EXAFS - पदार्थों की दुनिया को समझने का अनोखा अंदाज़

अशोक कुमार यादव

भाभा परमाणु अनुसंधान केंद्र, मुंबई

क्या आपने कभी सोचा है कि जो पदार्थ हम आँखों से देखते हैं, उनके मूल घटक जैसे कि अणु, परमाणु, आयन, इत्यादि कैसे व्यवस्थित रहते हैं? वैज्ञानिक कैसे किसी पदार्थ की संरचना को देखते हैं? आंखों से या सामान्य सूक्ष्मदर्शी से तो परमाणु दिखाई नहीं देते। फिर कैसे हमें उनका ज्ञान होता है? इसका जवाब है एक विशेष तकनीक, एक्स-रे (एक्स-किरण) ! हाँ, बिल्कुल वैसे ही जैसे हम चिकित्सा हेतु अपने शरीर के अंगों का एक्स-रे करवाते हैं। उसी प्रकार पदार्थों को भी अणु/परमाणु स्तर पर एक्स-रे की सहायता से देखा जा सकता है, बशर्ते कि प्रयुक्त एक्स-रे की तरंगदैर्ध्य परमाणुओं के बीच की दूरी के समतुल्य होनी चाहिए।

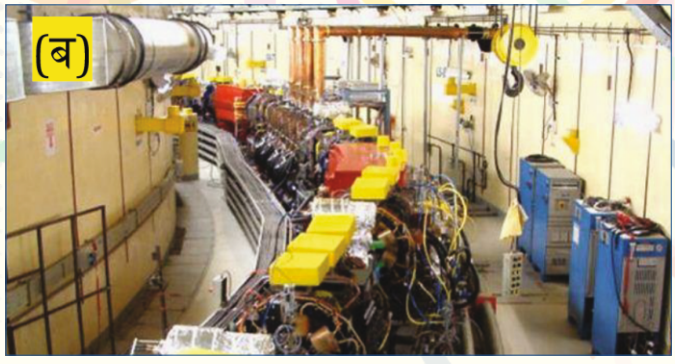
जिस तकनीक द्वारा किसी क्रिस्टल जालक को देखा जाता है, ठीक वैसे ही जैसे मानव शरीर के कंकाल को देखा जाता है, तथा जिसमें परमाणुओं की त्रिविमीय स्थिति दीर्घ-परास क्रम (लांग रेंज आर्डर) में ज्ञात की जाती है, उसे एक्स-रे विवर्तन (एक्स-रे डिफ्रैक्शन) तकनीक कहते हैं। यह तकनीक संपूर्ण क्रिस्टल में परमाणुओं की व्यवस्थित संरचना को समझने में सहायक होती है। परन्तु कभी-कभी केवल संपूर्ण क्रिस्टल की जानकारी ही पर्याप्त नहीं होती, बल्कि किसी विशेष परमाणु के आस-पास के वातावरण की जानकारी भी आवश्यक होती है। इसी आवश्यकता को पूरा करने वाली तकनीक का नाम है EXAFS ('एक्सटेंडेड एक्स-रे अब्सॉर्प्शन फाइन स्ट्रक्चर' अथवा 'Extended X-ray Absorption Fine Structure') जिसे 'विस्तारित एक्स-रे अवशोषण सूक्ष्म संरचना' तकनीक भी कहा जाता है।

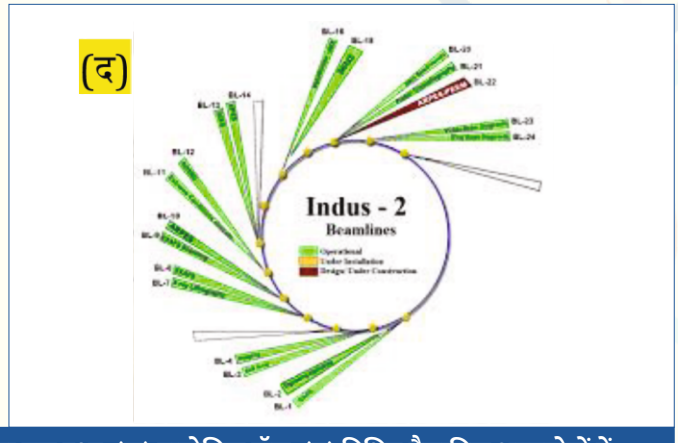
जहाँ एक्स-रे विवर्तन संपूर्ण क्रिस्टल की दीर्घ-परास संरचना बताती है, वहीं EXAFS द्वारा किसी विशेष परमाणु के चारों ओर के स्थानीय परिवेश का अध्ययन किया जाता है। यह तकनीक वैज्ञानिकों को यह समझने में सहायता करती है कि पदार्थ में किसी परमाणु के निकटतम कौन-कौन से परमाणु हैं, वे कितनी दूरी पर स्थित हैं, तथा उनकी व्यवस्था कितनी नियमित या अनियमित है।

जब हम किसी पदार्थ पर एक्स-रे डालते हैं, तो वह एक्स-रे उस पदार्थ के भीतर प्रवेश कर परमाणुओं से अन्योन्य क्रिया करती है। यदि आपतित एक्स-रे की ऊर्जा परमाणुओं के आंतरिक कक्षक में उपस्थित इलेक्ट्रॉन की बंधन ऊर्जा से अधिक हो, तो वह उस इलेक्ट्रॉन को परमाणु से बाहर निकाल सकती है। उत्सर्जित इलेक्ट्रॉन, एक तरंग के समान व्यवहार करता है। यह इलेक्ट्रॉन-तरंग जांचित परमाणु के आसपास उपस्थित परमाणुओं से परावर्तित होती है। उत्सर्जित इलेक्ट्रॉन-तरंग और परावर्तित इलेक्ट्रॉन-तरंग के मध्य होने वाले व्यतिकरण के परिणामस्वरूप एक्स-रे अवशोषण सूचकांक में विशेष प्रकार के दोलन (ऑसिलेशन) उत्पन्न होते हैं, जिन्हें EXAFS कहा जाता है। इन्हीं दोलनों के विश्लेषण से वैज्ञानिक किसी परमाणु के चारों ओर उपस्थित परमाणुओं के प्रकार, संख्या, दूरी तथा नियमितता का अध्ययन करते हैं।

EXAFS हेतु प्रयुक्त उपकरण एवं इससे प्राप्त जानकारियां

EXAFS प्रयोगों के लिए अत्यधिक तीव्र, सतत एवं नियंत्रित एक्स-रे विकिरण की आवश्यकता होती है। ये आवश्यकताएं प्रयोगशालाओं में उपयोग आने वाले परंपरागत एक्स-रे स्रोतों से पूरी नहीं की जा सकती, क्योंकि





चित्र - 1 (अ) इंडस सिंक्रोट्रॉन त्वरक परिसर, (ब) इंडस त्वरक मशीन का एक दृश्य, (स) प्रायोगिक हॉल, (द) विभिन्न वैज्ञानिक अनुप्रयोगों में प्रयुक्त कणपुंज रेखाओं (बीमलाइनों) का योजनावत दृश्य (चित्र सौजन्य: राजा रामन्ना प्रगत प्रौद्योगिकी केंद्र, इंदौर)

उनसे उत्सर्जित एक्स-रे विशिष्ट तरंगदैर्घ्य की और अपेक्षाकृत कम तीव्रता की होती हैं। अतः EXAFS मापन के लिए वैज्ञानिक सिंक्रोट्रॉन विकिरण स्रोत का उपयोग करते हैं। सिंक्रोट्रॉन एक विशाल वैज्ञानिक त्वरक (एक्सिलिरेटर) है, जिसमें इलेक्ट्रॉनों को लगभग प्रकाश की गति के निकट तक त्वरित किया जाता है और उन्हें वृत्ताकार पथ में उच्च तीव्रता वाले चुम्बकीय क्षेत्र द्वारा पथ से विचलित किया जाता है। त्वरित या विचलित होते इलेक्ट्रॉन अत्यंत तीव्र विद्युतचुम्बकीय विकिरण (जैसे कि एक्स-रे) उत्सर्जित करते हैं। इंडस-2, भारत की एक ऐसी सिंक्रोट्रॉन सुविधा है जो परमाणु ऊर्जा विभाग के संस्थान, राजा रामन्ना प्रगत प्रौद्योगिकी केंद्र, इंदौर (चित्र-1) में स्थित है।

विशेष रूप से अभिकल्पित की गई बीमलाइनों, जिनमें सिंक्रोट्रॉन विकिरण की ऊर्जा को सतत परिवर्तन करने की क्षमता होती है, के उपयोग से EXAFS मापन किए जा सकते हैं। इंडस में EXAFS प्रयोगों के लिए समर्पित दो बीमलाइनें, बीएल-08 और बीएल-09, उपलब्ध हैं।

EXAFS मापन की प्रक्रिया कई क्रमबद्ध चरणों में संपन्न होती है। सबसे पहले अध्ययन हेतु विशिष्ट तत्व का चयन

ऊर्जा विक्षेपी EXAFS बीमलाइन: बीएल-08

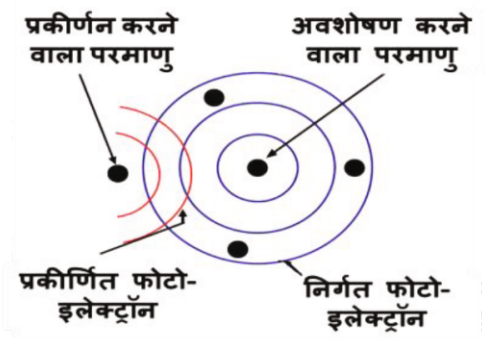
चित्र-2 इंडस-2 सिंक्रोट्रॉन स्रोत पर स्थित दो EXAFS बीमलाइनें

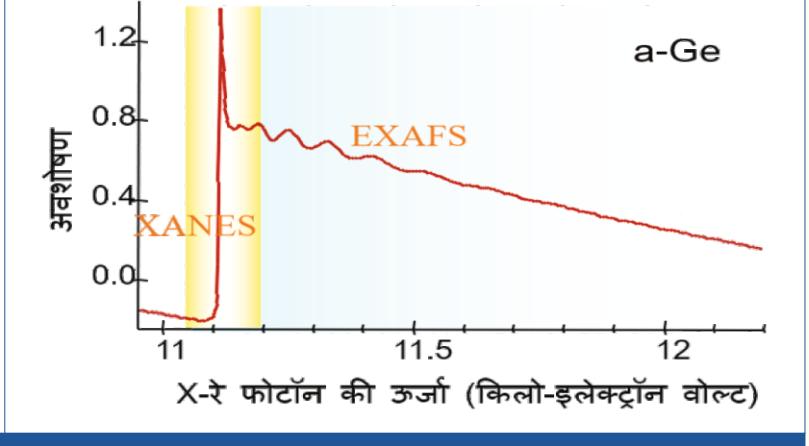
किया जाता है, क्योंकि EXAFS संकेत सीधे उस तत्व की अवशोषण-धार (अब्सॉर्प्शन-एड्ज) से संबंधित होता है। इसके पश्चात पदार्थ के नमूने (सैंपल) पर उपयुक्त ऊर्जा की एक्स-रे किरणें प्रविष्ट कराई जाती हैं, जिससे आंतरिक कक्षक से इलेक्ट्रॉनों का उत्सर्जन होता है। इस प्रक्रिया के दौरान प्राप्त एक्स-रे अवशोषण तीव्रता को बदलती एक्स-रे ऊर्जा के साथ रिकॉर्ड किया जाता है। प्राप्त आंकड़ों (डेटा) में उपस्थित सूक्ष्म दोलनों (ऑसिलेशन) का अवलोकन कर पदार्थ की संरचना का प्रारंभिक अनुमान लगाया जाता है। अंततः इन दोलनों का विस्तृत कंप्यूटरीकृत विश्लेषण करके निकटतम परमाणुओं के प्रकार, उनकी संख्या, जांचित परमाणु से बंध-दूरी तथा पदार्थ की स्थानीय संरचनात्मक व्यवस्थितता के बारे में सटीक जानकारी प्राप्त की जाती है।

EXAFS से ठीक पहले जो हिस्सा आता है, उसे XANES (एक्स-रे अब्सॉर्प्शन नियर एड्ज स्ट्रक्चर' या 'X-ray Absorption Near Edge Structure') कहा जाता है, जो तत्व की ऑक्सीकरण अवस्था के बारे में जानकारी देता है। विशेष EXAFS तकनीकों में, समय के साथ हो रहे परिवर्तनों का अध्ययन करने के लिए समय-समाधानित (टाइम-रिसॉल्वड) EXAFS का उपयोग प्रचलन में है। EXAFS डेटा में पाए जाने वाले दोलनों को कंप्यूटर प्रोग्राम की मदद से वास्तविक परमाण्विक दूरियों में रूपांतरित किया जाता है, जिसके लिए 'फूरियर रूपांतरण (फूरियर ट्रासंफॉर्मशन) जैसी गणितीय विधियों का उपयोग किया जाता है।

EXAFS के अनुप्रयोग

EXAFS तकनीक का उपयोग वैज्ञानिक और औद्योगिक क्षेत्रों में व्यापक रूप से किया जाता है। रसायनिक उत्प्रेरकों के सक्रिय स्थलों और उनकी संरचना को परमाण्वीय-स्तर पर समझने में इससे मदद मिलती है, जिससे अधिक दक्षता युक्त उत्प्रेरकों का विकास किया जा सकता है। पर्यावरण विज्ञान में इस तकनीक का प्रयोग पानी, मिट्टी और वायु में उपस्थित धात्विक प्रदूषकों के रसायनिक रूप और वितरण





चित्र-3 (बाएँ) EXAFS का सरल वर्णन, (दाएँ) माप से प्राप्त सामान्य वर्णक्रम (स्पेक्ट्रम)

को समझने के लिए किया जाता है। ऊर्जा भंडारण प्रणालियों, जैसे लिथियम-आयन बैटरियों और अति-संधारणीय संधारित्रों (सुपर कैपेसिटर्स) के लिए, यह तकनीक इलेक्ट्रोड के रूप में प्रयुक्त पदार्थों के आवेशन-निस्सरण (चार्ज–डिस्चार्ज) चक्र के दौरान संरचनात्मक परिवर्तनों के अध्ययन में उपयोगी है। जैविक प्रणालियों में, EXAFS धातु आयनों के स्थानीय परिवेश और उनकी जैव-रसायनिक भूमिका को उजागर करता है। इसके अलावा, यह तकनीक नए पदार्थों के विकास, नैनो-पदार्थों के अध्ययन, और उच्च तापमान अथवा उच्च दाब पर पदार्थों के संरचनात्मक अध्ययन हेतु भी प्रयुक्त होती है।

चित्र - 4 EXAFS तकनीक के बहुआयामी उपयोग

EXAFS - चुनौतियां, सीमाएं एवं भविष्य की संभावनाएं

EXAFS तकनीक के लिए सिंक्रोट्रॉन सुविधा की आवश्यकता होती है, जो हर जगह उपलब्ध नहीं है। सटीक मापन के लिए पदार्थ के नमूने में संबंधित तत्व की पर्याप्त मात्रा होना भी आवश्यक है। इसके अलावा, प्राप्त आंकड़ों (डेटा) के विश्लेषण के लिए विशेषज्ञता भी आवश्यक है। भविष्य में EXAFS तकनीक में कई उन्नत बदलाव देखने को मिलेंगे। कृत्रिम बुद्धिमत्ता के उपयोग से EXAFS डेटा का विश्लेषण और व्याख्या अधिक सटीक और शीघ्र हो पाएगी, जिससे शोधकर्ताओं को बेहतर परिणाम प्राप्त होंगे। साथ ही, अत्यंत त्वरित एक्स-रे सिंक्रोट्रॉन लेसर जैसी नई तकनीकों के संयोजन से EXAFS तकनीक वास्तविक काल (रियल टाइम) में जटिल प्रक्रियाओं को समझने में सक्षम होगी। इसके अलावा, अन्य विश्लेषण तकनीकों के साथ EXAFS के संयोजन से बहुआयामी और व्यापक अनुसंधान संभव होगा, जो नई वैज्ञानिक खोजों को प्रोत्साहित करेगा।

अंततः संक्षेप में यह कहना उचित होगा कि EXAFS एक ऐसी अद्भुत तकनीक है जिससे हम परमाणुओं की दुनिया में झांक सकते हैं। यह तकनीक वैज्ञानिकों की आंख बन गई है, जो किसी पदार्थ को बिना तोड़े/बिगाड़े, उसकी आंतरिक संरचना देखने में मदद करती है।

आभार

लेखक, इस लेख की रचना के दौरान प्राप्त मार्गदर्शन के लिए अध्यक्ष, परमाणु एवं आण्विक भौतिकी प्रभाग, भापअ केंद्र, मुंबई के प्रति आभार व्यक्त करते हैं।

लेखक का परिचय

अशोक कुमार यादव

डॉ. अशोक कुमार यादव, भाभा परमाणु अनुसंधान केंद्र, मुंबई के परमाणु एवं आण्विक भौतिकी प्रभाग (A&MPD) में वैज्ञानिक अधिकारी-ई के पद पर कार्यरत हैं।