



บทที่ 4

การศึกษาค่าคงที่ของโครงผลึกโดยวิธีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

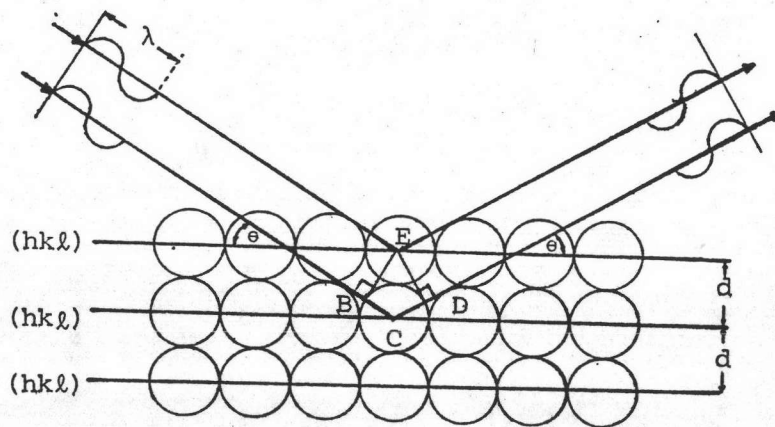
ในบทนี้ จะกล่าวถึงทฤษฎีเบื้องต้นที่เกี่ยวกับการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ เพื่อให้เข้าใจทฤษฎีการหาค่าคงที่โครงผลึกโดยวิธีผลึกผง (Powder method) ตีขึ้น ตลอดจนทราบแนวทางในการนำทฤษฎีดังกล่าวไปประยุกต์

4.1 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึก (11, 12)

ในปี 1895 เรินต์เกน (Roentgen) เป็นผู้พบรังสีเอ็กซ์ ซึ่งจัดเป็นคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า (electromagnetic wave) เป็นรังสีที่สามารถทะลุผ่านตัวกลางต่าง ๆ ได้ดี ไม่ว่าตัวกลางนั้นจะเป็นร่างกายมนุษย์หรือผลึก รังสีเอ็กซ์เกิดจากการปล่อยรังสีแคโทด (cathode ray) ไปกระทบเป้าโลหะที่อาจจะเป็นทองแดงหรือโมลิบดีนัม เมื่อรังสีแคโทดตกกระทบเป้าก็ถ่ายเทพลังงานให้แก่อะตอมของโลหะที่ใช่เป็นเป้า พวกอิเล็กตรอนในอะตอมของโลหะเมื่อได้รับพลังงานเพิ่มขึ้นก็ กระโดดไปอยู่ในระดับพลังงาน (energy level) ที่สูงขึ้น ครั้นตกลงมาอยู่ในระดับพลังงานเดิม พลังงานได้ถูกคายออกมาในรูปของรังสีเอ็กซ์ รังสีเอ็กซ์ที่เหมาะสมสำหรับการหาโครงผลึกควรมีความยาวคลื่น 0.5 - 3.0 อังสตรอม (Å) เมื่อรังสีเอ็กซ์ตกกระทบผลึกจะเกิดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์เพราะอิเล็กตรอนของอะตอมในผลึกสั่นเนื่องจากสนามแม่เหล็กไฟฟ้า และให้พลังงานออกมาในรูปคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าซึ่งมีค่าความถี่และความยาวคลื่น ค่าเดียวกันกับรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบ ส่วนค่าความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาจะมีค่ามากหรือน้อยนั้นขึ้นอยู่กับมุมระหว่างแนวรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนกับแนวของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบ ซึ่งค่าความเข้มของรังสีเอ็กซ์จะลดลงเมื่อมุมระหว่างแนวรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนกับแนวของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบมีค่ามากขึ้น

4.1.1 กฎของแบรกก์

วิธีของแบรกก์ใช้การกำหนดระนาบชุดหนึ่งในผลึกขึ้นมา โดยคิดว่ามีระยะห่างระหว่างระนาบเป็น d ให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบระนาบที่ E และ C เป็นมุม θ แล้วสะท้อนออกจากระนาบเป็นมุม θ เท่าเดิม มุม θ นี้เรียกว่า มุมของแบรกก์ (Bragg angle) ดังรูป 4.1



รูป 4.1 การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์

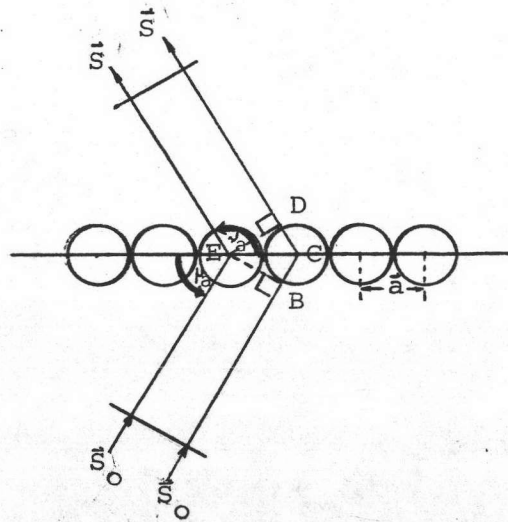
ถ้าคลื่นของรังสีเอ็กซ์ทั้งสองมีความแตกต่างของทางเดินเท่ากับ $BC + CD$ หรือ $2d \sin \theta$ มีค่าเป็น n เท่าของความยาวคลื่นของรังสีเอ็กซ์ (λ) ดังสมการ

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda \quad 4.1$$

เมื่อ $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ เป็นลำดับ สมการ 4.1 นี้แสดงเงื่อนไขของการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ตามความคิดของแบรกก์ จึงเรียกว่า "กฎการเลี้ยวเบนของแบรกก์ (Bragg law)"

4.1.2 เงื่อนไขของลาวเอ

เมื่อรังสีเอ็กซ์ตกกระทบผลึกก็เกิดการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์เนื่องจากผลึกซึ่งประกอบด้วยอะตอมต่าง ๆ เรียงกันเป็นสัณฐาน แต่ในการพิจารณาตามวิธีนี้อาจจะพิจารณาผลึกทีละชั้นหนึ่งชั้นก่อน แล้วเพิ่มเป็นสองชั้นและสามชั้นตามลำดับ ถ้ามีอะตอมเรียงกันเป็นแนวผลึกทีละชั้นหนึ่งชั้น โดยระยะห่างกันเป็น a ดังรูป 4.2



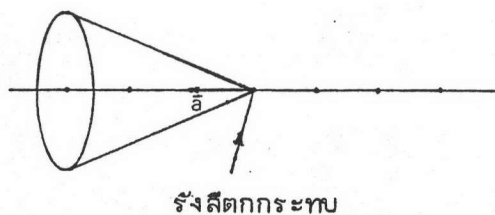
รูป 4.2 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ในหนึ่งมิติ

โดยให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบทำมุมกับ a เป็นมุม μ_a และรังสีเลี้ยวเบนทำมุม ν_a กับ a เมื่อค่าของ S_0 กับ S เป็นเวกเตอร์ที่มีขนาดหนึ่งหน่วยของรังสีตกกระทบกับรังสีเลี้ยวเบนตามลำดับ ถ้าคลื่นของรังสีเอ็กซ์ทั้งสองมีความแตกต่างของทางเดินเท่ากับ $BC + CD$ หรือ $a \cdot (S - S_0)$ มีค่าเป็น h เท่าของความยาวคลื่นของรังสีเอ็กซ์ (λ) ดังสมการ

$$a \cdot (S - S_0) = h\lambda \tag{4.2}$$

เมื่อ $h = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ เป็นลำดับ สมการ 4.2 อันนี้ แสดงเงื่อนไขการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ตามความคิดของลาวเอในหนึ่งมิติ จึงเรียกว่า "เงื่อนไขของลาวเอในหนึ่งมิติ" ซึ่งจากสมการ 4.2 มุม ν_a เป็นมุมระหว่างแนวของรังสี

เลี้ยวเบนทำกับแนวแลตทิซจะพบว่ามีโอกาสเป็นไปได้โดยรอบแนวแลตทิซ ดังนั้นมุม ν จึงเป็นครึ่งมุมยอดของกรวยการสะท้อนของลาวเอ ดังรูป 4.3



รูป 4.3 กรวยของการเลี้ยวเบนในหนึ่งมิติ

ในทำนองเดียวกัน ถ้ามีอะตอมเรียงกันในระนาบแลตทิซ (lattice plane) โดยที่อะตอมแต่ละอะตอมในแต่ละแนวห่างกันเป็นระยะ \vec{a} และ \vec{b} ดังนั้นเงื่อนไขของลาวเอก็ต้องมีสองเงื่อนไข คือ

$$\vec{a} \cdot (\vec{s} - \vec{s}_0) = h\lambda \quad 4.3$$

$$\vec{b} \cdot (\vec{s} - \vec{s}_0) = k\lambda$$

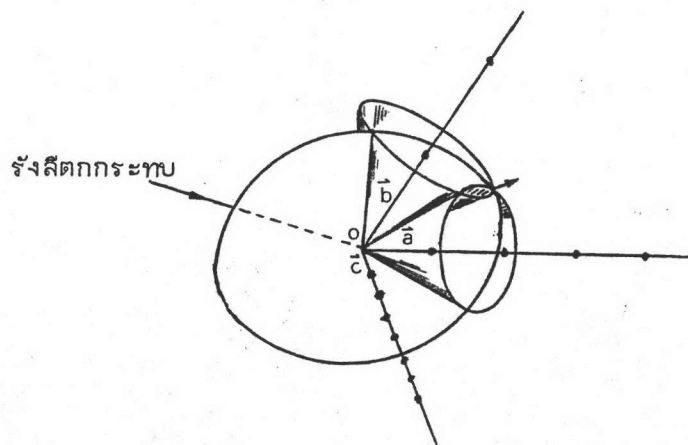
และถ้ามีอะตอมเรียงกันในโครงแลตทิซ (space lattice) โดยที่อะตอมแต่ละอะตอมในแต่ละแนวห่างกันเป็นระยะ \vec{a} , \vec{b} และ \vec{c} ดังนั้นเงื่อนไขของลาวเอก็ต้องมีสามเงื่อนไข คือ

$$\vec{a} \cdot (\vec{s} - \vec{s}_0) = h\lambda$$

$$\vec{b} \cdot (\vec{s} - \vec{s}_0) = k\lambda \quad 4.4$$

$$\vec{c} \cdot (\vec{s} - \vec{s}_0) = l\lambda$$

ดังนั้นจะเกิดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ขึ้นได้ ต้องมีการสอดคล้องทั้ง 3 เงื่อนไข ใน
 สัมการ 4.4 ดังรูปที่ 4.4



รูป 4.4 กรวยของการเลี้ยวเบนในสามมิติ

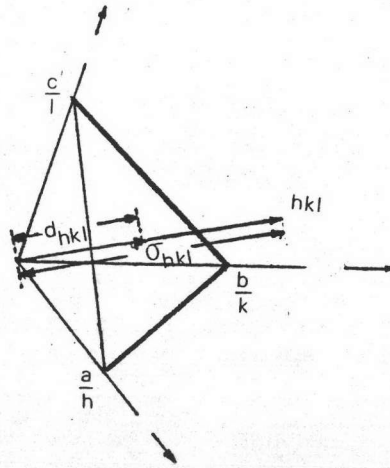
4.1.3 รีซีเพอเคิลแลททิส (reciprocal lattice)

รีซีเพอเคิลแลททิส คือ แลททิสที่ได้จากแลททิสปกติซึ่งได้จากการ
 จัดเรียงตัวของอะตอมต่าง ๆ ในสามมิติในผลึก โดยพิจารณาว่าระนาบทั้งหลายที่มีค่า
 ดัชนีมิลเลอร์ (Miller's indices) เหมือนกันในผลึกชนิดหนึ่ง จะถูกแทนที่ด้วยจุด
 เพียงหนึ่งจุดรีซีเพอเคิล (reciprocal point) และจุดรีซีเพอเคิลทั้งหลายนี้
 จัดเรียงตัวกันอยู่อย่างเป็นระเบียบในสามมิติเกิดเป็นแลททิสใหม่เรียกว่า "รีซีเพอ-
 เคิลแลททิส" ดังนั้นในการสร้างรีซีเพอเคิลแลททิส จึงจำเป็นต้องหาตำแหน่งของ
 จุดรีซีเพอเคิลต่าง ๆ ให้ได้ วิธีการหาจุดรีซีเพอเคิลได้จากการลากเส้นตั้งฉากจาก
 จุดเริ่มต้นไปยังระนาบ hkl ของผลึก โดยให้ความยาวของเส้นตั้งฉากเป็น d_{hkl}
 ดังรูป 4.5 แล้วจะได้จุดรีซีเพอเคิลแลททิสของระนาบ hkl ซึ่งอยู่ที่ปลายของเวก-
 เตอร์ที่ลากตั้งฉากกับระนาบ hkl นั้น แต่อยู่ห่างจากจุดเริ่มต้นเป็นระยะ σ_{hkl}
 โดยที่

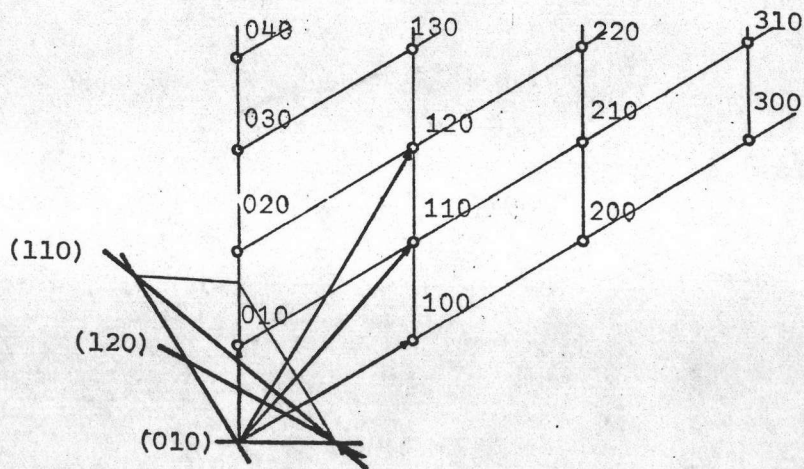
$$\sigma_{hkl} = \frac{1}{d_{hkl}} \quad 4.5$$

ถ้า \vec{n} เป็นเวกเตอร์ที่มีขนาดหนึ่งหน่วยในทิศของเส้นตั้งฉาก ดังนั้นสมการ 4.5 เขียนเป็นสมการเวกเตอร์ได้เป็น

$$\vec{\sigma}_{hkl} = \frac{1}{d_{hkl}} \vec{n} \quad 4.6$$



รูป 4.5 ความสัมพันธ์ระหว่างจุดรีซีเพอเคิลแลททิส hkl กับระนาบ (hkl) ในแลททิสปกติ



รูป 4.6 ระนาบ (010) , (120) , และ (110) ที่เกิดจากการเรียงตัวของจุดแลททิสในแลททิสปกติของผลึกกับจุดรีซีเพอเคิลแลททิสที่ชี้แทนระนาบ (hkl) เหล่านั้น ซึ่งรูปนี้แสดงเพียงสองมิติเท่านั้น

ถ้า a, b, c เป็นค่าคงที่ของโครงผลึกในแลตทิซปกติของผลึก
และ a^*, b^*, c^* เป็นค่าคงที่ของโครงผลึกในรีซีเพอเคิลแลตทิซ ดังนั้นจะ
พบความจริงว่า

$$\begin{aligned}\bar{a}^* & \equiv \bar{\sigma}_{100} = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \\ \bar{b}^* & \equiv \bar{\sigma}_{010} = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \\ \bar{c}^* & \equiv \bar{\sigma}_{001} = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}\end{aligned}\quad 4.7$$

$$\begin{aligned}\bar{a}^* \cdot \vec{b} & = 0 & \bar{a}^* \cdot \vec{c} & = 0 & \bar{a}^* \cdot \vec{a} & = 1 \\ \bar{b}^* \cdot \vec{c} & = 0 & \bar{b}^* \cdot \vec{a} & = 0 & \bar{b}^* \cdot \vec{b} & = 1 \\ \bar{c}^* \cdot \vec{a} & = 0 & \bar{c}^* \cdot \vec{b} & = 0 & \bar{c}^* \cdot \vec{c} & = 1\end{aligned}\quad 4.8$$

$$\begin{aligned}\bar{a}^* & = \bar{\sigma}_{100} = \frac{1}{d_{100}} \vec{n} \\ 2\bar{a}^* & = 2\bar{\sigma}_{100} = \frac{2}{d_{100}} \vec{n} \\ & = \bar{\sigma}_{200} = \frac{1}{d_{200}} \vec{n}\end{aligned}\quad 4.9$$

ตำแหน่งของจุดรีซีเพอเคิลใด ๆ ซึ่งอยู่ห่างจากจุดเริ่มต้นไปทางแกน \bar{a}^* ,
 \bar{b}^* และ \bar{c}^* เป็นระยะ h, k และ l สามารถเขียนแทนได้ด้วยเวกเตอร์ $\bar{\sigma}_{hkl}$
โดย

$$\bar{\sigma}_{hkl} = h\bar{a}^* + k\bar{b}^* + l\bar{c}^* \quad 4.10$$

$$\vec{a} = (\vec{a}^*)^* = \frac{\vec{b}^* \times \vec{c}^*}{\vec{a}^* \cdot \vec{b}^* \times \vec{c}^*}$$

$$\vec{b} = (\vec{b}^*)^* = \frac{\vec{c}^* \times \vec{a}^*}{\vec{a}^* \cdot \vec{b}^* \times \vec{c}^*}$$

$$\vec{c} = (\vec{c}^*)^* = \frac{\vec{a}^* \times \vec{b}^*}{\vec{a}^* \cdot \vec{b}^* \times \vec{c}^*}$$

4.11

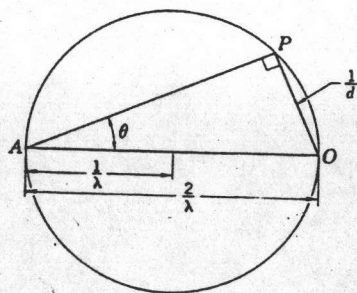
4.1.4 ความสัมพันธ์ระหว่างเงื่อนไขของลาวเอ กฎของแบรกก์กับ

รีซีเพรเคิลแลททิซ

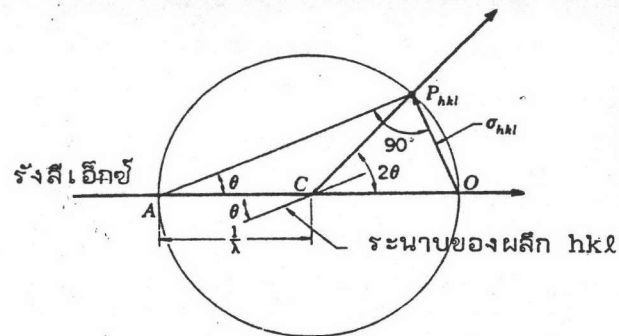
ถ้าเราวิเคราะห์กฎการเลี้ยวเบนของแบรกก์ที่ว่า $2d_{hkl} \sin\theta = n\lambda$ โดยนำมาเขียนใหม่ได้

$$\sin\theta = \frac{\lambda/2}{d_{hkl}} = \frac{1/d_{hkl}}{2/\lambda} = \frac{\sigma_{hkl}}{2/\lambda} \quad 4.12$$

ซึ่งความหมายของสามการนี้ แสดงได้ด้วยสามเหลี่ยมมุมฉากบรรจุในวงกลมมีเส้นผ่าศูนย์กลาง $2/\lambda$ เป็นด้านตรงข้ามมุมฉาก ดังรูป 4.7 ก. และ ข.



รูป 4.7 ก. กฎการเลี้ยวเบนของแบรกก์ในเชิงเรขาคณิต



รูป 4.7 ข. กฎการเลี้ยวเบนของแบรกก์ที่สัมพันธ์กับรีซีเพอเคิลแลททิสล์

จากรูป 4.7 ข. ถ้าวางผลึกไว้ที่จุดศูนย์กลางของวงกลม ให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบผลึกในแนวเส้นผ่าศูนย์กลางของวงกลม ดังนั้นรังสีเอ็กซ์ตกกระทบทำมุม θ กับระนาบของผลึกแล้วเกิดรังสีเลี้ยวเบนไปตัดเส้นรอบวงที่จุด P ซึ่งอยู่ห่างจากจุด O เป็นระยะ σ_{hkl} ดังนั้นจุด O จึงเป็นจุดเริ่มต้นของรีซีเพอเคิลแลททิสล์ และจุด P เป็นจุดรีซีเพอเคิลแลททิสล์ของระนาบ hkl . ถ้าหมุนผลึกก็ทำให้รังสีเอ็กซ์ทำมุมต่าง ๆ กับระนาบของผลึกและเกิดรังสีเลี้ยวเบนเมื่อจุดรีซีเพอเคิลแลททิสล์หมุนไปตัดเส้นรอบวงของวงกลม ถ้าพิจารณาในสามมิติวงกลมนี้ก็คือทรงกลม ซึ่งก็จะเกิดรังสีเลี้ยวเบนทุกครั้งจุดรีซีเพอเคิลแลททิสล์หมุนเข้าตัดผิวของทรงกลม จึงเรียกทรงกลมนี้ว่า "ทรงกลมการสะท้อน (sphere of reflection) หรือ ทรงกลมของอีวาลด์ (Ewald's sphere)"

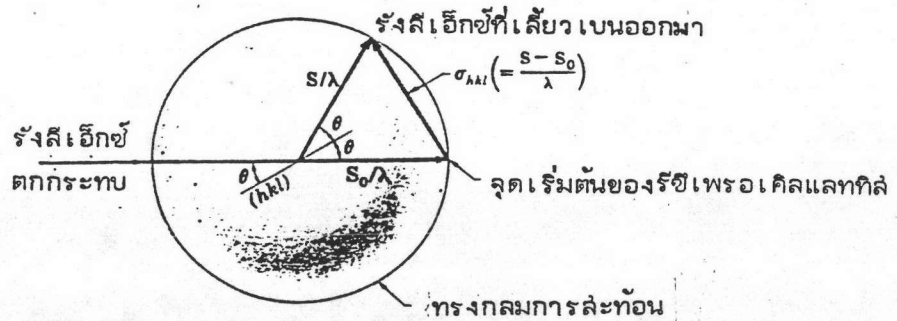
ส่วนความสัมพันธ์ของเงื่อนไซของลาวเอกับรีซีเพอเคิลแลททิสล์นั้น การแสดงได้ดังนี้ โดยพิจารณาจากรีซีเพอเคิลแลททิสล์เวกเตอร์ \vec{R} ใด ๆ ซึ่งเขียนได้ว่า

$$\vec{R} = p\vec{a}^* + q\vec{b}^* + r\vec{c}^* \quad 4.13$$

$$\vec{a} \cdot \vec{R} = \vec{a} \cdot (p\vec{a}^* + q\vec{b}^* + r\vec{c}^*)$$

$$\begin{aligned} \vec{a} \cdot \vec{R} &= p \\ \vec{b} \cdot \vec{R} &= q \\ \vec{c} \cdot \vec{R} &= r \end{aligned} \quad 4.14$$

ถ้าคิดว่า \vec{R} เป็นค่าผลต่างระหว่างเวกเตอร์ที่มีขนาดหนึ่งหน่วย \vec{S} และ \vec{S}_0 คูณด้วย $1/\lambda$



รูป 4.7 ค. ความสัมพันธ์ของเงื่อนไขของลาวเอกับรังสีเพอเคลแลททิล

แทนค่า \vec{R} ลงในสมการ 4.14 ก็ได้เงื่อนไขของลาวเอสามเงื่อนไขดังนี้

$$\begin{aligned} p &= \vec{a} \cdot \left(\frac{\vec{S} - \vec{S}_0}{\lambda} \right) = h \\ q &= \vec{b} \cdot \left(\frac{\vec{S} - \vec{S}_0}{\lambda} \right) = k \\ r &= \vec{c} \cdot \left(\frac{\vec{S} - \vec{S}_0}{\lambda} \right) = l \end{aligned} \quad 4.16$$

เมื่อ h, k และ l จากเงื่อนไขของลาวเอต้องเป็นเลขจำนวนเต็ม เพราะฉะนั้นได้

ความจริงว่า
$$\frac{\vec{S} - \vec{S}_0}{\lambda} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* = \vec{\sigma}_{hkl} \quad 4.17$$

จากนี้ พบว่าความจริงกฎการเลี้ยวเบนของแบรกก์นั้นมีความหมายเหมือนกับเงื่อนไขของลาวเอ เพราะว่าถ้าพิจารณาจากความจริงที่ว่า

$$\frac{1}{\lambda} |\vec{s} - \vec{s}_0| = |\vec{\sigma}_{hkl}| \quad 4.18$$

เมื่อมาวิเคราะห์จากรูป 4.7 ค. พบว่า

$$|\vec{s} - \vec{s}_0| = 2\sin\theta \quad 4.19$$

แทนค่าของ $|\vec{s} - \vec{s}_0| = 2\sin\theta$ และ $|\vec{\sigma}_{hkl}| = \frac{1}{d_{hkl}}$ ลงในสมการ 4.18 ได้กฎการเลี้ยวเบนของแบรกก์นั่นเอง

$$\frac{1}{\lambda} \cdot (2\sin\theta) = \frac{1}{d_{hkl}}$$

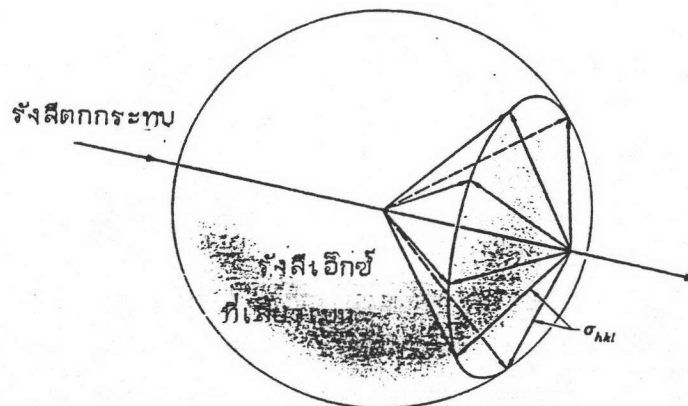
$$2d_{hkl} \sin\theta = \lambda$$

จากทฤษฎีเบื้องต้นเหล่านี้ ทำให้เข้าใจหลักการการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ดีและสามารถนำไปประยุกต์ใช้กับการหาค่าคงที่โครงสร้างผลึก หรือ หาโครงสร้างร่างของผลึกเดี่ยวได้

4.2 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผงสำหรับกล้องเดอบาย-เชอร์เรอร์

เนื่องจากการศึกษาค่าคงที่โครงสร้างผลึกโดยใช้ผลึกเดี่ยวที่มีขนาดใหญ่พอสมควร และต้องเป็นผลึกที่สมบูรณ์ ในทางปฏิบัติผลึกเดี่ยวหาได้ยาก ดังนั้นจึงได้มีผู้พัฒนาการศึกษาค่าคงที่โครงสร้างผลึกมาใช้เป็นผลึกผงของสารนั้นแทนผลึกเดี่ยว ผู้ที่ได้พัฒนามาใช้ผลึกผงแทนก็คือ เดอบาย (Debye) และเชอร์เรอร์ (Scherrer) ในเยอรมันเมื่อปี 1916 และฮัลล์ (Hull) ในอเมริกาเมื่อปี 1917 หลักการของวิธีนี้ พิจารณาว่าผลึกผงจะมีผลึกก้อนเล็ก ๆ สัตเรียงตัวกันอย่างไม่เป็นระเบียบ ไม่มีทิศทางแน่นอนและผลึกเล็ก ๆ เหล่านี้อยู่รวมกันเป็นจำนวนมาก โดยผลึกเล็ก ๆ แต่ละก้อนก็มีรีซีเพอเคิลเลททิสล์ประจำผลึกแต่ละก้อนนั้น ดังนั้นเมื่อพิจารณาซีเพอเคิลเวคเตอร์ $\vec{\sigma}_{hkl}$ อันหนึ่งของผลึกแต่ละก้อน ซึ่งผลึกก้อนเล็ก ๆ เหล่านี้ถ้ามีการเรียงตัวกันอย่างไม่เป็นระเบียบ ดังนั้นจึง

เกิดการเลี้ยวเบนได้โดยรอบเป็นรูปกรวย เมื่อจุดรีซีเพอเคิลที่อยู่ปลายของรีซีเพอเคิลเวคเตอร์เหล่านั้นอยู่บนผิวของทรงกลมการสะท้อน ดังรูป 4.8 ก.



รูป 4.8 ก. รีซีเพอเคิลเวคเตอร์ σ_{hkl} ชุดหนึ่งในผลึกผงที่สอดคล้องกับกฎการเลี้ยวเบนของแบรกก์

แต่ในผลึกผงจริง ๆ จะมีรีซีเพอเคิลเวคเตอร์หลาย ๆ เวคเตอร์ที่สอดคล้องกับกฎการเลี้ยวเบนของแบรกก์ ซึ่งจะมีที่เวคเตอร์นั้นขึ้นอยู่กับชนิดของผลึกผง ดังนั้นจึงเกิดการรวมที่แสดงแนวของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาได้หลายกรวย ดังรูป 4.8 ข.

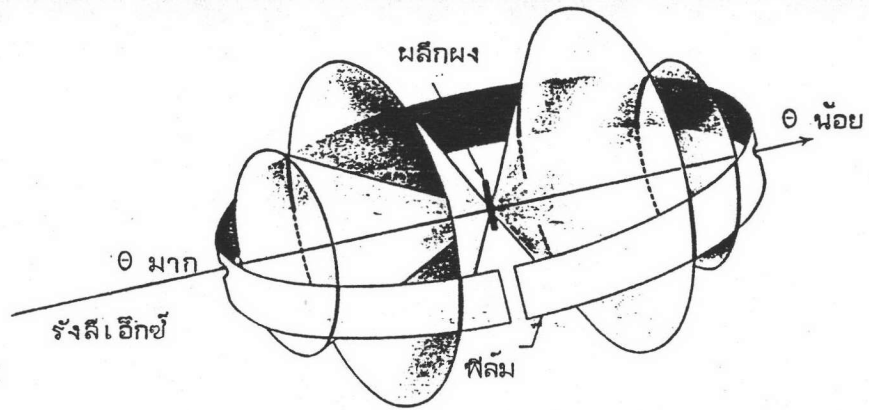
ส่วนลักษณะของฟิล์มที่ใส่ลงในกล้องเดอบาย-เซอร์เรอร์ มี 4 แบบ

คือ

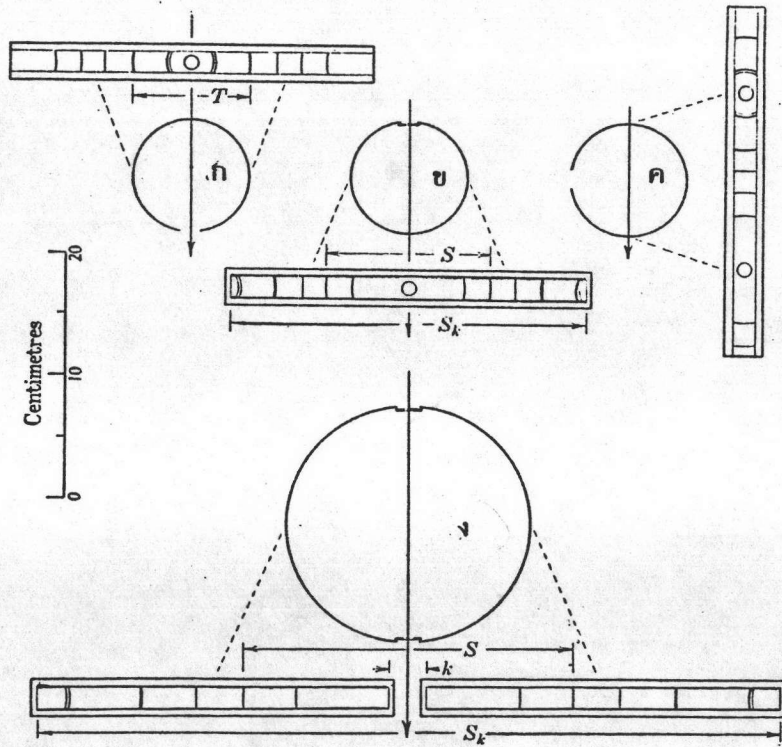
- ก. แบบแวน อาร์เกิล (Van Arkel)
- ข. แบบแบรดเลย์ (Bradley)
- ค. แบบไอ์วินส์ และสเตรามานิส (Ievins and Straumanis)
- ง. แบบแบรดเลย์-แบรกก์ (Bradley-Bragg)

ซึ่งลักษณะของฟิล์มที่ถ่ายภาพเรียบร้อยแล้วทั้ง 4 แบบ แสดงในรูปที่ 4.9 ก., ข.,

ค. และ ง.

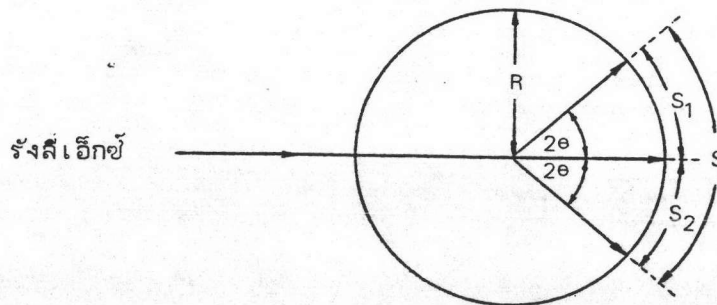


รูป 4.8 ข. กรวยการเลี้ยวเบนและรีซีเพอเคิลเวคเตอร์ชี้ชุดในผลึกผงที่สอดคล้องกับกฎการเลี้ยวเบนของแบรกก์ โดยบันทึกข้อมูลด้วยแผ่นฟิล์ม



รูป 4.9 ลักษณะของฟิล์มที่ใส่ลงในกล้องเดอบาย-เซอร์เรอร์ 4 แบบ
 ก. แบบแวน อาร์เกิล ข. แบบแบรดเลย์
 ค. แบบไอวินส์และสัเทรามานิส ง. แบบแบรดเลย์-แบรกก์

รูปแบบของการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ได้บันทึกโดยแผ่นฟิล์มซึ่งมีลักษณะโค้งรอบผลึกผงดังรูป 4.9 จากรูปแบบของการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์นี้จะช่วยทำให้สามารถวิเคราะห์หาค่าคงที่โครงสร้างผลึกได้โดยใช้ข้อมูลของรัศมีของฟิล์ม การวัดระยะห่างระหว่างเส้นที่ปรากฏบนฟิล์ม ก็สามารถนำข้อมูลมาใช้คำนวณหาค่ามุมของแบรกก์ (θ) และระยะทางของระนาบ (d) ได้ โดยใช้ความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางระหว่างเส้นที่วัดได้กับค่ามุมของแบรกก์ ดังรูป 4.10



รูป 4.10 ความสัมพันธ์กันระหว่างระยะทางระหว่างเส้นรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มกับค่ามุมของแบรกก์

จากรูป 4.9 จะพบว่า

$$4\theta = \frac{S}{R}$$

$$\theta = \left(\frac{1}{4R} \right) S \quad \text{เรเดียน} \quad 4.20$$

$$= \left(\frac{180}{\pi} \cdot \frac{1}{4R} \right) S \quad \text{องศา} \quad 4.21$$

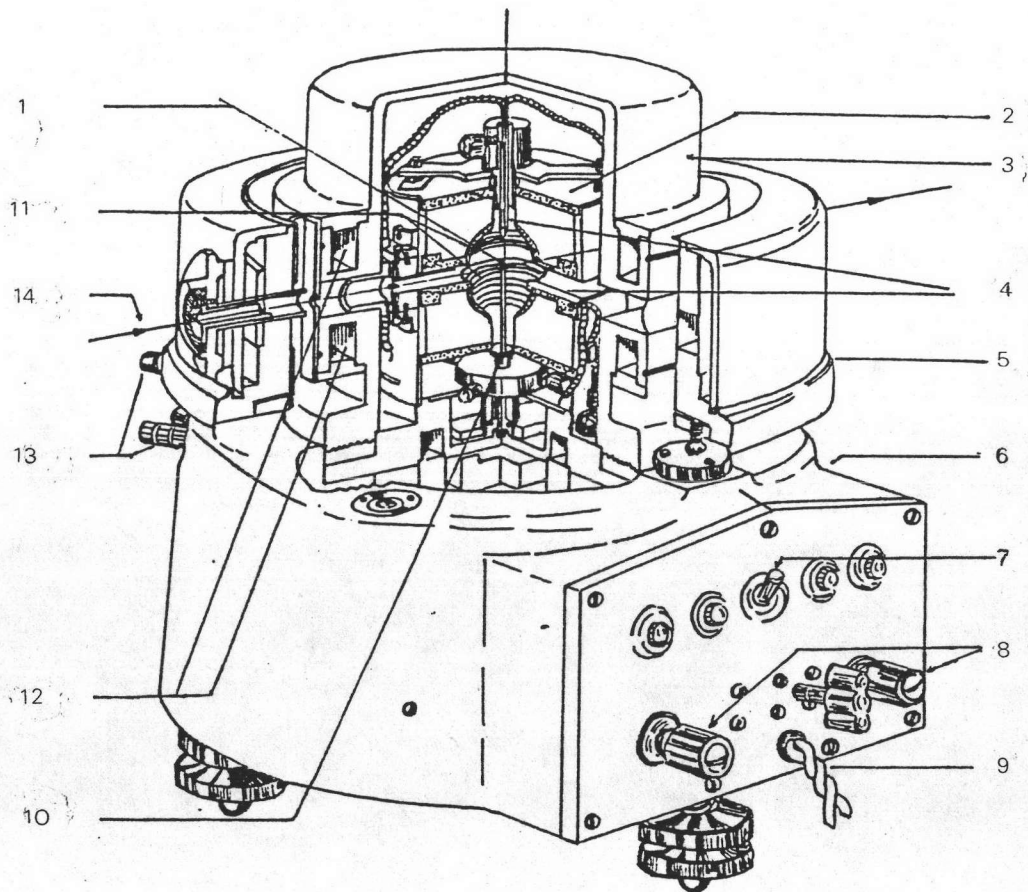
จากการวัดระยะทางระหว่างเส้นของทุก ๆ เส้นที่ปรากฏบนฟิล์ม ต่อมาต้องนำมาวิเคราะห์หาค่าคงที่โครงสร้างผลึก

4.2.1 ลักษณะกล้องเดอบาย-เซอร์เรอร์

กล้องเดอบาย-เซอร์เรอร์นี้มีอยู่ด้วยกันหลายแบบ โดยที่แต่ละแบบนั้นก็มิใช่หลักการในการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผงเหมือน ๆ กัน แต่มีลักษณะที่ต่างต่างกันไปก็คือ ลักษณะของการบรรจุฟิล์มเพื่อบันทึกผล นอกจากนี้กล้องเดอบาย-เซอร์เรอร์อาจมีส่วนประกอบเพิ่มเติมขึ้นไปอีกเพื่อที่สามารถทำให้ผลึกผงมีอุณหภูมิต่าง ๆ เพื่อทำการศึกษาการเปลี่ยนแปลงของโครงสร้างผลึกเมื่ออุณหภูมิเปลี่ยนแปลงไป ซึ่งแบ่งออกได้เป็นสองพวก คือ พวกกล้องถ่ายภาพผลึกผงแบบอุณหภูมิสูง (high-temperature powder camera) และพวกกล้องถ่ายภาพผลึกผงแบบอุณหภูมิต่ำ (low-temperature powder camera) แต่กล้องที่จะกล่าวถึงเป็นกล้องที่ใช้ในการทดลองนี้ เป็นกล้องถ่ายภาพผลึกผงแบบอุณหภูมิสูง (high-temperature powder camera) UNICAM S.70 ซึ่งมีลักษณะการจัดวางเครื่องมือของกล้องจริง ๆ ดังรูป 4.11 ลักษณะของเครื่องมือนี้ประกอบด้วยส่วนที่สำคัญอยู่ 4 ส่วน คือ ส่วนของตัวกล้อง (camera), ส่วนของห้องทำสุญญากาศ (evacuation chamber), ส่วนเตาสำหรับให้ความร้อน (furnace) และส่วนฐานสำคัญ (main base) โดยมีส่วนควบคุม (control unit) ในการป้อนกระแสไฟฟ้าให้กับเครื่องมือแยกออกมาต่างหาก รายละเอียดในแต่ละส่วนจะเป็นดังนี้

ก. ส่วนของตัวกล้อง มีฐานเป็นรูปวงแหวนแต่ตัวกล้องเป็นรูปแบบของทรงกระบอกสั้น ๆ โดยมีส่วนบนและส่วนล่างเปิดออก มีเส้นผ่าศูนย์กลางของรอบนอก 19 เซนติเมตร รอบ ๆ ตัวกล้องรูปทรงกระบอกนี้ ถูกตัดเป็นช่องตรงบริเวณกึ่งกลางของกล้อง ใช้สำหรับใส่ฟิล์มเพื่อใช้บันทึกรังสีเอ็กซ์ที่ถูกเลี้ยวเบน โดยผลึกผงจากมุม $\theta = 5^\circ$ ถึง 85° ส่วนของตัวกล้องนี้ สามารถแยกออกมาจากส่วนต่าง ๆ ของเครื่องทั้งหมดได้ทุกเวลาเมื่อต้องการนำฟิล์มออกมาล้าง หลังจากทำการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผงที่อุณหภูมิต่าง ๆ

ข. ส่วนของห้องทำสุญญากาศ มีลักษณะเป็นรูปทรงกระบอกโดยมีด้านบนปิด แต่ด้านล่างเปิด สิ่งทำให้ส่วนของห้องทำสุญญากาศนี้สามารถถอดออกมาได้ ส่วนทางด้านข้าง ถูกตัดเป็นช่องตรงบริเวณกึ่งกลางเช่นกันเพื่อให้รังสีเอ็กซ์ที่ถูกเลี้ยวเบนออกมาโดยผลึกผงสามารถผ่านไป ซึ่งที่ทางด้านข้างของห้องทำสุญญากาศถูกปิดด้วย



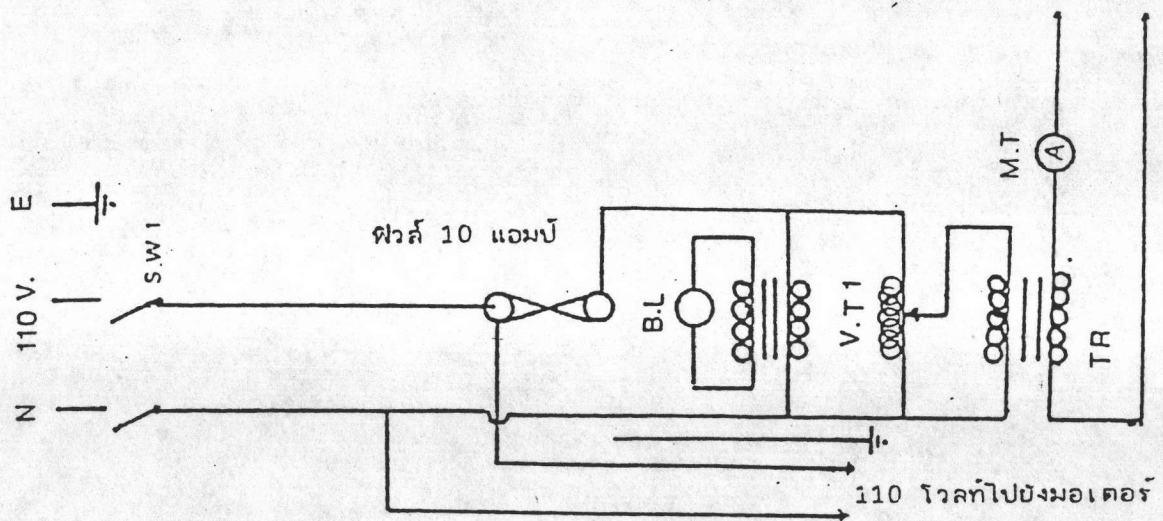
รูป 4.11 ส่วนประกอบของกล้องเดสบาย-เซอร์เรอร์ แบบอุณหภูมิลดลง UNICAM S.70

- | | | | |
|---|----------------------|----|--------------------------|
| 1 | ตำแหน่งผลึก | 8 | ขั้วต่อสายขดลวดความร้อน |
| 2 | เตาสำหรับให้ความร้อน | 9 | สายต่อจากเทอร์โมคัพเพิล |
| 3 | ห้องทำสุญญากาศ | 10 | แท่นยึดผลึก |
| 4 | เทอร์โมคัพเพิล | 11 | ขดลวดความร้อน |
| 5 | ตัวกล้อง | 12 | ช่องทางเดินของน้ำ |
| 6 | ฐานลำคัญ | 13 | ท่อน้ำระบายความร้อน |
| 7 | สวิตช์มอเตอร์ | 14 | แนวทางเดินของรังสีเอ็กซ์ |



รูป 4.12 ก. ส่วนควบคุมในการป้อนกระแสไฟฟ้าให้กับเครื่องมือต่าง ๆ ของกล้องถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผง แบบ อุณหภูมิสูง UNICAM S.70 และเครื่องวัดอุณหภูมิที่ใช้ต่อกับเทอร์โมคัพเพิล

ต่อไปยังขดลวดความร้อน 360 วัตต์



รูป 4.12 ข. วงจรภายในส่วนควบคุมในการป้อนกระแสไฟฟ้า

ซีลโลเฟน (cellophane) เนื่องจากลื่นอยู่ใกล้กับส่วนของเตา ดังนั้นส่วนนี้ จึงต้องการการหล่อเลี้ยงของน้ำผ่านท่อ

ค. ส่วนเตาสำหรับให้ความร้อน มีลักษณะเป็นรูปทรงกระบอกสั้น ๆ 2 อัน อันหนึ่งอยู่ด้านบน แต่อีกอันหนึ่งอยู่ด้านล่าง โดยมีช่องว่างระหว่างกันอยู่ตรงกึ่งกลาง เพื่อให้รังสีเอ็กซ์ที่ถูกเลี้ยวเบนออกมาโดยผลึกผงสามารถผ่านไปได้ ลวดที่ใช้ให้ความร้อนนั้นเป็นพวกโลหะผสม แพลทินัม-โรเดียม (platinum-rhodium alloy) ทำให้เกิดความร้อนแบบสม่ำเสมอ บริเวณจุดศูนย์กลางของเตาเผา โดยลวดพวกนี้ ถูกพันอยู่ในภาชนะทรงกระบอกสั้น ๆ 2 อันนี้ ค่าอุณหภูมิภายในเตาวัดโดยเทอร์โมคัพเพิล (thermocouple) 2 อัน อันหนึ่งติดอยู่ที่ด้านบนของทรงกระบอกอันล่างวางอยู่ตามแนวรัศมี ส่วนอีกอันหนึ่งถูกติดอยู่ตามแนวแกนของทรงกระบอกอันบน ซึ่งสามารถปรับตำแหน่งได้จนกระทั่งอยู่ใกล้ ๆ กับตัวผลึกผงได้ เตานี้สามารถเผาได้ถึงอุณหภูมิ 1000°C

ง. ส่วนฐานสำคัญ ใช้เป็นที่ติดตั้งตัวผลึกผง, ตัวมอเตอร์สำหรับทำให้ผลึกหมุน, ตัวเตา, ตัวห้องทำสูญญากาศ และตัวกลิ้ง ทำด้วยวัสดุที่ไม่ค่อยขยายตัวเมื่อถูกความร้อนสูง ๆ โดยบริเวณฐานก็จะมีปุ่มควบคุมอุปกรณ์ต่าง ๆ

จ. ส่วนควบคุมในการป้อนกระแสไฟฟ้าให้กับเครื่องมือ ถูกแยกออกมาต่างหากดังแสดงในรูป 4.12 ก. ซึ่งมีวงจรภายในเป็นดังรูป 4.12 ข. จากรูปก็พบว่า มีตัว วาริอะเบิล ทรานส์ฟอร์มเมอร์ 1 (V.T.1) ซึ่งเป็นตัวปรับให้ค่าของกระแสไฟฟ้าที่ผ่านขดลวดความร้อนมีค่าเป็นเท่าไรก็ได้ โดยจะทราบว่ามีกระแสไฟฟ้าไหลผ่านเท่าไรได้จาก การอ่านแอมป์มิเตอร์ จึงทำให้สามารถทำการควบคุมอุณหภูมิภายในเตาได้ ซึ่งทราบอุณหภูมิภายในเตาได้จากการอ่านเครื่องวัดอุณหภูมิซึ่งต่อกับเทอร์โมคัพเพิลที่อยู่ภายในเตา

4.2.2 การหาค่าคงที่โครงผลึกในระบบคิวบิกแบบแม่นยำจากภาพถ่ายผลึกผงของกล้องเดอบาย-เชอร์เรอร์ (13, 14)

ในการคำนวณหาค่าคงที่โครงผลึกโดยทั่วไป ต้องนำข้อมูลจากการวัดค่า ระยะทางระหว่างเส้นของการเลี้ยวเบนที่ทราบดัชนีมิลเลอร์แล้วมาคำนวณหาค่ามุมของแบรกก์ (θ) ต่อมาก็ใช้กฎของแบรกก์คำนวณหาระยะทางของระนาบ (d) ซึ่งจากค่าระยะทางของระนาบจะคำนวณหาค่าคงที่ของโครงผลึก (a) ในระบบคิวบิก (cubic system) ได้จาก

$$a = d \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

ดังนั้นจะเห็นว่าถ้า ทำการวัดค่าระยะทางระหว่างเส้นของการเลี้ยวเบนได้แม่นยำ ก็คำนวณค่าคงที่โครงผลึกได้แม่นยำเช่นกัน และเมื่อทำการดิฟเฟอเรนเชียล (differentiate) กฎของแบรกก์จะได้

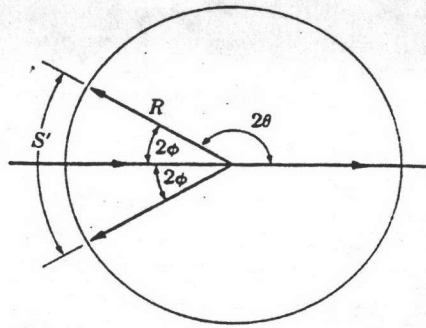
$$\frac{\Delta d}{d} = -\cot\theta \Delta\theta$$

$$\text{ดังนั้น} \quad \frac{\Delta a}{a} = \frac{\Delta d}{d} = -\cot\theta \Delta\theta \quad 4.22$$

ก็ทำให้ได้ความคิดต่อไปอีกว่า ค่าของ $\Delta a/a$ มีค่าเข้าใกล้ศูนย์ เมื่อ θ เข้าใกล้ 90° เพราะฉะนั้นเส้นการเลี้ยวเบนทางด้านที่มีค่า 2θ เข้าใกล้ 180° ทำให้สามารถคำนวณหาค่าคงที่โครงผลึกได้แม่นยำมากที่สุด แต่ก็ยังมีสาเหตุต่าง ๆ ที่ทำให้เกิดความคลาดเคลื่อนในการทดลองได้ดังนี้

- การหดตัวของฟิล์ม (film shrinkage)
- ความไม่ถูกต้องของค่ารัศมีของกล้อง (incorrect camera radius)
- การจัดวางผลึกผงไม่อยู่ที่กึ่งกลางกล้อง (off-centering of powder specimen)
- การดูดกลืนของผลึกผง (absorption in powder specimen)

ซึ่งสาเหตุพวกนี้จะส่งผลดังนี้ จากรูป 4.13



รูป 4.13 การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ทางด้านที่มีค่า 2θ เข้าใกล้ 180°

พบว่า
$$\phi = \frac{S'}{4R} \quad 4.23$$

แต่เนื่องจากเกิดการหดตัวของฟิล์มจึงทำให้เกิดความคลาดเคลื่อนในค่าของ S' มีค่าเท่ากับ $\Delta S'$ ประกอบกับเกิดความไม่ถูกต้องของคาร์ดมีของตัวกล้องมีค่าเท่ากับ ΔR จากสาเหตุทั้งสองก็ส่งผลทำให้เกิดความคลาดเคลื่อนในค่าของมุม ϕ ในสมการ 4.23 ดังนี้

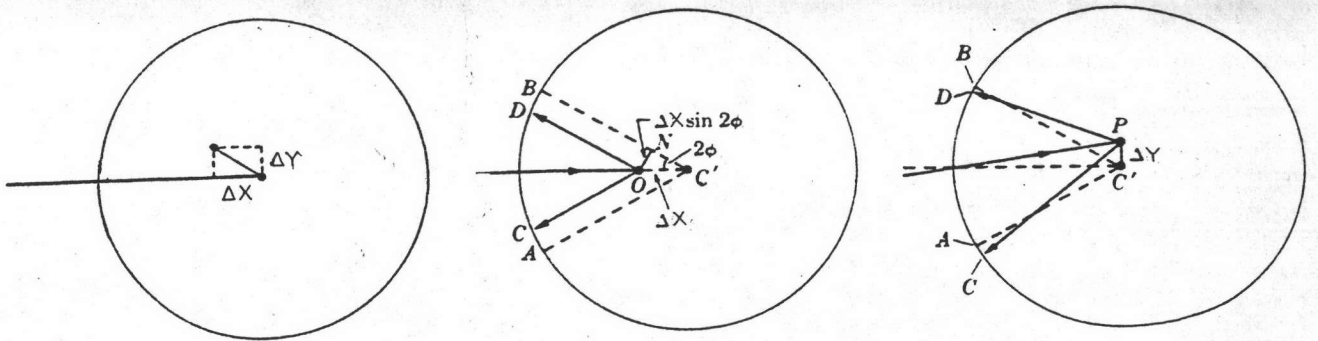
$$\ln \phi = \ln S' - \ln 4 - \ln R$$

ทำการดิฟเฟอเรนเชียล,

$$\frac{\Delta \phi}{\phi} = \frac{\Delta S'}{S'} - \frac{\Delta R}{R} \quad 4.24$$

$$\Delta \phi_{S',R} = \left(\frac{\Delta S'}{S'} - \frac{\Delta R}{R} \right) \phi \quad 4.25$$

สาเหตุต่อมาที่ทำให้เกิดความคลาดเคลื่อนคือ การจัดวางผลึกผงไม่อยู่ที่กึ่งกลางกล้อง ซึ่งส่งผลดังรูป 4.14 ซึ่งสามารถแยกพิจารณาได้เป็น 2 แนว



รูป 4.14 การเกิดความคลาดเคลื่อนเนื่องจากการจัดวางผลึกผก
ไม่อยู่ที่กึ่งกลางกล้อง

แนวแรกพิจารณาค่าความคลาดเคลื่อนในแนวรังสีเอ็กซ์ตกกระทบ พบว่าจะเกิดเส้น
ของรังสีที่ถูกเลี้ยวเบนออกมาโดยผลึกผก ณ ตำแหน่ง C และ D แทนที่จะพบที่
ตำแหน่ง A และ B ซึ่งเป็นตำแหน่งที่ถูกต้อง ซึ่งทำให้เกิดความคลาดเคลื่อนในค่า
ของ S' มีค่าเท่ากับ $(AC + DB) = 2DB = 2 ON$ หรือ

$$\Delta S' = 2ON = 2 \Delta x \sin 2\phi \quad 4.26$$

แนวที่สองพิจารณาค่าความคลาดเคลื่อนในแนวตั้งฉากกับรังสีเอ็กซ์ตกกระทบ พบว่าจะ
เกิดเส้นของรังสีที่ถูกเลี้ยวเบนออกมาโดยผลึกผก คลาดเคลื่อนจากตำแหน่ง A ไปอยู่ที่
ตำแหน่ง C และจากตำแหน่ง B ไปอยู่ที่ตำแหน่ง D เมื่อค่าของ ΔY มีค่าน้อย
ก็ทำให้ค่าของ AC เกือบเท่ากับ BD เพราะฉะนั้นจึงไม่เกิดความคลาดเคลื่อนในค่าของ
 S'

ดังนั้นเมื่อพิจารณาค่าความคลาดเคลื่อนในค่าของมุม ϕ อันเนื่องมาจากการ
จัดวางผลึกผกไม่อยู่ที่กึ่งกลางกล้อง คิดได้จากสมการ 4.25 เมื่อคิดว่า ΔR เท่ากับศูนย์
จะได้

$$\frac{\Delta \phi}{\phi} = \frac{\Delta S'}{S'} \quad 4.27$$

$$\Delta\phi_c = \frac{\phi\Delta S'}{S'} = \frac{\phi(2\Delta x \sin 2\phi)}{4R\phi} = \frac{\Delta x \sin\phi \cos\phi}{R} \quad 4.28$$

ส่วนสาเหตุของการดูดกลืนของผลึกผงที่ทำให้เกิดความคลาดเคลื่อนในค่าของมุม ϕ นั้น มีลักษณะเช่นเดียวกันกับการจัดผลึกไม่อยู่ที่กึ่งกลางกล้องซึ่งมีค่าน้อยมากเมื่อ θ อยู่ระหว่าง 60° ถึง 90° จากสาเหตุความคลาดเคลื่อนทั้งสองอย่าง ทำให้เกิดความคลาดเคลื่อนในค่าของมุม ϕ ดังนี้

$$\Delta\phi_{S',R,C,A} = \left(\frac{\Delta S'}{S'} - \frac{\Delta R}{R} \right) \phi + \frac{\Delta x \sin\phi \cos\phi}{R} \quad 4.29$$

แต่ $\phi = 90^\circ - \theta$, $\Delta\phi = -\Delta\theta$, $\sin\phi = \cos\theta$ และ $\cos\phi = \sin\theta$ เพราะฉะนั้นแทนค่าสมการ 4.22 ได้

$$\frac{\Delta d}{d} = -\frac{\cos\theta}{\sin\theta} \Delta\theta = \frac{\sin\phi}{\cos\phi} \Delta\phi$$

$$\text{และ } \frac{\Delta d}{d} = \frac{\sin\phi}{\cos\phi} \left[\left(\frac{\Delta S'}{S'} - \frac{\Delta R}{R} \right) \phi + \frac{\Delta x \sin\phi \cos\phi}{R} \right] \quad 4.30$$

เมื่อคิดเฉพาะพวกเส้นของการเลี้ยวเบนทางด้านที่มีค่า 2θ เข้าใกล้ 180° นั่นคือมีค่าของ ϕ น้อย ๆ จึงสามารถแทนค่า $\sin\phi \approx \phi$ และ $\cos\phi \approx 1$ จึงได้

$$\frac{\Delta d}{d} = \left(\frac{\Delta S'}{S'} - \frac{\Delta R}{R} + \frac{\Delta x}{R} \right) \sin^2\phi$$

$$\text{หรือ } \frac{\Delta d}{d} = K \sin^2\phi = K \cos^2\theta \quad 4.31$$

เมื่อ K คือ ค่าคงที่ของฟิล์มแต่ละอัน

ในกรณีผลึกผงเป็นผลึกในระบบคิวบิกจะได้

$$\frac{\Delta d}{d} = \frac{\Delta a}{a} = \frac{a - a_0}{a_0} = K \cos^2\theta \quad 4.32$$

$$a = a_0 + a_0 K \cos^2 \theta \quad 4.33$$

แสดงว่าถ้าค่ามุมค่าของ a สำหรับแต่ละเส้นของการเลี้ยวเบนทางด้านที่มีค่า 2θ เข้าใกล้ 180° และนำไปเขียนกราฟกับค่าของ $\cos^2 \theta$ ก็จะได้กราฟเส้นตรง และ a_0 ซึ่งเป็นค่าคงที่ของโครงผลึกที่ถูกต้อง ก็หาได้จากกราฟเส้นตรงนี้ลากไปตัดแกน a โดยที่กราฟนี้มีความชัน (slope) $= a_0 K$

ในการทดลองนั้นต้องนำเอาเส้นของการเลี้ยวเบนที่มีค่า θ มากกว่า 60° ขึ้นไปมาคิด นอกจากเขียนกราฟระหว่างค่าของ a กับค่าของ $\cos^2 \theta$ แล้ว อาจจะมีการเขียนกราฟระหว่าง a กับค่าของฟังก์ชันอื่น ๆ ได้ดังนี้

จากสมการ 4.30 เมื่อ ϕ มีค่าน้อย ๆ จึงสามารถแทน $\sin \phi \cos \phi$ ด้วย ϕ

จะได้
$$\frac{\Delta d}{d} = K \phi \tan \phi$$

ดังนั้นจึงเขียนกราฟระหว่างค่า a กับ $\phi \tan \phi$ ก็ได้ ซึ่งได้ผลเช่นเดียวกับข้างต้น

แต่การเขียนกราฟระหว่างค่า a กับค่าของ $\cos^2 \theta$ หรือ $\phi \tan \phi$ นั้นเหมาะสมกับการหาค่าคงที่โครงผลึกสำหรับผลึกที่สามารถให้เส้นการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ เมื่อมุม θ มากกว่า 60° มีจำนวนเส้นมากพอสมควร แต่ถ้ามีจำนวนเส้นไม่มากพอก็ต้องมาเขียนกราฟระหว่างค่าของ a กับ ฟังก์ชันตัวที่เหมาะสม ซึ่งให้กราฟเป็นเส้นตรงในช่วงของมุม θ ที่กว้างกว่า เพราะได้มีการคำนึงถึงสาเหตุของการดูดกลืนของผลึกผง ที่ทำให้เกิดความคลาดเคลื่อนในค่าของมุม θ ในลักษณะที่ละเอียดขึ้นดังนี้ ในการทดลองจะใช้ผลึกผงที่ทำการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ให้เป็นรูปทรงกระบอก ให้แนวรังสีเอ็กซ์ที่พุ่งตกกระทบผลึกผงตั้งฉากกับแนวแกนของทรงกระบอก เพราะฉะนั้นเมื่อรังสีเอ็กซ์พุ่งผ่านเข้าไปในผลึกผงแล้วเลี้ยวเบนออกจากตัวผลึกผงไปตกกระทบฟิล์มนั้น ทำให้ค่าความเข้มของเส้นรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มมีค่าลดลงในลักษณะต่าง ๆ กัน ซึ่งขึ้นอยู่กับ

- ตำแหน่งของเส้นรังสีเอ็กซ์ว่าอยู่ ณ ที่มุม θ เท่าไร
- ค่าผลคูณของสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงเส้นเฉลี่ยของผลึกผง (the mean linear absorption coefficient of powder specimen, μ) กับค่ารัศมีของผลึกผงที่ทำเป็นรูปทรงกระบอก (r)
- แหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ให้รังสีเอ็กซ์ออกมาในลักษณะเช่นไร

โดยมีหลักเกณฑ์ว่า "ค่าความเข้มในแต่ละส่วนของแถบรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มมีค่าเท่ากับ A เท่าของค่าความเข้มรังสีเอ็กซ์ที่ไม่ถูกดูดกลืน" เมื่อ A คือ แฟคเตอร์การดูดกลืน (absorption factor)

$$A = \frac{1}{4r^2} \iint e^{-\mu z} d\sigma \quad 4.34$$

- เมื่อ μ = สัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงเส้นเฉลี่ยของผลึกผง
 r = รัศมีของผลึกผงซึ่งทำเป็นรูปทรงกระบอก
 z = ระยะทางทั้งหมดที่รังสีเอ็กซ์เดินทางผ่านตัวผลึก
 $d\sigma$ = พื้นที่ภาคตัดขวางเล็ก ๆ ของผลึกผง

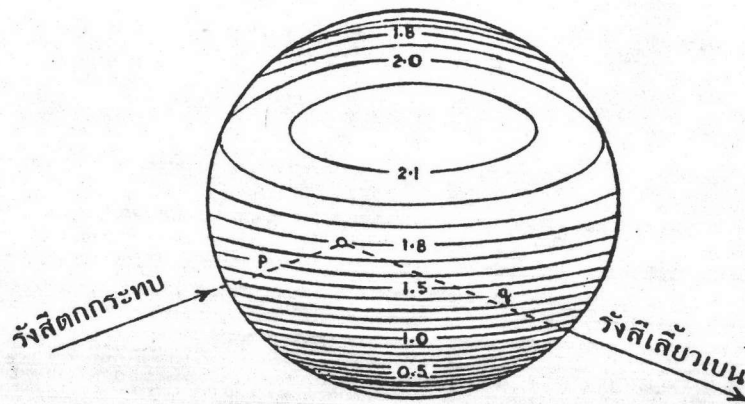
$$\text{หรือ } A = \frac{1}{4} \iint e^{-\mu r b} ds$$

$$\text{เมื่อ } b = \frac{z}{r}$$

$$ds = \frac{d\sigma}{r}$$

ส่วนในการคำนวณค่าของ A ในสมการ 4.34 สำหรับแต่ละค่าของ μr และ θ ได้โดยใช้รูป 4.15 ซึ่งแสดงภาพตัดขวางตัวผลึกที่เป็นรูปทรงกระบอก ส่วนภายในพื้นที่ภาคตัดขวางถูกทำเป็นแนวเส้นทางที่ให้ค่า b มีค่าคงที่ และมีช่วงของค่า b ของแต่ละเส้นเท่ากับ $0.1r$ เพราะฉะนั้นค่าของ A หาได้จากพื้นที่ภาคตัดขวางที่ถูกแบ่งเป็นช่วงเล็ก ๆ ของแต่ละช่วงคูณกับค่า $e^{-\mu r b}$ ซึ่งคิดว่าคงที่ในแต่ละช่วง ต่อมาก็นำมาบวกกันทุกช่วง ดังนั้นค่าของ A สำหรับแต่ละค่าของ μr และ θ จะหาได้ตามต้อง

การ วิธีการคำนวณค่าของ A แบบนี้เรียกว่า "วิธีแบบโตเรค สตรีป (direct strip method)" ถ้านำค่า A ที่คำนวณได้ตามวิธีการแบบนี้มาเปรียบเทียบกับวิธีการของแบรดเลย์ (Bradley) ได้ทำการคำนวณไว้ดังตาราง 4.1 ซึ่งพบว่า วิธีการทั้งสองแบบได้ค่า A ใกล้เคียงกัน แสดงว่าวิธีแบบโตเรค สตรีป ใช้ได้ดี

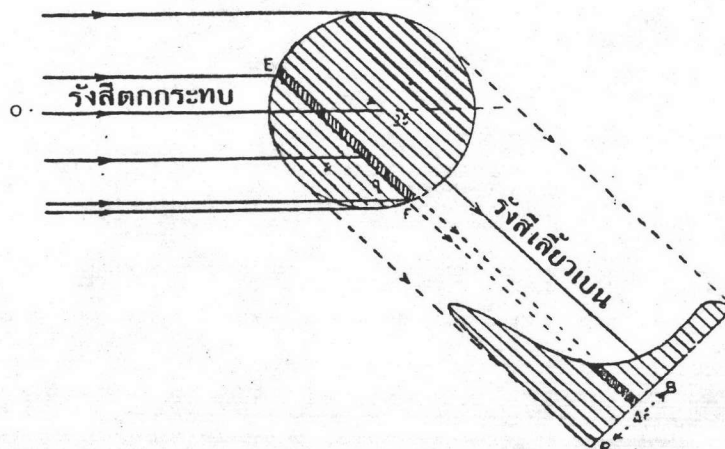


รูป 4.15 พื้นที่ภาคตัดขวางของตัวผลึกผงรูปทรงกระบอก ซึ่งภายในทำเป็นเส้นทางที่มีค่า b คงที่และมีช่วงของ b ของแต่ละเส้นเท่ากับ $0.1r$

ตาราง 4.1 เปรียบเทียบค่าของ A ที่คำนวณได้โดยวิธีแบบโตเรค สตรีป กับวิธีการของแบรดเลย์

$\sin^2 \theta$ θ°	0.0000 0°		0.1464 22½°		0.5000 45°		0.8536 67½°		1.0000 90°	
	โตเรค สตรีป	แบรดเลย์	โตเรค สตรีป	แบรดเลย์	โตเรค สตรีป	แบรดเลย์	โตเรค สตรีป	แบรดเลย์	โตเรค สตรีป	แบรดเลย์
0.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00
0.25	65.9	65.4	66.2	66.0	65.5	65.5	67.5	67.5	68.0	68.0
0.50	43.0	43.5	44.0	44.2	45.0	44.8	46.8	47.8	48.9	49.0
0.75	28.9	29.0	29.8	29.8	32.8	32.5	35.3	35.4	37.5	37.5
1.00	19.4	19.77	21.0	20.95	23.9	24.2	27.5	27.85	29.5	29.5
2.00	4.71	4.71	6.34	6.35	9.93	10.05	13.8	13.84	15.7	15.67
3.00	1.40	1.436	2.89	2.885	5.75	5.82	8.9	8.89	10.54	10.54
4.00	0.50	0.568	1.71	1.706	3.95	4.02	6.53	6.53	7.94	7.94
5.00	0.26	0.276	1.19	1.189	2.96	3.05	5.14	5.14	6.35	6.35

กรณีแรกมาดูลักษณะค่าความเข้มของเส้นรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์ม โดยแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ให้ลำรังสีเอ็กซ์ออกมาในแนวขนานกันหมด ไปตกกระทบตัวผลึกผงรูปทรงระบอก ซึ่งแสดงให้เห็นภาคตัดขวางดังรูป 4.16

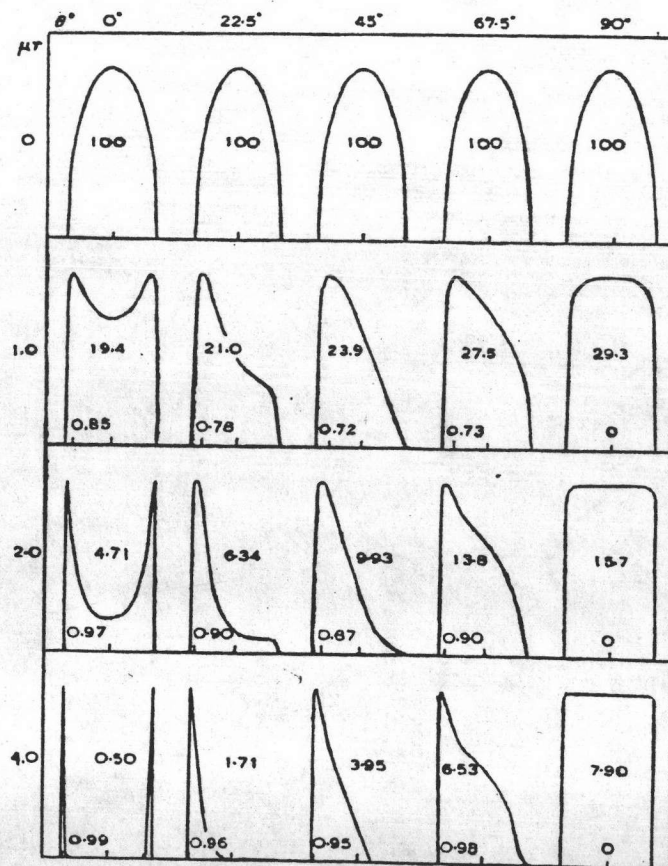


รูป 4.16 ภาพตัดขวางของตัวผลึกผงรูปทรงระบอก ซึ่งถูกแบ่งเป็นช่องเล็ก ๆ ตามแนวขนานกับแนวการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ พร้อมทั้งกราฟแสดงการกระจายของค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมา ณ ที่มุม $\theta = 22\frac{1}{2}^{\circ}$, $n_r = 2.0$

เมื่อลำรังสีเอ็กซ์ตกกระทบผลึกผงในแนวขนานกับ OA ซึ่งทำให้เกิดการเลี้ยวเบนไปในแนวขนานกับ AB โดยที่ทำมุมกับแนวรังสีตกกระทบเท่ากับ 2θ ในรูปแสดงเฉพาะตอนที่ $\theta = 22\frac{1}{2}^{\circ}$ และ $n_r = 2.0$ รังสีเอ็กซ์เมื่อผ่านเข้าไปในตัวผลึกนี้ก็ถูกดูดกลืนตามแนวทางเดินของรังสีเอ็กซ์ จนกระทั่งผ่านพ้นตัวผลึกออกไปตกกระทบบนฟิล์ม จึงทำให้ลักษณะค่าความเข้มของแถบรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มมีลักษณะต่าง ๆ กันออกไป ซึ่งค่าความเข้มในแต่ละส่วนของแถบรังสีเอ็กซ์แปรผันกับค่าของ $\iint e^{-\mu(p+q)} d\sigma$ หรือ $\iint e^{-\mu r b} ds$ เมื่อ $b = (p+q)/r$

ส่วนการคำนวณค่าความเข้มในแต่ละส่วนของแถบรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มนั้น ใช้วิธีการแบบ ไคเรค ลัตรีป โดยการแบ่งภาคตัดขวางเป็นช่องเล็ก ๆ จนเป็นเส้น

ตามแนวขนานกับเส้นการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ แล้วคำนวณค่าของ $\int e^{-\mu x} ds$ จากแต่ละช่วงเล็ก ๆ เช่น ในช่วงเล็ก ๆ EF ที่แลเงาจะต้องหาค่าของ $\int_E^F e^{-\mu x} ds$ จากนั้นนำไปคำนวณค่าความเข้ม และนำเอาความเข้มที่คำนวณได้จากแต่ละช่วงเล็ก ๆ ของผลึกผงในรูป 4.16 มาสร้างเป็นกราฟแสดงการกระจายของค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมา ในทำนองเดียวกันแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมา ณ ที่มุม θ อื่น ๆ กับค่าของ μx ต่าง ๆ กันก็สามารถสร้างกราฟแสดงการกระจายของค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาได้เช่นกัน ดังรูป 4.17



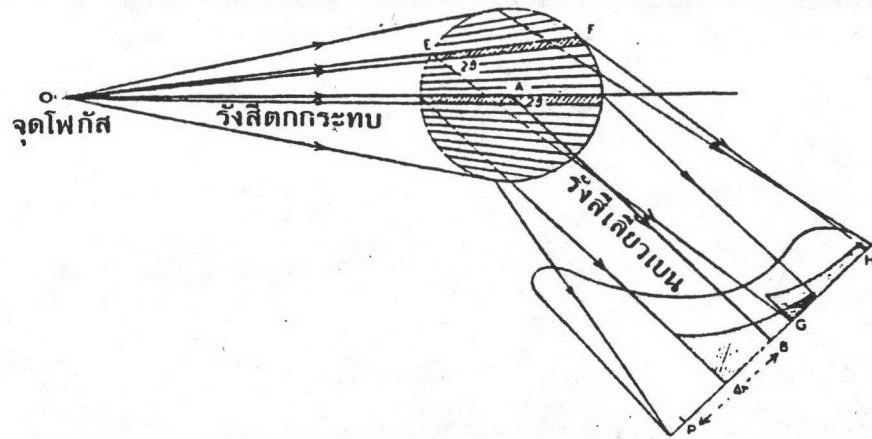
รูป 4.17 การกระจายค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมา ณ ที่มุม $\theta = 0^\circ, 22.5^\circ, 45^\circ, 67.5^\circ$ และ 90° กับค่าของ $\mu x = 0, 1.0, 2.0$ และ 4.0 โดยที่แหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ให้รังสีเอ็กซ์ออกมาแบบขนาน

เมื่อพิจารณารูป 4.17 พบว่าตำแหน่งของค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่มีค่ามากที่สุด ไม่ใช่ตำแหน่งกึ่งกลางในแถบรังสีเอ็กซ์ซึ่งเป็นตำแหน่งการเลี้ยวเบนที่ถูกต้อง แต่มีการคลาดเคลื่อนไปเป็นจำนวน Δx โดยที่ค่า Δx มีค่าแปรผันกับค่าของรัศมีของผลึกผงที่ทำเป็นรูปทรงกระบอก (r) เมื่อมีค่าของ μr คงที่, θ คงที่ และลำรังสีเอ็กซ์ออกมาจากแหล่งกำเนิดเป็นแนวขนานกัน ดังนั้นเพื่อความสะดวกที่จะแสดงค่าของการคลาดเคลื่อนของตำแหน่งค่าความเข้มของแถบรังสีเอ็กซ์ที่มีค่ามากที่สุดไปจากตำแหน่งกึ่งกลางของแถบรังสีเอ็กซ์เป็นในรูปของ $\Delta x/r$ ซึ่งแสดงให้เห็นค่า $\Delta x/r$ อยู่ ณ ที่บริเวณฐานของกราฟแสดงการกระจายของค่าความเข้มของแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมา โดยกรณีนี้ค่าของ $\Delta x/r$ นี้จะมีค่าคงที่เสมอสำหรับทุก ๆ กล้องไม่ว่ากล้องมีรัศมีขนาดเท่าไรก็ตาม ค่าของ $\Delta x/r$ ณ ที่มุม θ ต่าง ๆ และ μr มีค่าต่าง ๆ กัน ได้แสดงในตาราง 4.2

ตาราง 4.2 ค่าของ $\Delta x/r$ ของแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ให้รังสีเอ็กซ์ออกมาแบบขนาน

μr	$\theta = 0^\circ$	$22\frac{1}{2}^\circ$	45°	$67\frac{1}{2}^\circ$	85°	90°
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.25	0.00	0.28	0.30	0.24	0.07	0.00
0.50	0.00	0.58	0.47	0.48	0.22	0.00
0.75	0.72	0.72	0.64	0.64	0.50	0.00
1.00	0.85	0.78	0.72	0.73	0.67	0.00
2.00	0.97	0.90	0.87	0.90	0.90	0.00
3.00	0.98	0.94	0.92	0.96	0.97	0.00
4.00	0.98	0.96	0.95	0.97	1.00	0.00
5.00	0.99	0.97	0.97	0.98	1.00	0.00
∞	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.00

กรณีที่ล่อง มาดูลักษณะค่าความเข้มของเส้นรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์ม โดยแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ที่เป็นจุดโฟกัสของลำรังสีเอ็กซ์ให้รังสีเอ็กซ์ไปตกกระทบตัวผลึกทรงกระบอก ซึ่งแสดงให้เห็นภาคตัดขวางดังรูป 4.18



รูป 4.18 ภาพตัดขวางของผลึกผงรูปทรงกระบอกซึ่งถูกแบ่งเป็นช่วงเล็ก ๆ ตามแนวขนานกับแนวรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบบ พร้อมทั้งกราฟแสดงการกระจายของค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมา

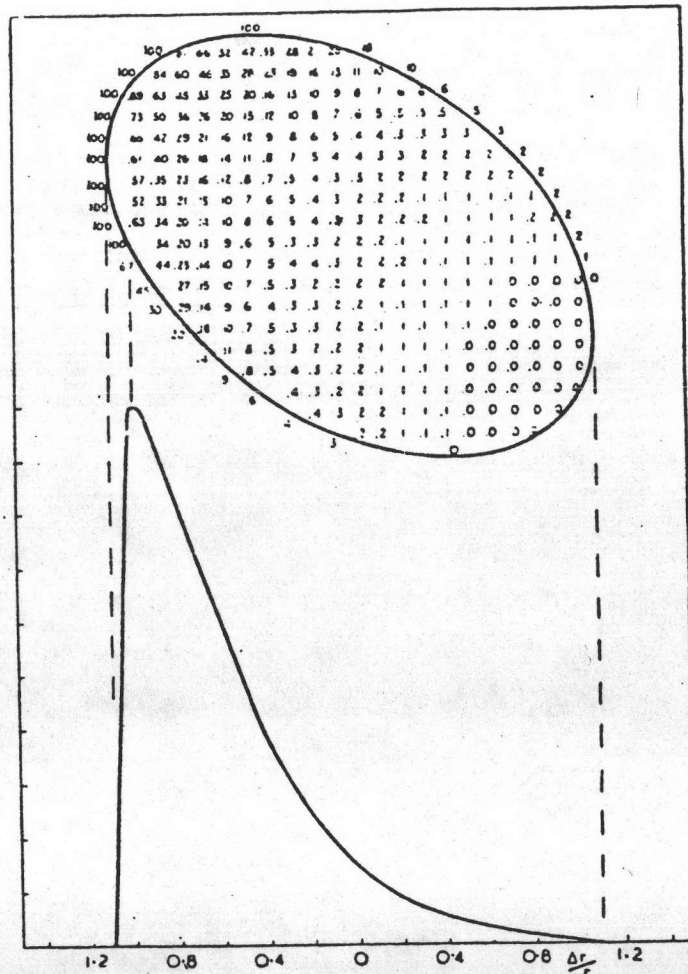
โดยที่ O เป็นแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ที่เป็นจุดโฟกัสของลำรังสีเอ็กซ์
A เป็นแกนกลางของผลึกผงรูปทรงกระบอก

เมื่อพิจารณาลักษณะค่าความเข้มของเส้นรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มในกรณีนี้จะขึ้นอยู่กับ

- ค่ารัศมีของกลองเดอบาย-เชอร์เรอร์ (R)
- ระยะทาง AO
- ตำแหน่งเส้นรังสีเอ็กซ์ว่าอยู่ ณ ที่มุม θ เท่าไร
- ค่าผลคูณของสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงเส้นเฉลี่ยของผลึกผง (μ) กับค่าของรัศมีของผลึกผงที่ทำเป็นรูปทรงกระบอก (r)

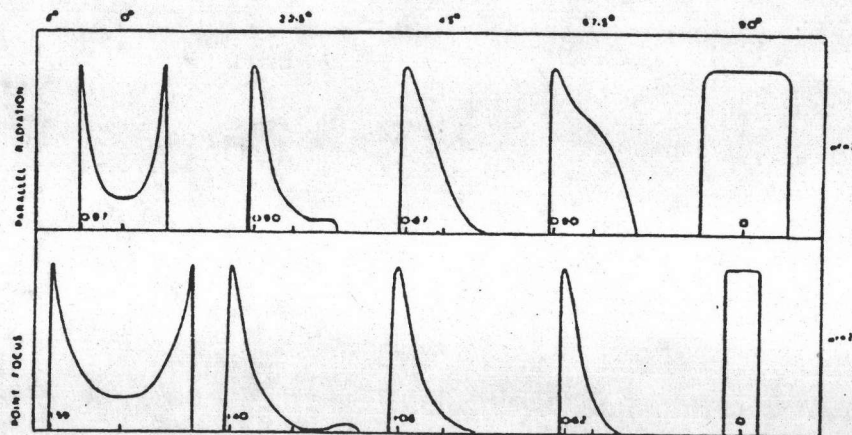
โดยทั่วไปค่ารัศมีของกลองเดอบาย-เชอร์เรอร์ (R) ที่ใช้กันมากมี 2 ค่า คือ R = 95.00 มิลลิเมตร และ 45.00 มิลลิเมตร ซึ่งจะมีค่าของระยะทาง AO เป็น 150 มิลลิเมตร และ 100 มิลลิเมตร ตามลำดับ ในรูป 4.18 นั้น เป็นกรณีที่ R = 45.00 มิลลิเมตร, AO = 100 มิลลิเมตร, $\mu r = 2.0$ ณ ที่ $2\theta = 45^\circ$ ส่วน

การคำนวณค่าความเข้มในแต่ละส่วนของแถบรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มนั้น ก็จะใช้วิธีการแบบโดเรคัสตรีป โดยแบ่งภาคตัดขวางออกเป็นช่วงเล็ก ๆ มาก ๆ ตามแนวของการตกกระทบของรังสีเอ็กซ์ จนคิดได้ว่าช่วงเล็ก ๆ เหล่านั้นเป็นสี่เหลี่ยมผืนผ้าที่มีขนาดต่าง ๆ กัน แล้วคำนวณค่าของ $\int e^{-\mu(p+q)} d\sigma$ จากแต่ละช่วงเล็ก ๆ เช่น ในช่วงเล็ก ๆ EF และช่วงเล็ก ๆ อื่น ๆ ซึ่งถูกนำมาเขียนเป็นแถว ๆ ไว้ในรูป 4.19 โดยเรียง



รูป 4.19 การกระจายค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมา ซึ่งเกิดขึ้นจากแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ ให้รังสีเอ็กซ์ออกมาแบบเป็นจุดโฟกัสของสารรังสีเอ็กซ์ โดยคำนวณ ณ ที่ $\theta = 45^\circ$, $\mu r = 2.0$, $R = 45$ มิลลิเมตร, $AO = 100$ มิลลิเมตร

ลำดับจากช่วงเล็ก ๆ ด้านใกล้ค่าความเข้มสูงสุดลึกเข้าไปเรื่อย ๆ ก็เกิดเป็น "เมตริกซ์ของค่าความเข้มในแต่ละส่วนของแถบรังสีเอ็กซ์ (line - contour matrix)" โดยตัวเลขแต่ละแถวแทนการกระจายของค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่ถูกเลี้ยวเบนออกมาอันเนื่องมาจากแต่ละช่วงเล็ก ๆ ดังนั้นเมื่อรวมตัวเลขในคอลัมน์ก็หาค่าความเข้มในแต่ละส่วนของแถบรังสีเอ็กซ์ได้ ซึ่งแสดงออกมาเป็นรูปภาพแสดงการกระจายของค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมา และในทำนองเดียวกันแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมา θ ที่มุม θ อื่น ๆ ก็สามารถสร้างกราฟแสดงการกระจายของค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาได้เช่นกันดังรูป 4.20 ซึ่งแสดงเปรียบเทียบกันระหว่างพวกที่มีแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ให้ลำรังสีเอ็กซ์ในแนวขนานกันกับพวกที่มีแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์แบบเป็นจุดโฟกัสของลำรังสีเอ็กซ์ ในรูปพบว่าบริเวณช่วงฐานของแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาโดยที่มีแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์แบบเป็นจุดโฟกัสของลำรังสีเอ็กซ์นั้นมีช่วงฐานกว้างขึ้น θ ที่มุม θ น้อยกว่า 45° และมีช่วงฐานแคบลง θ ที่มุม θ มากกว่า 45° เมื่อเปรียบเทียบกับแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาโดยแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ให้ลำรังสีเอ็กซ์ในแนวขนานกัน



รูป 4.20 การเปรียบเทียบความแตกต่างกันของขอบเขตในแถบความเข้มซึ่งเกิดจากแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์แบบขนานและแบบเป็นจุดโฟกัส เมื่อ $AO = 150$ มิลลิเมตร, $R = 95$ มิลลิเมตร, $\mu r = 2.0$

ต่อมาเมื่อพิจารณารูป 4.20 พบว่าตำแหน่งของค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่มีค่ามากที่สุดไม่ใช่ตำแหน่งกึ่งกลางในแถบรังสีเอ็กซ์ซึ่งเป็นการเลี้ยวเบนที่ถูกต้อง แต่ได้มีการคลาดเคลื่อนไปเป็นจำนวน Δx ซึ่งในทำนองเดียวกันกับกรณีแรกการแสดงผลการคลาดเคลื่อนโดยแสดงในรูปของ $\frac{\Delta x}{x}$ ณ ที่ θ ต่าง ๆ และ μx มีค่าต่าง ๆ กันดังแสดงในตารางที่ 4.3

ตาราง 4.3 ค่าของ $\frac{\Delta x}{x}$ ของแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ให้รังสีเอ็กซ์ออกมาแบบเป็นจุดโฟกัส

ก. เมื่อกล้องมี $R = 45$ มิลลิเมตร, $AO = 100$ มิลลิเมตร

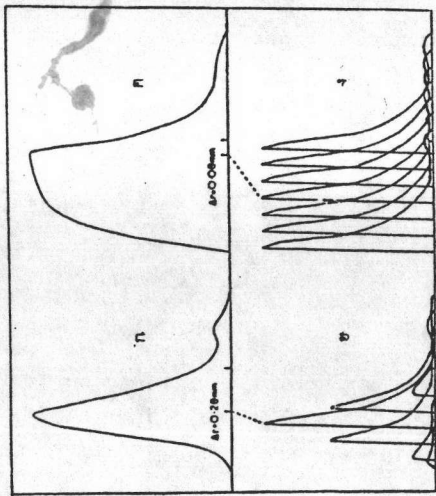
ข. เมื่อกล้องมี $R = 95$ มิลลิเมตร, $AO = 150$ มิลลิเมตร

ก.

$\frac{\Delta x}{x}$ \ θ	0 0°	0.1464 22½°	0.5000 45°	0.8536 67½°	1.0000 90°
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.25	0.00	0.36	0.30	0.15	0.00
0.50	0.00	0.69	0.55	0.28	0.00
0.75	1.05	0.95	0.72	0.38	0.00
1.00	1.23	1.09	0.83	0.46	0.00
2.00	1.40	1.25	1.00	0.63	0.00
3.00	1.42	1.30	1.02	0.71	0.00
4.00	1.43	1.33	1.05	0.73	0.00
5.00	1.44	1.33	1.06	0.73	0.00
∞	1.45	1.34	1.09	0.75	0.00

ข.

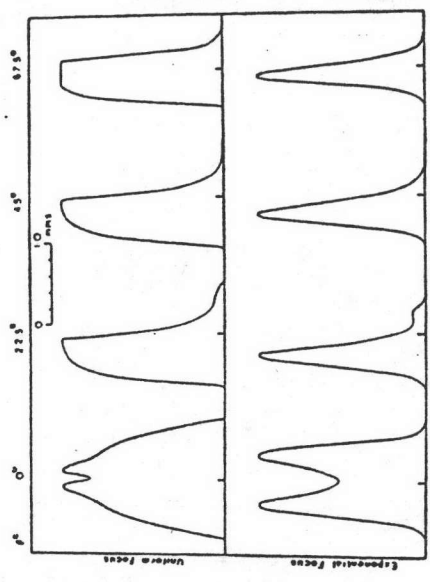
$\frac{\Delta x}{x}$ \ θ	0 0°	0.1464 22½°	0.5000 45°	0.8536 67½°	1.0000 90°
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.25	0.00	0.54	0.44	0.23	0.00
0.50	0.00	0.96	0.76	0.41	0.00
0.75	1.18	1.81	0.90	0.49	0.00
1.00	1.39	1.28	0.97	0.55	0.00
2.00	1.58	1.40	1.06	0.62	0.00
3.00	1.60	1.45	1.07	0.65	0.00
4.00	1.61	1.46	1.12	0.66	0.00
5.00	1.62	1.47	1.13	0.68	0.00
∞	1.63	1.51	1.18	0.71	0.00



รูป 4.21 การกระจายค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมา ซึ่งเกิดจากแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์แบบเป็นเส้นโฟกัสของ ลำรังสีเอ็กซ์ เมื่อ $R = 95.0$ มิลลิเมตร, $AO = 150$ มิลลิเมตร, $r = 0.25$ มิลลิเมตร, $\mu r = 2.0$, $\theta = 22\frac{1}{2}^{\circ}$

ก. เมื่อ η ที่ตำแหน่งต่าง ๆ บนเส้นโฟกัสมีความเข้มแบบ เอ็กซ์โพเนนเชียล $\exp(-k x^2)$

ค. เมื่อ η ที่ตำแหน่งต่าง ๆ บนเส้นโฟกัสมีความเข้มแบบเท่ากันโดยตลอด



รูป 4.22 การเปรียบเทียบความแตกต่างกันของขอบเขตในแถบความเข้ม ซึ่งเกิดจากแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์แบบเป็นเส้นโฟกัสเมื่อ η ที่ตำแหน่งต่าง ๆ บนเส้นโฟกัสมีความเข้มแบบ $\exp(-k x^2)$ และแบบเป็นเส้นโฟกัสเมื่อ η ที่ตำแหน่งต่าง ๆ บนเส้นโฟกัส มีความเข้มแบบเท่ากันโดยตลอด โดยที่ $R = 95.0$ มิลลิเมตร, $AO = 150$ มิลลิเมตร, $r = 0.25$ มิลลิเมตร และ $\mu r = 2.0$

กรณีที่สาม มาดูลักษณะค่าความเข้มของเส้นรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์ม โดยแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ที่เป็นเส้นโพกล์ของสารรังสีเอ็กซ์ ให้รังสีเอ็กซ์ θ ที่ตำแหน่งต่าง ๆ บนเส้นโพกล์มีค่าความเข้มต่าง ๆ กัน ซึ่งจะแยกเป็นสองแบบ คือ

แบบแรก ให้รังสีเอ็กซ์ θ ที่ตำแหน่งต่าง ๆ บนเส้นโพกล์มีค่าความเข้มเท่ากันโดยตลอด

แบบที่สอง ให้รังสีเอ็กซ์ θ ที่ตำแหน่งต่าง ๆ บนเส้นโพกล์มีค่าความเข้มเป็นแบบเอ็กซ์โพเนนเชียล ในรูปแบบของ $\exp(-k^2 x^2)$

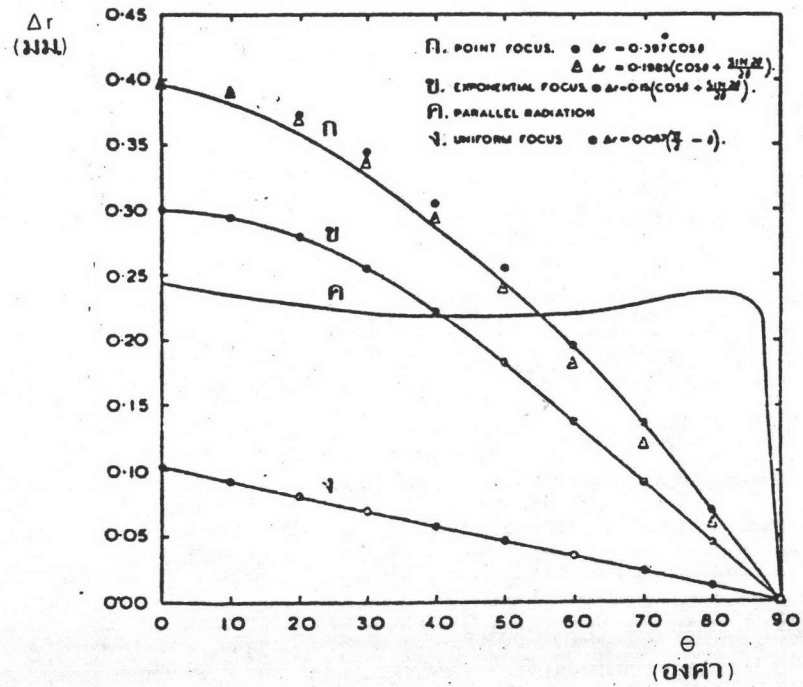
ซึ่งการสร้างกราฟแสดงการกระจายของค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาของทั้งสองแบบใช้วิธีการคิดแบบเดียวกันกับกรณีที่สองก็จะได้กราฟแสดงการกระจายของค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมามีรูป 4.21 และในทำนองเดียวกันแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมา θ ที่มุม θ อื่น ๆ ก็สามารถสร้างกราฟแสดงการกระจายของค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาได้เช่นกัน ดังรูป 4.22

สุดท้ายเมื่อมาพิจารณา ตำแหน่งของค่าความเข้มในแถบรังสีเอ็กซ์ที่มีค่ามากที่สุด จะไม่ใช่ตำแหน่งกึ่งกลางในแถบรังสีเอ็กซ์ซึ่งเป็นการเลี้ยวเบนที่ถูกต้อง แต่ได้เกิดการคลาดเคลื่อนไปเป็น Δx เช่นกัน เมื่อนำค่า Δx θ ที่มุม θ ต่าง ๆ ของแต่ละกรณีมาเขียนเป็นกราฟในรูปแบบเดียวกันจะได้ดังกราฟรูป 4.23

จากที่กล่าวมาข้างต้นได้เห็นว่าสาเหตุการดูดกลืนของผลึกผงทำให้เกิดความคลาดเคลื่อนในค่ามุม θ ได้ในหลาย ๆ แบบ ดังนั้นเมื่อต้องการเขียนกราฟระหว่าง a กับฟังก์ชันที่เหมาะสมให้ได้กราฟเป็นเส้นตรงในช่วงของมุม θ ที่กว้างกว่าช่วงระหว่าง 60° ถึง 90° ก็ต้องทำการทดลองดูลักษณะของกราฟระหว่าง Δx กับ θ ว่ามีลักษณะอย่างไร

เช่น
$$\Delta x = k(\cos\theta + \frac{\sin 2\theta}{2\theta})$$

โดยที่
$$k = \text{ค่าคงที่ใด ๆ}$$



รูป 4.23 กราฟของ Δr กับค่าของมุม θ สำหรับ $R = 95$ มิลลิเมตร, $AO = 150$ มิลลิเมตร, $r = 0.25$ มิลลิเมตร, $\mu r = 2.0$ โดยกราฟ

- ก. ใช้แหล่งกำเนิดเป็นจุดโฟกัส
- ข. ใช้แหล่งกำเนิดเป็นเส้นโฟกัสโดย ϕ ที่ตำแหน่งต่าง ๆ มีความเข้มแบบ $\exp(-k^2 x^2)$
- ค. ใช้แหล่งกำเนิดเป็นแบบให้รังสีแบบแนวขนาน
- ง. ใช้แหล่งกำเนิดเป็นเส้นโฟกัสโดย ϕ ที่ตำแหน่งต่าง ๆ มีความเข้มเท่า ๆ กัน

จากสมการ 4.20 และ 4.22 จะได้ $\frac{\Delta a}{a} = \frac{-\cot\theta}{4R} \Delta S$ (สำหรับระบบควอด) 4.35

$$\Delta S = \Delta S_A + \Delta S_C + \Delta S_S$$

$$\Delta S_A = \text{ความคลาดเคลื่อนของระยะทางบนฟิล์มเนื่องมาจากการดูดกลืนของผลึกผง (คือ } \Delta x \text{)}$$

$$\Delta S_C = \text{ความคลาดเคลื่อนของระยะทางบนฟิล์มเนื่องมาจากวางผลึกผงไม่อยู่ตรงตำแหน่งศูนย์กลางของกล้อง}$$

$$\Delta S_S = \text{ความคลาดเคลื่อนของระยะทางบนฟิล์มเนื่องมาจากการหดตัวของฟิล์ม (ซึ่งสามารถแก้ไขได้ในตอนวัดฟิล์มซึ่งจะกล่าวในวิธีการทดลองต่อไป)}$$

$$\begin{aligned} \Delta S &= 2\Delta x + 2 \Delta x \sin 2\phi \\ &= 2\Delta x + 2 \Delta x \sin [2(90^\circ - \theta)] \\ &= 2\Delta x + 2 \Delta x \sin (180^\circ - 2\theta) \\ &= 2\Delta x + 2 \Delta x \sin 2\theta \end{aligned}$$

แทนค่า Δx ได้

$$\Delta S = 2k \left(\cos\theta + \frac{\sin 2\theta}{2\theta} \right) + 2 \Delta x \sin 2\theta$$

แทนค่า ΔS ลงในสมการ 4.35 ได้

$$\begin{aligned} \frac{\Delta a}{a} &= -\frac{\cot\theta}{4R} \left[2k \left(\cos\theta + \frac{\sin 2\theta}{2\theta} \right) + 2\Delta x \sin 2\theta \right] \\ &= -\frac{k}{2R} \cdot \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \cdot \left(\cos\theta + \frac{\sin 2\theta}{2\theta} \right) - \frac{1}{2R} \cdot \frac{\cos\theta}{\sin\theta} \cdot \Delta x \sin 2\theta \\ &= -\frac{k}{2R} \left(\frac{\cos^2\theta}{\sin\theta} + \frac{\cos^2\theta}{\theta} \right) - \frac{\Delta x}{R} \cos^2\theta \end{aligned}$$

ถ้าคิดในกรณีที่ไม่มี ความคลาดเคลื่อนของระยะทางบนฟิล์มเนื่องจากวางผลึกผงไม่อยู่ตรงตำแหน่งศูนย์กลางของกล้อง (คือ $\Delta x = 0$) เพราะฉะนั้น

$$\frac{\Delta a}{a} = -\frac{k}{2R} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$$

หรือ
$$\frac{a - a_0}{a_0} = -\frac{k}{2R} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$$

$$a = a_0 - a_0 \frac{k}{2R} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$$

แสดงว่าต้องเขียนกราฟระหว่างค่า a กับ $\frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$ ซึ่งเหมาะสม
โดยค่าของ $\frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$ นี้เรียกว่า เนลสัน-ไรเลย์ ฟังก์ชัน (Nelson-Riley
function) แต่ถ้าคิดในกรณีที่มีความคลาดเคลื่อนของระยะทางบนฟิล์มเนื่องจากวางผลึก
ไม่อยู่ตรงตำแหน่งศูนย์กลางของกล้อง ซึ่งในการทดลองจริง ๆ เป็นการยากที่จะทำให้
 $\Delta x = 0$ แต่ค่า Δx นั้นต้องมีค่าคงที่เสมอตลอดการทดลอง ดังนั้นจึงต้องใช้วิธีการ
ต่าง ๆ เพื่อหาค่า Δx ออกมาได้ เพื่อจะได้เขียนกราฟระหว่างค่า a กับ เนลสัน-
ไรเลย์ ฟังก์ชัน ได้เส้นตรง

ในทำนองเดียวกัน ถ้า

$$\Delta r = \frac{r \sin 2\theta}{2\theta} \left(1 + \frac{R}{AO} \right)$$

$$\frac{\Delta a}{a} = - \left(\frac{\Delta x}{R} + \frac{r}{2\theta R} + \frac{r}{2\theta AO} \right) \cos^2 \theta$$

ในกรณีนี้ต้องเขียนกราฟระหว่างค่า a กับ $\cos^2 \theta$ ซึ่งเหมาะสม

และถ้า
$$\Delta r = k \left(\frac{\pi}{2} - \theta \right) \quad \text{เมื่อ } k = \text{ค่าคงที่ใด ๆ}$$

จะได้
$$\frac{\Delta a}{a} = -\frac{k}{2R} \left(\frac{\pi}{2} - \theta \right) \cot \theta$$

ในกรณีนี้ต้องเขียนกราฟระหว่างค่า a กับ $\left(\frac{\pi}{2} - \theta \right) \cot \theta$ ซึ่งเหมาะสม เป็นต้น

4.2.3 การหาค่าคงที่โครงผลึกในระบบเตตระโกนัล จากภาพถ่ายผลึกผง ของกล้อง เตอบาย-เซอร์เรอร์

วิธีการหาค่าคงที่โครงผลึกในระบบเตตระโกนัลมี 3 วิธี

วิธีที่หนึ่ง วิธีการเขียนกราฟสำหรับผลึกในระบบเตตระโกนัล

วิธีการนี้ ต้องมีเส้นของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาตกกระทบฟิล์มเป็นพวกที่มีดัชนีผลเลออร์

hoo, oko และ ool มีจำนวนเส้นมากเพียงพอ ซึ่งมีหลักการดังนี้

$$\begin{aligned}
 \vec{\sigma}_{hkl} \cdot \vec{\sigma}_{hkl} &= (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \\
 &= h\vec{a}^* \cdot \vec{a}^* + k\vec{a}^* \cdot \vec{b}^* + h\vec{a}^* \cdot \vec{c}^* + k\vec{b}^* \cdot \vec{a}^* + k\vec{b}^* \cdot \vec{b}^* \\
 &\quad + k\vec{b}^* \cdot \vec{c}^* + l\vec{c}^* \cdot \vec{a}^* + l\vec{c}^* \cdot \vec{b}^* + l\vec{c}^* \cdot \vec{c}^* \\
 \sigma_{hkl}^2 &= \frac{1}{d_{hkl}^2} = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^* b^* \cos\gamma^* \\
 &\quad + 2klb^* c^* \cos\alpha^* + 2lhc^* a^* \cos\beta^*
 \end{aligned} \tag{4.36}$$

สมการนี้แสดงความสัมพันธ์ของระยะทางระหว่างระนาบในผลึก (d) กับค่าดัชนีผลเลออร์

(h k l) และชนิดของระบบผลึก ดังนั้นถ้าคิดในระบบเตตระโกนัล คือ

$$a^* = b^* \neq c^* ; \alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$$

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{d_{hkl}^2} &= (h^2 + k^2) a^{*2} + l^2 c^{*2} \\
 \frac{4 \sin^2 \theta}{\lambda^2} &= \frac{(h^2 + k^2)}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \\
 \text{หรือ} \quad \sin^2 \theta &= \frac{\lambda^2}{4a^2} (h^2 + k^2) + \frac{\lambda^2}{4c^2} (l^2) \\
 \sin^2 \theta &= A (h^2 + k^2) + C (l^2)
 \end{aligned} \tag{4.37}$$

$$\text{เมื่อ} \quad A = \frac{\lambda^2}{4a^2}, \quad C = \frac{\lambda^2}{4c^2}$$

ถ้าคิดเฉพาะพวก hoo จะได้

$$\sin^2\theta = A h^2 = (\text{ค่าคงที่}) A$$

ซึ่งรูปแบบนี้ก็เหมือนกับกรณีของการหาค่าคงที่ของโครงผลึกในระบบคิวบิก เพราะว่าในระบบนี้ $a^* = b^* = c^*$; $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$

$$\sin^2\theta = A(h^2 + k^2 + l^2) = (\text{ค่าคงที่}) A$$

ดังนั้นจึงใช้วิธีการเขียนกราฟระหว่างค่าของ a กับฟังก์ชันที่เหมาะสมก็สามารถหาค่าคงที่โครงผลึก a ได้ ในทำนองเดียวกันกับข้างต้น ถ้าคิดเฉพาะพวก oko หรือ ool ก็สามารถหาค่าคงที่โครงผลึก b หรือ c ได้ เช่นกัน

วิธีที่สอง วิธีการของโคเฮนสำหรับระบบผลึกเตตระโกนัล วิธีนี้จะคำนวณค่าคงที่โครงผลึกจากค่า $\sin^2\theta$ ของแต่ละเส้นรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาโดยตรง โดยใช้วิธีการแบบกำลังสองน้อยที่สุด (method of least squares) เพื่อลดความคลาดเคลื่อนแบบสุ่ม (random errors) และต้องเลือกใช้ฟังก์ชันที่เหมาะสมสำหรับแสดงค่าของ $\Delta d/d$ เพื่อแก้ความคลาดเคลื่อนแบบเป็นระบบ (systematic error) อันเกิดจากการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ของผลึกผง และการจัดวางผลึกผงไม่อยู่ที่กึ่งกลางกล้อง ซึ่งมีหลักการดังนี้

$$2d \sin\theta = \lambda$$

เมื่อยกกำลังสองทั้งสองข้างของสมการ และเขียนเป็นฟังก์ชันของลอการิทึมได้

$$\ln \sin^2\theta = \ln\left(\frac{\lambda^2}{4}\right) - 2 \ln d$$

ทำการดิฟเฟอเรนเชียลได้

$$\frac{\Delta \sin^2\theta}{\sin^2\theta} = -\frac{2\Delta d}{d}$$

$$\Delta \sin^2\theta = -\frac{2\Delta d}{d} \cdot \sin^2\theta$$

ถ้าคิดในระบบเตตระโกนัล

$$\sin^2 \theta_{\text{cor}} = A(h^2 + k^2) + C(\ell^2)$$

เมื่อ $A = \frac{\lambda^2}{4a^2}$, $C = \frac{\lambda^2}{4c^2}$, $\sin^2 \theta_{\text{cor}}$ คือค่า $\sin^2 \theta$ ที่ถูกต้องจริง ๆ

แต่มีความจริงว่า

$$\sin^2 \theta_{\text{obs}} - \sin^2 \theta_{\text{cor}} = \Delta \sin^2 \theta$$

เมื่อ $\sin^2 \theta_{\text{obs}}$ คือค่า $\sin^2 \theta$ ที่ได้จากการทดลอง

แทนค่า $\sin^2 \theta_{\text{cor}}$ และ $\Delta \sin^2 \theta$ จะได้

$$\sin^2 \theta_{\text{obs}} - A(h^2 + k^2) - C(\ell^2) = - 2 \frac{\Delta d}{d} \sin^2 \theta$$

$$\sin^2 \theta_{\text{obs}} = A(h^2 + k^2) + C(\ell^2) - 2 \frac{\Delta d}{d} \sin^2 \theta \quad \dots 4.38$$

ในหัวข้อที่แล้วได้กล่าวถึงค่า $\frac{\Delta d}{d}$ ซึ่งเป็นความคลาดเคลื่อนที่เกิดขึ้นอย่างเป็นระบบในรูปของฟังก์ชันของมุม θ ถ้าสามารถเลือกฟังก์ชันที่เหมาะสมได้ตามวิธีการเลือกที่กล่าวมาแล้วให้นำมาแทนค่าลงในสมการ 4.38 เช่น

$$\text{สมมุติว่าได้} \quad \frac{\Delta d}{d} = K \cos^2 \theta$$

$$\text{เมื่อ} \quad K = \text{ค่าคงที่}$$

$$\text{ดังนั้น} \quad \sin^2 \theta_{\text{obs}} = A(h^2 + k^2) + C(\ell^2) + D \sin^2 2\theta$$

$$\text{เมื่อ} \quad D = \text{ค่าคงที่}$$

$$\text{หรือ} \quad \sin^2 \theta_{\text{obs}} = A \alpha + C \gamma + B \delta \quad \dots 4.39$$

$$\text{เมื่อ } A = \frac{\lambda^2}{4a^2}, \quad \alpha = (h^2 + k^2), \quad C = \frac{\lambda^2}{4c^2}, \quad \gamma = l^2, \quad B = \frac{D}{10}$$

$$\text{และ } \delta = 10\sin^2 2\theta$$

ในสมการ 4.39 เมื่อใช้วิธีการแบบกำลังน้อยที่สุด สามารถหาสมการนอร์มัล (normal equation)

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i \sin^2 \theta_i = A \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 + C \sum_{i=1}^n \alpha_i \gamma_i + D \sum_{i=1}^n \alpha_i \delta_i$$

$$\sum_{i=1}^n \gamma_i \sin^2 \theta_i = A \sum_{i=1}^n \gamma_i \alpha_i + C \sum_{i=1}^n \gamma_i^2 + D \sum_{i=1}^n \gamma_i \delta_i$$

$$\sum_{i=1}^n \delta_i \sin^2 \theta_i = A \sum_{i=1}^n \delta_i \alpha_i + C \sum_{i=1}^n \delta_i \gamma_i + D \sum_{i=1}^n \delta_i^2$$

สัญลักษณ์ x_i หมายถึง ค่าของ x ของแต่ละเส้นรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมา
เส้นที่ i โดยที่ x อาจจะเป็นค่า $\sin^2 \theta$, α , γ ,
และ δ

n หมายถึง จำนวนเส้นรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมา

วิธีที่สาม วิธีการใช้ซิลิกอนเป็นสารมาตรฐานผลลัมกับผลึกผงซึ่งเป็น
สารที่ต้องการหาค่าคงที่โครงสร้างผลึก วิธีการนี้สารซิลิกอนที่เป็นสารมาตรฐานนั้นต้องทราบค่า
คงที่โครงสร้างผลึกและรูปแบบการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่แน่นอนแล้วเสียก่อน จึงค่อยนำไปผลลัม
กับผลึกผง โดยใช้แค่ $\frac{1}{3}$ ของปริมาณผลึกผง ต่อมาจึงนำไปถ่ายภาพด้วยการเลี้ยวเบน
รังสีเอ็กซ์ ภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์ม จะประกอบด้วยรูปแบบการเลี้ยว-
เบนรังสีเอ็กซ์ของสารทั้งสองชนิดภายใต้ความคลาดเคลื่อนอย่างเป็นระบบ อันเนื่องมาจาก
สมการสิ่งแวดล้อมอันเดียวกัน และจากการที่ใส่สารมาตรฐานที่ทราบค่าคงที่โครงสร้างผลึกกับ
รูปแบบการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์เรียบร้อยแล้ว ซึ่งทำให้ทราบได้ว่าค่าของ $\sin^2 \theta_{cal}$ ของ

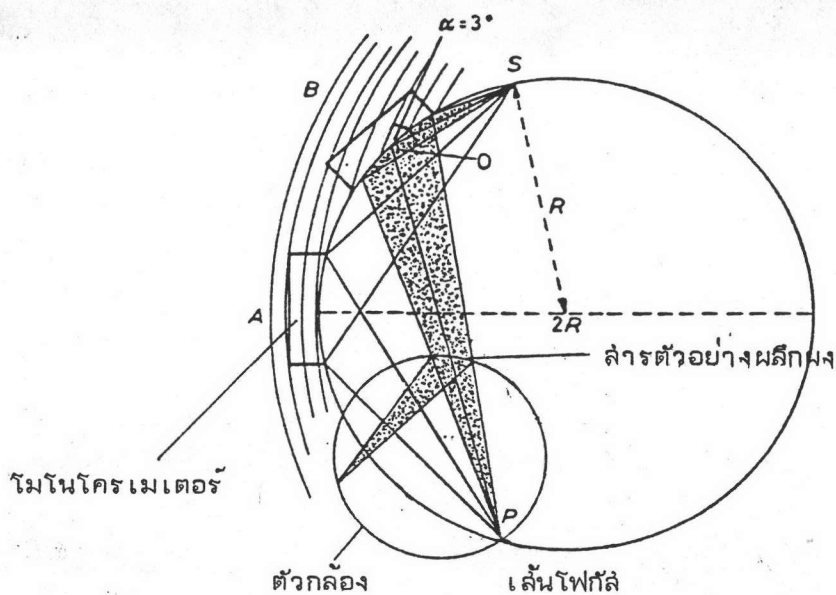
แต่ละเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของพวกสารมาตรฐานมีค่าเท่าไรได้โดยการคำนวณ จากนั้นจึงนำไปเปรียบเทียบกับค่าของ $\sin^2\theta_{obs}$ ของแต่ละเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของพวกสารมาตรฐานซึ่งคำนวณได้จากตำแหน่งของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์บนฟิล์มที่ได้จากการทดลอง จะพบว่าเกิดความแตกต่างกันระหว่าง $\sin^2\theta_{cal}$ กับ $\sin^2\theta_{obs}$ อันเนื่องมาจากความคลาดเคลื่อนอย่างเป็นระบบ แต่ความคลาดเคลื่อนอย่างเป็นระบบอันนี้สามารถกำจัดได้โดยนำเอาค่า $\Delta\sin^2\theta = \sin^2\theta_{obs} - \sin^2\theta_{cal}$ ของแต่ละเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของพวกสารมาตรฐานกับค่าของมุม θ หรือฟังก์ชันของมุม θ มาเขียนกราฟก็จะได้กราฟแสดงความคลาดเคลื่อนของ $\sin^2\theta_{obs}$ ณ มุม θ ต่าง ๆ ดังนั้นจากกราฟนี้ทำให้สามารถหาค่าของ $\sin^2\theta_{cor}$ ซึ่งเป็นค่าที่ถูกต้องสำหรับแต่ละเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์บนฟิล์มได้ โดยที่

$$\sin^2\theta_{cor} = \sin^2\theta_{obs} - \Delta\sin^2\theta$$

จากค่าของ $\sin^2\theta_{cor}$ นี้สามารถนำไปคำนวณค่าคงที่โครงสร้างและปรับค่าคงที่โครงสร้างได้อย่างละเอียด โดยวิธีกำลังสองน้อยที่สุด

4.3 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผง ในกล้องกิเนียร์-เฮกก์ (15)

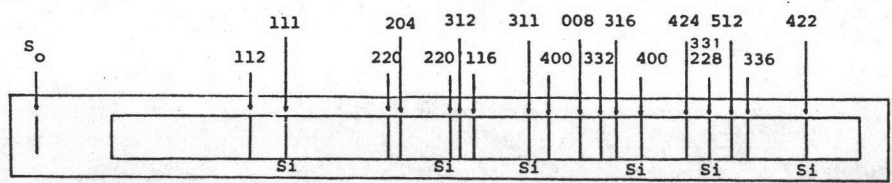
กล้องกิเนียร์-เฮกก์ที่ใช้ในการทดลองนี้เป็นกล้องกิเนียร์-เฮกก์ชนิดปรับโฟกัส (Guinier-Hägg focusing camera) แบบ Philips XDC-700 กล้องแบบนี้ใช้ถ่ายภาพผลึกผงได้เฉพาะ ณ ที่อุณหภูมิห้องทดลองเท่านั้น หลักการของกล้องนี้ กิเนียร์คิดขึ้นมา และเฮกก์เป็นผู้ออกแบบกล้อง ดังแสดงในรูปที่ 4.24 กล้องชนิดนี้สามารถปรับโฟกัสได้โดยใช้โมโนโครเมเตอร์ (monochromator) ตามความคิดของโจแฮนสัน (Johansson) จึงเรียกโมโนโครเมเตอร์ชนิดนี้ว่า "โจแฮนสันโมโนโครเมเตอร์ (Johansson monochromator)" ซึ่งทำขึ้นมาโดยใช้ผลึกของควอทซ์ เฮกก์ใช้ควอทซ์ที่เป็นแผ่นบาง ๆ ขนาด 35 มิลลิเมตร x 15 มิลลิเมตร x 0.3 มิลลิเมตร มาตัดและฝนในแนวที่ขนานหรือทำมุมเล็กน้อยกับระนาบที่มีดัชนีมิลเลอร์ (1011) ของผลึกควอทซ์แล้วทำให้โค้ง โดยที่รัศมีความโค้งสามารถเลือกค่าได้ตามความต้องการ แต่ก็ถูกควบคุมโดยคุณสมบัติการยืดหยุ่น (elastic properties) ของ



รูป 4.24 หลักการของกลองกีเนียร์-เอกก์

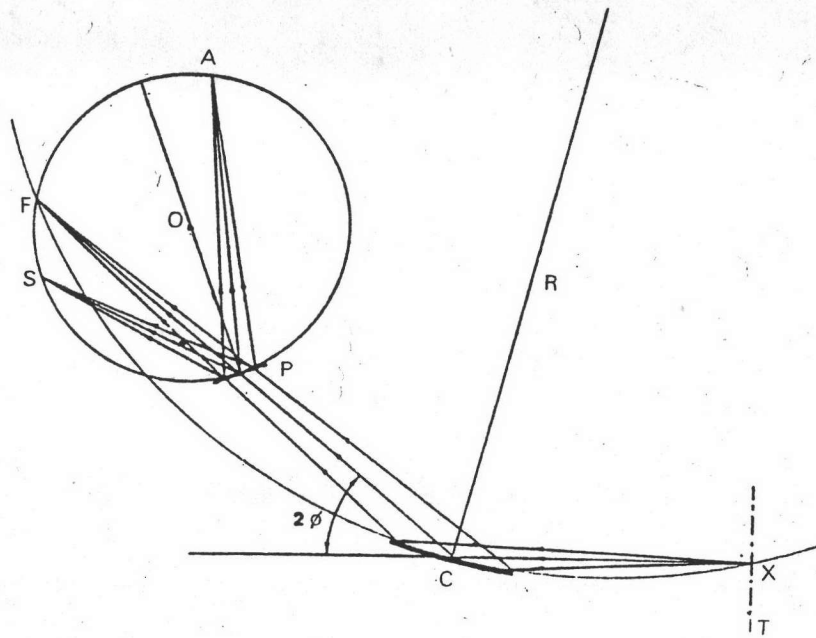
ผลึกควอทซ์ และค่าของระยะทางระหว่างโมโนโครเมเตอร์กับเส้นโฟกัสของรังสีตามที่ เราต้องการ และรัศมีความโค้งจะเปลี่ยนแปลงไปกับค่าของความยาวคลื่นของรังสี จนกระทั่งทำให้ได้ค่าระยะทางดังกล่าวมีค่าเกือบคงที่ ดังนั้นกลองกีเนียร์ - เอกก์ ที่ใช้ผลึกควอทซ์นี้จึงใช้ได้กับรังสีของ CuK_α , FeK_α และ CrK_α แต่ใช้ไม่ได้กับรังสี MoK_α เพราะในสามชนิดแรกต้องการใช้รัศมีประมาณ 600 และ 300 มิลลิเมตร แต่ MoK_α จะต้องใช้รัศมี 600 และ 1,200 มิลลิเมตร ถ้าผลึกควอทซ์ถูกตัดในแนวที่ขนานกับระนาบของแลตทิส ดังนั้นผลึกควอทซ์แบบนี้จะต้องถูกจัดวางให้อยู่ ณ ที่ตำแหน่ง A ดังในรูป 4.24 ซึ่งเป็นตำแหน่งที่อยู่กึ่งกลางที่ทำให้ระยะทางระหว่างโมโนโครเมเตอร์ถึงแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์กับระยะทางระหว่างโมโนโครเมเตอร์ถึงจุดโฟกัสมีค่าเท่ากัน แต่ในทางปฏิบัตินั้นโดยมากจะทำตัวกลองให้มีขนาดของ เส้นผ่าศูนย์กลางประมาณครึ่งหนึ่งของระยะทางระหว่างโมโนโครเมเตอร์ถึงจุดโฟกัส ดังนั้นจึงควรทำให้ระยะทางระหว่างโมโนโครเมเตอร์ถึงจุดโฟกัสมีค่ามากที่สุดแต่ยังคงให้ระยะทางระหว่างแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์กับจุดโฟกัสยังคงเดิม เพื่อให้สามารถสร้างตัวกลองได้สะดวกได้ใหญ่มากที่สุดและสะดวกต่อการใช้ทดลอง ซึ่งทำได้โดยการเอาผลึกควอทซ์มาตัดในแนวที่ทำมุมเล็กน้อยกับระนาบของแลตทิส ดังนั้นผลึกควอทซ์แบบนี้ซึ่งทำหน้าที่เป็นโมโนโครเมเตอร์จะต้องจัดวางอยู่ ณ ที่ตำแหน่ง B ในรูป 4.24 เช่นสำหรับผลึกควอทซ์

ที่ใช้สำหรับรังสี CuK_α ควรถูกตัดในแนวที่ทำมุม 3° กับระนาบของแลตทิซ และสำหรับ กล้องที่ปรับโฟกัสได้เช่นนี้จะสามารถปรับโฟกัสได้สมบูรณ์เมื่อรังสีจากแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ มีลักษณะ เป็นจุดหรือเป็นเส้นที่ขนานกับแนวแกนของตัวกล้องที่เป็นทรงกระบอก ที่กล่าวมาข้างต้นทั้งหมดนี้เป็นหลักการของกล้องกนิเนียร์-เฮกก์ ต่อมาพิจารณาลักษณะการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผงในกล้องกนิเนียร์-เฮกก์ โดยพิจารณาจากรูป 4.26 ซึ่งอธิบายได้ดังนี้เมื่อรังสีเอ็กซ์จากหลอดรังสีเอ็กซ์ X พุ่งไปตกกระทบโมโนโครเมเตอร์ C ทำมุมตกกระทบเป็นมุม ϕ ต่อมารังสีเอ็กซ์ก็ถูกเลี้ยวเบนไปจากแนวของรังสีตกกระทบเป็นมุม 2ϕ ซึ่งค่าของมุม ϕ นี้ หาได้จากการคำนวณ ซึ่งเป็นค่าที่ขึ้นอยู่กับค่าความยาวคลื่นของรังสีเอ็กซ์ที่ใช้ ส่วนรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนไปนี้ก็ถูกโฟกัสโดยโมโนโครเมเตอร์ไปตกที่เส้นโฟกัส F ซึ่งเป็นเส้นของรังสีเอ็กซ์ที่ไม่ถูกทำให้เลี้ยวเบนโดยลำตัวอย่างผลึกผง ซึ่งเส้นนี้จะเรียกว่าเส้นปฐมภูมิ (primary beam) แต่ก็เกิดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ที่ถูกโฟกัสเมื่อรังสีเอ็กซ์ผ่านลำตัวอย่างผลึกผง P ไปเป็นมุมต่างๆ กัน จึงทำให้เกิดเส้นของรังสีเอ็กซ์ที่ถูกเลี้ยวเบนเป็นเส้น A และเส้น S โดยที่เส้นของรังสีเอ็กซ์พวกนี้ถูกบันทึกลงบนฟิล์มซึ่งบรรจุอยู่ตามผิวของทรงกระบอก O ตามรูป การเลี้ยวเบนไปทาง FA นั้นเป็นมุมการเลี้ยวเบนไปในทางบวก ส่วนทาง FS นั้นเป็นทางลบ แต่ในการออกแบบกล้องนั้นต้องการดูการเลี้ยวเบนแค่ทางบวก ดังนั้นจึงต้องจัดตำแหน่งของกล้องรูปทรงกระบอก O ให้ได้ตำแหน่งที่ต้องการ ลักษณะของฟิล์มที่ถ่ายเรียบร้อยแล้วแสดงดังรูป 4.25



รูป 4.25 ลักษณะของฟิล์มที่ได้จากกล้องกนิเนียร์-เฮกก์ของลำตัวอย่างผลึกผง ที่มีโครงสร้างแบบชัลโคไพไรท์ ระบบผลึกแบบเตตระโกนัล ซึ่งใส่สารซิลิกอนเป็นสารมาตรฐาน

จากฟิล์มที่ถ่ายได้ ต้องนำมาวัดตำแหน่งของเส้นปฐมภูมิ (S_0) และเส้นรังสีเอ็กซ์ต่างๆ ที่ถูกเลี้ยวเบนออกมาโดยผลึกผงทุกเส้น เพื่อนำมาวิเคราะห์หาค่าคงที่โครงสร้างต่อไป

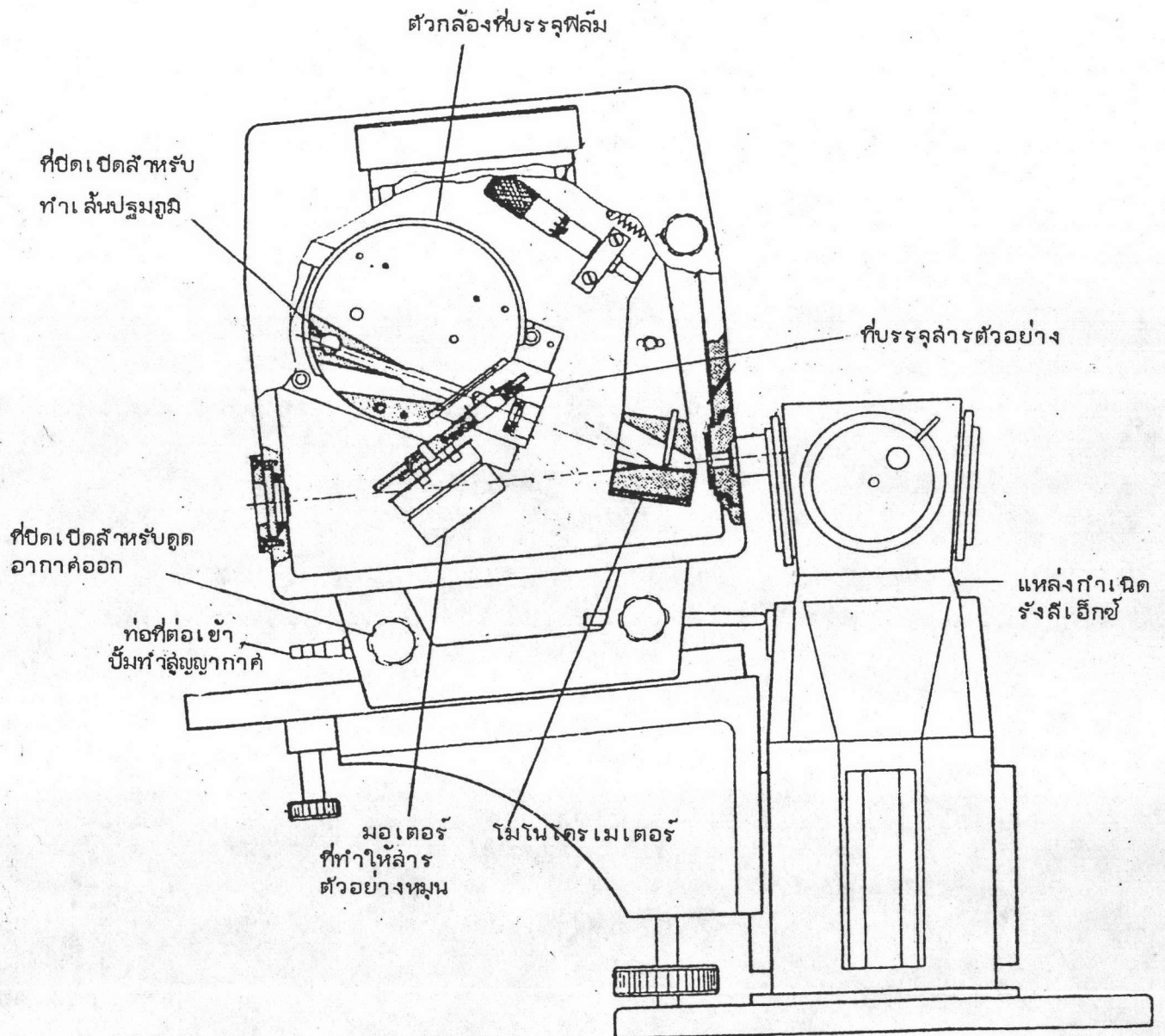


- X = เส้นโฟกัสของหลอดรังสีเอ็กซ์
- T = แนวแกนของหลอดรังสีเอ็กซ์
- C = ศูนย์กลางของผลึกโมโนโครเมเตอร์
- R = รัศมีของวงกลมโฟกัสของโมโนโครเมเตอร์
- O = ศูนย์กลางของตัวล้องรูปทรงกระบอกที่บรรจุฟิล์ม
- P = ศูนย์กลางของสารตัวอย่างที่ทำเป็นผลึกผง
- F = เส้นโฟกัส
- A & S = เส้นที่เกิดจากการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์โดยสารตัวอย่าง
ผลึกผงในทางด้านบวกและด้านลบ
- 2ϕ = มุมที่เกิดจากการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์โดยโมโนโครเมเตอร์
ซึ่งเท่ากับมุมระหว่างแนวของรังสีเอ็กซ์ที่ถูกเลี้ยวเบนโดย
โมโนโครเมเตอร์ (คือแนว CF) กับแนวของรังสีปฐมภูมิ
(primary beam) (คือแนว XC)

รูป 4.26 แผนผังการติดตั้งเครื่องมือของกล้องกีเนียร์-เฮกกี ชนิดปรับโฟกัสของ
Philips XDC-700

4.3.1 ลักษณะกล้องกีเนียร์-เอกก

ลักษณะการตัดเครื่องมือของกล้องกีเนียร์-เอกก ชนิดปรับโฟกัสของ Philips XDC-700 ได้แสดงให้เห็นเป็นแผนผังในรูป 4.26 และแสดงลักษณะการติดตั้งเครื่องมือจริง ๆ ดังรูป 4.27 โดยมีเส้นผ่าศูนย์กลางของตัวกล้องที่บรรจุฟิล์ม 100.00 มิลลิเมตร



รูป 4.27 ลักษณะการติดตั้งเครื่องของกล้องกีเนียร์-เอกก ชนิดปรับโฟกัสของ Philips XDC-700

4.3.2 การหาค่าคงที่โคร่งผลึก จากภาพถ่ายผลึกผงของกลองกีเนียร์-เฮกกี

การหาค่าคงที่โคร่งผลึกจากภาพถ่ายผลึกผงของกลองกีเนียร์-เฮกกีนี้ จะใช้วิธีการใส่สารซิลิกอนที่ทราบค่าคงที่โคร่งผลึกและรูปแบบการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์แล้ว เป็นสารมาตรฐานผลึกกับผลึกผง ซึ่งเป็นสารที่ต้องการหาค่าคงที่โคร่งผลึก โดยใช้ ปริมาณซิลิกอนเท่ากับ $\frac{1}{3}$ ของปริมาณผลึกผง ต่อมาจึงนำไปถ่ายภาพด้วยการเลี้ยวเบน รังสีเอ็กซ์ ภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มเป็นดังรูปที่ 4.25 จากฟิล์มนี้ ต้องนำมาวัดตำแหน่งของเส้นปฐมภูมิ (S_0) และเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ต่าง ๆ (S) ซึ่งประกอบด้วยรูปแบบการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของสารทั้งสองชนิดภายใต้ความคลาดเคลื่อน อย่างเป็นระบบ อันเนื่องมาจากสภาพสิ่งแวดล้อมอันเดียวกัน และจากการที่ใส่สาร มาตรฐานที่ทราบค่าคงที่โคร่งผลึกกับรูปแบบการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์เรียบร้อยแล้ว ซึ่งทำ ให้ทราบค่าของ $(S - S_0)_{cal}$ ของแต่ละเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์สำหรับพวกสารมาตรฐาน มีค่าเท่าไรได้โดยการคำนวณ จากนั้นจึงนำไปเปรียบเทียบกับค่าของ $(S - S_0)_{obs}$ ของแต่ละเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์สำหรับพวกสารมาตรฐาน ซึ่งคำนวณได้จากตำแหน่ง ของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์บนฟิล์มที่ได้จากการทดลอง จะพบว่าเกิดความแตกต่าง กันระหว่าง $(S - S_0)_{cal}$ กับ $(S - S_0)_{obs}$ อันเนื่องมาจากความคลาดเคลื่อน อย่างเป็นระบบ แต่ความคลาดเคลื่อนอย่างเป็นระบบอันนี้สามารถกำจัดได้โดยนำเอาค่า $\Delta S = (S - S_0)_{cal} - (S - S_0)_{obs}$ ของแต่ละเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของพวก สารมาตรฐาน กับค่าของ $(S - S_0)_{obs}$ มาเขียนกราฟจะได้กราฟแสดงความคลาดเคลื่อน ของ S ณ ที่ $(S - S_0)_{obs}$ ต่าง ๆ ดังนั้นจากกราฟนี้ทำให้สามารถหาค่าของ $(S - S_0)_{cor}$ ซึ่งเป็นค่าที่ถูกต้องสำหรับแต่ละเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์บนฟิล์มได้ โดย

$$(S - S_0)_{cor} = (S - S_0)_{obs} + \Delta S$$

จากค่าของ $(S - S_0)_{cor}$ ของแต่ละเส้นการเลี้ยวเบน จะถูกนำไปหาค่ามุมของแบรกก์ (θ) ได้โดยใช้สมการ

$$\theta = K(S - S_0)$$

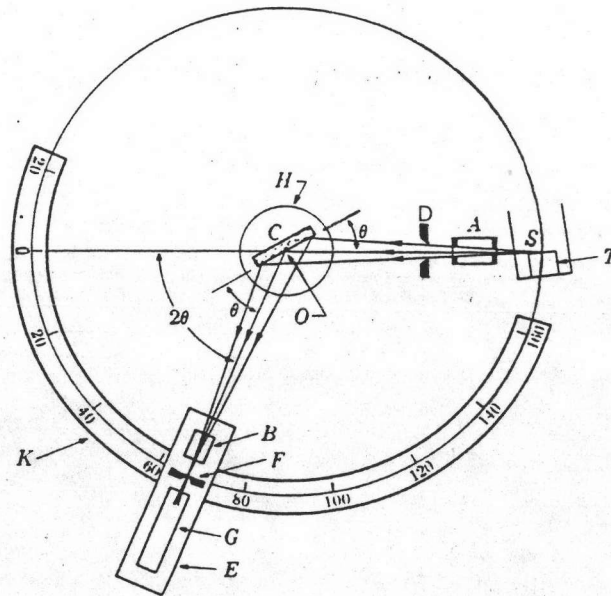
เมื่อ $K =$ ค่าคงที่ของกลองกีสำหรับกลองกีเนียร์ - เฮกกีมีค่าเท่ากับ

$$0.28600 \text{ องศา/มิลลิเมตร}$$

สุดท้ายก็ได้ค่า $(\sin^2 \theta)_{\text{cor}}$ ซึ่งถูกนำไปคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึกและปรับค่าคงที่ของโครงสร้างผลึกอย่างละเอียดโดยวิธีกำลังสองน้อยที่สุด

4.4 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ โดยผลึกผงในเครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์

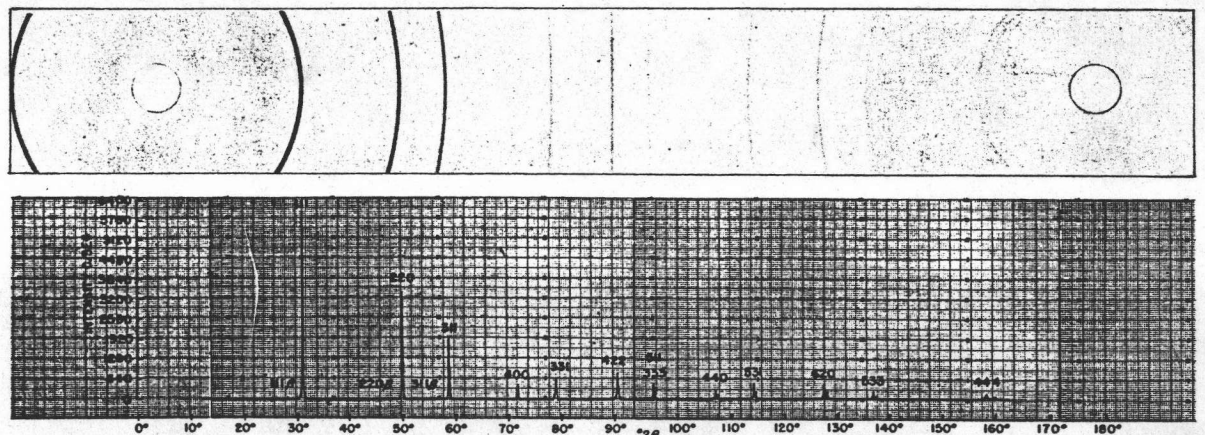
หลักการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผงในเครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์มีลักษณะ เช่นเดียวกับกับกล้องเดอบาย-เชอว์เรอร์ ดังแสดงให้เห็นในรูป 4.28



รูป 4.28 ลักษณะของเครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์

- โดยมี
- | | |
|---|------------------------------------|
| A, B = ช่องโซลเลอร์ (Soller slit), | C = แผ่นลึ่รตัวอย่างผลึกผง |
| D = ช่องลู่ออก (divergence slit), | E = ฐานยึดเครื่องมือ B, F |
| F = ช่องรับรังสีเอ็กซ์ (receiving slit) | และ G ให้เคลื่อนที่ไปพร้อม ๆ กัน |
| H = ฐานยึดลึ่รตัวอย่าง | G = เครื่องตรวจนับสัญญาณ (counter) |
| O = แกนกลางของวงกลมดิฟแฟรคโตมิเตอร์ (diffractometer circle) | K = สเกลแสดงค่าของมุม 2θ |
| | S = แหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ |
| | T = เป้าของหลอดรังสีเอ็กซ์ |

แผ่นลสารตัวอย่างผลึกผง (C) วางอยู่ที่แกนกลางของวงกลมดิฟแฟรคโตมิเตอร์ (O) รังสีเอ็กซ์จากหลอดเป็นเส้นโพกัส (S) ผ่านช่องโลหะบาง ๆ วางขนานกันเรียกว่าช่องโซลเลอร์ (A) โดยมีลักษณะลสารรังสีเอ็กซ์เป็นรังสีลู่ออก (diverge) ผ่านช่องลู่ออก (D) ไปตกกระทบลสารตัวอย่าง โดยแนวของรังสีตกกระทบท่ามุมกับระนาบของลสารตัวอย่างผลึกผงเป็นมุม θ ทำให้รังสีเอ็กซ์เกิดการเลี้ยวเบนไปในแนวที่ทำมุมกับแนวของรังสีตกกระทบทเป็นมุม 2θ ไปผ่าน ช่องโซลเลอร์อีกชุดหนึ่ง (B) โดยมีลักษณะลสารรังสีเอ็กซ์เป็นรังสีลู่ออก (converge) ผ่านช่องรับรังสีเอ็กซ์ (F) เข้าเครื่องตรวจนับสัญญาณ (G) โดยที่ขณะที่เครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์ทำการสแกน (scan) ไปนั้น แผ่นลสารตัวอย่างผลึกผงและเครื่องตรวจนับสัญญาณจะหมุนไปด้วยกัน รอบแกนกลางของวงกลมดิฟแฟรคโตมิเตอร์ (O) โดยที่เมื่อแผ่นลสารตัวอย่างผลึกผงหมุนไปเป็นมุม θ เครื่องตรวจนับสัญญาณต้องหมุนไปเป็นมุม 2θ ในลักษณะเช่นนี้เสมอ ส่วนการบันทึกข้อมูลของเครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์นั้น จะถูกบันทึกโดยการเขียนเป็นกราฟระหว่างค่าของมุม 2θ กับ ค่าจำนวนสัญญาณที่เครื่องตรวจนับสัญญาณนับได้ในเวลาหนึ่งวินาที θ ที่มุม 2θ นั้น ๆ ดังแสดงในรูป 4.29



รูป 4.29 รูปแบบของพีคที่เกิดจากการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผงซิลิกอนที่บันทึกได้จากเครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์ โดยเปรียบเทียบกับที่บันทึกได้จากกล้องเดอบาย-เชอร์เรอร์

จากกราฟก็จะหาค่าของ $\sin^2\theta$ สำหรับแต่ละระนาบ (hkl) ที่ทำการ
เลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ออกมาได้ ซึ่งจะถูกนำไปคำนวณค่าคงที่โครงสร้างและปรับค่าคงที่-
โครงสร้างอย่างละเอียดโดยวิธีกำลังสองน้อยที่สุด