



บทที่ 3

ผลึกศาสตร์

โครงสร้างผลึกที่สำคัญในสารประกอบกลุ่ม II-VI ได้แก่ โครงสร้างผลึกรูปลูกบาศก์แบบซิงค์เบลนด์และรูปปริซึมหกเหลี่ยมแบบเวอร์ทไซต์ (wurtzite) การจับกันของอะตอมในโครงสร้างทั้งสองเป็นพันธะรูปทรงสี่หน้า (tetrahedral) เช่นเดียวกับโครงสร้างผลึกแบบเพชรในธาตุกึ่งตัวนำกลุ่ม IV โครงสร้างผลึกอีกแบบหนึ่งซึ่งมีความสัมพันธ์กับโครงสร้างทั้งสองแบบ (อะตอมยังคงเรียงตัวเป็นรูปทรงสี่หน้า) คือ โครงสร้างผลึกแบบโพลีไทป์ (polytype) สารประกอบกลุ่ม II-VI ส่วนมากจะเปลี่ยนโครงสร้างผลึกภายใต้ความดันสูงไปเป็นแบบร็อคซอลต์ (rock salt) ซึ่งมีการจัดเรียงตัวของอะตอมเป็นรูปทรงแปดหน้า (octahedral) โครงสร้างผลึกแบบร็อคซอลต์นี้มักจะพบในผลึกไอออนิก พันธะในผลึกของสารประกอบกลุ่ม II-VI จึงมีลักษณะของพันธะไอออนิกรวมอยู่ในพันธะโคเวเลนต์ด้วย

โครงสร้างผลึกทั้งสี่แบบและความเป็นพันธะไอออนิกและโคเวเลนต์ จะได้กล่าวในหัวข้อ 3.1 ในหัวข้อ 3.2 ได้กล่าวถึงหลักการการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ที่จะใช้ศึกษาโครงสร้างผลึก ซึ่งแบ่งเป็นการพิจารณามุมของการเลี้ยวเบนและความเข้มที่แต่ละมุมของการเลี้ยวเบน ได้ศึกษาลักษณะการจัดเรียงอะตอมในผลึก ZnSe ที่ปลูกได้ด้วยการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนแบบผก (ในหัวข้อ 3.3) ซึ่งจะสามารถหาดำค่างที่โครงสร้างผลึกอย่างละเอียดได้ และได้ศึกษาหน้าผลึก ZnSe ด้วยการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนแบบสะท้อนกลับ (ในหัวข้อ 3.4) เพื่อใช้ประกอบการตัดผลึกให้ได้ระนาบหน้าผลึกตามต้องการ ดังกล่าวในหัวข้อ 3.5

3.1 โครงสร้างผลึก

การจัดเรียงตัวของอะตอมในโครงสร้างผลึกให้เป็นแบบใดนั้น มีผลมาจาก 1) เงื่อนไขบังคับทางเรขาคณิตซึ่งขึ้นกับขนาดของอะตอม, 2) แรงคูลอมบ์ซึ่งขึ้นกับประจุของอะตอม (ไอออน) และ 3) สมบัติเชิงทิศทางซึ่งสัมพันธ์กับธรรมชาติของพันธะเคมี พันธะโคเวเลนต์เกิดจากคู่อิเล็กตรอนที่มีสปินตรงข้ามกันมาอยู่ร่วมกันระหว่างสองอะตอม โดยพันธะโคเวเลนต์

ในสารประกอบ II-VI อิเล็กตรอนจะอยู่ในออร์บิทัลที่เกิดจากการไฮบริไดซ์แบบ sp^3 ซึ่งมีทิศทางรูปทรงสี่หน้า สำหรับพันธะไอออนิกเกิดจากอันตรกิริยาคูลอมบ์ระหว่างประจุบวกและลบของไอออน ซึ่งเกิดจากการย้ายของอิเล็กตรอนจากโลหะไปยังอโลหะ เช่น ใน ZnSe อิเล็กตรอน $4s^2$ จาก Zn จะย้ายไปที่ $4p$ ของ Se กลายเป็นไอออนเสถียรที่ closed shell Zn^{+2} ($3s^2, 3p^6, 3d^{10}$) และ Se^{-2} ($4s^2, 4p^6$) ถ้าพิจารณา ZnSe เป็นพันธะไอออนิกสมบูรณ์ อิเล็กตรอนจะย้ายอย่างสมบูรณ์เหลือไอออน Zn^{+2}, Se^{-2} แต่เมื่อพิจารณาเป็นพันธะโคเวเลนต์อะตอม Zn และ Se จะใช้ 8 เวเลนซ์อิเล็กตรอนร่วมอย่างเท่า ๆ กัน และประจุสุทธิจะเป็น Zn^{-2}, Se^{+2} ลักษณะเช่นนี้ดูเหมือนเป็นกลางคือ มีสมบัติความเป็นไอออนิก 50% Birman [36] ได้ให้ประจุสุทธิของการเกิดพันธะสำหรับ Zn มีค่าเป็น $+\frac{1}{2}$ และสำหรับ Se เป็น $-\frac{1}{2}$ ซึ่งจะได้สมบัติความเป็นไอออนิก 65%

โครงสร้างผลึกหลักของสารประกอบกลุ่ม II-VI แยกตามการแทรกตัวของแคตไอออนใน close packed ของแอนไอออนได้ดังในตารางที่ 3.1 ใน close packed ของแอนไอออนจะมีช่องว่างเป็นรูปทรงแปดหน้าหนึ่งรูปและเป็นรูปทรงสี่หน้าได้สองรูปต่อหนึ่งแอนไอออนในการประกอบกันเป็นสารประกอบ AB แคตไอออนจะแทรกอยู่ในตำแหน่งว่างที่มุมของรูปทรงแปดหน้าหรือในครึ่งหนึ่งของตำแหน่งที่ว่างที่มุมของรูปทรงสี่หน้า โครงผลึกหรือเซลล์จะเกิดจากการที่แคตไอออนแทรกอยู่ที่มุมของรูปทรงแปดหน้าของ cubic close packing (ccp), แคตไอออนของโครงผลึกแบบซิงค์เบลนด์และเวอร์ทไซต์ จะแทรกอยู่ครึ่งหนึ่งของตำแหน่งมุมในรูปทรงสี่หน้าใน ccp และ hexagonal close packing (hcp) ตามลำดับ โครงผลึกแบบ nickel arsenide ไม่พบในสารประกอบกลุ่ม II-VI นี้

Packing	Interstitial sites occupied	
	All octahedral	$\frac{1}{2}$ tetrahedral
cubic	sodium chloride	zincblende
hexagonal	nickel arsenide	wurtzite
cubic+hexagonal	-	polytypes

ตารางที่ 3.1 การแบ่งโครงผลึก AB ด้วยการบรรจุของแอนไอออน

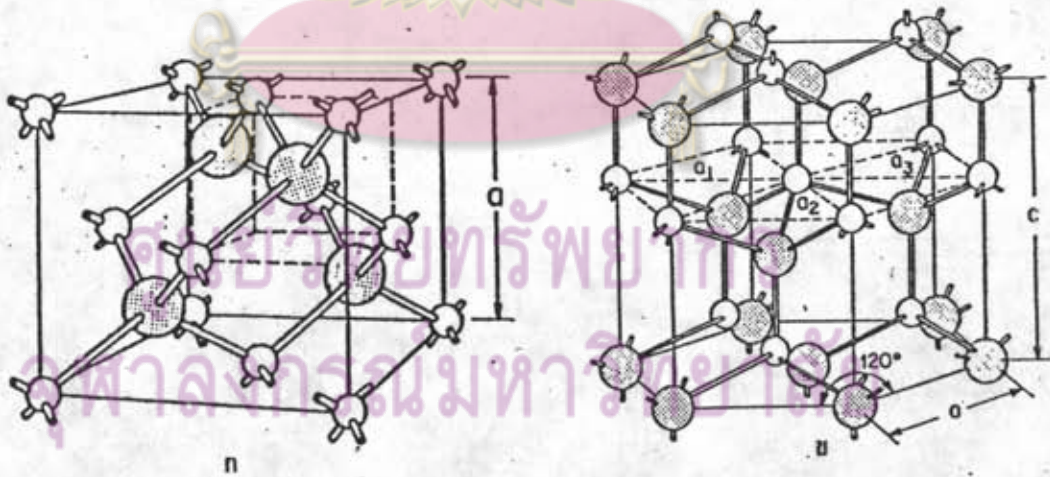
3.1.1 โครงผลึกแบบซิงค์เบลนด์

ผลึกของสารประกอบ II-VI โดยเฉพาะ CdTe, ZnTe และ ZnSe จะมีโครงผลึกส่วนใหญ่เป็นแบบซิงค์เบลนด์ (รูปที่ 3.1ก) โครงผลึกนี้มีสมมาตรอยู่ใน cubic space group $T_d^2-F_{43m}$ มีสี่ ZnSe ในหนึ่งเซลล์หน่วย (unit cell) โดยแต่ละอะตอมจะอยู่ในตำแหน่ง

$$4\text{Se}: 0,0,0; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$$

$$4\text{Zn}: \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$$

ตามตำแหน่งอะตอมข้างบนทำให้อะตอมทั้งสองเป็นชนิดเดียวกัน โครงผลึกจะมีลักษณะเหมือนโครงผลึกแบบเพชร ที่ทุก ๆ หนึ่งอะตอมจะต่อกับสี่อะตอมที่ต่างชนิดกันที่มุมของรูปทรงสี่หน้า แต่ละ Zn(Se) จะมีเพื่อนบ้านใกล้สุดเป็น Se(Zn) อยู่สี่อะตอมด้วยระยะทาง $0.433a$ เมื่อ a เป็นค่าคงที่โครงผลึก มี 12 อะตอมเพื่อนบ้านในลำดับถัดไปซึ่งห่างไปด้วยระยะทาง $0.707a$ โดย 6 อะตอมจะจัดเรียงเป็นรูปหกเหลี่ยมที่ระนาบเดียวกันและที่เหลือจะเป็นรูปสามเหลี่ยมกลับหัวสองรูปซ้อนกันบนล่าง

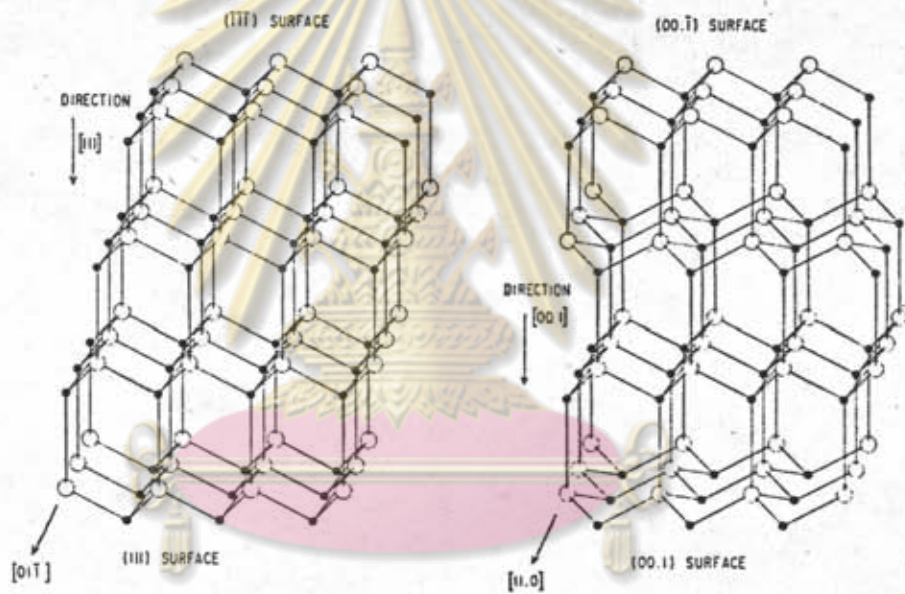


รูปที่ 3.1 โครงผลึก ก) ลูกบาศก์ซิงค์เบลนด์ ข) เฮกซะโกนอลเวอริกไซต์ วงกลมโปร่งแทนอะตอม Se (อโลหะ) วงกลมแทนอะตอม Zn (โลหะ)

ลักษณะที่สำคัญในโครงผลึกแบบซิงค์เบลนด์คือมีระนาบชั้นของ Zn และชั้นของ Se ซ้อนกันในทิศ $\langle 111 \rangle$ ดังในรูปที่ 3.2ก เป็นผลให้ผลึกมีสมบัติทางกายภาพและทางเคมีแตกต่างกันระหว่างหน้า (hkl) กับ $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ ผลึกแบบซิงค์เบลนด์ส่วนมากจึงมีสมบัติ

piezoelectric กล่าวคือระนาบของแคตไอออน (Zn) และแอนไอออน (Se) มีขั้วต่างกัน จึงเกิดไดโพลโมเมนต์ถาวรเรียงตัวอยู่ แรงภายนอกจะทำให้โมเมนต์เสียสมดุล ดังนั้นจึงเกิดความต่างศักย์ขึ้นเมื่อมีการกดหรือดึงผลึก

ผิวผลึก (AB) ที่ขนานกับระนาบ (111) ทั้งสองหน้าจะประกอบด้วยอะตอม A หรือ B เพียงชนิดเดียวเท่านั้น (ในรูป 3.2ก) ผิวหน้าที่พื้นระนาบ AB สามพื้นระนาบถูกตัด เหลือเพียงหนึ่งพื้นระนาบเท่านั้นที่ชิดกับผลึกข้างใน จะเป็นผิวที่ไม่เสถียร ดังนั้นผิวผลึกทั้งสองหน้าจึงชิดกับผลึกข้างในด้วยสามพื้นระนาบ ซึ่งจะเป็หน้า A(111) และหน้า B($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) ดังรูป การกัดผิวหน้าด้วยสารเคมี (etch) สามารถแสดงให้เห็นความแตกต่างของหน้า A และ B ได้ โดยหน้า A จะมีลักษณะเป็นรูปปิรามิดสามเหลี่ยมและหน้า B เป็นผิวขรุขระ [36]



รูปที่ 3.2 แสดงความมีขั้วในโครงผลึก ก) ซิงค์เบลนด์ ข) เวอร์ทไซต์ หน้า A ประกอบด้วยอะตอมโลหะ (วงกลมทึบเล็ก) และหน้า B เป็นอะตอมอโลหะ (วงกลมใหญ่)

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

3.1.2 โครงผลึกแบบเวอร์ทไซต์

โครงผลึกแบบเวอร์ทไซต์ (รูปที่ 3.1ข) อยู่ใน space group $C_{6v}^4-P6_3mc$ มี 2 โมเลกุลใน 1 เซลล์หน่วย (ปริซึมหกเหลี่ยม) โดย Zn สองอะตอมอยู่ที่ $0,0,0$; $\frac{1}{3}, 2, \frac{1}{2}$ และ Se สองอะตอมอยู่ที่ $0,0,u$; $\frac{1}{3}, 2, \frac{1}{2}+u$ เมื่อ $u = 0.38$ แต่ละอะตอม Zn จะสร้างพันธะกับสี่อะตอม Se ซึ่งจะประมาณอยู่ที่มุมของรูปทรงสี่หน้า โดยมี Se อะตอมหนึ่งอยู่ห่างเป็นระยะ uc และอีกสามอะตอมจะอยู่ห่างเท่ากับ $(\frac{1}{3}a^2 + c^2(u+\frac{1}{2})^2)^{1/2}$ มีอะตอม

เพื่อนบ้านถัดไปอยู่ 12 อะตอม โดยหอคอะตอมอยู่ที่มุมของหกเหลี่ยมที่ระนาบเดียวกันที่ระยะ a อีกหอคอะตอมอยู่ที่มุมของปริซึมฐานสามเหลี่ยมห่างเป็นระยะ $(\frac{1}{3}a^2 + \frac{1}{4}c^2)^{1/2}$ ถ้า $c/a = 2\sqrt{2}/\sqrt{3} = 1.6330$ และ $u = 38$ แล้วอะตอมเพื่อนบ้านใกล้สุดจะอยู่ที่มุมของรูปทรงสี่หน้า และระยะของ 12 อะตอมเพื่อนบ้านถัดไปจะห่างเท่ากัน การบิดเบี้ยวของโครงผลึกเกิดจากการที่พันธะบางส่วนมีขั้ว ในโครงผลึกแบบเวอรัทไซต์มีการเรียงระนาบผลึกซ้อนกันตามแนวฐานหกเหลี่ยม (0001) ดังในรูปที่ 3.2ข

3.1.3 โครงผลึกแบบโพไลไทท์

ค่าคงที่โครงผลึกแบบซิงค์เบลนด์และแบบเวอรัทไซต์จะมีความสัมพันธ์กัน ประมาณได้เป็น $a_{(hex)} = 0.707a_{(cubic)}$ และ $c_{(hex)} = 1.155a_{(cubic)}$ โครงผลึกทั้งสองมีลักษณะคล้ายกันถึงเพื่อนบ้านลำดับที่ 2 เพียงแต่ต่างกันที่การกลับหัวของสามเหลี่ยม (ในหัวข้อ 3.1.1 และ 3.1.2) พิจารณาโครงผลึกเป็นชั้น close packed ของ Zn และ Se ในโครงผลึกแบบซิงค์เบลนด์มีการเรียงชั้นตามหน้า (111) เป็น $a\bar{c}b\beta c\bar{\gamma}a\bar{c}b\beta c\bar{\gamma}...$ เมื่ออักษรกรีกแทน Se(VI) และอักษรอังกฤษแทน Zn(II) และในโครงผลึกเวอรัทไซต์มีการเรียงเป็นชั้นตามหน้า (0001) เป็น $a\bar{c}b\beta a\bar{c}b\beta...$ โครงผลึกที่มีลำดับการเรียงชั้น close packed แตกต่างออกไป เรียกว่าเป็นโครงผลึกแบบโพไลไทท์ ซึ่งระบุได้ด้วยสัญลักษณ์ เช่น 4H(22) เมื่อ 4 เป็นจำนวนชั้นในเซลล์หน่วย, H เป็นสมมาตรของแลตทิซ (hexagonal) และ (22) แทน stacking sequence ดังในรูปที่ 3.3

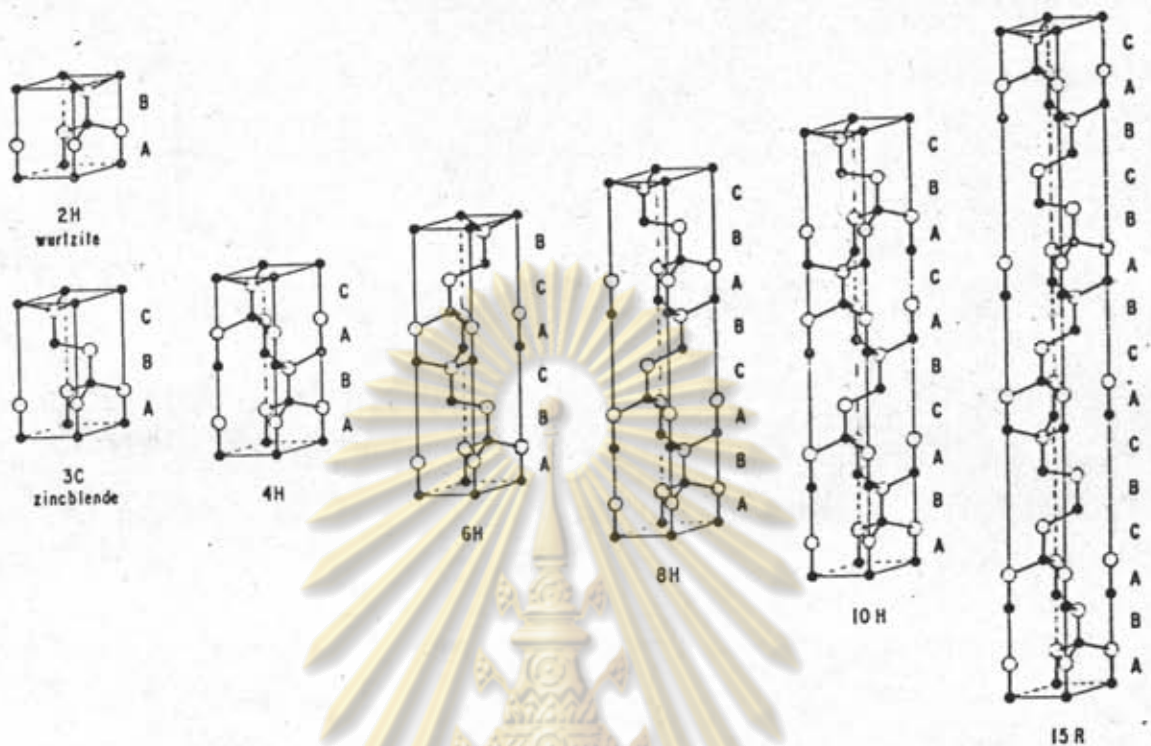
3.1.4 โครงผลึกแบบร็อคซอลท์

ที่ความดันสูงสารประกอบ II-VI จะเปลี่ยนโครงผลึกเป็นแบบร็อคซอลท์ (NaCl) ซึ่งมีการจัดอะตอมเป็นรูปทรงแปดหน้าและทำให้มีปริมาตรลดลง 20% โครงผลึกแบบนี้อยู่ใน space group $O_h^F - Fm\bar{3}m$ และในหนึ่งเซลล์หน่วยมี 4 โมเลกุลซึ่งอยู่ในตำแหน่ง

$$4Zn: 0, 0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

$$4Se: \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0, 0, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{2}, 0, 0$$

แต่ละอะตอมจะทำพันธะกับ 6 อะตอมต่างชนิดกัน โดยจะอยู่ที่มุมของรูปทรงแปดหน้าด้วยระยะห่าง $0.5a$ และมีอะตอมเพื่อนบ้านถัดไป 12 อะตอมโดยอยู่ที่มุมของรูป regular dodecahedron ด้วยระยะห่าง $0.707a$



รูปที่ 3.3 โครงผลึกโพลีไทป์ แสดงการจัดเรียงของอะตอมโลหะ (วงกลมทึบเล็ก) และอะตอมอโลหะ (วงกลมโปร่งใหญ่) อักษร A,B,C แทนแต่ละรูปแบบของการจัดชั้นอะตอม

3.2 หลักการถ่ายภาพเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์

ในหัวข้อ 3.1 ข้างต้นได้กล่าวถึงโครงสร้างแบบต่าง ๆ ที่มีได้ในผลึก ZnSe การศึกษาว่าก่อนผลึกนั้น ๆ มีโครงสร้างแบบใดนั้น ทำได้โดยการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ เงื่อนไขของการเลี้ยวเบนโดยทั่วไปจะได้กล่าวถึงในหัวข้อ 3.2.1 และในที่นี้จะได้กล่าวถึงเงื่อนไขเฉพาะในกรณีการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนแบบผก (หัวข้อ 3.2.2) และแบบเลาเอ (หัวข้อ 3.2.3) ซึ่งจะใช้นในงานวิจัยต่อไป เงื่อนไขหรือตำแหน่งของเส้นการเลี้ยวเบนจะสามารถระบุได้แต่ตำแหน่งแลตทิซในโครงสร้าง (เป็นโครงสร้างแบบใด) ข้อมูลความเข้มของเส้นการเลี้ยวเบนจะสามารถระบุชนิดของอะตอมในแต่ละแลตทิซได้ ซึ่งจะได้กล่าวไว้ในหัวข้อ 3.2.4

3.2.1 การเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์

เมื่อรังสีเอกซ์ (คลื่น) ตกกระทบแต่ละจุดของแลตทิซในผลึก รังสีเอกซ์จะกระเจิงออกจากจุดแลตทิซนั้น ๆ ในทิศและความเข้มต่าง ๆ ในทิศหนึ่ง ๆ รังสีเอกซ์จะรวมหรือหักล้างกันเป็นรังสีของการเลี้ยวเบน พิจารณาการกระเจิงของรังสีเอกซ์ที่

สองอะตอมใด ๆ (อะตอม O และ A ในรูปที่ 3.4ก) อะตอมอยู่ห่างกันเป็น $OA = pa_1 + qa_2 + ra_3$ เมื่อ p, q และ r เป็นจำนวนเต็มใด ๆ ให้รังสีเอกซ์ความยาวคลื่น λ ตกกระทบและเลี้ยวเบนออกในทิศของเวกเตอร์หนึ่งหน่วย S_0 และ S โดยทั่วไป S_0, S และ OA ไม่จำเป็นต้องอยู่ในระนาบเดียวกัน เงื่อนไขของการเกิดการเลี้ยวเบนอยู่ที่ความต่างเฟสของรังสีที่กระเจิงออก ความแตกต่างของระยะทางที่คลื่นกระเจิงออกจาก O และ A เป็น

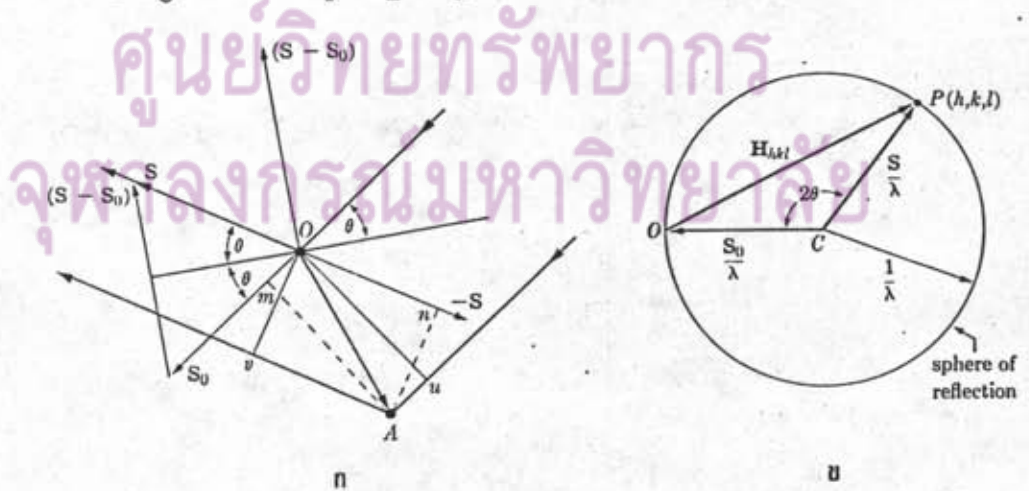
$$\delta = uA + vA = O_m + O_n = S_0 \cdot OA + (-S) \cdot OA = -OA \cdot (S - S_0)$$

ซึ่งสอดคล้องกับความต่างเฟส $\phi = 2\pi\delta/\lambda$ เขียนเวกเตอร์ $(S - S_0)/\lambda$ ในเทอมแลตทิซส่วนกลับ (reciprocal lattice) ได้เท่ากับ $hb_1 + kb_2 + lb_3$ โดยในขณะนี้ h, k และ l เป็นค่าใด ๆ ดังนั้นความต่างเฟส

$$\phi = -2\pi(hb_1 + kb_2 + lb_3) \cdot (pa_1 + qa_2 + ra_3) = -2\pi(hp + kq + lr)$$

แต่จะเกิดการเลี้ยวเบนเมื่อ ϕ มีค่าเป็นจำนวนเต็มเท่าของ 2π ฉะนั้น h, k และ l ต้องเป็นจำนวนเต็ม นั่นคือเงื่อนไขของการเกิดการเลี้ยวเบนจะเกิดขึ้นเมื่อปลายของเวกเตอร์ $(S - S_0)/\lambda$ อยู่ที่จุดแลตทิซกลับหรือ

$$S - S_0 = H = hb_1 + kb_2 + lb_3 \quad ; h, k \text{ และ } l \text{ เป็นจำนวนเต็ม} \quad (3.1)$$



รูปที่ 3.4 ก) การกระเจิงของรังสีเอกซ์โดยอะตอมที่จุด O และ A ข) ทรงกลมของการสะท้อน แสดงภาคตัดที่ระนาบรังสีตกและรังสีเลี้ยวเบน

สมการที่ 3.1 เป็นกรณีทั่วไปของสมการเลาเอ (Laue equations) และกฎของแบร็ก (Bragg law) โดยพิจารณาผลคูณสเกลาร์ระหว่างเวกเตอร์ในสมการที่ 3.1 กับเวกเตอร์โครงผลึก a_1, a_2 และ a_3 จะได้เป็นสมการเลาเอ

$$a_1 \cdot (S - S_0) = h, \quad a_2 \cdot (S - S_0) = k, \quad a_3 \cdot (S - S_0) = l \quad (3.2)$$

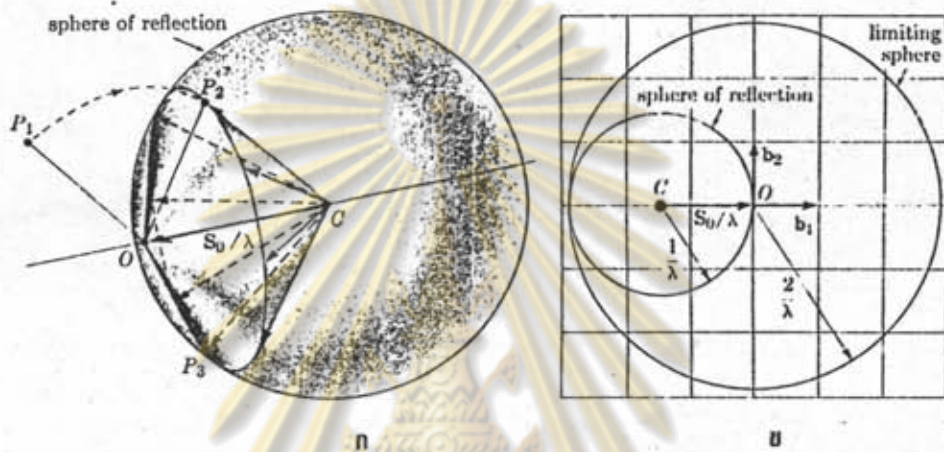
และในรูปที่ 3.4ก จะเห็นว่า $(S - S_0)$ จะแบ่งครึ่งมุมระหว่าง S และ S_0 และมีทิศตั้งฉากกับระนาบผลึก (hkl) ที่รังสีตกกระทบ จากสมการ (3.1) $S - S_0$ จะมีทิศทางเดียวกัน H ซึ่งตั้งฉากกับระนาบ (hkl) ให้ θ เป็นมุมระหว่าง S (หรือ S_0) กับระนาบนี้ เพราะ S และ S_0 เป็นเวกเตอร์หนึ่งหน่วย ดังนั้น $(S - S_0) / \lambda = 2 \sin \theta / \lambda = H = 1/d$ หรือคือกฎของแบร็ก $\lambda = 2d \sin \theta$

สมการที่ 3.1 เขียนแสดงได้ดังในรูปที่ 3.4ข ในทรงกลมรัศมี $1/\lambda$ เวกเตอร์ S_0/λ ซึ่งชี้ตามทิศที่รังสีเอกซ์ตกกระทบ เขียนแทนได้ด้วยเวกเตอร์ OO จุด O จะเป็นจุดเริ่มต้นของแลตทิซส่วนกลับที่สเกลเดียวกัน เงื่อนไขการเกิดการเลี้ยวเบนตามสมการที่ 3.1 จะเกิดขึ้นในทิศที่ขอบของทรงกลมตัดจุดแลตทิซส่วนกลับนี้ $P(h, k, l)$ จะเห็นเวกเตอร์ OP จึงเท่ากับ H_{hkl} และ $(S - S_0) / \lambda$ ทรงกลมนี้เรียกว่า "ทรงกลมของการสะท้อน" หรือ "Ewald sphere" การสร้างทรงกลมดังกล่าวข้างต้นจะช่วยให้เข้าใจเงื่อนไขการเกิดการเลี้ยวเบนของการเลี้ยวเบนของการถ่ายภาพแบบต่าง ๆ ได้ง่ายขึ้น

3.2.2 หลักการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนแบบผง

การถ่ายภาพการเลี้ยวเบนแบบผง จะให้รังสีเอกซ์ความยาวคลื่นเดี่ยวตกกระทบผลึกที่บดเป็นผง แต่ละผลึกผงจะมีหน้าผลึกวางสุ่มกระจายทั่วทุกมุม ฉะนั้นรังสี (เอกซ์) ตกกระทบในแนวหนึ่งจะมีหน้าผลึกทำมุมต่าง ๆ กันทุกมุม พิจารณาจุด P_1 (ระนาบ hkl) ใด ๆ ในแลตทิซส่วนกลับ (ในรูปที่ 3.5ก) ในขีดของผงผลึกที่มีระนาบ hkl ทำมุมกับแกนที่ตั้งฉากกับ OO เท่ากับที่จุด P_1 ย่อมมีจุดหนึ่ง P_2 ซึ่งอยู่บนทรงกลมของการสะท้อน และยังมีเขตของผงผลึกอีกเขตหนึ่งที่มีหน้าผลึกทำมุมกับแกน OC เท่ากับที่จุด P_2 ซึ่งจะตัดทรงกลมของการสะท้อนเป็นรูปวงกลมเล็ก ($P_2 P_3$) นั่นคือรังสีเลี้ยวเบน (H) ที่ระนาบ hkl ใด ๆ จะกวาดเป็นรูปกรวยรอบแกนของรังสีตกกระทบ OO จำนวนขีดของระนาบที่เกิดการเลี้ยวเบนจะขึ้นกับขนาดของความยาวคลื่นและค่าพารามิเตอร์ของโครงผลึก (ขนาดของทรงกลมของการสะท้อนและขนาดของแลตทิซกลับ) ขอบเขตของจุดแลตทิซกลับ (ระนาบ) ที่ยังคง

เกิดการเลี้ยวเบนจะเกิดจากการหมุนทรงกลมของการสะท้อนรอบจุด O ซึ่งเรียกว่า "ทรงกลมขีดจำกัด" (รูปที่ 3.5ข) ทุกจุดแลตทิซส่วนกลับในทรงกลมขีดจำกัดนี้จะสามารถตัดกับทรงกลมของการสะท้อนได้ จำนวนจุดแลตทิซส่วนกลับในทรงกลมขีดจำกัดต่อปริมาตรจะเท่ากับ $n = (4\pi/3)(2/\lambda)^3/v = 32\pi V/3\lambda^3$ เมื่อ V และ v เป็นปริมาตรของเซลล์หน่วยของผลึกและแลตทิซส่วนกลับ แต่ n จะไม่เป็นระนาบของการเลี้ยวเบนทั้งหมด เพราะการเลี้ยวเบนที่บางระนาบมีความเข้มเป็นศูนย์ (ดังจะได้อธิบายใน 3.2.4)



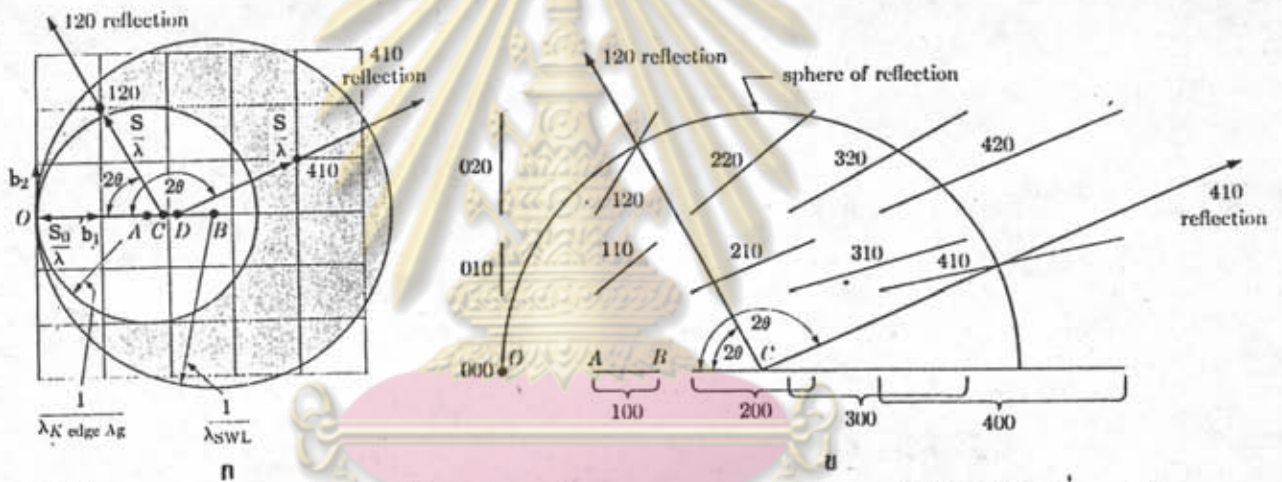
รูปที่ 3.5 ก) แสดงการเกิดกรวยของรังสีเลี้ยวเบน ข) ทรงกลมขีดจำกัด ในการถ่ายภาพแบบผง

3.2.3 หลักการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนแบบเลาเอ

การถ่ายภาพ โดยวิธีนี้รังสีเอกซ์ที่ตกกระทบก่อนผลิตจริงจะมีความยาวคลื่นต่อเนื่อง ทำให้รัศมีของทรงกลมของการสะท้อนเปลี่ยนอย่างต่อเนื่อง จุดศูนย์กลางของทรงกลมจึงเลื่อนไปพร้อม ๆ กันดังในรูป 3.6ก ที่ผิวทรงกลมของการสะท้อนทุกรูปจะต้องผ่านจุดเริ่มต้นของแลตทิซส่วนกลับ ขอบเขตของการเกิดการเลี้ยวเบน พิจารณาจากช่วงของความยาวคลื่น ในช่วงความยาวคลื่นสั้นรังสีเอกซ์จะลดลงอย่างรวดเร็วที่ λ_{swL} [37] ส่วนในช่วงความยาวคลื่นยาวพิจารณาจากขอบการดูดกลืน K ของเงิน (0.48A) เพราะความไวของการตอบสนองของฟิล์มจะลดลงอย่างรวดเร็วที่ความยาวคลื่นนี้ แต่ละจุดแลตทิซส่วนกลับในบริเวณแรกในรูป 3.6ก จะอยู่บนผิวของทรงกลมของการสะท้อนหนึ่ง ๆ ซึ่งจะแทนหน้าผลึกที่เกิดการเลี้ยวเบนที่ความยาวคลื่นที่สอดคล้องกับรัศมีของทรงกลมนั้น

สมการที่ 3.1 สามารถเขียนอยู่ในรูปที่ไม่มีหน่วยได้เป็น $S-S_0 = \lambda H$ โดยจากข้างซ้ายของสมการรัศมีของทรงกลมของการสะท้อนจะยาวหนึ่งหน่วย และจากข้างขวาของ

สมการตำแหน่งของแลตทิซส่วนกลับจะขึ้นกับความยาวคลื่นด้วย แต่ละจุดของแลตทิซส่วนกลับจะเป็นส่วนของเส้นตรงที่ลากจากจุดเริ่มต้นดังในรูป 3.6g เส้นของแลตทิซกลับ (100) จะลากจาก A ถึง B โดยระยะ $OA = \lambda_{\min} H_{100}$ และ $OB = \lambda_{\max} H_{100}$ เมื่อเส้นของแลตทิซกลับตัดกับทรงกลมของการสะท้อนจะเกิดการเลี้ยวเบนขึ้น เนื่องจากรังสีของการเลี้ยวเบนจะลากจากจุด C (คงที่) จึงง่ายต่อการเปรียบเทียบมุมของการเลี้ยวเบนกว่าวิธีในรูปที่ 3.6g การเลี้ยวเบนจากระนาบของโซนเดียวกัน (เข็ชต์ของระนาบที่มีเส้นตรงเส้นหนึ่งร่วมกัน เส้นตรงนี้จะแบนแกนโซน) จะมีลักษณะเป็นรูปกรวยที่มีแกนโซนเป็นแกนกรวยซึ่งสามารถแสดงได้ง่ายโดยวิธีนี้ เส้นของแลตทิซส่วนกลับของระนาบโซนหนึ่ง ๆ จะอยู่บนระนาบ (สอดคล้องกับแกนโซน) เดียวกัน ระนาบนี้จะตัดทรงกลมของการสะท้อนเป็นวงกลม ดังนั้นรังสีเลี้ยวเบนจึงมีลักษณะเป็นกรวยที่ตัดทรงกลมของการสะท้อนเป็นวงกลม



รูปที่ 3.6 ทรงกลมของการสะท้อนของการถ่ายภาพแบบเลาเอ ก) แลตทิซส่วนกลับคงที่ ข) แลตทิซส่วนกลับเปลี่ยนตามความยาวคลื่น

3.2.4 ความเข้มของการเลี้ยวเบน

ศูนย์วิทยทรัพยากร จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สมการที่ 3.1 ใช้อธิบายเงื่อนไข (ตำแหน่ง) ของการเกิดการเลี้ยวเบน การพิจารณาหาความเข้มของการเลี้ยวเบนจะต้องคำนวณการกระเจิงจากการกระจายของอิเล็กตรอนในแต่ละเซลล์หน่วย แอมพลิจูด (dA) ของคลื่นที่กระเจิงออก (ในทิศ S) จากปริมาตรเล็ก ๆ (dV) ซึ่งอยู่ห่าง r จะขึ้นกับความเข้มชั้นของอิเล็กตรอน $n(r)$ และความต่างเฟส $(2\pi/\lambda)(S-S_0) \cdot \lambda$ ฉะนั้นแอมพลิจูดรวมจากผลึก N เซลล์จะมีค่าเป็น

$$A = N \int_{\text{cell}} dV n(r) \exp[(2\pi i/\lambda)(S-S_0) \cdot r] = N \int_{\text{cell}} dV n(r) \exp(2\pi i H \cdot r)$$

เขียน $n(r)$ อยู่ในรูปของความเข้มชั้นของอิเล็กตรอนที่แต่ละอะตอม j ได้เป็น [38]

$$A = n \sum_j \int dV n_j (\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}) = N \sum_j \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_j) \int dV n_j(\mathbf{R}) \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{R})$$

$$= N \sum_j f_j \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_j) = N \sum_j f_j \exp[2\pi i (x_j h + y_j k + z_j l)] = N F_{hkl} \quad (3.3)$$

เมื่อ $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_j$, f_j เป็น atomic form factor หรือ atomic scattering factor ซึ่งคือ แอมพลิจูดของคลื่นที่กระเจิงออกจากอะตอม j เทียบกับการกระเจิงจากหนึ่งอิเล็กตรอน และ F_{hkl} เป็นแฟคเตอร์โครงสร้าง (structure factor) ของระนาบ hkl หรือคือ แอมพลิจูดที่กระเจิงจากอะตอมทั้งหมดในหนึ่งเซลล์หน่วย เทียบกับการกระเจิงจากหนึ่งอิเล็กตรอน ความเข้มของการกระเจิงขึ้นกับกำลังสองของแอมพลิจูด หรือ $|F_{hkl}|^2$

ในกรณีโครงสร้างผลึกแบบ FCC ประกอบด้วยสี่อะตอมที่ตำแหน่ง $0,0,0$; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$; $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ และ $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ เมื่อนำไปแทนค่าในสมการที่ 3.3 จะได้

$$F_{hkl} = f(1 + \exp[\pi i(h+k)] + \exp[\pi i(h+l)] + \exp[\pi i(k+l)])$$

ในกรณีที่ h, k และ l มีค่าเป็นเลขคู่หรือคี่ทั้งหมด $F_{hkl} = 4f$ แต่ถ้า h, k และ l มีค่าทั้งเลขคู่และเลขคี่ $F_{hkl} = 0$ คือจะไม่มีเส้นเลี้ยวเบนที่ระนาบ (hkl) ผลสมเลขคู่และคี่ โครงสร้าง ZnSe แบบซิงค์เบลนด์ประกอบด้วย FCC ของอะตอม Zn และ Se อย่างละสี่อะตอมที่ตำแหน่ง $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ และ $0, 0, 0$ (ดังกล่าวใน 3.1.1) พิจารณาแต่เฉพาะกรณีที่ h, k และ l เป็นเลขคู่หรือเลขคี่ทั้งหมด ดังนั้น

$$F_{hkl} = 4(f_{Se} + f_{Zn} \exp[(\pi/2)(h+k+l)])$$

$$\text{ความเข้มหรือ } |F_{hkl}|^2 = 16(f_{Se}^2 + f_{Zn}^2 + 2f_{Se}f_{Zn} \cos[(\pi/2)(h+k+l)])$$

ที่ค่า hkl ต่าง ๆ ความเข้มของการกระเจิงจากโครงสร้างซิงค์เบลนด์มีได้สามค่าคือ

$(h+k+l)$	$2n+1$	$2(2n+1)$	$4n$
$ F_{hkl} ^2$	$16(f_{Se}^2 + f_{Zn}^2)$	$16(f_{Se} - f_{Zn})^2$	$16(f_{Se} + f_{Zn})^2$

เมื่อ $n=0, 1, 2, \dots$ โดยค่า f_{Se} และ f_{Zn} ที่มุมต่าง ๆ แสดงไว้ในตารางที่ 3.2 [39]

ความเข้มของการเลี้ยวเบนแบบผงยังขึ้นกับแฟคเตอร์อื่น ๆ อีก เส้นของการเลี้ยวเบนที่เกิดจากชุดระนาบที่มีระยะห่างระหว่างระนาบเท่ากัน จะอยู่ที่ตำแหน่งเดียวกัน ดังนั้น ถ้ามีชุดระนาบจำนวนมากเส้นของการเลี้ยวเบนจึงเข้มมาก จำนวนระนาบในแต่ละชุดเรียกว่า Multiplicity factor (M) สำหรับโครงสร้างลูกบาศก์ที่ระนาบ $hkl, hh1, 0kl,$

Okk, hhh และ 00l แฟคเตอร์ M จะมีค่าเป็น 48, 24, 24, 12, 8 และ 6 ตามลำดับ [37] แฟคเตอร์ทางตรีโกณมิติที่ส่งผลต่อความเข้มของการเลี้ยวเบนเรียกว่า Lorentz factor แฟคเตอร์นี้รวมกับผลของโพลาไรส์ (ทิศทางการสั่นของอิเล็กตรอนต่อทิศทาง การเลี้ยวเบน) จะมีค่าเป็น $(1+\cos^2 2\theta)/(\sin^2 \theta \cos \theta)$ [37]

	$\sin \theta / \lambda$	0	.1	.2	.3	.4	.5	.6	.7	.8	.9	1.0	1.1	1.2
Zn	30	26.8	22.4	18.6	15.8	13.9	12.2	10.7	9.6	8.5	7.6	6.9	6.3	
Se	34	30.6	25.8	21.5	18.3	16.1	14.3	12.6	11.2	10.0	9.0	8.2	7.5	

ตารางที่ 3.2 แสดง atomic scattering factor ของ Zn และ Se [39]

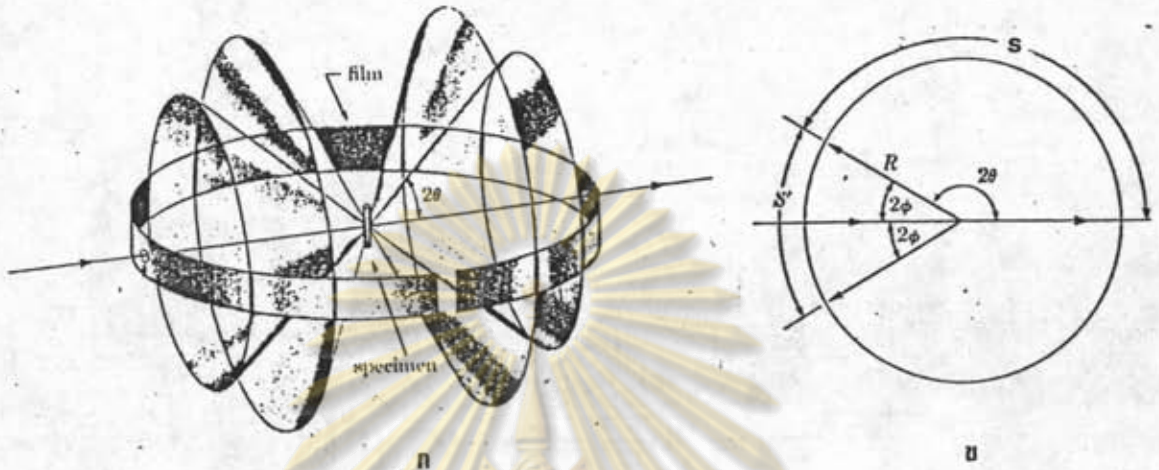
3.3 วิธีถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์แบบผง

ได้วิเคราะห์โครงสร้างผลึกที่เตรียมขึ้นมาโดยการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ด้วย กล้อง Debye-Scherrer ซึ่งมีลักษณะดังในรูปที่ 3.7k รังสีเอกซ์จากเป้า Cu ผ่านฟิลเตอร์ Ni เพื่อตัดให้ความยาวคลื่นเฉพาะบางค่าเท่านั้นที่ผ่านออกไปได้ ซึ่งได้แก่ $\lambda(K\alpha_1) = 1.54051$ และ $\lambda(K\alpha_2) = 1.54433 \text{ \AA}$ แต่เนื่องจาก $\lambda(K\alpha_1)$ มีความเข้มมากกว่า $\lambda(K\alpha_2)$ ดังนั้นความยาวคลื่นเฉลี่ยจึงคำนวณให้เท่ากับของ $\lambda(K\alpha_1)$ เป็นสองเท่าของ $\lambda(K\alpha_2)$ ได้ $\lambda(K\alpha) = 1.54178 \text{ \AA}$ [37] รังสีเอกซ์ที่ความยาวคลื่นนี้จะตกกระทบผงผลึกรูปทรงระบอบที่ จุดศูนย์กลางของกล้องแล้วเลี้ยวเบนออกเป็นรูปกรวย ส่วนของรูปกรวยจะตกกระทบฟิล์มเป็น ส่วนโค้งของวงกลม ระยะของส่วนโค้ง (S ดังในรูป 3.7ข) จะสัมพันธ์กับมุมของการ เลี้ยวเบน $\theta = S/2R$ เมื่อ R เป็นรัศมีของกล้อง (57.3 mm) และจากกฎของแบร์รี่ก็จะได้

$$dS/dd = (dS/d\theta)(d\theta/dd) = (2R)[-1/d \tan \theta]$$

ดังนั้นกำลังแยกขยาย (resolving power) จะเท่ากับ $d/\Delta d = -(2R/\Delta S) \tan \theta$ ซึ่งจะเห็น ได้ว่าที่ θ มากกำลังแยกขยายจะดีขึ้นเป็นสัดส่วนกับ $\tan \theta$ ทำให้สามารถสังเกตเห็นการแยก ของเส้นเลี้ยวเบนของ $\lambda(K\alpha_1)$ กับ $\lambda(K\alpha_2)$ ที่ θ มากได้ ฉะนั้นในการคำนวณหาค่าคงที่ โครงผลึกอย่างละเอียดจึงใช้ค่าที่ θ ประมาณ 90° ดังจะได้กล่าวในหัวข้อ 3.3.3 เพื่อให้ ได้ข้อมูลที่ถูกต้องมาก ได้แก้ความคลาดเคลื่อนด้วยเส้นเลี้ยวเบนของผลึก Si ดังกล่าวไว้ในหัวข้อ

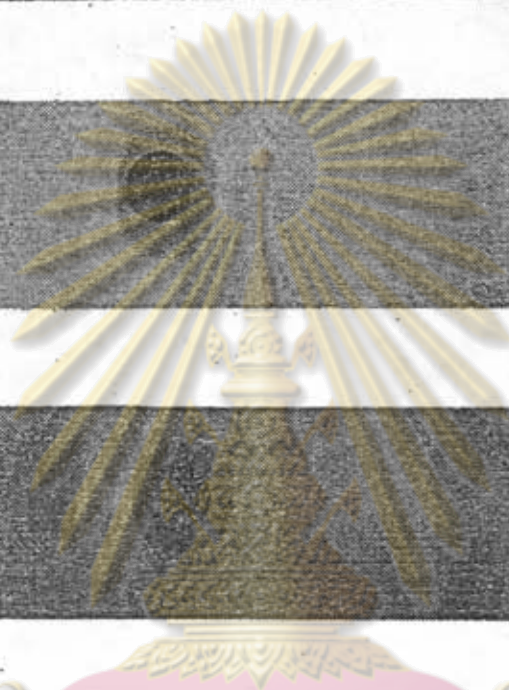
3.3.1 การระบุขนาดผลึกของแต่ละเส้นของการเลี้ยวเบนเพื่อหาชนิดของโครงสร้างผลึกได้
 กล่าวไว้ในหัวข้อ 3.3.2 ผลึกชนิดอื่นที่พบในการเตรียมผลึกจะได้อีกกล่าวในหัวข้อ 3.3.4



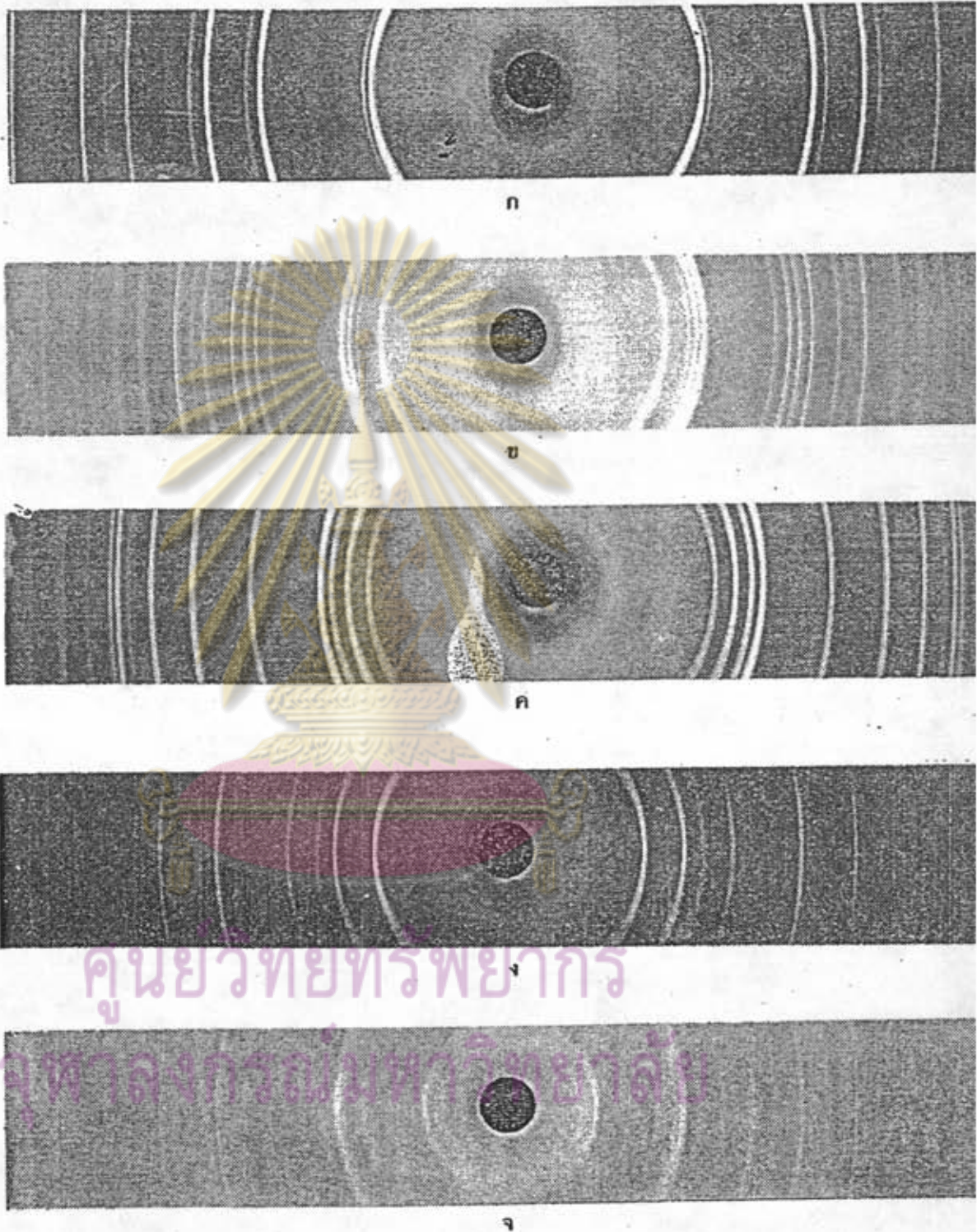
รูปที่ 3.7 การถ่ายภาพการเลี้ยวเบนแบบผงด้วยกล้อง Debye-Scherrer ก) ลักษณะการเกิด
 การเลี้ยวเบน ข) แสดงภาคตัดขวาง[37]

3.3.1 การเตรียมข้อมูลเส้นเลี้ยวเบน

ในการวิเคราะห์หาโครงสร้างผลึก, ค่าคงที่ของโครงสร้างผลึก และชนิดของอะตอมใน
 โครงสร้างผลึกที่ปลูกผลึกที่ปลูกได้ ได้นำผลึกมาวัดให้เป็นผง เติมน้ำมัน Si ลงไปหนึ่งในสามเพื่อ
 ใช้เป็นมาตรฐาน แล้วนำไปถ่ายภาพการเลี้ยวเบนแบบผงด้วยกล้อง Debye-Scherrer
 ดังกล่าวแล้วข้างต้น ภาพถ่าย(ฟิล์ม) ที่ได้จะมีเส้นเลี้ยวเบนเนื่องจากผลึกที่ปลูกได้และผลึก
 Si มาตรฐานดังแสดงในรูปที่ 3.8ก การวัดตำแหน่งของแต่ละเส้นของการเลี้ยวเบน
 จะวัดที่กึ่งกลางของส่วนโค้งของเส้นเลี้ยวเบน (ในแนวต่อจุดศูนย์กลางของรูปฟิล์ม) ด้วย
 travelling microscope ซึ่งวัดตำแหน่งได้ถูกต้องถึง 0.1 mm การวิเคราะห์โครงสร้างผลึก
 ได้คำนวณบนโปรแกรมอิเล็กทรอนิกส์เวิร์คชีต (electronic worksheet) ดังแสดง
 การคำนวณโครงสร้างผลึกที่ปลูกได้ (ของฟิล์มในรูปที่ 3.8ก) ดังในตารางที่ 3.5 คอลัมน์ X1
 และ X2 เป็นตำแหน่งของเส้นเลี้ยวเบนบนฟิล์มที่เป็นของกราฟการเลี้ยวเบนเดียวกันแต่อยู่คนละ
 ข้างของรังสีตกกระทบ I เป็นความเข้มของแต่ละเส้นเลี้ยวเบนเทียบกับเส้นที่มีความเข้ม
 มากที่สุด เขียนอยู่ในรูป $(I/I_{max}) \times 100$ หรือเขียนเป็นสัญลักษณ์เรียงตามความเข้ม (vs,
 s, m, w, vw, ni)[37] เส้นเลี้ยวเบนที่มน้อย ๆ จะไม่สังเกตเห็นการแยกเนื่องจาก
 $\lambda(K\alpha_1)$ และ $\lambda(K\alpha_2)$ การคำนวณจึงต้องใช้ λ เฉลี่ย ($\lambda = 3$) แต่ที่มนมากขึ้น
 การแยกขยายดีขึ้นเส้นเลี้ยวเบนจาก $\lambda(K\alpha_1)$ และ $\lambda(K\alpha_2)$ จะแยกกัน ($\lambda = 1$ และ 2)



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



รูปที่ 3.8 ภาพถ่ายการเลี้ยวเบนแบบผงด้วยกล้อง Debye-Scherrer ของ ก) ผลึกที่ปลูกได้
 ข) ก้อนสารสีดำที่เหลือจากการสังเคราะห์ ZnSe ค) ZnO ง) เกล็ดสีขาว
 ที่เหลือจากการปลูกผลึก ZnSe จากสถานะไอ จ) ผงสารประกอบ ZnSe สำเร็จ

ซึ่งจะสังเกตเห็นเป็นเส้นคู่ โดยเส้นที่ $\lambda(K\alpha_1)$ จะเข้มกว่า คอลลิเมตเตอร์ไปเป็นผลบวกของ X_1 กับ X_2 ซึ่งจะมีค่าใกล้เคียงกัน ($\pm 0.1\text{mm}$) ใช้เป็นค่าตรวจสอบความถูกต้องของตำแหน่งที่วัดได้ [40] ค่าคงที่ของผลบวกจะได้สองค่าซึ่งสอดคล้องกับตำแหน่งที่ $\theta = 0^\circ$ และ $\theta = 90^\circ$ (ตำแหน่งจุดศูนย์กลางของรูฟิล์ม) ระยะห่างระหว่างค่าเฉลี่ยทั้งสองจะมีค่าประมาณ 180 mm (สำหรับกล้องที่ใช้ที่มีเส้นผ่านศูนย์กลางยาว 114.6 mm) แต่เนื่องจากการยึดหดของฟิล์ม, ความผิดพลาดของรัศมี และการผิดตำแหน่งของตัวทำขนาน (collimator) ทำให้ระยะดังกล่าวผิดไป จึงใช้ระยะห่างนี้เป็นแพดเตอร์แก้ไขในการคำนวณหา θ [40] S คำนวณจากระยะห่าง X_1 ถึง X_2 โดย $\theta = S/2R$ เมื่อ R คำนวณจากระยะห่างระหว่างค่าเฉลี่ยแต่ละค่า θ ที่คำนวณได้จึงเชื่อถือได้มากเพราะมาจากข้อมูลสองจุด แต่ในบางเส้นบริเวณกลางฟิล์มจะได้เส้นเลี้ยวเบนเพียงเส้นเดียวจึงจำเป็นต้องใช้ค่าที่ลบจากค่าเฉลี่ย ในเส้นที่มีความเข้มมากจะมีความหนาแน่นมาก ตำแหน่งกลางเส้นหาได้จากการเฉลี่ยค่าจากขอบความหนาทั้งสองของเส้นนั้น $ADJ(S)$

ในการถ่ายภาพผลึกผงได้ผลผลึก Si มาตรฐาน เพื่อใช้เทียบตำแหน่งและความเข้มของเส้นเลี้ยวเบน เทียบ θ_{s_1} ที่คำนวณได้กับ θ_{s_1} มาตรฐาน (ในภาคผนวก ก) นำค่า s_{s_1} กับ θ_{s_1} มาตรฐานไปหาสมการถอดถอยเชิงเส้น ใช้สมการนี้แปลง s ของเส้นเลี้ยวเบนอื่นที่คำนวณได้ในครั้งแรกไปเป็นค่าแก้ของมุม $COR(TH)$ [37] ค่า $COR(TH)$ และ $LAMDA$ จะใช้คำนวณระยะระหว่างระนาบสะท้อนของผลึก (D) ตามกฎของแบร์ริก ซึ่งค่า D นี้จะเป็นข้อมูลที่สำคัญในการระบุระนาบของเส้นเลี้ยวเบนต่อไป

3.3.2 ศูนย์วิทยุทรัพยากร

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

จากหลักการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนแบบผงในหัวข้อ 3.2.2 ได้กล่าวแล้วว่าเส้นเลี้ยวเบนแต่ละเส้นจะเกิดจากการเลี้ยวเบนที่แต่ละระนาบ แต่ละเส้นของการเลี้ยวเบนจึงสามารถระบุได้ด้วยระนาบ ความสัมพันธ์ระหว่างระนาบที่เส้นเลี้ยวเบนแบบ(แพทเทริน) ต่าง ๆ จะทำให้ทราบชนิดของโครงสร้างผลึก ข้อมูลความเข้ม (ดังกล่าวใน 3.2.4) ของแต่ละเส้นเลี้ยวเบนจะทำให้สามารถระบุชนิดของอะตอมในผลึกได้ วิธีหนึ่งในการระบุระนาบการเลี้ยวเบน (hkl) ทำได้ในเทอมของผลคูณสเกลลาร์ของเวกเตอร์แลตทิซส่วนกลับ ($Q_{hkl} = 1/d_{hkl}^2$) [40] ในระบบผลึกต่าง ๆ Q_{hkl} จะมีค่าเป็นบางจำนวนเต็มเท่าของค่าคงที่แลตทิซส่วนกลับ (a^*, b^*, c^*)

KAI= 1.5405 KA2= 1.5443 KA= 1.5418															
LINE	X1	X2	I	LAMDA	X1+X2	S	ADJ(S)	THETA	Y(SI)COR(TH)	SIN	D	Q	H,K,L	A	
1	23.005	17.6	100	3	40.605	2.7025		0	0	0	0	0		0	
2	23.045	17.56	100	3	40.605	2.7425	2.7225	.23778	.23757	.23534	3.2756	.09320	111	5.6736	
3	23.135	17.475	80	3	40.61	2.83		0	0	0	0	0		0	
4	23.16	17.45	80	3	40.61	2.855	2.8425	.24826	.24840	.24805	3.1399	.10143		0	
5	23.465	17.15	5	3	40.615	3.1575	3.1575	.27578	.27555	.27208	2.8333	.12457	200	5.6667	
6	24.8	15.805	100	3	40.605	4.4975		0	0	0	0	0		0	
7	24.855	15.76	100	3	40.615	4.5475	4.5225	.39500	.39474	.38456	2.0046	.24886	220	5.6698	
8	25.04	15.575	40	3	40.615	4.7325	4.7325	.41334	.41314	.41307	1.9204	.27116		0	
9	25.65	14.96	100	3	40.61	5.345		0	0	0	0	0		0	
10	25.69	14.92	100	3	40.61	5.385	5.365	.46858	.46830	.45137	1.7079	.34283	311	5.6645	
11	25.925	14.685	30	3	40.61	5.62	5.62	.49085	.49018	.49056	1.6363	.37349	222	5.6683	
12	26.89	13.72	45	3	40.61	6.585	6.585	.57513	.57482	.54368	1.4179	.49740	400	5.6716	
13	27.225	13.385	15	3	40.61	6.92	6.92	.60439	.60381	.60407	1.3572	.54289		0	
14	27.57	13.035	70	3	40.605	7.2675	7.2675	.63474	.63441	.59270	1.3006	.59114	331	5.6693	
15	27.79	12.815	7	3	40.605	7.4875	7.4875	.65396	.65362	.60807	1.2678	.62218	420	5.6697	
16	27.95	12.665	17	3	40.615	7.6425	7.6425	.66750	.66712	.66716	1.2459	.64425		0	
17	28.65	11.96	90	1	40.61	8.345	8.345	.72885	.72849	.66575	1.1570	.74705	422	5.6680	
18	28.67	11.935	70	2	40.605	8.3675	8.3675	.73082	.73046	.66721	1.1573	.74663	422	5.6696	
19	29.105		25	1	0	8.8003	8.8003	.76862	.76816	.76825	1.1085	.81385		0	
20	29.14		8	2	0	8.8353	8.8353	.77167	.77056	.77130	1.1077	.81495		0	
21	29.285		40	1	0	8.9803	8.9803	.78434	.78396	.70609	1.0909	.84034	511	5.6683	
22	29.31		30	2	0	9.0053	9.0053	.78652	.78615	.70764	1.0912	.83984	511	5.6700	
23	29.795	46.785	15	1	76.58	9.4898	9.4898	.82884	.82857	.82845	1.0453	.91524		0	
24	29.825	46.76	10	2	76.585	9.5173	9.5173	.83124	.83128	.83085	1.0456	.91472		0	
25	30.345	46.24	40	1	76.585	10.037	10.037	.87666	.87626	.76835	1.0025	.99506	440	5.6709	
26	30.375	46.2	30	2	76.575	10.072	10.072	.87972	.87931	.77030	1.0024	.99518	440	5.6705	
27	31	45.585	60	1	76.585	10.692	10.692	.93387	.93345	.80368	.95841	1.0887	531	5.6700	
28	31.035	45.545	50	2	76.58	10.730	10.730	.93714	.93672	.80562	.95847	1.0885	531	5.6704	
29	31.22		1	1	0	10.915	10.915	.95334	.95292	.81511	.94497	1.1199	600	5.6698	
30	31.71	44.87	22	1	76.58	11.405	11.405	.99610	.99557	.99566	.83912	.91793	1.1868		0
31	31.75	44.825	15	2	76.575	11.447	11.447	.99981	.99941	.99937	.84113	.91801	1.1866		0
32	32.15	44.435	80	1	76.585	11.842	11.842	1.0343	1.0339	.85928	.89640	1.2445	620	5.6693	
33	32.195	44.385	60	2	76.58	11.890	11.890	1.0385	1.0380	.86139	.89641	1.2445	620	5.6694	
34	32.895	43.68	60	1	76.575	12.592	12.592	1.0998	1.0993	.89091	.86457	1.3378	533	5.6694	
35	33.045	43.53	20	1	76.575	12.742	12.742	1.1129	1.1124	.89678	.85891	1.3555		0	
36	33.1	43.46	15	2	76.56	12.805	12.805	1.1184	1.1179	.89918	.85874	1.3561		0	
37	33.98	42.595	10	1	76.575	13.677	13.677	1.1946	1.1945	1.1941	.92988	.82834	1.4574		0
38	34.055	42.525	5	2	76.58	13.750	13.750	1.2009	1.2008	1.2004	.93219	.82834	1.4574		0
39	34.35	42.225	30	1	76.575	14.047	14.047	1.2269	1.2264	.94128	.81831	1.4934	444	5.6694	
40	34.435	42.15	20	2	76.585	14.127	14.127	1.2339	1.2334	.94361	.81831	1.4934	444	5.6694	
41	35.5	41.08	70	1	76.58	15.195	15.195	1.3271	1.3266	.97033	.79381	1.5870	551	5.6689	
42	35.615	40.965	60	2	76.58	15.310	15.310	1.3372	1.3366	.97271	.79383	1.5869	551	5.6691	
43	35.99	40.59	1	1	76.58	15.685	15.685	1.3699	1.3694	.97978	.78615	1.6180	640	5.6690	
44	36.155	40.425	3	1	76.58	15.850	15.850	1.3843	1.3841	1.3838	.98256	.78393	1.6272		0
45	36.33	40.255	1	2	76.585	16.022	16.022	1.3994	1.3977	1.3988	.98525	.78372	1.6281		0
			18	X0 = 20.305					15.024				25	141.73	
			22	X0' = 38.290					17				A = 5.6694		
					S = 17.985	eR = 11.449									

ตารางที่ 3.3 แสดงการคำนวณระบุนามของฟิล์มในรูปที่ 3.8ก

Cubic: $Q_{hkl} = 1/d_{hkl}^2 = (h^2+k^2+l^2)/a^2 = N_C a^{*2}$
 $N_C = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, \dots$ (FCC ; $N_C = 3, 4, 8, 11, 12, \dots$)

Tetragonal: $Q_{hkl} = [(h^2+k^2)/a^2] + (l^2/c^2) = N_T a^{*2} + l^2 c^{*2}$
 $N_T = 1, 2, 4, 5, 8, 9, 10, \dots$

Hexagonal: $Q_{hkl} = [(4/3)(h^2+hk+k^2)/a^2] + (l^2/c^2) = N_H a^{*2} + l^2 c^{*2}$
 $N_H = 1, 3, 4, 7, 9, 12, 13, \dots$

ชุดของจำนวนเต็มหาได้จากการพิจารณาจำนวนเท่าของค่า Q_{hkl} และค่าความแตกต่างระหว่าง Q_{hkl} ของเส้นเลี้ยวเบนทั้งหมด ข้อมูลความเข้ม (แฟคเตอร์โครงสร้าง) ใช้ช่วยพิจารณาการระบุนาม ค่า Q_{hkl} ที่คำนวณจาก D ในตารางที่ 3.3 พบว่าเป็นจำนวนเต็มเท่าของค่าคงที่เพียงค่าเดียว ซึ่งแสดงว่าเป็นการเลี้ยวเบนจากโครงผลึกลูกบาศก์ การเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ แพทเทิร์นของการเลี้ยวเบนแสดงถึงโครงผลึกแบบ FCC อย่างชัดเจน คือ ไม่เห็นเส้นเลี้ยวเบนของระนาบที่มี hkl เป็นจำนวนคู่และคี่ปนกัน (ตามแฟคเตอร์โครงสร้างของ FCC) แสดงความเป็นซิงค์เบลนด์ (ดังในสมการ 3.5) คือ เส้นที่ระนาบ $h+k+l = 4n$ เช่น $(220)_{12}$, $(400)_8$, $(422)_{24}$ เข้มมาก, เส้นที่ $h+k+l = 2n+1$ เช่น $(111)_6$, $(311)_{24}$ จะเข้มปานกลาง และเส้นจะจางเมื่อ $h+k+l = 2(2n+1)$ เช่น $(200)_4$, $(222)_8$, $(420)_{24}$ โดยที่ $n = 0, 1, 2, \dots$ และตัวเลขห้อยท้ายเป็นแฟคเตอร์ซ้ำสรุปได้ว่าผลึกที่ปลูกได้มีโครงผลึกแบบซิงค์เบลนด์เพียงอย่างเดียว (ทุกเส้นสามารถระบุนามได้ด้วยโครงผลึกแบบนี้ได้หมด) และไม่สังเกตเห็นเส้นเลี้ยวเบนของผลึกเจือปน

อีกวิธีหนึ่งในการระบุหน้าผลึก โดยเฉพาะอย่างยิ่งในการหาว่าเป็นผลึกของสารใดนั้น ใช้วิธีเปรียบเทียบค่าระยะห่างระนาบ d และค่าความเข้ม I กับค่าในในแฟ้มการเลี้ยวเบนผลึกผง (powder diffraction file) [41] ซึ่งให้ไว้ในภาคผนวก ก ค่า d และ I ของผลึกที่ปลูกได้ในตารางที่ 3.3 สอดคล้องกับในแฟ้มการเลี้ยวเบนของผลึกผง ZnSe แบบลูกบาศก์ซิงค์เบลนด์ที่มีค่าคงที่โครงผลึก $a = 5.667 \text{ \AA}$ ในตารางที่ 3.3 ยังได้แสดงเส้นการเลี้ยวเบนที่มุมกว้างมาก (551) และ (640) ซึ่งไม่ปรากฏในตารางของแฟ้มการเลี้ยวเบนแบบผง

3.3.3 การคำนวณค่าคงที่โครงผลึกอย่างละเอียด

จากแต่ละค่าระยะห่าง d ระหว่างระนาบ (hkl) ของผลึกลูกบาศก์ ZnSe ใน

ตารางที่ 3.3 จะคำนวณหาค่าคงที่โครงผลึก a ได้ โดย $a_{hkl} = d_{hkl} / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$ แต่ละ a_{hkl} ที่คำนวณได้จากแต่ละเส้นเลี้ยวเบน (แต่ละ h, k, l) จะมีค่าใกล้เคียงกัน โดยค่าคงที่โครงผลึก a_{hkl} จะถูกต้องมากขึ้นเมื่อ θ มากขึ้นดังกล่าวมาแล้วข้างต้น ต่อไปจะพิจารณาสาเหตุของความผิดพลาดเพื่อนำไปใช้คำนวณค่าคงที่โครงผลึกอย่างละเอียด สาเหตุที่ทำให้ค่า θ ที่วัดได้มีความผิดพลาดได้แก่ 1) การยึดหดของฟิล์ม ขณะวัดหรือขณะทำให้แห้ง ซึ่งทำให้ S' เปลี่ยนไป $\Delta S'$ 2) ความผิดพลาดของรัศมีกล้อง ΔR จาก $\phi = S'/4R$ หรือ $\ln \phi = \ln S' - \ln 4 - \ln R$ เมื่อหาอนุพันธ์จะได้ $\Delta \phi / \phi = \Delta S' / S' - \Delta R / R$ 3) การที่ผลึกตัวอย่างเลื่อนไปจากตำแหน่งจุดศูนย์กลางจะทำให้ค่า S' ผิดไป ถ้ามีการเลื่อนผลึก (Δx) ขนานกับทิศรังสีที่พุ่งเข้าค่า S' จะผิดพลาดไปประมาณเท่ากับ $\Delta S' = 2\Delta x \sin 2\phi$ แต่ถ้าผลึกเลื่อนไปในทิศตั้งฉากกับรังสีตกกระทบ (Δy) จะไม่ทำให้ค่า S' เปลี่ยนไป [37] ดังนั้นความผิดพลาดของ R ค่าความผิดพลาดจากการเลื่อนตำแหน่งผลึก ทำให้ ϕ ผิดพลาดไป

$$\Delta \phi = \phi \Delta S' / S' = \phi (2\Delta x \sin 2\phi) / 4R\phi = (\Delta x / R) \sin \phi \cos \phi$$

4) การดัดโค้งของผลึกตัวอย่าง ผงผลึกส่วนผิวหน้าของทรงกระบอกเฉพาะด้านที่รังสีตกเท่านั้นที่จะมีผลให้รังสีเลี้ยวเบน ส่วนอื่นรังสีจะถูกดัดโค้งหมดก่อน ดังนั้นผลการดัดโค้งจึงประมาณเสมือนการเลื่อนตำแหน่งของผลึกไปจากจุดศูนย์กลาง จาก $\phi = 90^\circ - \theta$ ผลรวมความผิดพลาดทั้งหมดจึงเป็น

$$\frac{\Delta d}{d} = -\Delta \theta \cot \theta = \frac{\Delta \phi \sin \phi}{\cos \phi} = \frac{\sin \phi}{\cos \phi} \frac{\Delta S'}{S'} - \frac{\Delta R}{R} \phi + \frac{\Delta x}{R} \sin \phi \cos \phi \quad (3.6)$$

ในบริเวณสะท้อนกลับ ϕ มีค่าน้อยจึงประมาณ $\Delta d/d$ ด้วย $K \sin^2 \theta$, $K \cos^2 \theta$ หรือ $K \phi \tan \phi$ ในกรณีของโครงผลึกลูกบาศก์ $a = d / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$ เพราะฉะนั้น $\Delta a/a = \Delta d/d$ ดังนั้นกราฟระหว่างค่า a ของแต่ละเส้นเลี้ยวเบนที่คำนวณได้กับ $\sin^2 \theta$ ($\cos^2 \theta$ หรือ $\phi \tan \phi$) จะได้เป็นเส้นตรง และค่าที่ถูกต้องของ $a(a_0)$ หาได้จากการ extrapolate เส้นตรงนี้ที่ $\sin^2 \theta = 1$ ($\cos^2 \theta = 0$ หรือ $\phi \tan \phi = 0$) กราฟระหว่าง a กับ $\sin 2\theta$ ของข้อมูลในตารางที่ 3.3 แสดงได้ดังในรูปที่ 3.9g ที่ $\sin \theta = 1$ ได้ค่าคงที่โครงผลึก $a_0 = 5.6683 \pm 0.0003 \text{ \AA}$

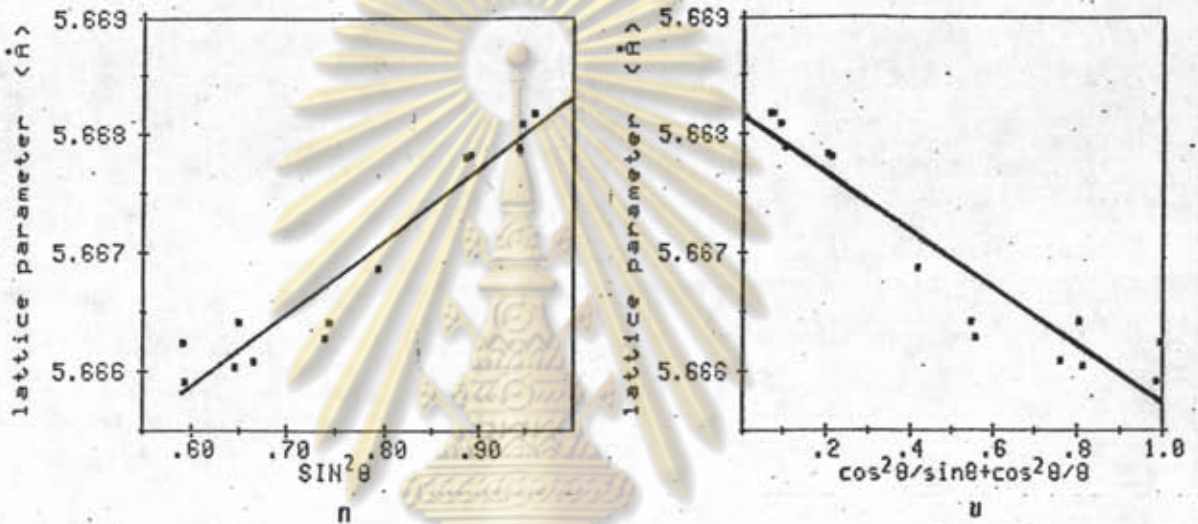
จากกราฟระหว่างค่า a กับ $\sin^2 \theta$ ในรูปที่ 3.9g นั้นจะใช้แก้ความผิดพลาดได้ดีเมื่อมีเส้นเลี้ยวเบนที่มุมกว้าง ($\theta > 60^\circ$) จำนวนมาก [37] การขยายช่วงความเป็นเส้นตรงกับฟังก์ชันที่เหมาะสมทำได้โดยพิจารณาผลความผิดพลาดให้ละเอียดขึ้น โดยเฉพาะผลจากการดัดโค้ง การดัดโค้งของผงผลึกรูปทรงกระบอกจากรังสีขนานหรือรังสีที่บานออกจะทำให้โปรไฟล์ความเข้มของแต่ละเส้นเลี้ยวเบน มีรูปร่างแตกต่างกัน ที่แต่ละมุมเลี้ยวเบน

ตำแหน่งความเข้มสูงสุดของแต่ละเส้นจึงเลื่อนไปเป็นระยะ Δr ตัวอย่างเช่น เมื่อ

$$\Delta r = k(\cos\theta + (\sin 2\theta)/2\theta) \quad [41] \text{ และจาก } \Delta S = 2\Delta r \text{ จะได้}$$

$$\Delta a/a = -(\Delta S/4R)\cot\theta = -(k/2R)[(\cos^2\theta/\sin\theta) + (\cos^2\theta)/\theta]$$

ซึ่งจากข้อมูลในตารางที่ 3.3 เขียนกราฟระหว่าง a กับ $[(\cos^2\theta/\sin\theta) + (\cos^2\theta)/\theta]$ (ฟังก์ชัน Nelson-Riley) ดังในรูปที่ 3.9 จะได้เป็นเส้นตรงในช่วงกว้าง ที่ค่าฟังก์ชัน เป็นศูนย์จะได้ค่า $a_0 = 5.6682 \pm 0.0003 \text{ \AA}$



รูปที่ 3.9 กราฟระหว่างค่าคงที่โครงสร้างผลึก (a) ของผลึก ZnSe ซึ่งคำนวณได้กับ ก) ฟังก์ชัน $\sin^2\theta$ ข) ฟังก์ชัน Nelson-Riley

ความผิดพลาดที่เป็นระบบสามารถกำจัดได้ด้วยการเลือกฟังก์ชันข้างต้นที่เหมาะสม การทำให้ความผิดพลาดที่ไม่เป็นระบบให้มีค่าน้อยที่สุด ทำได้โดยใช้เทคนิคกำลังสองน้อยที่สุดของ Cohen [37] โดยพิจารณาจากฟังก์ชัน $\Delta d/d = K\cos^2\theta$, กฎของแบร์ก และความสัมพันธ์ของระนาบโครงผลึกลูกบาศก์ จะได้

$$\begin{aligned} \Delta \sin^2\theta &= \sin^2\theta_{(observed)} - \sin^2\theta_{(true)} = -2(\Delta d/d)\sin^2\theta = -K\sin^2 2\theta \\ &= \sin^2\theta - (\lambda^2/4a_0^2)(h^2+k^2+l^2) = K\sin^2 2\theta \end{aligned}$$

$$\sin^2\theta = C\alpha + A\delta \quad (3.8)$$

เมื่อ $C = \lambda^2/4a_0^2$, $\alpha = (h^2+k^2+l^2)$, $A = -K/10$ และ $\delta = 10\sin^2 2\theta$ แพลตฟอร์ม 10 ใน A และ δ เพิ่มเข้ามาเพื่อให้ค่าทั้งสองอยู่ในระดับขนาดเดียวกัน เมื่อเส้นเลี้ยวเบนที่ λ ต่างกันแยกออกจากกัน พิจารณาสมการ 3.8 ใหม่ในเทอมของ $\lambda(K\alpha)$

$$\frac{\lambda(K\alpha)^2 \sin^2\theta(K\alpha_1)}{\lambda(K\alpha_1)^2} = \frac{\lambda(K\alpha)^2}{\lambda(K\alpha_1)^2} \frac{\lambda(K\alpha_1)^2}{4a_0^2} \alpha + \frac{\lambda(K\alpha)^2}{\lambda(K\alpha_1)^2} A\delta(K\alpha_1)$$

=====																		
KA1= 1.5405		KA2= 1.5443		KA= 1.5418														
LINE	X1	X2	I	LAMDA	X1+X2	S	ADJ(S)	THETA	Y(SI)	COR(TH)	SIN	D	Q	SE	H,K,L	ZNSE		

1	21.105	16.41	70	3	37.515	2.3475	2.3475	.20518		.20480	.20337	3.7905	.06960	100				
2	21.48	16.03	30	3	37.51	2.725	2.725	.23818		.23781	.23557	3.2724	.09338			111		
3	21.61	15.91	80	3	37.52	2.85	2.85	.24910	.24840	.24874	.24618	3.1314	.10198					
4	21.7	15.815	100	3	37.515	2.9425		0		0	0	0	0					
5	21.75	15.755	100	3	37.505	2.9975	2.97	.25959		.25923	.25633	3.0074	.11057	101				
6	22.89	14.63	20	3	37.52	4.13	4.13	.36098		.36065	.35288	2.1846	.20954	110				
7	23.125	14.39	50	3	37.515	4.3675	4.3675	.38174		.38141	.37223	2.0710	.23315	102				
8	23.285	14.23	25	3	37.515	4.5275	4.5275	.39573		.39540	.38518	2.0014	.24965	111		220		
9	23.495	14.02	70	3	37.515	4.7375	4.7375	.41408	.41314	.41376	.40205	1.9174	.27201					
10	23.925	13.585	15	3	37.51	5.17	5.17	.45188		.45157	.43638	1.7666	.32044	201				
11	24.13	13.4	7	3	37.53	5.365	5.365	.46893		.46862	.45166	1.7068	.34327			311		
12	24.31	13.21	7	3	37.52	5.55	5.55	.48510		.48480	.46603	1.6542	.36546	300				
13	24.37	13.14	70	3	37.51	5.615	5.615	.49078	.49018	.49048	.47105	1.6365	.37338	112		222		
14	24.905	12.615	6	3	37.52	6.145	6.145	.53710		.53682	.51140	1.5074	.44009	202				
15	25.29	12.22	5	3	37.51	6.535	6.535	.57119		.57091	.54040	1.4265	.49141	210				
16	25.58	11.95	3	3	37.53	6.815	6.815	.59566		.59539	.56084	1.3745	.52928	211				
17	25.665	11.84	12	3	37.505	6.9125	6.9125	.60419	.60381	.60392	.56787	1.3575	.54265					
18	25.91	11.595	1	3	37.505	7.1575	7.1575	.62560		.62534	.58537	1.3169	.57661	113				
19	26.04	11.49	1	3	37.53	7.275	7.275	.63587		.63561	.59367	1.2985	.59307			331		
20	26.39	11.115	50	3	37.505	7.6375	7.6375	.66756	.66712	.66731	.61887	1.2456	.64449					
21	26.93	10.58	1	3	37.51	8.175	8.175	.71454		.71430	.65509	1.1768	.72213	104				
22	27.115	10.415	1	3	37.53	8.35	8.35	.72983		.72960	.66657	1.1565	.74767			422		
23	27.42		1	3	0	8.6622	8.6622	.75712		.75689	.68666	1.1227	.79342	302				
24	27.545		40	1	0	8.7872	8.7872	.76804	.76816	.76782	.69457	1.1090	.81313					
25	27.58		20	2	0	8.8222	8.8222	.77110	.77056	.77088	.69677	1.1082	.81424					
26	27.825		1	1	0	9.0672	9.0672	.79251		.79230	.71197	1.0819	.85439	213				
27	28.24		15	1	0	9.4822	9.4822	.82879	.82857	.82858	.73697	1.0452	.91545					
28	28.27	45.235	7	2	0	9.4890	9.4890	.82938	.83128	.82918	.73738	1.0472	.91193					
29	29.41	44.045	10	1	73.455	10.654	10.654	.93121	.93115	.93104	.80224	.96013	1.0848					
30	29.45	44.01	7	2	73.46	10.691	10.691	.93449	.93449	.93431	.80419	.96018	1.0847					
31	30.15	43.31	25	1	73.46	11.391	11.391	.99567	.99557	.99551	.83904	.91802	1.1866					
32	30.195	43.27	15	2	73.465	11.434	11.434	.99939	.99941	.99923	.84106	.91809	1.1864					
33	31.49	41.975	30	1	73.465	12.729	12.729	1.1126	1.1129	1.1125	.89679	.85891	1.3555					
34	31.55	41.91	20	2	73.46	12.791	12.791	1.1180	1.1180	1.1179	.89919	.85873	1.3561					
35	32.43	41.04	20	1	73.47	13.666	13.666	1.1945	1.1945	1.1944	.93000	.82823	1.4578					
36	32.505	40.955	9	2	73.46	13.746	13.746	1.2015	1.2008	1.2014	.93255	.82801	1.4586					
37	33.935	39.51	1	1	73.445	15.184	15.184	1.3272		1.3271	.97045	.79371	1.5874			551		
38	34.595	38.86	8	1	73.455	15.839	15.839	1.3844	1.3841	1.3844	.98267	.78384	1.6276					
39	34.755	38.695	3	2	73.45	16.001	16.001	1.3986	1.3977	1.3986	.98521	.78376	1.6279					

			22		X0 = 18.758							16.890						
			11		X0' = 36.729							19						
					S = 17.971	11.441												
=====																		

ตารางที่ 3.4 แสดงการคำนวณระบระนาบของฟิล์มในรูปที่ 3.8ข

แต่จากกฎของแบร็กก์ $[\lambda(K\alpha)^2/\lambda(K\alpha_1)^2]\sin^2\theta(K\alpha_1) = \sin^2\theta(K\alpha)$

$$\sin^2\theta(K\alpha) = [\lambda(K\alpha)^2/4a_0^2]\alpha + A([\lambda(K\alpha)^2/\lambda(K\alpha_1)^2]\delta(K\alpha_1)) \quad (4.9)$$

ดังนั้นในแต่ละเส้นเลี้ยวเบนที่ λ ต่างกัน เช่น $\lambda(K\alpha_1)$ หรือ $\lambda(K\alpha_2)$ จะคูณ δ ด้วยแฟคเตอร์

$$\lambda(K\alpha)^2/\lambda(K\alpha_1)^2 = 0.9967 \quad \text{หรือ} \quad \lambda(K\alpha)^2/\lambda(K\alpha_2)^2 = 1.00165 \quad \text{แล้วคำนวณด้วยวิธี}$$

กำลังสองน้อยสุดโดยมีสมการปกติเป็น

$$\Sigma\alpha\sin^2\theta = C\Sigma\alpha^2 + A\Sigma\alpha\delta \quad \text{และ} \quad \Sigma\delta\sin^2\theta = C\Sigma\alpha\delta + A\Sigma\delta^2$$

สำหรับข้อมูลในตารางที่ 3.3 จะได้

$$432.27 = 23357C + 3145.3A ; \quad 58.227 = 3145.3C + 634.80A$$

ซึ่งเมื่อแก้ระบบสมการเชิงเส้นของสมการปกติ จะได้ค่าคงที่โครงผลึก $a_0 = 5.6692 \text{ \AA}$

ค่าคงที่โครงผลึกที่คำนวณได้ทั้งหมดจะมีค่าอยู่ในช่วง $5.6682 \pm 0.0004 \text{ \AA}$

3.3.4 โครงผลึกแบบอื่น ๆ ที่พบในการเตรียมผลึก

ก้อนสารสีดำที่ได้จากการสังเคราะห์ ZnSe โดยตรงจากธาตุ (ในหัวข้อ 2.3.1) เมื่อนำมาบดจะมีสีเหลืองสด นำไปถ่ายภาพรังสีเอกซ์แบบผลึกผงได้แพทเทิร์นการเลี้ยวเบนแบบฟิล์มดังในรูป 3.8 ข ค่าระยะระหว่างระนาบ d คำนวณได้เช่นเดียวกับที่กล่าวข้างต้น (ในหัวข้อ 3.3.1) ดังแสดงตารางที่ 3.4 พบว่ามีค่า d บางค่าที่สอดคล้องกับการเลี้ยวเบนของผลึกลูกบาศก์ ZnSe ที่ระนาบ (111), (220), (311), (222), (331) และ (422) จะเห็นว่าความเข้มของเส้นเลี้ยวเบนที่เข้มที่สุด (111) ของผลึก ZnSe มีค่าเพียง 30 ซึ่งแสดงว่ามีผลึก ZnSe ปนอยู่ในปริมาณน้อย เส้นเลี้ยวเบนที่นอกเหนือไปจากเส้นของ Si และ ZnSe นำไปหาค่า d_{hkl} เพื่อหาระบบและระนาบผลึกอื่นที่ปนอยู่ (ในหัวข้อ 3.3.2) ซึ่งพบว่าเป็นโครงผลึกแบบเฮกซะโกนอล และเมื่อเทียบกับแฟ้มการเลี้ยวเบนผลึกผง (ในภาคผนวก ก) พบว่าเป็นผลึกของ Se มีบางเส้นในแฟ้มการเลี้ยวเบนที่ไม่พบในตารางที่ 3.4 ((200), (112), (103), (203), (212), (301), (302), (204), (311) และ (105)) ทั้งนี้เพราะมีความเข้มน้อยหรือทับกับเส้นของ Si ในการถ่ายภาพผลึกผงของสารสีเหลืองที่สังเคราะห์ได้ จะพบเส้นเลี้ยวเบนของผลึก Se บ้างแต่อาจ จะสังเกตเห็นได้ แต่เส้นที่ระนาบ (100), (101) และ (102) เท่านั้น โดยเส้นที่ระนาบ (101) ของ Se (เส้นที่มีความเข้มมากที่สุด) มีความเข้มประมาณ 10 เท่านั้น ส่วนเส้นของ ZnSe จะเข้มและสามารถสังเกตเห็นได้ครบทุกเส้น แต่ทุกครั้งที่ถ่ายภาพผลึกผงของสารที่สังเคราะห์ได้จะไม่สังเกตเห็นเส้นของ Zn ในบางครั้งก็การสังเคราะห์มีอากาศในหลอด

KA1= 1.5405 KA2= 1.5443 KA= 1.5418											ZNO		
LINE	X1	X2	I	LAMDA	X1+X2	S	THETA	Y(SI)COR(TH)	SIN	D	Q	H,K,L	
1	23.08	17.35	80	3	40.43	2.865	.25016	.24840	.24909	.24652	3.1271	.10226	
2	23.401	17.02	95	3	40.421	3.1905	.27858		.27748	.27394	2.8141	.12627	100
3	23.675	16.75	80	3	40.425	3.4625	.30233		.30121	.29668	2.5984	.14811	200
4	23.85	16.575	100	3	40.425	3.6375	.31761		.31648	.31122	2.4770	.16299	101
6	24.955	15.46	70	3	40.415	4.7475	.41453	.41314	.41332	.40165	1.9193	.27146	102
7	25.895	14.535	65	3	40.43	5.68	.49595	.49018	.49467	.47474	1.6238	.37925	110
8	26.505	13.925	60	3	40.43	6.29	.54921		.54789	.52088	1.4800	.45656	103
9	26.86	13.565	10	3	40.425	6.6475	.58043		.57907	.54725	1.4087	.50395	200
10	27.015	13.41	50	3	40.425	6.8025	.59396		.59260	.55852	1.3802	.52491	112
11	27.13	13.293	40	3	40.423	6.9185	.60409	.60381	.60272	.56688	1.3599	.54076	201
12	27.48	12.95	3	3	40.43	7.265	.63435		.63295	.59152	1.3032	.58879	400
13	27.855		7	3	0	7.6427	.66733	.66712	.66590	.61777	1.2479	.64219	
14	27.92	12.5	7	3	40.42	7.71	.67320		.67177	.62237	1.2386	.65180	202
15	28.355	12.065	3	3	40.42	8.145	.71118		.70972	.65162	1.1830	.71450	104
16	29.02		20	3	0	8.8077	.76905	.76896	.76753	.69436	1.1102	.81131	
17	29.18		40	3	0	8.9677	.78302		.78149	.70434	1.0945	.83479	203
18	29.5		7	3	0	9.2877	.81096		.80941	.72388	1.0649	.88176	210
19	29.74	46.65	35	3	76.39	9.5349	.83254	.82947	.83097	.73859	1.0437	.91795	211
20	30.09	46.32	15	3	76.41	9.8749	.86223		.86064	.75826	1.0167	.96749	114
21	30.51	45.89	8	3	76.4	10.300	.89934		.89771	.78190	.98591	1.0288	212
22	30.63	45.785	30	3	76.415	10.412	.90916		.90753	.78798	.97831	1.0448	105
23	30.885	45.52	3	3	76.405	10.672	.93187	.93226	.93021	.80175	.96151	1.0817	
24	31.255	45.16	15	3	76.415	11.037	.96374		.96205	.82037	.93969	1.1325	300
25	31.62	44.77	20	1	76.39	11.415	.99670	.99557	.99499	.83875	.91834	1.1858	
26	31.66	44.74	8	2	76.4	11.450	.99975	.99941	.99804	.84041	.91880	1.1846	
27	31.83	44.57	40	1	76.4	11.620	1.0146		1.0129	.84836	.90794	1.2131	213
28	31.9	44.513	15	2	76.413	11.683	1.0201		1.0184	.85128	.90707	1.2154	213
29	32.365	44.055	25	1	76.42	12.145	1.0604		1.0587	.87171	.88362	1.2808	302
30	32.42	43.985	10	2	76.405	12.207	1.0659		1.0641	.87436	.88312	1.2822	302
31	32.965	43.44	12	1	76.405	12.752	1.1135	1.1129	1.1117	.89644	.85924	1.3545	
32	33.01	43.385	6	2	76.395	12.802	1.1178	1.1180	1.1160	.89836	.85952	1.3536	
33	33.585	42.815	15	1	76.4	13.375	1.1678		1.1660	.91917	.83799	1.4241	205
34	33.655	42.74	4	2	76.395	13.447	1.1742		1.1723	.92165	.83781	1.4247	205
35	33.91	42.505	3	1	76.415	13.692	1.1956	1.1945	1.1937	.92973	.82847	1.4569	106
36	42.435		1	2	0	13.757	1.2012	1.2008	1.1993	.93179	.82869	1.4562	106
37	41.905		3	1	0	14.287	1.2475		1.2456	.94757	.81287	1.5134	220
38	41.83		1	2	0	14.362	1.2540		1.2521	.94964	.81311	1.5125	220
39	36.07	40.335	2	1	76.405	15.857	1.3846	1.3841	1.3826	.98233	.78411	1.6265	
40	36.335	40.07	1	2	76.405	16.122	1.4077	1.3977	1.4057	.98640	.78281	1.6319	
			13	X0 = 20.212				14.356					
			19	X0' = 38.202				16					
					S = 17.990 11.453								

ตารางที่ 3.5 แสดงการคำนวณระบุนาขงฟิล์มในรูปที่ 3.8ค

ปริมาณมากจะสังเกตเห็นก้อนสารสีขาวนวลถึงสีเหลืองนวล ซึ่งเมื่อนำมาถ่ายภาพผลึกผง ได้ฟิล์มและคำนวณค่า d ได้ดังในรูปที่ 8c และในตารางที่ 3.5 จากการหาระบบผลึกด้วย Q_{hk1} และเทียบกับเฟ้มการเลี้ยวเบนผลึกผง พบว่าเป็นผลึกเฮกซะโกนอลของ ZnO (ไม่สังเกตเห็นเส้นที่ระนาบ (204), (006) และ (214) เนื่องจากจางมาก)

ในการปลูกผลึก ZnSe จากสถานะไอที่อุณหภูมิสูง บางครั้งจะพบเกล็ดหรือแผ่น สีขาวอยู่บริเวณตอนกลางของแคปซูล จากการถ่ายภาพผลึกผง (รูปที่ 10ค) และการคำนวณ (ตารางที่ 3.6) หาโครงผลึก (Q_{hk1}) พบว่าเกล็ดสีขาวนี้มีโครงผลึกแบบเตตระโกนอลของ SiO_2 (จากเฟ้มการเลี้ยวเบนผลึกผง ในภาคผนวก ข) มีหลายเส้นในเฟ้มการเลี้ยวเบนที่ไม่สามารถสังเกตเห็นเพราะมีความเข้มน้อยมาก SiO_2 เหล่านี้เกิดจากเศษแก้วควอทซ์ที่ปนกับสารตั้งต้น ZnSe ที่สังเคราะห์ได้

ภาพถ่ายการเลี้ยวเบนของผง ZnSe จากบริษัท Koch-light-Ltd. มีลักษณะ ไม่สอดคล้องกับผลึก ZnSe ทั้งโครงผลึกแบบซิงค์เบลนด์และเวอร์ไซท์ (รูปที่ 3.8จ) เส้นเลี้ยวเบนจะเกิดเฉพาะบริเวณที่มุมเล็กคือน้อยกว่าเส้นที่ 3 ของ Si และมีลักษณะเป็นแถบ (ไม่คมชัด) ซึ่งสอดคล้องกับการเลี้ยวเบนที่มุมเล็กของสารอสังฐาน [42] (ประกอบด้วย โมเลกุลน้ำ) หรือผลของขนาดของอนุภาคผงที่มีขนาดเล็กมาก (วงแหวนของเดบาย) [37]

3.4 วิธีถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์แบบสะท้อนกลับ

การถ่ายภาพการเลี้ยวเบนผลึกแบบสะท้อนกลับ ใช้หลักการถ่ายภาพโดยวิธีเลาเอ (ดังในหัวข้อ 3.2.3) กล่าวคือจะให้รังสีเอกซ์ที่มีความยาวคลื่นต่อเนื่อง (white radiation) ตกกระทบผลึกเดี่ยวที่ตรงไว้ ดังนั้นมุมตกกระทบ (มุมแบร์ริก) จึงมีค่าเฉพาะสำหรับแต่ละระนาบของผลึก และจะเกิดการเลี้ยวเบนที่ความยาวคลื่นเฉพาะแต่ละค่าของ d และ θ ของแต่ละระนาบที่สอดคล้องกับกฎของแบร์ริก (หรือกล่าวโดยทั่วไป คือ เวกเตอร์ทิศทางของรังสี $(S-S_0)$ ในแนวโครงผลึก (a_1, a_2, a_3) กับเวกเตอร์ของระนาบ hkl จะสอดคล้องกันตามสมการ(เลาเอ)ที่ 3.2) ดังนั้นแต่ละจุดบนฟิล์มจึงมาจากการเลี้ยวเบนของแต่ละระนาบผลึก ความเข้มของจุดของการเลี้ยวเบน จะขึ้นกับความเข้มของรังสีเอกซ์ที่ความยาวคลื่นต่าง ๆ ที่สอดคล้องกับมุมแบร์ริกนั้น ๆ จุดที่มาจากผลการเลี้ยวเบนที่ $\lambda(K\alpha)$ จะมีความเข้มมาก จุดของระนาบที่มีแกนร่วมกันเรียกว่า "ระนาบโซน" และแกนร่วม

=====												
KA1=	1.5405	KA2=	1.5443	KA=	1.5418						SI02	
LINE	X1	X2	I	LAMDA	X1+X2	S	ADJ(S)	THETA	SIN	D	Q	H,K,L

1	21.31	16.945	90	3	38.255	2.1825	0	0	0	0	0	
2	21.34	16.915	100	3	38.255	2.2125	2.1975	.19177	.19059	4.0447	.06113	101
3	21.96	16.29	60	3	38.25	2.835	2.835	.24740	.24488	3.1480	.10091	111
4	21.985	16.265	80	3	38.25	2.86	2.8475	.24849	.24594	3.1344	.10178	SI
5	22.28	15.97	25	3	38.25	3.155	3.155	.27533	.27186	2.8356	.12437	102
6	22.75	15.51	40	3	38.26	3.62	3.62	.31590	.31068	2.4813	.16242	200
7	23.4	14.85	5	3	38.25	4.275	4.275	.37306	.36447	2.1151	.22353	211
8	23.61	14.635	5	3	38.245	4.4875	4.4875	.39161	.38168	2.0198	.24513	202
9	23.865	14.38	60	3	38.245	4.7425	4.7425	.41386	.40215	1.9169	.27214	SI+113
10	23.99	14.25	9	3	38.24	4.87	4.87	.42499	.41231	1.8697	.28606	212
11	24.54	13.705	3	3	38.245	5.4175	5.4175	.47277	.45535	1.6930	.34890	203
12	24.75	13.505	50	3	38.255	5.6225	5.6225	.49066	.47120	1.6360	.37362	SI+104
13	24.835	13.405	5	3	38.24	5.715	5.715	.49873	.47831	1.6117	.38497	301
14	25.165	13.075	2	3	38.24	6.045	6.045	.52753	.50340	1.5314	.42642	311
15	25.34	12.915	3	3	38.255	6.2125	6.2125	.54214	.51597	1.4941	.44799	302
16	25.64	12.615	1	3	38.255	6.5125	6.5125	.56832	.53822	1.4323	.48745	312
17	25.815	12.44	1	3	38.255	6.6875	6.6875	.58359	.55103	1.3990	.51093	223
18	26.05	12.205	1	3	38.255	6.9225	6.9225	.60410	.56802	1.3571	.54293	SI+321
19	26.165		1	3	0	7.0404	7.0404	.61439	.57646	1.3373	.55918	105
20	26.39	11.845	1	3	38.235	7.2725	7.2725	.63465	.59289	1.3002	.59152	313
21	26.53	11.725	1	3	38.255	7.4025	7.4025	.64599	.60199	1.2806	.60981	322
22	26.765	11.48	12	3	38.245	7.6425	7.6425	.66693	.61858	1.2462	.64388	SI+400
23	26.935		1	3	0	7.8104	7.8104	.68158	.63002	1.2236	.66792	401
24	27.07		1	3	0	7.9454	7.9454	.69336	.63913	1.2062	.68737	410
25	27.93		40	1	0	8.8054	8.8054	.76841	.69499	1.1083	.81413	SI
26	27.96		30	2	0	8.8354	8.8354	.77103	.69687	1.1080	.81450	SI
27	28.045		1	3	0	8.9204	8.9204	.77845	.70218	1.0979	.82967	420

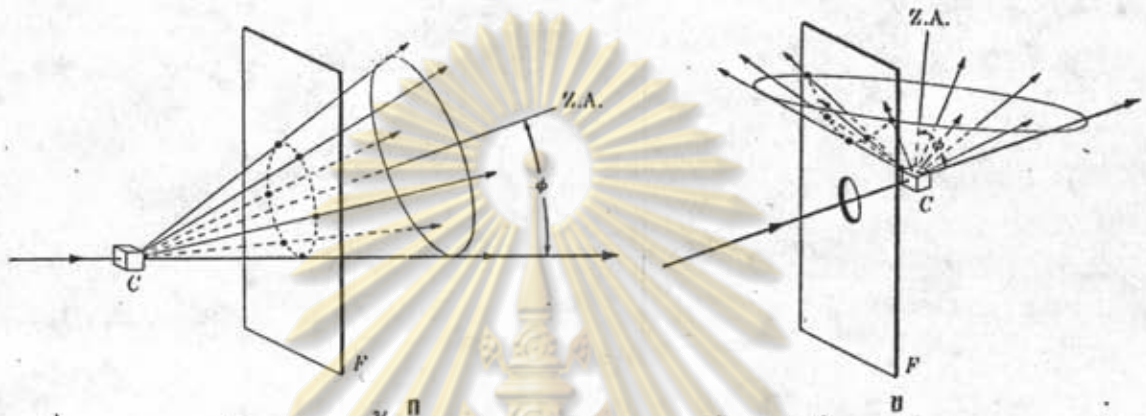
	21	X0= 19.125										
		S= 18 11.459										

ศูนย์วิทยทรัพยากร

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ตารางที่ 3.6 แสดงการคำนวณระบุนามของฟิล์มในรูปที่ 3.8ง

เรียกว่า "แกนโซน (ZA)" การเลี้ยวเบนจากระนาบโซนหนึ่งจะเป็นรูปกรวย โดยมีแกนโซนเป็นแกนของกรวย (ดังแสดงให้เห็นแล้วใน 3.2.3) กรวยการเลี้ยวเบนของโซนหนึ่ง ๆ จะตัดระนาบฟิล์มเป็นรูปไฮเปอร์โบล่า (แบบสะท้อนกลับ) หรือรูปวงรี (แบบทะลุผ่าน) ดังในรูปที่ 3.10 การถ่ายภาพแบบสะท้อนกลับเหมาะใช้กับผลึกที่ดูดกลืนรังสีเอกซ์มาก และเหมาะกับการหาตำแหน่งระนาบของผิวหน้าผลึก



รูปที่ 3.10 แสดงตำแหน่งจุดเลี้ยวเบนแบบเลาเอ ก) เป็นรูปวงรีในการถ่ายภาพแบบทะลุผ่าน ข) เป็นรูปพาราโบล่าในการถ่ายภาพแบบสะท้อนกลับ [37]

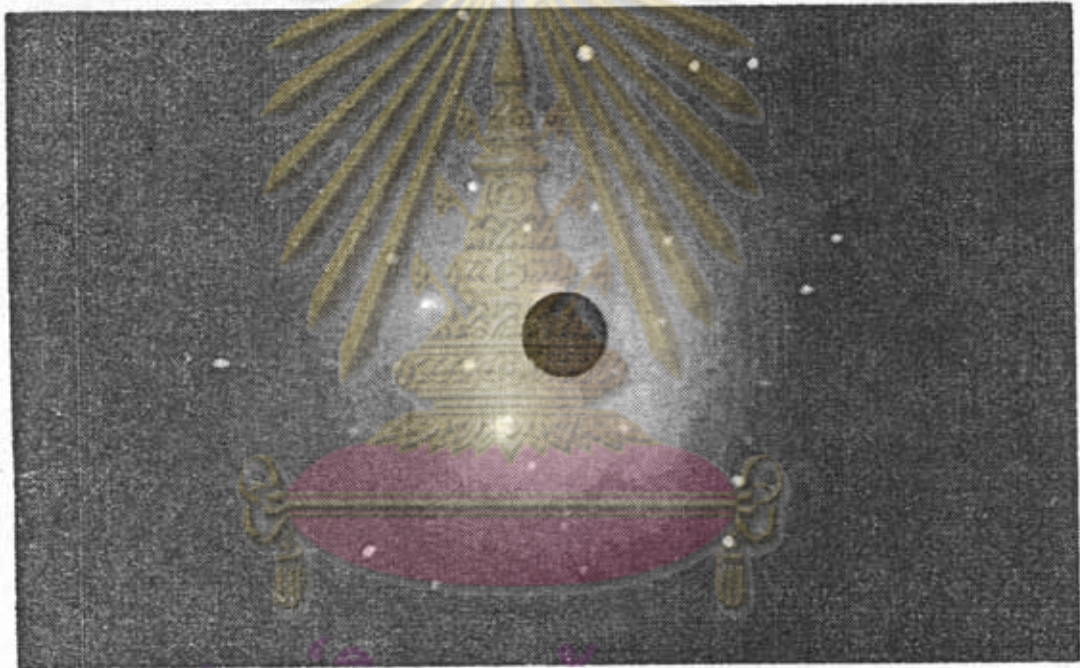
ในงานวิจัยนี้ ได้ถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์แบบสะท้อนกลับของผลึก ZnSe ซิงค์เบลนด์ที่ปลูกได้ ที่ระยะห่าง 3 cm ดังเช่นในรูปที่ 3.11 เขียนจุดระนาบบนฟิล์มเหล่านี้ ลงบนภาพฉาย stereographic (ดังในหัวข้อ 3.4.1) เพื่อให้สามารถวัดมุมระหว่างจุดระนาบได้สะดวกขึ้น การระบุจุดระนาบจากมุมที่วัดได้ดังกล่าวไว้ในหัวข้อ 3.4.2 การพิจารณาสมมาตรของภาพถ่ายจะช่วยให้การระบุระนาบ (ในหัวข้อ 3.4.3) และในหัวข้อ 3.4.4 จะได้พิจารณาภาพถ่ายสะท้อนกลับของทวินเพื่อใช้ในการตัดผลึก

3.4.1 ภาพฉาย stereographic

การเขียนระนาบผลึกในสามมิติทำได้ยาก ซึ่งในที่มีสนใจเพียงแต่มุมระหว่างระนาบผลึกเท่านั้น การเขียนภาพฉายแบบ stereographic ของผลึกในสองมิติยังคงให้ความสัมพันธ์ของมุมระหว่างระนาบผลึกเท่าเดิม ฉะนั้นจึงจะเขียนแต่ละจุด (แทนแต่ละระนาบ) บนฟิล์มในรูปที่ 3.11 ลงบนภาพฉาย stereographic โดยในขั้นแรกจะได้พิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างตำแหน่งจุดบนฟิล์มกับมุมบนภาพฉาย stereographic เพื่อใช้แปลงจุดบนฟิล์มลงบนภาพฉาย และในขั้นต่อไปจึงจะได้กล่าวถึงการวัดมุมระหว่างจุด (ระนาบ)

บนภาพฉาย พิจารณาทรงกลมของการสะท้อน (เช่นเดียวกับในหัวข้อ 3.2.3) ในรูปที่ 3.12ก ลำรังสีเอกซ์ตกกระทบผลึกที่จุดศูนย์กลางทรงกลม C ในแนว X เลี้ยวเบนจากระนาบซึ่งมีเส้นตั้งฉาก CP ไปทางทิศ R ทำมุม 2θ กับแนวรังสีตก พิกัดของจุด P กำหนดด้วยมุม ρ'' และ ϕ'' ซึ่งวัดจากแนวแกนที่ตั้งฉากกับรังสีตกกระทบ (AA') เซตของขีด (จุด) P ที่ ρ'' คงที่จะมีลักษณะเป็นวงกลมเล็ก โดยทิศของการเลี้ยวเบน R จะเป็นรูปกรวยซึ่งมีมุมเป็นครึ่งหนึ่งของ ρ และแกนกรวยผ่านจุดกำเนิดของแลตทิซส่วนกลับและขนานกับ CA ดังในรูป 3.12ข สมการของส่วนโค้งที่ ρ'' คงที่บนระนาบฟิล์มจะเป็นสมการดีกรีสี่ [43]

$$[y^2 - (\cot \rho'' \cot 2\rho'')x^2]^2 + D^2[y^2 - (\cot^2 \rho'')x^2] = 0 \quad (3.11)$$



รูปที่ 3.11 ภาพถ่ายการเลี้ยวเบนแบบสะท้อนกลับของผลึก ZnSe ที่หน้าผลึกใด ๆ (ซึ่งจะได้กล่าวถึงการระบุนาบบในบทความ)

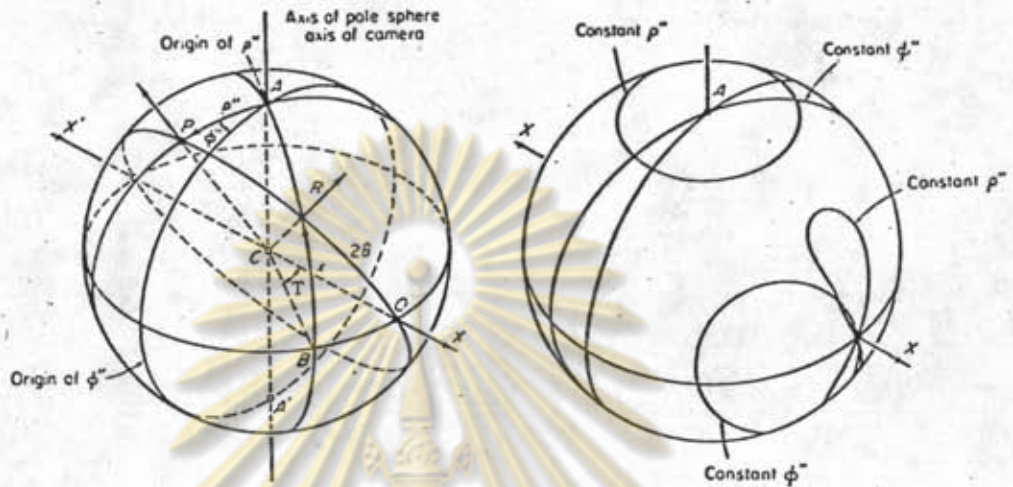
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

เมื่อ D เป็นระยะห่างจากผลึกถึงฟิล์ม ส่วนโค้งนี้จะเป็นรูปไฮเพอร์โบลา สำหรับทางเดินของจุด P ที่มีมุม ϕ'' คงที่จะเป็นวงกลมใหญ่ที่ผ่านจุด AA' ทิศของการเลี้ยวเบน R (รูปที่ 3.12ข) จะเป็นกรวยที่มีมุมเป็นครึ่งหนึ่งของ ϕ'' เช่นกัน จุดยอดของกรวยอยู่ที่ C และแกนกรวยตั้งฉากกับระนาบที่ ϕ'' คงที่ ดังนั้นส่วนโค้งที่ ϕ'' คงที่บนระนาบฟิล์มจึงเป็นรูปภาคตัดกรวยดังสมการ

$$x^2 - (\cot \phi'' - 1)y^2 + 2D(\cot \phi'')y = 0 \quad (3.12)$$

ภาคตัดกรวยนี้จะเป็นไฮเพอร์โบลาเมื่อ $\phi'' < 45^\circ$, เป็นพาราโบลาเมื่อ $\phi'' = 45^\circ$ และเป็นวงรี

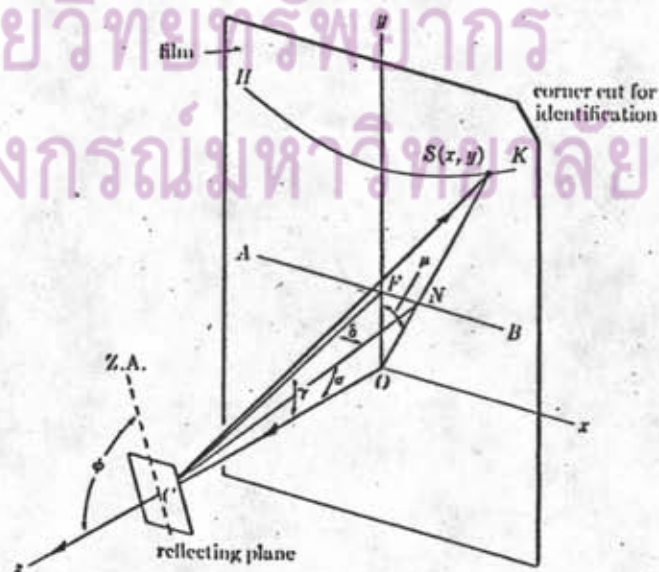
เมื่อ $45^\circ < \phi'' < 90^\circ$ ในกรณีการสะท้อนกลับพิจารณาความสัมพันธ์ของพิกัด x, y บนฟิล์มด้วยมุม $\delta = 90^\circ - \rho''$ และ $\gamma = 90^\circ - \phi''$ โดยวิธีของ Greninger [37] ดังแสดงในรูปที่ 3.13 จะได้



รูปที่ 3.12 ก) แสดงระบบพิกัดของมุม ρ'' และ θ'' ข) แสดงเส้นทางเดินของจุดบนผิวทรงกลมของการสะท้อน เมื่อ ρ'' และ θ'' คงที่ [43]

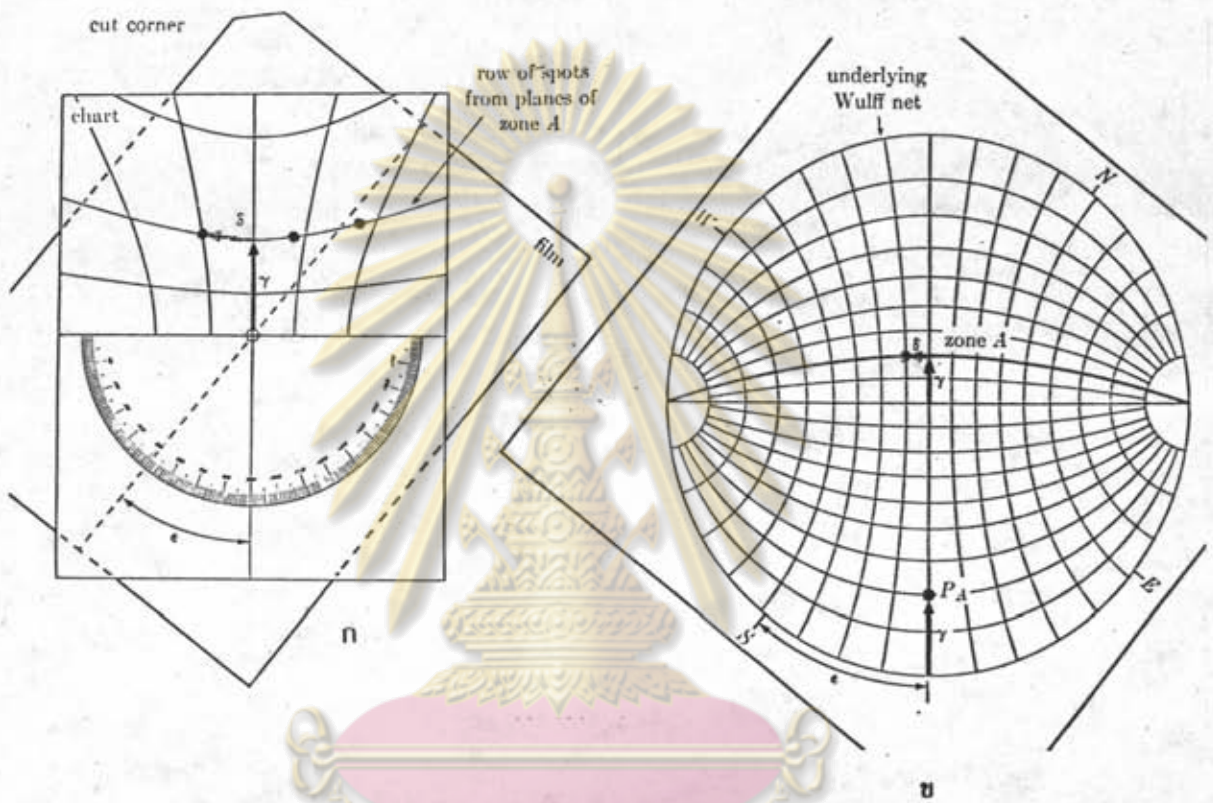
$$\begin{aligned}
 x &= OS \sin \mu, \quad y = OS \cos \mu \quad \text{และ} \quad OS = OC \tan 2\sigma \\
 \tan \mu &= FN/FO = C \tan \delta / C F \sin \gamma = \tan \delta / \sin \gamma \\
 \tan \sigma &= ON/OC = (FN/\sin \mu)(1/CF \cos \gamma) \quad \dots \quad (3.13) \\
 &= (C \tan \delta / \sin \mu)(1/CF \cos \gamma) = \tan \delta / \sin \mu \cos \gamma
 \end{aligned}$$

ศูนย์วิทยุทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



รูปที่ 3.13 ก) แสดงความสัมพันธ์ของมุม δ และ γ [37]

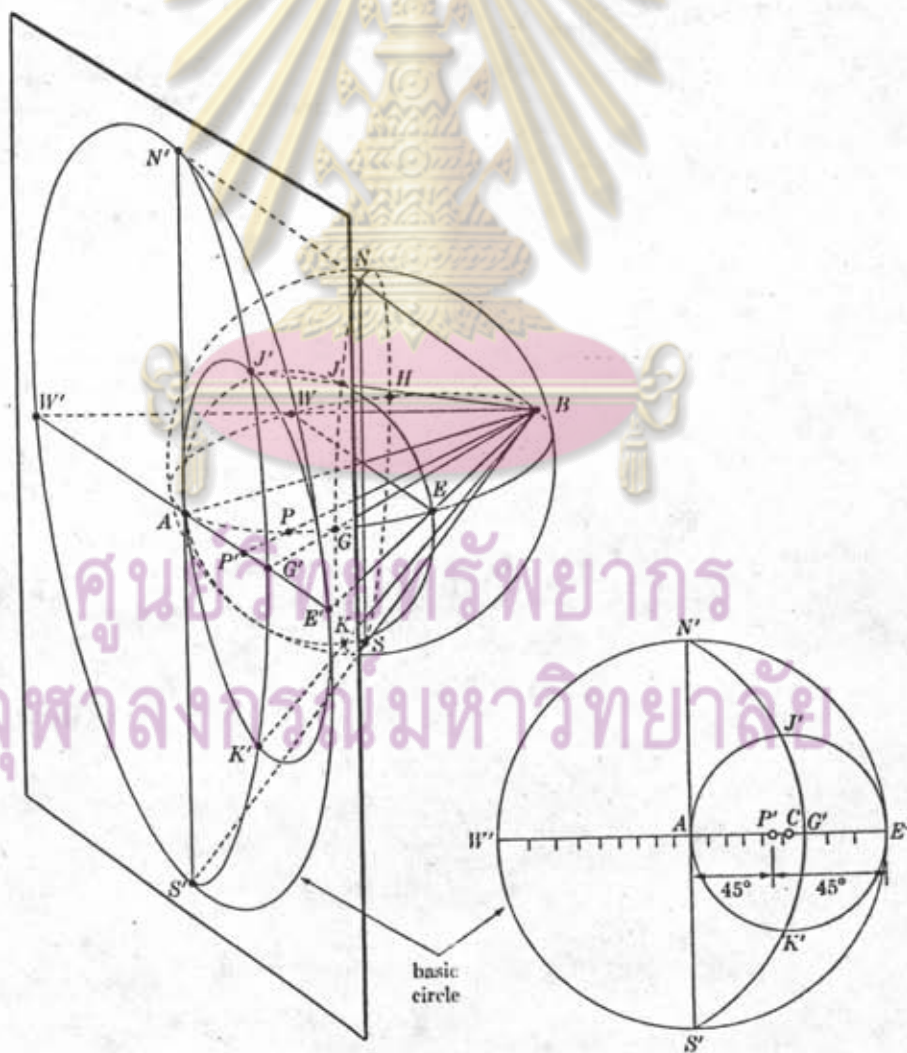
สมการ 3.13 ใช้คำนวณหาค่ามุม δ และ γ ของแต่ละจุด (x,y) บนฟิล์ม เขียนสมการ 3.11 และ 3.12 ในเทอมของ δ และ γ ได้เป็นแผนภาพของ Greninger ซึ่งใช้เทียบแผนภาพนี้กับฟิล์ม (ที่ระยะห่าง D เท่ากัน) เพื่อหาค่ามุม δ และ γ ของแต่ละจุดได้ทันที มุม δ และ γ จะนำไปใช้ระบุพิกัดจุดบนภาพฉาย stereographic ได้โดยตรง ดังในรูปที่ 3.14



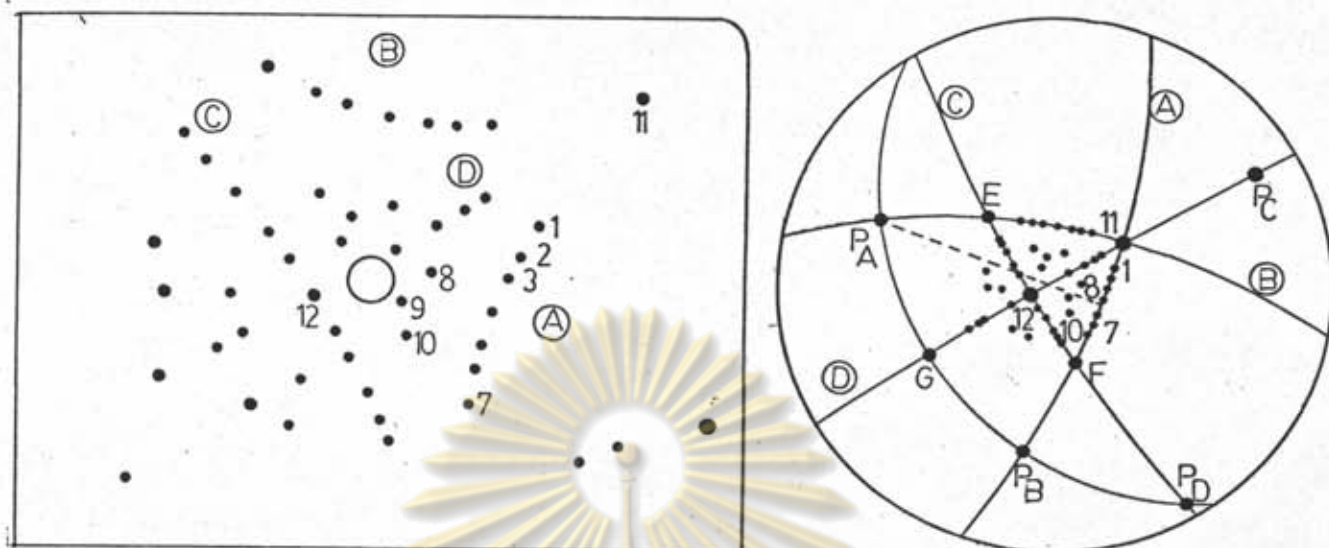
รูปที่ 3.14 แสดงการใช้แผนภูมิ ก) Greninger และ ข) Wulff net ช่วยลงจุดบนภาพฉาย [37]

ต่อไปจะ ได้กล่าวถึงการลงจุดและวัดมุมระหว่างจุดบนภาพฉาย stereographic พิจารณาทรงกลมของการสะท้อนในรูปที่ 3.15 ระนาบผลึกจะแทนด้วยจุดตัดของเส้นตั้งฉากกับระนาบหน้าทรงกลม (J) ระนาบฉายอยู่ที่ปลายข้างหนึ่ง (A) ของเส้นผ่านศูนย์กลางทรงกลม (AB) บน stereographic ขั้ว(จุด) P จะถูกฉายจาก B ไปยังระนาบฉายที่จุด J (ในภาพฉายแบบ gnomonic ขั้วจะถูกฉายจากจุดศูนย์กลางของทรงกลม C ภาพฉายแบบนี้จะใช้ได้ดีเฉพาะเมื่อรังสีเอกซ์จากกระทบผลึกในแนวสมมาตรของผลึกเท่านั้น จึงจะ ไม่กล่าวในที่นี้ วงกลมใหญ่บนทรงกลมที่ผ่านขั้ว N และ S (NGSH) จะถูกฉายเป็นส่วนโค้งของวงกลม (N'J'G'S') วงกลมบนทรงกลมที่ตั้งฉากกับ AB ที่จุดศูนย์กลาง (NESW) จะถูกฉายเป็นขอบของวงกลมใหญ่ (N'E'S'W') ทั้งหมดเรียกว่า "วงกลมมูลฐาน" วงกลมเล็ก (AJEK) จะถูกฉายเป็นรูปวงกลม (A'J'E'K') เช่นเดียวกัน แต่จุดศูนย์กลางจะเลื่อนไป

มุมระหว่างจุดสองจุดบนระนาบฉาย หาได้จากการแบ่งส่วนโค้งของวงกลมใหญ่ที่ผ่านสองจุดนี้หรือเทียบจุดสองจุดนี้กับ Wulff net โดย Wulff net จะเป็นภาพฉายที่ได้แบ่งวงกลมใหญ่ออกเป็น 90 ส่วน (ส่วนละ 2 องศา) ดังในรูป 3.14 ข ในแนวตั้งฉากกับวงกลมใหญ่ของ Wulff net จะเป็นเส้นของวงกลมเล็กที่มีจุดศูนย์กลางอยู่ที่ขั้ว N และ S และในการลงจุดบนภาพฉายจะให้แนว NS(EW) ของ Wulff net ขนานกับแกน Y(X) ของฟิล์ม มุม δ จะเป็นมุมตามวงกลมใหญ่ และมุม γ จะเป็นของวงกลมเล็กดังในรูป 3.14 (กรณีที่ $\epsilon=0$) ภาพฉาย stereographic ของภาพถ่ายการเลี้ยวเบนแบบสะท้อนกลับของผลึก ZnSe ในรูปที่ 3.11 ทำได้ดังรูปที่ 3.16 เมื่อลงจุด (ระนาบ) ลงบนภาพฉายแล้วจะง่ายต่อการวัดมุมระหว่างจุด จึงสะดวกต่อการระบุระนาบผลึกของแต่ละจุดในขั้นต่อไป



รูปที่ 3.15 แสดงการสร้างภาพฉาย stereographic [37]



รูปที่ 3.16 ภาพฉายของจุดเลี้ยวเบนในรูปที่ 3.11

3.4.2 การระบุระนาบของภาพถ่ายการเลี้ยวเบนแบบสะท้อนกลับ

จากภาพถ่ายการเลี้ยวเบนแบบสะท้อนกลับของผลึก ZnSe ซึ่งเคลือบในรูปที่ 3.11 จุด 1, 2, 3, 4, 5, 6 และ 7 จะอยู่ในแนวเส้นไฮเปอร์โพล่า (A) แสดงว่าจุดเหล่านี้เกิดจากการเลี้ยวเบนของระนาบในโซนเดียวกัน บนภาพถ่ายในรูปที่ 3.16 จุดเหล่านี้ยังคงเรียงเป็นแนวตามส่วนโค้งของวงกลมใหญ่ เนื่องจากแกนโซนและจุดตัดของแนวเส้นไฮเปอร์โพล่าบนฟิล์มหรือแนวตัดของเส้นวงกลมใหญ่บนภาพถ่ายจะมีดัชนีระนาบต่ำ เช่น $\{100\}$, $\{110\}$, $\{111\}$ และ $\{112\}$ [43] ดังนั้นในการระบุระนาบ (จุด) จึงต้องพิจารณาจุดแกนโซนและจุดตัดเป็นสำคัญ แกนโซน (P_A) ของจุดเหล่านี้ (ระนาบโซน) จะทำมุม 90° กับทุก ๆ จุด (ระนาบโซน) ซึ่งหาโดยหมุน Wulff net ให้แนวจุด (ระนาบโซน) อยู่ในแนวเดียวกับส่วนโค้งวงกลมใหญ่ จุดแกนโซนจะอยู่ห่างออกไปในแนว NS เท่ากับ 90° (ดูรูปที่ 3.16) ในบางครั้งที่น่าสนใจเฉพาะจุดแกนโซนบนภาพถ่ายจะสามารถหาได้โดยตรงจากแนวไฮเปอร์โพล่าบนฟิล์ม โดยหมุนแผนภาพ Greninger ไปเป็นมุม ϵ เพื่อให้แนวจุดไฮเปอร์โพล่าอยู่ในแนวเดียวกับเส้นไฮเปอร์โพล่าในแนวอน (γ) ของแผนภาพดังในรูป 3.14ก แล้วจึงหมุน Wulff net บนภาพถ่ายไปเป็นมุม ϵ เท่ากัน จุดแกนโซนจะอยู่เหนือจากหัว S เป็นมุมเท่ากับ γ (ทำมุมกับส่วนโค้งของวงกลมใหญ่ของระนาบโซนเป็นมุม 90°) ด้วยวิธีเหล่านี้เขียนจุดแกนโซน P_A , P_B , P_C และ P_D ของระนาบโซน A, B, C และ D ลงบนภาพถ่ายได้ดังในรูปที่ 3.16

จากภาพฉาย stereographic (ในรูป 3.16) ทามุมระหว่างจุดแกนโชนและจุดตัดที่สำคัญ โดยใช้ Wulff net (ดังกล่าวในหัวข้อ 3.4.1) ได้ค่ามุมดังแสดงในตารางที่

3.7 พิจารณาค่ามุมที่วัดได้เทียบกับค่ามุมระหว่างระนาบของผลึกลูกบาศก์ ดังสมการ

$$\cos\phi = (h_1h_2+k_1k_2+l_1l_2)/[(h_1^2+k_1^2+l_1^2)(h_2^2+k_2^2+l_2^2)]^{1/2} \quad (3.14)$$

ซึ่งมีค่าต่าง ๆ ดังที่ได้ให้ไว้ในภาคผนวก ข มุมที่วัดได้จะมีค่าประมาณ 35° , 45° , 55° , 60° , 71° และ 90° ซึ่งเป็นค่ามุมระหว่างระนาบต่ำ $\{100\}$, $\{110\}$ และ $\{111\}$ ที่มุม 60° และ 71° เป็นค่ามุมระหว่าง $\{110\}$ และ $\{111\}$ กับระนาบตัวเอง ทำให้สามารถระบุระนาบของจุด P_A , P_B , P_C , 12 ได้เป็น $\{110\}$ และจุด E, F เป็น $\{111\}$ จุด P_D , G และ 11 ทำมุม 45° กับ $\{110\}$ ดังนั้นจึงมีระนาบเป็น $\{100\}$ เปรียบเทียบมุมระหว่างจุดที่เหลือในตารางที่ 3.7 จะได้ว่าสอดคล้องกับระนาบที่ระบุไว้จริง สังเกตว่าแกนโชนที่ระบุได้เป็น $\{100\}$ และ $\{110\}$ เท่านั้น ถ้ากำหนดให้จุด 12 และ F เป็นระนาบ (011) และ (111) จะระบุระนาบของจุดต่าง ๆ ได้ดังตารางที่ 3.7

	P_B	P_C	P_D	E	F	11	12	
P_A :	90	59	45	34	90	90	60	: $\bar{1}01$
P_B :		58	46	90	35	90	61	: 101
P_C :			90	88	90	46	90	: $01\bar{1}$
P_D :				56	55	90	90	: 100
E :					71	54	36	: $\bar{1}11$
F :						55	35	: 111
11 :							44	: 010

101 $01\bar{1}$ 100 $\bar{1}11$ 111 010 011

ตารางที่ 3.7 แสดงค่ามุมระหว่างจุดระนาบที่สำคัญบนภาพฉายในรูปที่ 3.16

อนึ่งเงื่อนไขของการระบุระนาบนอกจากจะพิจารณาจากมุมระหว่างจุดแล้ว ยังสามารถใช้ความสัมพันธ์ระหว่างแกนโชนและระนาบช่วยระบุระนาบได้ พิจารณาจุดตัดของหลายโชน ให้ (uvw) และ $(u'v'w')$ เป็นแกนโชนที่มีระนาบโชนตัดกันที่จุด (hkl) นั่นคือในทางเรขาคณิตระนาบ (hkl) จะประกอบด้วยเส้นสองเส้น $[uvw]$ และ $[u'v'w']$ โดย

มีความสัมพันธ์เป็น [43]

$$h/(vw' - wv') = k/(wu' - uw') = l/(uv' - vu') \quad (3.15)$$

ตัวอย่างเช่น ระนาบโซนของแกนโซน $P_0[101]$ กับ $P_0[011]$ ตัดกันที่จุดระนาบ $E(111)$ จะ
 ได้ความสัมพันธ์สอดคล้องกับสมการ 3.15 ซึ่งสมการนี้จะใช้หาแกนโซนหรือระนาบที่มาตัดกัน
 ต่อไปจะพิจารณาเงื่อนไขของระนาบในโซนเดียวกัน

เพื่อนำไปสู่การระบุระนาบระหว่างสองจุดระนาบที่สำคัญ (จุดตัดแกนโซน)
 สมการระนาบ (hkl) ใด ๆ สามารถเขียนอยู่ในรูป $hx/a+ky/b+lz/c = 0$ ดังนั้น
 เมื่อมีสามระนาบ $(h_1k_1l_1)$, $(h_2k_2l_2)$ และ $(h_3k_3l_3)$ อยู่ในโซนเดียวกัน คือ ตัดกันเป็น
 เส้นตรงร่วม (แกนโซน) เส้นหนึ่ง $[uvw]$ หรือนั่นคือมีผลเฉลยร่วมกันของสามสมการ
 ระนาบ ซึ่งจะมีได้เมื่อตัวกำหนด (determinant) ของสัมประสิทธิ์ของระบบสมการเป็นศูนย์
 ดังนั้นระนาบอื่นในโซนเดียวกันที่อยู่ระหว่างสองระนาบ (h_1, k_1, l_1) และ (h_2, k_2, l_2) จะ
 สามารถเขียนได้เป็น $(nh_1+mh_2, nk_1+mk_2, nl_1+nl_2)$ เมื่อ n และ m เป็นจำนวนเต็ม
 โดยระนาบโซนจะเรียงตามกฎของ Goldschmidt [43] เช่น จุดระหว่างระนาบ 010 และ
 111 จะมีดัชนีระนาบ (ดูกร 6) เป็น (171), (161), (151), (141), (272), (131),
 (383), (252), (373), (494), (5,11,5), (121), (6,11,6), (474), (353),
 (585), (232), (575), (343), (454), (565) และ (676) แต่เนื่องจากขนาด
 ของทรงกลมของการสะท้อนมีขีดจำกัด ดัชนีระนาบที่มีค่ามากจึงไม่สามารถสังเกตเห็นได้
 และจากการวัดมุมช่วย ทำให้สามารถระบุจุด 1,2,3,4,5,6 และ 7 ได้เป็นระนาบ (171),
 (151), (141), (131), (373), (121) และ (353) ตามลำดับ

ศูนย์วิทยุทรัพยากร
 จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

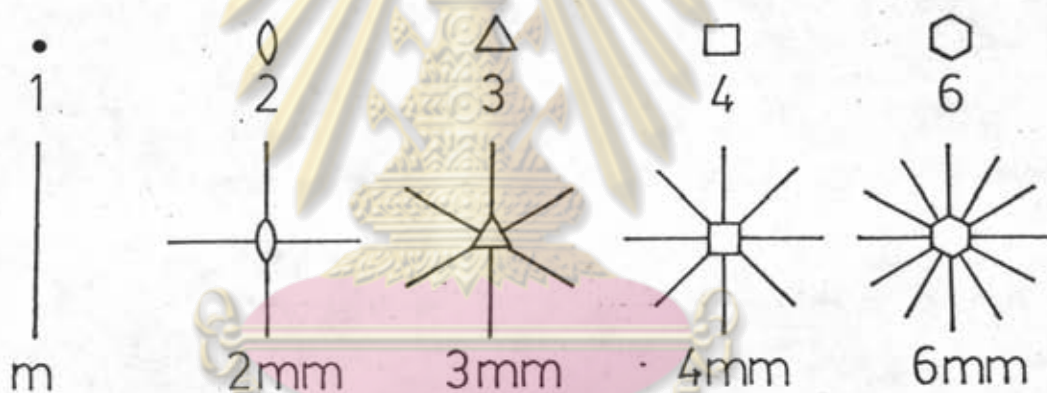
จุดอื่น (8,9 และ 10) ที่ไม่ได้อยู่ในระหว่างระนาบสำคัญสามารถระบุระนาบได้
 โดยให้มุมระหว่างระนาบนั้นกับระนาบ (100), (010) และ (001) เป็น ρ , σ และ τ
 ตามลำดับ ใช้ความสัมพันธ์ของ direction cosine [43]

$$p=\cos\rho=dh/a, \quad q=\cos\sigma=dk/b, \quad r=\cos\tau=dl/c; \quad h:k:l=pa:qb:rc$$

แต่ในที่นี้จุดที่ระบุระนาบไว้มีเพียงจุด $P_0(100)$ และ $11(010)$ จึงต้องหาจุดระนาบ (001)
 จากจุดตัด G ของระนาบของแกนโซน $P_0[001]$ กับ $11[010]$ จากการวัดมุมระหว่าง
 เชื้อตของจุด (100) กับ จุด 8,9 และ 10 แล้วใช้ความสัมพันธ์ข้างต้นจะระบุดัชนีระนาบได้เป็น
 (142), (153) และ (132) ตามลำดับ

3.4.3 สมมาตรของภาพถ่ายเลี้ยวเบนแบบสะท้อนกลับ

การพิจารณาสมมาตรของภาพถ่ายช่วยทำให้การระบุระนาบง่ายขึ้น ในการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนวิธีเลาเอจะมีสมมาตรรอบจุด (คือไม่สามารถแยกได้ระหว่างจุด $hk1$ กับจุด $\bar{h}\bar{k}\bar{1}$) ทำให้สมมาตรผลึกจากเดิม 32 กรุ๊ปลดลงเหลือ 11 สมมาตรของ Friedel [43] ในระบบผลึกลูกบาศก์สมมาตร $2\bar{3}$ และ $2\bar{3}$ จะลดลงเหลือ $2\bar{3}$ และสมมาตร $432, \bar{4}32$ และ $4\bar{3}2$ จะลดลงเหลือ $4\bar{3}2$ ถ้ารังสีเอกซ์ที่ตกกระทบผลึกในแนวสมมาตรของผลึกจะทำให้เกิดภาพฉายของสมมาตรผลึกในสองมิติบนระนาบฟิล์มแบน สมมาตรบนระนาบมี 10 กรุ๊ปจุดดังในรูปที่ 3.17 สำหรับผลึกลูกบาศก์ สมมาตรในสองมิติที่เกิดขึ้นเมื่อรังสีเอกซ์ตกกระทบผลึกในทิศทาง $\bar{h}k\bar{l}$ ที่แต่ละชั้น (class) ของ Friedel แสดงได้ดังในตารางที่ 3.8



รูปที่ 3.17 กรุ๊ปสมมาตรจุดบนระนาบ [43]

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Friedel class	direction of x-ray beam					
	[100]	[111]	[110]	[uv0]	[uuv]	[uvw]
$2\bar{3}$ \bar{m}	2mm	3	m	m	1	1
$4\bar{3}2$ $\bar{m} \bar{m}$	4mm	3m	2mm	m	m	1

ตารางที่ 3.8 แสดงสมมาตรภาพฉายของภาพถ่ายแบบเลาเอ ที่รังสีตกกระทบผลึกลูกบาศก์ในทิศทางต่าง ๆ [43]

พิจารณาที่จุด 12 ในรูปถ่ายที่ 3.11 จะเห็นว่ามีความยาว 2mm ซึ่งเป็น
 สมมาตรที่เกิดที่ระนาบ (110) คือ จะเห็นว่ามีแนว C ตั้งฉากกับแนว D มีจุดที่
 สมมาตรกับจุด 1 ถึงจุด 10 ในทุกจุดภาค (quadrant) แนว A และ B มีความยาว
 สอดคล้องกับแนว D ซึ่งสามารถ เทียบกับภาพถ่าย stereographic มาตรฐาน (ในภาคผนวก
 ข) ที่หน้า (110) เพื่อใช้เป็นแนวทางในการระบุระนาบต่อไป ภาพถ่ายในทิศ [u, v, w]
 ใด ๆ ของผลึกลูกบาศก์คำนวณได้จาก [43]



รูปที่ 3.18 ภาพถ่ายการเลี้ยวเบนแบบสะท้อนกลับบริเวณระนาบ 111

$$x_u = (uk-vh)CR_u / [C(h^2+k^2+l^2)^{1/2} + (uh+vk+wl)](u^2+v^2)^{1/2}$$

$$y_u = \frac{[u(u^2-vh)+v(v^2-wk)]R_u}{[C(h^2+k^2+l^2)^{1/2} + (uh+vk+wl)](u^2+v^2)^{1/2}}$$

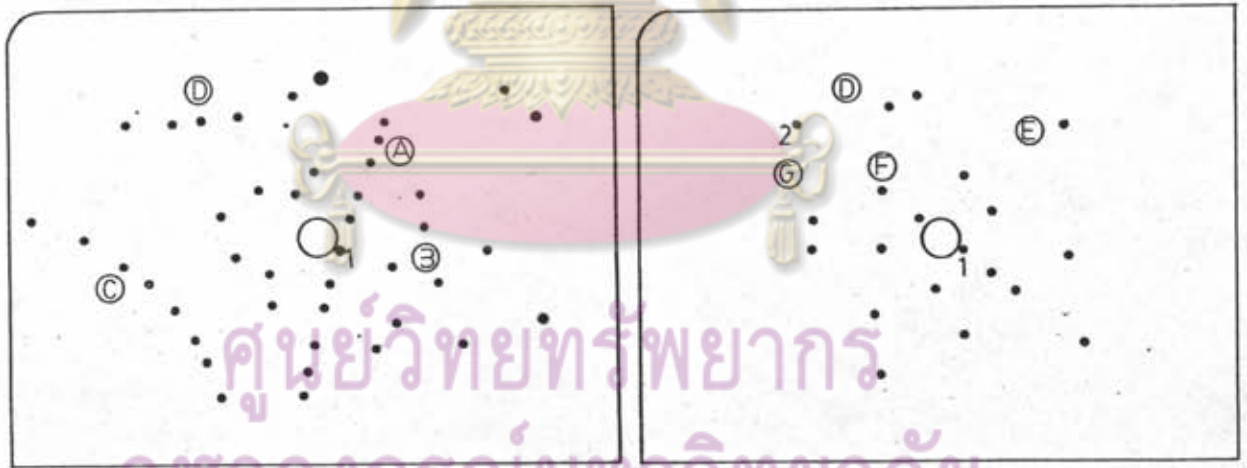
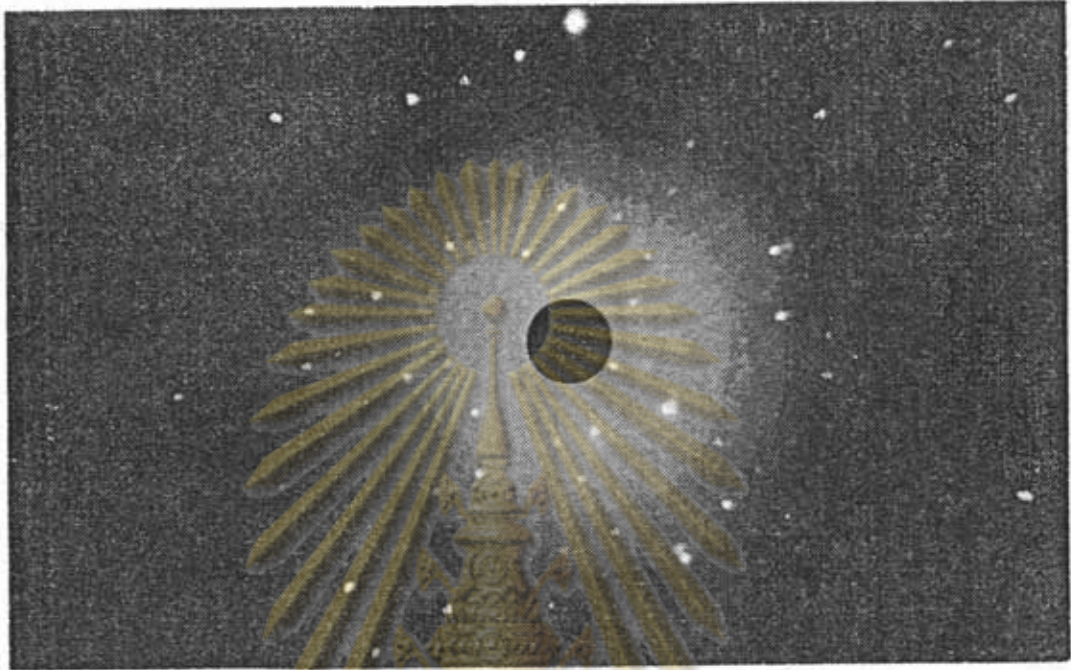
เมื่อ $C=(u^2+v^2+w^2)^{1/2}$, R_u เป็นรัศมีของภาพฉาย และ x_u, y_u เป็นตำแหน่งของจุดระนาบ (hkl) บนภาพฉาย ต่อไปจะพิจารณาภาพถ่ายการเลี้ยวเบนอีกภาพหนึ่งในรูปที่ 3.18 มุมระหว่างแกนโชน P_A, P_C และ P_E บนภาพฉายจะเป็น 60° แสดงว่าจุดตัด 1 มีสมมาตรแบบ 3m ซึ่งเป็นสมมาตรของจุดระนาบ {111} แต่เนื่องจากแนวทั้งสามที่จุด 1 มีแกนโชนอยู่ในเซตระนาบ 110 ชุดเดียวกันจึงยังไม่สามารถแยกระบุแต่ละแนวได้ ในแนว B มีเส้นในแนว G มาตัดกันที่จุด 2 แกนโชนของแนว G นั้นเป็น (100) และจุด 2 มีสมมาตรแบบ 2mm จึงระบุได้ว่าแนว B นี้เป็นแนวระหว่างระนาบ (111) (ที่จุด 1) กับ (110) (ที่จุด 2) จะสังเกตเห็นแนว (B, D และ F) แบ่งระหว่างแนว A, C และ E ซึ่งแกนโชนของแนวแบ่งเหล่านี้จะเป็นระนาบ <112> เทียบค่ามุมที่วัดได้กับมุมระหว่างระนาบ ผลึกลูกบาศก์ (ในภาคผนวก ข) และเทียบภาพถ่ายที่ได้กับภาพถ่ายมาตรฐาน (ในภาคผนวก ข) จะสามารถระบุจุดระนาบในรูปที่ 3.8 ได้

3.4.4 ภาพถ่ายการเลี้ยวเบนแบบสะท้อนกลับของทวิน

ในบางครั้งภาพถ่ายการเลี้ยวเบนของผลึก ZnSe มีลักษณะเป็นจุดสองชุดซ้อนกันดังในรูปที่ 3.19a สังเกตที่จุด 1 จะมีสมมาตรแบบ 2mm สองชุด ชุดที่หนึ่ง (รูปที่ 3.19b) ประกอบด้วยแนว A, B, C และ D และชุดที่สอง (รูปที่ 3.19c) ประกอบด้วยแนว D, E, F และ G แต่ละชุดสามารถระบุระนาบได้ด้วยวิธีเช่นเดียวกับที่กล่าวข้างต้น (ในหัวข้อ 3.4.3) ดังในรูปที่ 3.21g โดยที่จุด 1 นั้นจะเป็นระนาบ {110} ในทั้งสองชุด แกนโชน P_B และ P_E จะเป็น <100> แกนโชนนอกนั้นเป็น <110> ในชุดที่สองจะสามารถเห็นจุดระนาบ {111} ได้ที่จุด 2 (จุดตัดระหว่างแนว D กับ G) สังเกตว่าภาพทั้งสองเป็นการหมุนรอบจุด 1 {110} ด้วยมุม 70° (มุมระหว่าง P_B กับ P_E) หาจุดระนาบ {110} และ {111} ที่เหลือในภาพฉายทั้งสองโดยเทียบกับภาพถ่ายมาตรฐาน และกำหนดตำแหน่งโดยให้มุมระหว่าง {111} กับ {111} เป็น 70.53° (สมการที่ 3.14) จากภาพทั้งสองจะพบว่า มีหนึ่งจุดระนาบ {111} P_H และสามจุดระนาบ {110} ที่จุด $P_D, 1$ และ P_I ที่ซ้อนกันพอดี ซึ่งจุดระนาบ P_H {111} นี้จะเป็นแกนโชนของชุดระนาบ {110} ชุดนี้ ($P_D, 1$ และ P_I) ด้วย จึงสรุปได้ว่าผลึกของภาพถ่ายในรูปที่ 3.19 นี้ประกอบด้วยเกรน

สองเกรนติดกันที่ระนาบ {111} (มีระนาบ {111} ร่วมกันอยู่ระนาบ)
 แอนนีทวิน (annealing twin) ที่พบมากในผลึก FCC [37]

ซึ่งเป็นลักษณะ

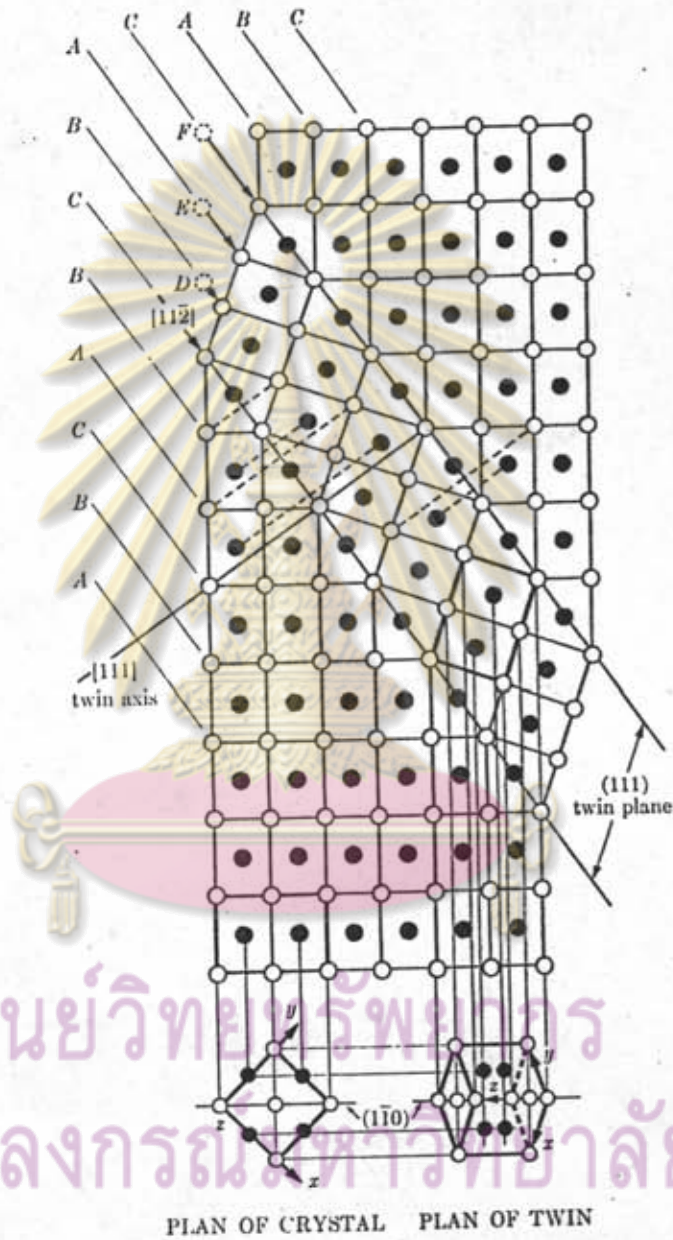


รูปที่ 3.19 ก) ภาพถ่ายการเลี้ยวเบนแบบสะท้อนกลับของทวิน ซึ่งสามารถแยกได้เป็นสองชุดดัง
 ในรูป ข) และ ค)

ลักษณะของทวิน (ในระดับอะตอม) ที่ระนาบ (110) แสดงได้ดังในรูปที่ 3.20
 ในรูปวงกลม โปร่งแทนอะตอมที่อยู่ในระนาบของกระดาษ และวงกลมทึบแทนระนาบที่อยู่เหนือหรือ
 ต่ำกว่าระนาบกระดาษนี้ ที่ลิกทวินจะมีสมมาตรสะท้อนที่ระนาบ 111 (ระนาบทวิน)
 ดังแสดงด้วยเส้นประ แอนนีทวินนี้เกิดจากขบวนการเกิดผลึกในทิศทาง 111 [37]

โดยปกติในผลึก FCC ระนาบ (111) จะมีการเรียงเป็นชั้นของ ABCABC...
 ความผิดพลาดชั้นการเรียงจะกลายเป็น ABCABCBACBACABC...
 ระนาบ C ทั้งสองชั้น

หากเกิด
 จึงเกิดทวินขึ้นระหว่าง

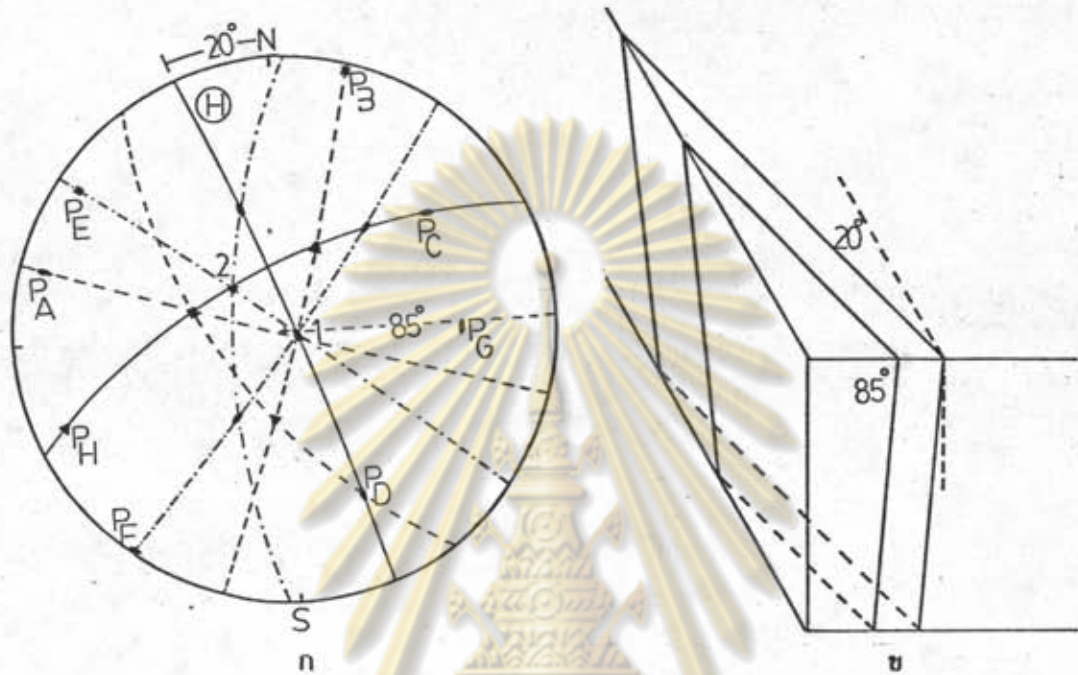


ศูนย์วิทยุวิทยากร
 จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

รูปที่ 3.20 แสดงแถบทวินในโครงผลึก FCC โดยระนาบกระดาษเป็น (110) [37]

ลักษณะทวิน (ระดับผลึก) สามารถหาได้โดยวัดมุมบนวงกลมมูลฐานระหว่างแกนอ้างอิง (NS) กับปลายระนาบโซน P, ซึ่งได้เท่ากับ 20° นั่นคือแนวของทวินเอียงทำมุม 20° กับแนวอ้างอิงในก้อนผลึก และหากพิจารณาแนวทวินที่ภาคตัดผลึก (90° กับผิวหน้า) หน้าตัดนี้จะแทนด้วยส่วนโค้งของวงกลมใหญ่ที่มีมุม 90° จากขั้ว N มุมระหว่างขั้ว

E และจุดตัดระหว่างเส้นหน้าตัดนี้กับแนวระนาบโซน P_H (84°) จะเป็นมุมระหว่างขอบกับแนวทวินที่ภาคตัดตั้งในรูปที่ 3.20 ข นั้นคือจะได้ระนาบรอยต่อ (111) มีทิศทางเดียวกับ P_H ($\delta = -84^\circ$, $\gamma = -20^\circ$)



รูปที่ 3.21 ก) ภาพฉาย และ ข) แผนภาพลักษณะ ของผลึกทวินของภาพฉายในรูปที่ 3.19

3.5 หน้าผลึกและการกัดผิวหน้าผลึก

เนื่องจากสมบัติของผลึกเดียวกันกับทิศทางของระนาบผลึก ดังนั้นในการศึกษาจึงจำเป็นต้องตัดผลึกให้ได้ระนาบผลึกตามต้องการ ในการปลูกผลึกขึ้นอิพินเทกซ์บนผลึกฐานรองเพื่อใช้เป็นอุปกรณ์สารกึ่งตัวนำจะปลูกได้ดีเฉพาะที่หน้าหนึ่ง ๆ ของผลึกฐานรองเท่านั้น การตัดผลึกจึงจำเป็นในการทำอุปกรณ์สารกึ่งตัวนำต่อไปอีกด้วย การพิจารณาการตัดเริ่มแรกจะเลือกตัดบริเวณที่มีเกรนขนาดใหญ่และเล็ก ซึ่งสามารถสังเกตได้ชัดเจนหากได้กัดด้วยสารเคมีดังจะได้กล่าวต่อไป แนวการตัดจะพิจารณาได้จากรูปสามเหลี่ยมที่เกิดที่ผิวผลึก ในบางครั้งที่มีผิวสามเหลี่ยมเป็นบริเวณกว้างจะสะท้อนแสงเลเซอร์ออกเป็นแถบ ๆ ซึ่งสามารถใช้เป็นแนวในการตัดครั้งแรกได้ อีกวิธีหนึ่งที่ใช้พิจารณาร่วมในการหาแนวตัด คือ แนวของการเกิดทวิน [44] ทั้งนี้ตั้งในหัวข้อที่แล้ว (3.4.4) จะพบว่าระนาบทวินในผลึก FCC จะเกิดที่หน้า (111)

ผิวที่ตัดได้ต้องนำไปขัดให้มันด้วยผงขัดอลูมิเนียมขนาด $0.05 \mu\text{m}$ เพื่อให้สามารถสะท้อนแสงเลเซอร์ในการตรวจสอบทิศทางของรังสีเอกซ์ที่ตกกระทบได้ ปรับหมุนผลึกบน goniometer ให้ผิวหน้าผลึกตั้งฉากกับรังสีเอกซ์ โดยให้ลำแสงเลเซอร์ผ่านตัวทำขนานตัวเดียวกับที่ลำรังสีเอกซ์จะผ่าน แล้วปรับผลึกให้แสงสะท้อนจากผลึกอยู่ในแนวเดียวกับแสงตก (กลางตัวทำขนาน) ความผิดพลาดของการเล็งหน้าผลึกจึงขึ้นกับขนาดของตัวทำขนาน (1°) ถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์แบบสะท้อนกลับที่ผิวหน้าผลึกนี้ ระบุระนาบของภาพถ่ายเพื่อหาทิศทางการหมุนผลึกต่อไป เพื่อให้ระนาบที่ต้องการตั้งฉากกับทิศของรังสีเอกซ์ที่ตกกระทบ เมื่อปรับมุมและถ่ายภาพผลึกจนได้ระนาบตามต้องการแล้วเลื่อนผลึกลง ให้แสงเลเซอร์ที่ผ่านตัวทำขนานตกกระทบกระจกที่ติดกับผลึกแล้วสะท้อนกับในแนวเดิม ขณะนี้ผิวกระจกจะขนานกับระนาบผลึกที่ต้องการตัดแล้ว จึงนำผลึกไปตัด โดยปรับให้แนวตัดขนานกับระนาบของกระจก แต่เนื่องจากการตัดยังมีความผิดพลาดได้มาก จึงต้องนำไปปรับมุมและถ่ายภาพการเลี้ยวเบนอีกครั้ง กระจกที่ปรับใหม่จะใช้เป็นแนวในการ lapping โดยติดผลึกให้กระจกขนานกับฐานที่ขัด ผิวหน้าผลึกที่ได้จะมีความผิดพลาดประมาณ 2°

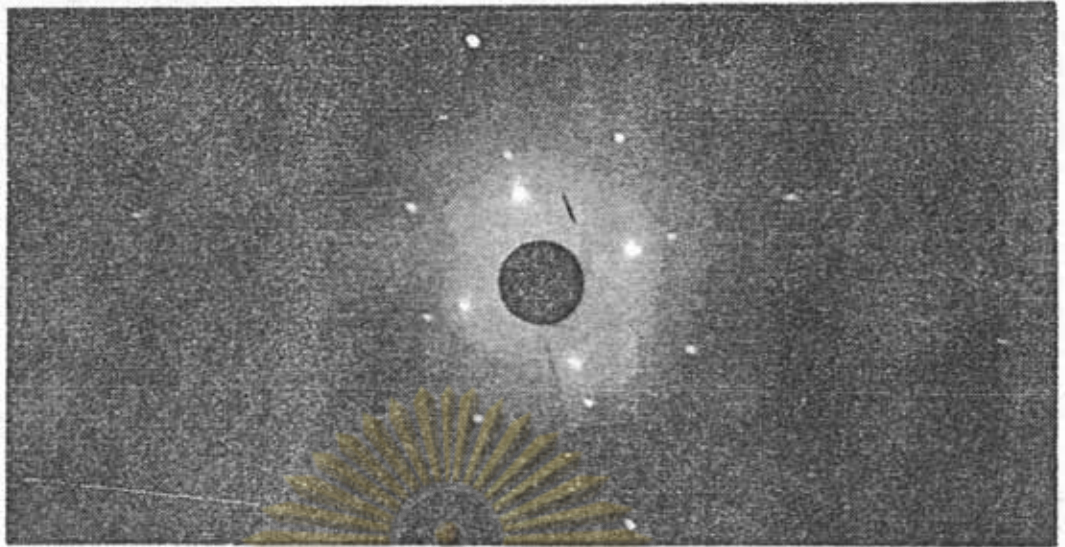
ได้ตัดหน้าผลึก ZnSe ที่ระนาบ (100), (110) และ (111) ซึ่งมีภาพถ่ายการเลี้ยวเบนดังในรูปที่ 3.22 หนึ่งในวิธีการระบุจุดระนาบ (hkl) ผลึกลูกบาศก์ในภาพถ่ายการเลี้ยวเบน (x,y) ที่ทราบทิศทางตกกระทบของรังสีเอกซ์ (u_0, v_0, w_0) ที่แน่นอนจะหาได้จากสมการ [43]

$$\frac{y}{(x^2 + y^2)^{1/2}} = \frac{-(u_1^2 + v_1^2 + w_1^2)^{1/2} (u_2 h + v_2 k + w_2 l)}{D (u_0^2 + v_0^2 + w_0^2)^{1/2} (u_1 h + v_1 k + w_1 l)}$$

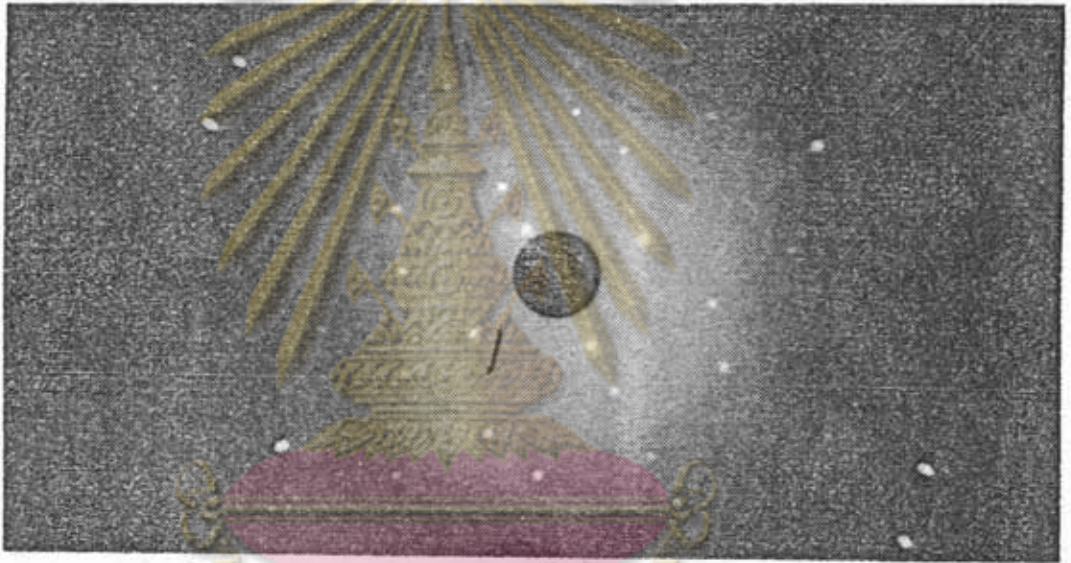
เมื่อ $[u_1, v_1, w_1]$ และ $[u_2, v_2, w_2]$ เป็นทิศของแกน Y และ X ของฟิล์ม ดังนั้นการระบุระนาบโดยวิธีนี้จะต้องหมุนให้แกนตั้งฉาก X, Y อยู่ในแนวจุดที่ทราบทิศแน่นอน โดยเทียบได้จากภาพถ่ายมาตรฐาน แต่บางภาพถ่ายระบุระนาบวิธีนี้ไม่สะดวก อีกวิธีหนึ่งทำได้โดยหาค่ามุมระหว่างจุดระนาบจากตำแหน่งพิกัด x,y บนแกน X, Y ใด ๆ ได้โดยตรงด้วยคอมพิวเตอร์ [46] โดยคำนวณจากสมการที่ 3.13 และจากมุมระหว่างจุดสองจุด (γ) ในโคออร์ดิเนตทรงกลม

$$\cos \gamma = \cos \sigma \cos \sigma' + \sin \sigma \sin \sigma' \cos (\mu - \mu')$$

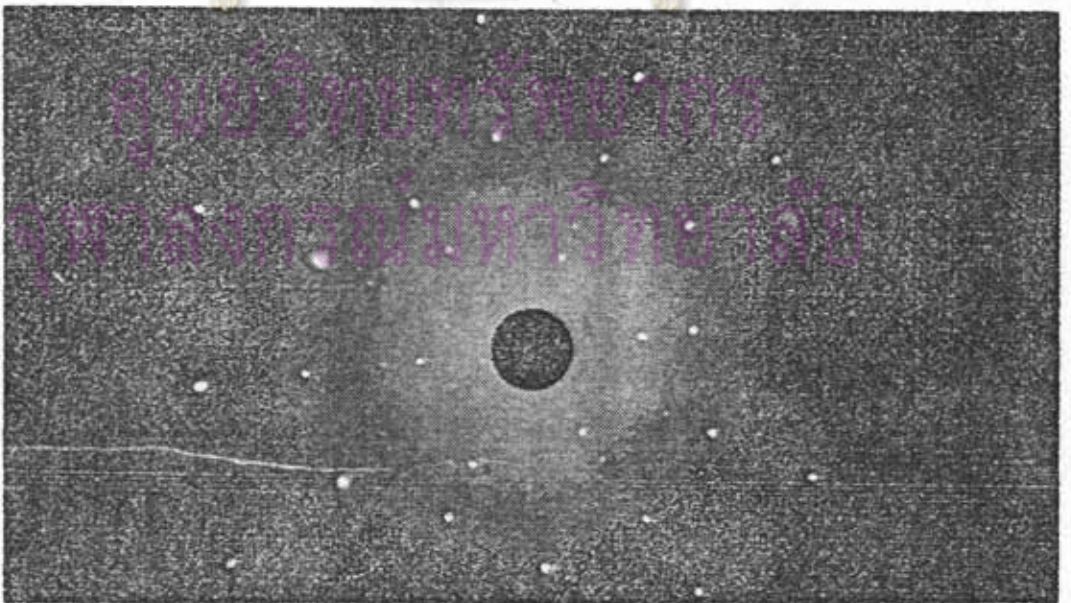
เทียบมุมและภาพถ่ายที่คำนวณได้กับตารางและภาพถ่ายมาตรฐาน (ซึ่งใกล้เคียงกันมาก) จะทำ



ก



ข



ค

รูปที่ 3.22 ภาพถ่ายการเลี้ยวเบนแบบสะท้อนกลับที่ระนาบผลึก ก) (100) ข) (110)

ค) (111)

ศูนย์วิจัยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ให้สามารถระบุระนาบแต่ละจุดได้ ทิศทางของระนาบนอกจากจะพิจารณาจากตำแหน่งของจุดบนภาพที่ได้แล้ว การพิจารณาความเท่ากันของความเข้มของจุดที่สมมาตรกัน เป็นการตรวจสอบทิศทางหน้าผลึกอย่างละเอียด

สำหรับผลึกซิงค์เบลนด์และเวอร์ทไซต์ การระบุหน้าผลึก (111) และ (0001) ด้วยดัชนีระนาบที่หาได้เพียงอย่างเดียวยังไม่เพียงพอ เนื่องจากผลึกเหล่านี้มีสมบัติความเป็นขั้วต่างกันที่ระนาบ (111) และ (0001) ดังในรูปที่ 3.2 ซึ่งสามารถสังเกตได้ด้วยการกัดผิวหน้าผลึกด้วยสารเคมี ความแตกต่างของอัตราการกัดผิวของแต่ละขั้วขึ้นกับความแรงของการเป็นไอออนิกของผลึก [47] ส่วนอัตราการกัดผิวหน้าของผลึกขึ้นกับความเข้มขั้วและค่าสภาพไฟฟ้าลบ (electronegativity) ของผลึก ได้กัดผิวหน้าผลึก (111) ของแวนผลึก ZnSe ซิงค์เบลนด์ในกรด HCl (conc) ที่อุ่นให้ร้อนและใน 0.5% Br-methanol [48] ผิวหน้าผลึกที่กัดได้ด้านหนึ่งจะสะท้อนแสงเป็นมันเงาแต่อีกด้านหนึ่งจะด้าน ผิวหน้าที่สะท้อนแสงเป็นมันเงาจะมีลักษณะเป็นปิรามิดสามเหลี่ยมซ้อนกัน [48] ซึ่ง Burr และ Woods [13] ได้ศึกษาด้วยการกระเจิงรังสีเอกซ์พบว่าผิวหน้าที่มันเงาเป็นหน้าของ Zn (111) (มีการดูดกลืนของ Zn ที่ 1.28 Å) และผิวหน้าที่ด้านเป็นหน้าของ Se (III) (มีการดูดกลืนของ Se ที่ 0.98 Å) นอกจากนี้การกัดผิวหน้าผลึกยังทำให้เห็นการแยกของเกรนและทวินชัดขึ้น ซึ่งได้ใช้เป็นแนวทางในการตัดผลึกดังกล่าวข้างต้น การกัดผิวหน้าด้วยสารเคมีอย่างเบาบาง (ในภาคผนวก ค) จะเป็นการกำจัดสิ่งปนเปื้อน, ชั้นออกไซด์ และสิ่งพร่องออกจากผิวหน้าผลึก ก่อนการทำการย้อม, การแพร่สารเจือ หรือการวัด ในขบวนการศึกษาสมบัติทางไฟฟ้าและแสงในบทความต่อไป

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย