

บทที่ 1



บทนำ

หลังจากการค้นพบเงื่อนไขการเกิดจุดสะท้อนของลาวอ (Laue's condition) และกฎของแบรกก์ (Bragg's law) ทฤษฎีเกี่ยวกับการหาโครงสร้างของผลึกโดยการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ จึงได้รับการพัฒนาขึ้นมาเรื่อย ๆ ทั้งด้านเทคนิคในทางปฏิบัติและการคำนวณโครงสร้าง ในเวลาต่อมาเป็นลำดับ อันเป็นผลทำให้ ในปัจจุบันโครงสร้างของผลึกต่าง ๆ ที่หาได้จาก การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ มีความถูกต้องดียิ่งขึ้น

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้ เป็นงานวิจัยที่เกี่ยวกับการหาโครงสร้างของผลึก ไตรฮาฟเนียมฟอสไฟต์ (Hf_3P) โดยการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ ผลึกไตรฮาฟเนียมฟอสไฟต์ที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้ ได้รับความเอื้อเฟื้อจากมหาวิทยาลัยอุพพัชลา แห่งประเทศสวีเดน วิธีการเตรียมผลึกไตรฮาฟเนียมฟอสไฟต์⁽¹⁾ ทำโดยหลอมฮาฟเนียมกับฟอสฟอรัสแดงที่มีความบริสุทธิ์ถึง 99 % ที่อุณหภูมิ 1000 องศาเซลเซียส เป็นเวลานาน 6 วัน

จุดประสงค์ของงานวิจัยนี้มีอยู่ 3 ประการด้วยกัน คือประการแรก เพื่อหาโครงสร้างของผลึก ไตรฮาฟเนียมฟอสไฟต์โดยละเอียด ประการที่สอง เพื่อศึกษาเทคนิคทางปฏิบัติที่ใช้ในการหาโครงสร้างของผลึก และประการสุดท้าย เพื่อฝึกหัดการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์สำหรับคำนวณหาโครงสร้างของผลึก ส่วนขั้นตอนของงานวิจัยนี้ ได้แบ่งออกเป็น 2 ตอนดังนี้ คือตอนแรก เป็นงานเกี่ยวกับด้านการทดลอง ซึ่งเริ่มจากหาความหนาแน่นของผลึก เลือกผลึกเดี่ยว ถ่ายภาพเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ เพื่อการตรวจข้อมูลทางผลึกวิทยา (crystallographic data) และรวบรวมข้อมูลความเข้ม เพื่อนำไปคำนวณหาโครงสร้างของผลึก ตอนสุดท้าย จะเป็นงานเกี่ยวกับการคำนวณ โดยมีการคำนวณค่ามิติของหน่วยเซลล์อย่างละเอียด ค่ามุมตำแหน่งอะตอม และปรับตำแหน่งอะตอมให้มีค่าถูกต้องมากที่สุด ซึ่งเรียกว่าการเกลารโครงสร้าง (structure refinement) อันเป็นการสิ้นสุดของงานวิจัย

วิทยานิพนธ์เล่มนี้ ได้แบ่งหัวข้อของการบรรยายไว้เป็นบท ๆ ดังนี้ คือบทที่ 1 เป็นบทนำ บทที่ 2 กล่าวถึงทฤษฎีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์และทฤษฎีการหาโครงสร้าง บทที่ 3 กล่าวถึงการขาดหายไปของจุดสะท้อนเนื่องจากหมู่สมมาตร (space group extinctions) บทที่ 4 กล่าวถึงขั้นตอนในการทดลอง บทที่ 5 กล่าวถึงการคำนวณหาโครงสร้างของผลึก และบทที่ 6 ซึ่งเป็นบทสุดท้าย เป็นการสรุปและวิจารณ์ผลการวิจัย