T130369

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การพัฒนาวิธีการอินเด็กซ์เส้นสะท้อนผลึกผงในระบบโมโนคลินิก
หน่วยกิตของวิทยานิพนธ์	12 หน่วย
โดย	นายสุทินธ์ คำน่าน
อาจารย์ที่ปรึกษา	รองศาสตราจารย์ กัลณกา สาธิตธาคา
	นายบุญเลิศ อาชีวระงับโรค
ระดับการศึกษา	วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
ภาควิชา	ฟิสิกส์
ปีการศึกษา	2544

บทคัดย่อ

ซอฟต์แวร์ได้ถูกสร้างขึ้นเพื่อช่วยในการอินเด็กซ์หาระนาบ (hkl) ของผลึกในระบบโมโนคลินิก ซึ่งเป็นระบบที่มีสมมาตรต่ำ การอินเด็กซ์มีความสลับซับซ้อนและยุ่งยาก โดยการใช้วิธีลองผิดลองถูก (Trial and Error Method) ด้วยการแทนค่าตัวแปรต่างๆ งานวิจัยนี้ได้เริ่มจากการศึกษาวิธีอินเด็กซ์ด้วยมือของผลึกระบบต่างๆ เช่น ระบบคิวบิก เตตระกอนอล และระบบออโธรอมบิค เพื่อเป็นแนวทางในการอินเด็กซ์ผลึกระบบโมโนคลินิก และได้ศึกษาการอินเด็กซ์ผลึกในระบบโมโนคลินิก ทั้งนี้ จะมีการคำนวณหาขนาดของหน่วยเซล a b c และ β โดยการสร้างโปรแกรมด้วยภาษาวิชวล เบสิก (Visual Basic) ซึ่งเป็นภาษาที่ถูกออกแบบให้ง่ายต่อการใช้งาน เน้นด้านการใช้กราฟิกเป็นสื่อแทนเมนูหรือคำสั่งต่างๆ ทำการทดสอบโปรแกรมที่สร้างขึ้นด้วยข้อมูลเส้นเลี้ยวเบนมาตรฐานจาก JCPDS (Joint Committee Powder Diffraction Society) ข้อมูลที่จะให้กับโปรแกรมคือค่า $\sin^2\theta_{obs}$ เมื่อ θ เป็นมุมของแบรกก์ และเปรียบเทียบกับค่า $\sin^2\theta_{cal}$ ซึ่งได้จากการแทนค่า a b c และ β ที่ได้จากการคำนวณ และทำการแปรค่า h k และ l ต่างๆ โดยอาศัยสมการความสัมพันธ์ของ $\sin^2\theta$ ในระบบโมโนคลินิก กำหนดความแตกต่างระหว่างค่า $\sin^2\theta_{cal}$ และ $\sin^2\theta_{obs}$ ไว้ไม่เกิน ± 0.00050 ทั้งนี้ ได้ทดสอบจากตัวอย่างจำนวน 80 ตัวอย่าง และผลจากการทดสอบโปรแกรมการอินเด็กซ์หาระนาบ (hkl) ผลึกนั้นพบว่า สามารถอินเด็กซ์หาระนาบผลึกได้ตรงตามผลจาก JCPDS ประมาณ 70 เปอร์เซ็นต์ ของตัวอย่างทั้งหมด ทั้งนี้ ส่วนที่ไม่สามารถอินเด็กซ์ได้เป็นผลมาจากกลุ่มระนาบ (hkl) ของผลึกนั้นอยู่นอกเหนือจากกรณีที่ตั้งไว้ในโปรแกรม คือ พวกที่ไม่มีชุดระนาบที่มีดัชนีมิลเลอร์เป็น (101), $(10\bar{1})$, (202), $(20\bar{2})$, (303), $(30\bar{3})$ และชุดระนาบที่มีดัชนีมิลเลอร์เป็น (111), $(11\bar{1})$, (222), $(22\bar{2})$, (333), $(33\bar{3})$

TE 130369

Thesis Title	The Development of Indexing Reflections of Crystals in Monoclinic System
Thesis Credits	12
Candidate	Mr. Sutin Kumnan
Supervisor	Assoc. Prof. Gannaga Satittada
	Mr. Boonlerd Archewarahuprok
Degree of Study	Master of Science
Department	Physics
Academic Year	2001

Abstract

The software using the Trial and Error Method with various parameter was created for indexing the crystal plane (hkl) of crystal in monoclinic system, the low symmetry of which made the indexing very difficult and complicated. Indexing method was studied in some systems such as cubic , tetragonal and orthorombic. Then the indexing on the monoclinic system was applied by using Visual Basic Program and the unit cell dimensions a , b , c and β were calculated. The Visual Basic Program was designed to be easy for using by graphic commands. This program was tested by using the powder diffraction data from JCPDS (Joint Committee Powder Diffraction Society) with input data for this program at $\sin^2\theta_{obs}$, θ was the Bragg 's angle. Then $\sin^2\theta_{obs}$ was compared with $\sin^2\theta_{cal}$ that calculated by using a ,b , c , β , h , k and l related to the $\sin^2\theta$ in monoclinic system. The difference between $\sin^2\theta_{cal}$ and $\sin^2\theta_{obs}$ was defined to be not more than $\pm$ 0.00050. The 80 samples were used to test the program and 70 percent of the test samples were indexed successfully. The others that had Miller planes except set (101) ,$(10\bar{1})$, (202) , $(20\bar{2})$, (303) , $(30\bar{3})$ and set (111) , $(11\bar{1})$, (222) , $(22\bar{2})$, (333) , $(33\bar{3})$ could not be indexed because of their plane (hkl) groups were not covered by the program.