

บทที่ 2

ทฤษฎี

2.1 สารกึ่งตัวนำแบบเรียมไททาเนต (Semiconducting Barium Titanate) [6,11,13]

สารแบบเรียมไททาเนต (BaTiO_3) ที่ได้จากการเตรียมทางเซอร์ามิกส์จากสารตั้งต้นแบบเรียมคาร์บอเนต (BaCO_3) ผสมกับไททาเนียมออกไซด์ (TiO_2) ความบริสุทธิ์ตั้งแต่ 99% ขึ้นไป ด้วยอัตราส่วน 1:1 โมล แล้วเผาตั้งปฏิกิริยา



แบบเรียมไททาเนตที่ได้ จะมีสภาพต้านทานไฟฟ้าสูงในช่วง 10^3 ถึง 10^{12} $\Omega \cdot \text{cm}$. ซึ่งมีคุณสมบัติเป็นฉนวนไฟฟ้า (Insulation) แต่ถ้าเจือด้วยโลหะออกไซด์ เช่น Sb^{+5} , Bi^{+5} , Bi^{+3} , La^{+3} , Pr^{+3} , Zr^{+4} และ Sr^{+2} ในปริมาณที่เหมาะสม จะทำให้มีสภาพต้านทานไฟฟ้าลดลง อยู่ในช่วง 10^{-3} - 10^3 $\Omega \cdot \text{cm}$. แสดงคุณสมบัติเป็นสารกึ่งตัวนำ โดยมีค่าสภาพต้านทานไฟฟ้าเปลี่ยนแปลงตามอุณหภูมิแบบ non-linear ซึ่งสามารถอธิบายได้โดยทฤษฎีการนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำ

2.2 การนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำ (Conducting of Semiconductors) [1,6,11,13]

สารกึ่งตัวนำเป็นวัสดุที่มีโครงสร้างพื้นฐานเป็นฉนวน แต่มีช่องว่างระหว่างแถบพลังงาน (Energy gap; E_g) ประมาณ 1 eV การนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำ อธิบายได้โดยทฤษฎีแถบพลังงานของของแข็ง (Band Theory of Solids) โดยการนำไฟฟ้าในสารกึ่งตัวนำเกิดจากการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอน และโฮล และกระแสไฟฟ้าอาจเกิดจากอิเล็กตรอน หรือโฮลอย่างใดอย่างหนึ่งเป็นส่วนใหญ่ โดยการเติมสารเจือปนในเนื้อสารกึ่งตัวนำนั้น การเคลื่อนที่ของพาหะอาจเกิดได้ 2 กรณี คือ เมื่อได้รับอิทธิพลจากสนามไฟฟ้า เรียกว่า Drift current และเมื่อเกิดมี Concentration gradient ขึ้นในเนื้อวัสดุ เรียก Diffusion Current

2.2.1 การกระจายพลังงานของอิเล็กตรอนในสารกึ่งตัวนำ [1,6,9,14]

อิเล็กตรอนในเนื้อสารย่อมมีพลังงานต่าง ๆ กัน กล่าวคือ มีการกระจายพลังงาน (Energy distribution) ลักษณะการกระจายพลังงานของอิเล็กตรอนนั้น เป็นไปตามกฎที่เรียกว่า Fermi-Dirac distribution ซึ่งเขียนเป็นสูตรของฟังก์ชันได้ดังนี้ คือ

$$f(E) = \frac{1}{[1 + \exp(E - E_F)/kT]} \quad (2.1)$$

- โดยมี k เป็นค่าคงที่ของ Boltzman
- T เป็นอุณหภูมิของสารสัมพันธ์
- E_F เป็น Fermi Level มีหน่วยเป็น eV
- E เป็นระดับพลังงานใด ๆ หน่วยเป็น eV

ถ้ากรณีที่สารนั้นเป็นโลหะ คือ ไม่มี forbidden band หรือ Energy gap

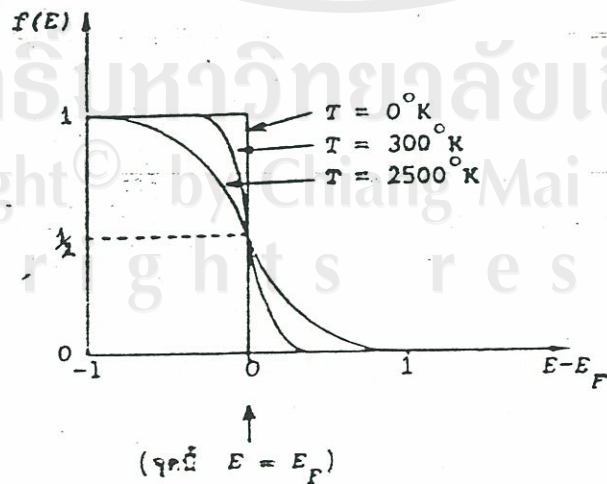
ฉะนั้น $E = E_F$ เราจะได้ว่า $f(E) = \frac{1}{2}$ ดังนั้น Fermi level คือ ระดับพลังงานที่มีความน่า

จะเป็นที่อิเล็กตรอนอยู่ในระดับพลังงานนั้น 50% ถ้าพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่าง $(E - E_F)$ กับ $f(E)$ จะพบว่า ที่ $T = 0$ องศาเคลวิน

- $E > E_F$ แล้ว $f(E) = 0$ แสดงว่าไม่มี occupied quantum state ที่เหนือกว่า E_F

- $E < E_F$ แล้ว $f(E) = 1$ แสดงว่า ทุก ๆ quantum state ที่ต่ำกว่า E_F จะถูก occupied หมด

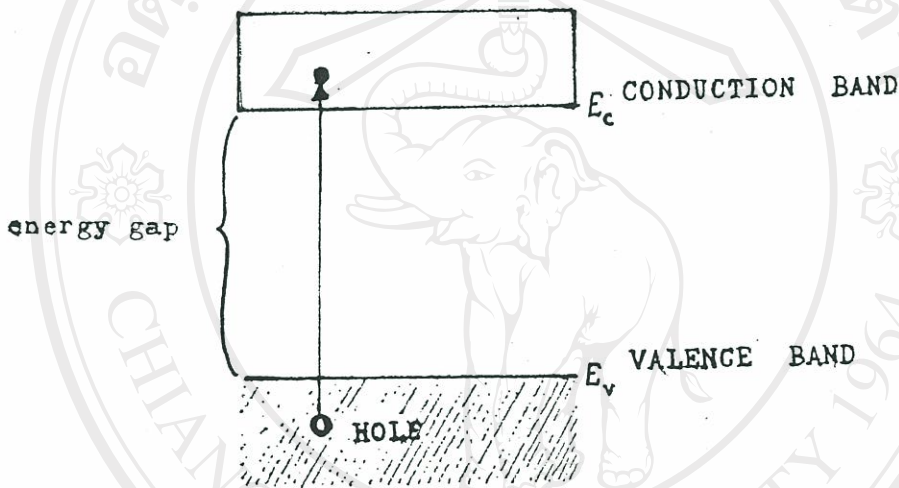
ถ้าอุณหภูมิสูงขึ้น กราฟแสดงความสัมพันธ์จะเปลี่ยนไป ดังรูปที่ 2.1



รูปที่ 2.1 แสดง Fermi - Dirac distribution

2.2.2 อิเล็กตรอนและโฮลในสารกึ่งตัวนำ^[1,2,6,9,11,13,14]

สภาพการนำไฟฟ้าของสารจะดีหรือเลวขึ้นขึ้นอยู่กับความหนาแน่นของอิเล็กตรอนอิสระ สำหรับสารกึ่งตัวนำจะมีโครงสร้างแถบพลังงานที่มีอิเล็กตรอนอยู่เต็มทุก energy state ในแถบ Valence band ส่วนใน Conduction band ถ้าอุณหภูมิสูงเท่ากับ ศูนย์องศาเคลวิน ($T=0^{\circ}\text{K}$) จะไม่มีอิเล็กตรอนอยู่เลย และจะมีช่องว่างแถบพลังงาน (Energy gap) อยู่ระหว่าง Valence band และ Conduction band ดังรูปที่ 2.2



รูปที่ 2.2 แสดงโครงสร้างแถบพลังงานของสารกึ่งตัวนำ

ที่อุณหภูมิศูนย์องศาสัมบูรณ์ ($T = 0^{\circ}\text{K}$) สารกึ่งตัวนำจะไม่นำไฟฟ้ามีสมบัติเป็นฉนวนไฟฟ้าโดยสมบูรณ์ แต่ถ้าอุณหภูมิมากกว่าศูนย์องศาสัมบูรณ์ ($T > 0^{\circ}\text{K}$) จะถูกกระตุ้นข้ามช่องว่างแถบพลังงาน (Energy gap) ขึ้นไปอยู่ในระดับพลังงาน Conduction band โดยสามารถคำนวณหาจำนวนความหนาแน่นของอิเล็กตรอน (n) ที่ขึ้นไปอยู่ใน Conduction band ได้โดยอาศัยหลักทางสถิติ ดังนี้

$$n = \int_{E_c}^{\infty} N(E) f(E) dE \quad (2.2)$$

เมื่อ $f(E)$ คือ Probability of occupy มีค่าตามสมการ (2.1) และ $N(E)$ เป็นจำนวนสถานะของอิเล็กตรอน (Density of state) ที่มีระดับพลังงาน E คือ

$$N(E) = \left[\frac{1}{2\pi^2} \right] \left[\frac{2m_e}{\hbar^2} \right]^{3/2} E^{1/2} \quad (2.3)$$

เมื่อ m_e เป็น effective mass ของอิเล็กตรอน (คือ มวลของอิเล็กตรอนที่เคลื่อนที่ไปภายใต้สนามไฟฟ้า)

อิเล็กตรอนที่นำไฟฟ้าได้ต้องเป็นอิเล็กตรอนอิสระที่มีพลังงาน E ซึ่งมีค่ามากกว่าพลังงาน E_c นั่นคือ $E - E_c > 0$ ดังนั้นจำนวนสถานะของอิเล็กตรอนใน Conduction band ที่มีพลังงาน $E - E_c$ กำหนดได้โดย

$$N(E) = \left[\frac{1}{2\pi^2} \right] \left[\frac{2m_e}{\hbar^2} \right]^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \quad (2.4)$$

ซึ่งระดับ E_c เป็นระดับพลังงานต่ำสุดของ Conduction band

เพราะฉะนั้นจากสมการ (2.2) จำนวนความหนาแน่นของอิเล็กตรอนทั้งหมด (n) ใน Conduction band คือ

$$n = \int_{E_c}^{\infty} \left[\frac{1}{2\pi^2} \right] \left[\frac{2m_e}{\hbar^2} \right]^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \frac{1}{1 + \exp(E - E_F/kT)} dE \quad (2.5)$$

ถ้า $\exp((E - E_F)/kT) \gg 1$ สามารถตัดเทอม $+1$ ออกไปได้ ซึ่งหมายความว่า อิเล็กตรอนที่อยู่ในชั้น Conduction band ทั้งหมดที่อุณหภูมิสูง ๆ สมการ (2.5) เขียนใหม่ได้เป็น

$$n = \left[\frac{1}{2\pi^2} \right] \left[\frac{2m_e}{\hbar^2} \right]^{3/2} \exp(E_F/kT) \int_{E_c}^{\infty} (E - E_c)^{1/2} \exp(-E/kT) dE \quad (2.6)$$

$$\text{จาก } \int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-x} dx = \frac{\pi^{1/2}}{2}$$

ดังนั้นจะได้

$$n = \left(\frac{1}{4}\right) \left[\frac{2kTm_e}{\pi\hbar^2}\right]^{3/2} \exp\left[\frac{(E_F - E_c)}{kT}\right] \quad (2.7)$$

จากสมการ (2.7) จะเห็นว่าเมื่อ $T > 0^\circ\text{K}$ จะมีอิเล็กตรอนปรากฏอยู่ใน Conduction band และจะมีมากขึ้น เมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น ในขณะที่อิเล็กตรอนถูกกระตุ้นจาก valence band ขึ้นไปอยู่ใน Conduction band จะทำให้เกิด energy state ว่างขึ้นใน valence band ที่เรียกว่า โฮล (hole) จำนวนเท่ากับจำนวนอิเล็กตรอนที่ขึ้นไปอยู่ใน Conduction band

สำหรับจำนวนความหนาแน่นของโฮล (p) ทั้งหมดใน valence band หาได้โดยหลักทางสถิติ เช่นเดียวกับของอิเล็กตรอน โดย

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} N_p(E) [1 - f(E)] dE \quad (2.8)$$

ซึ่งสำหรับโฮลแล้ว

$$N_p(E) = \left[\frac{1}{2\pi^2}\right] \left[\frac{2m_h}{\hbar^2}\right]^{3/2} (E_v - E)^{1/2} \quad (2.9)$$

ดังนั้นจะได้
$$p = \left(\frac{1}{4}\right) \left[\frac{2kTm_h}{\pi\hbar^2}\right]^{3/2} \exp\left[\frac{E_v - E_F}{kT}\right] \quad (2.10)$$

เมื่อ m_h คือ effective mass ของโฮล

และ E_v คือ ระดับพลังงานสูงสุดของ valence band

สำหรับสาร Intrinsic Semiconductor แล้ว $n = p$
จากสมการ (2.7) และ (2.10) จะได้

$$E_F = \left(\frac{3}{4}\right)kT \ln\left(\frac{m_h}{m_e}\right) + \left(\frac{E_c + E_v}{2}\right) \quad (2.11)$$

เมื่อนำสมการ (2.11) แทนลงในสมการ (2.7) จะได้

$$n = p = 2 \left[\frac{kT}{2\pi\hbar^2} \right]^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \quad (2.12)$$

E_g เป็น Energy gap มีค่าเท่ากับ $E_c - E_v$

จากสมการ (2.12) เมื่อ $T > 0^\circ \text{K}$ จะทำให้เกิดประจุที่เป็นพาหะนำไฟฟ้าขึ้นในสารกึ่งตัวนำ (อิเล็กตรอนใน Conduction band และ โฮลใน valence band)

2.2.3 ความสัมพันธ์ของสภาพต้านทานไฟฟ้า (resistivity ; ρ) กับอุณหภูมิ (T) ของสารกึ่งตัวนำ [1, 2, 9, 11, 14]

สารสภาพนำไฟฟ้า (Conductivity ; σ) ของสารกึ่งตัวนำ กำหนดโดย

$$\sigma = e(n\mu_e + p\mu_h) \quad (2.13)$$

เมื่อ e คือ ประจุไฟฟ้าของอิเล็กตรอน
 μ_e คือ mobility ของอิเล็กตรอน
 μ_h คือ mobility ของโฮล

ถ้า $n = p$ แล้วนำสมการ (2.12) แทนลงในสมการ (2.13) จะได้

$$\sigma = 2e \left[\frac{kT}{2\pi\hbar^2} \right]^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} (\mu_e + \mu_h) \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \quad (2.14)$$

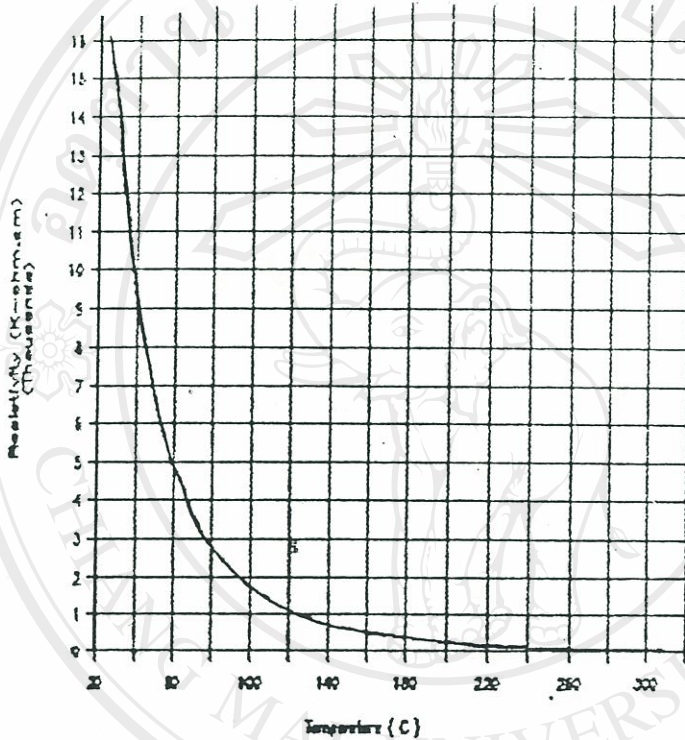
ความสัมพันธ์ของสภาพต้านทานไฟฟ้าเป็นส่วนกลับของสภาพนำไฟฟ้า ดังนั้น

$$\rho = \exp\left(\frac{E_g}{2kT}\right) \left[2e \left(\frac{kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} (\mu_e + \mu_h) \right]^{-1} \quad (2.15)$$

จากสมการ (2.15) พบว่า สภาพต้านทานไฟฟ้าจะแปรผกผันกับอุณหภูมิแบบ exponential ซึ่งปรากฏการณ์นี้เรียกว่า NTC effect (Negative Temperature Coefficient of Resistivity effect)

2.3 เทอร์มิสเตอร์ (Thermistor) [6, 13]

เทอร์มิสเตอร์ คือ สารกึ่งตัวนำที่เปลี่ยนค่าสภาพต้านทานไฟฟ้าตามอุณหภูมิ แบบ non-linear ในลักษณะสภาพต้านทานไฟฟ้าจะลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น หรือมีสัมประสิทธิ์อุณหภูมิของสภาพต้านทานไฟฟ้าเป็นลบ (Negative Temperature Coefficient of Resistivity) ดังรูปที่ 2.3



รูปที่ 2.3 แสดงลักษณะ NTC Thermistor

จากความสัมพันธ์ของสภาพต้านทานไฟฟ้า (ρ) กับอุณหภูมิ (T) มีลักษณะ nonlinear ตามสมการ (2.15) เป็นรูปที่ยู่ยกซับซ้อน เพื่อความง่ายจึงเขียนใหม่ ได้เป็น

$$\rho = \rho_0 \exp\left(\frac{B}{T}\right) \quad (2.16)$$

เมื่อ ρ_0 คือ ค่าคงที่ขึ้นกับชนิดของสาร

B คือ ค่าคงที่ขึ้นกับชนิดของสาร

ถ้านิยามค่าสัมประสิทธิ์อุณหภูมิของสภาพต้านทานไฟฟ้า (Temperature Coefficient of Resistivity) เขียนแทนด้วย สัญลักษณ์ α คือ

$$\alpha = \left(\frac{1}{\rho}\right) \left(\frac{d\rho}{dT}\right) \quad (2.17)$$

เมื่อแทนสมการ (2.16) ลงในสมการ (2.17) จะได้

$$\alpha = - \left(\frac{B}{T^2} \right) \quad (2.18)$$

ถ้า take log ฐาน e ในสมการ (2.16) จะกลายเป็น

$$\ln \rho = \ln \rho_0 + \left(\frac{B}{T} \right) \quad (2.19)$$

ดังนั้นถ้าเขียนกราฟความสัมพันธ์ระหว่าง $\ln \rho$ กับ $1/T$ จะได้กราฟเส้นตรง ซึ่งสามารถหาค่า B ได้จากความชันของกราฟ (Slope)

ส่วนค่า $\ln \rho_0$ หาได้จากจุดตัดกราฟแกน $\ln \rho$ เมื่อทราบค่า B ก็จะทำให้สามารถหาค่าสัมประสิทธิ์อุณหภูมิของสภาพต้านทานไฟฟ้าได้ จากสมการ (2.18) แต่ในทางการค้า จะนิยมใช้ค่า B มากกว่า โดยที่ B มีหน่วยเป็นองศาเคลวิน (K)

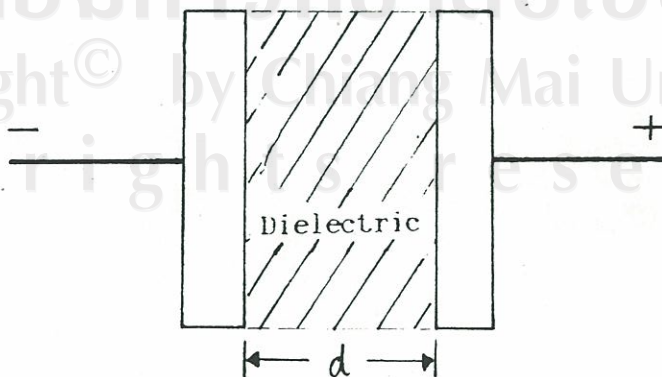
2.4 dielectric loss-factor [2. 8]

พิจารณาถึงคาปาซิเตอร์ (Capacitor) ที่คาโธดทั้งสองมีพื้นที่ A เท่ากัน วางห่างกันเป็นระยะ d ซึ่งมี dielectric กัน ดังรูปที่ 2.4 จะมีความจุไฟฟ้า (Capacitance) เป็น

$$C = \epsilon \epsilon_0 A/d \quad (2.20)$$

เมื่อ $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}$ farad/m

ϵ = dielectric constant



รูปที่ 2.4 แสดงคาปาซิเตอร์ที่มี dielectric

และ คาปาซิเตอร์มี admittance เป็น

$$Y = j\omega c \quad (2.21)$$

ถ้าให้ b เป็น susceptance จะเขียนได้เป็น

$$Y = jb \quad (2.22)$$

จากสมการ (2.21) และ (2.22) จะได้

$$b = \omega c \quad (2.23)$$

หรือ $b = \omega \epsilon \epsilon_0 A/d \quad (2.24)$

สำหรับสารไดอิเล็กตริกแล้วนั้น จะต้องมี dielectric losses โดยที่บอกคุณลักษณะได้ ตามสมการของ loss factor คือ

$$\tan \delta = \frac{g}{b} \quad (2.25)$$

เมื่อ g คือ ความนำไฟฟ้าของสารซึ่งเป็นส่วนกลับของความต้านทานไฟฟ้า (R) นั่นคือ

$$g = \frac{1}{R} \quad (2.26)$$

และ $R = \frac{\rho d}{A} \quad (2.27)$

เพราะฉะนั้นเมื่อนำสมการ (2.23) และ (2.26) แทนลงในสมการ (2.25) จะได้ loss factor เป็น

$$\tan \delta = \frac{1}{\omega RC} \quad (2.28)$$

ซึ่ง $\omega = 2\pi f \quad (2.29)$

และนำสมการ (2.20) (2.27) และ (2.29) แทนลงในสมการ (2.28) จะได้ dielectric loss factor เป็น

$$\epsilon \tan \delta = \left(\frac{1.8 \times 10^{10}}{f \rho} \right) \quad (2.30)$$

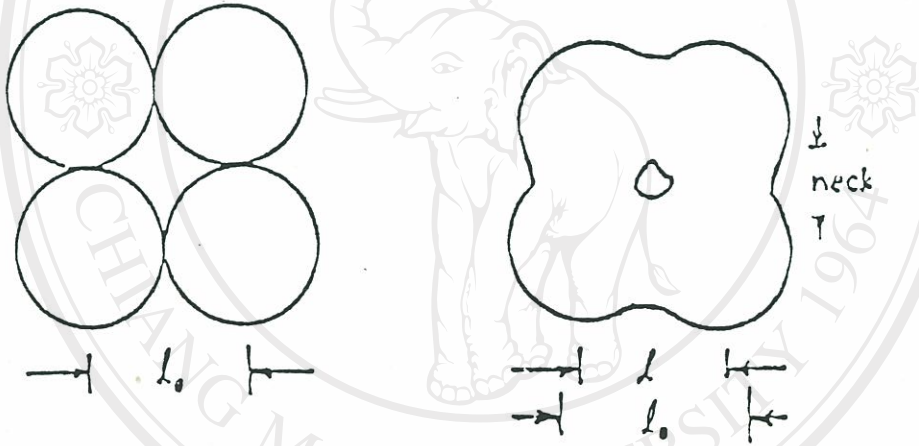
โดยที่ f คือ ความถี่มีหน่วยเป็นเฮิร์ตซ์ (Hz)

จากสมการ (2.30) แสดงให้เห็นว่า dielectric loss factor ใน AC field เป็นปฏิกิริยาผกผันกับความถี่

2.5 การเผาซินเตอร์ (Sintering)^[11]

2.5.1 Manufacturing of shaped products from metal powder

การผสมสารที่เป็นผงให้เป็นรูปร่างที่แข็งแรง (Consolidation) ต้องมีแบบพิมพ์ (block) สำหรับอัดไม่ให้ผงของสารกระจาย และเป็นการเพิ่มแรงจับตัวของอะตอม (Coherent bonds) ให้มากขึ้น แต่การอัดบางครั้งจะต้องมีขอบเขตขนาดของผง ซึ่งทำให้การอัดไม่ได้ผลสมบูรณ์นัก วิธีการเพิ่มอุณหภูมิในสารที่อัดแล้วจะทำให้สารมีการเคลื่อนที่เข้าชิดติดกัน โดยติดกันในส่วนที่เรียกว่า คอ (neck) อนุภาคที่ถูกอัดให้ชิดกันจะถูกบังคับให้ติดกันมากขึ้น ขบวนการนี้ไม่ใช่การหลอมเหลว (melting) แต่เรียกว่า Sintering



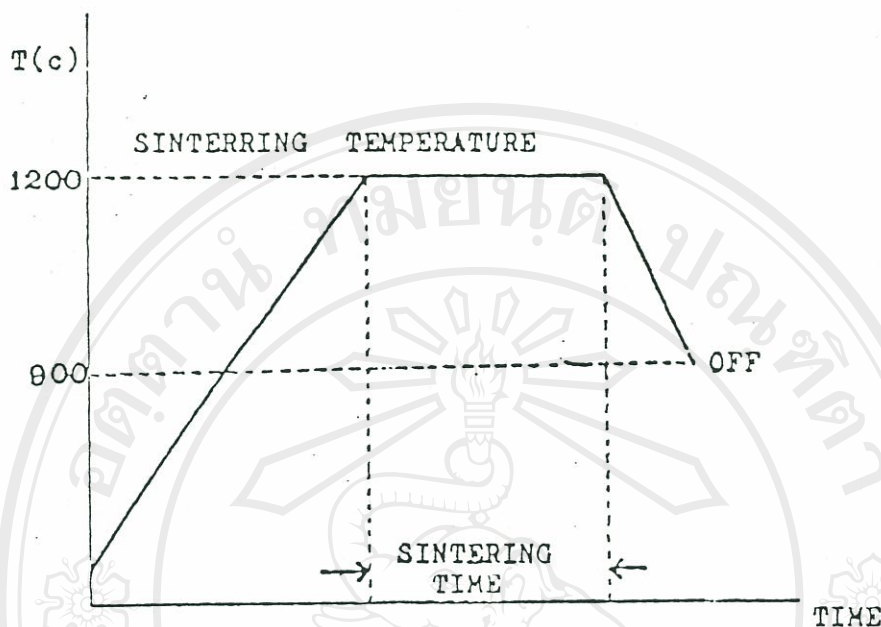
ก. ก่อนผ่านขบวนการ Sintering

ข. หลังผ่านขบวนการ Sintering

รูปที่ 2.5 แสดงการเคลื่อนที่ของอะตอมก่อนและหลังขบวนการ Sintering

2.5.2 Sintering in General

การอัดสารที่เป็นผง ไม่ว่าจะใช้วิธีใดเป็นการเพิ่มแรงจับตัวของอะตอมให้คงรูปอยู่ได้ แม้ว่าจะไม่แข็งแรงก็ตาม การอัดด้วยแรงอัดทั้งสองหน้าจะทำให้การยึดติดแน่นของผงสารมีมากขึ้น แต่จะมีขีดจำกัดถึงจุดหนึ่งเท่านั้น ซึ่งไม่อาจอัดให้แน่นต่อไปได้อีก แม้จะเพิ่มความดันมากขึ้นก็ตาม การ Sintering ต้องใช้อุณหภูมิสูง ขบวนการ Sintering เป็นขบวนการที่สำคัญคุณภาพของการ Sintering ขึ้นอยู่กับทั้งเวลาในการเผา (Sintering time) อุณหภูมิในการเผา อีกทั้งยังขึ้นอยู่กับความบริสุทธิ์ของผงสารนั้นด้วย ผงสารที่ไม่บริสุทธิ์อาจจะหลอมเหลวที่อุณหภูมิจำกัด ในขณะที่สารผงชนิดเดียวกันแต่บริสุทธิ์ไม่หลอมเหลว



รูปที่ 2.6 แสดง Sintering cycle

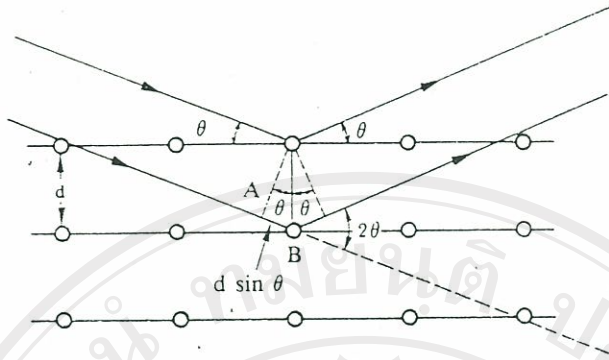
2.6 การหาโครงสร้างของผลึก (structure determination)

การวิเคราะห์โครงสร้างของผลึกสาร ส่วนมากจะนิยมใช้วิธี x-rays ซึ่งมีหลายแบบด้วยกัน เช่น x-ray diffraction, x-ray fluorescence เป็นต้น

2.6.1 การเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ (x-ray diffraction) [3, 7, 9, 12]

รังสีเอกซ์ เป็นคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่มีความยาวคลื่นตั้งแต่ $0.1-100 \text{ \AA}$ เมื่อยังรังสีเอกซ์ที่มีความยาวคลื่นใกล้เคียงกับ interplanar spacing ของผลึกเข้าสู่ผลึกสาร จะทำให้งรังสีเอกซ์เกิดการเลี้ยวเบน (diffraction) ได้ ดังนั้นถ้าเราทราบความยาวคลื่นของรังสีเอกซ์ก็สามารถคำนวณหา interplanar spacing ของผลึกสารนั้นได้ โดยอาศัยการอธิบายด้วยกฎของแบรกก์ (Bragg's law) ดังจะกล่าวต่อไปนี้

หากมีอะตอมเรียงกันอย่างเป็นระเบียบภายในผลึก เมื่อฉายรังสีเอกซ์ลงไปในผลึก จะทำให้เกิดการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ เนื่องจากการสะท้อนด้วยระนาบของอะตอมภายในผลึก ซึ่งมี interplanar spacing เท่ากับ d ดังรูปที่ 2.7



รูปที่ 2.7 การสะท้อนของรังสีเอกซ์จากระนาบผลึกที่ขนาน [9]

เมื่อรังสีเอกซ์ตกกระทบบนมุม θ กับระนาบของอะตอมก็จะเกิดการเลี้ยวเบนออกจากระนาบ เนื่องจากการสะท้อนเป็นมุม θ เท่ากัน และมีความถี่หรือความยาวคลื่นของรังสีเลี้ยวเบนค่าเดียวกับรังสีเอกซ์ที่ตกกระทบบนผลึก ซึ่งจะทำให้เกิดการแทรกสอดซึ่งกันและกัน เมื่อความแตกต่างของระยะการเดินทาง (path difference) ของรังสีเอกซ์เป็นจำนวนเต็ม เท่าของความยาวคลื่นของรังสีเอกซ์ ตามกฎของแบรกก์ (Bragg's law) จะได้ว่า

$$2d \sin\theta = n\lambda \quad (2.31)$$

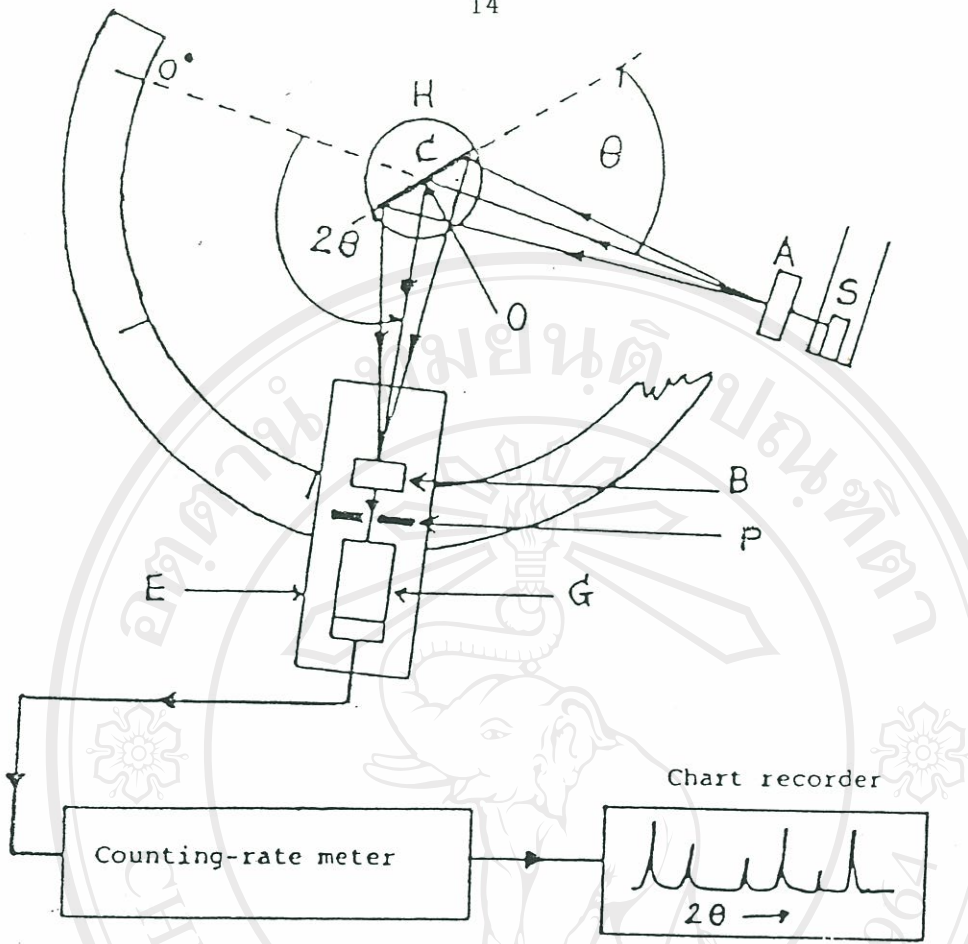
เมื่อ d คือ interplanar spacing (หรือเรียกว่า d-spacing)

θ คือ Bragg's angle

λ คือ ความยาวคลื่นของรังสีเอกซ์

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

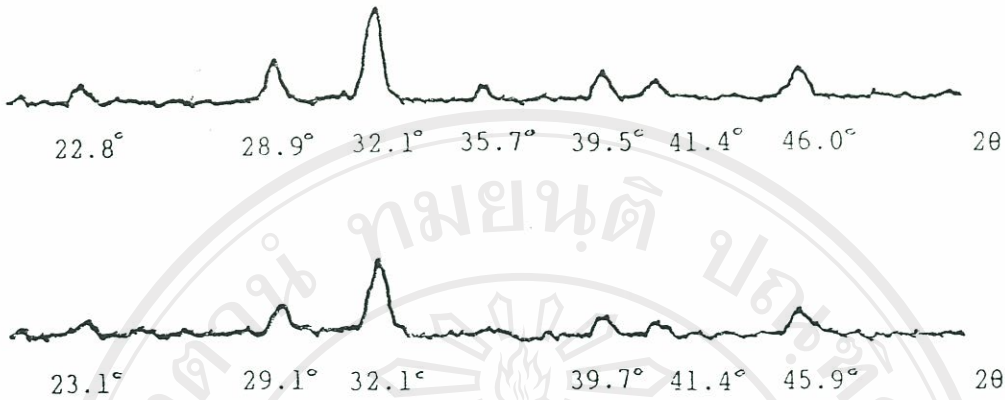
ในการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ในผลึกจะใช้เครื่องมือที่เรียกว่า "เอกซ์เรย์ดิฟแฟรคโตมิเตอร์ (x-ray Diffractometer) โดยมีส่วนประกอบต่าง ๆ ดังรูปที่ 2.8



รูปที่ 2.8 แสดงส่วนสำคัญของ เอกซ์เรย์ดิฟแฟรคโตมิเตอร์ [12]

สารตัวอย่างที่ใช้เป็นผง (powder) อัดแน่นบนแผ่นสไลด์ c ที่ถูกยึดอยู่บนฐาน H ซึ่งสามารถหมุนรอบแกน O รั้งรังสีเอกซ์จากแหล่งกำเนิด S ผ่านสลิต A มายังสารตัวอย่าง C และเลี้ยวเบนผ่านไปยังสลิต B และ P พร้อมทั้งผ่านเครื่องนับ G โดยสลิต B, P และเครื่องนับ G ตั้งอยู่บนฐาน E ซึ่งฐาน E กับฐาน H จะถูกเชื่อมโยงกันด้วยชุดเฟืองโดยที่ฐาน H หมุนรอบแกน O ไปเป็นมุม θ จะทำให้ฐาน E หมุนรอบแกน O ไปเป็นมุม 2θ

สำหรับความเข้มของรังสีเอกซ์ที่เลี้ยวเบนออกมา จะตรวจวัดได้โดยเครื่องนับสัญญาณ ซึ่งเป็นสัญญาณพัลส์ (pulse) นับเป็นหน่วยพัลส์ต่อวินาที สัญญาณนี้จะถูกเปลี่ยนให้เป็นกระแสไฟฟ้า (Steady current) และอ่านค่าโดยเคาท์ตั้งเรตมิเตอร์ (Counting rate meter) สัญญาณไฟฟ้าจะถูกส่งต่อไปยังหน่วยบันทึกผล (Chart recorder) เพื่อบันทึกออกมาเป็นพีค (peak) ของสเปกตรัม ที่ตำแหน่งมุม 2θ ของมุมแบรกก์บนกระดาดภาพของเครื่องบันทึกผล ดังรูปที่ 2.9



รูปที่ 2.9 diffraction pattern

ทำให้เราสามารถคำนวณหาค่า interplanar spacing (d-spacing) ของแต่ละระนาบที่ทำให้เกิด diffraction จากสมการของ Bragg จะได้ว่า

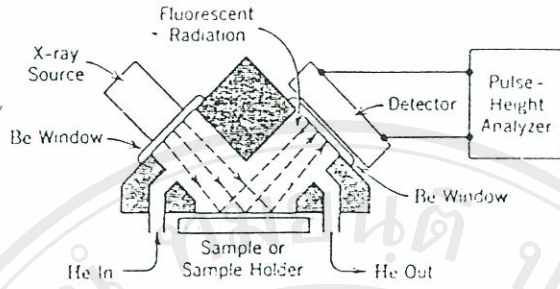
$$d = \lambda / 2d \sin \theta \quad \text{เมื่อ } n = 1 \quad (2.32)$$

แล้วนำค่า d-spacing ที่คำนวณได้ไปเปรียบเทียบกับค่า d-spacing มาตรฐานที่รายงานไว้ใน A.S.T.M. card ก็จะทราบลักษณะและรายละเอียดโครงสร้างของสารนั้น ๆ ได้ เนื่องจากว่าสารใด ๆ จะให้ diffraction pattern เหมือนเดิมเสมอ แม้แต่สารนั้นจะมีสิ่งเจือปนอื่น ๆ ผสมอยู่

2.6.2 เอกซ์เรย์ฟลูออเรสเซนซ์ (x-ray fluorescence) [5, 10]

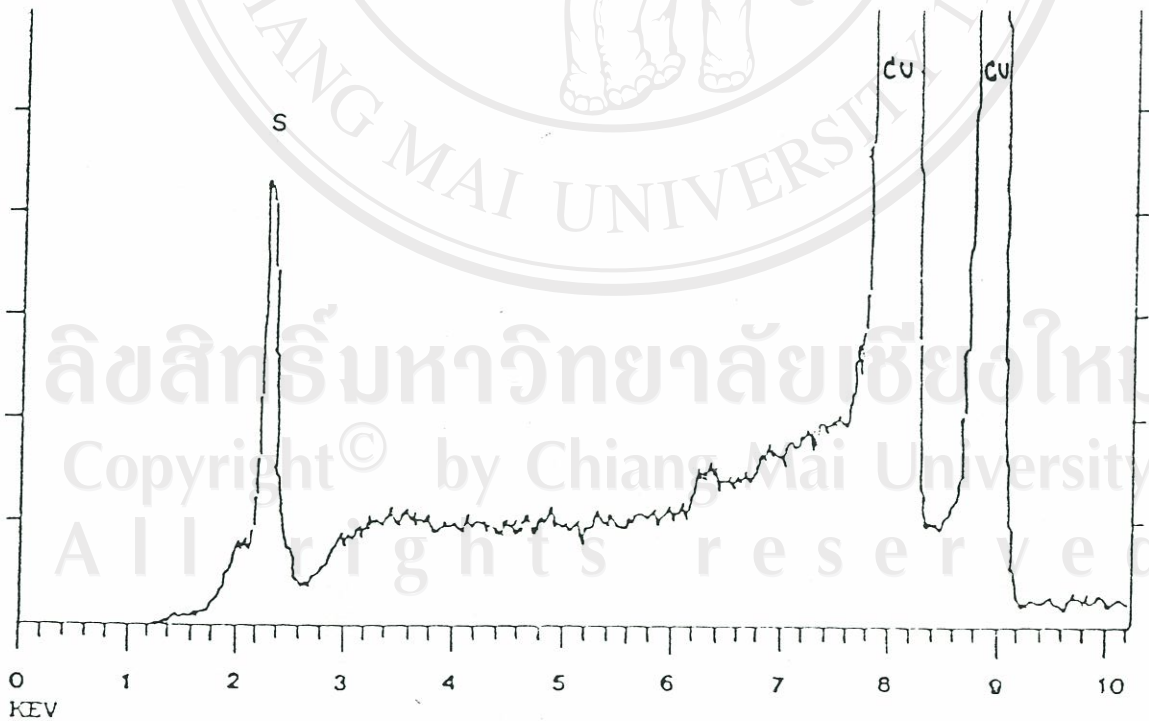
x-ray fluorescence หรือที่นิยมเรียกกันในชื่อย่อว่า XRF เป็นการศึกษารังสีเอกซ์เฉพาะตัว (characteristic x-ray) ซึ่งถูกปล่อยออกมาจากอะตอมของธาตุต่าง ๆ หลังจากอะตอมของธาตุเหล่านั้น ถูกกระตุ้นด้วยรังสีเอกซ์ รังสีเอกซ์เฉพาะตัวนี้จะใช้เป็นตัวบ่งชี้ว่าเป็นธาตุใด เนื่องจากแต่ละธาตุจะมีรังสีเฉพาะตัวไม่เหมือนกัน ดังนั้นจึงสามารถบอกได้ว่าสารตัวอย่างหนึ่ง ๆ ประกอบด้วยธาตุใดบ้าง โดยการตรวจสอบรังสีเอกซ์เฉพาะตัวจากสารตัวอย่าง

สำหรับเครื่องมือ x-ray fluorescence มีส่วนประกอบที่สำคัญ คือ x-ray tube เป็นแหล่งกำเนิดรังสีเอกซ์ , sample holder, pulse height analyser และ detector ดังรูปที่ 2.10



รูปที่ 2.10 แสดงส่วนประกอบของเครื่องมือ x-ray fluorescence [10]

เมื่อผ่านรังสีเอกซ์เข้าไปในสารตัวอย่าง สารตัวอย่างจะดูดกลืนรังสีเอกซ์ และให้ fluorescence radiation ออกมา ซึ่งจะถูกตรวจวัดโดย detector และจะส่ง pulse เข้าไปใน pulse height analyser ซึ่งเป็นเครื่องตรวจนับความสูงของ pulse อ่านออกมาเป็น peak ที่เป็นสัดส่วนกับพลังงานของโฟตอน โดย peak ที่อ่านได้จาก pulse height analyser ก็สามารถบอกความเข้มข้นของสารตัวอย่างที่ต้องการได้ เช่นรูปที่ 2.11



รูปที่ 2.11 ตัวอย่างแสดงสเปกตรัมของสาร

การวิเคราะห์เชิงคุณภาพโดย XRF สามารถนำสารตัวอย่างมาศึกษาได้ทันทีโดยไม่ต้องผ่านขั้นตอนการเตรียมสารตัวอย่าง และวิธีนี้จะไม่ทำให้สารตัวอย่างถูกทำลายหรือเปลี่ยนแปลงแต่อย่างใด (nondestructive method) และสามารถใช้ตรวจสอบธาตุต่าง ๆ ในสารตัวอย่างได้ตั้งแต่ Na ไปจนถึง U สำหรับธาตุเบา หรือเลขอะตอมต่ำกว่า Na ไม่สามารถตรวจสอบได้ เนื่องจากมีขีดจำกัดทางด้านเทคนิค

การวิเคราะห์เชิงปริมาณ เนื่องจากสารตัวอย่างมักเป็นของแข็งและประกอบด้วยธาตุต่าง ๆ หลายชนิด อาจเกิดผลรบกวนต่อกันมากบ้างน้อยบ้าง ระหว่างองค์ประกอบต่าง ๆ ที่มีอยู่ในสารตัวอย่าง ซึ่งเป็นปัญหาสำคัญมาก สำหรับการศึกษเชิงปริมาณ โดย XRF ถึงแม้ว่าในการศึกษาเชิงปริมาณ โดย XRF จะดีกว่าเทคนิคอื่น ๆ ในเรื่องของเวลาความแม่นยำ ความง่ายของวิธีการ แต่ถ้าเป็นสารตัวอย่างที่จำเป็นต้องวิเคราะห์โดยให้อยู่ในสภาพเดิมแล้ว การใช้ XRF ก็จะเป็นข้อได้เปรียบกว่าวิธีอื่น ๆ

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright © by Chiang Mai University
All rights reserved