

ศันศนีย์ รักไทยเจริญชีพ\*

## ประโยชน์จาก

# เอกซเรย์ดิฟแฟรคชัน (XRD)

## ในงานทดสอบวัสดุและผลิตภัณฑ์

เครื่องเอกซเรย์ดิฟแฟรคโตมิเตอร์ (X-ray diffractometer : XRD) เป็นเครื่องมือวิเคราะห์วัสดุขั้นพื้นฐาน ซึ่งเป็นการวิเคราะห์แบบไม่ทำลายตัวอย่าง (non-destructive analysis) เพื่อศึกษาเกี่ยวกับโครงสร้างของผลึก การจัดเรียงตัวของอะตอมในโมเลกุลของสารประกอบต่าง ๆ ทั้งในเชิงคุณภาพและปริมาณ โดยอาศัยหลักการเลี้ยวเบนและการกระเจิงของรังสีเอกซ์ และความรู้เกี่ยวกับวิธาระบบโครงสร้างผลึก เครื่องมือชนิดนี้มีความสำคัญมากในกระบวนการควบคุมคุณภาพการผลิต ใช้สำหรับตรวจสอบสมบัติของวัสดุและผลิตภัณฑ์ในกระบวนการผลิตตามขั้นตอนต่าง ๆ

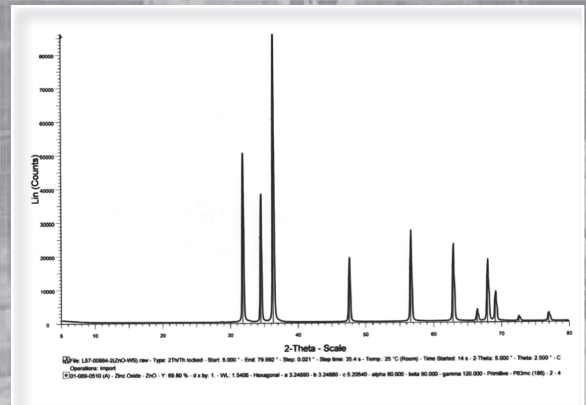
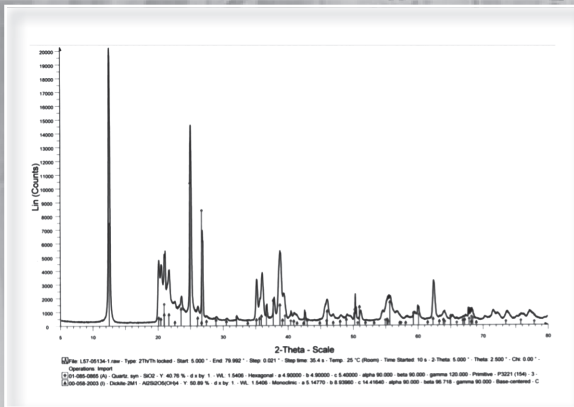
ทฤษฎีพื้นฐานของ XRD อาศัยหลักการเลี้ยวเบนของลำรังสีเอกซ์ เมื่อลำรังสีตกกระทบวัตถุหรืออนุภาคจะเกิดการหักเหของลำรังสีที่สะท้อนทำมุมกับระนาบของอนุภาคเท่ากับมุมของลำรังสีตกกระทบ ในปี ค.ศ. 1912 นาย W.L.Brags ได้นำทฤษฎีดังกล่าวมาศึกษารูปแบบโครงสร้างผลึกของแร่ต่าง ๆ ต่อมาได้มีการประดิษฐ์คิดค้น เครื่องเอกซเรย์ดิฟแฟรคโตมิเตอร์ขึ้นในปี 1948 และมีการพัฒนาอย่างต่อเนื่อง จนกระทั่งสามารถนำคอมพิวเตอร์มาประยุกต์ใช้ในการควบคุมการทำงาน และวิเคราะห์ประมวลผล เพื่อให้เกิดความรวดเร็วแม่นยำยิ่งขึ้น

XRD เป็นที่รู้จักกันอย่างแพร่หลาย ในกลุ่มนักวัสดุศาสตร์ ธรณีวิทยา โลหะวิทยา เพราะเป็นเครื่องมือที่ใช้วิเคราะห์โครงสร้างผลึกของสารประกอบและแร่ ผลการวิเคราะห์จาก XRD ทำให้สามารถแยกแยะประเภทและชนิดของวัสดุที่พบในธรรมชาติว่ามีรูปแบบโครงสร้างผลึกแบบใด หรือจำแนกได้ว่าวัสดุที่พบเห็นนั้นเป็นแร่ชนิดใด โดยทำการวัดค่าความเข้มของรังสีที่สะท้อนออกมาที่มุมต่าง ๆ เปรียบเทียบกับข้อมูลมาตรฐานที่ทำการตรวจวัดโดยองค์กร JCPDs (Joint Committee on Powder Diffraction Standard) เนื่องจากสารประกอบแต่ละชนิด มีรูปแบบโครงสร้างผลึกแตกต่างกัน และระยะห่างระหว่างระนาบของอะตอม ที่จัดเรียงกันอย่างเป็นระเบียบก็แตกต่างกันไปด้วย โดยที่ขนาดและประจุของอะตอมของสารประกอบแต่ละชนิดจะมีรูปแบบ (XRD pattern) เฉพาะตัว เปรียบได้กับลายนิ้วมือของคนที่แตกต่างกัน

### ประโยชน์ของ XRD เพื่อการวิเคราะห์องค์ประกอบของวัสดุและผลิตภัณฑ์

หลักการการทำงานของ XRD ถูกนำมาใช้ประโยชน์เพื่อวิเคราะห์องค์ประกอบของวัสดุและผลิตภัณฑ์อย่างแพร่หลาย ตัวอย่างเช่น การวิเคราะห์แร่ ดังภาพที่ 1 ซึ่งหากดูจากภายนอกคล้ายหินสบู่หรือทลค์ แต่เมื่อวิเคราะห์ด้วย XRD พบว่าแร่มีส่วนประกอบคือ ควอร์ตซ์และดิกโคไซด์ ดังภาพที่ 2 หรือการพบแร่ไพไรต์ซึ่งมีลักษณะคล้ายสินแร่ทองคำ ก็สามารถใช่เทคนิค XRD วิเคราะห์ได้ว่า แร่ที่พบเห็นนั้นใช่แร่ทองคำจริงหรือไม่

ภาพที่ 1 ก้อนแร่ที่สงสัยว่าเป็นหินสปู่



ภาพที่ 4 XRD pattern ของผงสีขาว ซึ่งมีองค์ประกอบคือ  
ซิงค์ออกไซด์เพียงอย่างเดียว

### ประโยชน์ของ XRD เพื่อคำนวณพิกัดภาคีขาเข้า

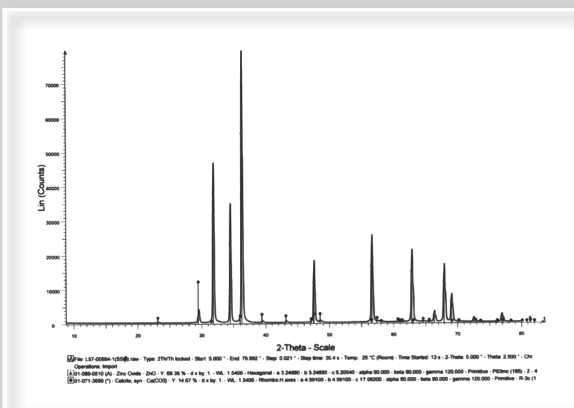
เทคนิค XRD ถูกนำมาใช้เพื่อการทดสอบผลิตภัณฑ์เพื่อคำนวณพิกัดภาคีสินค้าขาเข้า ได้แก่ผลิตภัณฑ์เครื่องใช้บนโต๊ะอาหารประเภทเซรามิกและแก้ว ตามข้อตกลง ASEAN-China FTA เครื่องใช้บนโต๊ะอาหารประเภทเซรามิกที่ไม่ใช่ชนิดพอร์ซเลนหรือไชน่า จะถูกพิกัดภาคีขาเข้าร้อยละ 30 ในขณะที่สินค้าที่เป็นเครื่องใช้บนโต๊ะอาหารประเภทแก้วจะได้รับการยกเว้นภาคีขาเข้าในปัจจุบันเครื่องใช้บนโต๊ะอาหารบางชนิดจำแนกด้วยสายตาได้ยากว่าเป็นผลิตภัณฑ์ที่ทำจากเซรามิกหรือแก้ว จำเป็นต้องใช้เทคนิค XRD ในการตรวจสอบ หากผลิตภัณฑ์นั้นเป็นเซรามิก เมื่อลำแสง x-ray ตกกระทบจะเกิดการกระเจิงและหักเหของลำรังสี เกิดเป็น peak ที่องศาต่างๆ ตามลักษณะโครงสร้างผลึกของสารตัวอย่าง แต่หากผลิตภัณฑ์เป็นแก้วจะไม่เกิดเป็น peak ให้เห็นเนื่องจากแก้วเป็นวัสดุที่ไม่มีโครงสร้างผลึก

### ประโยชน์ของ XRD เพื่อควบคุมคุณภาพวัตถุดิบและผลิตภัณฑ์

XRD มีประโยชน์มากในอุตสาหกรรมการผลิตที่ต้องควบคุมคุณภาพ (quality control) เช่น อุตสาหกรรมปูนซีเมนต์ เป็นที่ทราบกันโดยทั่วไปว่า การผลิตปูนซีเมนต์เป็นสาเหตุของการเกิดก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ (CO<sub>2</sub>) ซึ่งเป็นก๊าซเรือนกระจก เพื่อลดปัญหาดังกล่าว ผู้ผลิตปูนซีเมนต์จึงเติมวัตถุดิบอื่นเพื่อลดการใช้ปูนเม็ด เช่น ถ้ำลอย อย่างไรก็ตามการผสมวัตถุดิบอื่นเมื่อนำไปเผาจะมีผลทำให้ปูนซีเมนต์ที่ได้มีโครงสร้างผลึกที่เปลี่ยนแปลงไปส่งผลต่อสมบัติการนำไปใช้งาน เช่น ความแข็งแรงลดลง การแข็งตัวของปูนช้าลง ผู้ผลิตจึงต้องใช้เทคนิค XRD วิเคราะห์องค์ประกอบของปูนเพื่อรักษาโครงสร้างผลึกให้สม่ำเสมอ

ภาพที่ 2 XRD pattern ของก้อนแร่ในภาพที่ 1 ซึ่งมีองค์ประกอบคือ  
ควออตซ์และคัลไซต์

นอกจากนี้ การวิเคราะห์องค์ประกอบของวัตถุด้วย XRD ยังสามารถใช้ประโยชน์เพื่อจำแนกชนิดของสาร เช่น ตัวอย่าง A มีลักษณะภายนอกเป็นผงสีขาว ซึ่งผู้ขายแจ้งว่า ตัวอย่าง A คือ ซิงค์ออกไซด์ (ZnO) แต่เมื่อนำมาทดสอบด้วย XRD พบว่า ตัวอย่าง A ประกอบไปด้วยซิงค์ออกไซด์และแคลเซียมคาร์บอเนต (CaCO<sub>3</sub>) ดังภาพที่ 3 ในขณะที่สารซิงค์ออกไซด์บริสุทธิ์เมื่อนำมาวิเคราะห์ด้วย XRD จะได้กราฟดังภาพที่ 4 ซึ่งไม่สามารถแยกแยะด้วยตาเปล่าได้เนื่องจากสารทั้งสองชนิดมีลักษณะภายนอกเป็นผงสีขาวเหมือนกัน



ภาพที่ 3 XRD pattern ของผงสีขาว ซึ่งมีองค์ประกอบคือ  
ซิงค์ออกไซด์และแคลเซียมคาร์บอเนต

## การเตรียมตัวอย่างสำหรับวิเคราะห์ด้วยเครื่องเอกซเรย์ดิฟแฟรคชัน

สารตัวอย่างสำหรับการวิเคราะห์ด้วยเครื่องเอกซเรย์ดิฟแฟรคโทมิเตอร์โดยทั่วไปจะอยู่ในรูปของแข็งที่เป็นผงขนาดเล็กกว่า 45 ไมครอน (325 เมช) ปริมาณผงตัวอย่างที่เหมาะสมประมาณ 1-2 กรัม (หากตัวอย่างมีน้อย สามารถอัดบนแผ่นวางตัวอย่างแบบ zero background ได้) และอัดด้วยแรงกระทำสม่ำเสมอเท่ากันทุกทิศทาง บริเวณผิวหน้าของตัวอย่างต้องเรียบสม่ำเสมอ ตัวอย่างที่ดีต้องมีการจัดเรียงตัวของผลึกอย่างอิสระ (random orientation) หากตัวอย่างเป็นก้อน ต้องตัดและขัดหน้าตัวอย่างให้เรียบ ขนาดก้อนตัวอย่างประมาณ 10 x 10 เซนติเมตร การเตรียมตัวอย่างที่ดีมีผลมากต่อผลการวิเคราะห์ เช่น หากบดตัวอย่างละเอียดเกินไปจะทำให้ลายโครงสร้างผลึกหรือหากใช้แรงอัดตัวอย่างมากเกินไปจะทำให้เกิด Preferred Orientation ขึ้นได้

### สรุป

การวิเคราะห์ด้วย XRD มีประโยชน์มากทั้งในการวิเคราะห์ห้องปฏิบัติการและการควบคุมคุณภาพของวัตถุดิบและผลิตภัณฑ์ นอกจากนี้ประโยชน์ในการวิเคราะห์เชิงคุณภาพแล้ว XRD ยังสามารถใช้วิเคราะห์เชิงปริมาณ นั่นคือ ใช้ในการวัดขนาดอนุภาคของวัสดุที่มีขนาดเล็กระดับนาโนเมตรได้อีกด้วย กรมวิทยาศาสตร์บริการ กระทรวงวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี พร้อมให้บริการวิเคราะห์ทั้งเชิงคุณภาพและปริมาณด้วยเครื่อง XRD ของตัวอย่างดิน หิน แร่ ปูนซีเมนต์ เซรามิก และวัสดุเหลือทิ้ง อาทิ แก้วลอย แก้วชานอ้อย แก้วกะลาปาล์ม แก้วแกลบ ตะกรันของโลหะ ตะกอนน้ำทิ้ง และบริการให้คำปรึกษางานวิจัยด้านวัสดุศาสตร์และเซรามิก ผู้สนใจสามารถติดต่อสอบถามได้ที่สำนักเทคโนโลยีชุมชน ในวันและเวลาราชการ

### เอกสารอ้างอิง

CULLITY, B.D. and S.R. STOCK. Elements of X-Ray Diffraction. 3rd ed. Upper Saddle River, NJ : Prentice Hall, 2001.

KINGERY, W.D., et al. Introduction to ceramic. 2nd ed. New York : John Wiley & Sons, 1960.

คันศนีย์ รักไทยเจริญชีพ. การวัดขนาดอนุภาคนาโนเมตรด้วยเทคนิค X-ray Diffraction. วารสารกรมวิทยาศาสตร์บริการ. มกราคม 2557, ฉบับที่ 194, 34-35.

สรินทร ลิ้มปนาท. มารู้อีกกับ XRD กันเถอะ [ออนไลน์]. สถาบันวิจัยโลหะและวัสดุ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2557.

[อ้างถึงวันที่ 3 พฤศจิกายน 2557]. เข้าถึงจาก: <http://www.material.chula.ac.th/RADIO44/APRIL/RADIO4-1.HTM>