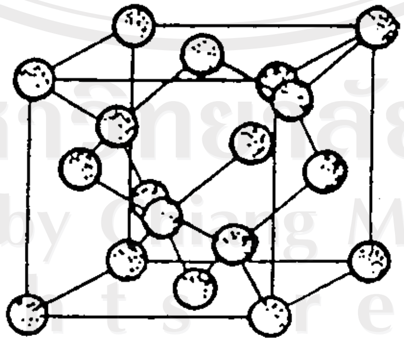
บทที่ 2
ทฤษฎี

2.1 โครงสร้างของผลึกของสารกึ่งตัวนำ

โดยทั่วไปแล้ว โครงสร้างของสารกึ่งตัวนำจะมีลักษณะพันธะแบบ tetrahedral bond กล่าวคือ ทุกอะตอมในผลึกจะมีอะตอมอื่น ๆ ที่อยู่ใกล้เคียงที่สุดล้อมรอบอยู่ 4 อะตอม แต่เนื่องจากอะตอมของธาตุชนิดต่าง ๆ มีขนาดและอำนาจในการดึงดูดซึ่งกันและกันไม่เท่ากัน เป็นผลทำให้โครงสร้างผลึกมีลักษณะแตกต่างจากโครงสร้างสมบูรณ์เล็กน้อย อาจแบ่งโครงสร้างได้ 4 ประเภท คือ

2.1.1 โครงสร้างแบบเพชร (Diamond lattice Structure)

สารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบนี้จะมีลักษณะของสเปสแลททีส (space lattice) เป็นแบบเฟสเซ็นเตอร์คิวบิก (face centered cabic) ซึ่งมีค่าคงที่ของโครงผลึก a = b = c และ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ดังแสดงในรูป 2.1 หนึ่งหน่วยเซลล์ (unite cell) ของสารที่มีโครงสร้างแบบนี้จะมี 8 อะตอม สารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบนี้เป็นผลึกที่ประกอบด้วยธาตุกลุ่ม IV ได้แก่ เพชร (C), ซิลิกอน (Si), เยอร์มาเนียม (Ge) และดีบุก (Sn) ซึ่งมีค่าคงที่ของโครงผลึกเป็น 3.56, 5.43, 5.65 และ 6.46 A° ตามลำดับ

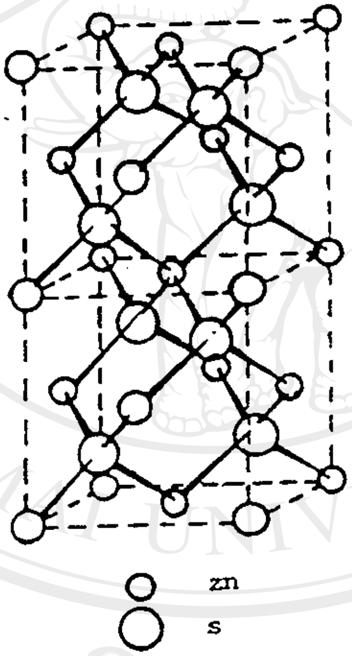


รูปที่ 2.1 แสดงโครงสร้างผลึกแบบเพชร[1]

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

2.1.2 โครงสร้างผลึกแบบซิงค์เบลนด์ (Zinc-blende structure)[2]

โครงสร้างแบบนี้จะมีลักษณะของสเปสแลททิสเป็นแบบเฟสเซนเตอร์คิวบิก ซึ่งมีค่าคงที่ของโครงผลึก $a = b = c$ และ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ เช่นเดียวกับโครงสร้างแบบเพชร ดังรูปที่ 2.2 หนึ่งหน่วยเซลของโครงสร้างผลึกแบบซิงค์เบลนด์ จะมีอะตอมทั้ง 2 ชนิดรวมกันอยู่ 8 อะตอม สารประกอบกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบนี้ ประกอบด้วย สารกลุ่ม III-V หรือ II-VI ได้แก่ ZnSe, CdS และ InAs ซึ่งมีค่าคงที่ของผลึกเป็น 5.65, 5.82 และ 6.04 A° ตามลำดับ

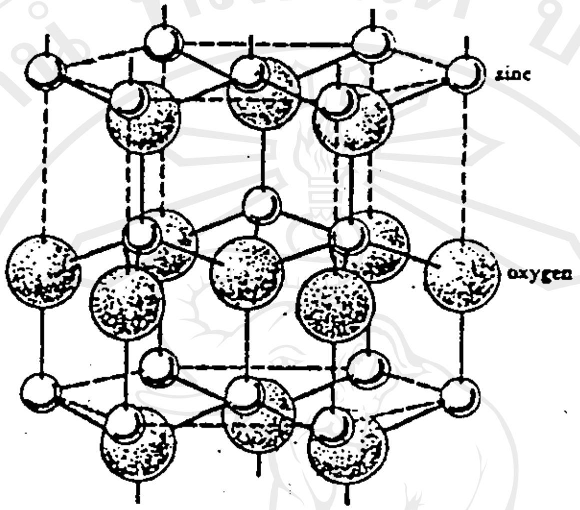


ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

รูปที่ 2.2 แสดงโครงสร้าง[1] ผลึกแบบ Zinc-blende

2.1.3 โครงสร้างผลึกแบบเวอร์ทไซท์[1] (Wurtzite)

สารประกอบกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบนี้จะมีลักษณะของสเปสแลททิส เป็นแบบเฮ็กแซ็กโกนอล (hexagonal) ดังรูปที่ 2.3 สารประกอบกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบนี้เป็นผลึกที่ประกอบด้วย สารกลุ่ม III-V หรือ II-VI ได้แก่ ZnS, InSe, CdS และ CdSe ซึ่งมีค่าคงที่ของโครงผลึก (a) เป็น 3.81, 3.98, 4.13 และ 4.30 A° ตามลำดับ และมีค่าคงที่ของโครงผลึก (c) เป็น 6.23, 6.53, 6.75 และ 7.02 A° ตามลำดับ



รูปที่ 2.3 แสดงโครงสร้างแบบเวอร์ทไซท์[1]

2.1.4 โครงสร้างแบบชาลโคไพไรท์ (Chalcopyrite)[1]

สารประกอบกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบนี้จะมีลักษณะของสเปสแลททิสเป็นแบบบอดี้เซ็นเตอร์เททระโกนอล (body-centered tetragonal) ซึ่งมีค่าคงที่ของโครงผลึก $a = b \neq c$ และ $\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$ ดังรูปที่ 2.4 หนึ่งหน่วยเซลล์ของสารประกอบกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบนี้ จะมี 16 อะตอม สารที่มีโครงสร้างแบบนี้ คือ สารกึ่งตัวนำ $I\text{-}III\text{-}VI_2$ และ $II\text{-}IV\text{-}V_2$ ดังรูป 2.4 ซึ่งอะตอมมีตำแหน่งดังนี้ คือ

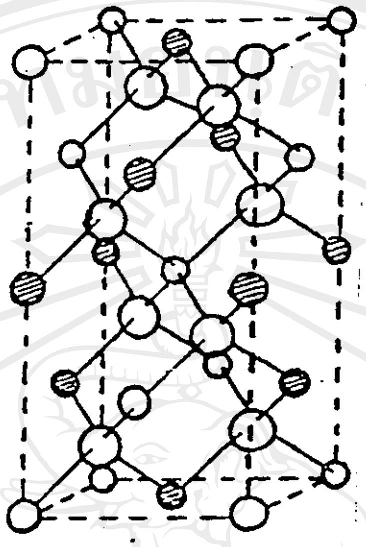
ธาตุกลุ่ม I เช่น Cu มี 4 อะตอม อยู่ที่ : $000, 0\frac{1}{2}\frac{1}{4}, \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}1\frac{3}{4}$

ธาตุกลุ่ม III เช่น In มี 4 อะตอม อยู่ที่ : $00\frac{1}{2}, 0\frac{1}{2}\frac{3}{4}, \frac{1}{2}\frac{1}{2}1, \frac{1}{2}1\frac{1}{4}$

ธาตุกลุ่ม VI เช่น Se มี 8 อะตอม อยู่ที่ : $x\frac{1}{4}\frac{1}{8}, \frac{\bar{x}3}{8}\frac{1}{8}, \frac{3}{4}x\frac{7}{8}, \frac{1}{4}\frac{\bar{x}7}{8}, \frac{1}{2}+\frac{x3}{4}\frac{5}{8}, \frac{1}{2}+\frac{\bar{x}1}{4}\frac{5}{8}, \frac{1}{4}\frac{1}{2}+\frac{\bar{x}3}{8}$ และ $\frac{3}{4}\frac{1}{2}+\frac{\bar{x}3}{8}$

โดยที่ $x = \frac{1}{4}+U$ และ $\bar{x} = \frac{3}{4}+U$, U เป็นค่าการเลื่อนแบบเททระโกนอล ซึ่งเกิดจากอะตอมของธาตุชนิดต่าง ๆ มีขนาดและอำนาจในการดึงดูดซึ่งกันและกันไม่เท่ากัน เป็นผลให้โครงสร้างแตกต่างจากโครงสร้างสมบูรณ์เล็กน้อย เป็นผลทำให้อัตราส่วนของ c/a ไม่เท่ากับ 2 และ x เป็นตำแหน่งของอะตอมกลุ่ม VI

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved



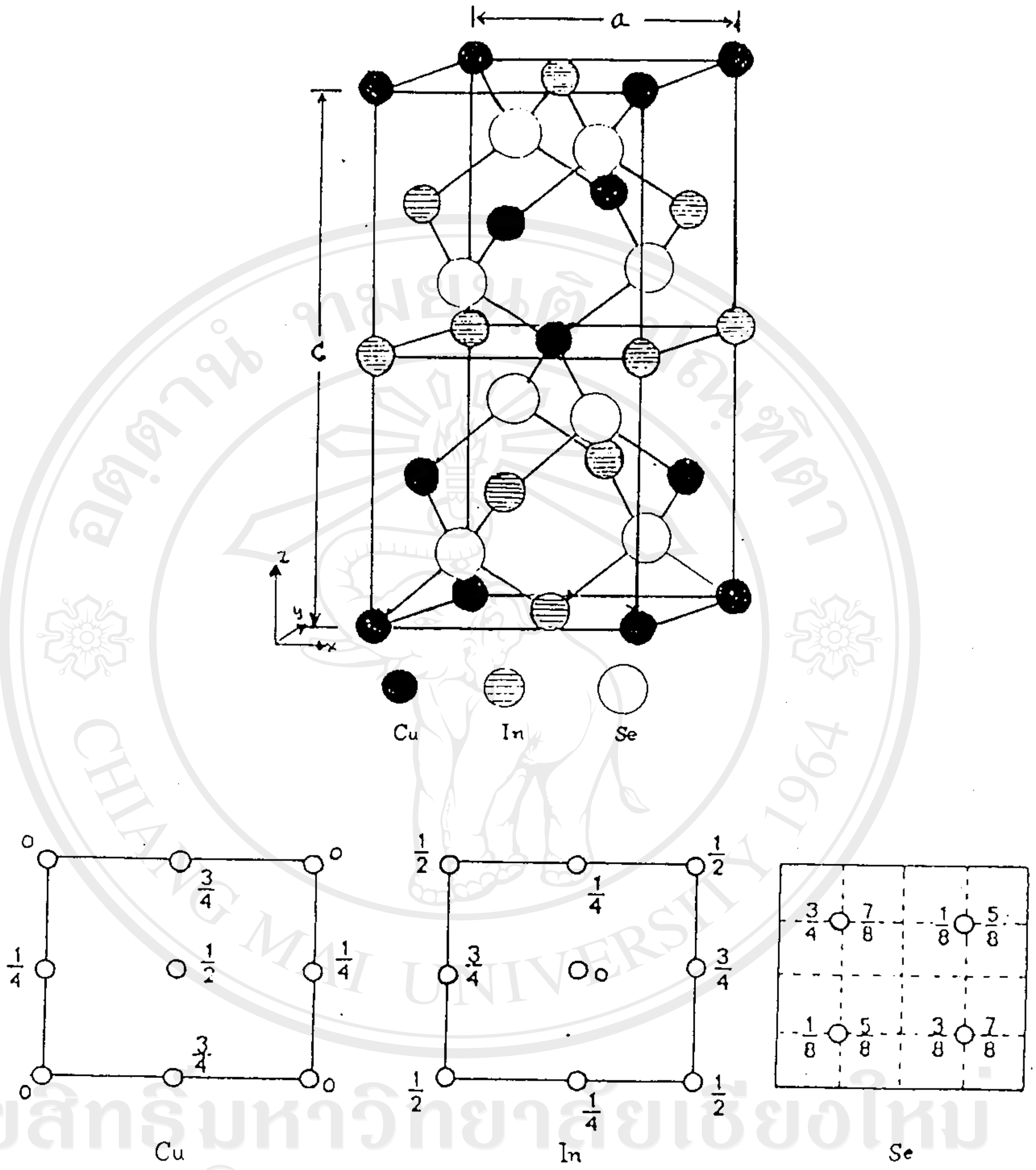
รูปที่ 2.4 แสดงโครงสร้างแบบชาลโคไพไรท์[1]

2.2 หลักการเตรียมผลึกเบื้องต้น

นำเอาธาตุแต่ละชนิดที่เราต้องใช้เพื่อทำให้เกิดผลึกสารกึ่งตัวนำ มาชั่งให้ได้น้ำหนักตามที่คำนวณไว้ แล้วบรรจุธาตุต่าง ๆ ที่ชั่งน้ำหนักแล้วนี้ลงในหลอดแก้วควอทซ์ ซึ่งปลายด้านหนึ่งเปิดดูดอากาศออก ปิดหลอด แล้วนำไปหลอม ก่อนที่จะนำสารมาเตรียมนั้นต้องศึกษาองค์ประกอบที่เกี่ยวข้องกับการเลือกวิธีการเตรียมผลึก การเลือกวิธีการเตรียมผลึกแต่ละชนิด จะต้องพิจารณาองค์ประกอบต่าง ๆ ดังต่อไปนี้ คือ [2]

1. พิจารณาปฏิกริยาทางเคมีของสารประกอบหรือธาตุต่าง ๆ ก่อน ถ้าหากธาตุต่าง ๆ หรือสารประกอบทำปฏิกริยากับผนังหลอดขณะหลอมแล้ว จะทำให้เกิดสารเจือปนมาปนกับสารที่เตรียมได้ ดังนั้น ก่อนบรรจุธาตุต่าง ๆ ควรเคลือบผนังหลอดด้วยคาร์บอน

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved



รูปที่ 2.4.1 แสดงโครงสร้างของ $CuInSe_2$

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

2. พิจารณาความดันไอของธาตุต่าง ๆ ธาตุบางชนิดเมื่อกลายเป็นไอจะมีความดันไอสูง จะส่งผลทำให้หลอดแตกหรือระเบิด ถ้าเตรียมสารที่เป็นสารประกอบฟอสไฟด์หรือซัลไฟด์(phosphide or sulphide compounds) จะต้องเพิ่มอุณหภูมิการหลอมอย่างช้า ๆ เพื่อลดความดันไอส่วนพวกของสารประกอบเซเลไนด์ (selenide compounds) สามารถเพิ่มอุณหภูมิได้เร็วกว่ากรณีแรก เพราะความดันไอต่ำ

3. พิจารณาจุดหลอมเหลวของสารประกอบหรือธาตุต่าง ๆ ในการเลือกอุณหภูมิการหลอม ให้อุณหภูมิของการหลอมเหลวของธาตุสูงกว่าจุดหลอมเหลวของธาตุ นิยมใช้สูงกว่า 50°C ขึ้นไป ทั้งนี้ขึ้นอยู่กับความแน่นอนของเครื่องวัดอุณหภูมิ

2.3 เทคนิคการหลอมสาร[3]

2.3.1 เทคนิคการหลอมสารแบบบริดจ์แมน

นำเอาธาตุต่าง ๆ ที่บรรจุไว้ในหลอดแก้วสุญญากาศดังได้กล่าวแล้วในข้อ 2.2 มาดำเนินการทำให้หลอมเหลว เพื่อให้ธาตุต่าง ๆ เหล่านี้จับตัวกันใหม่ เพื่อให้ได้ผลึกที่เราต้องการ บริดจ์แมน ได้ทำให้ธาตุเหล่านี้จับรูปเป็นผลึก โดยการให้หลอดแก้วบรรจุธาตุต่าง ๆ เหล่านี้ ที่ความดันต่ำเท่าที่จะสามารถเตรียมได้และค่อย ๆ เลื่อนหลอดแก้วนี้ในเตา ซึ่งอุณหภูมิของแต่ละตำแหน่งไม่เท่ากัน โดยที่อุณหภูมิค่อย ๆ เพิ่มขึ้นจนถึงอุณหภูมิสูงสุด ซึ่งสูงกว่าจุดหลอมเหลวของธาตุต่าง ๆ และของสารประกอบที่จะจับตัวกันเป็นผลึก แล้วอุณหภูมิค่อย ๆ ลดลง การเลื่อนหลอดแก้วอย่างช้ามากผ่านเตาดังกล่าวจะทำให้เราได้ผลึกสารกึ่งตัวนำตามต้องการ

การประยุกต์วิธีการของบริดจ์แมน

การประยุกต์วิธีการของบริดจ์แมน ทำได้โดยการให้หลอดแก้วที่บรรจุธาตุต่าง ๆ ที่ความดันต่ำสุดเท่าที่จะทำได้ ตามข้อ 2.2 วางไว้ในเตาเผา ค่อย ๆ เพิ่มอุณหภูมิของเตาอย่างช้า ๆ จนกระทั่งอุณหภูมิสูงกว่าจุดหลอมเหลวของธาตุต่าง ๆ หรือของสารประกอบที่จะจับตัวเป็นผลึก ประมาณ 50°C ในบางกรณีเพื่อให้เกิดความมั่นใจว่าอุณหภูมิสูงพอ อาจให้อุณหภูมิสูงกว่าถึง 100°C หรือมากกว่านั้นเล็กน้อยก็ได้ จากนั้นค่อย ๆ ลดอุณหภูมิลงอย่างช้า ๆ ก็จะได้ผลึกที่ต้องการ เพื่อให้ได้ผลึกสมบูรณ์ยิ่งขึ้น นิยมนำไปแอนนีลในเตาเผาประมาณ 1-2 เดือน

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

2.3.2 การหลอมแบบธรรมดา[3]

ลักษณะเตาเผาจะอยู่ในแนวดิ่ง เมื่อใส่สารที่ต้องการหลอมในหลอดควอทซ์ แล้วนำไปใส่ในเตา จากนั้นเพิ่มอุณหภูมิของเตาให้สูงกว่าจุดหลอมเหลวของสาร ประมาณ 200 °C และให้คงที่ประมาณ 24-48 ชม. และขณะเดียวกันก็มีการเขย่าหลอด หรือหมุนเตากลับไปกลับมา เพื่อให้ธาตุต่าง ๆ ผสมกันดีขึ้น เมื่อครบเวลาก็ลดอุณหภูมิตามปกติจนถึงอุณหภูมิห้อง ซึ่งวิธีการนี้โดยมาก เมื่อสารเย็นตัวหลอดแก้วมักแตก ต้องนำไปบรรจุหลอดใหม่ แล้วดูดอากาศออก จากนั้นนำไปแอนนีลเพื่อให้เนื้อสารอยู่ในสภาวะสมดุลต่อไป ซึ่งต้องใช้เวลาประมาณ 4-5 เดือน จึงจะได้ผลึกที่สมบูรณ์

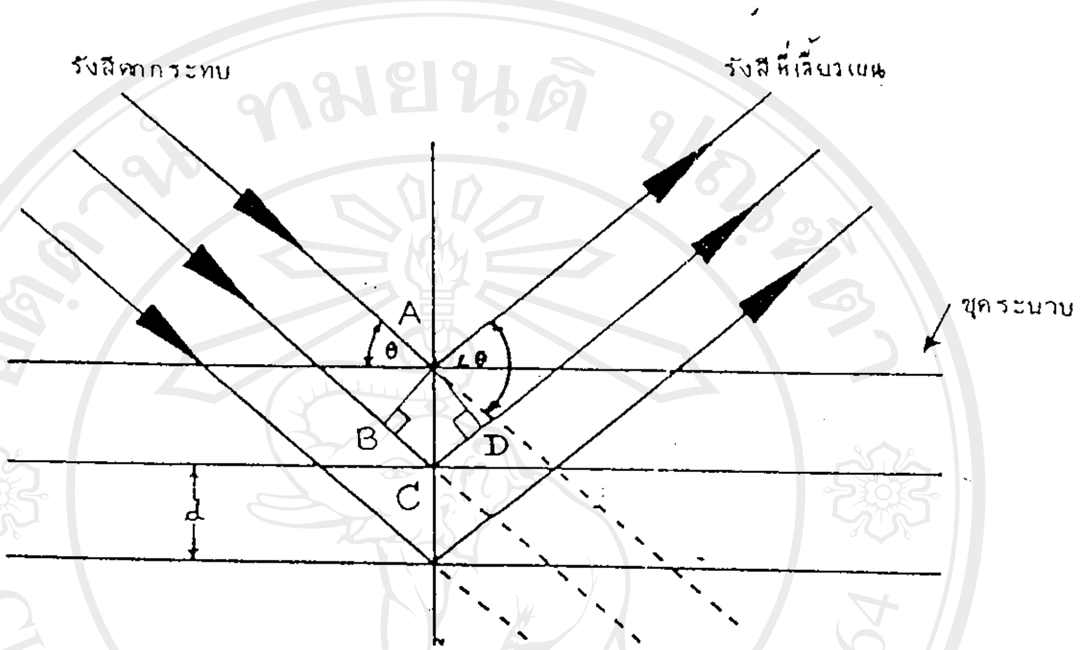
2.3.3 การหลอมแบบเควํนช์[3]

ลักษณะของการหลอม เตาจะวางเหมือนการหลอมแบบธรรมดา เพียงแต่เมื่อหลอมจนได้สูงกว่าจุดหลอมประมาณ 200 °C ในเวลา 24-48 ชม. แล้ว ก็เปิดเตาเอาสารจุ่มในน้ำเย็นทันที สารจะเย็นตัวอย่างรวดเร็ว ทำให้แท่งสารมีผิวเรียบ ไม่มีรูพรุน จากนั้นก็นำไปแอนนีลประมาณ 2 - 2 1/2 เดือน

2.4 การหาโครงสร้างของผลึก (Structure determination)[4]

ในปี ค.ศ. 1895 หลังจากที่ Roentgen ได้ค้นพบรังสีเอกซ์ ซึ่งเป็นคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่มีความยาวคลื่นอยู่ในช่วง 0.1 Å ถึง 100 Å แล้ว แบรกก์ (Bragg) ก็ได้อธิบายการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ในทิศทางต่าง ๆ ของผลึกว่า ผลึกประกอบไปด้วยชุดระนาบหลายระนาบขนานกัน เมื่อรังสีเอกซ์กระทบชุดระนาบต่าง ๆ (planes) ของผลึก ชุดระนาบเหล่านี้จะทำให้รังสีเอกซ์เกิดการเลี้ยวเบนออกมา รังสีเอกซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาจากระนาบต่าง ๆ จะมีความถี่หรือความยาวคลื่นค่าเดียวกับรังสีเอกซ์ที่ตกกระทบผลึก และจะเกิดการแทรกสอดซึ่งกันและกัน ดังแสดงในรูป 2.5

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved



รูปที่ 2.5 แสดงการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์

จากรูปที่ 2.5 Θ คือ มุมที่รังสีเอกซ์ทำกับผิวระนาบที่สะท้อน (Bragg angle) และ d คือ ระยะระหว่างระนาบในชุดเดียวกัน (interplanar spacing) สำหรับการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์จากระนาบต่าง ๆ ของผลึกพบว่า รังสีเอกซ์ทั้งหมดจะมีความแตกต่างของทางเดินเท่ากับ BC + CD หรือ $2d \sin \Theta$ หรือ $n\lambda$ ดังสมการ

$$2d \sin \Theta = n\lambda \qquad (2.1)$$

เมื่อ n = 0, 1, 2, 3...... เป็นลำดับ (order) ของรังสีเอกซ์ที่ถูกเลี้ยวเบน ถ้าเราพิจารณาการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ที่เกิดจากระยะระหว่างระนาบที่ถัดกัน พบว่า รังสีเอกซ์ทั้งสองจะมีความแตกต่างเฟสเท่ากับ λ หรือ n = 1 ดังนั้น สมการ (2.1) เปลี่ยนรูปเป็น

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

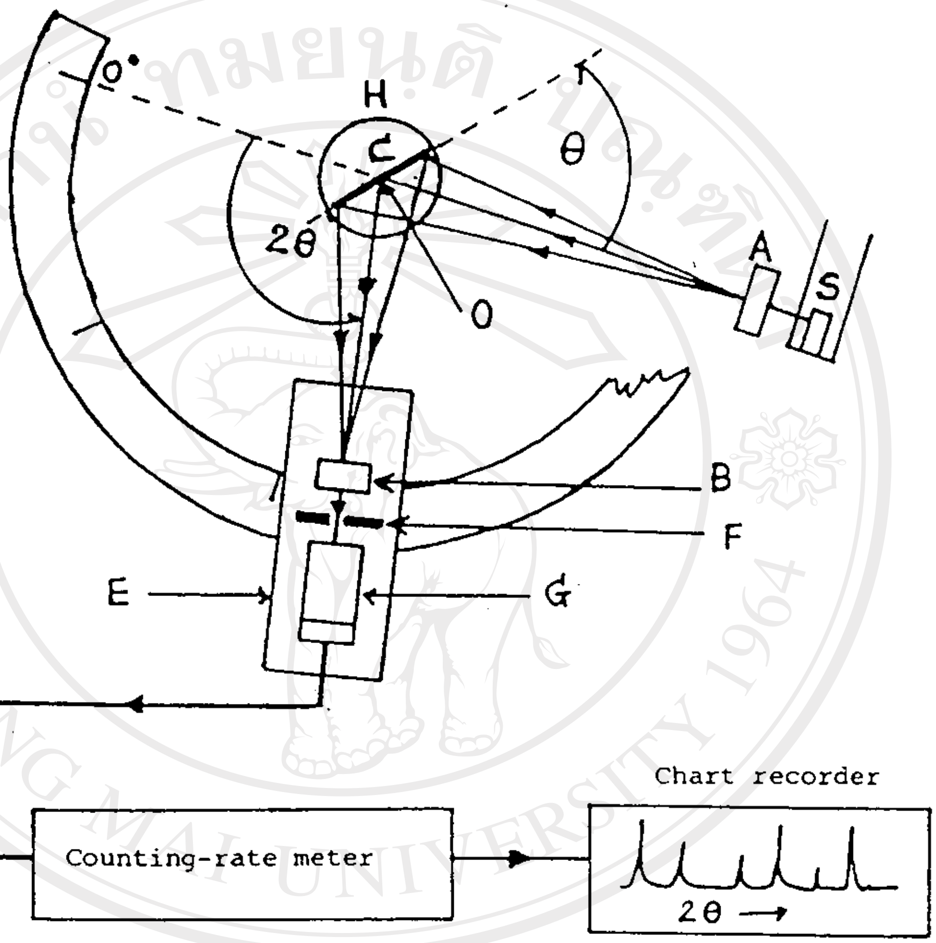
2d sin Θ = λ ซึ่งถูกเรียกว่า กฎของแบรกก์ (Bragg's Law) สมการนี้เป็นสมการใช้หาระยะระหว่างระนาบที่ถัดกัน (d) เมื่อทราบความยาวคลื่นของรังสีเอกซ์ที่ใช้ (λ) และมุมของแบรกก์ (Θ) จากการถ่ายภาพรังสีเอกซ์

2.4.1 หลักการของเครื่องเอกซ์เรย์ดิฟแฟรคโตมิเตอร์ (X-ray Diffractometer)

ในการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนโดยวิธี X-ray diffractometer นั้น สารตัวอย่างจะเป็นแผ่นสไลด์ของผงผลึก C ถูกยึดบนฐาน H ซึ่งสามารถหมุนรอบแกน O รังสีเอกซ์จากแหล่งกำเนิด S ผ่านสลิท A มายังสารตัวอย่าง แล้วเลี้ยวเบนผ่านไปยังสลิท B และ F พร้อมทั้งผ่านเครื่องนับ G โดยที่สลิท B, F และเครื่องนับ G อยู่บนฐาน E และแท่นฐาน H จะถูกเชื่อมโยงอยู่ด้วยชุดเฟือง H หมุนรอบแกน O ไปเป็นมุม Θ จะทำให้ฐาน E และเครื่องนับสัญญาณหมุนไป 2Θ ดังรูป 2.6

ความเข้มของรังสีเอกซ์ที่เลี้ยวเบนแล้ว ตรวจวัดโดยเครื่องนับสัญญาณ จะถูกส่งไปยังหน่วยบันทึกผล (Chart recorder) เมื่อบันทึกผลออกมาเป็นพีคของสเปคตรัมที่ตำแหน่งมุม 2Θ ของมุมแบรกก์ ค่าต่าง ๆ บนกระดาษกราฟ เราสามารถมาคำนวณหาค่า d(d-spacing) ได้ ทำให้ทราบโครงสร้างของสารตัวอย่าง

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

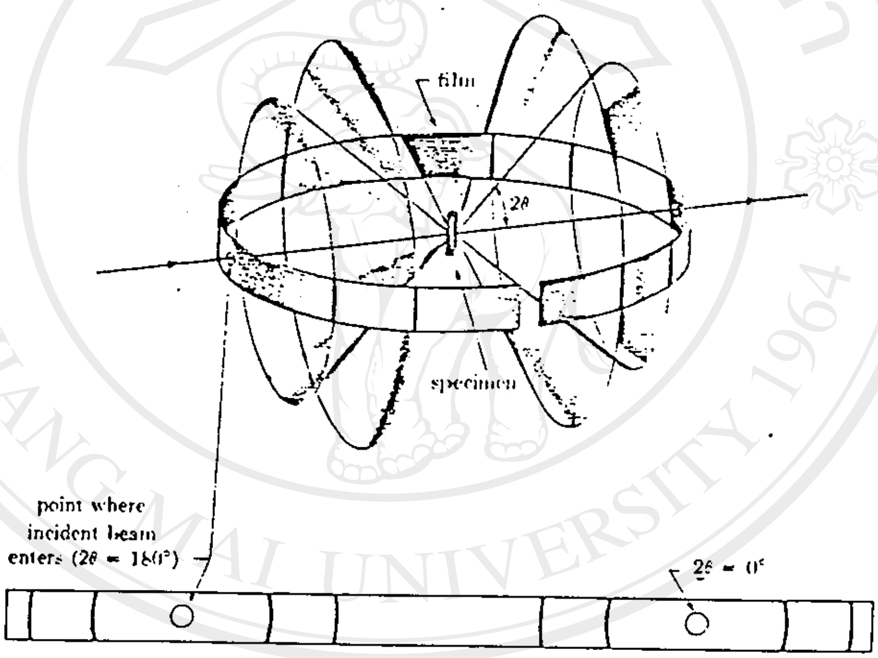


ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

รูปที่ 2.6 แผนผังแสดงส่วนสำคัญของเอกซ์เรย์ดิฟแฟรคโตมิเตอร์

2.4.2 Debye Scherrer Method[4]

เป็นการถ่ายภาพการเกิด diffraction โดยนำเอาสารที่จะถ่ายภาพนั้น มาบดเป็นผงให้ละเอียด (Powder) ผงเล็ก ๆ จะเป็นผลึกเชิงเดี่ยว แล้วนำไปใส่ในหลอดกระดาษแก้วซึ่งมีเส้นผ่าศูนย์กลาง 0.5 มิลลิเมตร โดยอัดให้แน่น จะทำให้ระนาบของผลึกมีการเรียงตัวสม่ำเสมอในทุกทิศทุกทาง โดยที่แต่ละระนาบ (plane) ของผลึกถูกแทนด้วย reciprocal lattice d^*_{hkl} ซึ่งมีค่าเท่ากับ λ / d_{hkl} ดังรูป 2.7

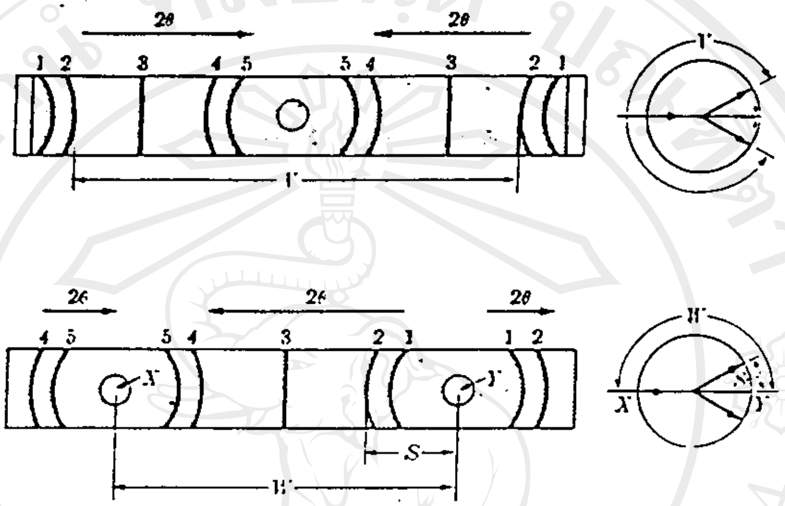


ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่

รูปที่ 2.7 แสดง reciprocal แทนชุดของระนาบหนึ่ง ๆ ที่เรียงตัวอย่างสม่ำเสมอทุกทิศทุกทาง

Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

ในทางปฏิบัติทั่วไป เราใช้กล้องถ่ายภาพมีลักษณะเป็นทรงกระบอก สำหรับ Specimen เมื่อรังสีเอกซ์ผ่านเข้าไป ทำให้เกิด diffraction ออกมากระทบฟิล์มที่เราใส่ไว้รอบ ๆ Specimen ดังแสดงในรูป 2.7



รูปที่ 2.8 แสดงการเกิดลายเส้นบนฟิล์ม

จากลายเส้นที่ได้ จะได้ว่า

$$2\Theta = S/R \quad \text{เรเดียน}$$

เมื่อ Θ = Bragg's angle

R = รัศมีของกล้อง

S = ระยะระหว่างเส้นบนฟิล์ม

$$\Theta = (S/2R) \times (180/\pi) \quad \text{องศา} \qquad (2.2)$$

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

ดังนั้น ทำให้เราหาค่า Interplanar Spacing ของแต่ละระนาบที่ทำให้เกิด diffraction จากสมการ (2.1) จะได้ว่า

$$d = \lambda/2 \sin \theta \quad (\text{เมื่อ } n = 1) \qquad (2.3)$$

2.4.3 Laue Method[๕]

การศึกษาคุณสมบัติต่าง ๆ ของสารที่อยู่ในรูปผลึกส่วนใหญ่ ได้มาจากการศึกษาคุณสมบัติของผลึกเชิงเดี่ยว ตามปกติส่วนมากเป็นพวก anisotopic ในการศึกษาวิจัย จำต้องทราบถึง Orientation ของผลึกก่อน เพื่อจะทราบระนาบ (plane) หรือแกน (axis) ของผลึกของสารตัวอย่าง

การศึกษา Orientation ของผลึก โดย X-ray diffraction หาได้จากวิธี back reflection Laue Method และ transmission Laue Method โดยอาศัยวิธี Stereographic projection เข้าช่วย

2.4.4 Stereographic projection[๖]

การศึกษาผลึกสามารถแสดงได้โดย เขียนอยู่ในรูปจำลองหรือแผนผัง แต่สิ่งเหล่านี้ไม่สะดวกในการแสดงมุมที่เกี่ยวข้องกันระหว่างระนาบแลททีส (Lattice plane) และทิศทาง (direction) โดยทั่วไปเราสนใจมุมระหว่างระนาบ (Interplanar angle) มากกว่าคุณสมบัติอื่น ๆ ของผลึก

แทน Orientation ของระนาบใด ๆ ในผลึกด้วยเส้นตั้งฉากระนาบ (plane normal) ที่ลากจากจุดหนึ่งในผลึก ถ้าอธิบายด้วยทรงกลมอ้างอิงรอบจุดนั้น เส้นตั้งฉากจะต้องตัดทรงกลมเป็นจุดที่เรียกว่า "Pole" ดังในรูป 2.9 ซึ่งแสดงกลุ่มของระนาบ {100} ของผลึกแบบลูกบาศก์ (Cubic crystal)

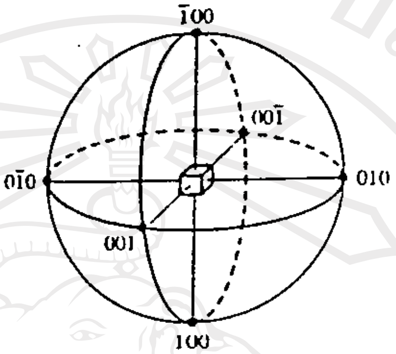
ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

Pole ของระนาบแทนตำแหน่งของระนาบทรงกลมอ้างอิง และแทน orientation ของระนานนั้น และอาจแทนระนาบได้ด้วย trace ซึ่งแสดงระนาบบนผิวทรงกลม ดังรูป 2.10 ABCDA แทนระนาบที่มี pole เป็น P_1 trace นี้จะเป็นวงกลมใหญ่ ถ้าระนาบผ่านจุดศูนย์กลางของทรงกลมอ้างอิง

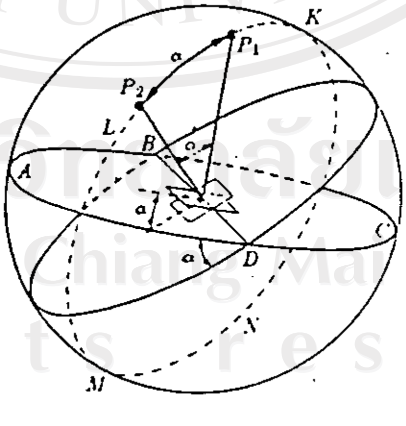
ถ้าระนาบไม่ผ่านจุดศูนย์กลางทรงกลมอ้างอิง ก็จะตัดเป็นวงกลมเล็ก พิจารณาระนาบระนาบที่เอียงทำมุมเท่ากับ α ถ้าลากเส้นตั้งฉากระนาบนี้จะตัดวงกลมอ้างอิงที่ P_1 และ P_2 ที่ทำมุมเท่ากับ α เหมือนกัน และสามารถวัดค่ามุม α นี้บนผิวทรงกลมอ้างอิงตามเส้นรอบวงของทรงกลมใหญ่ KLMNK ซึ่งเชื่อมระหว่าง Pole P_1 และ P_2 ของระนาบทั้งสอง ถ้าแบ่งทรงกลมที่เป็น 360 ส่วนเท่ากัน ก็สามารถวัดมุมระหว่างระนาบจากผิวทรงกลมอ้างอิง ในวิชาผลึกวิทยาเราเลือกใช้ equi angle stereographic projection ซึ่งให้ค่ามุมที่ถูกต้อง วิธีนี้ทำได้โดยเอาระนาบของ projection ตั้งฉากกับปลายด้านหนึ่งของเส้นผ่าศูนย์กลางที่เลือกแล้วของทรงกลมอ้างอิง และให้ปลายข้างหนึ่งของเส้นผ่าศูนย์กลางจะเป็นจุดที่จะ project ดังรูป 2.11

จากรูป 2.11 projection plane จะตั้งฉากกับเส้นผ่าศูนย์กลาง AB ที่ปลาย A และ project จากจุด B ถ้าระนาบนี้มี pole ที่ P แล้ว stereographic projection ของ P หรือ P′ ซึ่งได้จากลากเส้น BP ไปพบกับ projection plane ที่ P′ ระนาบ NESW ตั้งฉากกับเส้นผ่าศูนย์กลาง AB และผ่านจุดศูนย์กลาง C ดังนั้น จึงเป็นระนาบที่แบ่งครึ่งทรงกลมออกเป็น 2 ส่วนเท่ากัน trace ของระนาบนี้ บนผิวทรงกลมอ้างอิงคือวงกลมใหญ่ และเงาของวงกลมใหญ่นี้จะปรากฏบน projection plane เป็น basic circle N′E′S′W′ pole ทั้งหมดที่บนครึ่งวงกลมซ้ายมือจะถูก project ภายนอก basic circle ถ้าต้องการ projection plane ไปยังจุด B ด้วย จะได้กลุ่มของจุดใหม่ที่มีเครื่องหมายตรงกันข้ามของกลุ่มแรก การเคลื่อนย้าย projection plane ไปตามแนว AB เป็นการเปลี่ยนค่ากำลังขยาย พร้อมทั้งสามารถให้ projection plane อยู่ที่จุดศูนย์กลางวงกลมอีกด้วย ในกรณีนี้ basic circle มีขนาดเท่ากับวงกลมใหญ่ NESW พอดี

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved



รูปที่ 2.9 แสดงกลุ่ม Pole {100} ของผลึกลูกบาศก์[2]



รูปที่ 2.10 แสดงมุมระหว่างระนาบ 2 ระนาบ[2]

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

ในการ project ระนาบแลททิสของผลึกลงใน projection plane สามารถสรุปได้ดังนี้

1. แทนระนาบ C ด้วยเส้นตั้งฉาก CP
2. แทนเส้นตั้งฉาก CP ด้วย pole P ซึ่งเป็นจุดตัดของ CP กับทรงกลมอ้างอิง
3. แทน P ด้วย stereographic projection P′

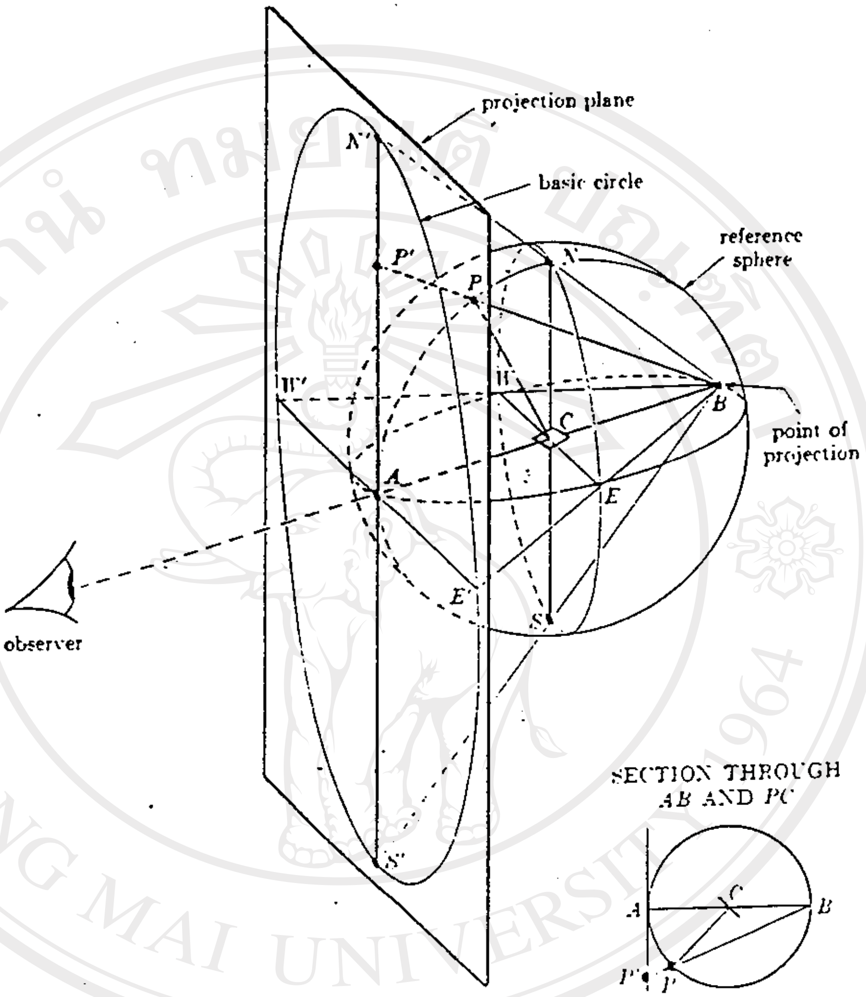
จากที่กล่าวมานี้ อาจกล่าวได้ว่า P′ คือ Pole ของระนาบ C หรือแทนระนาบ C โดยตรง วงกลมใหญ่บนทรงกลมอ้างอิงจะถูก project เป็นส่วนโค้งของวงกลมบน projection plane วงกลมใหญ่ของวงกลมอ้างอิงที่ผ่านจุดศูนย์กลาง AB จะถูก project เป็นเส้นตรงผ่านเส้นผ่าศูนย์กลาง AB ของ basic circle บน projection plane ดังรูป 2.11

ถ้าเราแบ่งครึ่งวงกลมใหญ่เป็น 18 ส่วนเท่า ๆ กัน ดังรูป 2.12 เมื่อถูก project ลงบน projection plane จุดที่แบ่ง W′, A′, E′ จะเป็นจุดแบ่งมาตราส่วนทุกช่อง 10 องศา บนเส้นผ่าศูนย์กลางของ basic circle ส่วนวงกลมเล็กบนทรงกลมอ้างอิงก็จะถูก project เป็นวงกลมด้วย แต่เงาของจุดศูนย์กลางของวงกลมเล็กที่สุด project จะไม่ทับกับจุดศูนย์กลางของวงกลมบน projection plane วงกลม AJEK มีจุดศูนย์กลางที่ P ซึ่งอยู่บนเส้น AWBE วงกลมนี้ถูก project เป็น AJ′E′K′ และมีจุดศูนย์กลางที่ C ซึ่งอยู่กึ่งกลางของเส้น AE′ แต่เงาของ P คือ P′ อยู่ที่ตำแหน่ง 45 องศา กับ A และกับ E′

สิ่งที่สำคัญในการศึกษาผลึกโดย stereographic projection คือ Wulff net ดังรูป 2.13 เป็น projection ของทรงกลม ประกอบด้วย เส้นรุ้งและเส้นแวง อยู่ในแนวขนานและเหนือใต้ของทรงกลม เส้นรุ้งบน Wulff net เป็นวงกลมเล็กลากจากด้านหนึ่งไปอีกด้านหนึ่ง ส่วนเส้นแวงเป็นวงกลมใหญ่ระหว่างขั้วเหนือ-ใต้ ของ Wulff net

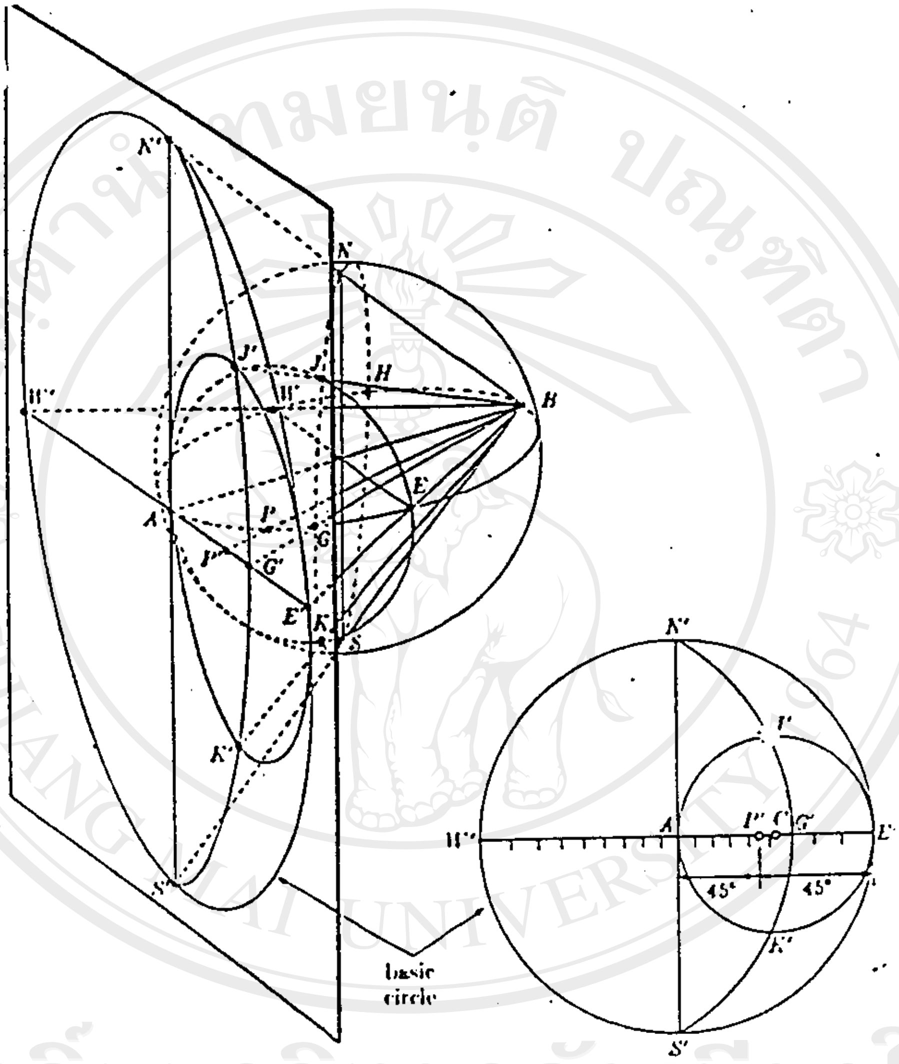
สร้าง sterographic projection บนกระดาษแก้ว โดยซ้อนกระดาษแก้วบน Waulff net ใช้เข็มหมุดปักตรงจุดศูนย์กลางของ Wulff net เพื่อให้กระดาษแก้วหมุนรอบจุดศูนย์กลาง จะได้ stereographic projection ที่มีศูนย์กลางของ Wulff net พอดี

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved



รูปที่ 2.11 แสดง Stereographic projection

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved



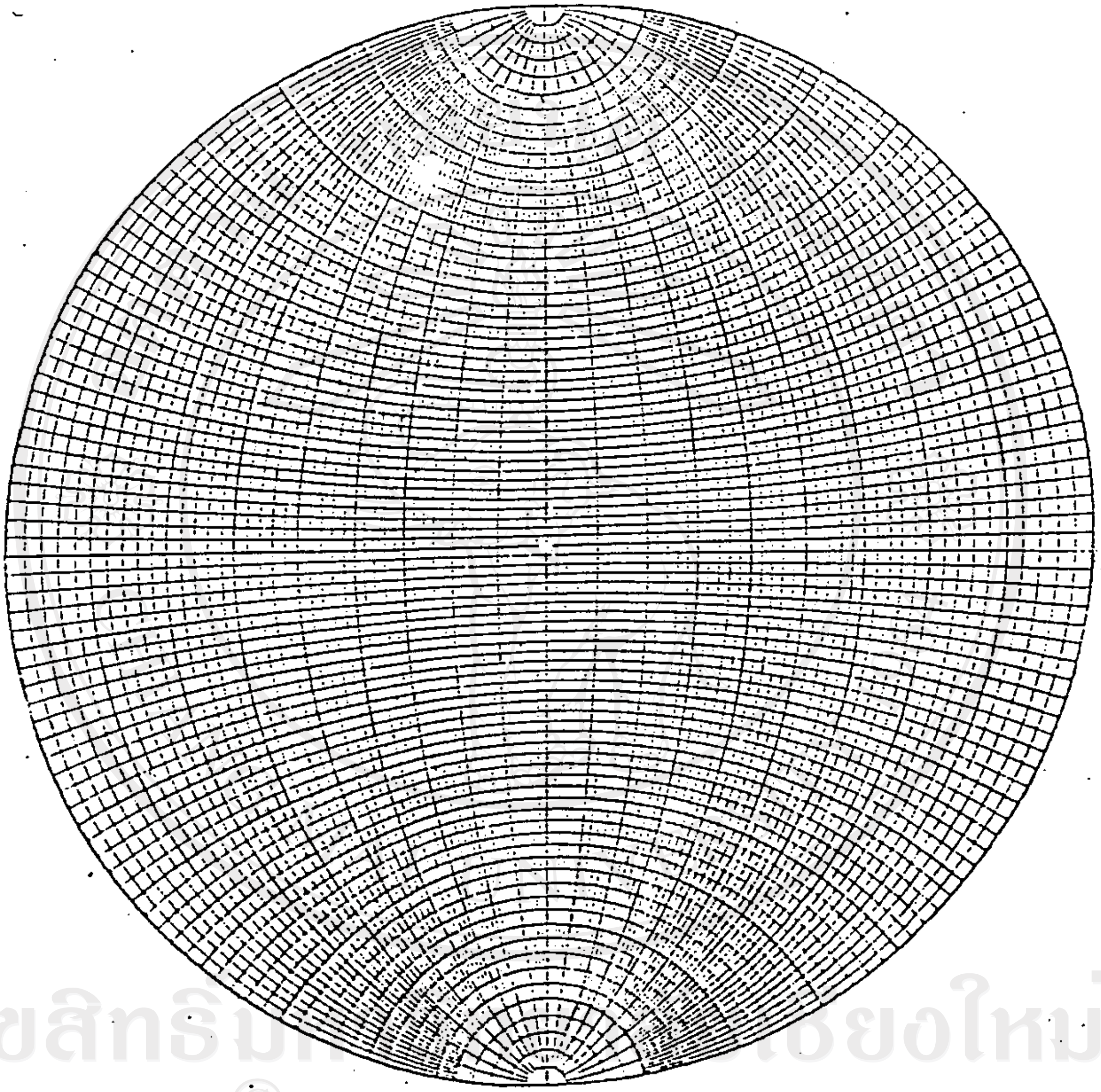
ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

รูปที่ 2.12 แสดง Stereographic projection ของวงกลมใหญ่และวงกลมเล็ก

จากรูป 2.12 วงกลมใหญ่ ANBS ถูก project เป็นเส้นตรง N' S'

วงกลมเล็ก AWSE ถูก project เป็นเส้นตรง N' E'

วงกลมใหญ่ NGSH ซึ่งทำมุมกับ projection plane ถูก project เป็นส่วนโค้ง N' G' S'



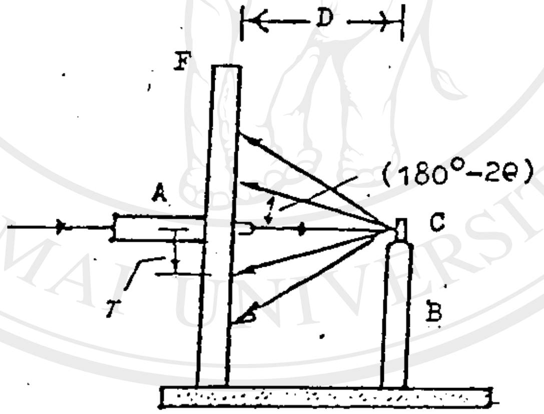
ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

รูปที่ 2.13 แสดง Wulff net 1 ช่องเท่ากับ 2 องศา

2.4.5 Back reflection Laue method[4]

Laue pattern ของผลึกเชิงเดี่ยว ประกอบด้วย กลุ่มของจุด diffraction บนฟิล์ม ตำแหน่งของจุดขึ้นอยู่กับ Orientation ของผลึก ฉะนั้น Laue method ทั้ง Back reflection และ transmission สามารถหา Orientation ของผลึกได้ Back reflection ใช้กับผลึกที่มีความหนาได้ ผลึกที่ใช้มักทำอยู่ในรูปแท่งหรือแผ่น เพื่อสะดวกในการหมุนตามแกนและจัดทิศทางผลึกให้ตรงกันกับฟิล์มได้ง่าย ดังรูป 2.14

การศึกษาหา Orientation จากจุดบนฟิล์ม ซึ่งอยู่ในตำแหน่ง back reflection ต้องหา Bragg angle θ ที่สอดคล้องกับจุดทุกจุด



ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

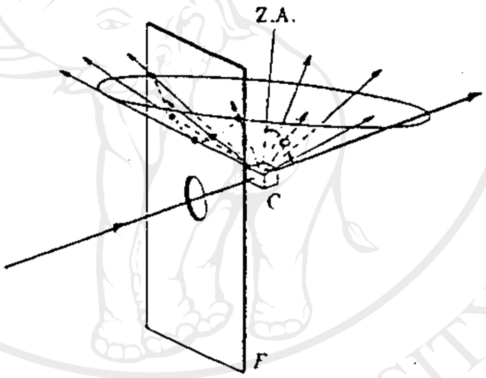
รูปที่ 2.14 แสดงการถ่ายภาพ back reflection Laue method

จากรูปที่ 2.14 จะเห็นว่าผลึกจะ diffract รังสีเอกซ์เป็นมุมBragg's angle θ เราสามารถหา θ ได้จากความสัมพันธ์

$$\tan(180-2\theta) = r/D \qquad (2.4)$$

เมื่อทราบค่า θ แล้วยังไม่สามารถชี้ลงไปได้ว่า ระนาบไหนทำให้เกิดจุดนั้นได้ เราสามารถหา Orientation ของเส้นตั้งฉากระนาบที่ทำให้เกิดจุดแต่ละจุด เพราะเส้นตั้งฉากระนาบจะแบ่งครึ่งมุมระหว่างรังสีตกกระทบและรังสีเลี้ยวเบน

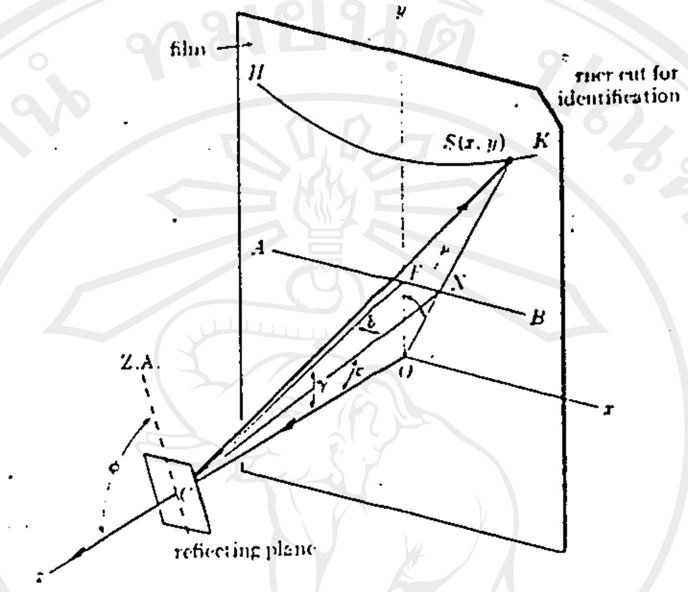
ดังนั้นการศึกษา Orientation จึงได้จากการวัดตำแหน่งจากจุดที่เกิดจากการ diffraction ทุกจุดบนฟิล์มและตำแหน่ง stereographic projection ของ pole ของระนาบที่ทำให้เกิดจุดนั้นทุกระนาบของ Zone จะสะท้อนรังสีอยู่ในกรวยที่ Zone axis ทำกับรังสีตกกระทบ ดังรูป 2.15



รูปที่ 2.15 แสดงการตัดของ diffraction beam รูปกรวยบนฟิล์ม back reflection, C = ผลึก, F = ฟิล์ม, ZA คือ Zone axis

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

จากรูป 2.15 ถ้ามุม ϕ น้อยกว่า 45 องศา รังสีเลี้ยวเบนจะไม่ตัดฟิล์มที่อยู่ข้างหลังผลึก
ถ้า ϕ อยู่ระหว่าง 45-90 องศา รังสีจะตัดฟิล์มเป็นรูปไฮเปอร์โบลา
ถ้า ϕ เท่า 90 องศา จะได้รังสีเลี้ยวเบนเป็นเส้นตรงตามแนวรังสีตกกระทบ
ถ้า ϕ มากกว่า 90 องศา รังสีเลี้ยวเบนจะต่ำกว่ารังสีตกกระทบ
ดังนั้น จุดบนฟิล์มที่อยู่ตำแหน่ง back reflection จะเป็นรูปไฮเปอร์โบลากับเส้นตรง



รูปที่ 2.16 แสดงตำแหน่งของจุดบนฟิล์มที่ตำแหน่ง back reflection เมื่อ $\gamma = 90-\phi$

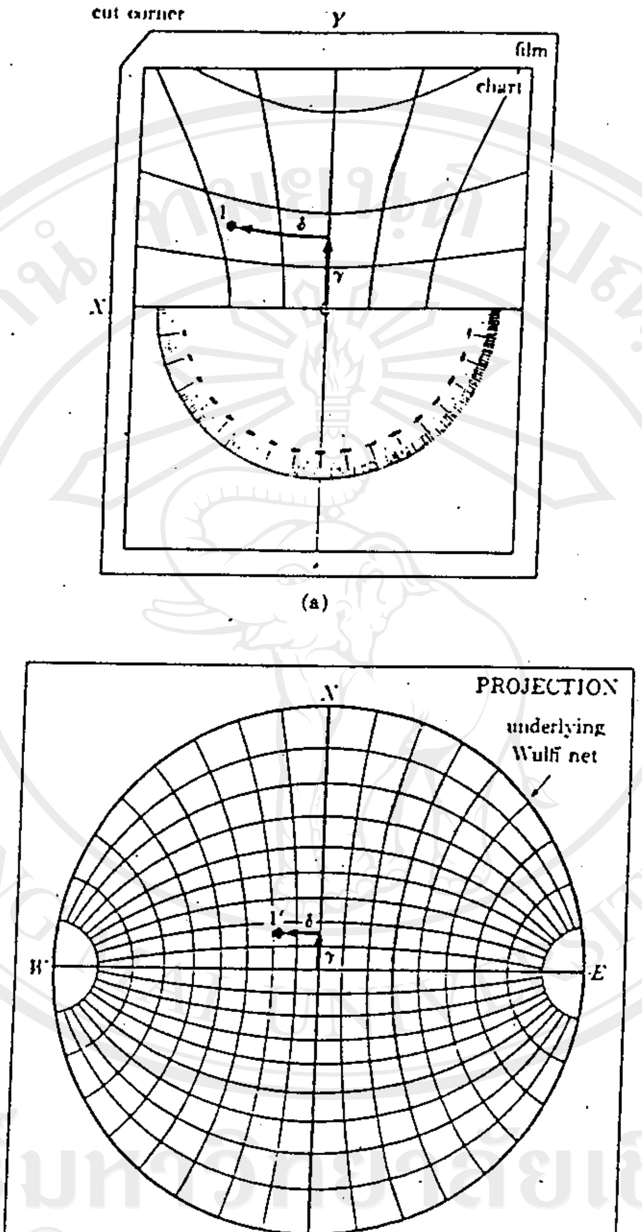
ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

จากรูป 2.16 แสดงฟิล์มที่มองจากทางด้านผลึก โดยใช้รังสีตกกระบอยู่ในแนวแกน Z ในทิศทาง OZ และฟิล์มอยู่ในระนาบ xy จุด S บนฟิล์มเกิดจากรังสีที่สะท้อนบนระนาบ C ในผลึก CN คือ เส้นตั้งฉากระนาบ C ระนาบนี้อยู่ใน Zone ที่มี zone axis อยู่ในระนาบ yz ถ้าระนาบนี้หมุนรอบ zone axis รังสีจะผ่านทุกระนาบของ zone นี้ของผลึกจริง เส้นตั้งฉากจะตัดฟิล์มเป็นรูปเส้นตรงและรังสีสะท้อนจะปรากฏเป็นรูปไฮเปอร์โบลา HK ฉะนั้น AB คือ Locus ของเส้นตั้งฉากระนาบ HK คือ Locus ของรังสีสะท้อน ดังนั้น orientation ของเส้นตั้งฉากระนาบอธิบายได้ด้วยมุม γ และ δ และวัดมุมดังกล่าวจากพิกัด x,y ของจุด S บนฟิล์ม

มีการประดิษฐ์ Gerninger chart รูปที่ 2.16 เพื่อวัดมุมเหล่านี้โดยวิธีกราฟ เมื่อวาง chart บนฟิล์มแล้วจัดให้ γ และ δ บน chart สอดคล้องกับจุดที่เกิดจากการเลี้ยวเบน

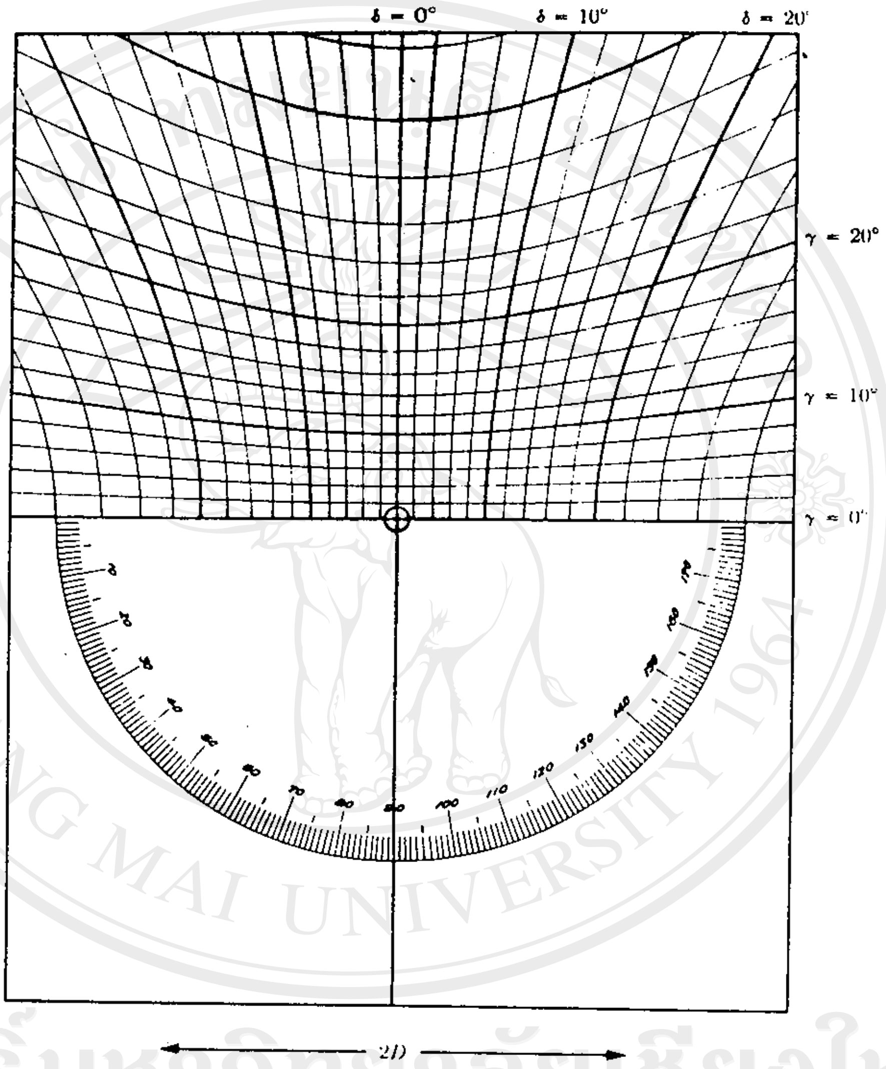
เอาฟิล์มวางบน chart โดยให้จุดศูนย์กลางของทั้งสองทับกัน ให้ขอบฟิล์มและ chart ขนานกัน วัดค่า γ และ δ ของแต่ละจุดได้โดยตรงจาก chart จากค่าที่อ่านได้นำไปเขียน stereographic projection ของ pole ต่าง ๆ ในการทดลองควรตัดมุมด้านบนขวาของฟิล์ม เพื่อให้ทราบว่าขณะทดลองนั้นฟิล์มหันไปทางด้านไหน เมื่อจะอ่านฟิล์มต้องเอามุมที่ตัดวางไว้ให้อยู่ด้านบนซ้าย ดังในรูป 2.17 (a) เอาค่ามุม γ และ δ ที่อ่านได้จาก chart นำไปเขียน pole บน stereographic projection ดังรูป 2.17 (b) ซึ่งต้องจัดให้ Wulff net อยู่ในแนวตะวันออกตก เนื่องจากรังสีเลี้ยวเบนอยู่บนเส้นโค้งที่มีค่าคงที่ γ เดียวกัน มาจากระนาบต่าง ๆ ของ zone เดียวกัน pole ของวงกลมใหญ่ต้องอยู่บนวงกลมใหญ่เดียวกัน การใช้ chart วัดจุดที่อยู่ครึ่งล่างของฟิล์มทำได้โดยหมุน Gerninger chart มาด้านล่าง โดยวิธีนี้จะทำให้ทราบ orientation ของผลึกได้

CHIANG MAI UNIVERSITY 1964
ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved



ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

รูปที่ 2.17 แสดงการใช้ Gerninger chart เพื่อเขียน pole ระนาบบน stereographic projection pole 1 ในรูป (b) ได้จาก pole ซึ่งเกิดขึ้นจาก plane ที่ทำให้เกิดจุด 1 บนฟิล์มในรูป (a)

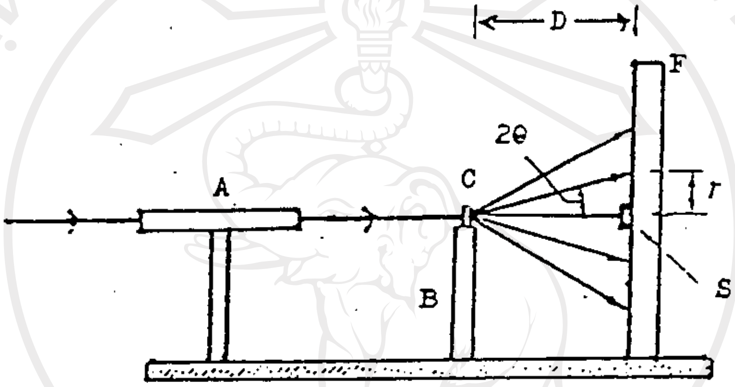


รูปที่ 2.18 แสดง Gerninger chart สำหรับ back reflection ซึ่งมีเป็นขนาด
ที่ใช้กับระยะฟิล์มและผลึกเท่ากับ 3 เซนติเมตร

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

2.4.6 **Transmission Laue Method**[4]

สำหรับการถ่ายภาพแบบ Transmission ผลึกที่ใช้ต้องมีค่า absorption ต่ำ และมีขนาดไม่หนามากนัก Laue pattern ที่ได้เป็นเช่นเดียวกันกับ back reflection



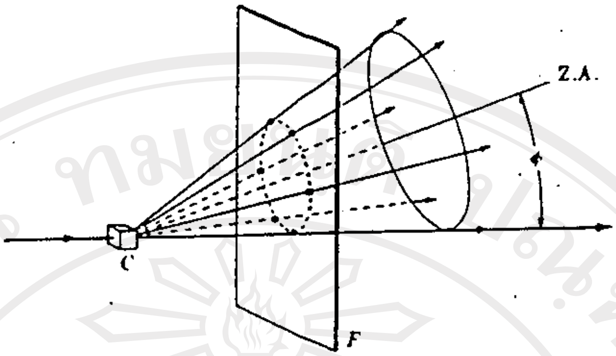
รูปที่ 2.19 แสดงการถ่ายภาพ Transmission ของ Laue

จากรูปที่ 2.19 สามารถหาค่ามุม Bragg's angle ได้จาก

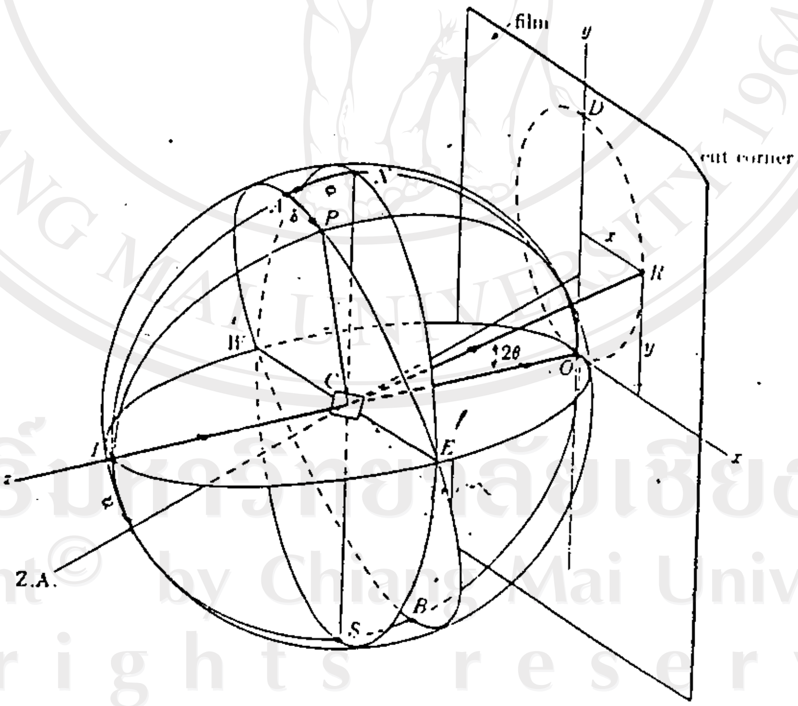
$$\tan 2\theta = r/D \qquad (2.5)$$

เช่นเดียวกับ back reflection เพื่อแสดงให้เห็น orientation ของผลึก จุดที่เกิดบนฟิล์มเกิดจากระนาบต่าง ๆ ของแต่ละ Zone ในผลึก จุดที่เกิดจากระนาบของ Zone จะเรียงตัวเป็นเส้นโค้งแบบใดแบบหนึ่งของภาคตัดกรวย ส่วนโค้งจะเป็นวงรีอย่างสมบูรณ์ แบบเมื่อมุมระหว่าง Zone axis กับรังสีทะลุผ่าน (ϕ) เป็นมุมเล็ก ๆ ทั้งนี้เพราะว่า ขนาดของฟิล์มมีจำกัด ถ้ามุม ϕ เป็นมุม 45 องศา จะได้รูปพาลาโบลาและถ้า ϕ เท่ากับ 90 องศา จะได้รูปเส้นตรงดังในรูป 2.20

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved



รูปที่ 2.20 แสดงภาคตัดขวางของกรวย diffraction beam ซึ่งตัดฟิล์ม[2] ของ Transmission, C = ผลึก, F = ฟิล์ม, Z.A. = Zone axis



รูปที่ 2.21 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างเส้นตั้งฉากระนาบกับจุดต่าง ๆ บนฟิล์ม transmission[2]

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright © by Chiang Mai University
All rights reserved

จากรูป 2.21 แสดงถึงมุมต่าง ๆ ที่เกี่ยวข้องกับวิธีการ transmission ของ Laue สามารถนำมาเขียนเป็นทรงกลมอ้างอิง จะอยู่รอบ ๆ ผลึกที่ C รังสีตกกระทบผ่านเข้าทรงกลมที่ I และทะลุผ่านออกทรงกลมที่ O (ฟิล์มที่ใช้ทดลองจะตัดมุมขวาออก เพื่อจะได้ทราบว่าด้านไหนหันไปทางรังสีเอกซ์) ถ้ารังสีสะท้อนจากระนาบแลททิสกระทบฟิล์มที่ R และเส้นตั้งฉากตัดทรงกลมที่ P

พิจารณาการเลี้ยวเบนรังสีของระนาบของ Zone ที่มีแกนขนานกับระนาบ yz และทำมุม O กับรังสีตกกระทบหรือรังสีทะลุผ่าน ถ้ามุมระนาบใดระนาบหนึ่งของ Zone นี้รอบแกนเริ่มจาก A ไป P โดยผ่านวงกลมใหญ่ PEBW คือ มันจะผ่านทุกระนาบใน Zone ขณะที่มุมระนาบรอบ Zone axis นี้ จุดที่เกิดบนฟิล์มจาก D ไป R ไป O ไป D เป็นรูปวงรี DROD Zone อื่น ๆ นอกจากนี้สามารถเกิดภาพแบบเดียวกัน แต่ค่า ϕ และ δ ต่างกันออกไป

ϕ คือ มุมรังสีทะลุผ่านกับ Zone axis

δ คือ พิกัดของมุมของ pole ของระนาบนั้น

D คือ ระยะห่างระหว่างผลึกกับฟิล์ม

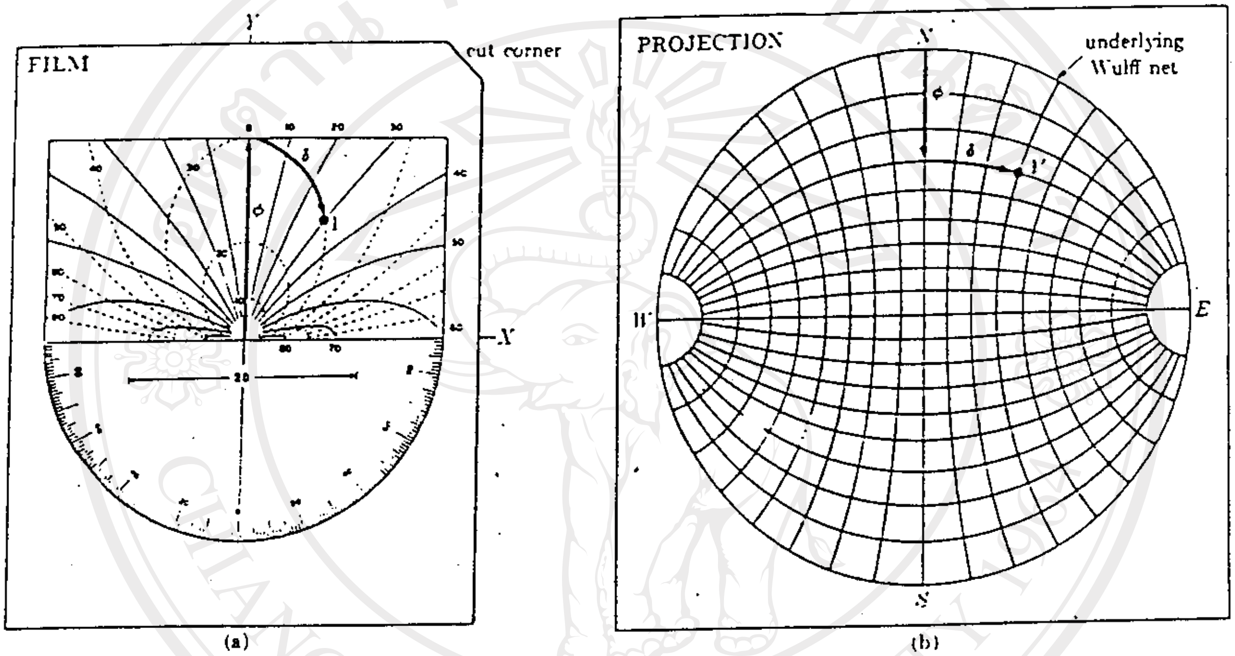
ค่า x,y ของจุด R บนฟิล์มสามารถหา orientation ของระนาบที่สอดคล้องกับจุดเหล่านี้ได้ โดยใช้ Leonhardt Chart ดังรูป 2.22 (a)

Chart นี้คล้ายคลึงกับ Gerninger chart ที่ใช้ศึกษา back reflection ประกอบด้วย ตาข่ายที่เกิดจากเส้น 2 ชุด คือ เส้นค่า ϕ คงที่ซึ่งสอดคล้องกับเส้นแวงของ Wulff net และเส้นของค่า δ คงที่ซึ่งสอดคล้องกับเส้นรุ้งของ Wulff net

Pole ของระนาบจะทำให้เกิดจุดเนื่องจากการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ ซึ่งสามารถนำมาเขียนลงบน stereographic projection โดย projection plane สัมผัสกับทรงกลมที่ I และ projection จากจุด O นั้นคือ เราอ่านฟิล์มทางด้านที่เข้าหาผลึก ดังรูป 2.22

จาก Pole ที่เขียนแล้วนำมา index หา indices ของระนาบต่าง ๆ ที่สอดคล้องกับ pole นั้น โดยให้ Wulff net วัดมุมระหว่าง pole แล้วเทียบมุมกับมุมที่ได้จากการคำนวณของมุมระหว่างระนาบ

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved



รูปที่ 2.22 แสดงการใช้ Leonhardt chart สำหรับเขียน Pole ของระนาบ stereographic projection pole 1′ ในรูป (b) เกิดจาก pole ของระนาบที่ทำให้เกิดจุดบนฟิล์มในรูป (a)

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved