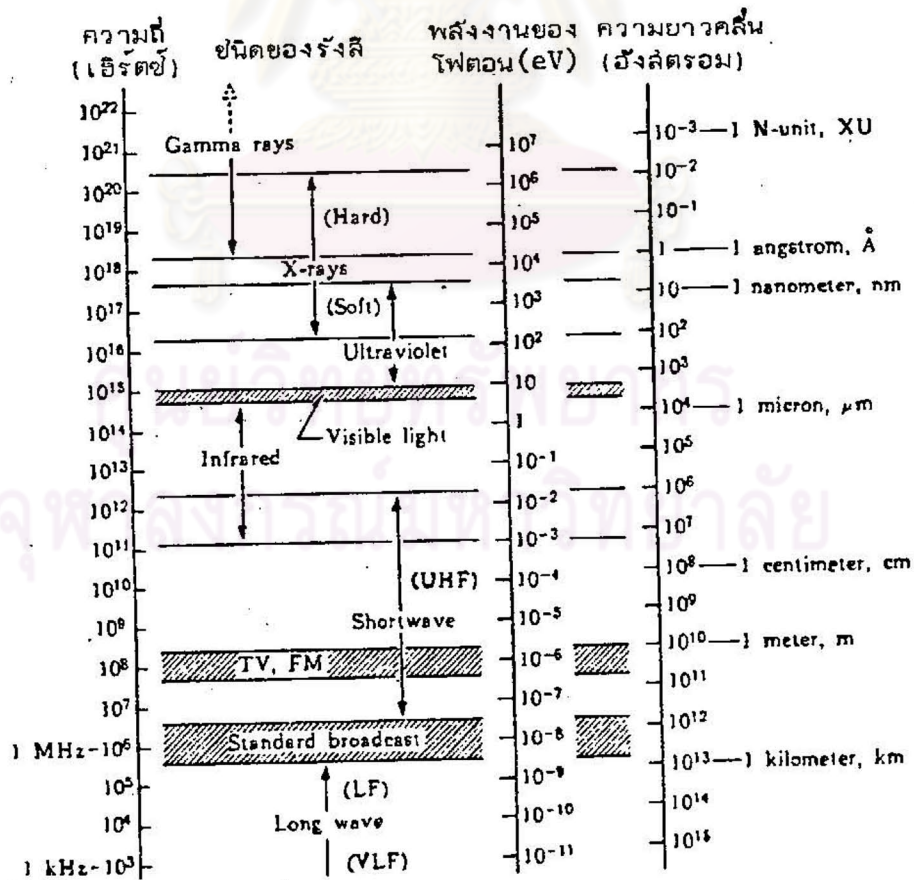




ทฤษฎีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

2.1 กำเนิดรังสีเอ็กซ์

ในปี ค.ศ. 1895 เรินต์เกน (Roentgen) นักฟิสิกส์ชาวเยอรมัน ได้ค้นพบรังสีเอ็กซ์ ซึ่งสัต์เป็นคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าเหมือนแสง แต่มีความยาวคลื่นสั้นกว่าแสง โดยมีความยาวคลื่นอยู่ในช่วงระหว่างรังสีแกมมาและรังสีอัลตราไวโอเล็ต ดังแสดงในรูปที่ 2.1 รังสีเอ็กซ์เป็นรังสีที่มองไม่เห็น สามารถวิ่งผ่านตัวกลางทึบแสงต่าง ๆ ได้ รังสีเอ็กซ์ที่เหมาะสมสำหรับการหาโครงสร้างผลึกควรมีความยาวคลื่นอยู่ในช่วง $0.5-2.5 \text{ \AA}$



รูปที่ 2.1 สเปกตรัมของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า

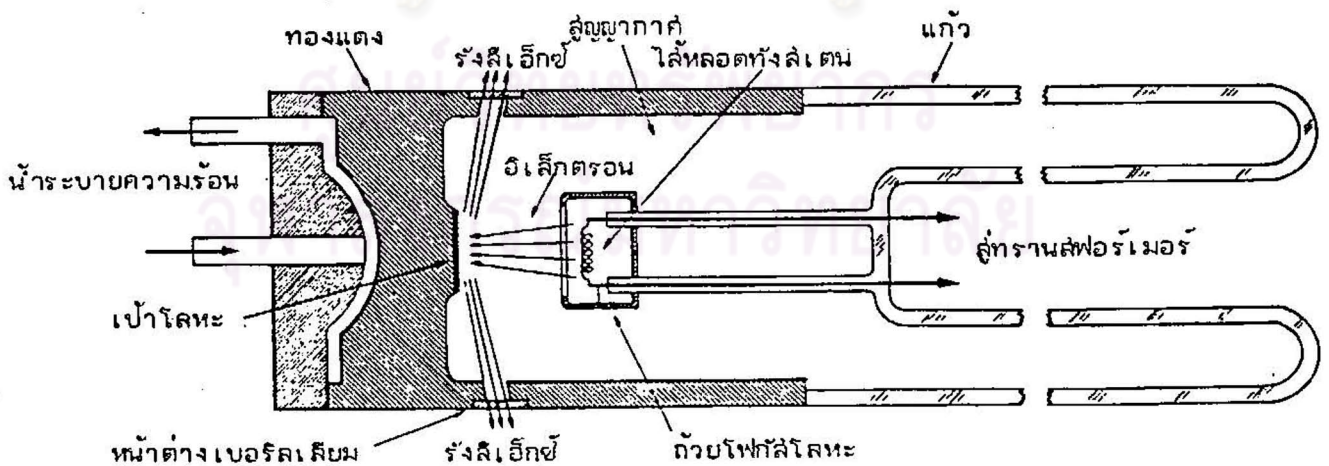
รังสีเอ็กซ์เกิดขึ้นจากหลอดรังสีเอ็กซ์ซึ่งประกอบด้วยขั้วโลหะในหลอดแก้วสุญญากาศ ดังรูปที่ 2.2 เมื่ออิเล็กตรอนที่เกิดขึ้นจากไส้หลอดที่คาโทดถูกเร่งด้วยความต่างศักย์ไฟฟ้า V รั้งพุ่งเข้าชนเป้าโลหะที่แอโนด จากการชนหลายครั้งทำให้อิเล็กตรอนถูกหน่วงให้รั้งช้าลง จนกระทั่งหยุด พลังงานของอิเล็กตรอนที่ลดลงนี้จะเปลี่ยนไปเป็นโฟตอน ซึ่งมีความถี่ และความยาวคลื่นตามสมการคือ

$$\Delta E = h\nu \tag{2.1}$$

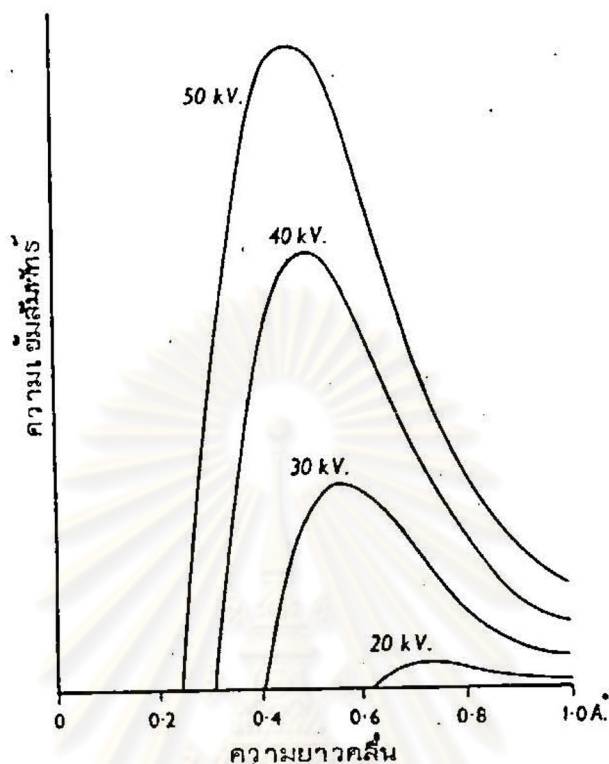
หรือ
$$\Delta E = h\frac{c}{\lambda} \tag{2.2}$$

- โดยที่
- h = ค่าคงที่พลังค์ (Plank's constant)
 - c = ความเร็วของแสง
 - ν = ความถี่ของโฟตอน
 - λ = ความยาวคลื่นของโฟตอน

ลักษณะของรังสีเอ็กซ์ที่เกิดขึ้นดังกล่าวนี้ จะมีความถี่ต่าง ๆ ต่อเนื่องกัน ดังแสดงในรูปที่ 2.3 ซึ่งขึ้นกับความต่างศักย์ไฟฟ้า เริ่มต้นที่ใช่ รั้งอิเล็กตรอน และชนิดของเป้าโลหะ



รูปที่ 2.2 ส่วนประกอบของหลอดรังสีเอ็กซ์



รูปที่ 2.3 สเปกตรัมของรังสีเอกซ์ต่อเนื่องจากเป้าหังสแตน

ถ้าอิเล็กตรอนที่พุ่งเข้าชนเป้าโลหะมีพลังงานสูงพอจนทำให้อิเล็กตรอนในวงโคจรของอะตอมหลุดออกจากวงโคจร และอิเล็กตรอนในระดับวงโคจรที่มีพลังงานสูงกว่าตกลงมาแทนที่พร้อมกับคายพลังงานออกมาในรูปของคลื่นรังสีเอกซ์ รังสีที่เกิดขึ้นเช่นนี้เป็นรังสีเฉพาะ (characteristic x-ray) ซึ่งมีความถี่ หรือความยาวคลื่นขึ้นอยู่กับชนิดของเป้าโลหะ

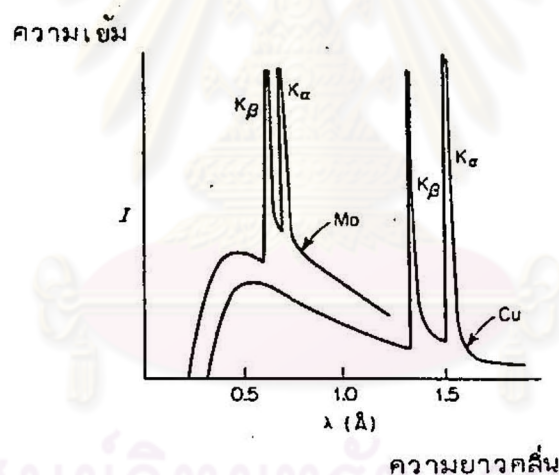
ในกรณีที่พลังงานของอิเล็กตรอนมีขนาดประมาณ 10,000 eV พลังงานจำนวนนี้สามารถทำให้อิเล็กตรอนในระดับวงโคจรชั้นในสุด คือวงโคจรชั้นที่ K ของเป้าโลหะชนิดที่มีเลขอะตอมประมาณ 30 หลุดออกจากวงโคจรได้ เมื่อเกิดช่องว่างในวงโคจรชั้นที่ K อิเล็กตรอนจากวงโคจรชั้นอื่นที่สูงกว่า คือวงโคจรชั้นที่ L หรือชั้นที่ M จะตกลงมาแทนที่ รังสีเอกซ์ที่เกิดจากการเปลี่ยนระดับพลังงานจากวงโคจรชั้นที่ L ไปสู่วงโคจรชั้นที่ K เรียกรังสีเอกซ์ K_{α} และรังสีเอกซ์ที่เกิดจากการเปลี่ยนระดับพลังงานจากวงโคจรชั้นที่ M ไปสู่วงโคจรชั้นที่ K เรียกรังสีเอกซ์ K_{β}

เนื่องจากความต่างของระดับพลังงานระหว่างระดับวงโคจรชั้นที่ L และ K น้อยกว่าระหว่างระดับวงโคจรชั้นที่ M และ K ดังนั้นรังสีเอกซ์ K_{α} จึงมีความยาวคลื่นมากกว่า

รังสีเอ็กซ์ K_{β} ดังแสดงในรูปที่ 2.4 รังสีเอ็กซ์ K_{α} สามารถแยกออกได้เป็น K_{α_1} และ K_{α_2} ซึ่งมีความยาวคลื่นต่างกันเล็กน้อย เนื่องจากมาจากความแตกต่างของสถานะทางควอนตัมในระดับวงโคจรเดียวกัน ในทำนองเดียวกัน รังสีเอ็กซ์ K_{β} สามารถแยกออกได้เป็น K_{β_1} และ K_{β_2} รังสีเอ็กซ์ K_{α_1} มีความเข้มเป็น 2 เท่าของรังสี K_{α_2} และประมาณ 3-6 เท่าของ K_{β_1} ส่วน K_{β_2} จางมากจนถือว่าไม่มีผล ดังนั้นความยาวคลื่นเฉลี่ยของรังสีเอ็กซ์ K_{α} หาได้โดย

$$\lambda_{K_{\alpha}} = \frac{1}{3} (\lambda_{K_{\alpha_2}} + 2\lambda_{K_{\alpha_1}})$$

ค่าความยาวคลื่นเฉลี่ยของรังสีเอ็กซ์ K_{α} จากเป้าโลหะชนิดต่าง ๆ แสดงไว้ในตารางที่ 2.1



รูปที่ 2.4 การกระจายความเข้มของคลื่นรังสีเอ็กซ์ MoK_{α} , 50kV และ CuK_{α} , 35 kV

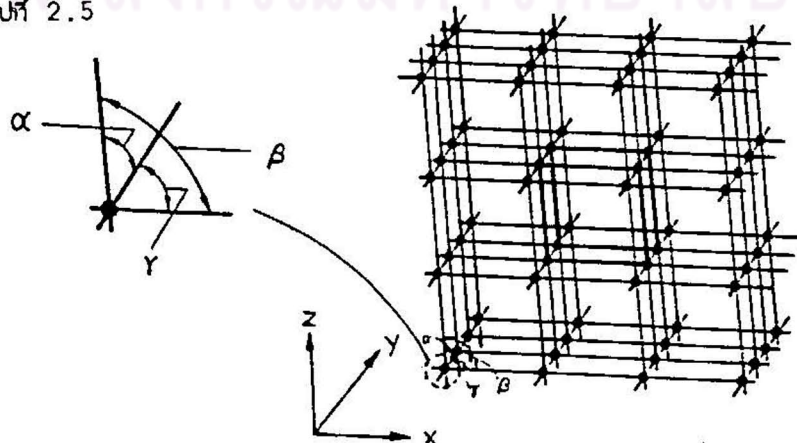
ธาตุทรานซิชันในแถวแรกและแถวที่สองซึ่งมีเลขอะตอม 21-30 และ 39-48 เป็นธาตุที่ใช้ทำเป้าโลหะ และให้รังสีเฉพาะในช่วงความยาวคลื่นที่มีประโยชน์ในการวิเคราะห์ทางโครงสร้างของผลึกมาก ถ้าโลหะที่ใช้ทำเป้าโลหะมีเลขอะตอมเพิ่มขึ้น รังสีเฉพาะที่เกิดขึ้นจะมีความยาวคลื่นสั้นลง การเลือกใช้ชนิดของเป้าโลหะจึงเลือกตามค่า $\lambda_{K_{\alpha}}$ ที่ต้องการใช้

ตารางที่ 2.1 ค่าความยาวคลื่นเฉลี่ยของรังสีเอ็กซ์ K_{α} จากเป้าโลหะชนิดต่าง ๆ

ชนิดของธาตุ	$\lambda_{K_{\alpha}}$ (Å)	$\lambda_{K_{\alpha_2}}$ (Å)	$\lambda_{K_{\alpha_1}}$ (Å)	$\lambda_{K_{\beta_1}}$ (Å)
Cr	2.29100	2.293606	2.28970	2.08487
Fe	1.937355	1.939980	1.936042	1.75661
Co	1.790260	1.792850	1.788965	1.62079
Cu	1.541838	1.544390	1.540562	1.392218
Mo	0.710730	0.713590	0.709300	0.632288

2.2 ระบบผลึก

ผลึกต่าง ๆ ประกอบขึ้นด้วยอะตอมหรือกลุ่มของอะตอม ซึ่งจัดเรียงตัวอย่างเป็นระเบียบ ลักษณะคล้ายตารางสี่เหลี่ยมวางซ้อนกันเป็นจำนวนมาก โดยแต่ละชั้นห่างกันเป็นระยะเท่า ๆ กัน และมีแนวของตารางขนานกัน ดังแสดงในรูปที่ 2.5 จุดซึ่งเกิดจากการตัดกันของชั้นตารางจะแทนอะตอมหรือกลุ่มของอะตอม โดยที่อะตอมทุก ๆ กลุ่มซึ่งแทนด้วยจุดดังกล่าวจะมีลักษณะการจัดเรียงอะตอมแบบเดียวกัน ตารางสี่เหลี่ยมซึ่งวางซ้อนกันเป็นชั้นนี้เรียกว่า แกวลำดับแลตทิซ (lattice array) และจุดที่เกิดจากการตัดกันของเส้นตารางนี้ เรียกว่า จุดแลตทิซ (lattice point) จุดแลตทิซจะประกอบกันเป็นหน่วยเซลล์สี่เหลี่ยมขนาดเล็กลittle จำนวนมาก โดยกำหนดให้ความยาวของหน่วยเซลล์ตามแกน X, Y และ Z เป็น a, b และ c และมุมระหว่างแกน \vec{b} และ \vec{c} , แกน \vec{a} และ \vec{c} , แกน \vec{a} และ \vec{b} เป็น α , β , γ ตามลำดับ ดังแสดงในรูปที่ 2.5

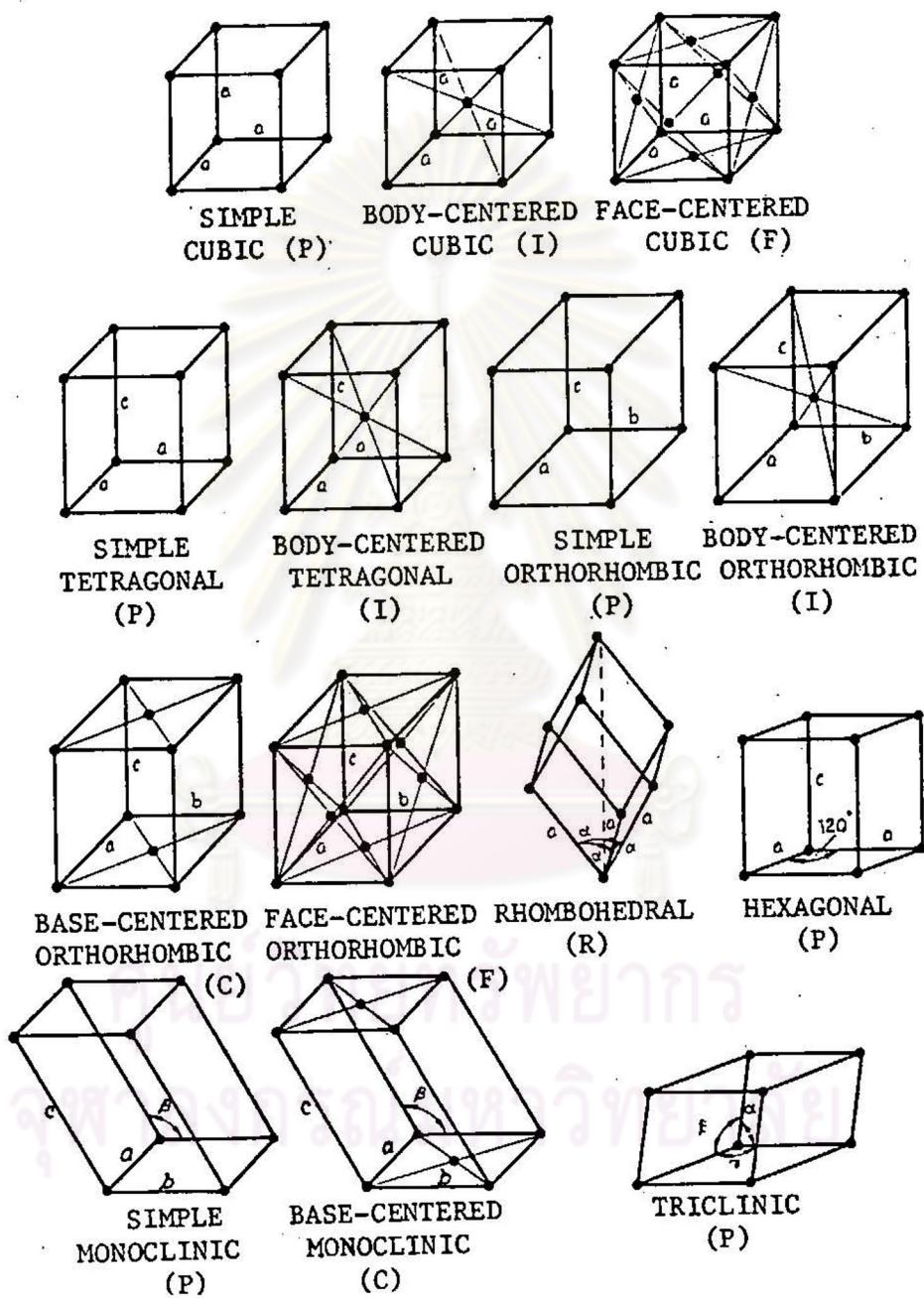


รูปที่ 2.5 จุดแลตทิซในสามมิติและหน่วยเซลล์

ผลึกต่าง ๆ ซึ่งประกอบด้วยหน่วยเซลล์เล็ก ๆ เหล่านี้ สามารถแบ่งโดยจำแนกออกตามค่าคงที่โครงผลึกได้เป็น 7 ระบบ นอกจากนี้ระบบผลึกทั้ง 7 ยังสามารถแบ่งย่อยออกได้เป็นบราวเวส์แลททิส 14 แบบ ดังแสดงในตารางที่ 2.2 และรูปที่ 2.6

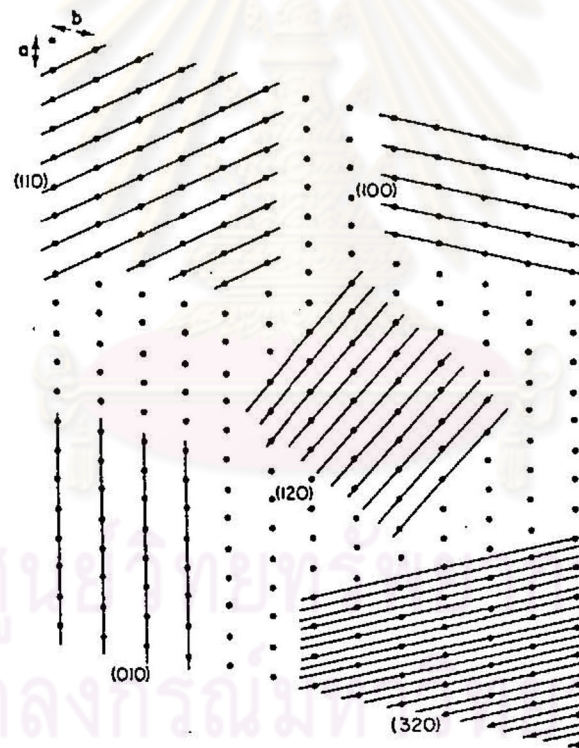
ตารางที่ 2.2 ระบบผลึกและบราวเวส์แลททิส

ระบบ	ด้านและมุม	บราวเวส์แลททิส	สัญลักษณ์แลททิส
คิวบิก (cubic)	ด้านทั้งสามเท่ากันและตั้งฉากกัน $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	พริสมิทริก บอดี้เซ็นเตอร์ เฟซ-เซ็นเตอร์	P I F
เตตระโกนัล (Tetragonal)	ด้านทั้งสามตั้งฉากกัน และมีด้านเท่ากัน 2 ด้าน $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	พริสมิทริก บอดี้เซ็นเตอร์	P I
ออโธโรมบิก (Orthorhombic)	ด้านทั้งสามไม่เท่ากัน แต่ ตั้งฉากกัน $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	พริสมิทริก- บอดี้เซ็นเตอร์ เบสเซ็นเตอร์ เฟซ-เซ็นเตอร์	P I C F
รอมโบฮีดรัล (Rhombohedral)	ด้านทั้งสามยาวเท่ากัน และมุมระหว่าง ด้านทั้งสามเท่ากัน $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$		R
เฮกซะโกนัล (Hexagonal)	ด้านยาวเท่ากันสองด้าน พหุมุม 120° ซึ่งกันและกัน ด้านที่สามพหุมุม 90° กับด้านทั้งสอง $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	พริสมิทริก	P
โมนอคลินิก (Monoclinic)	ด้านทั้งสามยาวไม่เท่ากัน และมีมุมฉาก สองมุม $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$ แบบที่ 1 $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$ แบบที่ 2	พริสมิทริก เบสเซ็นเตอร์	P C
ไตรคลินิก (Triclinic)	ด้านทั้งสามไม่เท่ากัน และไม่ตั้งฉากกัน $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	พริสมิทริก	P



รูปที่ 2.6 โครงผลึกบราวเอร์ส 14 แบบ

พิจารณาจุดแลตทิซในรูปที่ 2.7. ระนาบที่ลากผ่านจุดแลตทิซในสามมิติ เรียกว่า ระนาบของผลึก (lattice plane) เราสามารถลากระนาบของผลึกขนานกันในแนวต่าง ๆ ได้เป็นจำนวนมาก โดยระนาบแต่ละชุดมีระยะห่างระหว่างระนาบเท่ากัน ถ้าระนาบที่ใกล้จุดกำเนิดมากที่สุดตัดแกน a , b และ c ที่ระยะห่างจากจุดกำเนิดเป็น a/h , b/k และ c/l ตามลำดับ โดยที่ h , k และ l เป็นเลขจำนวนเต็มซึ่งมีความหมายว่า จุดของระนาบนี้แบ่งแกน a ของหน่วยเซลล์ออกเป็น h ส่วน เท่า ๆ กัน แบ่งแกน b ของหน่วยเซลล์ออกเป็น k ส่วน เท่า ๆ กัน และแบ่งแกน c ของหน่วยเซลล์ออกเป็น l ส่วน เท่า ๆ กัน เลข h , k และ l นี้ก็คือดัชนีผลเลอว์ (Miller indices) ซึ่งไปเรียกชื่อชุดระนาบของผลึก ดังแสดงในรูปที่ 2.7 โดยจะเขียนไว้ในวงเล็บ (hkl) เสมอ



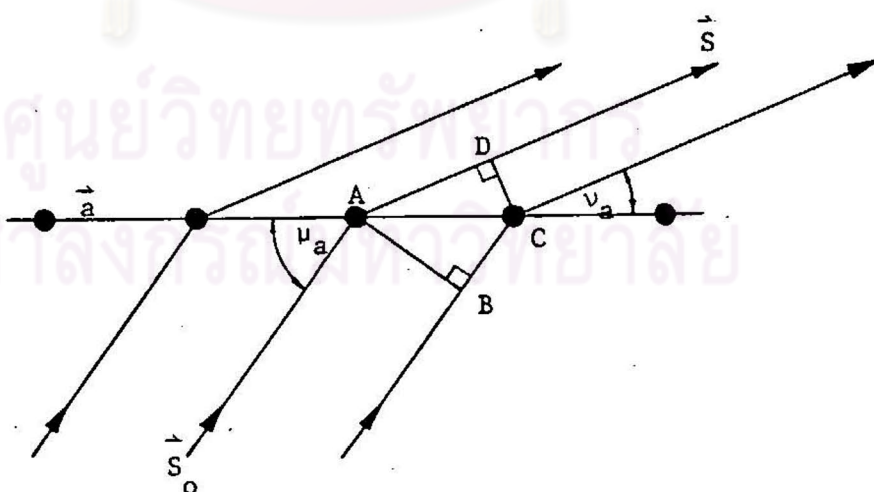
รูปที่ 2.7 ชุดระนาบต่าง ๆ ของผลึกที่ตัดกับระนาบ (001)

2.3 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

เมื่อรังสีเอ็กซ์ตกกระทบผลึก จะเกิดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ เนื่องจากอิเล็กตรอนที่อยู่ในอะตอมสั่น และให้โฟตอน (photon) ออกมา โฟตอนหรือรังสีเอ็กซ์ที่กระเจิงออกมาจากอะตอมต่างๆ จะมีความยาวคลื่น หรือความถี่ เดียวกันกับรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบผลึก และรังสีเอ็กซ์ที่กระเจิงเหล่านี้จะแทรกสอดซึ่งกันและกัน เมื่อเฟสตรงกัน หรือพาริตีเฟอเรนซ์ (path difference) มีค่าเท่ากับศูนย์ หรือจำนวนเต็มของความยาวคลื่นของรังสีเอ็กซ์ ก็จะมีการแทรกสอดแบบเสริมกัน และค่าความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่สังเกตได้จะมีค่าสูง

2.3.1 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ตามเงื่อนไขของลาวเอ

เมื่อให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบผลึก พิจารณาจุดแลททิส์ในแกน a โดยกำหนดให้ระยะระหว่างจุดแลททิส์เป็น a ทิศทางของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบผลึก (\vec{S}_0) ทำมุม μ_a กับ a และทิศทางของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบน (\vec{S}) ทำมุม ν_a กับ a ดังรูปที่ 2.8 โดยที่ \vec{S}_0 และ \vec{S} เป็นเวกเตอร์ที่มีขนาดหนึ่งหน่วย



รูปที่ 2.8 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยพิจารณาจุดแลททิส์ในแกน a

จากรูปที่ 2.8 จะพบว่ารังสีเอ็กซ์ทั้งสองที่กระเจิงจากจุดแลตทิสสองจุดที่อยู่ติดกัน A และ C จะมีค่าพาริตีเฟอเรนซ์เท่ากับ $AD-BC$ ในกรณีที่ว่าพาริตีเฟอเรนซ์มีค่าเท่ากับ 0 หรือจำนวนเต็มของความยาวคลื่นของรังสีเอ็กซ์ รังสีเอ็กซ์ทั้งสองจะแทรกสอดแบบเสริมกัน และเมื่อเอาฟิล์มไปรับ ก็จะได้จุดดับหรือมืด เรียกว่า "เงื่อนไขการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของลาวเอ"

$$\text{ดังนั้น} \quad AD-BC = h\lambda \quad (2.3)$$

เมื่อ h คือ เลขจำนวนเต็ม และมีค่าเท่ากับ $0, \pm 1, \pm 2, \dots$

λ คือ ความยาวคลื่นของรังสีเอ็กซ์

สมการ (2.3) เขียนใหม่ได้เป็น

$$a (\cos \nu_a - \cos \mu_a) = h\lambda$$

$$\text{หรือ} \quad \cos \nu_a = \cos \mu_a + \frac{h\lambda}{a} \quad (2.4)$$

หรือเขียนในรูปเวกเตอร์ ได้ว่า

$$\vec{a} \cdot (\vec{S} - \vec{S}_0) = h\lambda \quad (2.5)$$

สมการ (2.4) และ (2.5) เป็นเงื่อนไขของลาวเอ โดยพิจารณาจุดแลตทิสในแกน \vec{a} เท่านั้น ดังนั้นเมื่อพิจารณาจุดแลตทิสในทั้งสามแกน โดยให้ระยะระหว่างจุดแลตทิสในแต่ละแกนเป็น a , b และ c จะได้เงื่อนไขของลาวเอ ดังนี้

$$\cos \nu_a = \cos \mu_a + \frac{h\lambda}{a}$$

$$\cos \nu_b = \cos \mu_b + \frac{k\lambda}{b} \quad (2.6)$$

$$\cos \nu_c = \cos \mu_c + \frac{l\lambda}{c}$$

$$\text{หรือ} \quad \vec{a} \cdot (\vec{S} - \vec{S}_0) = h\lambda$$

$$\vec{b} \cdot (\vec{S} - \vec{S}_0) = k\lambda \quad (2.7)$$

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

โดยที่รังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบผลึกทำมุม μ_a, μ_b, μ_c กับ \vec{a}, \vec{b} และ \vec{c} ตามลำดับ รังสีเลี้ยวเบนทำมุม ν_a, ν_b, ν_c กับ \vec{a}, \vec{b} และ \vec{c} ตามลำดับ

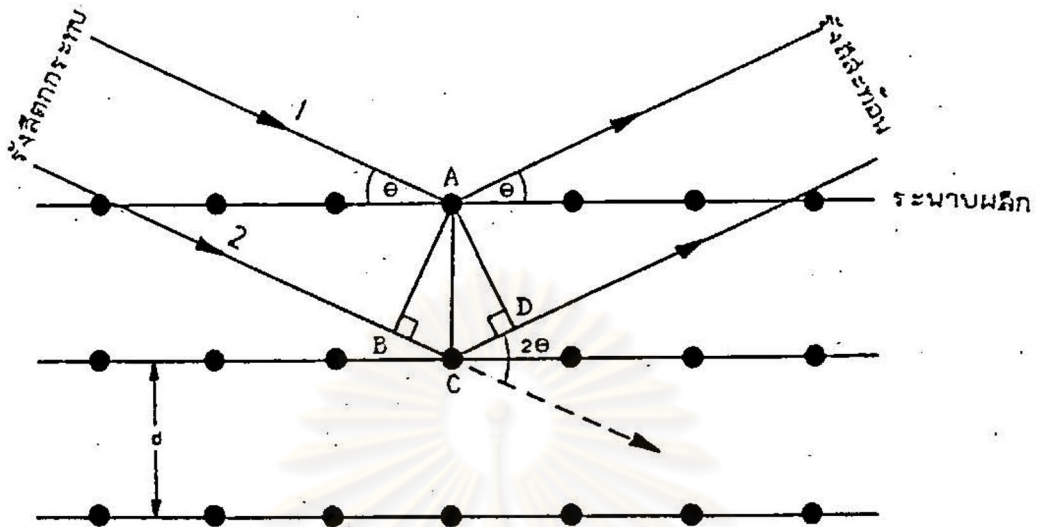
h, k และ l เป็นเลขจำนวนเต็ม มีค่าเท่ากับ $0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ตามลำดับ ดังแสดงในรูปที่ 2.9 ซึ่งแสดงทิศทางของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบผลึกและทิศทางของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนตามเงื่อนไขของลาวเอ



รูปที่ 2.9 การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ตามเงื่อนไขของลาวเอในสามมิติ

2.3.2 กฎของแบรกก์

แบรกก์อธิบายการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ในทิศทางต่าง ๆ โดยผลึกว่า "ผลึกประกอบด้วยชุดระนาบของอะตอม และเมื่อรังสีเอ็กซ์ตกกระทบกับผลึก ชุดระนาบเหล่านี้จะสะท้อนรังสีเอ็กซ์ออกมา" ดังแสดงในรูปที่ 2.10 โดยให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบระนาบที่ A และ C เป็นมุม θ แล้วสะท้อนออกจากระนาบเป็นมุม θ เท่าเดิม มุม θ นี้เรียกว่า มุมของแบรกก์ (Bragg angle) และระยะห่างระหว่างระนาบเป็น d



รูปที่ 2.10 การสะท้อนรังสีเอ็กซ์โดยชุดระนาบของผลึก

จากรูปที่ 2.10 เมื่อพิจารณารังสีเอ็กซ์ที่สะท้อนกับระนาบติดกัน 2 ระนาบ พบว่ารังสีเอ็กซ์ทั้งสองมีค่าพาสตเฟสเฟอเรนซ์เท่ากับ $BC + CD$ และในกรณีที่เกิดจุดบนฟิล์มที่นำไปรับรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบน โดยที่จุดนี้สัมพันธ์กับชุดระนาบที่สะท้อน จะได้ว่า

$$BC + CD = n\lambda \quad (2.8)$$

โดยที่ n คือ เลขจำนวนเต็มที่มีค่าเท่ากับ $0, \pm 1, \pm 2, \dots$

$$\text{หรือ} \quad 2d \sin \theta = n\lambda \quad (2.9)$$

สมการ (2.9) นี้คือ กฎของแบรกก์

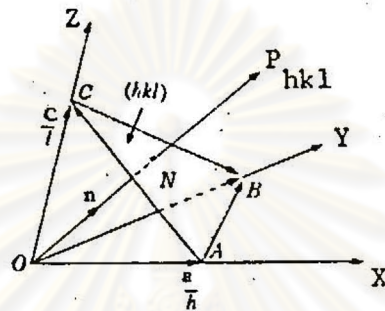
2.3.3 รีซีเพอเคิลแลตทิส์ (reciprocal lattice)

ผลึกประกอบด้วยระนาบของผลึกที่มีค่าดัชนีผลเลอ์ต่าง ๆ มากมาย ชุดระนาบของผลึกที่มีค่าดัชนีผลเลอ์เหมือนกันจะถูกแทนที่ด้วยจุดรีซีเพอเคิลเพียงจุดเดียว ซึ่งจุดรีซีเพอเคิลของชุดระนาบ (hkl) ใด ได้จากการลากเส้นตั้งฉากจากจุดเริ่มต้นไปยังระนาบแรกของชุดระนาบ (hkl) นั้น โดยให้ความยาวของเส้นตั้งฉากเป็น d_{hkl} แล้วจะได้จุดรีซีเพอเคิลอยู่ที่ปลายของเวกเตอร์ที่ลากตั้งฉากกับชุดระนาบ (hkl) นั้น แต่อยู่ห่างจากจุดเริ่มต้นเป็นระยะ

σ_{hkl} ดังแสดงในรูปที่ 2.11

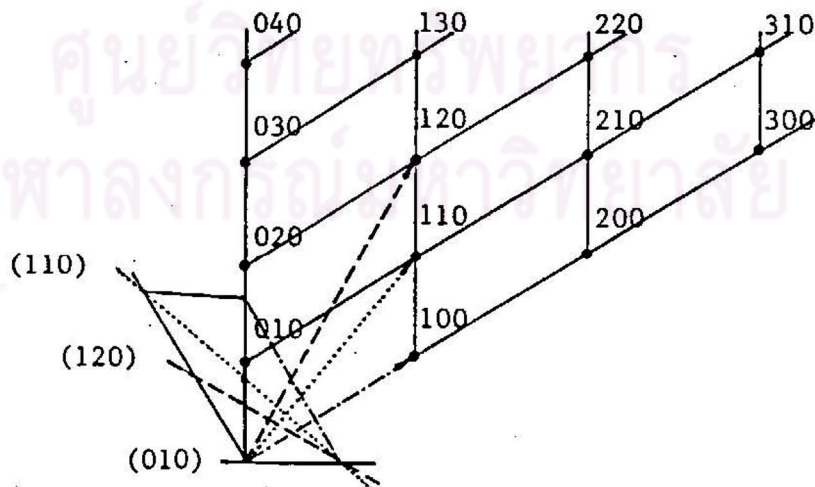
$$\text{โดยที่ } \sigma_{hkl} = K \frac{1}{d_{hkl}} \quad (2.10)$$

เมื่อ K เป็นค่าคงที่ ซึ่งมามีค่าเท่ากับ 1 หรือความยาวคลื่นของรังสีเอ็กซ์ที่ใช้



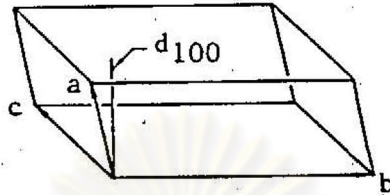
รูปที่ 2.11 ความสัมพันธ์ระหว่างจุดรีซีเพอเคิล P_{hkl} กับระนาบ (hkl) ในแลตทิซของผลึก

จุดรีซีเพอเคิลที่ได้จากชุดระนาบ (hkl) ต่าง ๆ จะจัดเรียงตัวกันอย่างเป็นระเบียบในลุ่มมิด เกิดเป็นแลตทิซใหม่ เรียกว่า รีซีเพอเคิลแลตทิซ ดังแสดงในรูปที่ 2.12 โดยที่รีซีเพอเคิลแลตทิซมีค่าคงที่โครงสร้างผลึกเป็น a^* , b^* , c^* , α^* , β^* และ γ^*



รูปที่ 2.12 ระนาบบางระนาบในแลตทิซของผลึกกับจุดรีซีเพอเคิลที่ใช้แทนระนาบ (hkl) เหล่านี้ในรีซีเพอเคิลแลตทิซ

ความสัมพันธ์ของแลตทิซของผลึกกับรีซีเพอเคิลแลตทิซอาจพิจารณาได้จาก
หน่วยเซลล์แบบพริสมัฟ ดังแสดงในรูปที่ 2.13



รูปที่ 2.13 หน่วยเซลล์แบบพริสมัฟในแลตทิซของผลึก

ปริมาตรของหน่วยเซลล์ได้จากพื้นที่ฐานที่ประกอบด้วยด้าน b และ c คูณกับความสูงของหน่วย
เซลล์ ซึ่งก็คือ d_{100} .

$$\text{นั่นคือ} \quad V = \text{area} \cdot d_{100}$$

$$\frac{1}{d_{100}} = \frac{\text{area}}{V} \quad (2.11)$$

ถ้า \vec{n} เป็นเวกเตอร์ที่มีขนาดหนึ่งหน่วยในทิศของเส้นตั้งฉาก ดังนั้นสมการ (2.10) เขียนในรูป
เวกเตอร์จะได้เป็น

$$\vec{\sigma}_{hkl} = K \frac{1}{d_{hkl}} \cdot \vec{n} \quad (2.12)$$

จากสมการ (2.11) เขียนใหม่ในรูปเวกเตอร์เป็น

$$\frac{1}{d_{100}} \vec{n} = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V} \quad (2.13)$$

เพื่อความสะดวกในการคำนวณ ให้ K มีค่าเท่ากับ 1 จากสมการ (2.12) และ (2.13)
จะได้ว่า

$$\vec{\sigma}_{100} = \frac{1}{d_{100}} \vec{n}$$

$$\vec{\sigma}_{100} = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$

$$\text{นั่นก็คือ } \vec{a}^* \equiv \vec{\sigma}_{100} = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$

และในทำนองเดียวกัน

$$\vec{b}^* \equiv \vec{\sigma}_{010} = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad (2.14)$$

$$\vec{c}^* \equiv \vec{\sigma}_{001} = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$

และจะพบว่า \vec{a}^* ตั้งฉากกับ \vec{b} และ \vec{c}

\vec{b}^* ตั้งฉากกับ \vec{c} และ \vec{a}

\vec{c}^* ตั้งฉากกับ \vec{a} และ \vec{b}

นั่นคือ

$$\begin{aligned} \vec{a}^* \cdot \vec{b} &= 0 & \vec{a}^* \cdot \vec{c} &= 0 & \vec{a}^* \cdot \vec{a} &= 1 \\ \vec{b}^* \cdot \vec{c} &= 0 & \vec{b}^* \cdot \vec{a} &= 0 & \vec{b}^* \cdot \vec{b} &= 1 \\ \vec{c}^* \cdot \vec{a} &= 0 & \vec{c}^* \cdot \vec{b} &= 0 & \vec{c}^* \cdot \vec{c} &= 1 \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\vec{a}^* = \vec{\sigma}_{100} = \frac{1}{d_{100}} \vec{n}$$

$$2\vec{a}^* = 2\vec{\sigma}_{100} = \frac{2}{d_{100}} \vec{n} \quad (2.16)$$

$$= \vec{\sigma}_{200} = \frac{1}{d_{200}} \vec{n}$$

$$3\vec{a}^* = 3\vec{\sigma}_{100} = \frac{3}{d_{100}} \vec{n}$$

$$= \vec{\sigma}_{300} = \frac{1}{d_{300}} \vec{n}$$

ตำแหน่งของจุดรีซีเพอเคิลโต ๆ ซึ่งอยู่ห่างจากจุดเริ่มต้นไปตามแกน \vec{a}^* , \vec{b}^* และ \vec{c}^* เป็นระยะ h , k และ l ตามลำดับ สามารถเขียนแทนได้ด้วยเวกเตอร์ \vec{c}_{hkl} โดย

$$\vec{o}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \quad (2.17)$$

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

$$\vec{b} = (\vec{b}^*)^* = \frac{\vec{c}^* \times \vec{a}^*}{\vec{a}^* \cdot \vec{b}^* \times \vec{c}^*} \quad (2.18)$$

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

ความสัมพันธ์ของค่าคงที่โครงสร้างของแลตทิซของผลึก กับรีซีเพอเคิลแลตทิซ แสดงไว้ใน

ตารางที่ 2.3

ตารางที่ 2.3 ความสัมพันธ์ของค่าคงที่โครงสร้างของแลตทิซของผลึก กับรีซีเพอเคิลแลตทิซ

$\cos \alpha^* = \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma}$	$a^* = \frac{bc \sin \alpha}{V}$
$\cos \beta^* = \frac{\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta}{\sin \gamma \sin \alpha}$	$b^* = \frac{ca \sin \beta}{V}$
$\cos \gamma^* = \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \sin \beta}$	$c^* = \frac{ab \sin \gamma}{V}$
$\cos \alpha = \frac{\cos \beta^* \cos \gamma^* - \cos \alpha^*}{\sin \beta^* \sin \gamma^*}$	$a = \frac{b^* c^* \sin \alpha^*}{V^*}$
$\cos \beta = \frac{\cos \gamma^* \cos \alpha^* - \cos \beta^*}{\sin \gamma^* \sin \alpha^*}$	$b = \frac{c^* a^* \sin \beta^*}{V^*}$
$\cos \gamma = \frac{\cos \alpha^* \cos \beta^* - \cos \gamma^*}{\sin \alpha^* \sin \beta^*}$	$c = \frac{a^* b^* \sin \gamma^*}{V^*}$
<p>ปริมาตร</p>	
$V^* = a^* b^* c^* \sqrt{1 - \cos^2 \alpha^* - \cos^2 \beta^* - \cos^2 \gamma^* + 2 \cos \alpha^* \cos \beta^* \cos \gamma^*}$	
$V = abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$	

2.3.4 ความสัมพันธ์ระหว่างเงื่อนไขของลาวเอ กฎของแบรกก์กับรีซีเพรอสเคิล-

แลททิส

จากเงื่อนไขของลาวเอ ตามสมการ (2.7) สามารถนำมาสัมพันธ์กับรีซีเพรอสเคิลแลททิสได้โดยการใช้คุณสมบัติของแลททิสที่ว่า เวกเตอร์ใด ๆ ในแลททิสสามารถเขียนแสดงในรูปของแกนแลททิสทั้งสามได้ เช่นเดียวกัน ในรีซีเพรอสเคิลแลททิส ถ้าให้เวกเตอร์ \vec{R} เป็นเวกเตอร์ใด ๆ ในรีซีเพรอสเคิลแลททิส จะเขียนได้ว่า

$$\vec{R} = p\vec{a}^* + q\vec{b}^* + r\vec{c}^* \quad (2.19)$$

โดยที่

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

$$\vec{a} \cdot \vec{R} = p$$

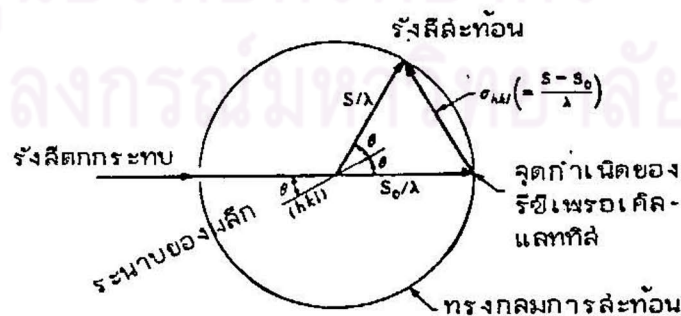
และในทำนองเดียวกัน

$$\vec{b} \cdot \vec{R} = q \quad (2.20)$$

$$\vec{c} \cdot \vec{R} = r$$

ถ้าให้เวกเตอร์ \vec{R} แทนผลต่างระหว่างเวกเตอร์หนึ่งหน่วย \vec{S} และ \vec{S}_0 คูณด้วย $\frac{1}{\lambda}$ ซึ่งแสดงไว้ดังในรูปที่ 2.14

$$\vec{R} = \frac{\vec{S} - \vec{S}_0}{\lambda} \quad (2.21)$$



รูปที่ 2.14 ความสัมพันธ์ระหว่างเงื่อนไขของลาวเอกับรีซีเพรอสเคิลแลททิส

แทนค่าเวกเตอร์ \vec{R} ลงในสมการ (2.20) และเปรียบเทียบกับเงื่อนไขของลาวเอในสมการ (2.7) จะได้เป็น

$$\begin{aligned} p &= \vec{a} \cdot \left(\frac{\vec{S} - \vec{S}_0}{\lambda} \right) = h \\ q &= \vec{b} \cdot \left(\frac{\vec{S} - \vec{S}_0}{\lambda} \right) = k \\ r &= \vec{c} \cdot \left(\frac{\vec{S} - \vec{S}_0}{\lambda} \right) = l \end{aligned} \quad (2.22)$$

โดยที่ h, k และ l เป็นเลขจำนวนเต็ม

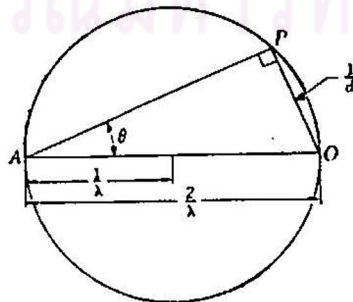
ดังนั้น เมื่อแทนสมการ (2.21) และ (2.22) ลงในสมการ (2.19) จะได้ว่า

$$\frac{\vec{S} - \vec{S}_0}{\lambda} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* = \vec{\sigma}_{hkl} \quad (2.23)$$

ส่วนความสัมพันธ์ระหว่างกฎของแบรกก์กับรีซีเฟอเคิลแลททิสนั้น ต้องพิจารณากฎของแบรกก์ก่อน จากเงื่อนไขการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ตามกฎของแบรกก์ที่ว่า $2d \sin \theta = \lambda$ สามารถจัดรูปแบบใหม่ได้เป็น

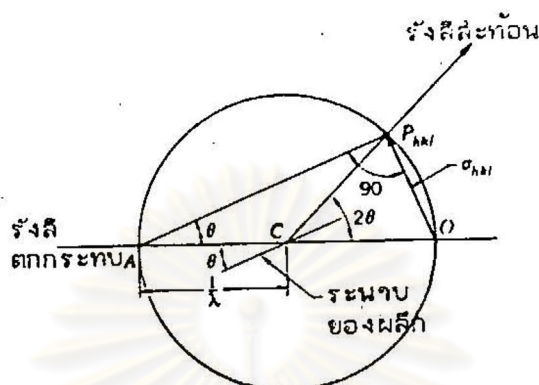
$$\sin \theta_{hkl} = \frac{\lambda/2}{d_{hkl}} = \frac{1/d_{hkl}}{2/\lambda} = \frac{\sigma_{hkl}}{2/\lambda} \quad (2.24)$$

จากสมการ (2.24) สามารถแสดงรูปเชิงเรขาคณิตที่สอดคล้องกับสมการได้ดังรูปที่ 2.15



รูปที่ 2.15 กฎการเลี้ยวเบนของแบรกก์ในเชิงเรขาคณิต

จากรูปที่ 2.15 ถ้าให้แนวเส้นผ่านศูนย์กลาง AO แทนทิศของรังสีเอ็กซ์ตกกระทบ และวางผลึกไว้ที่จุดกึ่งกลางของวงกลมที่จุด C ดังแสดงในรูปที่ 2.16



รูปที่ 2.16 ความสัมพันธ์ระหว่างกฎของแบรกก์กับรีซีเพอเคิลแลททิส

ดังนั้น จะได้ว่ารังสีเอ็กซ์ตกกระทบทำมุม θ กับระนาบของผลึก แล้วเกิดรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนไปตัดเส้นรอบวงที่จุด P_{hkl} ซึ่งอยู่ห่างจากจุด O เป็นระยะ σ_{hkl} ดังนั้นจุด O จึงเป็นจุดเริ่มต้นของรีซีเพอเคิลแลททิส และจุด P_{hkl} เป็นจุดรีซีเพอเคิลของระนาบ hkl ถ้าหมุนผลึกจะทำให้รังสีเอ็กซ์ทำมุมต่าง ๆ กับระนาบของผลึก และเกิดรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนเมื่อจุดรีซีเพอเคิลหมุนไปตัดเส้นรอบวงของวงกลม ถ้าพิจารณาในสามมิติ วงกลมนี้ก็คือ ทรงกลม ซึ่งจะเกิดรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนทุกครั้งจุดรีซีเพอเคิลหมุนเข้าตัดผิวของทรงกลม จึงเรียกทรงกลมนี้ว่า "ทรงกลมการสะท้อน (sphere of reflection) หรือ ทรงกลมของอีวาลด์ (Ewald's sphere)"

การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ตามเงื่อนไขของลาวเอ และตามกฎของแบรกก์ ความจริงแล้วมีความหมายเหมือนกัน จากการพิจารณาเงื่อนไขของลาวเอตามสมการ (2.23) ซึ่งถ้าเปลี่ยนรูปจากสมการเวกเตอร์เป็นความยาว จะได้

$$\frac{1}{\lambda} \left| \vec{S} - \vec{S}_0 \right| = \left| \vec{\sigma}_{hkl} \right| \quad (2.25)$$

และจากรูปที่ 2.15 พบว่า

$$|\vec{S}-\vec{S}_0| = 2 \sin \theta \quad (2.26)$$

แทนสมการ (2.26) ลงในสมการ (2.25) ได้เป็น

$$\frac{1}{\lambda} (2 \sin \theta) = \left| \vec{\sigma}_{hkl} \right| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

$$\text{หรือ} \quad 2 d_{hkl} \sin \theta = \lambda$$

ซึ่งก็คือกฎของแบรกก์นั่นเอง

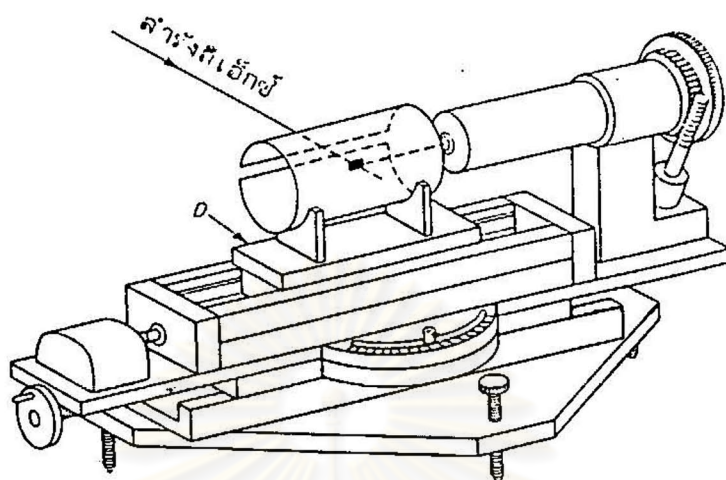
2.4 การถ่ายภาพผลึกเดี่ยว

ภาพถ่ายผลึกเดี่ยวมีส่วนสำคัญอยู่สองส่วน คือ ตำแหน่งของจุดสะท้อน และความเข้มของจุดสะท้อน จากตำแหน่งของจุดสะท้อน ทำให้ทราบลักษณะและขนาดของหน่วยเซลล์ ซึ่งหลังจากได้กำหนดดัชนีของจุดสะท้อนทั้งหลายแล้ว จะทำให้ได้ข้อมูลต่าง ๆ ซึ่งนำไปใช้ในการหาสมมาตรสามมิติของผลึก ส่วนการพิจารณาความเข้มของจุดสะท้อน ใช้เป็นข้อมูลในการหาโครงสร้างของผลึกต่อไป

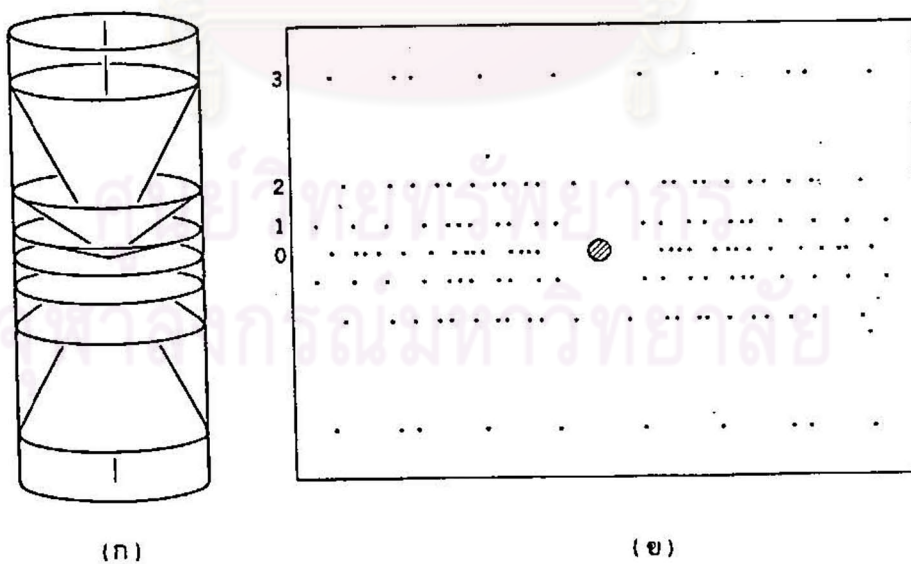
วิธีการที่จะได้ภาพถ่ายผลึกเดี่ยวในการวิจัยครั้งนี้ แบ่งออกเป็น 3 วิธี คือ การถ่ายภาพแบบผลึกหมุน การถ่ายภาพแบบไวซ์เซ็นเบอร์ก และการถ่ายภาพแบบพรูเชลซ์ ซึ่งแต่ละวิธีมีหลักการต่าง ๆ กัน ดังนี้

2.4.1 การถ่ายภาพแบบผลึกหมุน (rotation method)

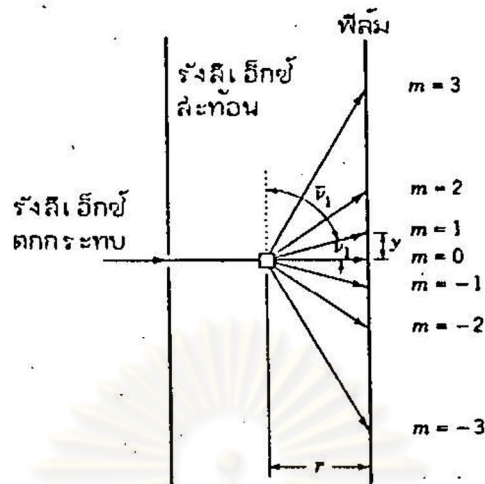
วิธีการถ่ายภาพแบบผลึกหมุนในการวิจัยครั้งนี้ ใช้กล้องไวซ์เซ็นเบอร์ก ซึ่งมีลักษณะดังแสดงในรูปที่ 2.17 โดยติดตั้งโกณีโอมิเตอร์ที่มีผลึกเดี่ยวติดอยู่ แล้วเข้ากับตัวกล้อง สดให้แกนหมุนของผลึกเดี่ยวซึ่งต้องเป็นแกนของแลตทิซของผลึก อาจจะเป็นแกน a , b หรือ c ในกรณีนี้ เลือกแกน a ตั้งฉากกับลำรังสีเอ็กซ์ ฉายรังสีเอ็กซ์ไปยังผลึกขณะที่ผลึกกำลังหมุน โดยให้ตัวกล้องอยู่นิ่ง รัศมีเพรอดีลแลตทิซจะตัดทรงกลมการสะท้อนเป็นรูปวงกลม ดังแสดงในรูปที่ 2.18 (ก) และรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนจากทิศทางต่าง ๆ จะไปปรากฏบนแผ่นฟิล์ม เมื่อกลิ้แผ่นฟิล์มออก จะพบแนวของจุดสะท้อนเป็นเส้นตรง ดังแสดงในรูปที่ 2.18 (ข)



รูปที่ 2.17 สักขระของกล้องไวซ์เซ็นเบอร์



รูปที่ 2.18 สักขระเลย์เออร์ไลน์ที่ปรากฏบนฟิล์มของการถ่ายภาพแบบผลึกหมุน



รูปที่ 2.19 การถ่ายภาพแบบผลึกหมุนโดยมีแกน \vec{a} เป็นแกนหมุน

จากรูป 2.19 ทิศทางของรังสีเลี้ยวเบนที่เกิดขึ้นย่อมต้องสอดคล้องกับเงื่อนไขของลาวเอ ในกรณีเมื่อคิดเฉพาะแกน \vec{a} จะได้ว่า

$$a \cos \bar{\nu} - a \cos \bar{\mu} = 1 \lambda$$

เนื่องจากรังสีตกกระทบตั้งฉากกับแกนหมุน \vec{a} จึงทำให้ $\cos \bar{\mu}$ มีค่าเท่ากับ 0 นั่นคือ

$$\cos \bar{\nu}_1 = \frac{1\lambda}{a} \tag{2.27}$$

เพราะว่า

$$\nu_1 = 90^\circ - \bar{\nu}_1$$

ดังนั้นสมการ (2.27) จึงเป็น $\sin \nu_1 = \frac{1 \cdot \lambda}{a} \tag{2.28}$

แต่จากรูปที่ 2.19 ทราบว่า

$$\tan \nu_1 = \frac{Y_1}{r} \tag{2.29}$$

ดังนั้น จากสมการ (2.27) และ (2.28) จะได้ว่า

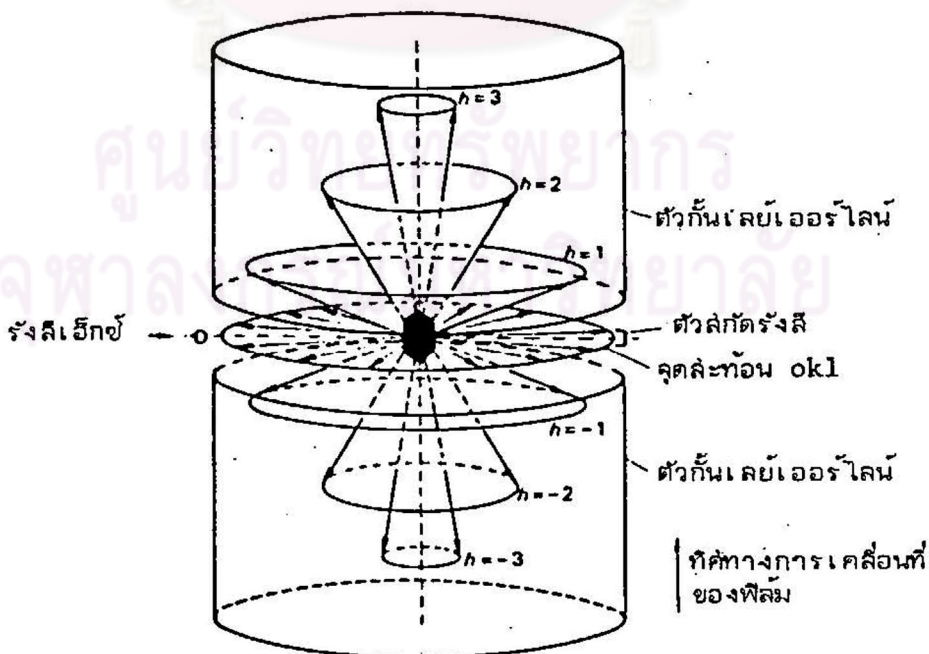
$$a = \frac{1 \cdot \lambda}{\sin \cdot \tan^{-1} \left(\frac{Y_1}{r} \right)} \tag{2.30}$$

เมื่อ r คือรัศมีของฟิล์มซึ่งขึ้นกับชนิดของกล้อง สำหรับกล้องไวซ์เชินเบอร์กแบบเอ็นราฟโนเนียส (Enraf-Nonius Weissenberg camera) ที่ใช้ในการวิจัยนี้มีค่า r เท่ากับ 57.3 มิลลิเมตร

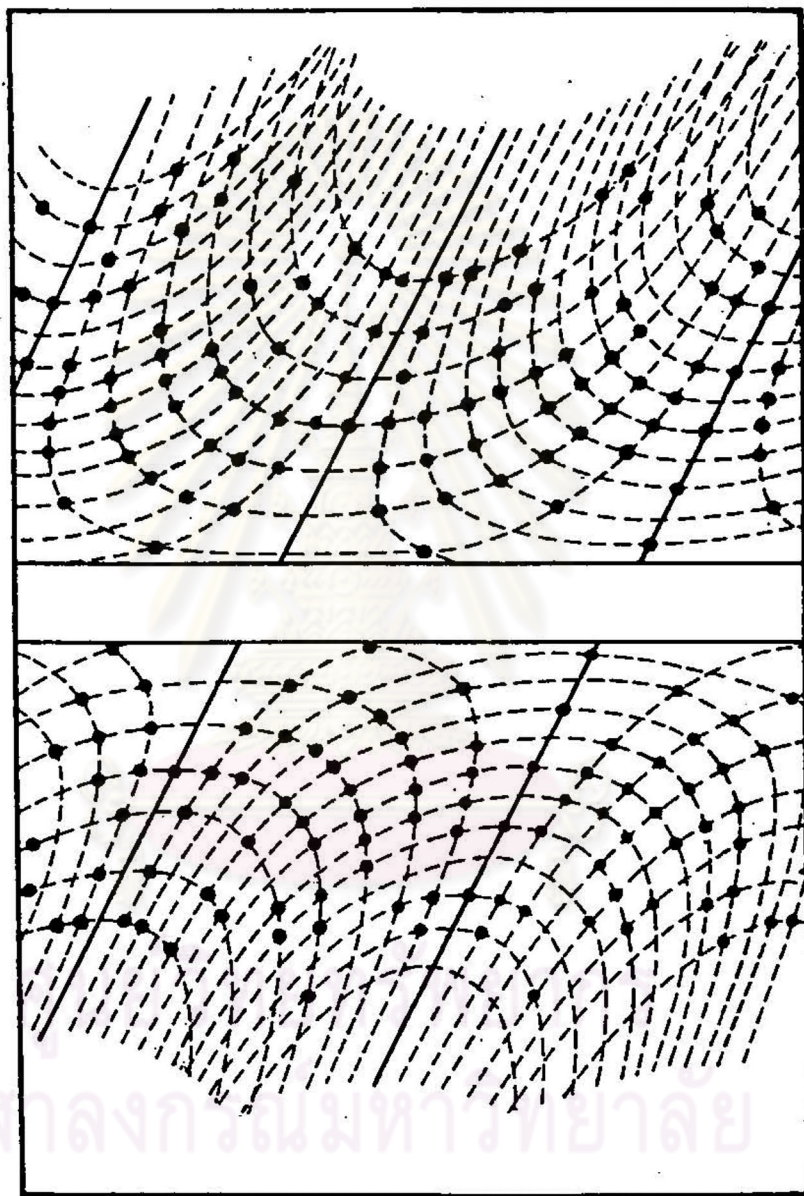
และ Y_1 เป็นระยะห่างระหว่างเลเยอร์ที่ 0 กับเลเยอร์ที่ 1 นั่นคือ การถ่ายภาพแบบผลึกหมุนสามารถหาค่าคงที่โครงสร้างในแนวแกนหมุนได้ ในกรณีที่ใส่ให้ผลึกเดี่ยวหมุนกลับไปกลับมารอบแกนหมุนในช่วงมุมแคบประมาณ 5° ถึง 25° ภาพถ่ายที่ได้จะมีลักษณะเหมือนภาพถ่ายแบบผลึกหมุน ซึ่งเราเรียกภาพถ่ายชนิดนี้ว่า ภาพถ่ายแบบออสซิลเลชัน (oscillation photograph)

2.4.2 การถ่ายภาพแบบไวซ์เซ็นเบิร์ก (Weissenberg method)

เนื่องจากการถ่ายภาพแบบผลึกหมุนเป็นการหาข้อมูลผลึกในสามมิติจากภาพถ่ายสองมิติ ซึ่งข้อมูลในระนาบรีซีเพรอสเฟอเคลแลกทิสล์เลเยอร์ใด เลเยอร์หนึ่งจะปรากฏออกมาให้เห็นเพียงเส้นตรงเส้นเดียว ดังนั้นภาพรีซีเพรอสเฟอเคลแลกทิสล์ที่ได้จึงเกิดการบิดเบี้ยว และซ้อนทับกัน การกำหนดสัณฐานของจุดสะท้อนที่ปรากฏจากภาพถ่ายแบบผลึกหมุนทำได้ลำบาก จึงหาวิธีการใหม่ที่จะทำให้ง่าย สะดวกรวดเร็วขึ้น นั่นคือ วิธีการถ่ายภาพแบบไวซ์เซ็นเบิร์ก ซึ่งสามารถแยกถ่ายภาพรีซีเพรอสเฟอเคลแลกทิสล์ละเลเยอร์ โดยใช้ที่กันเลเยอร์ไลน์ลวดไว้ระหว่างผลึกกับฟิล์ม เพื่อเป็นตัวกันรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนจากระนาบอื่นที่ไม่ต้องการออก ดังแสดงในรูปที่ 2.20 ในขณะที่ผลึกหมุนกลับไปกลับมาเหมือนในการถ่ายภาพแบบผลึกหมุน ตัวลวดจะเคลื่อนที่ไปข้างหน้า และถอยหลัง ลวดเคลื่อนไปกับการหมุนของผลึก โดยเมื่อผลึกหมุนไป 2 องศา ฟิล์มจะเคลื่อนที่ไป 1 มิลลิเมตร จึงทำให้จุดสะท้อนไม่ซ้อนทับกัน และแม้กระจายเต็มภาพถ่าย ดังแสดงในรูปที่ 2.21

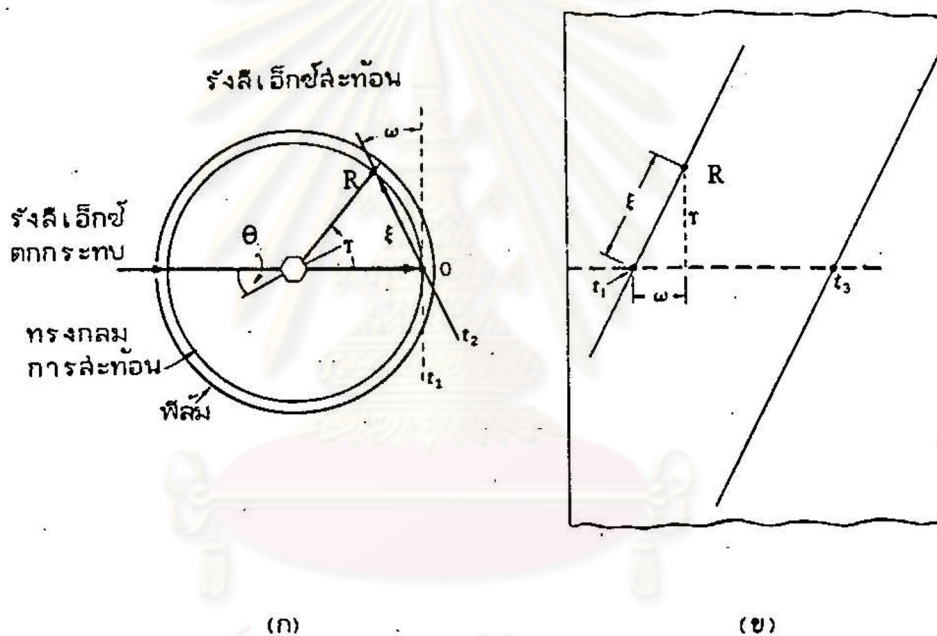


รูปที่ 2.20 การใช้ตัวกันเลเยอร์ไลน์แยกถ่ายภาพรีซีเพรอสเฟอเคลแลกทิสล์ละเลเยอร์



รูปที่ 2.21 ภาพถ่ายไวซ์เชิมเบอร์ก

การถ่ายภาพไวซ์เซ็นเบอร์ก็ แบ่งเป็น 2 ตอน คือ ตอนแรกเป็นการถ่ายภาพไวซ์เซ็นเบอร์ที่เลขเออร์ที่ 0 โดยสัดให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบบนตั้งฉากกับแกนหมุนของผลึก (normal beam method) ดังนั้นรังสีเอ็กซ์จึงตั้งฉากกับแกนของรีซีเพรอกเคิลแลททิส เมื่อผลึกหมุนไปเป็นมุม θ แกนของรีซีเพรอกเคิลแลททิสจะหมุนไปเป็นมุม ω ตัดกับทรงกลมการสะท้อน เกิดรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนตกบนฟิล์ม ปรากฏเป็นจุดสะท้อน ดังแสดงในรูปที่ 2.22 (ก) เมื่อคลี่แผ่นฟิล์มออก จะปรากฏเป็นจุดสะท้อนที่จุด R ดังแสดงในรูปที่ 2.22 (ข)



รูปที่ 2.22 การเกิดจุดสะท้อน และตำแหน่งของจุดสะท้อนบนฟิล์ม

เมื่อ ω เป็นมุมที่แกนของรีซีเพรอกเคิลแลททิส หมุนไปจากจุดกำเนิดของรีซีเพรอกเคิลแลททิส

γ เป็นมุมระหว่างแนวรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบน กับแนวรังสีเอ็กซ์ตกกระทบบน

ϵ เป็นระยะจากจุดกำเนิดของรีซีเพรอกเคิลแลททิส ไปยังจุดสะท้อน

พิจารณาจากรูปที่ 2.22 (ก) จะพบว่า

$$\gamma = 2\theta$$

และ $\omega = \theta$

จุดสะท้อนที่ปรากฏในภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์ก ดังแสดงในรูปที่ 2.21 สามารถแบ่งออกได้เป็น 2 สักขะ คือ จุดสะท้อนซึ่งปรากฏเป็นแนวของเส้นตรง เรียกว่า เส้นเซ็นทรัลแลททิส์ (central lattice line) และสักขะที่จุดสะท้อนปรากฏเป็นแนวเส้นโค้ง เรียกว่า เส้นน็อนเซ็นทรัลแลททิส์ (non-central lattice line) ซึ่งการเกิดจุดสะท้อนทั้งสองสักขะแสดงได้ในรูปที่ 2.23 (ก) และ 2.23 (ข). โดย a^* และ b^* เป็นแกนของรีซีเพอเคิลแลททิส์ ให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบผลึกในแนวเส้นผ่าศูนย์กลางของทรงกลมการสะท้อน โดยจะเลี้ยวไปตกบนแผ่นฟิล์ม ถือเป็นเส้นแบ่งครึ่งฟิล์ม ในขณะที่ผลึกหมุนไปเป็นมุม θ แกนของรีซีเพอเคิลแลททิส์จะหมุนไปเป็นมุม ω จุดรีซีเพอเคิลใด ๆ ที่มีแนวของจุดผ่านจุดกำเนิดของรีซีเพอเคิลแลททิส์ จะปรากฏสักขะของจุดสะท้อนบนแผ่นฟิล์มเป็นแนวเส้นตรง ในทางตรงข้าม ถ้าจุดรีซีเพอเคิลใดที่มีแนวของจุดไม่ผ่านจุดกำเนิดของรีซีเพอเคิลแลททิส์ จะปรากฏสักขะของจุดสะท้อนบนแผ่นฟิล์มเป็นแนวเส้นโค้ง

ตอนที่ล่องเป็นการถ่ายภาพไวซ์เซ็นเบอร์กเลย์เออร์ที่ n เมื่อ n เป็น $\pm 1, \pm 2, \dots$ ถ้าให้รังสีเอ็กซ์ตั้งฉากกับแกนหมุนของผลึกเหมือนในการถ่ายภาพเลย์เออร์ที่ 0 พบว่าแกนของรีซีเพอเคิลแลททิส์ในเลย์เออร์ที่ n จะไม่สัมพันธ์กับทรงกลมการสะท้อน ทำให้เกิดย่านบอด (blind region) ตรงจุดกึ่งกลางของแผ่นฟิล์ม และย่านบอดนี้จะมีบริเวณกว้างขึ้นเมื่อระยะห่างระหว่างเลย์เออร์ที่ 0 กับเลย์เออร์ที่ต้องการถ่ายภาพ (Z_n) มีค่ามากขึ้น ดังแสดงในรูปที่ 2.24 ทำให้ได้ข้อมูลไม่สมบูรณ์

ดังนั้น การถ่ายภาพไวซ์เซ็นเบอร์ก (เลย์เออร์ที่ n) ไม่สามารถใช้ข้อมูลสมบูรณ์

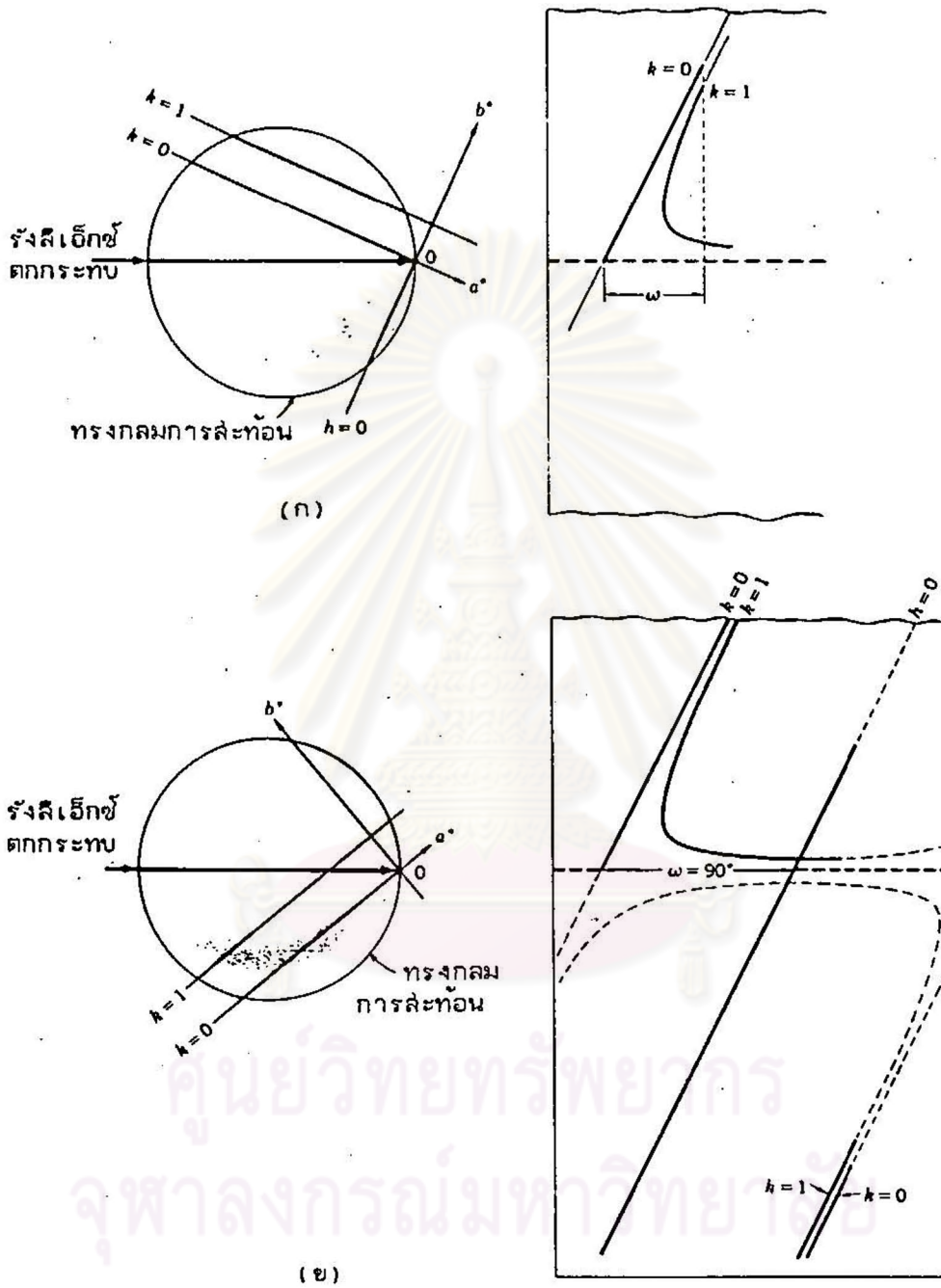
ซึ่งทำโดยให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบที่มุม θ ซึ่งให้ระนาบแกว่งของผลึก (crystallographic plane) โดยวิธีของเลอเชอว์ (Lecher's method) เพื่อให้เห็นของรีซีเพอเคิลแลททิส์ในล่องเออร์ที่ n ซึ่งต้องกำหนดตำแหน่งของการสะท้อนพอดี ดังแสดงในรูปที่ 2.25

เลขที่ของระนาบ (hkl) ของเลอเชอว์ (Lecher's method) เพื่อให้เห็นของรีซีเพอเคิลแลททิส์ในล่องเออร์ที่ n ซึ่งต้องกำหนดตำแหน่งของการสะท้อนพอดี ดังแสดงในรูปที่ 2.25

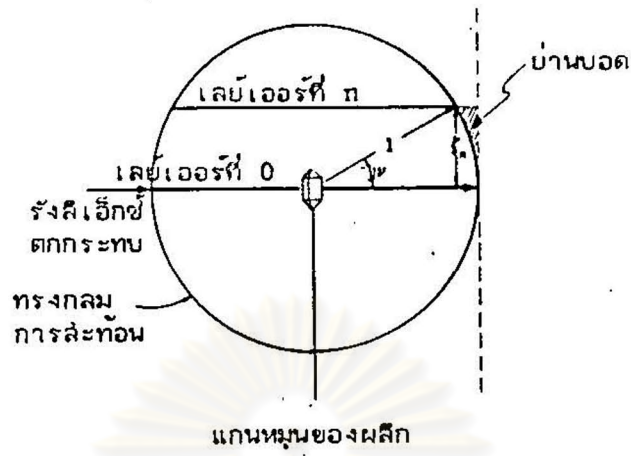
เลขที่ของระนาบ (hkl) ของเลอเชอว์ (Lecher's method) เพื่อให้เห็นของรีซีเพอเคิลแลททิส์ในล่องเออร์ที่ n ซึ่งต้องกำหนดตำแหน่งของการสะท้อนพอดี ดังแสดงในรูปที่ 2.25

เลขที่ของระนาบ (hkl) ของเลอเชอว์ (Lecher's method) เพื่อให้เห็นของรีซีเพอเคิลแลททิส์ในล่องเออร์ที่ n ซึ่งต้องกำหนดตำแหน่งของการสะท้อนพอดี ดังแสดงในรูปที่ 2.25

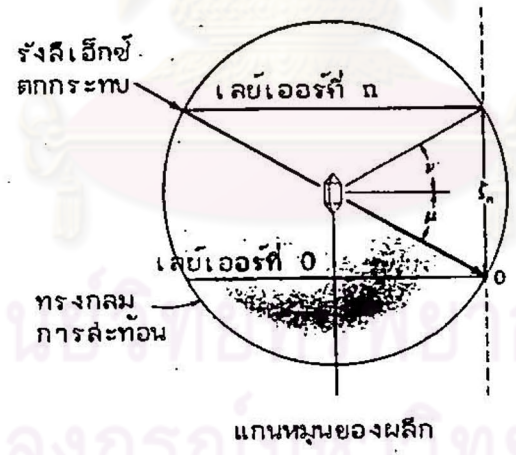
เลขที่ของระนาบ (hkl) ของเลอเชอว์ (Lecher's method) เพื่อให้เห็นของรีซีเพอเคิลแลททิส์ในล่องเออร์ที่ n ซึ่งต้องกำหนดตำแหน่งของการสะท้อนพอดี ดังแสดงในรูปที่ 2.25



รูปที่ 2.23 ลักษณะการเกิดเส้นเอ็นทรัลแลททิส และเส้นมันเอ็นทรัลแลททิส



รูปที่ 2.24 บ้านบอดของการถ่ายภาพไวซ์เซ็นเซอร์เลขเออร์ที่ n



รูปที่ 2.25 วิธีการถ่ายภาพไวซ์เซ็นเซอร์เลขเออร์ที่ n โดยวิธีมุมเอียงที่เหมาะสม (equi-inclination method)

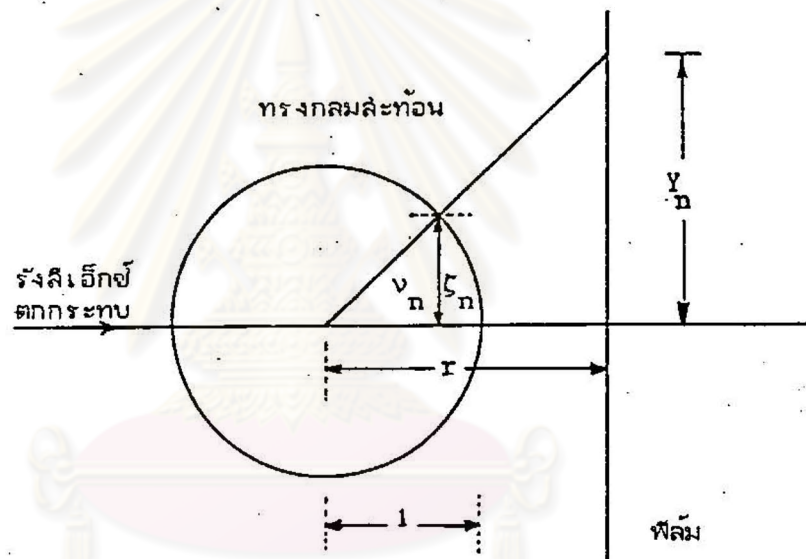
โดย μ_n เป็นมุมที่รังสีเอ็กซ์ตกกระทบเอียงไปจากแนวเดิม
 ν_n เป็นมุมที่รังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนทำกับแนวรังสีเอ็กซ์ตกกระทบเดิม

ค่าของมุม μ_n หาได้จากภาพถ่ายแบบผลึกหมุน โดยให้ระยะห่างระหว่างเส้นเออร์บนแผ่นฟิล์มเป็น Y_n และรัศมีของฟิล์มเป็น r ดังแสดงในรูปที่ 2.26

$$\text{จะได้ว่า} \quad \tan v_n = \frac{Y_n}{r} \quad (2.31)$$

$$\text{และ} \quad \sin v_n = \frac{\zeta_n}{l} \quad (2.32)$$

$$\text{จากรูปที่ 2.25 พบว่า} \quad \sin \mu_n = \frac{\zeta_n}{2} \quad (2.33)$$



รูปที่ 2.26 ความสัมพันธ์ของระยะห่างระหว่างเส้นเออร์ในรีซีเพอเคิลสแตทิสต์ กับระยะที่ปรากฏบนแผ่นฟิล์ม

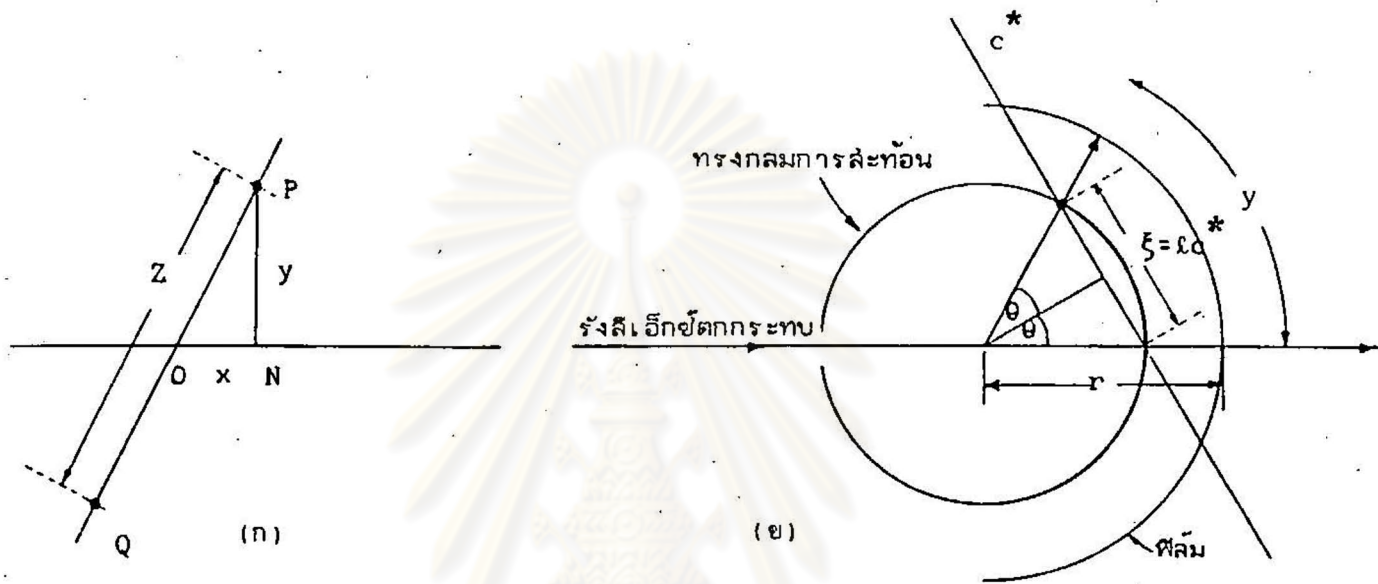
จากสมการ (2.31), (2.32) และ (2.33) ได้ความสัมพันธ์ว่า

$$\mu_n = \sin^{-1} \left[\frac{\sin \tan^{-1} \left(\frac{Y_n}{r} \right)}{2} \right] \quad (2.34)$$

การถ่ายภาพไวซ์เซ็นเบอร์กับเลขเออร์ที่ n โดยวิธีให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบทำมุมเอียงที่เหมาะสมกับแกนหมุนของผลึกนั้น ในทางปฏิบัติ การเคลื่อนตัวกล้องทำได้สะดวกกว่าการเคลื่อนลำรังสีเอ็กซ์ และระยะที่ต้องเลื่อนตัวกันเลขเออร์ไลน์ไปจากเดิม (S_n) หาได้ดังนี้

$$S_n = r_s \tan \mu_n \tag{2.35}$$

เมื่อ r_s เป็นระยะรัศมีของตัวกันแสงเออร์ไลน์



รูปที่ 2.27 (ก) จุดสะท้อนซึ่งสัมพันธ์กันจากภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์รัก
 (ข) ความสัมพันธ์ระหว่างระยะรัศมีเพอร์เคิลแลททิล กับระยะที่ปรากฏบนฟิล์ม

จากรูปที่ 2.27 (ก) ให้ $ON = X$ มม., $PN = Y$ มม. และ $OP = \frac{Z}{2}$ มม. จากการออกแบบกล้อง จะได้ว่า $Y = 2X$ และ $\frac{Z}{2} = \sqrt{5} X = \frac{\sqrt{5}}{2} Y$

$$Y = \frac{Z}{\sqrt{5}} \tag{2.36}$$

จากรูปที่ 2.27 (ข) ได้ว่า $2\theta = Y/r$ เรเดียน $\tag{2.37}$

เพราะว่า r มีค่าเท่ากับ $90/\pi$ มม. ดังนั้นจากสมการ (2.37) จะได้ว่า

$$\theta = Y \text{ องศา}$$

และจากรูปที่ 2.27 (ข)
$$\sin \theta = \left(\frac{\xi}{2/l} \right)$$

สัมพันธ์ให้จุด P และ Q อยู่บนแกน c^* จะได้

$$\xi = lc^*$$

ดังนั้น
$$c^* = \frac{2 \sin \theta}{l\lambda} \quad (2.38)$$

กรณีผลึกในระบบออร์ทอโรมบิก จะได้ว่า

$$c = \frac{1}{c^*}$$

นั่นคือ

$$c = \frac{l\lambda}{2 \sin \left(\frac{\theta}{\sqrt{5}} \right)}$$

ในทำนองเดียวกัน ค่าของแกน b มีความสัมพันธ์เป็น

$$b = \frac{k\lambda}{2 \sin \left(\frac{\theta}{\sqrt{5}} \right)}$$

จากภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์ก สามารถคำนวณค่ามิติเซลล์ของแกนผลึกอีก 2 แกนที่เหลือ โดยแกนแรกหาได้จากภาพถ่ายแบบผลึกหมุน และยังสามารถหามุมระหว่างแกนของผลึกได้อีกด้วย ภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์กนั้น แม้ว่าจะแปลผลได้ง่ายกว่าภาพถ่ายแบบผลึกหมุน และให้จุดสะท้อนบนแผ่นฟิล์มไม่ซ้อนทับกัน แต่ยังคงเป็นภาพรีซีเพรอสเฟอเคลสไลท์ที่บิดเบี้ยวไป

2.4.3 การถ่ายภาพแบบพรีเซสชัน (precession method)

เป็นวิธีการถ่ายภาพผลึกเดี่ยวที่ให้ภาพรีซีเพรอสเฟอเคลสไลท์ ดังที่เป็นอยู่จริง ไม่บิดเบี้ยว (undistorted reciprocal lattice) ซึ่งเป็นการบันทึกรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนจากผลึกที่หมุนควงรอบสักรังสีเอ็กซ์โดยมีฟิล์มเคลื่อนที่ลัดคล่องไปด้วย ทำให้ได้ข้อมูลผลึกที่สมบูรณ์ การถ่ายภาพโดยวิธีนี้จะกล่าวโดยละเอียดในบทที่ 3 อีกครั้ง