บทที่ 2

ทฤษฎี

2.1 การเลี้ยวเบน (Diffraction)[7]

การเกิดดิฟแฟรคชั่นเกิดขึ้นได้เมื่อมีเงื่อนไขเป็นไปตามกฎของแบรกก์ (Bragg's law)

$$2d \sin \theta = \lambda \qquad (2.1)$$

θ เป็นมุมของแบรกก์ (Bragg's angle)

d เป็น d-spacing

λ เป็นความยาวคลื่นของรังสีเอกซ์

วิธีการที่ใช้หลักการดิฟแฟรคชั่นมีหลายวิธีได้แก่

1. Debye scherrer method
2. Laue method
3. Diffractometer
4. Weissenberg method
5. Oscillation method
6. Rotation method

2.2 Debye scherrer method[6]

เป็นวิธีการถ่ายภาพการเกิดการเลี้ยวเบน (Diffraction) โดยการนำเอาสารที่จะถ่ายภาพนั้นมาบดให้เป็นผงละเอียด (powder) โดยผงเล็ก ๆ จะทำหน้าที่คล้ายผลึกเชิงเดี่ยวหนึ่ง ๆ เมื่อนำเอามาใส่ในหลอดคาปิลารี (Capillary tube) โดยการอัดสารให้แน่นจะทำให้ระนาบของผลึกมีการเรียงตัวอย่าง

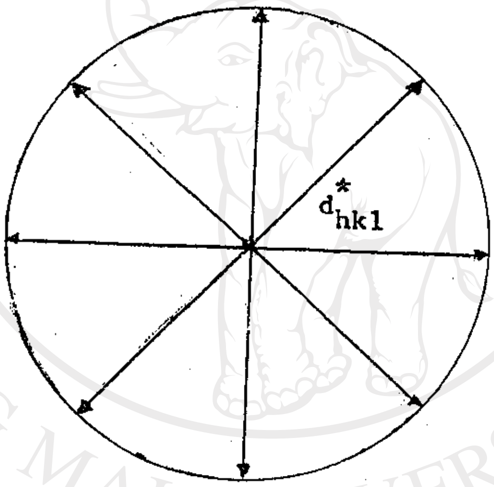
ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

สม่ำเสมอในทุกทิศทุกทาง โดยที่แต่ละระนาบของผลึกจะถูกแทนที่ด้วย reciprocal lattice d^*_{hkl} ซึ่งมีค่าเท่ากับ λ / d_{hkl}

λ เป็นความยาวคลื่นของรังสีเอกซ์

d_{hkl} เป็น interplanar spacing ใน direct lattice

d^*_{hkl} เป็น interplanar spacing ใน reciprocal lattice

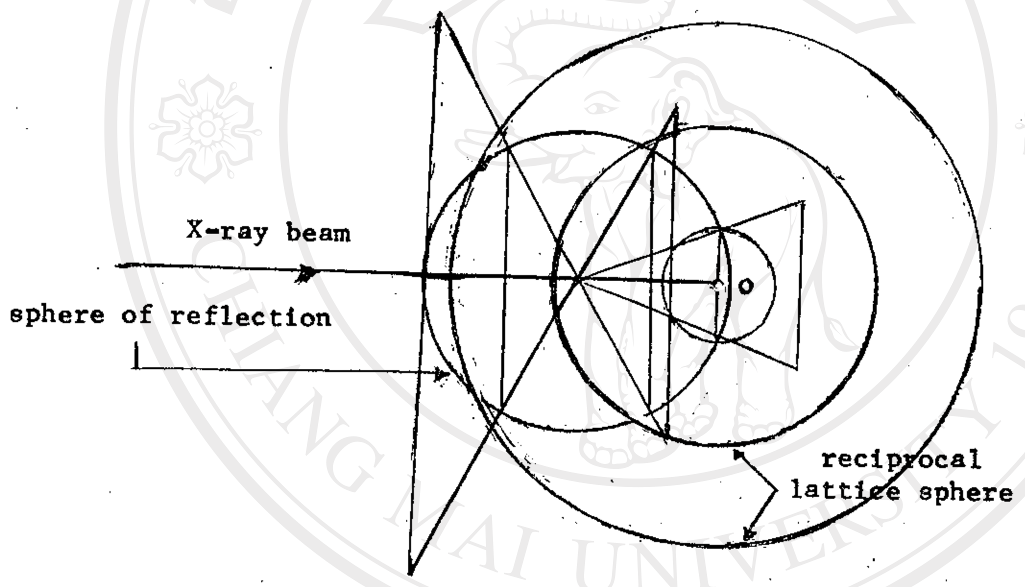


รูปที่ 2.1[6] แสดง reciprocal lattice แทนชุดของระนาบหนึ่ง ๆ ที่เรียงตัวอย่างสม่ำเสมอในทุกทิศทาง

ดังนั้น จะได้ว่าชุดของระนาบผลึกถูกแทนที่ด้วย reciprocal lattice sphere อันหนึ่ง โดยจุดต่าง ๆ บนผิวของทรงกลมมีการกระจายอย่างสม่ำเสมอ

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

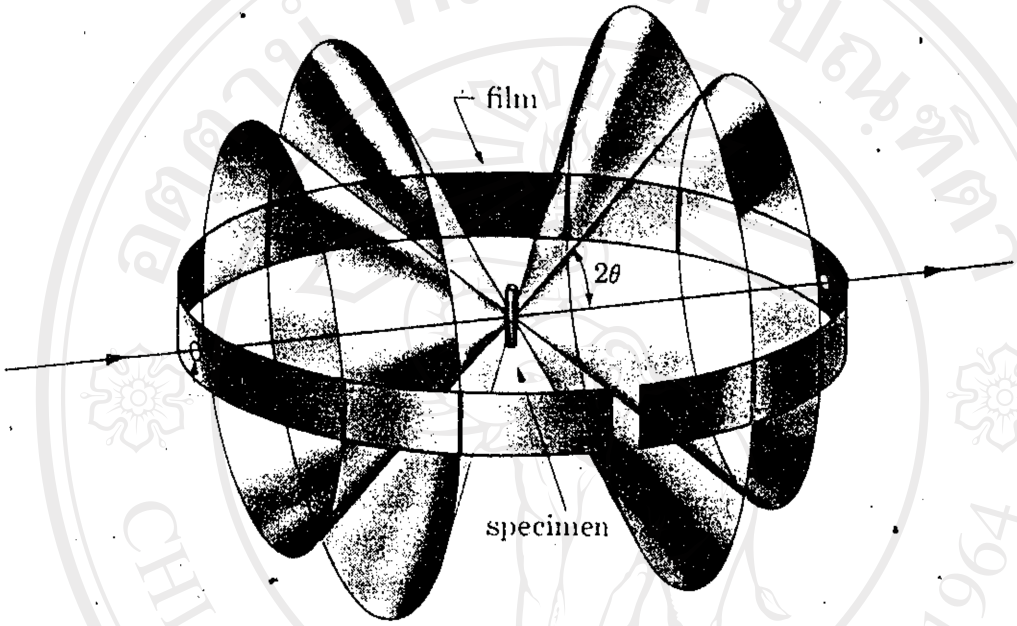
เมื่อรังสีเอกซ์ผ่านเข้าไปกระทบระนาบผลึกโดยทำมุม θ ที่เหมาะสม จะสอดคล้องกับ Bragg's law ทำให้เกิด diffraction ขึ้นได้ เมื่อจุดต่าง ๆ ของ reciprocal lattice ที่อยู่บนผิวของ reciprocal lattice sphere และอยู่บนผิวของ Sphere of reflection สอดคล้องกับสมการของ Bragg ดังนั้น ทำให้เกิด diffraction ออกมาเป็นวงหลาย ๆ วง ดังรูป 2.2



รูปที่ 2.2[6] แสดงการตัดกันของ sphere of reflection กับ reciprocal lattice sphere ที่แทนชุดของระนาบขนาดต่าง ๆ ของผลึก

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

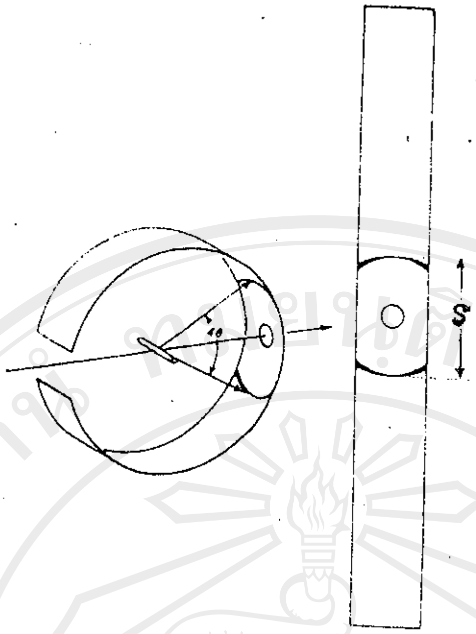
ถ้านำฟิล์มมารับตั้งฉากกับ incident Beam จะได้ภาพออกมาเป็นวงกลมเป็นชั้น ๆ แต่ละวงเรียกว่า powder ring ดังรูปที่ 2.3



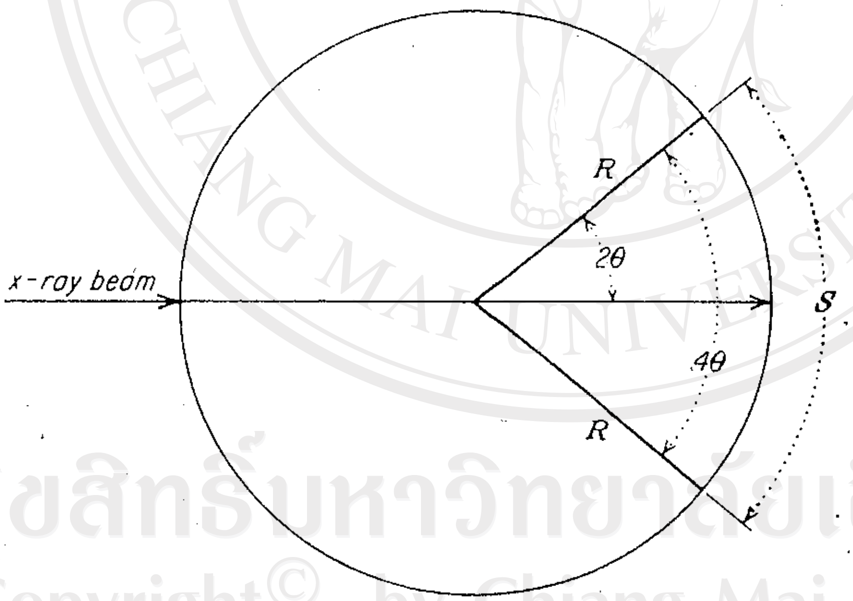
รูปที่ 2.3(7) แสดงการเกิด powder ring

ในการปฏิบัติทั่วไปเราใช้กล้องถ่ายภาพมีลักษณะเป็นรูปทรงกระบอก สำหรับวาง Specimen เมื่อรังสีเอกซ์ผ่านเข้าไปจะทำให้เกิดดิฟแฟรคชั่นออกมากระทบกับฟิล์มที่เราใส่ไว้รอบ ๆ specimen ดังรูปที่ 2.4

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved



รูปที่ 2.4[8] แสดงการวางตำแหน่งฟิล์มและสารตัวอย่างและระยะที่เกิดจากการเลี้ยวเบนของรังสีบนฟิล์ม



รูปที่ 2.5[9] แสดงความสัมพันธ์ของมุมที่เกิดการเลี้ยวเบนกับระยะบนฟิล์มคู่หนึ่ง

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

จากรูปที่ 2.5 จะได้ว่า

$$4\theta = \frac{S}{R} \quad \text{เรเดียน}$$

θ เป็น Bragg's angle

R เป็นรัศมีของกล้อง

S เป็นระยะระหว่างลายเส้นคู่หนึ่งบนฟิล์ม

$$\theta = \frac{S}{4R} \times \frac{180}{\pi} \qquad (2.2)$$

ดังนั้น จะสามารถหา interplanar spacing ของแต่ละระนาบที่ทำให้เกิดการ diffraction ได้จาก Bragg's law

$$2d \sin \theta = \lambda$$

$$d = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} \text{ Å}$$

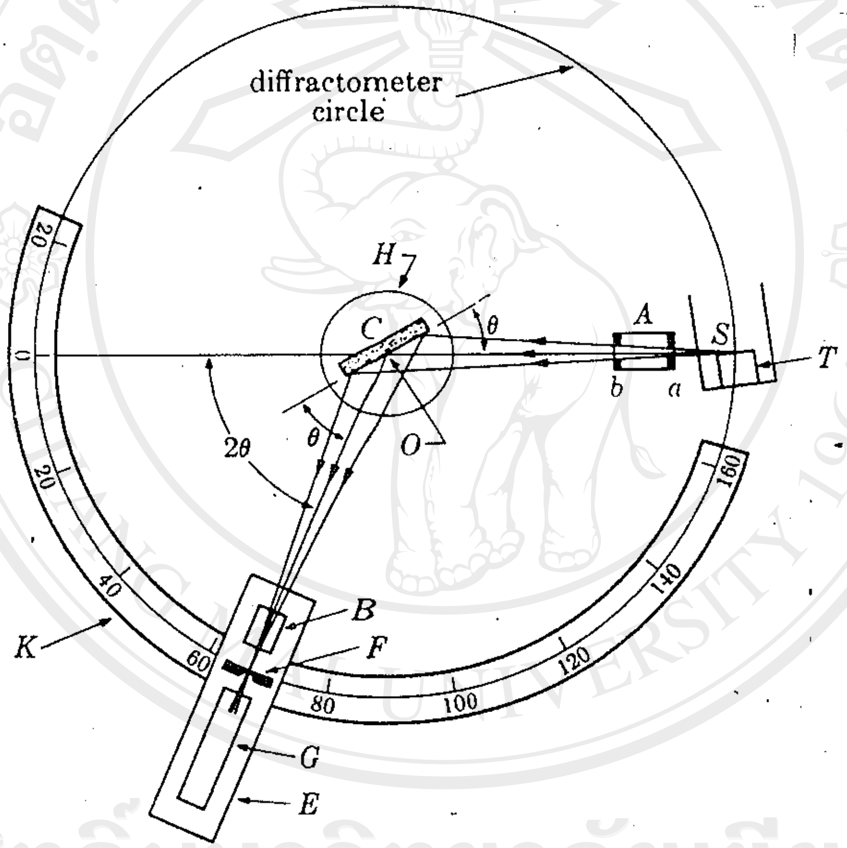
ถ้าทราบค่า d จากแต่ละเส้นแล้วนำค่า d ไปเทียบกับค่า d จากตาราง A.S.T.M. (American society for testing materials) ซึ่งเป็นบัตรที่มีข้อมูลเกี่ยวกับธาตุต่าง ๆ มีทั้งค่า d, I/I_1 ของสารประกอบ เมื่อเปรียบเทียบกันได้ตรงกันก็สามารถจะทราบส่วนประกอบในผงละเอียด (powder) ที่นำมาทดสอบ

2.3 ดิฟแฟรคโตมิเตอร์[10] (Diffractometer)

ดิฟแฟรคโตมิเตอร์เป็นเครื่องมือสำหรับหาความเข้มของรังสีเอ็กซ์ซึ่งอยู่ในรูปของฟังก์ชั่นของมุมระหว่างรังสีตกกระทบกับรังสีเลี้ยวเบน โดยที่สารตัวอย่างที่ใช้มีลักษณะเป็นผง (powder)

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

ดิฟแฟรคโตมิเตอร์มีลักษณะสำคัญคือ ใช้หัววัดที่เคลื่อนที่ได้แทนแถบของฟิล์มล้อมรอบสารตัวอย่างที่วางไว้ตรงจุดศูนย์กลาง การเคลื่อนที่ของหัววัดกับสารตัวอย่างสัมพันธ์กันในอัตราส่วน 2:1 เพื่อจะทำให้มุมตกกระทบรังสีเอกซ์กับระนาบของสารตัวอย่างเท่ากับมุมสะท้อนจากสารตัวอย่างเป็นครึ่งหนึ่งของค่ามุมเลี้ยวเบน ส่วนประกอบของดิฟแฟรคโตมิเตอร์ แสดงดังรูปที่ 2.6



รูปที่ 2.6(10) แสดงส่วนประกอบสำคัญของดิฟแฟรคโตมิเตอร์

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

C เป็นสารตัวอย่างทำเป็นแผ่นวางไว้บนแท่น หมุนรูปแกน θ ซึ่งตั้งฉากกับระนาบกระดาษ

T เป็นเป้า

S เป็นแหล่งกำเนิดรังสีเอกซ์ฉายไปยัง C เกิดรังสีเลี้ยวเบนรวมกันที่สลิท (slit) F

G เป็นหัววัดรังสี

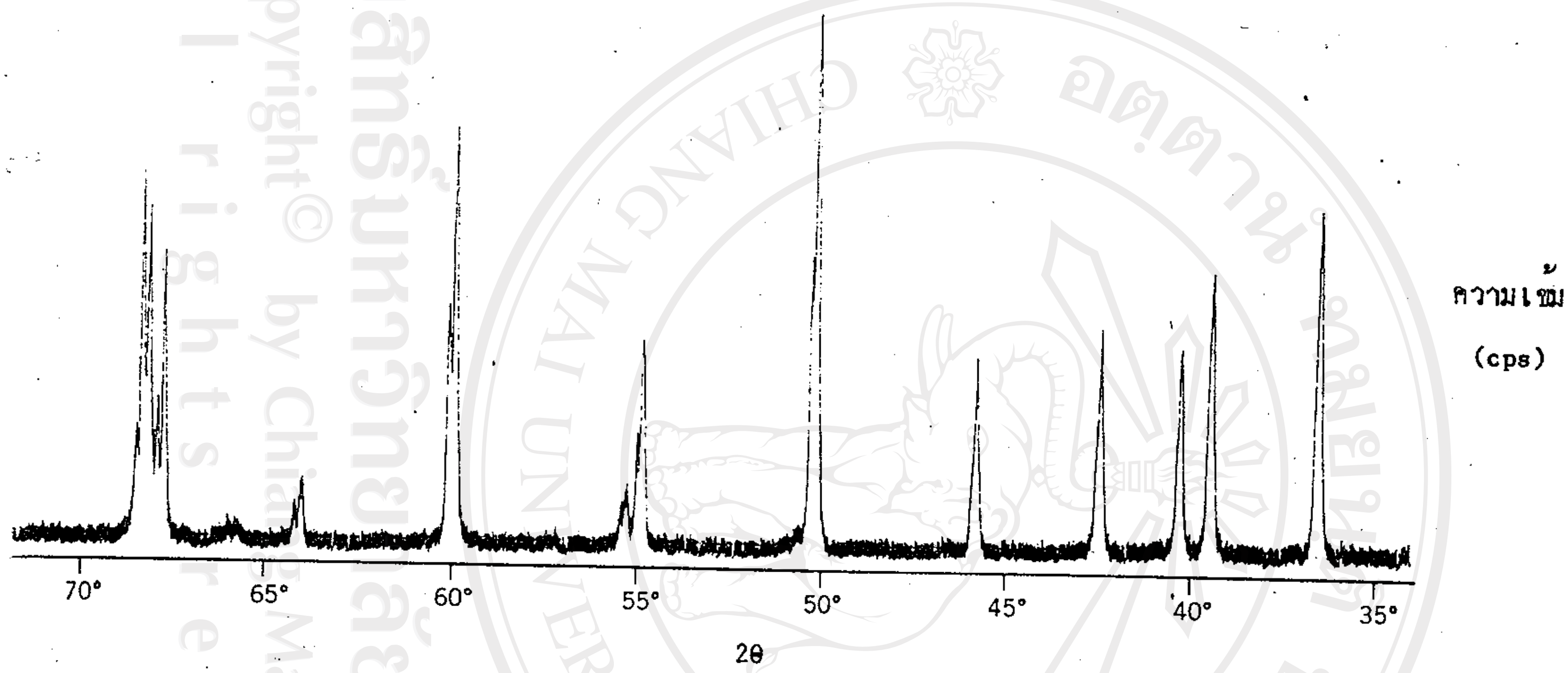
A เป็นสลิทประกอบด้วยซอลเลอร์สลิท (Soller slit) ทำหน้าที่ตัดรังสีในแนวตั้งฉากกับระนาบของดิฟแฟรคโตมิเตอร์และไดเวอร์เจนสลิท (divergence slit) ควบคุมลำแสงตกกระทบบนสารตัวอย่างให้พอดี

B ประกอบด้วยซอลเลอร์สลิทอีกชุดหนึ่ง และแอนติสแคทเทอริงสลิท (antiscattering slit) เพื่อรวมรังสีเลี้ยวเบนที่มาจากสารตัวอย่างผ่านต่อไปยังสลิท F (recieving slit)

เส้นกราฟที่บันทึกได้ในแถบกระดาษดังรูปที่ 2.7 เกิดจากการที่รังสีเอกซ์เลี้ยวเบนเข้าสู่หัววัดสัญญาณจากหัววัดจะถูกขยายและส่งไปยังเครื่องวัดอัตราการนับ (counting rate meter) เข้าสู่เครื่องบันทึกอัตโนมัติไปบังคับการให้ขีดเป็นเส้นกราฟบนแถบกระดาษที่เคลื่อนที่ด้วยความเร็วคงที่ จากกราฟจะได้จำนวนนับต่อนาที (diffraction intensity) กับค่ามุมเลี้ยวเบน (2θ) ซึ่งสามารถหา d-spacing ของสารตัวอย่าง (specimen) โดยอาศัยความสัมพันธ์ตามกฎของแบรกก์ (Bragg's law) ดังสมการที่ (2.1)

เมื่อหาค่า d ได้แล้วนำไปเปรียบเทียบกับ A.S.T.M. card จะทำให้ทราบชนิดของสารประกอบนั้น ๆ

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright © by Chiang Mai University
All rights reserved



รูปที่ 2.7(8) ตัวอย่างการบันทึกของดิฟแฟรคโตมิเตอร์ของสารตัวอย่างควอทซ์ โดยใช้ 40 Kv/15 mA Scan อัตราเร็ว 1°/นาที

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

2.4 การสอบเทียบ (Calibration)

การสอบเทียบหาปริมาณของสารประกอบในสารตัวอย่าง (Specimen) จากวิธีการ diffractometer ทำได้จากสารตัวอย่าง C1

โดย สมมุติให้สารตัวอย่าง C1 มี U_3O_8 = X กรัม (2.3)

เมื่อนำเอาสารมาตรฐาน U_3O_8 ผสมกับ C1 (coal 1) ในอัตราต่าง ๆ แล้วนำไปเข้าเครื่องผสมสาร (Ball mill) 24 ชั่วโมง แล้วนำสารที่ผสมไปถ่ายรังสีเอกซ์โดยวิธีดิฟแฟรคโตมิเตอร์ ได้กราฟระหว่างความสูงกับ 2θ นำผลจากกราฟไปหาปริมาณ U_3O_8 โดยดำเนินการดังต่อไปนี้

ครั้งที่ 1 เมื่อใส่สาร U_3O_8 A กรัมลงใน C1

∴ C1+B นับได้ (count) Y หน่วย (2.4)

ครั้งที่ 2 เมื่อใส่สาร U_3O_8 B กรัมลงใน C1

∴ C1+B นับได้ (count) Z หน่วย (2.5)

ครั้งที่ 3 เมื่อใส่สาร U_3O_8 C กรัมลงใน C1

∴ C1+C นับได้ (count) M หน่วย (2.6)

ครั้งที่ 4 เมื่อใส่สาร U_3O_8 D กรัมลงใน C1

∴ C1+D นับได้ N หน่วย (2.7)

ดังนั้น พิจารณาสมการที่ (2.4) และ 2.5) ได้ว่า

นับได้ Y หน่วยมี $U_3O_8 = X + A$ กรัม

นับได้ Z หน่วยมี $U_3O_8 = \frac{(X + A)Z}{Y}$ กรัม

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

แต่ $Z = X + B$

$$\therefore X + B = \frac{(X + A)Z}{Y} \qquad (2.8)$$

ในทำนองเดียวกันจากสมการที่ (2.6) และ (2.7) หาได้โดยพิจารณา

นับได้ M หน่วยมี U_3O_8 = $X + C$ กรัม

นับได้ N หน่วยมี U_3O_8 = $\frac{(X + C)N}{M}$ กรัม

แต่ $N = X + D$

$$\therefore X + D = \frac{(X + C)N}{M} \qquad (2.9)$$

จากสมการที่ (2.8) และ (2.9) สามารถหาค่าปริมาณ X ได้ทำให้ทราบปริมาณ U_3O_8 ภายในสารตัวอย่าง C1 ได้

เถ้าลิกไนต์ตัวอื่นสามารถหาปริมาณ U_3O_8 ได้โดยเอา C1 เป็นตัวมาตรฐานในการหาปริมาณ U_3O_8

ดังสมการ

ปริมาณ U_3O_8 ในสารตัวอย่าง

$$= \frac{500 \times \text{จำนวน count ในสารตัวอย่าง}}{31.6695} \qquad (2.10)$$

การหาปริมาณ U-238 หาได้ตามสมการที่ (2.11)

ปริมาณ U-238 ในสารตัวอย่าง

$$= \frac{238 \times 3 \times \text{น้ำหนักของ } U_3O_8 \text{ ในสารตัวอย่าง}}{(238 \times 3) + (16 \times 8)} \qquad (2.11)$$

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved