بیست و یکمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و هفتمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۲۳ تا ۲۵ دی ماه ۱۳۹۳، دانشگاه شهید بهشتی

شناسایی و تحلیل گسیل‌های‌مولکولی TiO و AlO در دی‌اکسیدتیتانیوم و نمونه‌های آلیاژی آلومینیوم و اینکونل با روش بیناب‌نمایی فروشکست القایی لیزری

مرضیه همتی فارسانی[۱]، سید جبار موسوی[۲]، سید محمدرضا دربانی[۱]، عبدا... اسلامی‌مجد[۱]، محمود سلطان‌الکتابی[۲]

[۱] پژوهشکده علوم و فناوری اپتیک و لیزر، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، اصفهان

[۲] گروه پژوهشی اپتیک کوانتومی، گروه فیزیک، دانشگاه اصفهان، اصفهان

چکیده– گذارهای‌مولکولی *TiO* در پلاسمای آلیاژهای اینکونل و آلومینیوم و همچنین دی‌اکسیدتیتانیوم با استفاده از روش *LIBS* شناسایی شدند. وابستگی شدت این گذارها به نوع ماده مورد مطالعه مشاهده شد. باندهای مختلف گسیل‌مولکولی *AlO* در پلاسمای آلومینیوم شناسایی و مکانیسم‌های شکل‌گیری این ترکیب مولکولی ارائه گردید. تأثیر تغییر انرژی لیزر بر شدت گسیل‌های‌مولکولی *TiO* و خطوط اتمی *Ti* در پلاسمای اینکونل بررسی شد. افزایش شدت گسیل‌های‌مولکولی *TiO* در اثر افزایش شدت خطوط اتمی *Ti* مشاهده شد.

کلید واژه- آلومینیوم، اینکونل، دی‌اکسیدتیتانیوم، گسیل‌های مولکولی TiO و AlO، LIBS.

Identification and analysis of molecular emissions of TiO and AlO in Al and In alloys and TiO_2 by LIBS technique

M. Hemati Farsani[1], S. J. Mousavi [2], S. M. R. Darbani[1], A. Eslami Majd[1], M. Soltanolkotabi[2]

[1] Optics & Laser Science and Technology Research Center, Malek Ashtar University of Technology, Isfahan

[2] Quantum Optics Research Group, Department of Physics, University of Isfahan, Isfahan

Abstract- Molecular transitions of TiO in plasma of Al and In alloys as well as TiO_2 have been identified by LIBS technique. Intensity dependence of these transitions to type of material has been observed. Different bands of AlO molecular emission in Al plasma have been identified and formation mechanisms of this molecular species has been represented. The effect of laser energy variation on TiO molecular emissions and Ti atomic lines intensity in plasma of In has been investigated. Increasing intensity of TiO molecular emissions subsequent increasing intensity of Ti atomic lines intensity have been observed.

Keywords: Aluminum, Inconel, LIBS, Molecular emissions of TiO and AlO, Titanium dioxide.

[1]Laser Induced Breakdown Spectroscopy

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-04]

۱- مقدمه

بیناب‌نمایی فروشکست القایی لیزری(LIBS)[1] روش آنالیز چندعنصری برای شناسایی و تحلیل نمونه‌های جامد، مایع و گاز بوده که عدم‌نیاز به آماده‌سازی‌اولیه و پاسخ‌های سریع و با دقت از ویژگی‌های آن است[۱]. به‌منظور توسعه حوزه کاربردی این روش، در سالهای اخیر تلاش‌های چشمگیری برای استفاده از نتایج آن در تحلیل بیناب‌های مولکولی انجام شده است[۲]. مولکول TiO باندهای مولکولی زیادی دارد که در سرتاسر بیناب با یکدیگر همپوشانی داشته و شناسایی صحیح باندهای‌مولکولی آن‌را دشوار می‌سازد[۳]. از گذارهای‌مولکولی TiO در نجوم برای تعیین فراوانی اکسیژن، طبقه‌بندی و اندازه‌گیری دمای ستارگان استفاده می‌شود[۴]. مولکول AlO بواسطه داشتن تعداد زیادی حالت الکترونی شناخته شده مانند $X^2\sum^+$، $A^2\Pi_i$، $B^2\sum^+$ و $C^2\Pi_r$ در اخترفیزیک از اهمیت خاصی برخوردار است که در این‌میان شدیدترین گذار مشاهده‌شده مربوط به باند (0,0) $B^2\sum^+ \rightarrow X^2\sum^+$ است[۵]. شناسایی خطوط اتمیAl و گسیل‌های مولکولی AlO با استفاده از LIBS در تشخیص سریع تراشه‌های آلومینیوم در خطوط تولید کارخانه‌های بازیافت بکار می‌رود[۶]. در این تحقیق از روش LIBS برای شناسایی باندهای مولکولی TiO و AlO در دی‌اکسیدتیتانیوم و نمونه‌های آلیاژی آلومینیوم۶۰۶۱ و اینکونل۷۱۸ استفاده شد. علاوه‌بر تأثیر نوع ماده، اثر انرژی لیزر بر شدت خطوط بینابی و گسیل‌های‌مولکولی و همچنین وابستگی شدت گسیل‌های مولکولی TiO به شدت خطوط اتمی تیتانیوم نیز بررسی گردید.

۲- مواد و چیدمان آزمایش

دی‌اکسید تیتانیوم بکاررفته در این پژوهش ساخت شرکتAR و با خلوص ۹۹٪ بوده که بصورت قرص مورد آنالیز قرارگرفت. نمونه‌های آلیاژی اینکونل۷۱۸ و آلومینیوم۶۰۶۱ از شرکت ASM تهیه شد. عناصر اصلی و جزئی تشکیل‌دهنده این آلیاژها همراه با درصدوزنی در جدول۱ نشان داده شده است[۷]. لیزر Qسوئیچ Nd:YAG با طول موج ۱۰۶۴nm، انرژی ۱۰۰mJ و پهنای تپ ۷±۲ns جهت تولید پلاسمای نمونه استفاده شد. از بیناب‌سنج مدل A-13-01-20 ساخت شرکت Avantes که قابلیت بیناب‌نگاری در ناحیه طول‌موجی ۱۸۰ تا ۱۱۵۷ نانومتر را دارا بود، جهت ثبت تابش نشری پلاسما استفاده شد. از یک مدار تأخیرانداز الکترونیکی با قابلیت اعمال تأخیر تا حدود ۵ میکروثانیه جهت دریافت گسیل‌های مولکولی با بیشینه شدت استفاده شد.

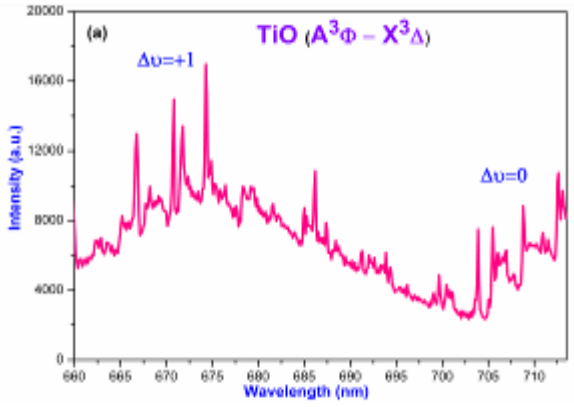
جدول۱: درصدوزنی عناصر تشکیل‌دهنده اینکونل۷۱۸ و آلومینیوم۶۰۶۱

نام عنصر	درصدوزنی در اینکونل۷۱۸	درصدوزنی در آلومینیوم۶۰۶۱
Ni	۵۰-۵۵	-
Fe	۱۷	-
Cr	۱۷-۲۱	۰/۰۴-۰/۳۵
Ti	۰/۶۵-۱/۱۵	۰/۱۵
Al	۰/۲-۰/۸	۹۵/۸-۹۸/۶
Nb	۴/۷۵-۵/۵	-
Mb	۲/۸-۳/۳	-
Si	-	۰/۴-۰/۸
Mn	-	۰/۱۵
Mg	-	۰/۸-۱/۲
Cu	-	۰/۱۵-۰/۴

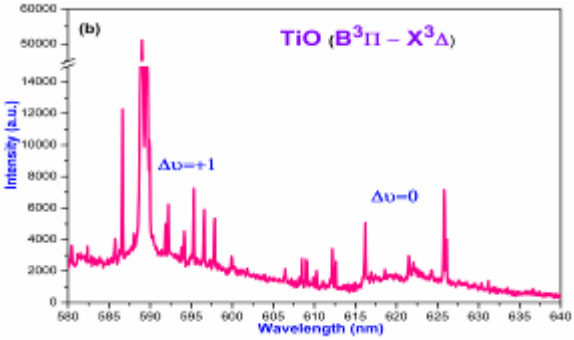
۳- بحث و تحلیل

۳-۱- شناسایی باندهای‌مولکولی TiO

باندهای‌گسیلی $TiO\gamma(A^3\Phi \rightarrow X^3\Delta)$ و $TiO\gamma'(B^3\Pi \rightarrow X^3\Delta)$ مربوط به گسیل‌های‌مولکولی مختلف TiO آلیاژ اینکونل۷۱۸ بترتیب در شکل‌های ۱.a و ۱.b نشان داده‌شده‌است.



[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-04]

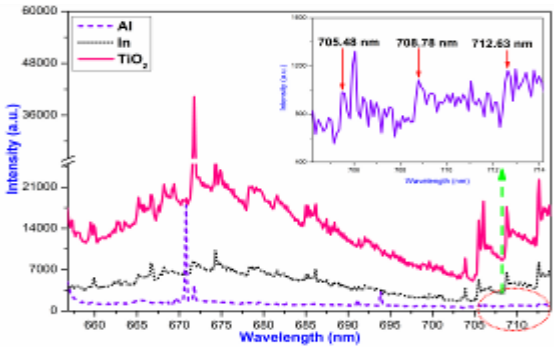


شکل۱: گسیل‌های‌مولکولی آلیاژ اینکونل۷۱۸- a: TiO γ وb: TiO γ'

باندهای ارتعاشی $\Delta v=+1$ و $\Delta v=0$ در نواحی بینابی ۶۶۰-۶۸۰nm و ۷۰۵-۷۱۵nm مربوط به TiO γ و $\Delta v=+1$ و $\Delta v=0$ در نواحی ۵۸۰-۶۰۰nm و ۶۱۵-۶۴۰nm مربوط به TiO γ' است[۳]. با افزایش $|\Delta v|$ کاهش شدت باندهای ارتعاشی انتظار می‌رود[۴]، اما بدلیل تنوع و گستردگی خطوط اتمی مربوط به عناصر تشکیل‌دهنده اینکونل۷۱۸ از جمله ظاهرشدن خطوط اتمی تیتانیوم با طول موج‌های ۵۸۶/۶۴nm، ۵۹۵/۳۱nm و ۶۷۴/۵۵nm و خطوط اتمی سدیم با طول‌موج‌های ۵۸۸/۹۹nm و ۵۸۹/۵۵nm در نواحی بینابی ۶۶۰-۶۸۰nm (باند $\Delta v=+1$ TiO γ) و ۵۸۰-۶۰۰nm (باند $\Delta v=+1$ TiO γ') انتظار فوق برآورده نشد[۸].

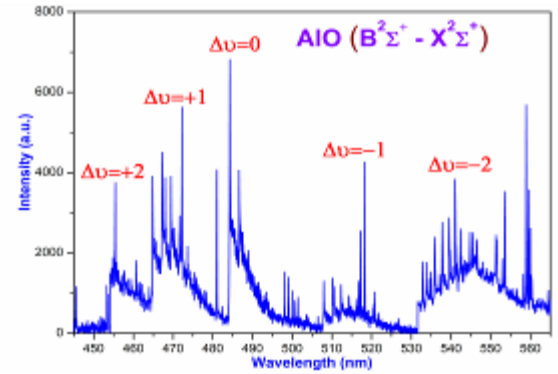
۳-۲- گسیل‌های‌مولکولی TiO γ و AlO در نمونه‌های مختلف

بینابی نمونه‌های دی‌اکسیدتیتانیوم، آلیاژ آلومینیوم۶۰۶۱ و اینکونل۷۱۸ در محدوده بینابی ۶۶۰-۷۱۵nm به‌منظور بررسی تأثیر نوع ماده بر شدت گسیل‌های مولکولی TiO γ، در شکل۲ نشان داده شده است. شدت بینابی گسیل‌مولکولی برای دی‌اکسیدتیتانیوم بیشینه و برای آلیاژهای اینکونل۷۱۸ و آلومینیوم۶۰۶۱ در مراتب بعدی قرار دارد.



شکل۲: گسیل‌های مولکولی TiO γ در نمونه‌های مختلف

درصد خلوص ۹۹٪ دی‌اکسیدتیتانیوم و بواسطه آن بالا بودن مقدار غلظت تیتانیوم موجود در آن و همچنین اختلاف درصدوزنی عنصر تیتانیوم(۱/۱۵-۰/۶۵ در اینکونل و ۰/۱۵ در آلومینیوم)، روند کاهشی شدت گسیل‌های مولکولی متناظر را توجیه می‌نماید. با توجه به انجام آزمایش در شرایط اتمسفری آزمایشگاه بازترکیب اتم‌های تیتانیوم برانگیخته‌شده از پلاسمای نمونه‌های مورد مطالعه با اکسیژن ناشی از پلاسمای هوا تشکیل مولکول‌های TiO را ممکن می‌سازد. بیناب گسیل مولکولی ($B^2\sum^+ \rightarrow X^2\sum^+$) AlO در آلیاژ آلومینیوم۶۰۶۱ متناظر با پنج باند ارتعاشی از $\Delta v=+2$ تا $\Delta v=-2$ در محدوده بینابی ۴۵۰-۵۶۰nm در شکل۳ نشان داده شده است. عدم وجود آلومینیوم در نمونه دی‌اکسیدتیتانیوم و همچنین زیاد بودن خطوط اتمی در بیناب گسیلی اینکونل۷۱۸ دلیل عدم مقایسه بین شدت‌های گسیلی AlO در این ناحیه بینابی است.



شکل۳: باندهای ارتعاشی گسیل‌مولکولیAlO در آلیاژ آلومینیوم۶۰۶۱

شکل‌گیری گونه‌های مولکولی AlO در فرآیند بازترکیب اتم‌های آلومینیوم جداشده از سطح نمونه با اتم‌ها و یا مولکول‌های اکسیژن عمدتاً از طریق برهمکنش‌های زیر صورت می‌پذیرد[۹].

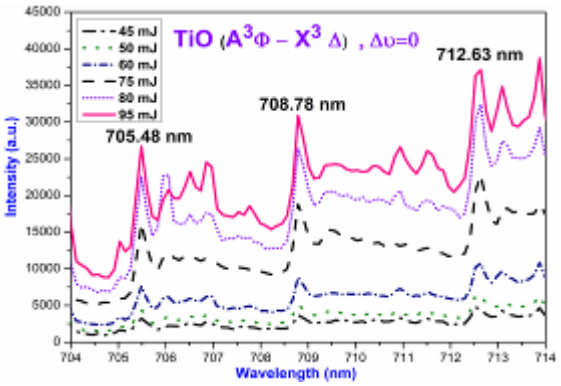
$$Al + O_2 \leftrightarrow AlO + O$$
$$Al + O + M \leftrightarrow AlO + M$$

اتم‌های اکسیژن شرکت‌کننده در فرآیند بازترکیب با اتم‌های آلومینیوم را علاوه‌بر اتم‌های اکسیژن ناشی از پلاسمای هوا به اتم‌های اکسیژن برانگیخته‌شده موجود در سطح نمونه به علت اکسیدشدن سطح نیز می‌توان نسبت داد[۱۰].

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-04]

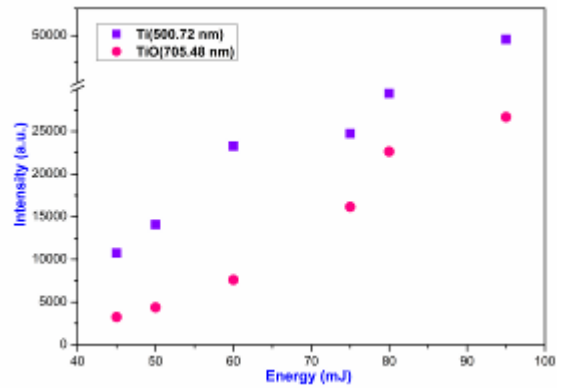
۳-۳- بررسی تأثیر انرژی لیزر بر شدت خطوط اتمی و گسیل‌های‌مولکولی

تغییرات شدت بینابی باند ارتعاشی $\Delta v=0$ گسیل‌مولکولی γ TiOدر نمونه اینکونل۷۱۸ در بازه‌های مختلف انرژی در شکل۴ دیده می‌شود. با افزایش شدت لیزر میزان کندگی لیزری نمونه بیشتر شده و بواسطه آن میزان عناصر ترکیبات آلیاژی از جمله تیتانیوم در پلاسمای حاصل نیز افزایش پیدا کرده که در اثر آن فرایندهای بازترکیبی و شدت گسیل‌های‌مولکولی افزایش می‌یابد.



شکل۴: تغییرات شدت گسیل‌مولکولی γ TiO برحسب انرژی‌های مختلف در آلیاژ اینکونل۷۱۸

وابستگی مستقیم شدت خط اتمی ۵۰۰/۷۲nm تیتانیوم و گذارمولکولی(۲،۲) در طول‌موج ۷۰۵/۴۸nm به انرژی لیزر در شکل۵ ترسیم شده است. از طرفی روند افزایشی شدت گسیل‌های‌مولکولی با افزایش شدت خطوط اتمی در شکل۵ مشاهده می‌شود.



شکل ۵: وابستگی شدت خط اتمی تیتانیوم و گسیل‌های‌مولکولی

۴- نتیجه‌گیری

باندهای مختلف گسیل‌های‌مولکولی TiO در نمونه‌های آلیاژی اینکونل۷۱۸، آلومینیوم۶۰۶۱ و همچنین دی‌اکسیدتیتانیوم با استفاده از روشLIBS آشکارسازی شدند. گسیل‌های مولکولی AlO در تابش پلاسمای آلیاژ آلومینیوم۶۰۶۱ مشاهده و مکانیسم شکل‌گیری آنها ارائه گردید. وابستگی شدت گسیل‌های مولکولی γ TiO به نوع ماده مورد مطالعه و انرژی لیزر و همچنین افزایش شدت گسیل‌های مولکولی TiO در اثر افزایش شدت خطوط اتمی Ti که نشان‌دهنده بیشترشدن تعداد اتم‌های تیتانیوم موجود در فرآیند بازترکیب با اتم‌های اکسیژن هوا و درنتیجه افزایش گونه‌های مولکولی TiO و شدت‌های مربوطه است، دیده شد.

سپاسگزاری

از پرسنل پژوهشکده علوم و فناوری اپتیک و لیزر دانشگاه صنعتی مالک اشتر که ما را در انجام این پژوهش یاری نموده‌اند، سپاسگزاری می‌شود.

مراجع

[1] Miziolek A W., Palleschi V., Schechter I., *Laser Induced Breakdown Spectroscopy*, Cambridge University Press, New York, 2006.

[2] Parigger C G., *Atomic and molecular emissions in laser-induced breakdown spectroscopy*, **Spectrochim Acta. B.** 79–80 (2013) 4–16.

[3] Woods A C., Parigger C G., Keszler A, Nemes L., Hornkohl J O., *Analysis of TiO Spectral Transitions in Laser-induced and Radio-frequency Thermal Plasmas*, **IRAMP.** 3 (2012) 51-59.

[4] Woods A C., Parigger C G., Hornkohl G.O., *Measurement and analysis of titanium monoxide spectra in laser-induced plasma*, **Opt. Lett.** 37 (2012) 5139-5141.

[5] Chaudhari M M., Londeh C T ., Behere S H., *Determination of rotational temperature of AlO from the* $B^2\sum^+$-$X^2\sum^+$ *system.* **PRAMANA. J. Phys.** 66 (2006) 596-600.

[6] Noll R., Sturm V., Aydin Ü., Eilers D., Gehlen C., Höhne M., Lamott A., Makowe J., Vrenegor J., *Laser-induced breakdown spectroscopy-From research to industry*, new frontiers for process control. **Spectrochim Acta. B.** 63 (2008) 1159-1166.

[7] ASM Aerospace Specification Metals, http://asm. matweb. com/

[8] Ahmad K., Tawfik W., Farooq W A., Singh J. P., *Analysis of alumina-based titanium carbide composites by laser-induced breakdown spectroscopy*, **Appl. Phys. A**. 014 (2014) 8544-8547.

[9] Yuasa S., Zhu Y., Sogo S., *Ignition and combustion of aluminum in oxygen/nitrogen mixture streams*, **Combust. Flame.** 108 (1997) 387–390.

[10] Cremers D A., Radziemski L J., *Handbook of Laser-Induced Breakdown Spectroscopy*, John Wiley & Sons, 2006.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-04]