# บทที่ 3

## โปรแกรมและขั้นตอนการคำนวณผลด้วยเครื่องคอมพิวเตอร์

ในการคำนวณผลใช้เครื่องคอมพิวเตอร์ IBM รุ่น 370/138 ซึ่งติดตั้งอยู่ที่สถาบันบริการคอมพิวเตอร์ จุฬาฯ โปรแกรมชุด (packaged programe) ที่ใช้นี้ได้รับและดัดแปลงมาจากมหาวิทยาลัย อุพพ้อลา (Uppsala) แห่งประเทศสวีเดน ภาษาที่ใช้คือโฟร์แทรน IV (FORTRAN IV) ลักษณะของโปรแกรมจะประกอบด้วยชื่อ โปรแกรมและลักษณะงาน (JOB SET-UP) ชุดคำสั่งขั้นตอนในการคำนวณ (JOB CONTROL CARDS) ข้อมูลซึ่งอาจบันทึกอยู่ในเทปแม่เหล็ก (magnetic tape) หรือบัตรคอมพิวเตอร์ (card) และส่วนที่เป็นผลการคำนวณที่พิมพ์บนกระดาษ หรือมีการบันทึกในเทปแม่เหล็ก เนื่องจากในระยะที่ทำการคำนวณผล ทางสถาบันฯได้มีการปรับปรุงแก้ไขระบบต่าง ๆ ชุดบอกชื่อโปรแกรมและลักษณะงาน ที่แสดงนี้เป็นผลจากการปรับปรุงแล้ว

### 3.1 โปรแกรม CSPHABSW

เป็นโปรแกรมที่ใช้สำหรับแก้ค่าความเข้มของจุดสะท้อน ที่บันทึกด้วยเทคนิคแบบไวซ์เซ็นเบิร์ก (Weissenberg photograph) ด้วยวิธีการเอียงมุมเท่ากัน (equi-inclination method) แฟคเตอร์ที่ใช้แก้ค่าความเข้มของจุดสะท้อนได้แก่ โพลาไรเซชั่นแฟคเตอร์ (Polarization factor) ซึ่งเกิดเนื่องจากรังสีเอ็กซ์ที่ใช้ไม่เป็นแสงโพลาไรซ์ (Stout and Jensen, 1968) ลอเรนซ์แฟคเตอร์ (Lorentz factor) หรือแฟคเตอร์ความเร็ว (velocity factor) (Jeffery, 1971) ซึ่งเกิดเนื่องจากจุดสะท้อนส่วนกลับ (reciprocal lattice point) หมุนตัดผ่านทรงกลมสะท้อน (reflecting sphere) ด้วยความเร็วในแนวรัศมีของทรงกลมสะท้อนใช้เวลาไม่เท่ากัน จุดที่อยู่ใกล้กับแกนหมุนจะใช้เวลามากกว่าจุดที่อยู่ห่างออกไป การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ (X-ray absorption) ค่าการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ของผลึกขึ้นกับระยะทางที่รังสีเอ็กซ์ผ่านผลึก และสัมประสิทธิ์การดูดกลืน (absorption coefficient) ของผลึก การแก้ค่าดูดกลืน (absorption correction)ที่ใช้ในโปรแกรมเป็นแบบโคพ์เพนและคณะ (Coppens, Leiserowitz and Rabinovich, 1965)

ในโปรแกรมชุดนี้มีรูปผลึกที่ใช้แก้ค่าดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ รูปทรงกระบอก (cylindrical shape) รูปทรงกลม (spherical shape) และรูปทรงทั่วไป (general shape) ที่กำหนดรูปร่างเหมือนกับรูปผลึกจริง

3.1.1 การใช้และลักษณะโปรแกรม CSPHABSW

ในการศึกษาครั้งนี้ อินพุท (input) โปรแกรมนี้ซึ่งเป็นข้อมูลความเข้มของจุดสะท้อนใช้บัตร โดยเจาะ (punch) ค่าดัชนีมิลเลอร์ (Miller indices) และค่าความเข้ม (IH, IK, IL, WI) โดยใช้รูปแบบคำสั่ง (FORMAT) เป็น (3I5, F15.0) ใบสุดท้ายของข้อมูลเจาะ IH=999

เอาท์พุทของโปรแกรมพิมพ์บนกระดาษ และเทปแม่เหล็กที่บันทึกผลการคำนวณซึ่งจะใช้เป็นอินพุทของโปรแกรม CSPHLSQ และ CSPHFOUR เพื่อใช้ในการทำแผนภาพแพทเทอร์สัน (Patterson map) ลักษณะของโปรแกรมเป็นดังนี้

ชุดบอกชื่อโปรแกรมและลักษณะงาน

```
* $$ JOB JNM = --------, CLASS = T
* $$ PRT CLASS = A
// JOB (Account NO.)
// OPTION LOG
// PAUSE MOUNT OUTPUT TAPE '--------' AT 282
// ASSGN SYS005, X'282'
* $$ SLI P.GETLIB
// EXEC CSPHABSW
          DATA
/*
/&
* $$ SLI P.RETURN
* $$ EOJ
```

## 3.2 โปรแกรม CSPHFOUR

ใช้สังเคราะห์ฟูเรียร์ (Fourier syntheses) เพื่อทำแผนภาพแพทเทอร์สัน ซึ่งแสดงพีค (peak) โดยอาศัยผลต่างของเวคเตอร์ตำแหน่ง (positional vector) ของอะตอม 2 อะตอมในสเปสผลึก (crystal space) ปริมาตรใต้พีคที่ปรากฏในแผนภาพ 2 มิติแบบฉาย (projection) เป็นสัดส่วนโดยตรงกับผลคูณของเลขอะตอม (atomic number) ของ 2 อะตอมนั้น (Buerger, 1959), แผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอน (electron density map) หรือในโปรแกรมเขียน FOBS เป็นการหาความหนาแน่นของอิเลคตรอนที่ตำแหน่งต่าง ๆ โดยอาศัยตำแหน่งอะตอมหนักที่พิจารณาได้จากแผนภาพแพทเทอร์สัน เป็นเฟสในการคำนวณ สำหรับแผนภาพผลต่างความหนาแน่นอิเลคตรอน (difference synthesis) ใช้ผลต่างของขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้างสังเกต (observed structure factor) กับขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้างคำนวณ (calculated structure factor) เป็นสัมประสิทธิ์ในการคำนวณ โดยอาศัยตำแหน่งอะตอมที่ได้จากแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนเป็นเฟส แผนภาพผลต่างความหนาแน่นอิเลคตรอนที่ได้นี้จะคูณขึ้น (scale up) ด้วยค่าคงที่ตัวหนึ่ง เพื่อให้ผลต่างที่มีค่ามากสุดในแผนภาพเป็น 999 เพื่อความสะดวกในการพิจารณาตำแหน่งอะตอมโปรแกรมนี้สามารถกำหนดให้ทำระนาบในแนวขนานกับแกนของหน่วยเซลล์ หรือเอียงทำมุมตามกำหนดก็ได้ ถ้าพิจารณาระนาบในแผนภาพแพทเทอร์สันจากตำแหน่งอะตอมที่สมมาตรกันด้วยสมมาตรแบบแกน (Axial symmetry) ระนาบนี้เรียกว่าระนาบฮารักเกอร์ (Harker plane) ซึ่งช่วยในการพิจารณาตำแหน่งอะตอมได้ดีขึ้น

### 3.2.1 การใช้และลักษณะของโปรแกรม CSPHFOUR

ข้อมูลที่เป็นอินพุทของโปรแกรมนี้เป็นเทปแม่เหล็ก ซึ่งอาจเป็นเอาท์พุทจากโปรแกรม CSPHABSW หรือ จากโปรแกรม CSPHLSQ ในกรณี ทำแผนภาพแพทเทอร์สันจะใช้เอาท์พุทจากโปรแกรม CSPHABSW ถ้าทำแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนหรือแผนภาพผลต่างความหนาแน่นอิเลคตรอนจะใช้เอาท์พุทจากโปรแกรม CSPHLSQ เอาท์พุทของโปรแกรม CSPHFOUR จะพิมพ์บนกระดาษ แล้วพิจารณาตำแหน่งอะตอมจากโปรแกรมนี้ เพื่อเป็นอินพุทของโปรแกรม CSPHLSQ ต่อไป ลักษณะของโปรแกรม CSPHFOUR มีดังนี้

ชุดบอกชื่อโปรแกรมและลักษณะงาน

```
* $$ JOB JNM = --------, CLASS = T
* $$ PRT CLASS = A
// JOB (Account NO.)
// OPTION LOG
// PAUSE MOUNT INPUT TAPE -------- AT 281
* $$ SLI P.GETLIB
// EXEC PROC = $$XRAY01
            DATA
/*
/&
* $$ SLI P.RETURN
* $$ EOJ
```

3.3 โปรแกรม CSPHLSQ

เป็นโปรแกรมที่ใช้ปรับ (refine) โครงสร้างของผลึกโดยใช้เมตริกเต็ม (full-metrix) ค่าพารามิเตอร์ที่โปรแกรมปรับได้แบ่งได้ 2 ประเภทคือ

1 พารามิเตอร์รวม (overall parameter) ได้แก่สเกลแฟคเตอร์ (scale factor), แฟคเตอร์อุณหภูมิแบบสมสักษณ์ (isotropic temperature factor) สัมประสิทธิ์เอ็กซ์ทิงชั่นแบบสมสักษณ์ (isotropic extinction coefficients) สำหรับการปรับค่าสเกลแฟคเตอร์อาจปรับทุกเลเออร์ (layer) เปลี่ยนไปเท่ากันหรือแต่ละเลย์เออร์เปลี่ยนไปไม่เท่ากัน

2 พารามิเตอร์ของอะตอม (atomic parameters) ได้แก่ ตำแหน่งอะตอม (fractional coordinates), แฟคเตอร์อุณหภูมิแบบสมสักษณ์หรือแบบอสมสักษณ์ (anisotropic) และออคคิวแพนซีแฟคเตอร์ (occupancy factor) สำหรับการปรับแฟคเตอร์อุณหภูมิแบบสมสักษณ์ของแต่ละอะตอมหมายถึงค่าแฟคเตอร์อุณหภูมิในทิศทางต่าง ๆ มีค่าเท่ากัน ส่วนแบบอสมสักษณ์ค่าแฟคเตอร์อุณหภูมิของแต่ละอะตอมในทิศทางแกน x, y, z มีค่าไม่เท่ากัน

ในการปรับพารามิเตอร์ต่าง ๆ ของอะตอมเพื่อให้ได้โครงสร้างที่ใกล้เคียงกับความเป็นจริง จำเป็นต้องมีข้อมูลที่ถูกต้องและจำนวนมากพอสมควร ในกรณีที่มี N อะตอมในหนึ่งอสมมาตร จำนวนจุดสะท้อนอาจมีได้ถึง 50 N จุดสะท้อน ซึ่งเพียงพอที่จะใช้ปรับพารามิเตอร์ต่าง ๆ ของอะตอม จำนวน 4N + 1 พารามิเตอร์ได้ (Ladd and Palmer, 1977) จากค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของพารามิเตอร์ที่คำนวณจากวิธีผลต่างกำลังสองน้อยที่สุด (least squares) จะพบว่ามีค่าแปรตาม $\sqrt{1/m}$ เมื่อ m เป็นจำนวนจุดสะท้อนที่สังเกตได้ (Stout and Jensen, 1968)

รายละเอียดที่โปรแกรม CSPHLSQ ทำได้ ในกรณีที่อินพุทเป็นเทปแม่เหล็กที่เก็บข้อมูลในรูปแฟคเตอร์โครงสร้างสังเกตกำลังสอง $(Fo)^2$ พร้อมกับค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน $(SIGMA(FO)^2)$ เมื่อมีการปรับโครงสร้างโดยอาศัยค่าแฟคเตอร์โครงสร้างสังเกต $(F_o)$ ค่าแฟคเตอร์โครงสร้างสังเกตกับค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (SIGMA (FO)) จะคำนวณจากความสัมพันธ์

$FO = SQRT\ (ABS\ (FO^2))$, $SIGMA\ (FO) = \frac{SIGMA(FO^2)}{(2.FO)}$ เมื่อ

$SQRT\ (ABS\ (FO)^2)$ = รากที่สองของแฟคเตอร์โครงสร้างสังเกต กำลังสอง ถ้า Fo = 0 แล้วกำหนดให้ค่า $SIGMA\ (FO) = SIGMA\ (FO^2)$

การเลือกข้อมูลจุดสะท้อน (Reflection Data Screening)

ในการเลือกข้อมูลของโปรแกรมนี้ ถ้าอินพุทเป็นบัตร ก็สามารถคัดเอาจุดสะท้อนที่ให้ผลไม่ดีหรืออ่านค่าความเข้มผิดออกได้ ถ้าอินพุทเป็นเทปแม่เหล็กมีให้เลือกได้ 3 วิธี

- เลือกจุดสะท้อนที่มีค่า YO < RSIG . SIGMA(INPUT) ให้มีน้ำหนักเป็น 0 หรือไม่นำมาคำนวณ โดยที่ $YO = |Fo|^2$ หรือ $|Fo|$ คือกำลังสองหรือขนาด (amplitude) ของแฟคเตอร์โครงสร้างสังเกต ในกรณีที่ใช้เอาท์พุทของโปรแกรม CSPHABSW ซึ่งเป็นเทปแม่เหล็ก ค่า YO ที่ใช้จะมีค่าเป็นกำลังสองของขนาดแฟคเตอร์โครงสร้างสังเกต, RSIG เป็นค่าคงที่ที่กำหนดขึ้น

- เลือกจุดสะท้อนโดยอาศัยค่า SINL > SLMAX และ/หรือ SINL < SLMIN ไม่นำมาคำนวณ เมื่อ SINL คือ $(\sin \theta)/\lambda$ $\lambda$ = ความยาวคลื่นของรังสีเอ็กซ์ที่ใช้ SLMAX และ SLMIN เป็นค่าคงที่ที่กำหนดขึ้น

- ใช้คำสั่งพิเศษซึ่งมีอยู่ในโปรแกรม เลือกจุดล่ะท้อนบางจุดไม่นำมาคำนวณโดยเจาะตัยนีมิลเลอร์ และค่าความเข้มของจุดล่ะท้อนที่ไม่ต้องการลงบนบัตร ซึ่งเลือกจุดล่ะท้อนประเภทดังกล่าวนี้ได้มากที่สุด 30 จุด

น้ำหนัก (Weighting, WTG)

ในการคำนวณน้ำหนักของจุดล่ะท้อนของแต่ละจุด เป็นดังนี้

$$WTG = 1/SIGMA\ (YO^2)$$

เมื่อค่า SIGMA เป็น 0 หรือมีค่าลบ น้ำหนักจะเป็น 0 , YO = แฟคเตอร์โครงล่ร้างสังเกต น้ำหนักที่ใช้ในการคำนวณของแต่ละจุดล่ะท้อน ได้จากค่าความเบี่ยงเบนมาตรฐาน ซึ่งในโปรแกรมมีให้เลือกได้ 5 แบบ

- ความเบี่ยงเบนมาตรฐาน = 1.0
- ความเบี่ยงเบนมาตรฐานที่ให้พร้อมกับข้อมูล ค่าความเบี่ยงเบนมาตรฐานใหม่จะคำนวณโดยอาศัยความสัมพันธ์ ดังนี้

$$SIGMA(MOD.) = SQRT|(C_1.SIGMA(INPUT)^2) + (C_2.YO)^2|$$

โดยที่ $C_1$ และ $C_2$ เป็นค่าคงที่ที่กำหนดขึ้นโดยปกติมีค่าเป็น 1.0 และ 0.01 - 0.05 ตามลำดับ

- แบบของ HUGHES

$SIGMA = YO$ ถ้า $YO \geqslant C_1$

$SIGMA = C_1$ ถ้า $YO < C_1$

โดยที่ $C_1$ เป็นค่าคงที่ที่กำหนดขึ้น

- แบบ CRUICKSHANK

$$SIGMA = SQRT\ (C_1 + YO + C_2YO^2 + C_3YO^3)$$

โดยที่ $C_1 = 2\ Fo\ min$, $C_2 = \frac{2}{Fo\ max.}$ , $C_3 = 0$

(Woolfson, 1970)

- น้ำหนักคำนวณจาก SUBROUTINE LSQWGT

การวิเคราะห์น้ำหนัก (Weight Analysis)

การตรวจดูน้ำหนักที่ใช้ในการปรับจะแสดงหลังจากปรับรอบสุดท้ายแล้วโดยแสดงผลเป็นค่า WTG. $(|YOE| - |YC|)^2$ เมื่อ YOE = FO.SKAL.EXT, SKAL = สเกลแฟคเตอร์แบบ FO, EXT = ค่าเอ็กซ์ทิงชั่น ในรูปของค่า YOE และ sin θ

- แบ่งตามค่า YOE จากค่าน้อยไปมากเป็น 10 ย่วง โดยให้แต่ละย่วงมีจำนวนจุดสะท้อนเท่า ๆ กัน และมีค่าเป็น

$$A = \frac{\Sigma(WTG.(|YOE| - |YC|)^2)}{\text{Number of reflections}}$$

แล้วนอมัลไลซ์ (Normalized) ให้ผลรวมทั้ง 10 ย่วงมีค่าเป็น 10

- แบ่งตามค่า sin θ จาก 0 ถึง sin θ max. โดยที่แต่ละย่วงที่แบ่งมีปริมาตรในสเปสส่วนกลับ (reciprocal space) มีค่าเท่า ๆ กันและค่าที่คำนวณได้ก็นอมัลไลซ์เช่นเดียวกับการแบ่งตาม YOE

การแก้ค่าอนอมัลสัสดิสเพอร์ชั่น(Anormalous dispersion corrections)

สมการที่ใช้เป็น $Fc(H) = A(H) + Im.B(H)$ 3.3.1

เมื่อ $A(H) = \Sigma(F(J).\cos 2\pi (\bar{H}.\bar{X}(J)) - \Sigma(F''(J).\sin 2\pi(\bar{H}.\bar{X}(J)))$

$B(H) = \Sigma(F(J) . \sin 2\pi (\bar{H}.\bar{X}(J))) + \Sigma(F''(J) \cdot \cos 2\pi (\bar{H}.\bar{X}(J)))$

$\bar{H}$ แสดงถึงเวคเตอร์ H, K, L

$\bar{X}$ แสดงถึงเวคเตอร์ X, Y, Z

Im แสดงถึงจินตภาพ 'i'

F(J) คือส่วนที่เป็นค่าจริง (real part) ของแฟคเตอร์การกระเจิงของอะตอม 'J' และรวมส่วนที่เป็นค่าจริงของอนอมัลสัสดิสเพอร์ชัน (F')

F''(0) คือส่วนจินตภาพของอนอมัลสัล่ดิส่เพอร์ชั่นแฟคเตอร์ ค่าอนอมัลสัล่ดิส่เพอร์ชั่นแฟคเตอร์ ดูจาก International Tables for X-ray Crystallography Volume IV, 1974

ค่าแฟคเตอร์โครงส่ร้างที่ใช้ในวิธีผลต่างกำสังส่องน้อยที่สุด คำนวณจากสูตร 3.3.1 ค่าแฟคเตอร์โครงส่ร้างสังเกตจะไม่แก้อนอมัลสัล่ดิส่เพอร์ชั่น ในการคำนวณฟูเรียร์ ผลของอนอมัลสัล่ดิส่เพอร์ชั่น จะไม่นำมาคำนวณด้วย แฟคเตอร์โครงส่ร้างสังเกตที่เขียนในฟูเรียร์ไฟล์ (Fourier file) คำนวณจาก

FOE (NO ANOMAL) = FOE (ANOMAL). |Fc (NO ANOMAL) / Fc (ANOMAL)|

Fc = แฟคเตอร์โครงส่ร้างคำนวณ

Fc , cos A และ sin A ที่เขียนบนฟูเรียร์ไฟล์ ไม่รวมผลจากอนอมัลสัล่ดิส่เพอร์ชั่น

( Fc = |FO| cos A + Im. |Fc| sin A )

การปรับค่าส่เกลแฟคเตอร์(Scale factor refinement)

ในโปรแกรมทำได้ 2 แบบ คือ

1 ปรับส่เกลแฟคเตอร์แบบรวมคือให้ค่าส่เกลแฟคเตอร์ของแต่ละเลย์เออร์ เปลี่ยนไปเท่า ๆ กัน หรือรวมทุกเลย์เออร์ให้เป็นส่เกลแฟคเตอร์ตัวเดียว

2 ปรับส่เกลแฟคเตอร์แบบแต่ละเลย์เออร์ คือค่าเปลี่ยนไปของส่เกลแฟคเตอร์แต่ละเลย์เออร์อาจไม่เท่ากัน

ค่าเส่กลแฟคเตอร์ FO คือ อัตราส่วนของ $\frac{Fc}{Fo}$ ส่วนค่าส่เกลแฟคเตอร์ FC คืออัตราส่วน Fo ระหว่างรอบ (cycle) หนึ่งกับรอบถัดไป ซึ่งขึ้นรอบใหม่ก็จะให้ส่เกลแฟคเตอร์ FC มีค่าเป็น 1.0

การปรับค่าเอ็กซ์ทิงชั่น (Extinction refinement)

ในโปรแกรมที่ใช้ไม่มีการปรับเอ็กซ์ทิงชั่นแบบอส่มสักษณ์ การแก้ค่าเอ็กซ์ทิงชั่นใช้สูตร

$$|FO| \text{ (corr.)} = |FO| \ (1 + G.|FC|^2. \ TMOD)^{1/4}$$

เมื่อ G = GISO สำหรับแก้ค่าเอ็กซ์ทิงชั่นแบบส่มสักษณ์

TMOD = TBAR. CONST. , TBAR = ระยะทางเฉลี่ยของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบและสะท้อนออกไปจากผลึก, ค่า CONST เป็นค่าคงที่ที่ขึ้นกับความยาวคลื่นที่ใช้ และมุม θ ของจุดสะท้อน ค่า TMOD มีผลคำนวณไว้ในโปรแกรม

การบังคับ (Constraints)

ทำได้ 2 แบบ คือ

1 กำหนดให้ตัวแปร คงที่ไว้ตามค่าที่กำหนดครั้งแรก ทำได้โดยเจาะ 0 หรือปล่อยทิ้งไว้บนบัตร PARAMETER SELECTION CARD (PSELCT)

2 กรณีพารามิเตอร์ตั้งแต่สองพารามิเตอร์ขึ้นไปสัมพันธ์กันอย่างง่าย ๆ เช่น ตำแหน่งของอะตอม $x_j$, $y_j$, $z_j$ เมื่อมีการปรับตำแหน่ง $x_j$ แล้ว ค่าที่ปรับจะมีผลต่อตำแหน่ง $y_j$ ด้วย ซึ่งไม่มีการปรับ กรณีเช่นนี้จะต้องใช้ RESET CARD และ PARAMETER SELECTION CARD ด้วย

ขนาดของโปรแกรม (Programe dimensions)

จำนวนอะตอมสูงสุด 60 อะตอม

จำนวนพารามิเตอร์สูงสุด 622 ค่า

จำนวนสเกลแฟคเตอร์สูงสุด 20 ค่า

จำนวนสูงสุดของบัตรสมมาตร 48 ใบ

จำนวนสูงสุดของตารางของแฟคเตอร์การกระเจิง 12 ตาราง

3.3.1 การใช้และลักษณะของโปรแกรม CSPHLSQ

อินพุทของโปรแกรมอาจใช้เทปแม่เหล็กซึ่งเก็บข้อมูลความเข้มหลังจากผ่านโปรแกรม CSPHABSW หรืออาจใช้บัตรโดยเจาะค่าดัยนีมิลเลอร์ ค่า $F_o$ และค่า SIGMA ของ Fo ใช้รูปแบบคำสั่งเป็น (3I5, 2F10.0) ซึ่งคำนวณโดยใช้โปรแกรมย่อย SUBROUTINE LSQINP . ในบัตรใบสุดท้ายของข้อมูลเจาะค่า IH = 999 เอาท์พุทของโปรแกรมนี้จะพิมพ์บนกระดาษและบันทึกบนเทปแม่เหล็ก ซึ่งใช้เป็นอินพุทของโปรแกรม CSPHFOUR เมื่อทำแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอน หรือแผนภาพผลต่างความหนาแน่นอิเลคตรอน สำหรับหาตำแหน่งอะตอมเพิ่ม ลักษณะโปรแกรมเป็นดังนี้

1152 42031

. ชุดบอกชื่อโปรแกรมและลักษณะงาน

```
* $$ JOB JNM = --------, CLASS = T
* $$ PRT CLASS = A
// JOB (Account NO.)
// OPTION LOG
// PAUSE MOUNT OUTPUT TAPE "--------"  AT 282
// ASSGN SYS005, X'282'
// ASSGN SYS007, DISK, VOL = CUWK1, SHR
// DLBL IJSYS07, 'WORK.FILE', 0
// EXTENT SYS007, CUWRK1,,, 3480,50
// ASSGN SYS006, DISK, VOL = CUWRK1, SHR
// DLWL IJSYS06, 'DISTAN.FILE', 0
// EXTENT SYS006, CUWRK1,,, 3530, 10
* $$ SLI P.GETLIB
// EXEC CSPHLSQ
       DATA
/*
/&
* $$ SLI P.RETURN
* $$ EOJ
```

## 3.4 โปรแกรม CSPHGUNE

เป็นโปรแกรมที่ใช้คำนวณระยะห่างระหว่างระนาบ (d-spacing) ในผลึกจริง และค่า $\sin^2\theta$ ของแต่ละระนาบโดยใช้ข้อมูลจากภาพถ่ายผลึกผงด้วยกล้อง กีเนียร์-เฮกก์ (Guinier-Hägg)รุ่น XDC-700 ในการคำนวณใช้ลีสแควร์โพลีโนเมียล (least-squares polynomial) อธิบายค่าแก้แบบเส้นโค้ง K (K-curve) หรือค่าแก้แบบเดลต้า S (S-S(0)) สำหรับจำนวนจุดที่ใช้ในการทำเส้นโค้งปรับค่า (calibration curve) โปรแกรมนี้จะเพิ่มจุดพิเศษ 1 จุด ดังนี้

- ในกรณีใช้เส้นโค้งปรับค่าแบบเดลต้าเอส จะเพิ่มจุดพิเศษที่เดลต้าเอส มีค่าเป็น 0 ที่จุดกำเนิด

- ในเส้นโค้งปรับค่าแบบ K จะทำ K ที่ SS(1)/2 อยู่บนเส้นตรงระหว่าง SS(1) และ SS(2) โดยที่ SS(I) = เดลต้าเอสของเส้นปรับค่าเส้นที่ I (S(I) - S(0))

### 3.4.1 การใช้และลักษณะของโปรแกรม CSPHGUNE

อินพุทที่เป็นข้อมูลของโปรแกรมนี้ใช้บัตรโดยเจาะค่าตำแหน่งของเส้นที่ปรากฏบนฟิล์ม, ความเข้ม, น้ำหนัก (weight) หรือความเชื่อมั่นในการวัดว่าถูกต้องมากหรือน้อย และตัวเลขบอกว่าเป็นข้อมูลใบสุดท้ายโดยเจาะ 1 ถ้ายังไม่ใช่ข้อมูลใบสุดท้ายเจาะ 0 บัตรข้อมูลนี้ใช้รูปแบบคำสั่งเป็น (F6.3, A1, F8.2, I1)

เอาท์พุทของโปรแกรมนี้ที่พิมพ์ออกมาจะบอกถึงค่า $\theta$ , $\sin^2\theta$ และค่า d ที่ล่อดคล้องกับตำแหน่งของเส้น ซึ่งผลเหล่านี้จะใช้เป็นตัวเทียบกับผลการให้ (generate) ของระนาบ (h k l) ในช่วงมุม $\theta$ ที่กำหนดของโปรแกรม CSPHCENE เพื่อจะหาระนาบ (h k l) ที่มีค่า $\sin^2\theta$ ใกล้เคียงกันที่สุด ลักษณะของโปรแกรม CSPHGUNE เป็นดังนี้

ชุดบอกชื่อโปรแกรมและลักษณะงาน

```
* $$ JOB JNM = --------, CLASS = T
* $$ PRT CLASS = A
// JOB (Acount_NO.)
* $$ SLI P.GETLIB
// EXEC CSPHGUNE
      DATA
```

```
/*
/&
* $$ SLI P.RETURN
* $$ EOJ
```

3.5 โปรแกรม CSPHCENE

โปรแกรมนี้อาจแบ่งการทำงานได้ 2 ตอน

ตอนที่ 1 เป็นการให้ (generate) ค่าระนาบ (h k l) ต่าง ๆ ในช่วงค่ามุม θ ที่กำหนด โดยใช้ระบบผลึก และมิติของหน่วยเซลล์ ที่ได้จากภาพถ่ายออสซิลเลชั่นและภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบิร์ก เป็นข้อมูล

ตอนที่ 2 เป็นการปรับค่ามิติของหน่วยเซลล์ โดยใช้ค่า $\sin^2\theta$ จากโปรแกรม CSPHGUNE และค่าระนาบ (h k l) จากโปรแกรม CSPHCENE ที่ให้ค่า $\sin^2\theta$ ใกล้เคียงกับค่า $\sin^2\theta$ จาก CSPHGUNE ข้อมูล (h k l) สำหรับการปรับมิติของหน่วยเซลล์ต้องไม่เกิน 50 ระนาบ ในการคำนวณปรับค่ามิติของหน่วยเซลล์ใช้วิธีผลต่างกำลังสองน้อยที่สุด

3.5.1 การใช้และลักษณะของโปรแกรม CSPHCENE

ข้อมูลที่เป็นอินพุทของโปรแกรมนี้ใช้บัตรโดยเจาะค่าดัชนีมิลเลอร์, $\sin^2\theta$, น้ำหนักซึ่งแสดงถึงความเชื่อมั่นในการวัดตำแหน่งเส้น

ชุดบอกชื่อโปรแกรมและลักษณะงาน

```
* $$ JOB JNM = --------, CLASS = T
* $$ PRT CLASS = A
// JOB (Account NO.)
* $$ SLI P.GETLIB
// EXEC CSPHCENE
        DATA
```

```
/*
/&
* $$ P.RETURN
* $$ EOJ
```

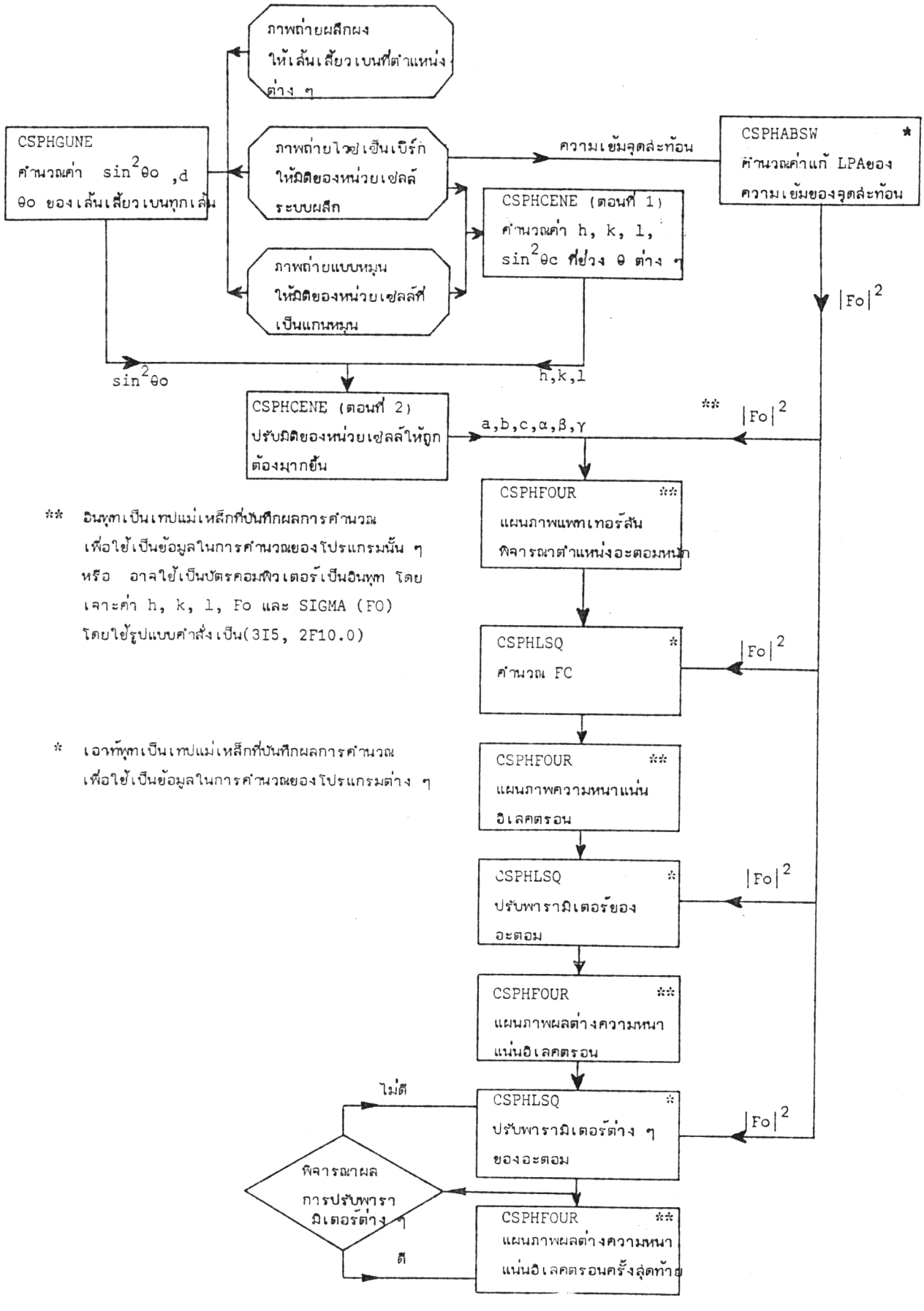
3.6 โปรแกรม CSPHDIST เป็นโปรแกรมที่ใช้หาความยาวพันธะระหว่างอะตอมต่าง ๆ ในหน่วยเซลล์ และมุมระหว่างพันธะ ค่าที่คำนวณได้จะแสดงค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานไว้ด้วย โดยอาศัยค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของมิติของหน่วยเซลล์ ที่ได้จากโปรแกรม CSPHCENE และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของตำแหน่งอะตอมที่ได้จากโปรแกรม CSPHLSQ

3.6.1 การใช้และลักษณะของโปรแกรม CSPHDIDT

อินพุทของโปรแกรมนี้ใช้บัตร บัตรที่ใช้เจาะข้อมูลมิติของหน่วยเซลล์ และมุม $\alpha,\beta,\gamma$ ใช้รูปแบบคำสั่งเป็น (A4, 6X, 7F 10.0) ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของมิติและมุมของหน่วยเซลล์ ซึ่งเป็นผลการคำนวณของโปรแกรม CSPHCENE ใช้รูปแบบคำสั่งเป็น (A4, 6X, 7F 10.0) ส่วนตำแหน่งอะตอมและค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานที่เป็นผลการคำนวณจากโปรแกรม CSPHLSQ ใช้รูปแบบคำสั่งเป็น (A4, 6X, A4, 6X, 6F 10.0) และ (A4, 6X, A4, 6X, 6F 10.0) ตามลำดับ

ชุดบอกชื่อโปรแกรมและลักษณะงาน

```
* $$ JOB JNM = --------, CLASS = T
* $$ PRT CLASS = A
// JOB (Account NO.)
// ASSGN SYS007, DISK, VOL = CUWRK1, SHR
// DLBL IJSYS 07, 'SCR.DIST' , 0
// EXTENT SYS007, CUWRK1,,, 3480, 50
* $$ SLI P.GETLIB
// EXECT CSPHDIST
        DATA
/*
/&
* $$ SLI P.RETURN
* $$ EOJ
```




** อินพุทเป็นเทปแม่เหล็กที่บันทึกผลการคำนวณ
เพื่อใช้เป็นข้อมูลในการคำนวณของโปรแกรมนั้น ๆ
หรือ อาจใช้เป็นบัตรคอมพิวเตอร์เป็นอินพุท โดย
เจาะค่า h, k, l, Fo และ SIGMA (FO)
โดยใช้รูปแบบคำสั่งเป็น(3I5, 2F10.0)

* เอาท์พุทเป็นเทปแม่เหล็กที่บันทึกผลการคำนวณ
เพื่อใช้เป็นข้อมูลในการคำนวณของโปรแกรมต่าง ๆ

รูปที่ 3.1 แผนผังแสดงขั้นตอนการคำนวณด้วยโปรแกรมคอมพิวเตอร์