T130369



| | |
|---|---|
| หัวข้อวิทยานิพนธ์ | การพัฒนาวิธีการอินเด็กซ์เส้นสะท้อนผลึกผงในระบบโมโนคลินิก |
| หน่วยกิตของวิทยานิพนธ์ | 12 หน่วย |
| โดย | นายสุทินธ์ คำน่าน |
| อาจารย์ที่ปรึกษา | รองศาสตราจารย์ กัลณกา สาธิตธาดา |
| | 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 เพื่อเป็นแนวทางในการอินเด็กซ์ผลึกระบบโมโนกลินิก 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 $\pm 0.00050$ 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), $(33\bar{3})$