

## บทที่ 4

### การวิเคราะห์ข้อมูลและผลการทดลอง

ขั้นตอนการวิเคราะห์ข้อมูลประกอบด้วย การวิเคราะห์สเปกตรัม เพื่อหาความเข้ม (พื้นที่  
พีค) ของรังสีเอกซ์เรืองแสงและความเข้มรังสีกระเจิง การทำ system calibration และ  
การคำนวณค่าความเข้มชั้นของธาตุในสารตัวอย่าง

#### 4.1 การวิเคราะห์สเปกตรัม

การวิเคราะห์สเปกตรัมเริ่มต้นด้วย การสอบเทียบพลังงาน (Energy Calibration) โดย  
อาศัยสเปกตรัมจากสารมาตรฐานที่มีธาตุ Ti, Fe, Zn และ Zr ผสมอยู่ ซึ่งการวิเคราะห์ขั้น  
ตอนนี้จะใช้โปรแกรม AXIL\* ช่วยวิเคราะห์และผลการวิเคราะห์ที่ได้ (zero, gain, noise และ  
fano factor) จะถูกนำไปใช้เป็นข้อมูลในโปรแกรมที่จะวิเคราะห์สเปกตรัมอื่นต่อไป

เนื่องจากส่วนของสเปกตรัมที่เป็นรังสีเอกซ์เรืองแสงพลังงานเฉพาะตัวของธาตุมีรูปร่างแตกต่าง  
จากส่วนของสเปกตรัมที่เป็นรังสีกระเจิง (แบบโคฮีเรนต์และแบบอินโคฮีเรนต์) ดังนั้นเพื่อ  
ความสะดวกในการเขียนโปรแกรมการวิเคราะห์สเปกตรัม จึงได้แยกการวิเคราะห์ออกเป็น 2  
ส่วน กล่าวคือ

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่

Copyright © by Chiang Mai University

All rights reserved

\* ได้รับจาก International Atomic Energy Agency (IAEA)

#### 4.1.1 ความเข้มรังสีเอกซ์เรืองแสงเฉพาะตัว

โปรแกรมที่ใช้สำหรับการวิเคราะห์สเปกตรัมรังสีเอกซ์เรืองแสงเส้นเฉพาะตัว มีชื่อเรียก ว่า FIT\* เป็นโปรแกรมที่เขียนในภาษาฟอร์แทรน ขบวนการ non-linear least square fitting โดยกำหนดให้รังสีเอกซ์เรืองแสงเฉพาะตัวมีรูปร่างผิดเป็นการกระจายแบบ Gaussian (Gaussian distribution) และมี background เป็นลักษณะ polynomial ดังสมการ

$$Y_{\text{fit}} = \sum_{i=1}^N A_i e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{x - \bar{x}_i}{\sigma_i} \right)^2} + \sum_{i=1}^3 B_i x^{i-1} \quad (19)$$

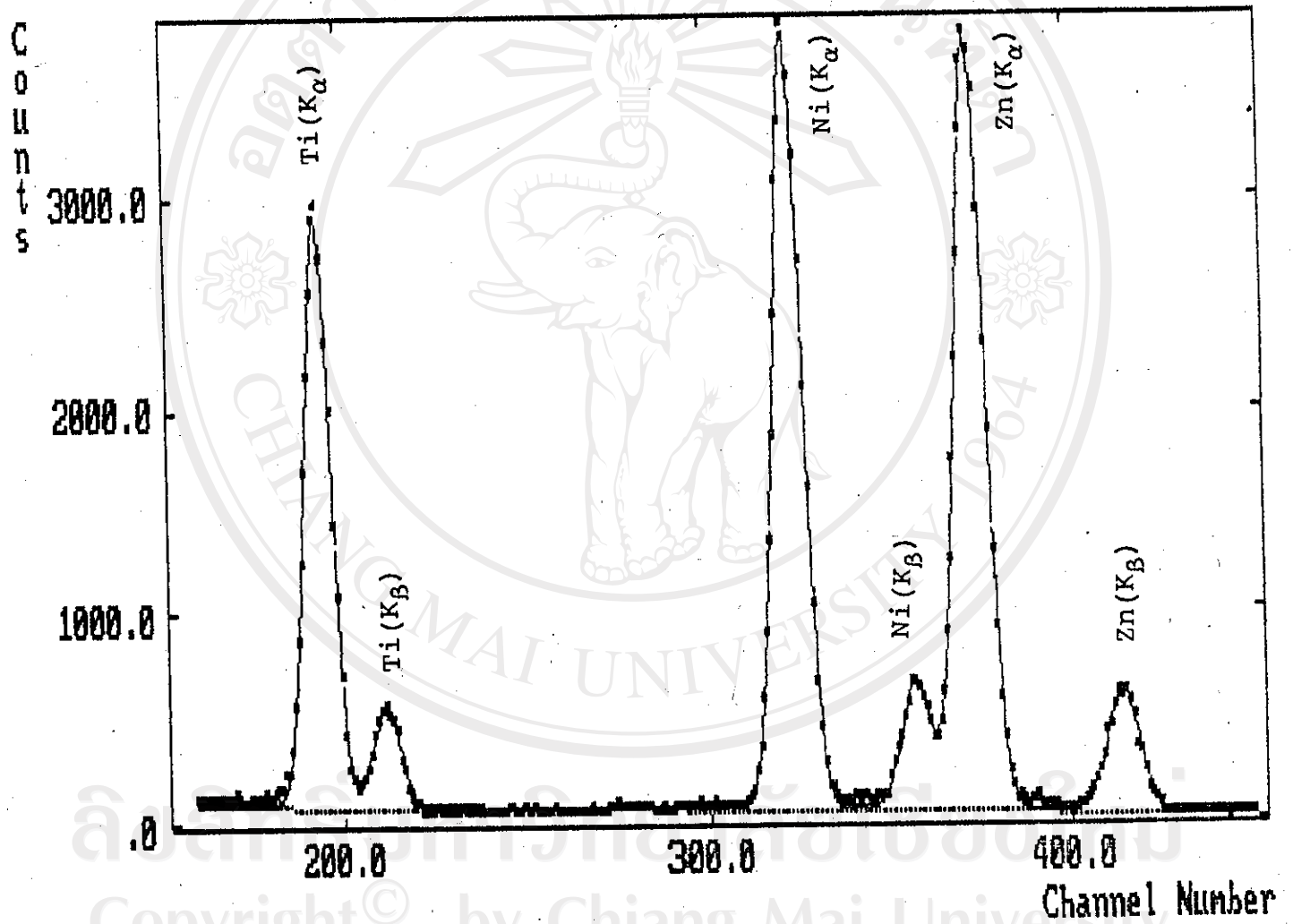
เมื่อ

- N คือ จำนวนข้อมูล  
 $A_i$  คือ อัมพลิจูด  
 $\sigma_i$  คือ ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน  
 $= \left( \frac{\sum_i |x - x_i|^2}{N-1} \right)^{1/2}$   
 $B_i$  คือ ค่าสัมประสิทธิ์

สำหรับตัวอย่างการฟิตสเปกตรัมรังสีเอกซ์เรืองแสงเฉพาะตัวด้วยสมการ (19) แสดงในรูปที่ 4.1

Copyright © by Chiang Mai University  
 All rights reserved

\* เขียนโดยกลุ่มวิจัยฟิสิกส์นิวเคลียร์ ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่



รูปที่ 4.1 ตัวอย่างแสดงการฟิตสเปคตรัมของรังสีเอกซ์เรืองแสงเฉพาะตัว  
กรณีเม็ดผสมของธาตุ Ti+Ni+Zn

#### 4.1.2 ความเข้มรังสีกระเจิง

โปรแกรมที่ใช้สำหรับการวิเคราะห์ความเข้มรังสีกระเจิง คือ SCAT\* อาศัยหลักการ non-linear least square fitting เช่นเดียวกับโปรแกรม FIT โดยจะกำหนดให้รังสีกระเจิงโคฮีเรนต์ที่มีรูปร่างผิดเป็นแบบ Gaussian distribution เหมือนรังสีเอกซ์เรืองแสงเฉพาะตัว ส่วนรังสีกระเจิงอินโคฮีเรนต์นั้น มีการกระจายเป็นแบบ semi-Gaussian และ semi-Lorentzian distribution สำหรับ background ยังคงมีลักษณะเป็น polynomial ดังสมการ

$$\begin{aligned}
 Y_{\text{fit}} = & \sum_{i=1}^2 A_i e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{x - \bar{x}_i}{\sigma_i} \right)^2} + \sum_{i=1}^2 \delta_i G_i e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{x - \bar{x}'_i}{\sigma'_i} \right)^2} \\
 & + \sum_{i=1}^2 \delta_2 L_i \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \left( \frac{x - \bar{x}'_i}{\sigma'_i} \right)^2} + \sum_{i=1}^3 B_i x^{i-1} \quad (20)
 \end{aligned}$$

โดยที่เทอมแรกคือพีคของรังสีกระเจิงโคฮีเรนต์ซึ่งเป็น gaussian เทอมที่สองเป็น half gaussian เทอมที่สามเป็น half Lorentzian และเทอมที่สี่เป็น polynomial background ส่วนค่า  $\delta_1$  และ  $\delta_2$  นั้นมีค่าดังนี้

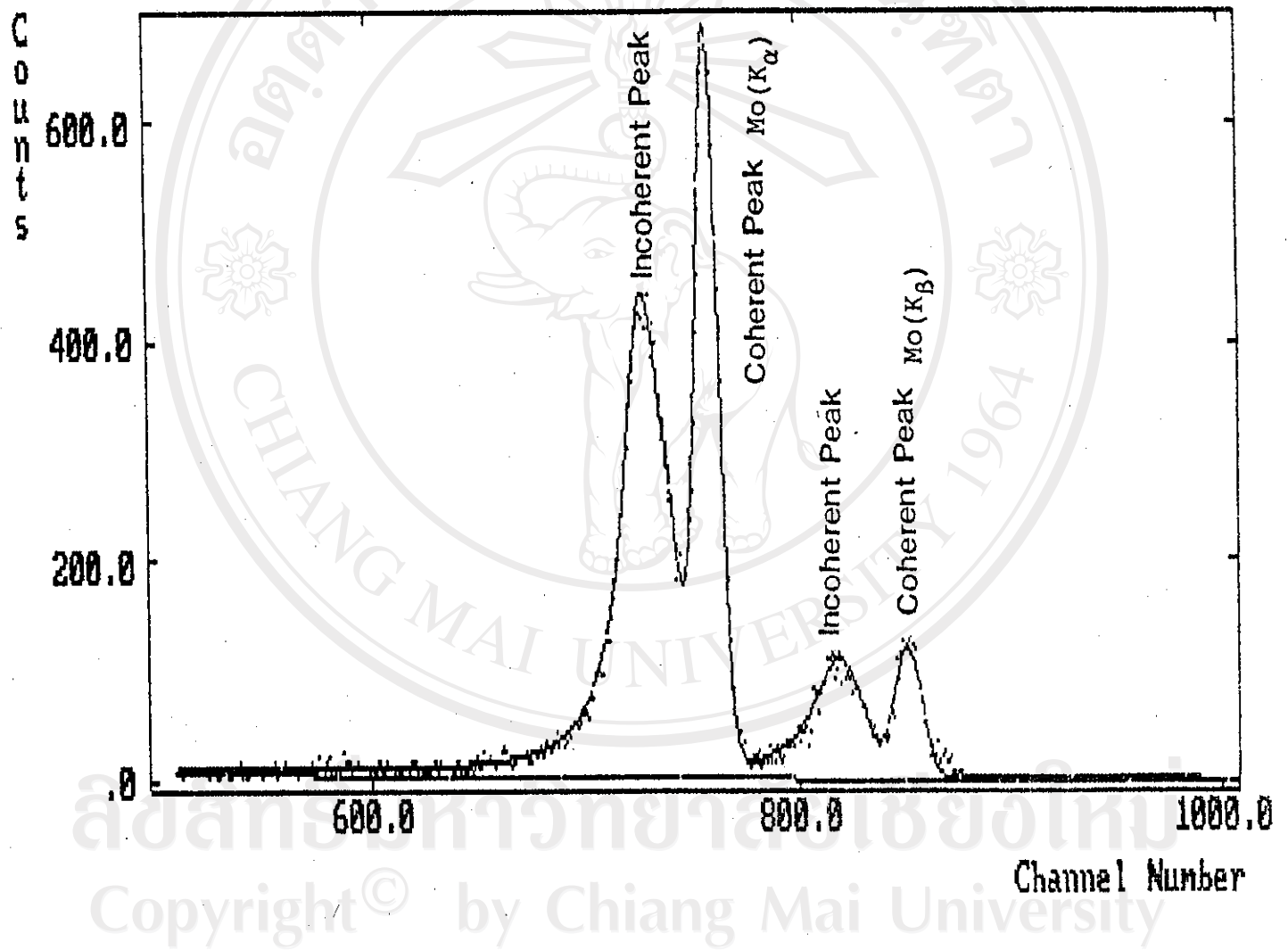
$$\begin{aligned}
 \delta_1 &= 1 && ; x > \bar{x}'_i \\
 &= 0 && ; x < \bar{x}'_i \\
 \delta_2 &= 0 && ; x > \bar{x}'_i \\
 &= 1 && ; x < \bar{x}'_i
 \end{aligned}$$

\* เขียนโดยกลุ่มวิจัยฟิสิกส์นิวเคลียร์ ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่

สำหรับตัวอย่างการฟิตสเปคตรัมรังสีกระเจิงแบบโคฮีเรนต์และแบบอินโคฮีเรนต์ ตามสมการ(20) แสดงดังรูปที่ 4.2

ตารางที่ 4.1 และ 4.2 แสดงผลการฟิตสเปคตรัมรังสีเอกซ์เรืองแสงพลังงานเฉพาะตัวรังสีกระเจิงแบบโคฮีเรนต์และแบบอินโคฮีเรนต์ของสารมาตรฐาน และสารตัวอย่างที่จะทำการวิเคราะห์ความเข้มข้นธาตุ ตามลำดับ รูปที่ 4.3 และ 4.4 เป็นตัวอย่างสเปคตรัมของสารตัวอย่างเม็ดผสม  $\text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  และ  $\text{CuO} + \text{MnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$  ซึ่งใช้เป็น unknown เพื่อการวิเคราะห์ ตามลำดับ

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่  
Copyright© by Chiang Mai University  
All rights reserved



รูปที่ 4.2 ตัวอย่างแสดงการพิสเปคตรัมรังสีกระเจิงแบบโคฮีเรนต์และแบบอินโคฮีเรนต์

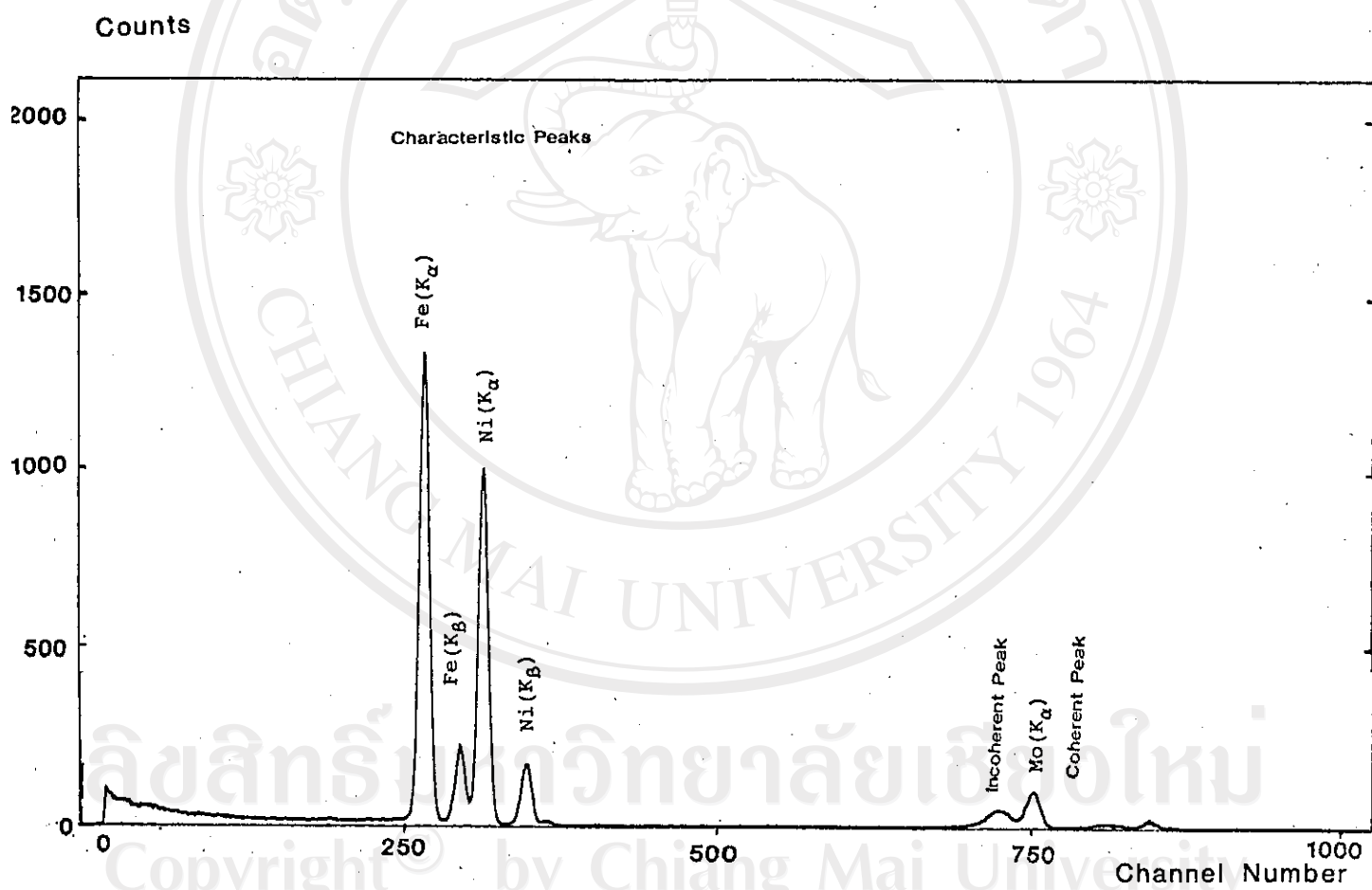
ตารางที่ 4.1 ตารางแสดงความเข้มรังสีที่ได้จากการฟิตสเปคตรัมด้วย non-linear least square fitting ของสารมาตรฐาน (เวลา 200 วินาที)

สารมาตรฐาน	ธาตุ	ความเข้มรังสีเอกซ์ $K_{\alpha}$ (Counts)	ความเข้มรังสีกระเจิง (Counts)	
			โคฮีเรนท์	อินโคฮีเรนท์
$K_2SO_4$	K	1636	9985	5565
$Ca_3(PO_4)_2$	C	3252	9180	9590
$CaCO_3$	Ca	6330	9049	10252
Ti-plate	Ti	348737	6737	4852
$KCr(SO_4)_2$	Cr	9992	8738	11399
$MnSO_4 \cdot H_2O$	Mn	42205	6903	6531
$Fe_2O_3$	Fe	128647	5441	3095
$FeSO_4(NH_4)SO_4 \cdot 6H_2O$	Fe	38582	7749	11651
$Fe_2(SO_4)_3(NH_4)_2$	Fe	41070	6873	8199
$CoSO_4 \cdot 7H_2O$	Co	81552	6465	7765
$NiSO_4 \cdot 6H_2O$	Ni	116963	6060	6928
CuCl	Cu	172119	4542	1649
$CuSO_4 \cdot 5H_2O$	Cu	162437	5220	6457
ZnO	Zn	329175	3430	6035

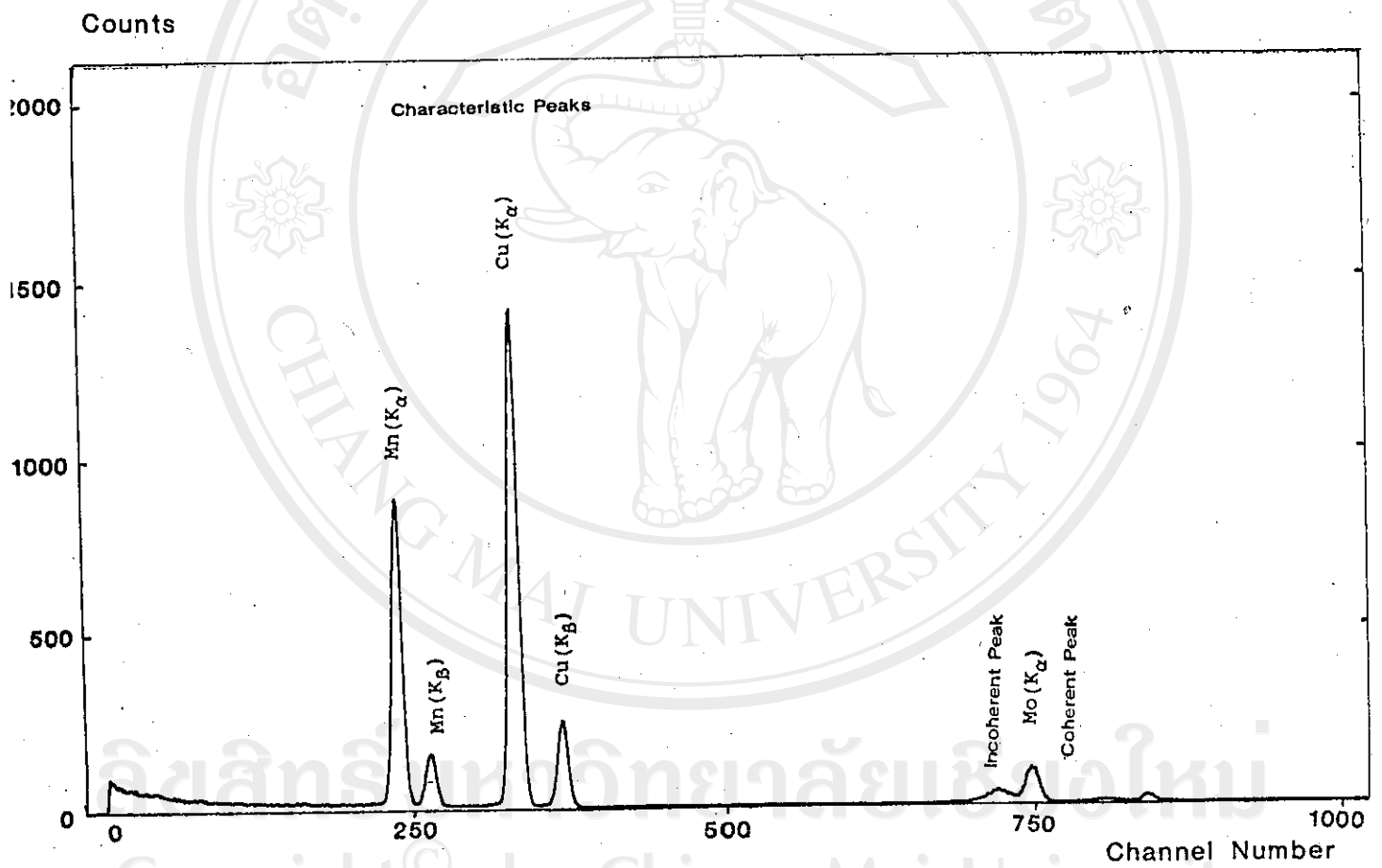
ตารางที่ 4.2 ตารางแสดงความเข้มรังสีที่ได้จากการฟิตสเปคตรัมด้วย non-linear least square fitting ของสารตัวอย่าง(เวลา 200 วินาที)

สารตัวอย่าง	เม็ดที่	ธาตุ	ความเข้มรังสีเอกซ์ $K_{\alpha}$ (counts)	ความเข้มรังสีกระเจิง(counts)	
				โคฮีเรนท์	อินโคฮีเรนท์
Ni-plate	-	Ni	198931	-	-
$Fe_2O_3 + NiSO_4 \cdot 6H_2O$	1	Fe	88867	10971	11757
		Ni	76205		
	2	Fe	95765	10708	11740
		Ni	74542		
	3	Fe	101559	10410	11041
		Ni	60754		
$CuO + MnSO_4 \cdot H_2O$	4	Cu	100894	10538	9308
		Mn	62416		
	5	Cu	107922	10375	8991
		Mn	62577		
	6	Cu	111060	9965	9463
		Mn	57231		





รูปที่ 4.3 แสดงสเปกตรัมของสารตัวอย่างเม็ดผสม  $\text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$   
พลังงานรังสีเอกซ์ตกกระทบเท่ากับ 17.44 keV



รูปที่ 4.4 แสดงสเปกตรัมของสารตัวอย่างเม็ดผสม  $\text{CuO} + \text{MnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$   
พลังงานรังสีเอกซ์ตกกระทบเท่ากับ 17.44 keV

#### 4.2 System Calibration

สูตรพื้นฐานจาก fundamental parameter theory ที่นำมาใช้ในการวิเคราะห์คือ

$$I_i = Q_i \cdot \frac{C_i}{\mu_s^*(E_i)} \quad (21.1)$$

$$I_{coh} = Q_{coh} \cdot \frac{\mu_s^{coh}}{\mu_s^*(E_{coh})} \quad (21.2)$$

$$I_{inc} = Q_{inc} \cdot \frac{\mu_s^{inc}}{\mu_s^*(E_{inc})} \quad (21.3)$$

$Q_i$  เป็นค่าคงที่ขึ้นกับชุดการทดลอง ความเข้มรังสีเอกซ์ตกกระทบและสมบัติเฉพาะตัวของธาตุ สามารถหาได้จากการทดลองด้วยการตรวจวัดความเข้มรังสีเอกซ์พลังงานเฉพาะตัวของธาตุของสารตัวอย่างมาตรฐานที่ทราบองค์ประกอบ

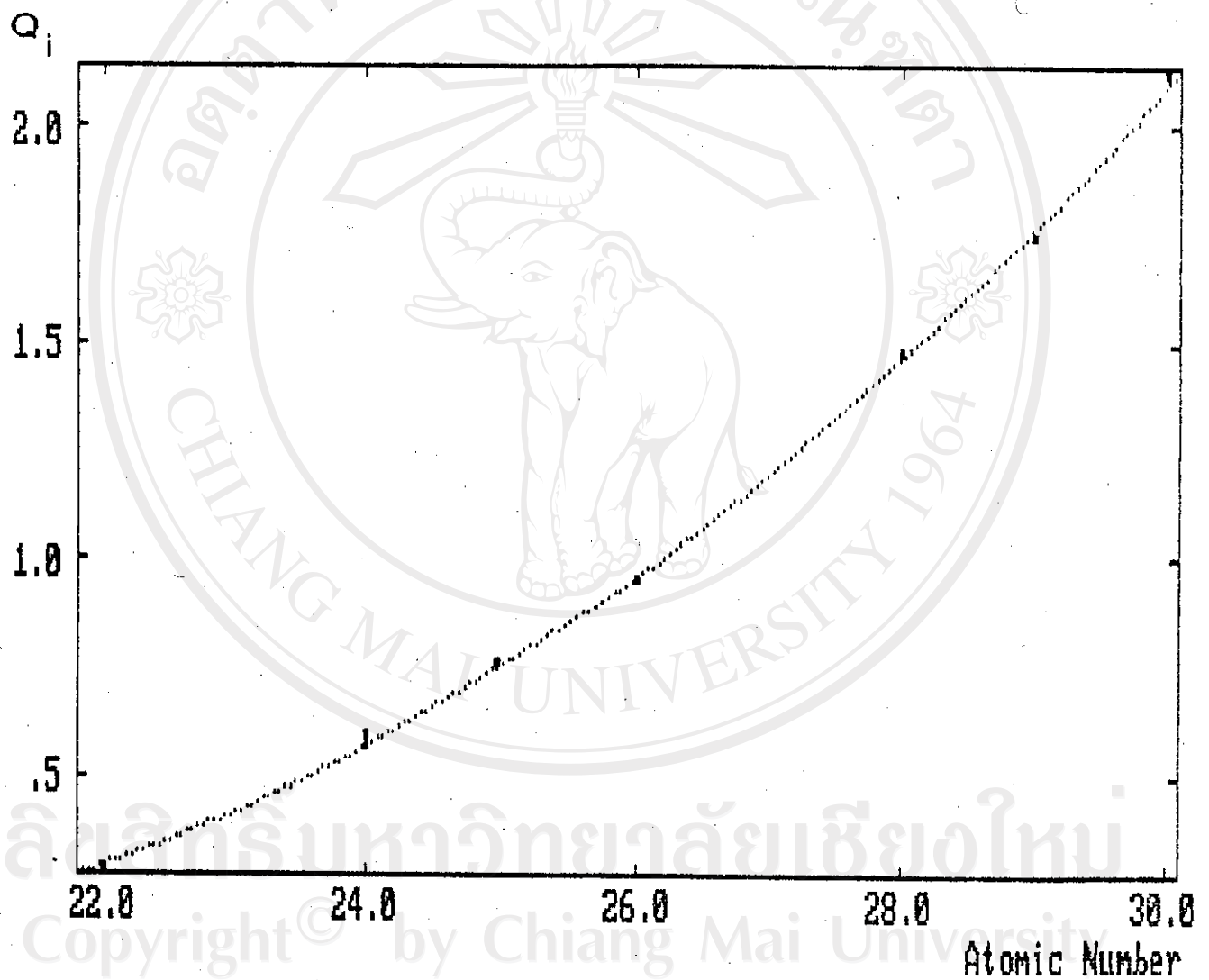
กล่าวคือ สมการ(21.1) จะเขียนได้ว่า

$$Q_i = I_i \cdot \frac{\mu_s^*(E_i)}{C_i} \quad (22.1)$$

สมการ(22.1) เป็นสมการที่ใช้สำหรับ system calibration โดยอาศัยการวัดความสัมพันธ์ระหว่าง  $Q_i$  กับเลขอะตอมของธาตุของสารตัวอย่างมาตรฐานเพื่อใช้เป็นข้อมูลพื้นฐานการวิเคราะห์ความเข้มข้นธาตุในสารตัวอย่าง แต่ทั้งนี้ เลขอะตอมของธาตุของสารตัวอย่างมาตรฐานจะต้องครอบคลุมเลขอะตอมของธาตุในสารตัวอย่างที่จะทำการวิเคราะห์

ผลการวัด  $Q_i$ 's ของธาตุของสารตัวอย่างมาตรฐานจากตารางที่ 4.1 ด้วยสมการ polynomial แสดงดังรูปที่ 4.6

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่  
Copyright© by Chiang Mai University  
All rights reserved



รูปที่ 4.6 แสดงการพืดความสัมพันธ์ระหว่าง  $Q_i$  กับเลขอะตอมของสารมาตรฐาน (Z)

ทำนองเดียวกัน  $Q_{coh}$  และ  $Q_{inc}$  เป็นค่าคงที่ขึ้นกับชุดการทดลองและความเข้มรังสีเอกซ์ตกกระทบของรังสีกระเจิงแบบโคฮีเรนต์และแบบอินโคฮีเรนต์ตามลำดับ สามารถพิจารณาได้จากการตรวจวัดความเข้มรังสีกระเจิงจากสารตัวอย่างมาตรฐาน

นั่นคือ สมการ(21.2)และ(21.3) จะได้ว่า

$$Q_{coh} = I_{coh} \cdot \frac{\mu_s^*(E_{coh})}{\mu_s} \quad (22.2)$$

และ

$$Q_{inc} = I_{inc} \cdot \frac{\mu_s^*(E_{inc})}{\mu_s} \quad (22.3)$$

ผลการวิเคราะห์ค่าคงที่ของการกระเจิงจากสารตัวอย่างมาตรฐานของชุดทดลองดังกล่าว พบว่าที่พลังงานรังสีเอกซ์ตกกระทบเท่ากับ 17.44 keV ค่าคงที่ของการกระเจิงแบบโคฮีเรนต์  $Q_{coh}$  และแบบอินโคฮีเรนต์  $Q_{inc}$  มีค่าเท่ากับ 1.192 และ 1.448 ตามลำดับ

#### 4.3 การคำนวณความเข้มข้นของธาตุ

โปรแกรมที่ใช้ในการคำนวณความเข้มข้นของธาตุในสารตัวอย่าง มีชื่อเรียกว่า ROCK\* ซึ่งอาศัยหลักการ ความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มรังสีกับความเข้มข้นของธาตุตามสมการ (14), (15) และ (16) คือ

$$R_i = \frac{C_i}{1 + \sum_{j \neq i} \beta_{ij}(E_i) C_j}$$

$$R_{coh} = \frac{\sum_j c_j \mu_j^{coh}(E_{coh})}{\sum_j c_j \mu_j^*(E_{coh})} \quad (23)$$

$$R_{inc} = \frac{\sum_j c_j \mu_j^{inc}(E_{coh})}{\sum_j c_j \mu_j^*(E_{inc})}$$

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่  
Copyright © by Chiang Mai University  
All rights reserved

\* เขียนโดยกลุ่มวิจัยฟิสิกส์นิวเคลียร์ ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่

ขอย้ำในที่นี้ว่า การคำนวณความเข้มข้นของธาตุในสารตัวอย่างด้วยความสัมพันธ์ดังกล่าว จะเริ่มด้วยเงื่อนไข normalization ทำให้สมการประกอบด้วยตัวแปรคือความเข้มข้นของธาตุที่ ตรวจวัดความเข้มข้นรังสีเอกซ์เรื่องแสงพลังงานเฉพาะตัวได้และความเข้มข้นของ dark matrix จำนวนเท่ากับ  $n+1$  สมการ แล้วเขียนในฟอร์ม inhomogeneous linear equation เพื่อแก้ สมการหาความเข้มข้นของธาตุ ตามสมการ (17) มีความเข้มข้นรังสีเอกซ์เรื่องแสงของแผ่นโลหะ  $N_i$  สำหรับการ normalize ชุดข้อมูล

$C_{n+1}$  คือ ความเข้มข้นของ dark matrix แต่ dark matrix ประกอบด้วยธาตุตัวแทน 2 ธาตุ ที่มีสมบัติการดูดกลืนและการกระเจิงรังสีเหมือนธาตุเขาตั้งเดิม เพราะฉะนั้น ถ้าให้  $C_x$  แทนความเข้มข้นของ dark matrix ธาตุที่หนึ่งแล้ว  $1-C_x$  คือความเข้มข้นของ dark matrix ธาตุที่สอง สัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงมวล  $\mu_s^*(E_i)$  ของ dark matrix จะเขียนได้ว่า

$$\mu_s^*(E_i) = C_x \cdot \mu_1^*(E_i) + (1-C_x) \cdot \mu_2^*(E_i) \quad (24)$$

สมการ (24) จะอาศัยการแปรค่าความเข้มข้นของธาตุตัวแทน 2 ธาตุของ dark matrix แล้วคำนวณความเข้มข้นของธาตุต่างๆในสารตัวอย่าง จนกระทั่งค่าความเข้มข้นรังสีที่คำนวณ ได้สอดคล้องกับค่าความเข้มข้นรังสีที่วัดได้ โดยการพิจารณาจาก least chi-square ตามสมการ (18)

#### 4.4 ผลการทดลอง

ผลการวิเคราะห์ความเข้มข้นของธาตุในสารตัวอย่าง เปรียบเทียบกับค่าจริงที่ได้จากการ คำนวณโดยตรง แสดงดังตารางที่ 4.3



ตารางที่ 4.3 ตารางแสดงผลการวิเคราะห์ความเข้มข้นของธาตุในสารตัวอย่าง

สารตัวอย่าง	เมตท	ธาตุ	ความเข้มข้น (%)	
			ค่าจริง	ทดลอง
$\text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	1	Fe	17.70	18.87
		Ni	17.38	17.22
	2	Fe	17.60	18.45
		Ni	17.45	16.76
	3	Fe	20.66	19.92
		Ni	16.41	15.13
$\text{CuO} + \text{MnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$	4	Cu	20.20	20.06
		Mn	24.65	24.45
	5	Cu	21.11	21.25
		Mn	24.05	24.30
	6	Cu	21.78	20.95
		Mn	24.01	22.47