หอสมุดกลาง
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 3

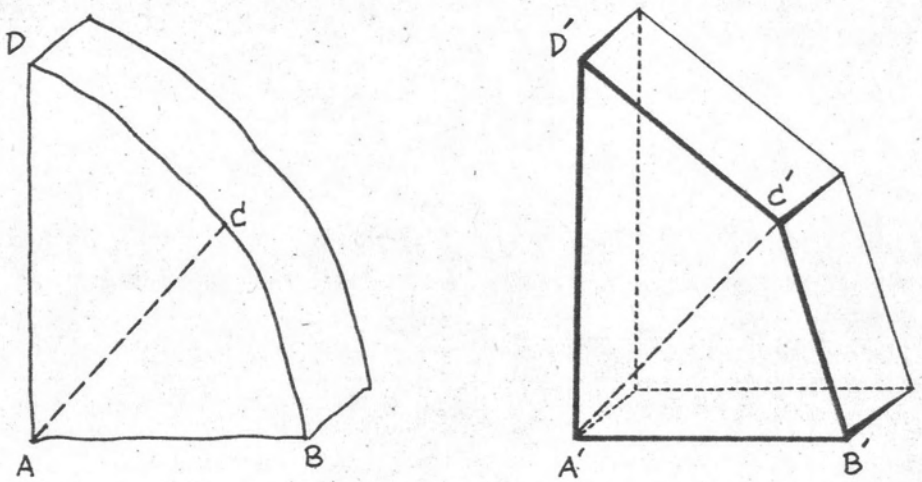
การกำหนดคัชนีมิลเลอร์ของผิวหน้าและแกนของผลึกจำลอง

ในบทที่ 2 นั้น ได้กล่าวถึงปัญหาที่เกิดขึ้นเนื่องจากการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ของผลึกเดี่ยว และวิธีการแก้ปัญหาด้วยการคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสีเมื่อคิดผลึกในรูปทั่วไป และได้สรุปขั้นตอนของการคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสีไว้ในตอนท้าย สำหรับในขั้นตอนของการคำนวณเมื่อพิจารณาดูขั้นตอนที่ 2 แล้วพบว่า ถ้าในการคำนวณเพื่อแก้ข้อมูลความเข้มที่ผิดพลาดโดยอิทธิพลของการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ของผลึกเดี่ยวด้วยการเลือกสมมุติให้ผลึกมีรูปร่างทั่วไปแล้ว สิ่งสำคัญที่ต้องทำเพื่อเตรียมการคำนวณคือ ต้องสร้างผลึกจำลองให้มีขนาดและรูปร่างเหมือนผลึกจริงที่ใช้ในการทดลองให้มากที่สุด ต้องกำหนดแกนลงในผลึกจำลองให้สอดคล้องตามสภาพที่เป็นจริง และต้องกำหนดคัชนีมิลเลอร์ของผิวหน้าทุกผิวหน้าที่ปิดล้อมผลึกจำลองอยู่ (4) ดังนั้นในบทนี้จะได้กล่าวถึง รายละเอียดของการกำหนดแกนลงในผลึกจำลองและการกำหนดคัชนีมิลเลอร์ของผิวหน้าของผลึกจำลอง

3.1 การกำหนดแกนของผลึกจำลองที่สอดคล้องกับผลึกจริง

3.1.1 การสร้างผลึกจำลอง หากรูปร่างของผลึกเดี่ยวที่พบในการทดลองส่วนมากมีลักษณะแบนราบเหมือนใบไม้หรือรูปร่างที่ไม่อาจจะสมมุติให้เป็นทรงกระบอกหรือทรงกลมได้ เมื่อถึงคราวที่จะคำนวณค่าแฟคเตอร์แก้ของการดูดกลืนหรือแฟคเตอร์การแพร่รังสี จึงจำเป็นต้องคำนวณด้วยการสมมุติให้ผลึกมีรูปทั่วไปดังรายละเอียดในบทที่ 2 ผลึกที่มีรูปทั่วไปหมายถึงผลึกจำลองที่สร้างขึ้นโดยให้มีขนาดและรูปร่างเท่าหรือใกล้เคียงกับผลึกจริง การสร้างนั้นกระทำโดยการจำลองจากผลึกจริงที่สามารถตรวจสอบได้ด้วยกล้องจุลทรรศน์ วัดขนาดความกว้าง ความยาว ความหนา แบ่งวัดด้านตามลักษณะจริงของผลึกหรือเพิ่มด้านที่ต้องวัดเพื่อประโยชน์ในการจำลองผลึก เช่น พิจารณารูป 3-1(ก) สมมุติเป็นรูปผลึกจริงที่ติดตั้งบนใยแก้วที่ใช้ในการทดลอง สังเกตเห็นว่า จะมีจุดสำคัญอยู่ 4 จุด คือ A , B , C และ D ถ้าวัดความยาว AB , AC , AD , BC และ CD ตามลำดับแล้ว ความยาวของทั้ง 5 เส้น

รวมกับความหนาของผลึก จะสามารถจำลองผลึกให้มีขนาดและรูปร่างใกล้เคียงกับผลึกจริง ได้ดังรูป 3-1(ข) ถ้าผลึกมีความหนาเท่ากันตลอดการวัดความหนาจะกระทำได้ง่าย แต่เมื่อ



(ก) (ข)

รูป 3-1 แสดงการเปรียบเทียบระหว่างผลึกจริงกับผลึกจำลอง

(ก) ผลึกจริง

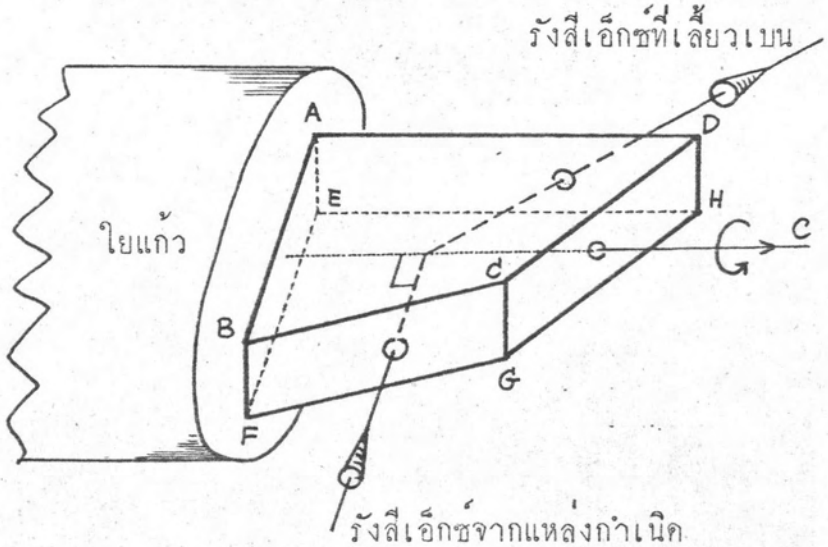
(ข) ผลึกจำลอง

พิจารณาผลึกทางด้านแบนราบแล้ว จะพบคำถามหนึ่งที่น่าสนใจคือ จะทราบได้อย่างไรว่า การวัดด้าน AC , BC และ CD นั้นใกล้เคียงกับความเป็นจริงมากที่สุด ทั้งนี้เนื่องจากจุด C เป็นจุดที่อยู่บนส่วนโค้งของผลึกที่เลือกขึ้นเพื่อประโยชน์ในการสร้างผลึกจำลอง สำหรับด้าน AB และ AD ไม่มีปัญหา การวัดจะทำได้ใกล้เคียงเพราะมีจุด A , B และ D อยู่ตรงมุมของผลึกที่สามารถสังเกตได้ชัดเจน วิธีที่ง่ายและได้ผลดีพอสมควรสำหรับการตรวจสอบการวัดด้าน AC , BC และ CD คือ อาศัยคุณสมบัติทางเรขาคณิต กล่าวคือ ถ้ารูป ABCD มีลักษณะเป็นรูปทรงเรขาคณิตอย่างง่ายแล้ว เช่น รูป A'B'C'D' ในรูป 3-1(ข) กางวงเวียนรัศมี AC , BC และ DC ใช้จุด A , B และ D เป็นจุดศูนย์กลางตามลำดับ แล้วเขียนส่วนโค้ง ส่วนโค้งทั้งสามต้องตัดกันที่จุดๆหนึ่งจุดนั้นคือ จุด C ถ้าหากด้าน AC , BC และ DC ที่วัดได้สอดคล้องกับคุณสมบัติดังกล่าวนี้ ก็พอจะกล่าวได้ว่า ค่าที่วัดได้หรือรูปร่างผลึกที่จำลองขึ้นใกล้เคียงกับสภาพที่เป็นจริง

โดยอาศัยหลักการดังที่กล่าวมานี้ จะสามารถสร้างผลึกจำลองขึ้นมาได้ ข้อมูลที่ได้จากการวัดด้านสำคัญต่างๆ จะนำมาคำนวณมุมภายในระหว่างระนาบ 2 ระนาบ เช่น จากรูป 3-1(ข) จะได้แก่มุม $\acute{A}\acute{B}\acute{C}$, $\acute{B}\acute{C}\acute{D}$, $\acute{C}\acute{D}\acute{A}$ และ $\acute{D}\acute{A}\acute{B}$ ซึ่งจะได้นำไปใช้ในการกำหนดดัชนีมิลเลอร์ของผิวหน้าผลึกจำลองต่อไป

3.1.2 <u>การกำหนดแกน</u> คำว่าแกนในที่นี้หมายถึง แกนของผลึกที่ใช้เป็นแกนอ้างอิง (**reference axes**) และถูกเลือกขึ้นมาโดยให้สอดคล้องกับสมมาตรของผลึก ใช้สัญญลักษณ์ **a** , **b** และ **c** กับ α, β และ γ แทนแกนและมุมระหว่างแกนทั้งสามตามลำดับ ดังนั้น หลังจากสร้างผลึกจำลองที่มีขนาดและรูปร่างใกล้เคียงกับผลึกจริงได้แล้ว ปัญหาต่อไปคือ ทำอย่างไรจึงจะทราบว่า แกนของผลึกจริงหรือผลึกจำลองมีทิศทางและการจัดตัวเป็นอย่างไรบ้าง ปัญหานี้คลี่คลายได้ไม่ยากนัก

เมื่อพิจารณาการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์โดยผลึกจะเห็นว่า อันดับแรกต้องจัดให้แกนหมุนของผลึกหมุนรอบแกน **a** , **b** หรือ **c** แกนใดแกนหนึ่งจึงจะเริ่มการถ่ายภาพแบบต่างๆต่อไป สมมุติว่า ผลึกมีลักษณะตามรูป 3-1 ถ้าจัดให้ผลึกหมุนรอบแกน **c** แล้วปรากฏว่า จะทราบได้ทันทีว่าแกน **c** มีทิศทางตั้งฉากกับลำรังสีเอ็กซ์ดังแสดงในรูป 3-2

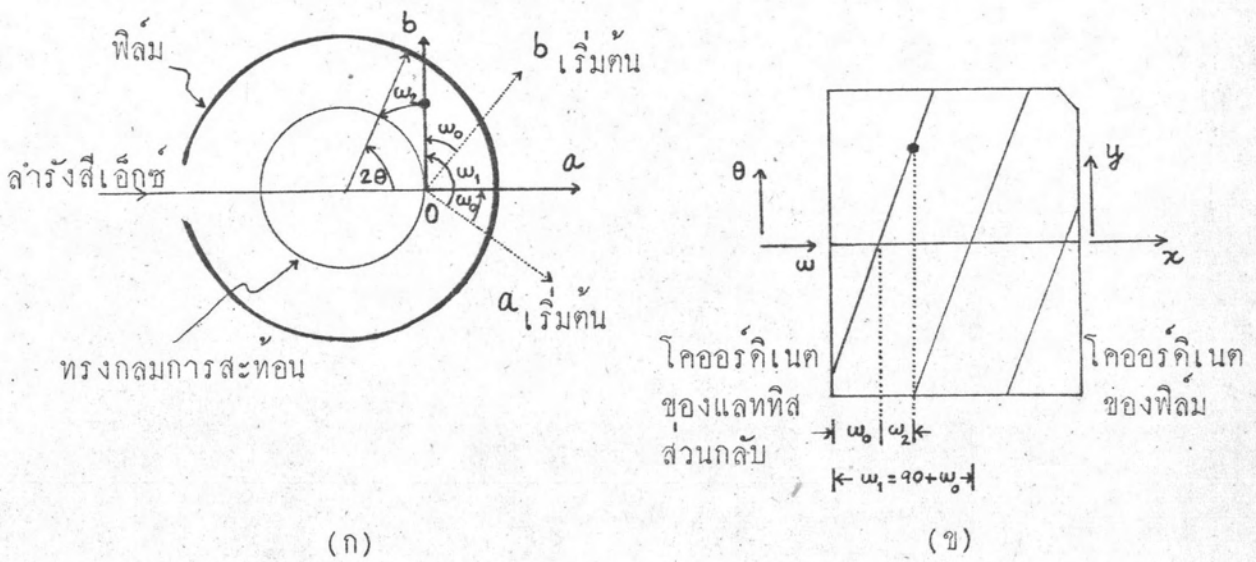


รูป 3-2 แสดงลักษณะการจัดตัวของผลึกเมื่อแกนหมุน **c** ถูกปรับให้ตั้งฉากกับลำรังสีเอ็กซ์

และสมมุติให้ ทิศทางของแกน c ขนานกับระนาบ ADHE ของผลึก นั่นคือขณะนี้ทราบแล้วว่า แกน c ของผลึกมีทิศทางไปทางไหน ยังคงเหลืออีก 2 แกน คือ a และ b ที่ยังไม่ทราบทิศทาง

ถ้าเป็นกรณีแกนของผลึกตั้งฉากกันหมดทั้งสามแกน ดังนั้น ในขั้นนี้จะทราบได้ทันทีว่า แกน a และ b อยู่ในระนาบที่ตั้งฉากกับแกน c กล่าวคือ ตามรูป 3-2 ระนาบนั้นจะขนานกับระนาบ ABFE แต่ทิศทางของแกน a และ b ก็ยังไม่อาจทราบได้ในขณะนี้ อาศัยวิธีการถ่ายและภาพถ่ายแบบไวซเซ็นเบิร์กจะสามารถบอกได้ว่า แกน a และ b มีทิศทางเป็นอย่างไรหรือจัดตัวอย่างไรในผลึก

พิจารณาการถ่ายภาพและภาพถ่ายแบบไวซเซ็นเบิร์กที่เลย์เออร์ที่ 0 (zero - layer) ดังแสดงในรูป 3-3 สำหรับรูป 3-3(ก) นั้นผลึกกำลังหมุนทวนเข็มนาฬิการอบแกน c ที่พุ่งออกจากกระดาษ สมมุติว่า ถ้ามองสวนเข้าไปในทิศที่รังสีเอ็กซ์พุ่งออกจากแหล่งกำเนิด เมื่อเริ่มต้นฟิล์มอยู่ขวามือสุด และกล้องกำลังเคลื่อนเพื่อรับภาพปรากฏทางซ้ายมือของฟิล์มทั้งนี้แกน b ทำมุม ω_0 กับเส้นสัมผัสทรงกลมการสะท้อนซึ่งตั้งฉากกับลำรังสีเอ็กซ์ที่จุด 0 เมื่อผลึกหมุนไปเป็นมุม ω_0 ขณะนั้นแกน b จะสัมผัสทรงกลมการสะท้อนพอดี และตรงตำแหน่งนี้แกน b จะเริ่มปรากฏที่ครึ่งบนของฟิล์มที่ ω_0 ดังรูป 3-3(ข) ในทำนองเดียวกัน



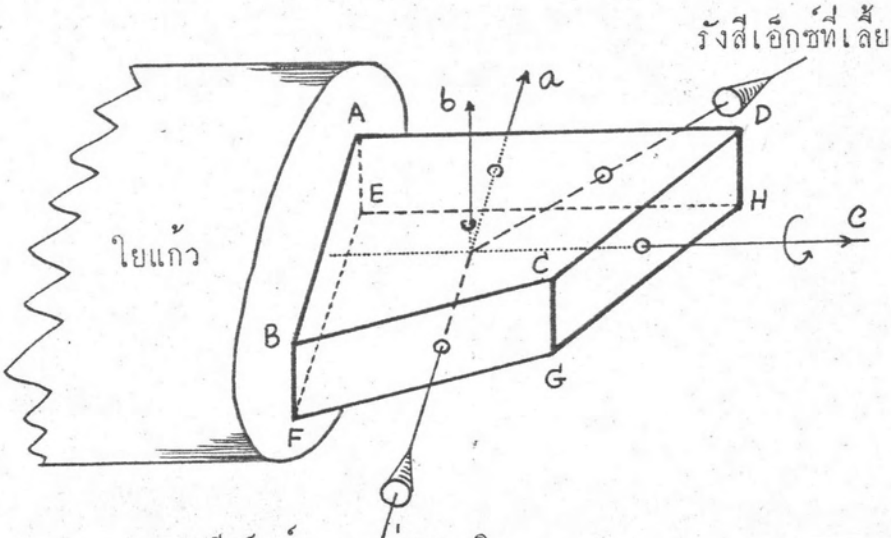
(ก) (ข)

รูป 3-3 (ก) แสดงเรขาคณิตของการถ่ายภาพแบบไวซเซ็นเบิร์ก
(ข) แสดงภาพถ่ายแบบไวซเซ็นเบิร์กที่เลย์เออร์ที่ 0 ที่สอดคล้องกับรูป (ก)

แกน a เมื่อเริ่มต้นจะทำมุม ω_o กับเส้นตรงที่ขนานกับลำรังสีเอ็กซ์ เมื่อหมุนผลึกไปเป็นมุม $90 + \omega_o$ แกน a จะสัมผัสทรงกลมการสะท้อนและตั้งฉากกับลำรังสีเอ็กซ์ ตรงตำแหน่งนี้ แกน a จะเริ่มปรากฏที่ครึ่งบนของฟิล์มที่ ω_1 ซึ่งเท่ากับ $90 + \omega_o$ ดังรูป 3-3(ข) สำหรับกล้องถ่ายภาพแบบไวซเซ็นเบิร์กถูกจัดให้แกนหมุนของผลึก 1 องศาเท่ากับการเคลื่อนที่ของฟิล์มเป็นระยะทาง 2 มิลลิเมตร[3] ค่ามุม ω สามารถอ่านได้จากกล้องในขณะที่ x สามารถวัดได้จากฟิล์มซึ่งเขียนความสัมพันธ์ระหว่าง ω กับ x ได้เป็น

$$\omega = 2x$$

ดังนั้น เมื่อพิจารณาแล้วจะเห็นว่า ตรงตำแหน่ง ω_o และ ω_1 บนฟิล์มเป็นตำแหน่งที่มีความสำคัญซึ่งจะเป็นกุญแจไขความลับในเรื่องทิศทางของแกน a และ b ในผลึก กล่าวคือ ในขณะที่ผลึกหมุนรอบแกน c แล้วมาหยุดตรง ω_o หรือ ω_1 แสดงว่า ขณะนั้นแกน b หรือ a ของผลึกกำลังตั้งฉากกับลำรังสีเอ็กซ์และสัมผัสกับทรงกลมการสะท้อนตามลำดับ



รูป 3-4 แสดงการจัดตัวของผลึกที่ติดตั้งบนกล้อง
และทิศทางของแกน a , b และ c

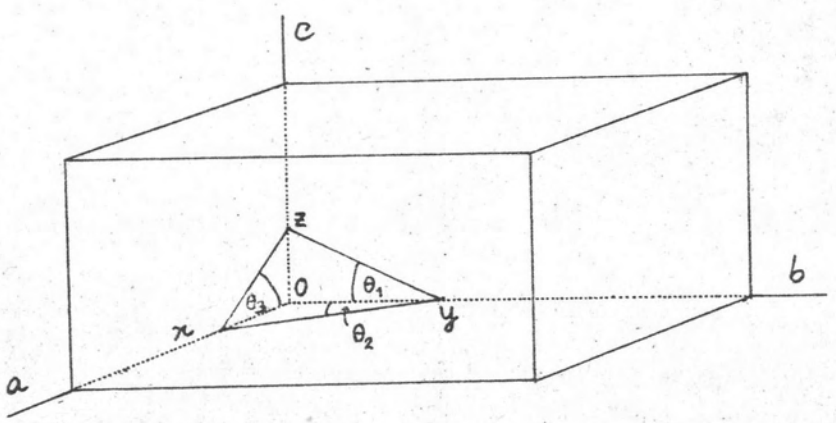
ในทางปฏิบัติ จากภาพถ่ายไวซเซ็นเบิร์กวัดและคำนวณ ω_oได้ จากนั้นจึงหมุนผลึกที่ติดตั้งบนกล้องถ่ายภาพแบบไวซเซ็นเบิร์กไปที่ ω_oองศา ในขณะนั้นแกน b จะตั้งฉากกับลำรังสีเอ็กซ์และผลึกจัดตัวในลักษณะตามรูป 3-4 ดังนั้น จะทราบทิศทางของ b ในผลึก

ส่วนแกน a จะทราบได้โดยปริยาย โดยวิธีการนี้ จะสามารถกำหนดแกนของผลึกลงในผลึกจำลองให้สอดคล้องกับสภาพความเป็นจริงได้

3.2 การกำหนดดัชนีมิลเลอร์ของผิวหน้าของผลึกจำลอง

ในหัวข้อ 3.1 ได้ทราบถึงวิธีการสร้างผลึกจำลองให้มีขนาดและรูปร่างเหมือนผลึกจริงมากที่สุด และทราบถึงวิธีการกำหนดแกนของผลึกจำลองที่สอดคล้องกับผลึกจริง จะเห็นว่า ผลึกจำลองที่สร้างขึ้นนั้นถูกล้อมรอบด้วยผิวหน้าซึ่งเป็นรูปทรงเรขาคณิตอย่างง่าย ถ้าผลึกมีลักษณะตามรูป 3-1(ข) จะมี 6 ผิวหน้า ผิวหน้าเหล่านี้จำเป็นต้องทราบดัชนีมิลเลอร์และระยะทางจากจุดกำเนิดในระบบแกนของผลึกที่กำหนดลงไปดังรายละเอียดในหัวข้อ 3.1.2 ไปยังผิวหน้าเหล่านั้น ทั้งนี้เพราะ ข้อมูลเหล่านี้ต้องนำไปใช้ในการคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสีดังได้กล่าวแล้วในบทที่ 2

พิจารณาในหนึ่งหน่วยเซลล์ (unit cell) ของผลึก ถ้ามีระนาบที่ต้องการทราบดัชนีมิลเลอร์ เช่น ระนาบ xyz ดังรูป 3-5 การกำหนดดัชนีมิลเลอร์ของระนาบดังกล่าวนั้นอาจใช้วิธีการดังต่อไปนี้



รูป 3-5 แสดงระนาบ xyz ในหนึ่งหน่วยเซลล์ของผลึก

สมมุติว่า ระนาบหนึ่งมีดัชนีมิลเลอร์เป็น (234) มีความหมายว่า เมื่อคิดในหนึ่งหน่วยเซลล์ระนาบนั้นจะตัดแกน a , b และ c ที่ทุกๆระยะ $\frac{1}{2}$ a , $\frac{1}{3}$ b และ $\frac{1}{4}$ c ตามลำดับ หรือระนาบนั้นตัดแกน a , b และ c แล้วแบ่งแกน a , b และ c ออกเป็น 2 , 3 และ 4 ส่วนเท่ากันตามลำดับ ดังนั้น ถ้าต้องการทราบดัชนีมิลเลอร์ของระนาบ xyz ใดๆ

จึงต้องทราบเสียก่อนว่า การที่ระนาบ xyz ตัดแกน a , b และ c ที่ x , y และ z นั้น แบ่งแกน a , b และ c ออกได้เป็นกี่เท่าตามลำดับ นั่นคือ ต้องทราบความสัมพันธ์

$$\left.\begin{aligned} x &= n(a/h) \\ y &= n(b/k) \\ z &= n(c/l) \end{aligned}\right\} \qquad (3.1)$$

เมื่อ h,k,l และ n คือ เลขจำนวนเต็ม ถ้าพิจารณารูป 3-5 จะได้

$$\left.\begin{aligned} \tan\theta_1 &= z/y \\ \tan\theta_2 &= x/y \\ \tan\theta_3 &= z/x \end{aligned}\right\} \qquad (3.2)$$

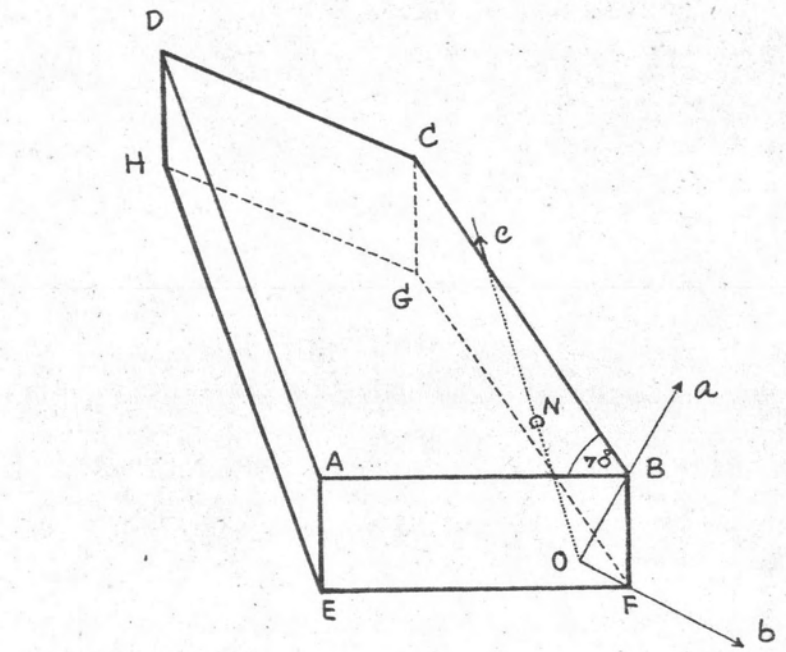
จากสมการ (3.1) และ (3.2) จะได้

$$\left.\begin{aligned} (b/c)\tan\theta_1 &= k/l \\ (b/a)\tan\theta_2 &= k/h \\ (a/c)\tan\theta_3 &= h/l \end{aligned}\right\} \qquad (3.3)$$

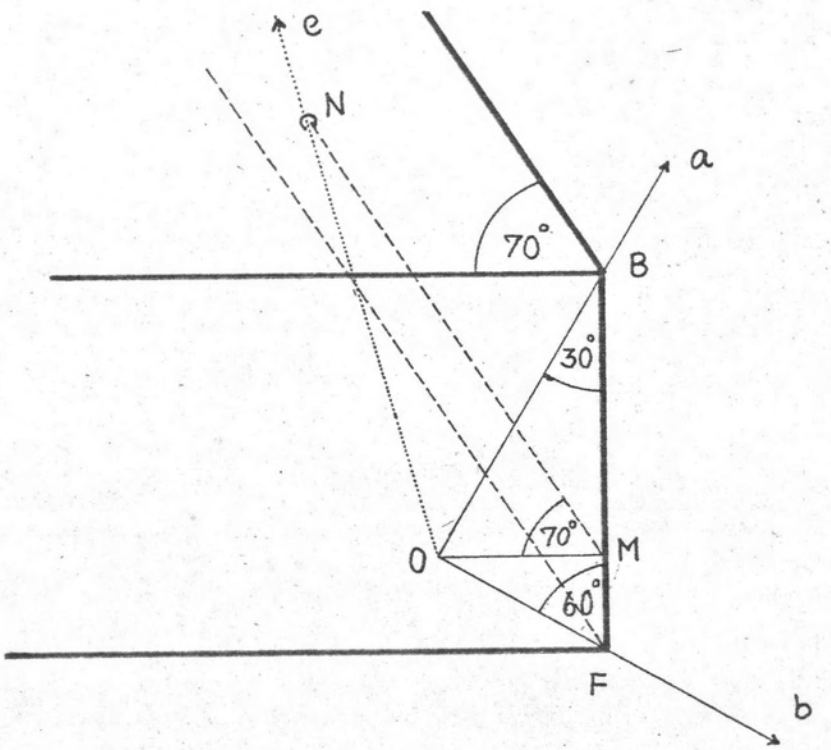
จากสมการ (3.3) ค่า a , b และ c สามารถคำนวณได้จากภาพถ่ายแบบออสซิลเลเชิน และแบบไวซเซ็นเบิร์ก ดังนั้น ถ้าทราบค่ามุม θ_1 , θ_2 และ θ_3 หรือทราบ $\tan\theta_1$, $\tan\theta_2$ และ $\tan\theta_3$ จะคำนวณหา h , k และ l ได้ซึ่งจะเป็นดัชนีมิลเลอร์ของระนาบ xyz และเขียนเป็น (hkl)

พิจารณารูป 3-6(ก) จะเห็นว่า แกน c ของผลึกจำลองขนานกับระนาบ ADHE ส่วนแกน a และ b ต่างก็ขนานและอยู่ในระนาบ ABFE แกน a และ b ทำมุมกับเส้นตรง BF เป็น 30 และ 60 องศา ตามลำดับ และระนาบ BCGF ทำมุม 70 องศากับระนาบ ABFE จะใช้สมการ (3.3) เพื่อแสดงตัวอย่างในการกำหนดดัชนีมิลเลอร์ของระนาบ

(ก)



(ข)



รูป 3-6 (ก) แสดงทิศทางและการจัดแกน a , b และ e ในผลึกจำลอง
(ข) ภาพขยายบางส่วนของรูป (ก) เพื่อการคำนวณกำหนดดัชนีมิลเลอร์ของระนาบ

จากรูป 3-6(ข) จะเห็นว่าระนาบ BCGF ตัดแกน a , b และ c ที่ B , F และ N ตามลำดับ เมื่อเทียบกับรูป 3-5 แล้ว มุม θ_2 เทียบได้กับมุม 60 องศา ถ้าใช้สมการ (3.3) จะได้

$$(b/a)\tan 60 = k/h \qquad (3.4)$$

พิจารณาสามเหลี่ยม BOF ในรูป 3-6(ข) มี OM ตั้งฉากกับด้าน BF ที่ M และ BF เป็นความหนาของผลึกทราบได้จากการวัด สมมุติว่าวัดได้ 0.008 มิลลิเมตร ดังนั้น จะคำนวณความยาวของ OB , OM และ OF ได้ดังนี้

$$\left.\begin{aligned} OB &= 0.008\sin 60 = 0.007 \text{ ม.ม.} \\ OF &= 0.008\cos 60 = 0.004 \text{ ม.ม.} \\ OM &= 0.007\sin 30 = 0.004 \text{ ม.ม.} \end{aligned}\right\} \qquad (3.5)$$

พิจารณาสามเหลี่ยม MNO ในรูป 3-6(ข) มุม OMN เท่ากับ 70 องศา ดังนั้น จะคำนวณ ON ได้เป็น

$$ON = 0.004\tan 70 = 0.011 \text{ ม.ม.} \qquad (3.6)$$

เมื่อเทียบรูป 3-6 กับรูป 3-5 แล้วพบว่า

$$\left.\begin{aligned} \tan\theta_1 &= (ON)/(OF) = (0.011)/(0.004) \\ \tan\theta_3 &= (ON)/(OB) = (0.011)/(0.007) \end{aligned}\right\} \qquad (3.7)$$

จากสมการ (3.7) และ (3.3) จะได้

$$\left.\begin{aligned} (b/c)(0.011)/(0.004) &= k/l \\ (a/c)(0.011)/(0.007) &= h/l \end{aligned}\right\} \qquad (3.8)$$

สมมุติว่า a = 10 , b = 10 และ c = 5 Å แทนค่า a , b และ c ลงในสมการ (3.8) และ (3.4) จะได้

$$\left.\begin{aligned} k/h &= 1.7 \approx 2 \\ k/l &= 5.5 \approx 6 \\ h/l &= 3.1 \approx 3 \end{aligned}\right\} \qquad (3.9)$$

สมการ (3.9) จะแสดงอัตราส่วนของ k/h , k/l และ h/l ซึ่งอัตราส่วนทั้งสามนี้สามารถนำไปหาค่า h , k และ l ที่ง่ายและเหมาะสม ปรากฏว่ากรณีนี้จะได้

$$\left.\begin{aligned} h &= 3 \\ k &= 6 \\ l &= 1 \end{aligned}\right\} \qquad (3.10)$$

ดังนั้น ดัชนีมิลเลอร์ของระนาบ BCGF คือ (361)

ในทำนองเดียวกัน ระนาบอื่นๆ ก็สามารถกำหนดดัชนีมิลเลอร์ได้ด้วยวิธีการแบบนี้ ดัชนีมิลเลอร์ของแต่ละระนาบในกรณีนี้จะใช้เป็นเครื่องกำหนดทิศทางของระนาบจากจุดกำเนิด ดัชนีแต่ละตัวคือ h , k และ l จะเป็นส่วนประกอบในทิศทางตามแกน a , b และ c ของเวคเตอร์นอร์มัลหรือเวคเตอร์ที่ตั้งฉากกับระนาบตามสมการ (2.11) ตามลำดับ ถ้าทราบเวคเตอร์นอร์มัลของแต่ละระนาบแล้ว จึงไม่เป็นการยากที่จะหาสมการของระนาบต่อไปซึ่งจะได้นำไปใช้ในการคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสีดังรายละเอียดในบทที่ 2