



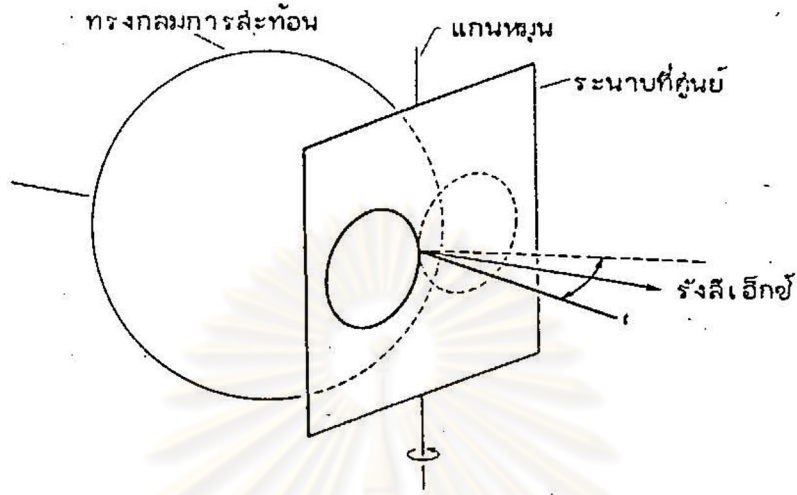
บทที่ 3

การถ่ายภาพผลึกด้วยวิธีฟรีเซลล์

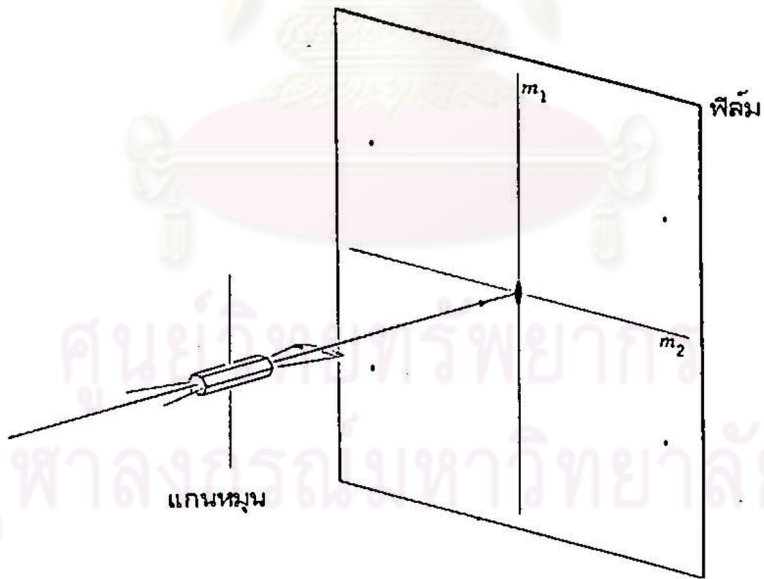
ในการศึกษาผลึกเดี่ยว นอกจากนิยมนำกล้องไวซ์เซ็นเบอร์แล้ว กล้องที่นิยมใช้กันอย่างกว้างขวางอีกชนิดหนึ่งคือ กล้องฟรีเซลล์ ซึ่งคิดประดิษฐ์ขึ้นในปี ค.ศ. 1940 โดยศาสตราจารย์ เอ็ม.เจ.เบอร์เกอร์ (M. J. Bueger) หลักของการถ่ายภาพฟรีเซลล์คล้ายกับหลักของการถ่ายภาพไวซ์เซ็นเบอร์ คือ ภาพถ่ายที่ได้นั้นได้จากการที่ตัวผลึกและฟิล์มเคลื่อนที่ พร้อมกับสามารถแยกถ่ายภาพได้ทีละเลเยอร์ของระนาบรีซีเพรเอเคิลแลททิส ส่วนที่แตกต่างกันคือ ภาพถ่ายที่ได้จากวิธีฟรีเซลล์ เป็นภาพของรีซีเพรเอเคิลแลททิส ดังที่เป็นอยู่จริง ไม่บิดเบือน ทำให้สะดวกในการหาค่าคงที่โครงสร้างผลึก และลุ่มมาตรการของผลึกที่ถูกต้อง จึงนิยมใช้ในการหาโครงสร้างของผลึกที่ซับซ้อน เช่น โครงสร้างของโมเลกุลโปรตีน

3.1 การพัฒนาวิธีการถ่ายภาพแบบฟรีเซลล์

เนื่องจากขีดจำกัดของการถ่ายภาพแบบผลึกหมุนกลับไปกลับมา (oscillating-crystal method) ทำให้ลุ่มมาตรการของผลึกที่ปรากฏได้สูงสุดเพียง 2 mm ดังรูปที่ 3.1 ซึ่งเป็นผลมาจากอิทธิพล 2 อย่าง คือ ลุ่มมาตรการของฟรีเทล (Friedel symmetry) และลุ่มมาตรการของการเคลื่อนที่ (motion symmetry) ของผลึก ซึ่งเป็นตัวกำหนดขอบเขตของพื้นที่รีซีเพรเอเคิลแลททิสที่จะตัดกับทรงกลมของการสะท้อน ดังนั้นจากภาพถ่ายแบบผลึกหมุนกลับไปกลับมา เราจึงสามารถเห็นภาพถ่ายที่มีลุ่มมาตรการเป็น 2mm, 2, m และ 1 เท่านั้น ไม่สามารถเห็นภาพถ่ายที่มีลุ่มมาตรการเป็น 3, 3m, 4, 4m, 6 หรือ 6m ได้เลย ด้วยเหตุนี้ เบอร์เกอร์จึงได้คิดประดิษฐ์กล้องขึ้นใหม่ เพื่อสามารถให้ภาพถ่ายที่แสดงลุ่มมาตรการของผลึกที่เป็นอยู่จริง



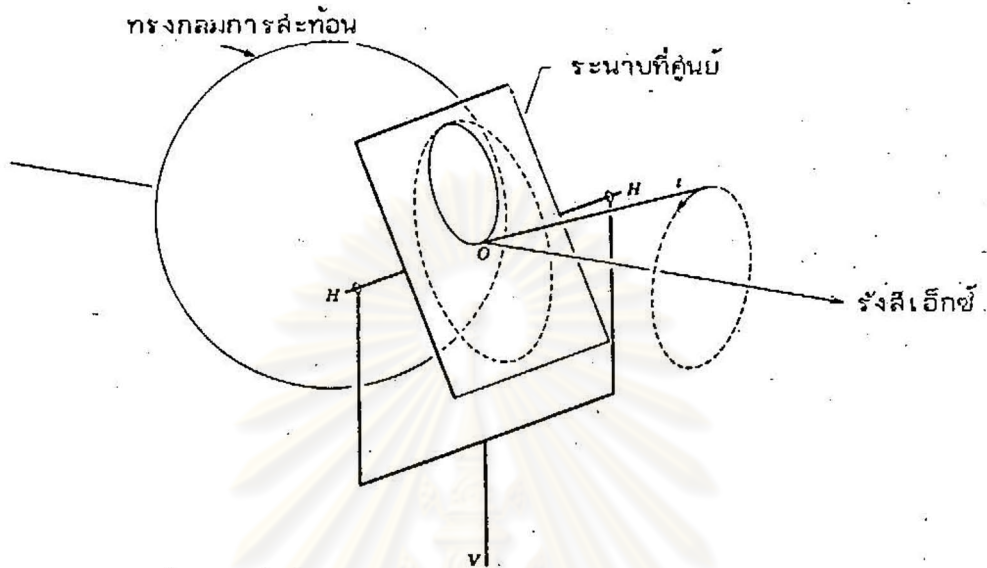
รูปที่ 3.1 (ก) การหมุนของผลึกแบบผลึกหมุนกลับไปกลับมา



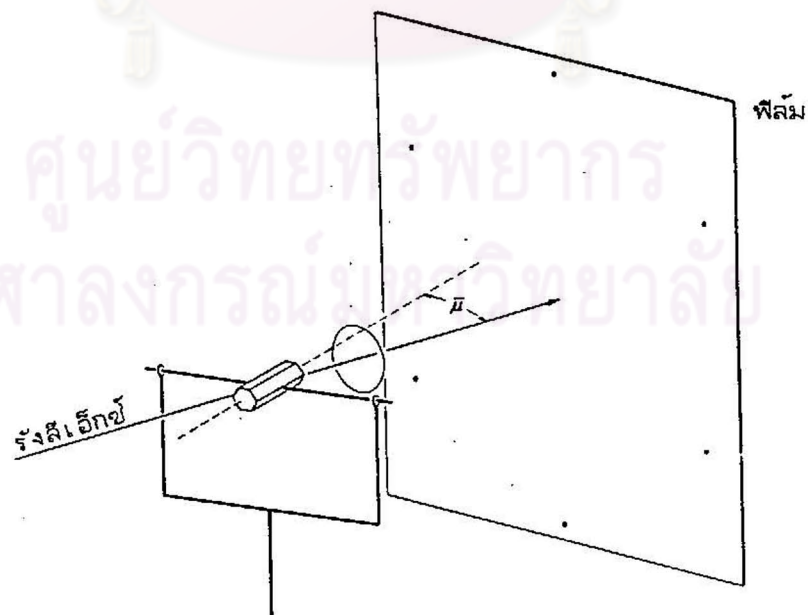
รูปที่ 3.1 (ข) สัณฐาน 2 มม บนฟิล์ม เนื่องจากการถ่ายภาพแบบผลึกหมุน

จากรูปที่ 3.2 (ก) แกน c ของผลึกตั้งฉากกับระนาบรีซีเพอเคิลแลททิล และเอียงทำมุม μ กับลำรังสีเอ็กซ์ เมื่อระนาบรีซีเพอเคิลแลททิลหมุนทั้งในแนวนอน (H) และแนวตั้ง (V) ไปพร้อม ๆ กัน จะทำให้แกน c ของผลึกหมุนรอบลำรังสีเอ็กซ์ด้วยมุม μ คงที่ เรียกว่า

แกน ต. หมุนแบบควง หรือฟรีเฮลซ์รอบลำรังสีเอ็กซ์ และเรียกวิธีการนี้ว่า วิธีฟรีเฮลซ์



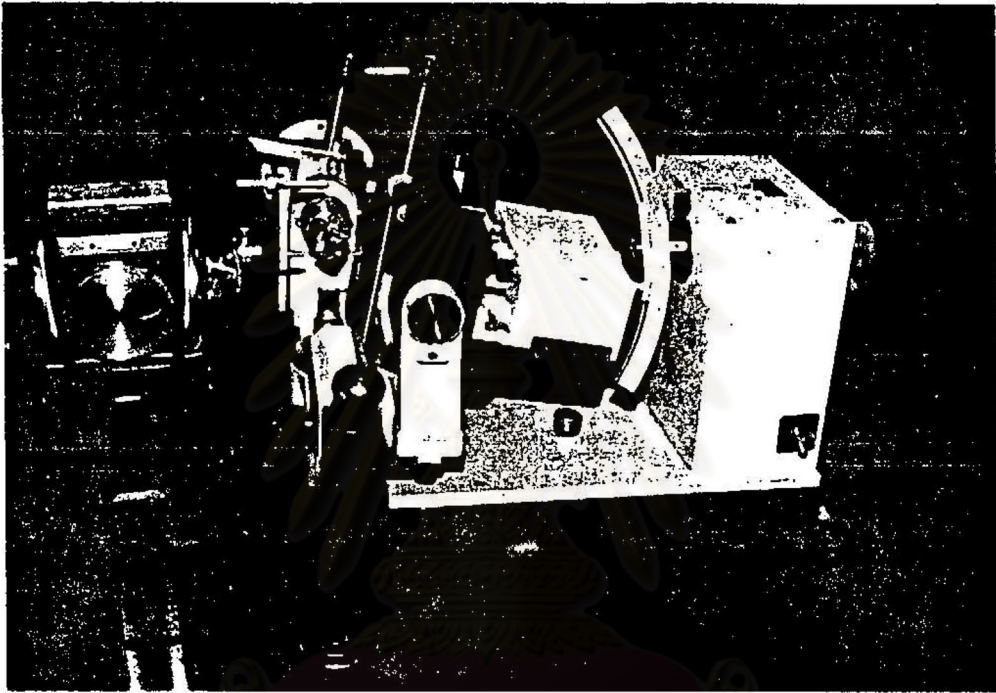
รูปที่ 3.2 (ก) การหมุนของผลึกทั้งทางแกนนอน (H) และแกนตั้ง (V)



รูปที่ 3.2 (ข) สัมมาตร 6 มม บนฟิล์มเนื่องจากการถ่ายภาพแบบฟรีเฮลซ์

3.2 กล้องพรเซล์ซีน

ลักษณะและส่วนประกอบต่าง ๆ ของกล้องพรเซล์ซีนของหน่วยผลึกวิทยารังสี เอ็กซ์แห่งนี้ แสดงไว้ในรูปที่ 3.3



รูปที่ 3.3 ส่วนประกอบของกล้องพรเซล์ซีน

ลักษณะของกล้องพรเซล์ซีน ประกอบด้วยส่วนสำคัญ 6 ส่วน คือ ฐานล่าง (lower base), กล้องจุลทรรศน์และกระจก (microscope and mirror), ผลึก (crystal), ตัวสกัดรังสี (beam stop), ฉากกัน (screen) และกาส์ใส่ฟิล์ม (cassette) รายละเอียดในแต่ละส่วนเป็นดังนี้

ก. ฐานล่าง ตอนล่างของกล้องมีลึกรู 3 ตัว เป็นตัวปรับระดับให้ลำรังสี เอ็กซ์พุ่งออกมาอบผลึกได้ตรง และมีความเข้มมากที่สุด

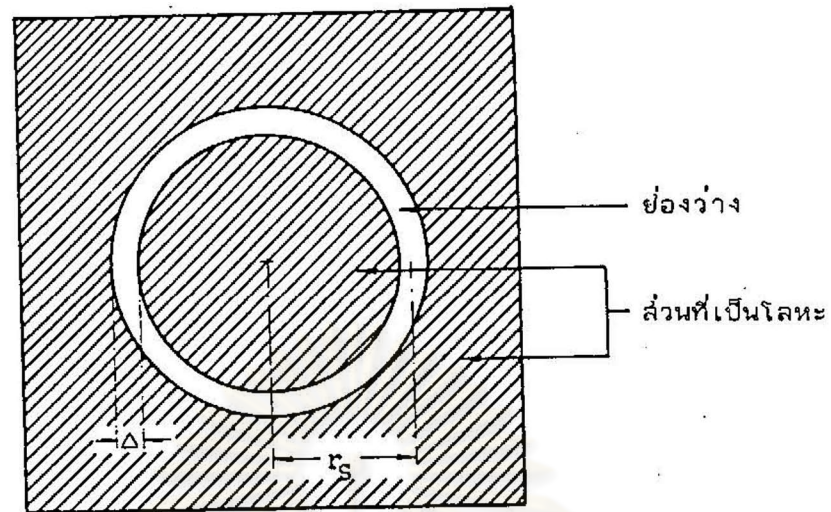
ข. กล้องจุลทรรศน์และกระจก เป็นอุปกรณ์ในการตรวจสอบตำแหน่งของผลึก ซึ่งใช้ในการปรับแกนผลึก หลังจากปรับแกนผลึกเสร็จแล้ว ต้องนำกระจกออกก่อนการถ่ายภาพพร็เซลล์ขึ้น มิฉะนั้นตัวใส่จากกันจะบังกระจกในระหว่างการพร็เซลล์

ค. ผลึก ผลึกที่ติดอยู่บนหัวโกนิโอมิเตอร์ ถูกนำมาติดกับแกนในแนวนอนของกล้อง เพื่อเป็นแกนหมุนเช่นเดียวกับแกนหมุนในกล้องไวซ์เซ็นเบอร์ก เราเรียกแกนหมุนนี้ว่า แกนหมุนไดอัล (dial axis) ซึ่งแกนนี้สามารถเคลื่อนที่เข้าหา หรือออกจากลำรังสี เอ็กซ์ได้โดยการคลายสวิตช์ และปรับแกนไปยังตำแหน่งที่ต้องการ เพื่อให้ผลึกบนหัวโกนิโอมิเตอร์อยู่ตรงกึ่งกลางลำรังสี เอ็กซ์ ส่วนแกนที่ยาวนานกับอาร์คทั้งสองบนหัวโกนิโอมิเตอร์ เราเรียกว่า แกนตั้ง (vertical axis) และแกนนอน (horizontal axis) ตามลำดับ

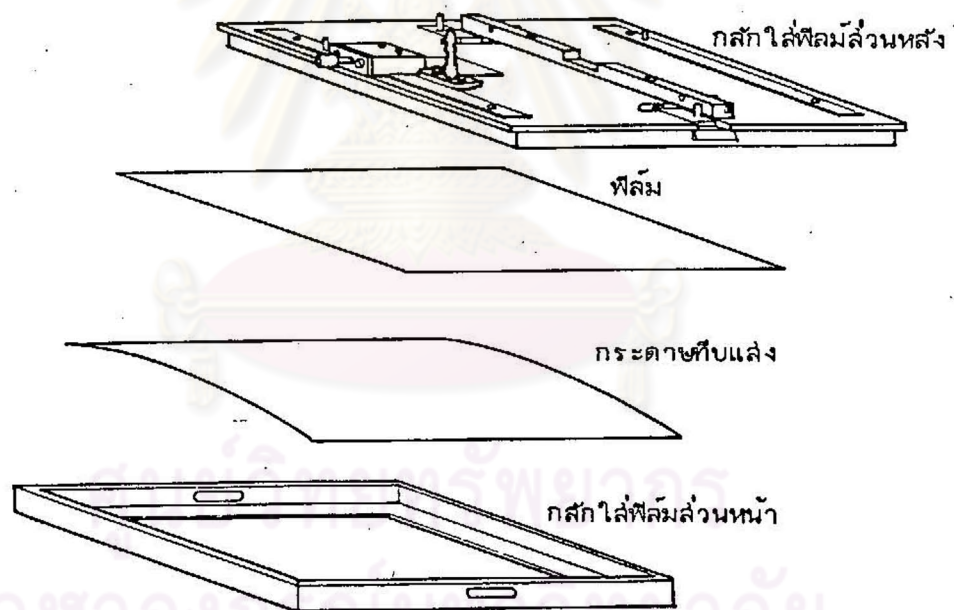
ง. ตัวลึกรังสี เป็นตัวกันลำรังสี เอ็กซ์หลังจากผ่านผลึก ไม่ให้พุ่งไปยังฟิล์ม มีลักษณะเป็นถ้วยยึดติดกับแกนที่สามารถเคลื่อนได้คล้องตัวลึกรังสี ควรอยู่ห่างจากฟิล์มให้มากที่สุด เพื่อลดความเข้มของพื้นฟิล์ม (background) หรือกล่าวอีกนัยหนึ่ง ตัวลึกรังสีควรอยู่ใกล้ผลึกให้มากที่สุด เพื่อป้องกันไม่ให้รังสีสะท้อนมากเกินไป เป็นเหตุให้จุดมืดบนฟิล์มใหญ่เกินไปจนครอบคลุมจุดสะท้อนบนฟิล์มที่เกิดขึ้น

จ. จากกัน มีลักษณะเป็นแผ่นโลหะสี่เหลี่ยม ตรงกลางเป็นช่องว่างรูปวงแหวน ดังแสดงในรูปที่ 3.4 รัศมีของวงแหวน (r_s) มี 6 ขนาดด้วยกัน คือ 5, 10, 15, 20, 25 และ 30 มิลลิเมตร ขนาดของช่องว่างวงแหวน (Δ) ของจากกันมี 3 ขนาด คือ 1, 2 และ 3 มิลลิเมตร เมื่อต้องการใช้จากกัน จะลอคลงในตัวใส่จากกันที่ติดติดกับแกนที่สามารถเคลื่อนได้คล้อง เพื่อปรับระยะระหว่างผลึกกับจากกัน (S) ได้ตามที่ต้องการ โดยการอ่านจากสเกลละเอียดที่ติดอยู่ ระยะระหว่างผลึกกับจากกันน้อยที่สุดประมาณ 2.3 เซนติเมตร ซึ่งถูกจำกัดโดยเส้นผ่าศูนย์กลางของหัวโกนิโอมิเตอร์ และระยะที่มากที่สุดที่จากกันจะไม่ติดกับตัวใส่ฟิล์มประมาณ 4.5 เซนติเมตร

ฉ. กสีกใส่ฟิล์ม ฟิล์มที่ใช้ในการถ่ายภาพพร็เซลล์ขึ้นเป็นรูปสี่เหลี่ยมจัตุรัสขนาด 125 x 125 ตารางมิลลิเมตร ถูกใส่ลงในกสีกใส่ฟิล์มที่ทำด้วยกรอบโลหะ ดังแสดงในรูปที่ 3.5 ฟิล์มถูกประกบด้วยกระดาษหีบแสง และด้านหลังถูกปิดทับด้วยแผ่นโลหะ เพื่อให้ฟิล์มไม่เสื่อมขณะการถ่ายภาพพร็เซลล์ขึ้น แผ่นโลหะที่ปิดทับด้านหลังมีช่องเล็ก ๆ ที่มุม มุมละช่อง เว้นมุมหนึ่งมี 2 ช่อง ทำให้เกิดจุดดำบนภาพถ่ายพร็เซลล์ขึ้นทั้งสี่มุม เพื่อใช้ในการพิจารณาภาพถ่ายพร็เซลล์ขึ้นว่า

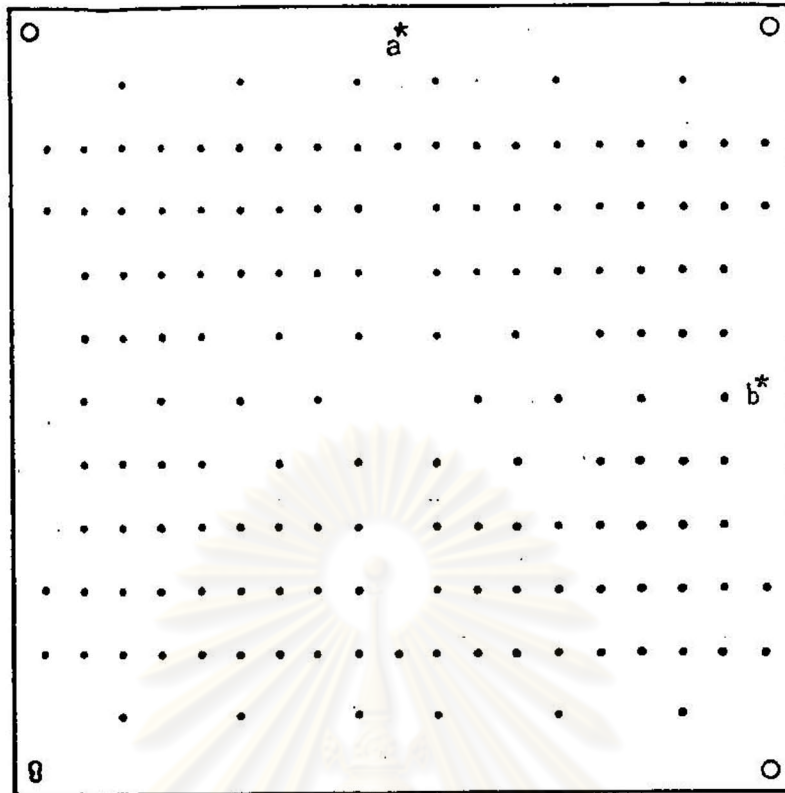


รูปที่ 3.4 ลักษณะของฉากกันรังสีเอ็กซ์



รูปที่ 3.5 ลักษณะการบรรจุฟิล์มลงในก๊อกลใส่ฟิล์มในการถ่ายภาพแบบพรีเซชัน

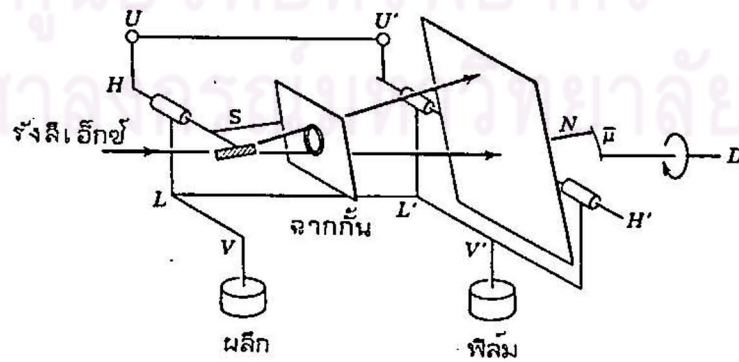
มีด้านใดเป็นด้านหน้า และด้านใดเป็นด้านหลัง ดังแสดงในรูปที่ 3.6 ก๊อกลใส่ฟิล์มยึดติดกับตัวกล้องด้วยสลัก ตัวกล้องส่วนนี้สามารถเลื่อนเข้าหาผลึกได้ สิ่งทำให้เราสามารถปรับระยะห่างระหว่างฟิล์มกับผลึก (MC) ได้ตามที่ต้องการ โดยอ่านจากสเกลละเอียดที่ติดอยู่



รูปที่ 3.6 ลักษณะภาพถ่ายพร็เซลล์ันด้านหลัง

3.3 หลักการทำงานของกล้องพร็เซลล์ัน

ภาพถ่ายพร็เซลล์ัน เป็นภาพของริซเฟรอนต์แลตทิซที่เป็นอยู่จริง ทั้งนี้เนื่องจากผลึก และฟิล์มมีการเคลื่อนที่อย่างสอดคล้องซึ่งกันและกัน เมื่อเทียบกับลำรังสีเอ็กซ์ หลักการทำงานของกล้องพร็เซลล์ัน แสดงดังรูปที่ 3.7



รูปที่ 3.7 หลักการทำงานของกล้องพร็เซลล์ัน

ผลึกและฟิล์มถูกยึดติดด้วยแขนตามแนวแกนตั้ง V และ V' ส่วนทางแกนนอนคือ H และ H' ตามลำดับ แขนที่ยึดผลึกและฟิล์มจะถูกยึดติดกันด้วยแขน LL' และ UU' มีผลทำให้เมื่อแขนยึดผลึก หรือฟิล์มส่วนใดส่วนหนึ่งเคลื่อนที่ อีกส่วนหนึ่งของแขนจะเคลื่อนที่ตาม นั่นคือฟิล์มและผลึกจะมีการเคลื่อนที่แบบสัมพันธ์กัน แนว N เป็นแกนที่ตั้งฉากกับจุดศูนย์กลางของฟิล์ม และสามารถปรับให้เอียงทำมุมกับแนว D ซึ่งเป็นแนวเดียวกับลำรังสีเอ็กซ์ ได้เป็นมุมต่าง ๆ (μ) ตั้งแต่ 0 ถึง 30 องศา ฟิล์มสามารถเลื่อนเข้าหาผลึกได้ในแนวแกน D ระหว่างผลึกกับฟิล์มจะมีฉากกันเพื่อเป็นตัวกำบังรังสีเอ็กซ์ที่เกิดการเลี้ยวเบนจากเลย์เออร์อื่นไปตกบนฟิล์ม ทั้งนี้เนื่องจากต้องการให้รังสีเอ็กซ์จากเลย์เออร์ใดเลย์เออร์หนึ่งเท่านั้นปรากฏบนฟิล์ม เพราะวาทิศทางการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์อยู่บนผิวของกรวย ดังนั้นฉากกันซึ่งเป็นแผ่นสี่เหลี่ยมจึงทำเป็นช่องวงแหวน เพื่อให้รังสีเอ็กซ์ผ่าน ฉากกันต้องมีการเคลื่อนที่สอดคล้องกับผลึก และฟิล์ม ดังนั้นจึงยึดฉากกันกับผลึกด้วยแกน S

เมื่อให้แกน D หมุน แนว N ซึ่งเป็นเส้นตั้งฉากกับฟิล์มจะพริเซล์รอบลำรังสีเอ็กซ์เป็นมุม μ ทำให้ฟิล์มออสซิลเลทรอบแกน H' และ V' เป็นมุมคงที่ $90^\circ - \mu$ กับลำรังสีเอ็กซ์ เนื่องจากแกนของผลึกขนานกับแนว N ดังนั้นเมื่อแนว N พริเซล์ แกนผลึกจะพริเซล์รอบลำรังสีเอ็กซ์ด้วยมุมที่เท่ากันกับแนว N พริเซล์ด้วย ระนาบรีซีเพรเอเคิลแลททิสของเลย์เออร์ที่ต้องการจะเกิดการเลี้ยวเบนผ่านช่องวงแหวนของฉากกันไปตกบนฟิล์ม

3.4 หลักการถ่ายภาพพริเซลล์ชัน

การถ่ายภาพพริเซลล์ชัน แยกพิจารณาเป็น 2 แบบ คือ การถ่ายภาพของเลย์เออร์ที่ 0 และการถ่ายภาพของเลย์เออร์ที่ n

การถ่ายภาพพริเซลล์ชันของเลย์เออร์ที่ 0 แสดงดังในรูปที่ 3.8 $O'N'$ เป็นแกนที่ตั้งฉากกับระนาบรีซีเพรเอเคิลแลททิสเลย์เออร์ที่ 0 แกน $O'N'$ เอียงทำมุม μ กับลำรังสีเอ็กซ์ การพริเซลล์ของแกน $O'N'$ ทำให้ระนาบรีซีเพรเอเคิลแลททิสตัดทรงกลมของการสะท้อน เกิดเป็นวงกลมเคลื่อนไปรอบจุด O' ถ้าให้ระนาบรีซีเพรเอเคิลแลททิสตัดทรงกลมของการสะท้อนที่จุด P' ซึ่งไปปรากฏบนฟิล์มเป็นจุด P จากสามเหลี่ยมคล้าย $SO'P'$ กับ SOP ตามรูปที่ 3.8 นี้พบว่า

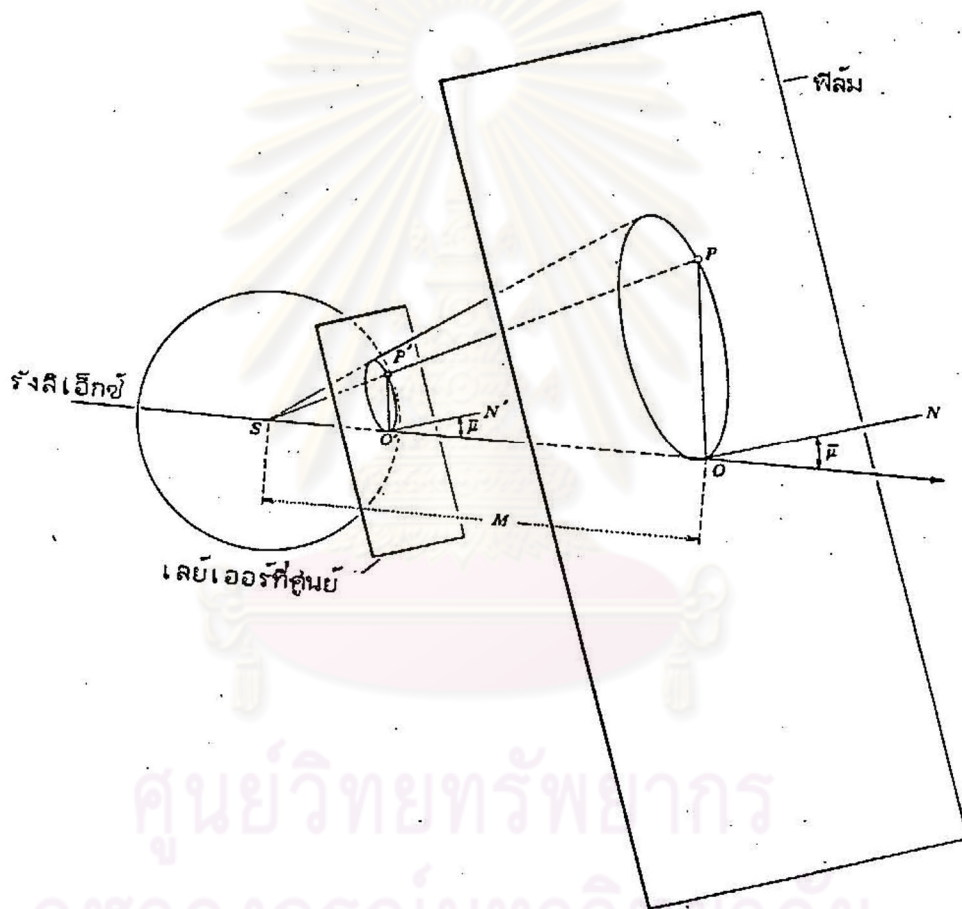
$$\frac{OP}{O'P'} = \frac{SO}{SO'} = \frac{M}{I} \quad (3.1)$$

$$OP = M (O'P') \tag{3.2}$$

เมื่อ $O'P'$ คือ ระยะระหว่างจุดกำเนิดรีซีเพอเคิลแลททีลกับจุดที่ตัดตรงกลมการ
- สะท้อน

M คือ ระยะระหว่างผลึกกับฟิล์ม 60 มิลลิเมตร

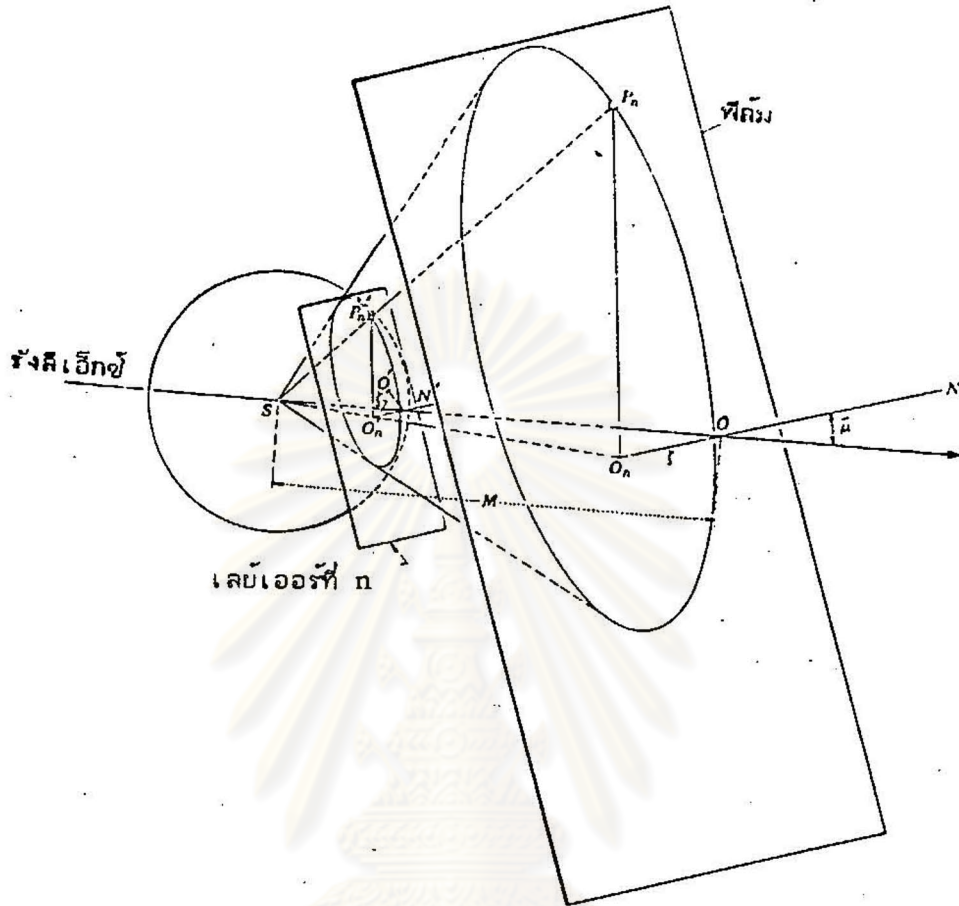
OP คือ ระยะที่วัดได้จากฟิล์ม



รูปที่ 3.8 การถ่ายภาพรีซีเพอเคิลแลททีลของเลเยอร์ที่ 0

จากสมการที่ (3.2) นี้ พบว่าระยะ OP มีความยาวเป็น M เท่าของระยะรีซีเพอเคิลแลททีล ($O'P'$)

ส่วนการถ่ายภาพรีซีเพอเคิลแลททีลของเลเยอร์ที่ n ดังแสดงในรูปที่ 3.9 ระนาบรีซีเพอเคิลแลททีลเลเยอร์ที่ n มีระยะห่างจากระนาบรีซีเพอเคิลแลททีลเลเยอร์ที่ 0 เป็น ζ



รูปที่ 3.9 การถ่ายภาพรีเชลชันของเลนส์เออร์ที่ n

เนื่องจากต้องการให้เกิดภาพรีเชลเพรอกเซลแลทกล์เลนส์เออร์ที่ n โดยไม่บิดเบือน จึงต้องเลื่อนฟิล์มเข้าหาผลึกตามแนว NO โดยระยะที่ต้องเลื่อนฟิล์มเป็นสัดส่วนโดยตรงกับระยะห่างระหว่างระนาบรีเชลเพรอกเซลแลทกล์เลนส์เออร์ที่ n กับเลนส์เออร์ที่ 0 คือ

$$\frac{\zeta}{\zeta'} = \frac{M}{1} \quad (3.3)$$

$$\zeta = M\zeta' \quad (3.4)$$

นั่นคือระยะที่ต้องเลื่อนฟิล์มเข้าหาผลึกเป็น M เท่าของระยะห่างของระนาบรีเชลเพรอกเซลแลทกล์เลนส์เออร์ที่ n จากเลนส์เออร์ที่ 0 ซึ่งสามารถปรับให้ตรงตามค่าที่คำนวณได้ โดยอ่านจากสเกลละเอียดที่ติดไว้ เมื่อแกน $O'N'$ ซึ่งเอียงทำมุม μ กับลำรังสีเอ็กซ์ฟรีเชลล์ ระนาบรีเชลเพรอกเซลแลทกล์ จะตัดทรงกลมของการสะท้อนที่จุด P'_n ซึ่งไปปรากฏบนฟิล์มเป็นจุด P_n จากสามเหลี่ยม

คล้าย $SO'_n P'_n$ และ $SO_n P_n$ ดังรูปที่ 3.9 พบว่า

$$\frac{O_n P_n}{O'_n P'_n} = \frac{SO_n}{SO'_n} \quad (3.5)$$

และจากสามเหลี่ยมคล้าย $SO'_n O'_n$ และ $SO_n O_n$ ได้ว่า

$$\frac{SO_n}{SO'_n} = \frac{SO}{SO'} = \frac{M}{I} \quad (3.6)$$

จากสมการที่ (3.5) และ (3.6) จะได้

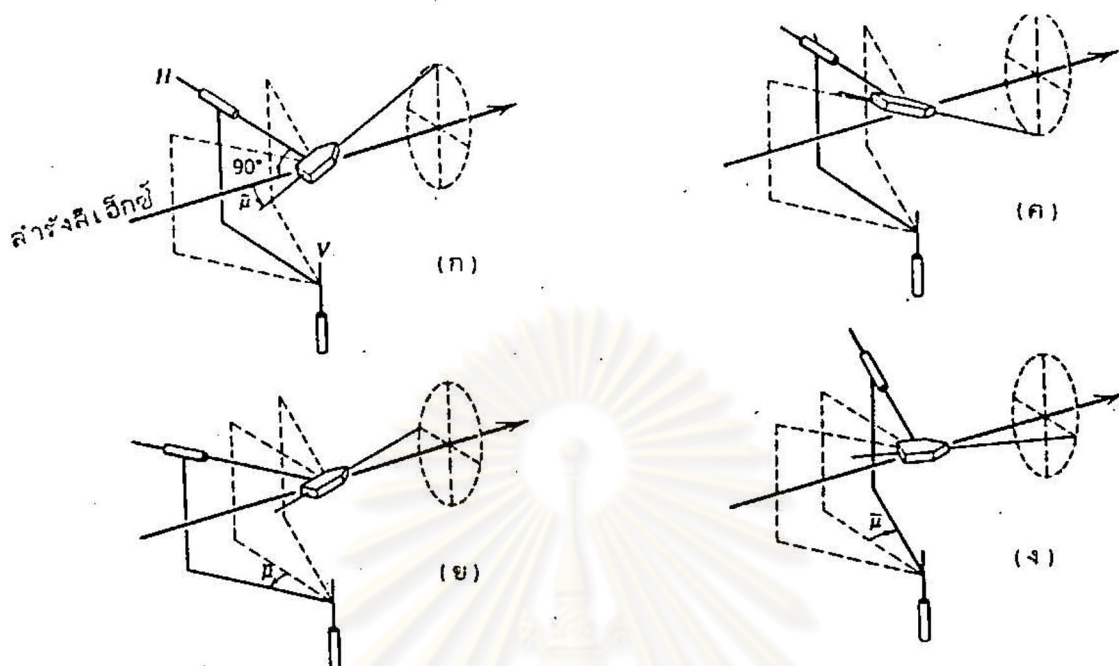
$$\frac{O_n P_n}{O'_n P'_n} = \frac{M}{I} \quad (3.7)$$

$$O_n P_n = M (O'_n P'_n) \quad (3.8)$$

นั่นคือระยะห่างจากจุดกึ่งกลางฟิล์มถึงจุดสะท้อนบนฟิล์ม ($O_n P_n$) ของระนาบรีซีเฟรอก็ิลแลททิล-เลย์เออร์ที่ n เป็น M เท่าของระยะรีซีเฟรอก็ิลแลททิล ($O'_n P'_n$) เหมือนเลย์เออร์ที่ 0

3.5 การเคลื่อนที่ของผลึกรีซีเฟรอก็ิลแลททิล

ดังได้กล่าวข้างต้นแล้วว่า การรีซีเฟรอก็ิลแลททิลของแกนผลึกเกิดจากการหมุนของผลึกทั้งในแนวอนและแนวตั้งพร้อมกัน ลักษณะการรีซีเฟรอก็ิลแลททิลแสดงได้ดังรูปที่ 3.10 โดยเมื่อให้ผลึกเอียงท่ามุม μ กับลำรังสีเอ็กซ์ การหมุนของผลึกตามแนวอน (H) จะมีผลทำให้ระนาบในแนวตั้ง (V) หมุนตามไปด้วย ในทำนองเดียวกัน การควบคุมให้ผลึกหมุนทางแนวตั้งก็มีผลให้ระนาบแนวอนหมุนเช่นกัน ทั้งนี้เนื่องจากแกนในแนวตั้งและแนวอนถูกยึดติดกัน การรวมการหมุนทั้งสองแนวจะเป็นผลให้แกนของผลึกรีซีเฟรอก็ิลแลททิลเป็นรูปกรวย มีมุมกรวยเป็น 2μ แกนกรวยเป็นแกนร่วมกับลำรังสีเอ็กซ์



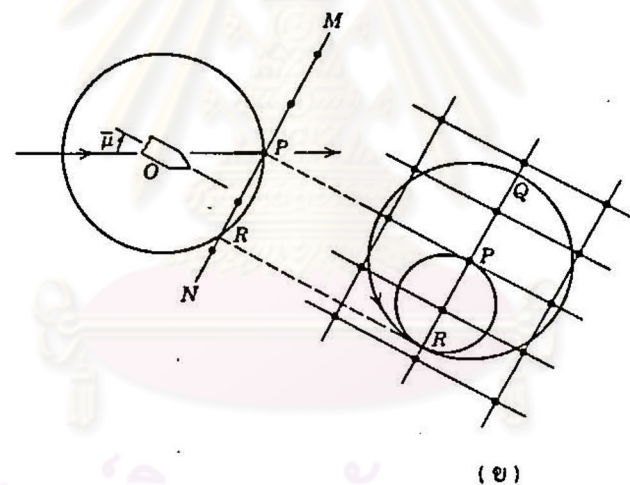
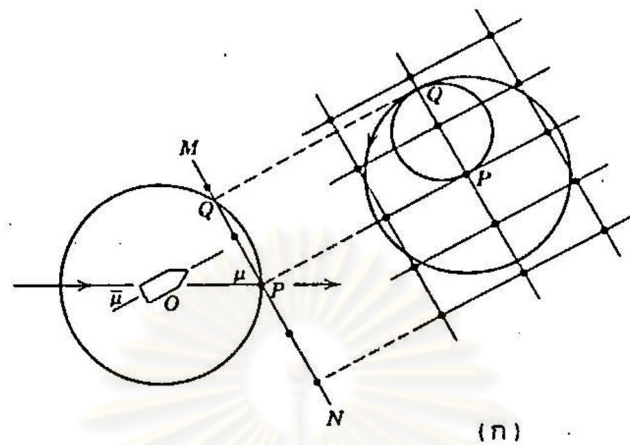
รูปที่ 3.10 ลักษณะการเคลื่อนที่แบบพรีเซล์ชันของผลึก

3.5.1 การเคลื่อนที่ของระนาบเลย์เออร์ที่ 0

การเคลื่อนที่แบบพรีเซล์ชันของระนาบรีซีเพรเอเคิลแลททิลซึ่งตั้งฉากกับแกนพรีเซล์ชันของผลึกนั้น กรณีที่สังเกตเห็นชัดเจนที่สุดคือ การพรีเซล์ชันของระนาบเลย์เออร์ที่ 0 จากรูปที่ 3.11 (ก) และ (ข) MN คือระนาบรีซีเพรเอเคิลแลททิลของเลย์เออร์ที่ 0 P เป็นจุดศูนย์กลางของระนาบ และเป็นจุดร่วมของจุดกำเนิดรีซีเพรเอเคิลแลททิล ระนาบ MN ทำมุมกับแนวลำรังสีเอ็กซ์ $90^\circ - \mu = \mu$ โดยมุม μ จะคงที่ในระหว่างที่แกนผลึกพรีเซล์

ระนาบรีซีเพรเอเคิลแลททิลจะตัดกับทรงกลมของการสะท้อนเป็นวงกลม มีเส้นผ่าศูนย์กลางเป็น $PQ = PR$ ความยาวเส้นผ่าศูนย์กลางของวงกลมมีความสัมพันธ์กับมุมการพรีเซล์ และมุมนี้คงที่ตลอดเวลาในขณะที่แกนผลึกพรีเซล์ การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ เกิดขึ้นขณะเมื่อจุดรีซีเพรเอเคิลแลททิลภายในวงกลม PQ และ PR ตัดกับผิวทรงกลมของการสะท้อน วงกลม PQ และ PR จะหมุนรอบจุด P ดังนั้นบริเวณของจุดรีซีเพรเอเคิลแลททิลของเลย์เออร์ที่ 0 เขตที่เกิดการเลี้ยวเบนคือพื้นที่วงกลมซึ่งมีเส้นผ่าศูนย์กลางเป็น QR การพิจารณาทิศการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของเลย์เออร์ที่ 0 เริ่มจากจุด O ผ่านจุดรีซีเพรเอเคิลแลททิลที่ตัดกับทรงกลมของการสะท้อน โดยทิศการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์อยู่บนบริเวณผิวของกรวย กรวยนี้จะมีกึ่งมุมกรวย

เส้น μ และแกนกรวยเป็นแกนร่วมกับแกนพรีเซล์ของผลึก

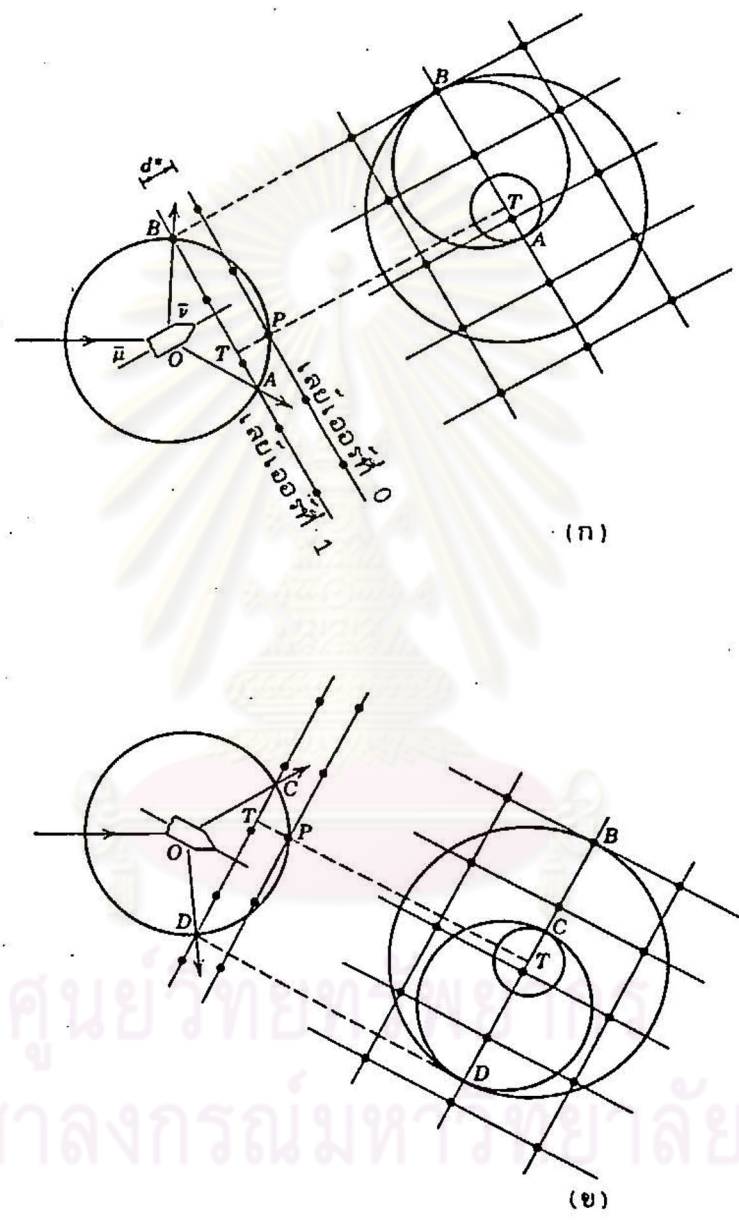


รูปที่ 3.11 การเคลื่อนที่ของระนาบรีซีเพรอเคิลแลททิลเลเยอร์ที่ 0

3.5.2 การเคลื่อนที่ของระนาบเลเยอร์ที่ n

ระนาบรีซีเพรอเคิลแลททิลเลเยอร์ที่ n หมายถึงระนาบรีซีเพรอเคิลแลททิลของชั้นที่อยู่เหนือเลเยอร์ที่ 0 คือ ตั้งแต่เลเยอร์ที่ 1, 2, 3, ... n ในที่นี้จะพิจารณาการเคลื่อนที่เฉพาะเลเยอร์ที่ 1 เท่านั้น เพราะการเคลื่อนที่ของระนาบรีซีเพรอเคิลแลททิลเลเยอร์ที่ 2, 3, ... n เหมือนกับเลเยอร์ที่ 1 จากรูปที่ 3.12 ระนาบรีซีเพรอเคิลแลททิลเลเยอร์ที่ 1 ตัดทรงกลมของการสะท้อนเป็นวงกลม มีเส้นผ่าศูนย์กลาง $AB = CD$ ซึ่งการเคลื่อนที่นี้คล้ายกับการเคลื่อนที่ของระนาบเลเยอร์ที่ 0 แต่มีข้อแตกต่างกันตรงที่การเคลื่อนที่

ของระนาบรีซีเพอเคิลแลทที่ลํเลขที่ 1 มีพื้นที่เล็ก ๆ ตรงกลาง มีรัศมี $TA = TC$ จะไม่
 ตัดกับทรงกลมการสะท้อน พื้นที่ตรงกลางนี้จะเพิ่มขึ้นเมื่อ d^* เพิ่มขึ้น การสะท้อนของระนาบ
 รีซีเพอเคิลแลทที่ลํเลขที่ 1 จะเกิดบนบริเวณผิวของกรวย ซึ่งมีกึ่งมุมกรวยเป็น β



รูปที่ 3.12 การเคลื่อนที่ของระนาบรีซีเพอเคิลแลทที่ลํเลขที่ 1

3.6 การปรับแกนของผลึก

ในการถ่ายภาพด้วยกล้องไวซ์เซ็นเบอร์รัก ไม่ว่าจะเป็นการถ่ายภาพด้วยวิธีผลึกหมุน หรือ
 วิธีไวซ์เซ็นเบอร์รัก ก่อนอื่นต้องปรับแกนผลึกให้ตั้งฉากกับลำรังสีเอ็กซ์ แต่ในการปรับแกนของผลึก
 ก่อนการถ่ายภาพด้วยวิธีเฟรเซิลสัน ต้องปรับให้แกนของผลึกขนานกับลำรังสีเอ็กซ์เมื่อมุม μ เป็น 0

พิจารณาจากรูปที่ 3.13 (ก) t เป็นแกนพรีเซลล์ของผลึกซึ่งเป็นแนวเดียวกับ CK จุด Q เป็นจุดอยู่บนระนาบเลย์เออร์ที่ 0 ซึ่งตัดทรงกลมการสะท้อนปรากฏบนฟิล์มเป็นจุด B ถ้าแกนผลึกปรับเรียบร้อยแล้ว แกนพรีเซลล์เป็นแนว CL ซึ่งจุด P ตัดทรงกลม การสะท้อนตกบนฟิล์มเป็นจุด A นั่นคือระยะบนฟิล์มที่ผิดไป คือ Z_+

ในสามเหลี่ยมคล้าย CQR และ CBA ความยาว $CQ = 1 \text{ r.l.u.}$, $CB = F$
 $= 60$ มิลลิเมตร

$$\hat{R}CQ = 2\Sigma, \quad \hat{C}QK = 90^\circ - \bar{\mu}$$

$$\hat{C}QR = 90^\circ + \bar{\mu}, \quad \hat{C}RQ = 90^\circ - 2\Sigma - \bar{\mu}$$

และ $\hat{C}AB = 90^\circ - 2\Sigma - \bar{\mu}$

จากกฎของ sine ของสามเหลี่ยม CAB

$$Z_+ / \sin 2\Sigma = F / \sin (90^\circ - 2\Sigma - \bar{\mu})$$

$$Z_+ = F \sin 2\Sigma / \cos (2\Sigma + \bar{\mu}) \quad (3.9)$$

รูปที่ 3.13 (ข) ซึ่งเป็นกรณีที่แกนพรีเซลล์ของผลึก คือแนว CF T เป็นจุดรีซีเพอ-เคลดแลททิส์เลย์เออร์ที่ 0 ซึ่งตัดทรงกลมของการสะท้อน ปรากฏเป็นจุด E บนฟิล์มเช่นเดียวกับรูปที่ 3.13 (ก) ถ้าปรับแกนผลึกถูกต้องแล้ว แกนพรีเซลล์เป็นแนว CN จากสามเหลี่ยม CTF และ CED หาก $CT = 1 \text{ r.l.u.}$ และ $CE = 60$ มิลลิเมตร $\hat{E}CD = 2\Sigma$, $\hat{C}TF = 90^\circ - \bar{\mu}$, $\hat{C}ED = 90^\circ - \bar{\mu}$ ดังนั้น $\hat{C}DE = 90^\circ - 2\Sigma + \bar{\mu}$

จากกฎของ sine ของสามเหลี่ยม CDE ได้ว่า

$$Z_- / \sin 2\Sigma = F / \sin (90^\circ - 2\Sigma + \bar{\mu})$$

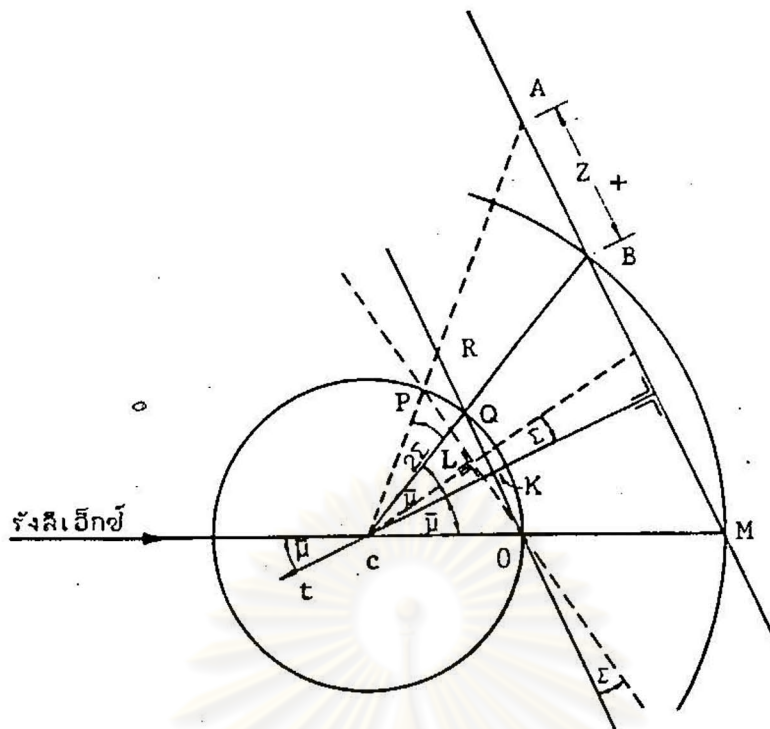
$$Z_- = F \sin 2\Sigma / \cos (2\Sigma - \bar{\mu}) \quad (3.10)$$

ระยะ MA และ MD วัดได้จากฟิล์ม ดังรูปที่ 3.14 และ

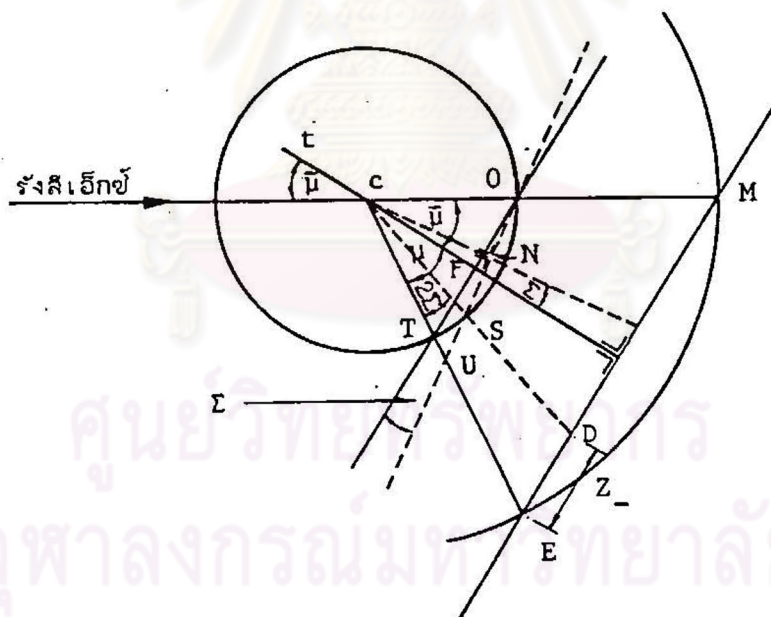
$$MA - MD = MB + BA - (ME - DE) = Z_+ + Z_- \quad (3.11)$$

แทนค่า Z_+ และ Z_- ในสมการ (3.11) ได้ว่า

$$MA - MD = F \sin 2\Sigma \{ 1 / \cos (2\Sigma + \bar{\mu}) + 1 / \cos (2\Sigma - \bar{\mu}) \} \quad (3.12)$$



(ก)

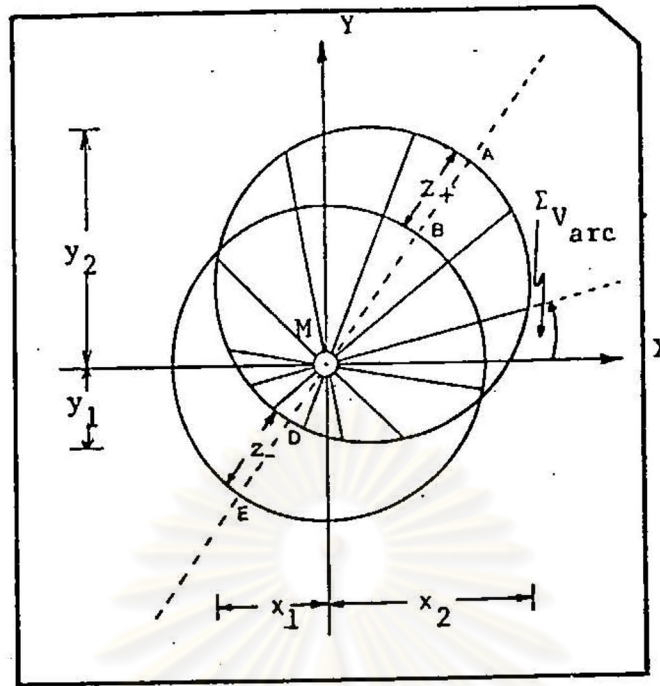


(ข)

รูปที่ 3.13 ระนาบรีซีเพอเคิลแลทที่ล่ที่ยังไม่ได้ปรับแกนตัดกับทรงกลมการละท่อน

(ก) ระนาบรีซีเพอเคิลแลทที่ล่ตัดด้านบนของทรงกลมการละท่อน

(ข) ระนาบรีซีเพอเคิลแลทที่ล่ตัดด้านล่างของทรงกลมการละท่อน



รูปที่ 3.14 สักขณะภาพถ่ายที่ได้ในขณะปรับแกนพรีเซลล์ของผลึก

หากพิจารณาในกรณีที่มี μ และ Σ มีค่าน้อย ๆ

$$MA - MD = 4F \cdot \Sigma$$

$$\Sigma = \frac{MA - MD}{4F} \text{ เรเดียน}$$

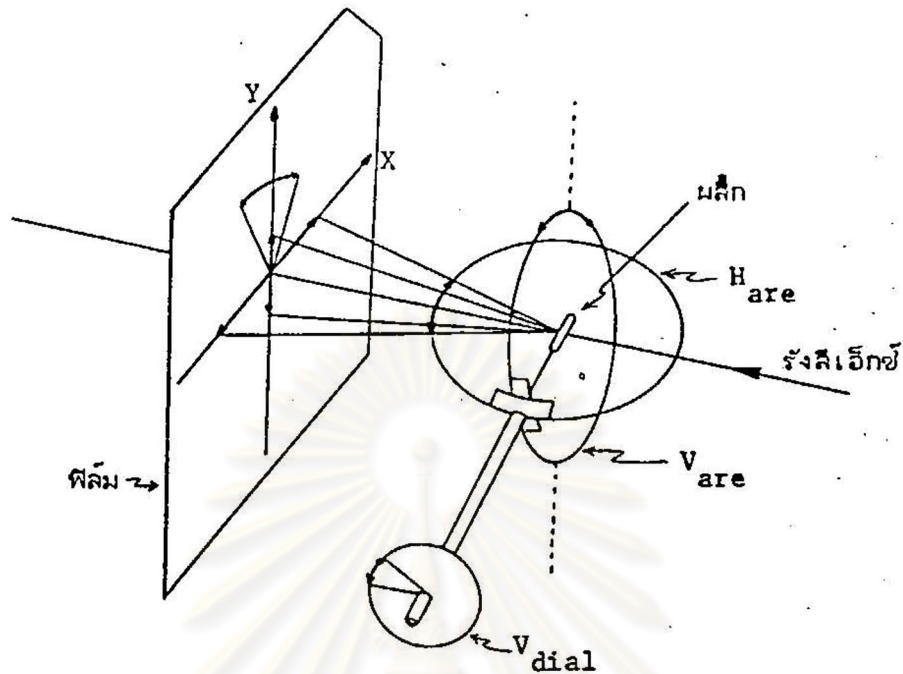
หรือ
$$\Sigma = \frac{MA - MD}{4F} \times \frac{360}{2\pi} \text{ องศา} \quad (3.13)$$

แยกพิจารณา Σ ออกเป็น 2 แกน ดังรูปที่ 3.14 ได้

$$\Sigma_{\text{dial}} = (Y_2 - Y_1) \times \frac{3}{4\pi} \quad (3.14)$$

$$\Sigma_{\text{h arc}} = (X_2 - X_1) \times \frac{3}{4\pi} \quad (3.15)$$

ส่วน $\Sigma_{\text{V arc}}$ วัดได้จากภาพถ่ายโดยตรง การปรับ Σ_{dial} , $\Sigma_{\text{h arc}}$ และ $\Sigma_{\text{V arc}}$ แสดงดังรูปที่ 3.15



รูปที่ 3.15 ลักษณะการปรับแกนพรีเซลล์ของผลึกของ H_{arc} , V_{arc} และ V_{dial}

ในทางปฏิบัติ การปรับแกนพรีเซลล์ของผลึกขั้นแรก ให้ $\bar{\mu} = 0$ อดค่า อ่านค่าบน V_{dial} ดังรูปที่ 3.15 จากนั้นตั้งใหม่ $\bar{\mu} = 10$ อดค่า ไม่ต้องใส่ตัวกรองรังสีเอ็กซ์ และจากนั้น ตั้งฟิล์มไว้ที่ตำแหน่งของระนาบเลย์เออร์ที่ 0 คือ $F = 60$ มิลลิเมตร ทำการถ่ายภาพโดยใช้ เวลาประมาณ 30 นาที นำฟิล์มมาล้าง ทำการวัดและแก้ค่า Σ_{dial} , $\Sigma_{H_{arc}}$ และ $\Sigma_{V_{arc}}$ เพื่อปรับแกนพรีเซลล์ของผลึก กระทำเช่นนี้จนกระทั่งวงกลมที่ปรากฏบนภาพถ่ายมีจุดศูนย์กลางอยู่ที่ กึ่งกลางของตัวล่งตัวรังสีเอ็กซ์ คือจุด M ดังรูปที่ 3.14 สำหรับความยาวรัศมีของวงกลม (r) บนฟิล์มในการถ่ายภาพ เพื่อปรับแกนพรีเซลล์ของผลึก พบว่า

$$r = 2F \sin \bar{\mu} \quad (3.16)$$

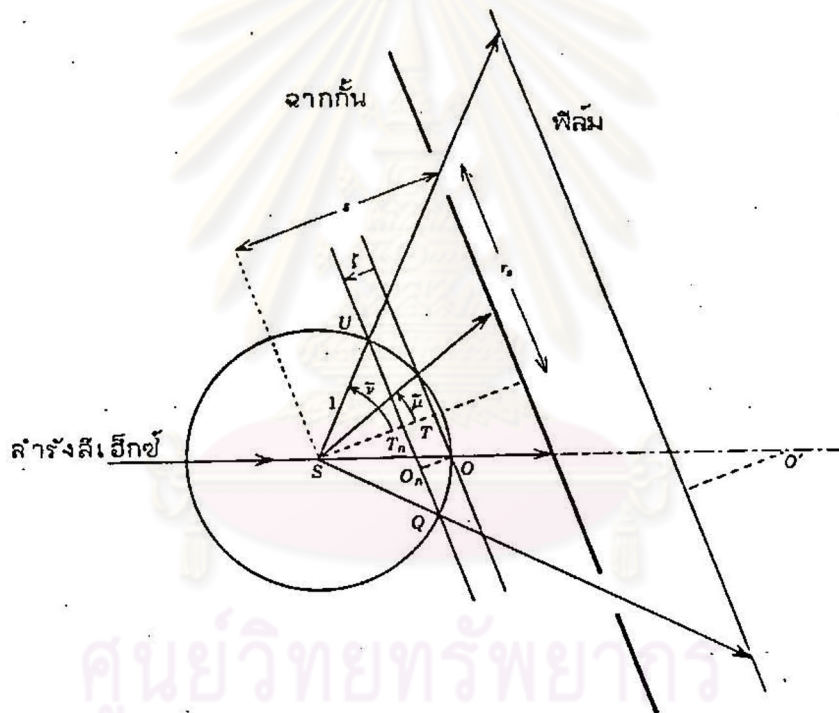
ค่า r จะขึ้นกับมุมของการพรีเซลล์ ($\bar{\mu}$) เท่านั้น เนื่องจาก F เป็นค่าคงที่ การปรับ แกนของผลึกบนแกน H_{arc} และ V_{arc} มีขีดจำกัดโดยจะต้องไม่เกิน $\pm 25^\circ$ จากตำแหน่งศูนย์กลางของแกนทั้งสอง ส่วนบนแกนหมุนไดอัล สามารถปรับได้โดยไม่มีขีดจำกัด

เพื่อความสะดวกในการปรับแกนพรีเซลล์ของผลึกให้ถูกต้อง และใช้เวลาสั้น พบว่า ในกรณีผลึกเป็นระบบที่มีแกนจริง และแกนรีซีเพอโรเคลออยู่ในระนาบเดียวกัน หลังจากถ่ายภาพผลึก

ด้วยวิธีผสมกันแล้ว ถ้านำผลคูณมาถ่ายภาพเพื่อมาปรับแกนพรีเซลส์ของผลึก พบว่าจาก
 ภาพถ่ายที่ได้จะแก้เฉพาะค่า V_{dial} เท่านั้น

3.7 การแยกถ่ายภาพพรีเซลส์ขึ้นทีละระนาบ

เนื่องจากทิศการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์อยู่บนบริเวณผิวของกรวย ดังนั้นการแยกถ่าย-
 ภาพพรีเซลส์ทำได้โดยการเอากลากที่มีวงแหวนตรงกลางกัน เพื่อให้รังสีเอ็กซ์ของระนาบรีซิเพร-
 เคลแลทกัลที่ต้องการผ่าน ดังแสดงในรูปที่ 3.16



รูปที่ 3.16 หลักการแยกถ่ายภาพพรีเซลส์ขึ้นทีละระนาบ

เมื่อให้แกนพรีเซลส์ทำมุม μ กับลำรังสีเอ็กซ์ กรณีของระนาบรีซิเพรเคลแลทกัล-
 เลย์เออร์ที่ 0 จะเกิดกรวยที่มีกึ่งมุมกรวยเป็น μ ด้วย แต่สำหรับกรณีของระนาบรีซิเพรเคล-
 แแลทกัลเลย์เออร์ที่ n กึ่งมุมกรวย ν จะไม่เท่ากับ μ ดังนั้นจึงต้องเลือกฉากกันให้เหมาะสม
 เพื่อให้รังสีเอ็กซ์ของระนาบรีซิเพรเคลแลทกัลเลย์เออร์ที่ต้องการผ่าน

จากรูปที่ 3.16 พบว่า

$$\frac{r_s}{S} = \tan \bar{v} \quad (3.17)$$

เนื่องจาก $O_n = TS - T_n S$

$$\zeta = \cos \bar{\mu} - \cos \bar{v}$$

ดังนั้น $\bar{v} = \cos^{-1} (\cos \bar{\mu} - \zeta)$ (3.18)

จากสมการ (3.17) และ (3.18) ได้ว่า

$$\frac{r_s}{S} = \tan \cos^{-1} (\cos \bar{\mu} - \zeta) \quad (3.19)$$

หรือ $S = r_s \cot \cos^{-1} (\cos \bar{\mu} - \zeta)$ (3.20)

ดังนั้น ในการถ่ายภาพพร็เซสชันของแต่ละเลย์เออร์ของรีซีเพอเคิลแลททิสต้องเลือกค่า $\bar{\mu}$, r_s และ S ที่เหมาะสมกับระยะ ζ ซึ่งคำนวณหาได้จากสมการ (3.20) แต่เพื่อความสะดวกในการเลือกค่าเหล่านี้ ฮิวานส์, ทิลดอน และ อาดัมส์ (Evans, Tildon and Adams) ได้สร้างภาพซึ่งเรียกว่า โนโมแกรม (nomogram) ดังแสดงในรูปที่ 3.17

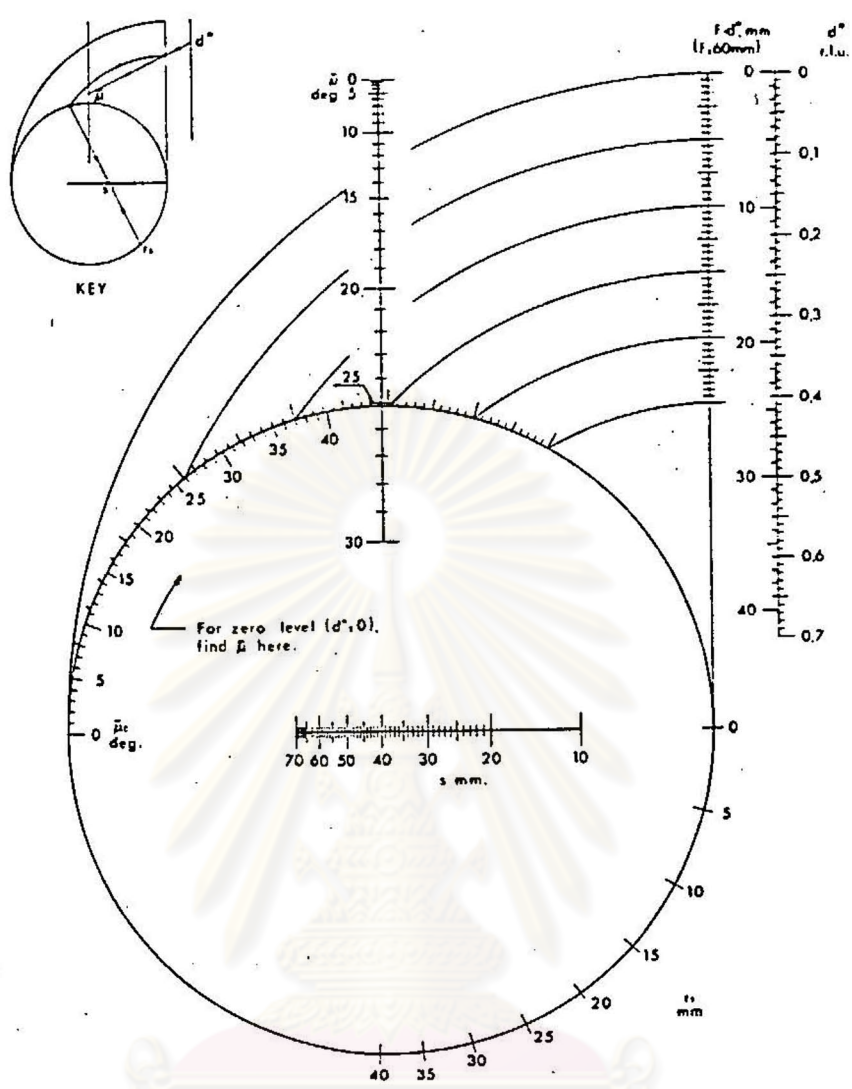
3.8 ขีดจำกัดของการถ่ายภาพพร็เซสชัน

เนื่องจากภาพถ่ายภาพพร็เซสชันของระนาบรีซีเพอเคิลแลททิสเลย์เออร์ที่ n ปรากฏย่านบอด (blind region) ตรงจุดกึ่งกลางของฟิล์ม เหตุที่เป็นเช่นนี้ดังแสดงในรูปที่ 3.18

รูปที่ 3.18 แสดงระนาบรีซีเพอเคิลแลททิสเลย์เออร์ที่สูงที่สุดของการพร็เซสชัน ย่านบอดเกิดบริเวณที่มีระยะห่างจากจุดกึ่งกลางเป็นระยะรัศมี $O_n Q$ โดยรอบ ซึ่งระนาบรีซีเพอเคิลแลททิสส่วนนี้ไม่ตัดผ่านทรงกลมของการสะท้อน จึงไม่เกิดการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ รัศมีของย่านบอดคำนวณได้จากรูปที่ 3.18

$$O_n Q = T_n Q - T O \quad (3.21)$$

ดังนั้น $\zeta_{\min} = \sin \bar{v} - \sin \bar{\mu}$ (3.22)

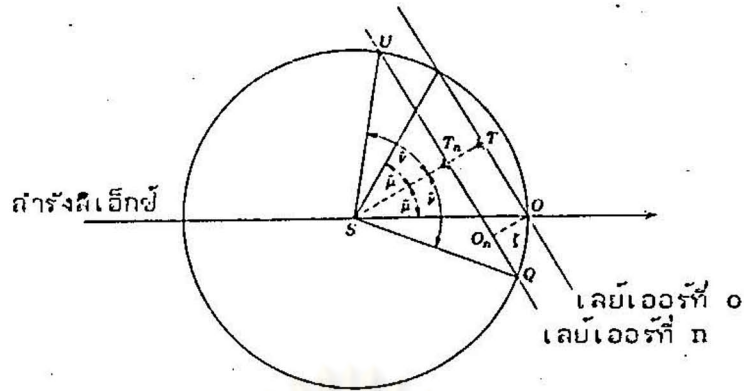


รูปที่ 3.17 รูปโนโมแกรมสำหรับเลือกค่า $\bar{\mu}$, r_s , s เมื่อทราบค่า ξ

ในกรณีของจุดรีซีเพอเคิลแลทที่มีระยะห่างจากจุดกึ่งกลาง ξ มากกว่า $O_n U$ บ่อไม่ตัดทรงกลมของการสะท้อน จึงไม่เกิดการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ รัศมีของขีดจำกัดนี้คำนวณได้จากรูปที่ 3.18 คือ

$$O_n U = OT + T_n U \tag{3.23}$$

$$\xi_{\max} = \sin \bar{\mu} + \sin \bar{\nu} \tag{3.24}$$



รูปที่ 3.18 การพร่เซลล์ของระนาบคริสตัลเพอร์เซลล์แลททิสเลขเออร์สูงที่สุด

3.9 การพิจารณาหมู่สมมาตรสามมิติ และคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึก

ดังได้กล่าวข้างต้นแล้วว่า ภาพถ่ายพร่เซลล์นั้นเป็นภาพของคริสตัลแลททิสที่เป็นอยู่จริง ทำให้การพิจารณาสัมมาตรของผลึก และคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึกง่าย และสะดวก ทั้งยังมีความถูกต้องสูง

3.9.1 การพิจารณาสัมมาตรสามมิติของผลึก

ผลึกสามารถ แบ่งเป็นกลุ่มตามหมู่สมมาตรสามมิติซึ่งมีอยู่ด้วยกันทั้งหมด 230 หมู่ โดยที่หมู่สมมาตรสามมิตินี้เกิดจากการรวมของบราวเวลล์แลททิส กับกลุ่มจุด (point groups) การพิจารณาสัมมาตรสามมิติของผลึกไม่ขึ้นกับการคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึก ดังนั้นจึงสามารถหาหมู่สมมาตรสามมิติของผลึกก่อนการคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึกได้

การพิจารณาสัมมาตรสามมิติของผลึกจากภาพถ่ายพร่เซลล์มีสองวิธี คือ วิธีแรกเป็นวิธีเก่าแก่ที่ใช้ในการพิจารณาสัมมาตรสามมิติของผลึกจากภาพถ่ายไวซ์เซินแบร์ก โดยการกำหนดค่าดัชนีมิลเลอร์ของจุดคริสตัลแลททิสที่ปรากฏบนภาพถ่าย แยกจุดคริสตัลแลททิสไว้เป็นกลุ่ม ๆ ตามค่าดัชนีมิลเลอร์ พิจารณาว่าจุดคริสตัลแลททิสกลุ่มใดหายไปบ้าง ตรวจสอบกับเงื่อนไขของการเกิดจุดสะท้อนของหมู่สมมาตรสามมิติของผลึกว่าสอดคล้องตรงกับหมู่สมมาตรสามมิติใด ผลึกจึงมีหมู่สมมาตรสามมิติตามนั้น

วิธีที่สอง เป็นการพิจารณาสัมมาตรสามมิติโดยไม่ต้องกำหนดดัชนีมิลเลอร์ของจุดคริสตัลแลททิส การพิจารณาสัมมาตรสามมิติวิธีนี้ต้องพิจารณาสัญลักษณ์ดิฟแฟรคชัน (diffraction symbols) ก่อน แล้วจึงเปลี่ยนเป็นสมมาตรสามมิติภายหลัง การพิจารณาสัญลักษณ์ดิฟแฟรคชันต้องพิจารณาจากส่วนประกอบ 3 อย่าง คือ สมมาตรฟรีเดิล (Friedel

symmetry), สัญลักษณ์ชนิดแลตทิซ (lattice type), ระนาบเลื่อน (glide planes) และ แกนสกรู (screw axes) ซึ่งจะขอพิจารณาเป็นส่วน ๆ ไป

สมมาตรฟริเทิล เป็นสมมาตรที่มีศูนย์กลางของสมมาตร (center of symmetry) รวมอยู่ จุดริซิเพรอกเิลแลตทิซก็ได้จากการเลี้ยวเบนของผลึกต่าง ๆ สัดแบ่งสมมาตรฟริเทิลออกเป็น 11 กลุ่ม ดังแสดงในตารางที่ 3.1 จากภาพถ่ายฟริเซล์ย่น สามารถหาสมมาตรของแกนฟริเซล์ซึ่งตั้งฉากกับระนาบของภาพถ่ายฟริเซล์ย่นได้ สมมาตรที่หาได้จะเป็นหนึ่งในสิบของกลุ่มจุดในระนาบ ซึ่งแสดงไว้ในตารางที่ 3.2 เมื่อทราบกลุ่มจุดในระนาบแล้ว เราสามารถทราบสมมาตรฟริเทิลของผลึกได้โดยรวมศูนย์กลางของสมมาตรเข้ากับกลุ่มจุดในระนาบที่ทราบแล้ว ดังแสดงในตารางที่ 3.1



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

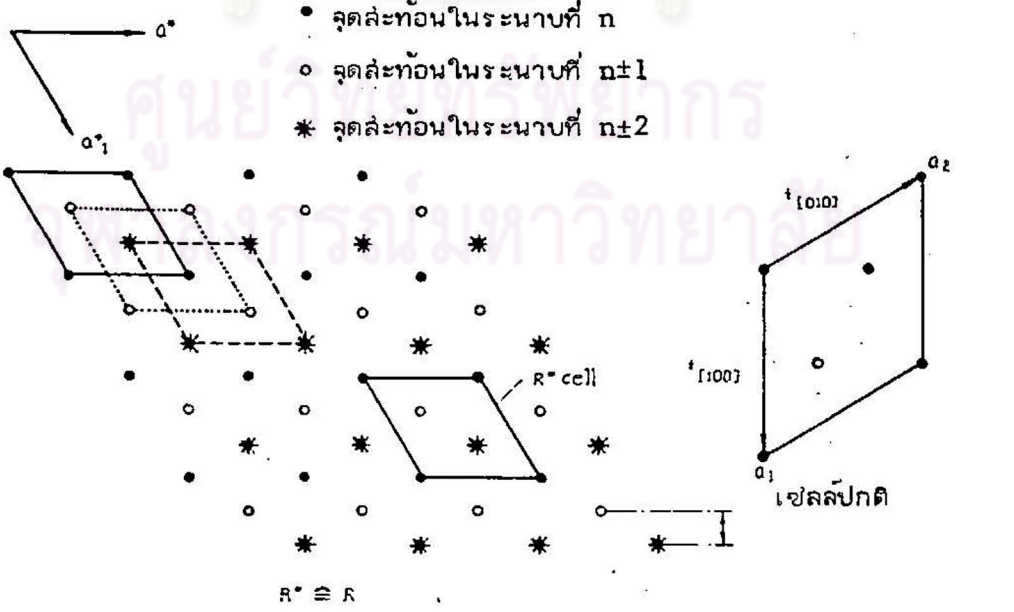
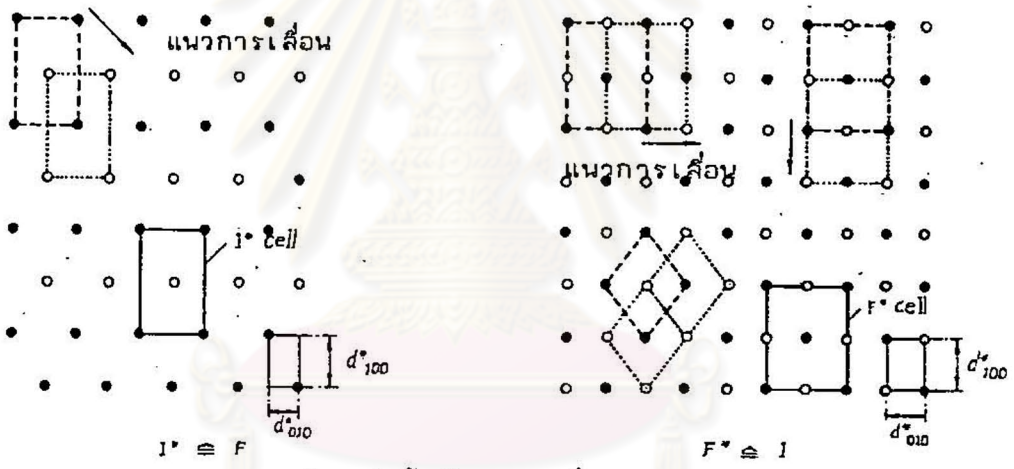
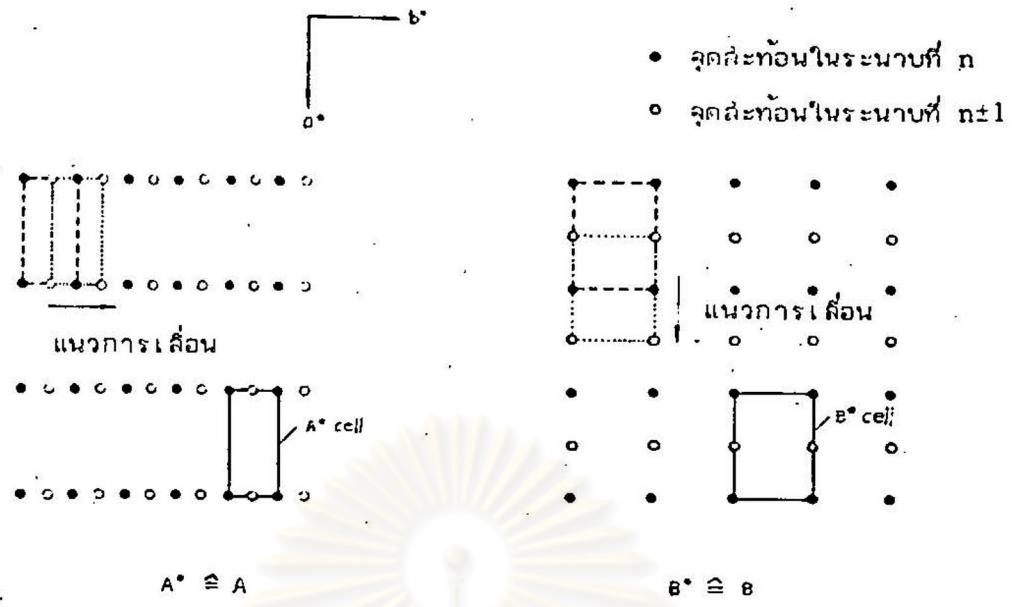
ตารางที่ 3.1 สัณฐานวิทยาฟิสิกส์ของผลึก

	สัณฐานวิทยาของผลึก	สัณฐานวิทยาฟิสิกส์
ไตรโกนิก	C_1 1 C_i $\bar{1}$	C_1 $\bar{1}$
ไบโนนิก	C_2 2 C_v m C_{2h} $2/m$	C_{2h} $2/m$
ออร์โทโรมบิก	D_2 222 C_{2v} $2mm$ D_{2h} mmm	D_{2h} mmm
เตตระโกนิก	S_4 $\bar{4}$ C_4 4 C_{4h} $4/m$	C_{4h} $4/m$
	D_{2d} $\bar{4}2m$ C_{4v} $4mm$ D_4 422 D_{4h} $4/mmm$	D_{4h} $4/mmm$
รวมไบซตรอก	C_3 3 C_{3i} $\bar{3}$	C_{3i} $\bar{3}$
	C_{3v} $3m$ D_3 32 D_{3d} $\bar{3}m$	D_{3d} $\bar{3}m$
เฮกซะโกนิก	C_6 6 C_{3h} $\bar{6}$ C_{6h} $6/m$	C_{6h} $6/m$
	D_{3h} $6m2$ C_{6v} $6mm$ D_6 622 D_{6h} $6/mmm$	D_{6h} $6/mmm$
คิวบิก	T 23 T_h $m\bar{3}$	T_h $m\bar{3}$
	T_d $\bar{4}3m$ O 432 O_h $m\bar{3}m$	O_h $m\bar{3}m$

ตารางที่ 3.2 10 กลุ่ม ชุดในระนาบ

1	m
2	2mm
3	3m
4	4mm
6	6mm

สัญลักษณ์เลขทศนิยมอยู่ทั้งหมด 7 ระบบ คือ P, A, B, C, I, F และ R สัญลักษณ์เลขทศนิยมของเลขทศนิยมระบบใดจะตรงกับรหัสเฟรอนเคลเลขทศนิยมของระบบนั้น ยกเว้น I และ F คือ ถ้ารหัสเฟรอนเคลเลขทศนิยมเป็น I สัญลักษณ์เลขทศนิยมจะเป็น F ในทางกลับกัน ถ้ารหัสเฟรอนเคลเลขทศนิยมเป็น F สัญลักษณ์เลขทศนิยมจะเป็น I การพิจารณาสัญลักษณ์เลขทศนิยมของระบบทำได้ง่ายและสะดวก โดยการพิจารณาภาพถ่ายรหัสเฟรอนเคลเลขทศนิยมของเลย์เออร์ที่ติดกัน 2 เลย์เออร์ ซึ่งไม่ควรเลือกภาพถ่ายรหัสเฟรอนเคลเลขทศนิยมเลย์เออร์ที่ศูนย์ เนื่องจากอิทธิพลของเอ็กซ์ทิงคชัน (extinction effect) อาจทำให้จุดรหัสเฟรอนเคลเลขทศนิยมบางส่วนหายไป ทำให้เกิดการยุ่งยากในการพิจารณาสัญลักษณ์เลขทศนิยม วิธีการพิจารณาสัญลักษณ์เลขทศนิยมมีดังนี้คือ สัมมติให้แกน c พริเชลล์ ดังนั้นบนภาพถ่ายพริเชลล์จะปรากฏแกน b^* เป็นแกนในแนวนอน และ a^* เป็นแกนในแนวตั้ง หากแกน b เป็นแกนขนานกับแกนหมุนไดฮัล โดยในที่นี้ให้ $\gamma^* = 90^\circ$ นำภาพถ่ายพริเชลล์เลย์เออร์ที่ติดกันมาซ้อนกัน โดยให้ตำแหน่งจุดศูนย์กลางของภาพถ่ายซ้อนทับกันสนิท ถ้าปรากฏว่าระนาบเลขทศนิยมของภาพถ่ายทั้งสองซ้อนทับกันทุกระนาบ และระนาบเลขทศนิยมนั้นเป็น p สัญลักษณ์เลขทศนิยมจะเป็น P แต่ถ้าระนาบเลขทศนิยมนั้นเป็น c สัญลักษณ์เลขทศนิยมจะเป็น C ถ้าในกรณีที่ต้องเลื่อนภาพถ่ายเลย์เออร์หนึ่งเลย์เออร์ใดเพื่อให้ระนาบเลขทศนิยมซ้อนทับกันแล้ว สัญลักษณ์เลขทศนิยมเลขทศนิยมอาจจะเป็น A, B, I, F หรือ R ซึ่งขึ้นกับชนิดของระนาบเลขทศนิยม และทิศที่ต้องเลื่อนไป การพิจารณาสัญลักษณ์เลขทศนิยมแสดงไว้ในรูปที่ 3.19 และในตารางที่ 3.3



รูปที่ 3.19 การพิจารณาสัญลักษณ์เลขที่ล้อยของผลึกจากภาพถ่ายพรูเอเซลล์

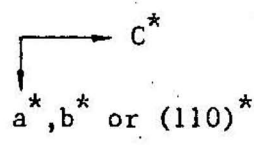
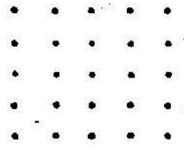
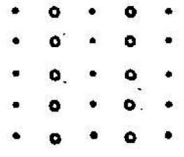
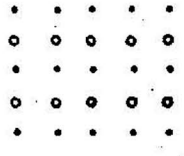
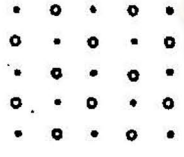

ตารางที่ 3.3 การพิจารณาสัญลักษณ์รีซีเพรอสเกลแลททิลจากภาพถ่ายรีเซลล์

c แกนหมุนรีเซลล์
 แกน b^* แนวนอน
 a^* แนวตั้ง เมื่อ $\gamma^* = 90^\circ$

ระยะที่ต้องเลื่อนเพื่อให้ระนาบรีซีเพรอสเกลแลททิลซ้อนทับกัน	สัญลักษณ์แลททิลบนระนาบ	
	P^*	C^*
0	$P^* \triangleq P$	$C^* \triangleq C$
$\frac{1}{2}t_{100}^*$	$B^* \triangleq B$	$F^* \triangleq I$
$\frac{1}{2}t_{010}^*$	$A^* \triangleq A$	$F^* \triangleq I$
$\frac{1}{2}t_{100}^* + \frac{1}{2}t_{010}^*$	$I^* \triangleq F$	
$\frac{1}{3}t_{100}^* + \frac{1}{3}t_{010}^*$	$R^* \triangleq R$	

ระนาบเลื่อน (glide planes) และแกนสกรู (screw axes) เป็นส่วนสุดท้ายของสัญลักษณ์รีซีเพรอสเกล การพิจารณาระนาบเลื่อน และแกนสกรูของผลึกกระทำโดยการพิจารณาภาพถ่ายรีซีเพรอสเกลแลททิลเลย์เออร์ที่คู่ขนาน กับเลย์เออร์อื่นอีกหนึ่งเลย์เออร์ โดยนำภาพถ่ายทั้งสองมาซ้อนทับกัน พิจารณาสัญลักษณ์การหายไปของจุดรีซีเพรอสเกลแลททิลในเลย์เออร์ที่คู่ขนาน เทียบกับเลย์เออร์อื่น แล้วจึงแปลผลว่ามีระนาบเลื่อน หรือแกนสกรูแบบใด ภาพแสดงการหายไปของจุดรีซีเพรอสเกลแลททิลบนเลย์เออร์ที่ 0 พร้อมการแปลผล แสดงไว้ในรูปที่ 3.20 และตารางที่ 3.4 สำหรับระนาบเลื่อน และแสดงไว้ในรูปที่ 3.21 และตารางที่ 3.5 สำหรับแกนสกรู จากรูปที่ 3.20 ในแนวนอนแถวแรก ปรากฏว่าจุดรีซีเพรอสเกลแลททิลของเลย์เออร์ที่ 0 ไม่ได้หายไป แสดงว่าไม่มีระนาบเลื่อนตั้งฉากกับแกนรีเซลล์ การพิจารณาแกนสกรูเทียบได้จากรูปที่ 3.21 จุดรีซีเพรอสเกลแลททิลที่ต้องพิจารณาคือ จุดรีซีเพรอสเกลแลททิลบนแกนที่ปรากฏบนภาพถ่าย เมื่อมีจุดรีซีเพรอสเกลแลททิลบนแกนใดที่ปรากฏบนภาพถ่ายหายไปมีลักษณะตรงตามรูปที่ 3.21 แถวใด แสดงว่าแกนนั้นมีสกรูชนิดนั้นขนานกับแกน ในกรณีที่ไม่มีการเลื่อน หรือแกนสกรูรวมอยู่ในระบบผลึก สัญลักษณ์รีซีเพรอสเกลจะเขียนยึดลิ้น ๆ แกนลงไปในตำแหน่งนั้น ๆ เช่น

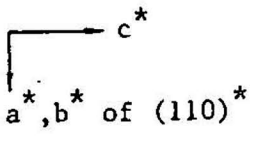
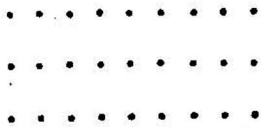
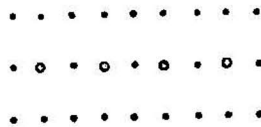
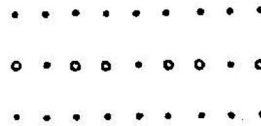
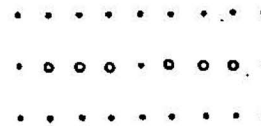
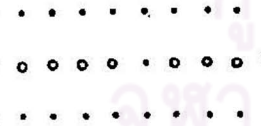
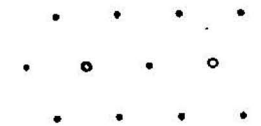
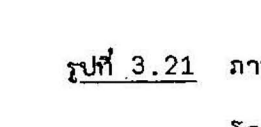

ตารางที่ 3.4 แสดงการแปลผลภาพถ่ายชนิดระนาบเลื่อนฉากรูปที่ 3.20

	ตรีเซอร์เคิล แลททิส <table border="0" style="width: 100%; text-align: center;"> <tr> <td>P^*</td> <td>A^*</td> <td>B^*</td> <td>C^*</td> <td>I^*</td> <td>F^*</td> <td>R^*</td> </tr> </table> แลททิส ปกติ <table border="0" style="width: 100%; text-align: center;"> <tr> <td>P</td> <td>A</td> <td>B</td> <td>C</td> <td>F</td> <td>I</td> <td>R</td> </tr> </table>	P^*	A^*	B^*	C^*	I^*	F^*	R^*	P	A	B	C	F	I	R
P^*	A^*	B^*	C^*	I^*	F^*	R^*									
P	A	B	C	F	I	R									
															
	c a c c														
	a b -														
	n (d) (d) d														
	$c=b$ $c=a$ $c=a$ $c=b$														

รูปที่ 3.20 ภาพการหายไปอย่างเป็นระบบของจุดรีซีเพอร์เคิลแลททิสบนเลขีเออร์ที่ 0

- โดยที่
- หมายถึง จุดรีซีเพอร์เคิลแลททิสที่ปรากฏให้เห็น
 - หมายถึง จุดรีซีเพอร์เคิลแลททิสที่หายไปแบบเป็นระบบ

ตารางที่ 3.5 แสดงการแปลผลภาพถ่ายย่นิตแกนลึกรูปร่างที่ 3.21

	รังสีเพรอกเทิล แลททิล แลททิล ปกติ	P^*	A^*	B^*	C^*	I^*	F^*	R^*
		P	A	B	C	F	I	R
								
		2_1			2_1			
		4_2			(4_2)	$(4_1, 4_3)$	$4_1, 4_3$	
		6_3			(6_3)			
		$3_1, 3_2$			$(3_1, 3_2)$			
		$6_2, 6_4$			$(6_2, 6_4)$			
		$4_1, 4_3$			$(4_1, 4_3)$			
		$6_1, 6_5$			$(6_1, 6_5)$			
							$(4_1, 4_3)$	$4_1, 4_3$

รูปที่ 3.21 ภาพการหายไปอย่างเป็นระบบของจุดรังสีเพรอกเทิลแลททิลบนเลขีเออร์ที่ 0

- โดยที่
- หมายถึง จุดรังสีเพรอกเทิลแลททิลที่ปรากฏให้เห็น
 - หมายถึง จุดรังสีเพรอกเทิลแลททิลที่หายไปแบบเป็นระบบ

เมื่อทราบสัญลักษณ์ของเฟรคชันแล้ว เป็นตารางง่ายที่จะพิจารณาสมมาตรสามมิติ โดยนำสัญลักษณ์ของเฟรคชันที่ได้ไปเปรียบเทียบกับสมมาตรสามมิติได้จากตารางที่ 4.4.3 หน้า 348-352 ของ International Table for X-ray Crystallography Volume I ดังยกมาแสดงไว้เป็นบางส่วนในตารางที่ 3.6 จะเห็นได้ว่าวิธีที่สองเป็นวิธีที่ใช้ประโยชน์จากภาพถ่ายพร็เซชันอย่างเต็มที่

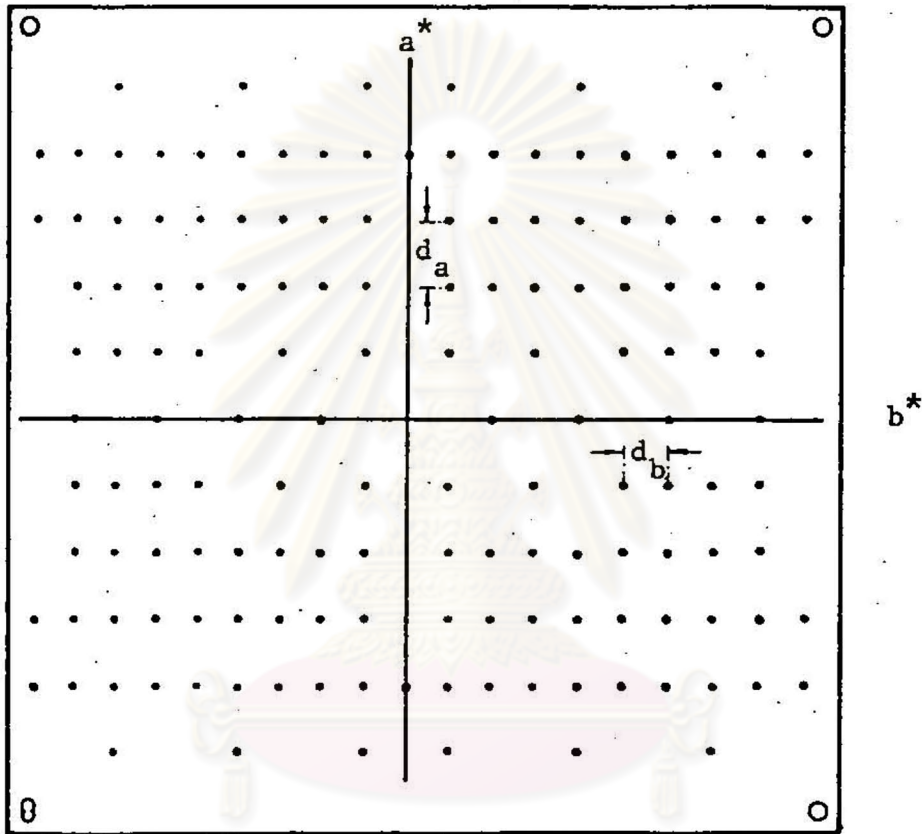
ตารางที่ 3.6 ความสัมพันธ์ของสัญลักษณ์ของเฟรคชันกับสมมาตรสามมิติของผลึกระบบออร์ทอโรมบิก

ORTHORHOMBIC. Laue Group *mmm*

Diffraction symbol	Point group		
	222	<i>mm2</i>	<i>mmm</i>
<i>mmm P</i> . . .	<i>P222</i>	<i>Pmm2</i>	<i>Pmmm</i>
<i>mmm P</i> . . 2 ₁	<i>P222₁</i>		
<i>mmm P</i> 2 ₁ 2 ₁ .	<i>P2₁2₁2</i>		
<i>mmm P</i> 2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	<i>P2₁2₁2₁</i>		
<i>mmm P</i> <i>c</i> . . .		<i>Pc2m = (Pma2)</i> <i>Pcm2₁ = (Pmc2₁)</i> <i>Pnn2₁ = Pnn2₁</i>	<i>Pcmm = Pmma</i>
<i>mmm P</i> <i>n</i> . . .		<i>Pcc2</i>	<i>Pnmm = Pmmn</i>
<i>mmm P</i> <i>c c</i> . .		<i>Pca2₁</i>	<i>Pccm</i>
<i>mmm P</i> <i>c a</i> . .		<i>Pba2</i>	<i>Pcam = Pbcm</i>
<i>mmm P</i> <i>b a</i> . .		<i>Pnc2</i>	<i>Pbam</i>
<i>mmm P</i> <i>n c</i> . .		<i>Pna2₁</i>	<i>Pncm = Pnma</i>
<i>mmm P</i> <i>n a</i> . .		<i>Pnn2</i>	<i>Pnam = Pnna</i>
<i>mmm P</i> <i>n n</i> . .			<i>Pnmm</i>
<i>mmm P</i> <i>c c a</i>			<i>Pcca</i>
<i>mmm P</i> <i>b c a</i>			<i>Pbca</i>
<i>mmm P</i> <i>c c n</i>			<i>Pccn</i>
<i>mmm P</i> <i>b a n</i>			<i>Pban</i>
<i>mmm P</i> <i>b c n</i>			<i>Pbcn</i>
<i>mmm P</i> <i>n n a</i>			<i>Pnna</i>
<i>mmm P</i> <i>n n n</i>			<i>Pnnn</i>
<i>mmm C</i> . . .	<i>C222</i>	<i>Cmm2 = (Cmm2)</i> <i>Cm2m = (Cmm2)</i>	<i>Cmmm</i>
<i>mmm C</i> . . 2 ₁	<i>C222₁</i>		
<i>mmm C</i> . . <i>c</i> .		<i>Cmc2₁ = (Cmc2₁)</i> <i>C2cm = (Cma2)</i>	<i>Cmcm</i>
<i>mmm C</i> . . <i>a</i>		<i>C2ma = Abm2</i>	<i>Cmma</i>
<i>mmm C</i> . . <i>c a</i>		<i>C2ca = Aba2</i>	<i>Cmca</i>
<i>mmm C</i> <i>c c</i> . .		<i>Ccc2</i>	<i>Cccm</i>
<i>mmm C</i> <i>c c a</i>			<i>Ccca</i>
<i>mmm I</i> . . .	[<i>I222</i> <i>I2₁2₁2₁</i>]	<i>Imm2</i>	<i>Immm</i>
<i>mmm I</i> . <i>a</i> .		<i>Ima2</i>	<i>Imam = Imma</i>
<i>mmm I</i> <i>b a</i> .		<i>Iba2</i>	<i>Ibam</i>
<i>mmm I</i> <i>b c a</i>			<i>Ibca</i>
<i>mmm F</i> . . .	<i>F222</i>	<i>Fmm2</i>	<i>Fmmm</i>
<i>mmm F</i> <i>d d</i> .		<i>Fdd2</i>	
<i>mmm F</i> <i>d d d</i>			<i>Fddd</i>

3.9.2 การคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึก

จากภาพถ่ายฟริเซสชันของระนาบรีซีเพอเคิลแลททิสเลย์เออร์ที่ 0 เมื่อแกน c เป็นแกนฟริเซส แสดงดังรูปที่ 3.22 สามารถคำนวณหาค่าคงที่โครงสร้างผลึก a และ b ได้ ประกอบกับจากภาพถ่ายฟริเซสชันของระนาบรีซีเพอเคิลแลททิสเลย์เออร์ที่ 0 เมื่อแกน b เป็นแกนฟริเซส สามารถคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึก c และ a ได้



รูปที่ 3.22 ลักษณะภาพถ่ายฟริเซสชันของระนาบรีซีเพอเคิลแลททิสเลย์เออร์ที่ 0

จากสมการ (3.2) พบว่า

$$OP = \frac{O'P'}{M} \tag{3.25}$$

เมื่อ OP คือ a^* , b^* และ c^*

$O'P'$ คือ ระยะที่วัดได้บนฟิล์ม

ในกรณีที่ผลึกเป็นระบบออร์โทโรอมบิก พบว่า $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ และ

$$\begin{aligned} a^* &= \lambda/a \\ b^* &= \lambda/b \\ c^* &= \lambda/c \end{aligned} \tag{3.26}$$

จากสมการที่ (3.25) และ (3.26) ได้ว่า

$$a = \lambda M/d_a$$

$$b = \lambda M/d_b \quad (3.27)$$

และ $c = \lambda M/d_c$

เมื่อ a , b และ c คือ ค่าคงที่โคจรผลึกตามแกน a , b และ c ตามลำดับ

มีหน่วยเป็นอังสตรอม

d_a , d_b และ d_c คือ ระยะระหว่างจุดสะท้อนตามแนวแกนผลึกที่ต้องการหาค่า

คงที่โคจรผลึก มีหน่วยเป็นมิลลิเมตร

M คือ ค่าคงที่ของกล้อง 60 มิลลิเมตร

λ คือ ความยาวคลื่นของลำรังสีเอ็กซ์ที่ใช้ มีหน่วยเป็นอังสตรอม

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย