



บทที่ 4

เอ็กซ์ทิงค์ชัน ปฐมภูมิและทุติยภูมิ
(Primary and Secondary Extinction)

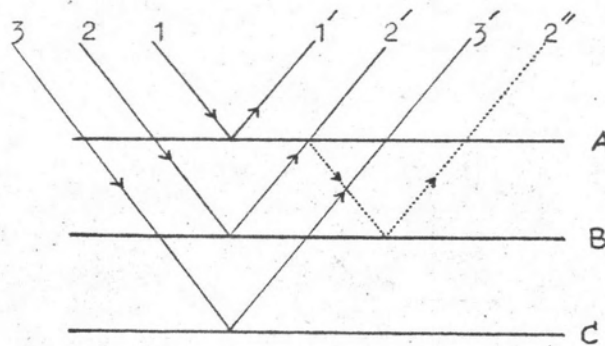
ในระยะแรกที่มีการค้นพบรังสีเอ็กซ์นั้น คิดว่า อิทธิพลของการถูกคลื่นรังสีเอ็กซ์
ที่เนื่องมาจากผลึกนั้นเกิดจาก ปรากฏการณ์โฟโตอิเล็กทริก (photoelectric effect)
ปรากฏการณ์คอมป์ตัน (Compton effect) และการผลิตสารคู่ (pair production) (7)
แล้วคิดสูตรสำเร็จในการคำนวณความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกจากผลึกถึงได้กล่าวแล้ว
ในตอนต้นของบทที่ 2 แต่หลังจากนั้นค้นพบว่า ความเข้มที่เลี้ยวเบนออกมาเมื่อเกิดการถูกคลื่น
ธรรมชาติไม่สอดคล้องกับที่เป็นจริง กล่าวคือ ความเข้มเลี้ยวเบนที่คำนวณได้มากกว่าที่วัดได้
จริง แสดงว่า การที่คิดถึงอิทธิพลการถูกคลื่นของผลึกด้วยการคิดแต่เพียงปรากฏการณ์ทั้งสาม
แบบแล้วคิดสูตรสำเร็จออกมานั้นไม่เป็นการเพียงพอเสียแล้ว จะต้องมีการพิจารณาหรืออาจ
กล่าวว่า ต้องมีการถูกคลื่นหรือการทำให้รังสีเอ็กซ์บางส่วนหายไปแบบอื่นอีกที่ซ่อนเร้นอยู่และ
เป็นคำถามในเรื่องนี้ คาร์วิน (Darwin) (8) เป็นคนแรกที่นำปัญหานี้มาแก้ไขด้วยการคิด
คำนวณทางทฤษฎีที่อาศัยคณิตศาสตร์เข้าช่วย เขาเรียกอิทธิพลหรือปรากฏการณ์ที่ทำให้รังสีเอ็กซ์
บางส่วนหายไปโดยลักษณะนี้ว่า เอ็กซ์ทิงค์ชัน (Extinction) และพบว่าต้องคิดถึงอิทธิพล
นี้ด้วยเงื่อนไขที่เกี่ยวข้องกับความสมบูรณ์ของผลึก (perfection of crystal) ซึ่ง
ทำให้ต้องแยกคิดเป็น 2 กรณี คือ เอ็กซ์ทิงค์ชันปฐมภูมิ และเอ็กซ์ทิงค์ชันทุติยภูมิ

เพื่อความสะดวกในการทำความเข้าใจกับเรื่องราวของเอ็กซ์ทิงค์ชัน ในบทนี้จึง
ได้กล่าวถึงเรื่องใหญ่ 2 เรื่อง คือ เอ็กซ์ทิงค์ชัน ปฐมภูมิและทุติยภูมิ โดยจะเริ่มทบทวนถึง
ทฤษฎีเบื้องต้นที่นำมาใช้ตามลำดับ เริ่มจาก ทฤษฎีเฟรสเนลโซน (Fresnel - zone
theory) แล้วนำเอาทฤษฎีนี้มาพิจารณาหาแอมพลิจูด (amplitude) ของรังสีเอ็กซ์ที่สะท้อน
จากระนาบอะตอมระนาบเดียว ต่อจากนั้นจึงได้ขยายความคิดให้กว้างออกไปอีกด้วยการ
พิจารณาการสะท้อนของรังสีเอ็กซ์จากซุกของระนาบอะตอมที่ขนานกันจริงๆ โดยมีระยะระหว่าง
แต่ละระนาบเท่ากับผลึก หรือพิจารณาการเลี้ยวเบนจากผลึกสมบูรณ์นั่นเอง และเมื่อพิจารณา

มีลึที่เฟิด วิเฟลคชัน (multiple reflection) จากผลึกสมบูรณแล้ว เอ็กซทิงคชัน
 ปรุมณูมิ ก็เคยเินออกมาให้เห็น ในตอนสุดท้ายของบทนี้ ใค้กล่าวถึงการสะท้อนของรังสี
 เอ็กซจากผลึกโมเซอิก (mosaic crystal) ซึ่งในที่สุดใค้แสดงให้เห็นว่า ความเข้ม
 ของรังสีเอ็กซที่เล็วเบนออกมาจากผลึกโมเซอิกถูกทำให้ลดลงด้วยอิทธิพลของเอ็กซทิงคชัน
 ทุกิยณูมิ

4.1 เอ็กซทิงคชัน ปรุมณูมิ

เอ็กซทิงคชัน ปรุมณูมิ เกี่ยวข้องกับขบวนการแทรกสอด (interference)⁽³⁾
 ระหว่างรังสีเอ็กซที่สะท้อนกับระนาบการสะท้อนหลายครั้งกับรังสีเอ็กซที่สะท้อนครั้งเดียวหรือ
 อื่นๆ ซึ่งจะมีผลทำให้ความเข้มของรังสีเอ็กซที่เล็วเบนออกมาจากผลึกลดลงไปมากกว่าที่
 คึกการคูกกลืนแบบธรรมดาตามรูป 4-1 มีรังสีเอ็กซ 1 , 2 และ 3 สะท้อนที่ระนาบ



รูป 4-1 การสะท้อนของรังสีเอ็กซที่ทำให้เกิด เอ็กซทิงคชัน ปรุมณูมิ

การสะท้อน A , B และ C สะท้อนออกมาเป็น 1' , 2' และ 3' ตามลำดับ ที่พิเศษคือ 2''
 ที่เกิดจาก 2 สะท้อนที่ระนาบ B บางส่วนทะลุระนาบ A ออกไปเป็น 2' บางส่วนสะท้อนระนาบ
 A กลับลงมาสะท้อนกับระนาบ B อีกครั้งใค้เป็น 2'' เมื่อพิจารณาเฟสของรังสีเอ็กซที่สะท้อน
 หลายครั้งคือ 2'' จะพบว่า เฟสของมันจะเป็นไปในลักษณะที่จะทำให้ตัวมันเองไปหักล้างกับ 1' ,
 2' หรือ 3' ทั้งนี้เพราะ รังสีเอ็กซที่สะท้อนที่ระนาบการสะท้อนจะมีเฟสต่างไปจากเดิม $\pi/2$ ⁽⁹⁾
 สมมุติว่า ถ้าเฟสของ 1 , 2' และ 3 เป็น $n(2\pi)$ โดยที่ n เป็นเลขจำนวนเต็ม เมื่อ

สะท้อนแล้วจะกลายเป็น $1'$, $2'$ และ $3'$ ที่มีเฟสเป็น $n(2\pi) + \pi/2$ แต่ $2''$ จะมีเฟสเป็น $n(2\pi) + 3\pi/2$ เมื่อพิจารณาเฟสของรังสีเอ็กซ์ในลักษณะนี้จะเห็นว่า ความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาจะถูกทำให้ลดลงไปอีกโดย $2''$ การสะท้อนของรังสีเอ็กซ์แบบนี้เรียกว่า มัลติเฟล วิเฟลคชัน วิธีทางที่จะแก้ปัญหาคือการค้นหาค่าอะไรสักอย่างหนึ่งที่จะเป็นเครื่องมือสำหรับแก้ปัญหาคือ เอ็กซ์ทิงค์ชัน ปริมาณนี้มันมีหลักอยู่ว่า คำนวณความเข้มที่เลี้ยวเบนออกมาจากผลึกสมบูรณ์ในทิศทางหนึ่งอย่างตรงไปตรงมา ค่อยไปคำนวณความเข้มที่เลี้ยวเบนออกจากผลึกโดยคิคแบบ มัลติเฟล วิเฟลคชัน แล้วเปรียบเทียบผลที่ได้ทั้งสองกรณี ซึ่งในตอนสุดท้ายจะพบว่าเกิดมีแฟคเตอร์แก้ (correction facton) สำหรับ เอ็กซ์ทิงค์ชัน ปริมาณนี้ ขึ้น

4.1.1 ทฤษฎีเฟรสเนลโซน⁽⁹⁾ ก่อนที่จะไปถึงการคำนวณความเข้มที่เลี้ยวเบนออกมาจากผลึกสมบูรณ์ที่ประกอบด้วยระนาบอะตอมหรือระนาบการสะท้อนที่ขนานกันตลอดทั้งผลึกไม่ว่าจะคิคการสะท้อนในแบบโคคัทาม อันคัมแรกจะพิจารณาทฤษฎีเฟรสเนลโซน ซึ่งจะได้นำทฤษฎีนี้ไปใช้ในการพิจารณาการสะท้อนของรังสีเอ็กซ์จากระนาบอะตอม เพราะว่าทฤษฎีนี้มีความสะดวกและช่วยให้นักภาพการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากระนาบอะตอมได้ชัดเจน

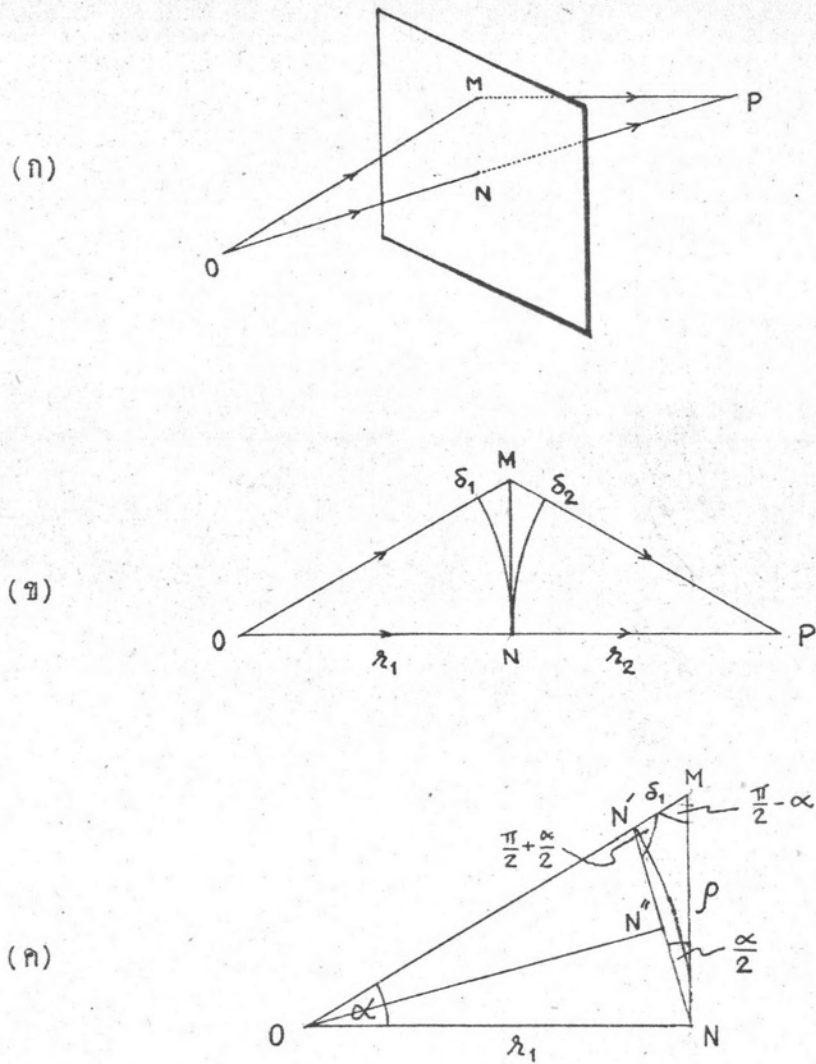
พิจารณารูป 4-2(ก) รังสีเอ็กซ์ถูกส่งออกจากแหล่งกำเนิด O ไปกระทบกับระนาบการสะท้อน โดยสมมุติให้ทุกๆจุดในระนาบการสะท้อนนี้ประพฤติตัวเป็นแหล่งกำเนิดที่จะส่งรังสีเอ็กซ์ออกมาใหม่ ทฤษฎีเฟรสเนลโซนจะพิจารณาผลลัพธ์ที่เกิดขึ้นที่จุด P จากรูป 4-2(ข) จะเห็นว่า ความยาว OMP มากกว่า ONP ประมาณ δ โดยที่

$$\delta = \delta_1 + \delta_2 \tag{4.1}$$

ขนาดของ δ_1 สามารถหาได้จากรูป 4-2(ค) ซึ่งแสดงเฉพาะด้านซ้ายของรูป 4-2(ข) โดยให้มุม $NOM = \alpha$ ลากคอร์ด (chord) NN' ตั้งฉากกับเส้นแบ่งครึ่งมุม NOM ที่ N'' จากสามเหลี่ยม NNM ใช้กฎของซายส์ (law of sines) จะได้

$$\delta_1 = \rho \frac{\sin(\alpha/2)}{\cos(\alpha/2)} = \rho \tan \frac{\alpha}{2} \tag{4.2}$$

จากสามเหลี่ยม ONN'' จะเห็นว่า



รูป 4-2 (ก) รังสีเอ็กซ์ตกกระทบกับระนาบการสะท้อนแล้วเลี้ยวเบนไปที่จุดๆหนึ่ง
 (ข) มองรูป (ก) ในระนาบของ OMP
 (ค) แสดงรายละเอียดทางด้านซ้ายมือของรูป (ข)

$$\tan \frac{\alpha}{2} = \frac{NN''}{r_1} = \frac{1}{2} \frac{NN'}{r_1}$$

ถ้าเป็นกรณีที่ α เล็กมากๆ จะได้ $\rho \approx NN'$

$$\therefore \tan \frac{\alpha}{2} = \frac{1}{2} \frac{\rho}{r_1} \quad (4.3)$$

จากสมการ (4.2) และ (4.3) จะได้

$$\delta_1 \approx \frac{\rho^2}{2r_1} \quad (4.4)$$

ในทำนองเดียวกันอาจแสดงได้ว่า

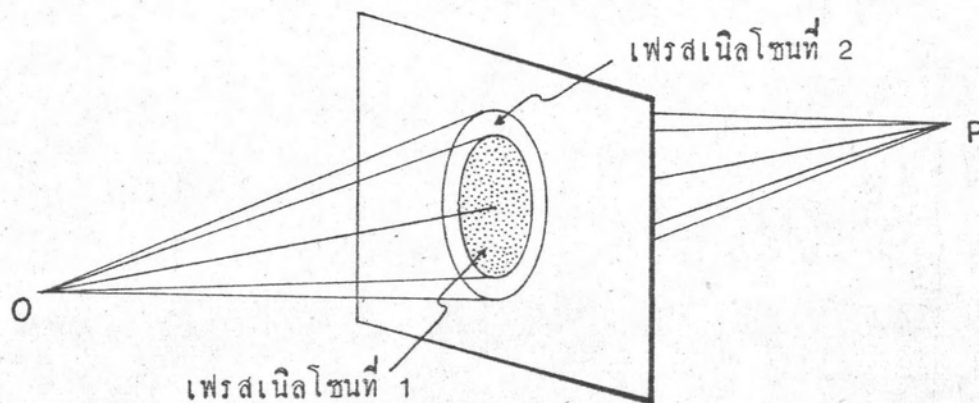
$$\delta_2 \approx \frac{\rho^2}{2r_2} \quad (4.5)$$

$$\delta \approx \frac{\rho^2}{2} \left(\frac{r_1 + r_2}{r_1 r_2} \right) \quad (4.6)$$

จากความสัมพันธ์ (4.6) จะเห็นว่า δ เป็นฟังก์ชันของ r_1 , r_2 และ ρ เมื่อระยะทางการสะท้อนตั้งฉากกับ OP จุดที่ให้ δ เท่ากันจะปรากฏบนระนาบการสะท้อนเป็นวงกลมที่มีรัศมี

$$\rho \approx \sqrt{2\delta \left(\frac{r_1 r_2}{r_1 + r_2} \right)} \quad (4.7)$$

สำหรับกรณีนี้ เฟรสเนลโซนที่ 1 (first Fresnel zone) จะนิยามว่า เป็นพื้นที่ของวงกลมซึ่งภายในวงกลมนั้นจะมี δ อยู่ระหว่าง 0 และ $\lambda/2$ เมื่อ λ เป็นความยาวคลื่นของรังสีเอ็กซ์ เฟรสเนลโซนที่ 2 (second Fresnel zone) นิยามว่า เป็นพื้นที่ของวงแหวนซึ่งภายในวงแหวนนั้นจะมี δ อยู่ระหว่าง $\lambda/2$ และ $2\lambda/2$ ดังรูป 4-3 ส่วน



รูป 4-3 แสดงเฟรสเนลโซนที่ 1 และ 2 บนระนาบการสะท้อน

เฟรสเนลโซนที่ n (n^{th} Fresnel zone) จะนิยามว่า เป็นพื้นที่วงแหวนซึ่งภายในวงแหวนนั้นมี δ อยู่ระหว่าง $(n-1)\lambda/2$ และ $n\lambda/2$ ดังนั้นตรงขอบนอกของเฟรสเนลโซนที่ n นี้จะได้

$$\delta_n = \frac{n\lambda}{2} \quad (4.8)$$

และรัศมีขอบนอกจะเป็น

$$\rho_n \approx \sqrt{\frac{r_1 r_2 n \lambda}{r_1 + r_2}} \quad (4.9)$$

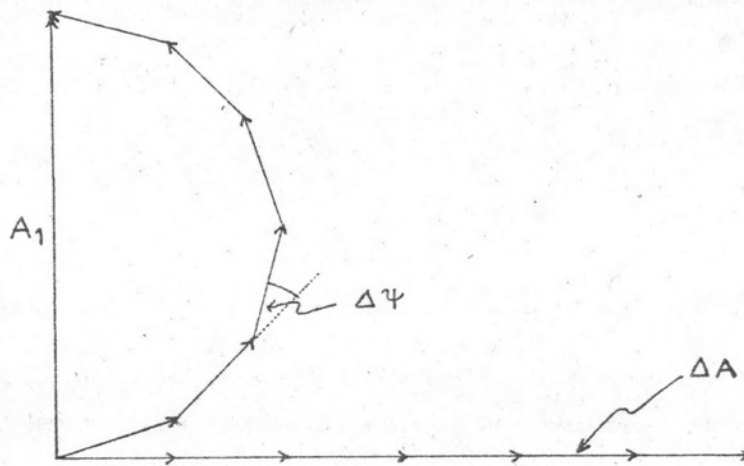
พื้นที่ของเฟรสเนลโซนที่ n คือ

$$\begin{aligned} \Delta_n &= \pi \rho_n^2 - \pi \rho_{n-1}^2 \\ &\approx \pi \lambda \left(\frac{r_1 r_2}{r_1 + r_2} \right) \end{aligned} \quad (4.10)$$

จะเห็นว่า พื้นที่ของเฟรสเนลโซนที่ n เป็นฟังก์ชันของ r_1, r_2 และ λ ซึ่งถ้าให้ r_1, r_2 และ λ คงที่ จะได้ว่า ทุกๆ เฟรสเนลโซนมีพื้นที่โดยประมาณเท่ากัน ในแต่ละเฟรสเนลโซนสามารถแบ่งออกเป็นโซนย่อย (zonelet) ใกล้เคียง โดยที่ขอบของโซนย่อยเหล่านี้มี δ เป็นสัดส่วนกับ $\lambda/2$ ในทำนองเดียวกัน จะแสดงได้ว่า พื้นที่ของทุกๆ โซนย่อยเท่ากัน แต่ทั้งนี้ต้องอาศัยการประมาณความสัมพันธ์ (4.3) อาพันธ์ที่ออกจากแหล่งกำเนิด 0 มาถึงโซนย่อยต่างๆ จะเท่ากัน และโซนย่อยก็จะกระเจิง (scatter) รั้งสีเอ็กซ์ให้เหมือนกัน แต่เมื่อมาถึงจุด P จะมีเฟสต่างกัน เฟสของรั้งสีเอ็กซ์ที่ออกมาจากโซนย่อยหนึ่งมาถึงจุด P จะต่างกับเฟสของรั้งสีเอ็กซ์ที่ออกมาจากโซนย่อยข้างเคียงมาถึงจุด P เป็น

$$\Delta\psi = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \cdot 2\pi \quad (4.11)$$

โดยที่ $\Delta\psi$ คือ ความแตกต่างทางเฟส (phase difference) ของรั้งสีเอ็กซ์ที่ออกมาจากโซนย่อยหนึ่งกับโซนย่อยข้างเคียงมาถึงจุด P ถ้าวัดเฟรสเนลโซนที่ 1 อาจพิจารณาผลลัพท์ของการกระเจิงรั้งสีเอ็กซ์เนื่องจากโซนย่อยต่างๆ ในเฟรสเนลโซนที่ 1 ที่จุด P ได้จาก



รูป 4-4 แผนผังแสดงผลลัพธ์ของอำนาจที่กระเจิงจากโซนย่อยของเฟรสเนลโซนที่ 1 เมื่อเฟสคงเดิมและเมื่อเฟสเปลี่ยนไป

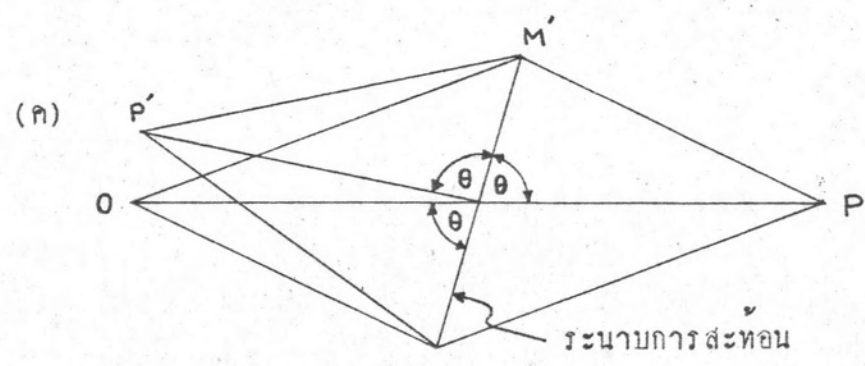
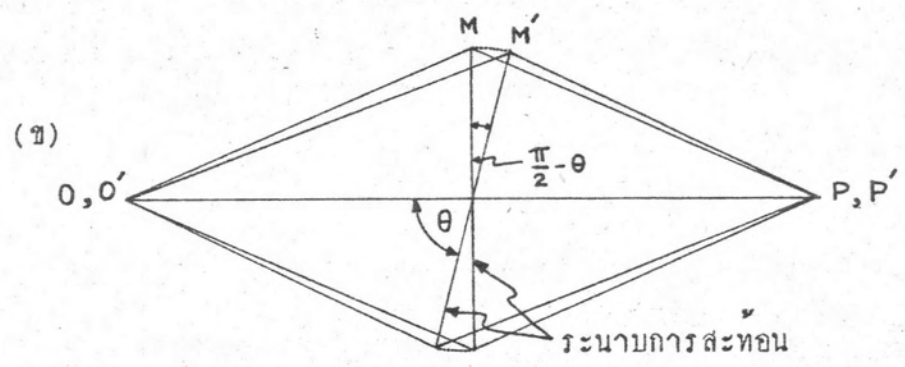
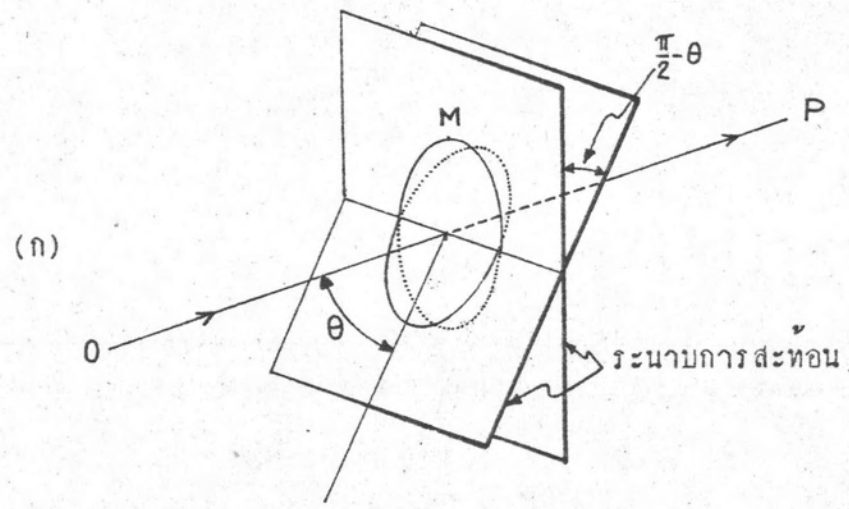
อำนาจที่ออกจากโซนย่อยต่างๆในเฟรสเนลโซนที่ 1 มาถึงจุด P จะมีเฟสต่างกัน และเพิ่มขึ้นอย่างมีระเบียบด้วยขนาดตามสมการ (4.11) เฟสของอำนาจที่ออกจากโซนย่อยแรกจะต่างกับเฟสของอำนาจที่ออกจากโซนย่อยสุดท้ายของเฟรสเนลโซนที่ 1 เป็น

$$\Delta \psi = \frac{(1/2) \lambda}{\lambda} \cdot 2\pi = \pi$$

ถ้าโซนย่อยที่แบ่งนั้นเล็กมากจนขนาดของความแตกต่างทางเฟสระหว่างโซนย่อยที่อยู่ข้างเคียงกันเป็น $d\psi$ อำพันธ์ที่เห็นแยกเป็นส่วนๆ ดังรูป 4-4 นั้นจะต่อเนื่องกันกลายเป็นส่วนของครึ่งวงกลม ถ้า ΔA เป็นอำนาจที่กระเจิงจากโซนย่อยต่างๆในเฟรสเนลโซนที่ 1 โดยที่เฟสเท่ากันตลอดทุกโซนย่อย และ A_1 เป็นอำนาจผลลัพธ์ที่กระเจิงจากโซนย่อยต่างๆในเฟรสเนลโซนที่ 1 โดยที่เฟสของทุกโซนย่อยต่างกันตามสมการ(4.11) จะได้

$$\frac{A_1}{\sum \Delta A} = \frac{\text{เส้นผ่านศูนย์กลางของวงกลม}}{\frac{1}{2} (\text{เส้นรอบวงของวงกลม})} = \frac{2}{\pi}$$

$$A_1 = \frac{2}{\pi} \sum \Delta A \quad (4.12)$$



รูป 4-5 (ก) รังสีเอ็กซ์ตกกระทบบรรนาบการสะท้อนโดยเอียงทำมุม θ กับ
 ระนาบการสะท้อน
 (ข) มองรูป (ก) ในระนาบ OMP
 (ค) แสดงสมมาตรของการสะท้อนเทียบกับระนาบการสะท้อน

ยิ่งไปกว่านั้น สามารถแสดงได้ว่า พื้นที่ของโซนย่อยจะลดลงเมื่อจำนวนโซนย่อยเพิ่มขึ้น ซึ่ง ตอนแรกจำนวนโซนย่อยจะเพิ่มขึ้นอย่างช้าๆ แต่ต่อไปจะเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็ว ฉะนั้น เมื่ออำพันของโซนย่อยลดลง จะเป็นเหตุให้ A_1 ตามรูป 4-4 ลดลงในลักษณะที่บิดเป็นเกลียวเข้าหาศูนย์กลางของวงกลม A_1 จะลดลงเร็วมากเมื่อจำนวนโซนย่อยมาก ซึ่งอาจสรุปเป็นทฤษฎีได้ว่า ผลลัพธ์ของอำพันที่เนื่องจากเฟรสเนลโซนทั้งหมดจะเป็นครึ่งหนึ่งของอำพัน ที่เนื่องจากเฟรสเนลโซนที่ 1

$$A_p = \frac{1}{2} A_{\text{zone 1}} \quad (4.13)$$

เมื่อ A_p คือ อำพัน ที่กระเจิงจากเฟรสเนลโซนทั้งหมด

$A_{\text{zone 1}}$ คือ อำพัน ที่กระเจิงจากเฟรสเนลโซนที่ 1

สมมติว่า ระบายการสะท้อนเฉียงทำมุม θ กับ OP ตามรูป 4-5(ก) จะเห็นภาพฉาย (projection) ของวงกลมในระบายการสะท้อนที่ตั้งฉากกับ OP จะเป็นรูปวงรี (ellipse) ในระบายการสะท้อนที่เฉียงทำมุม θ กับเส้น OP อย่างไรก็ตาม ทั้งวงกลมและวงรีก็มี δ ประมาณเท่ากันเพราะตามรูป 4-5(ข) $OMP \approx O'M'P'$ พื้นที่ของเฟรสเนลโซนบนระบายเฉียงสัมพันธ์กับระบายตั้งฉากดังนี้

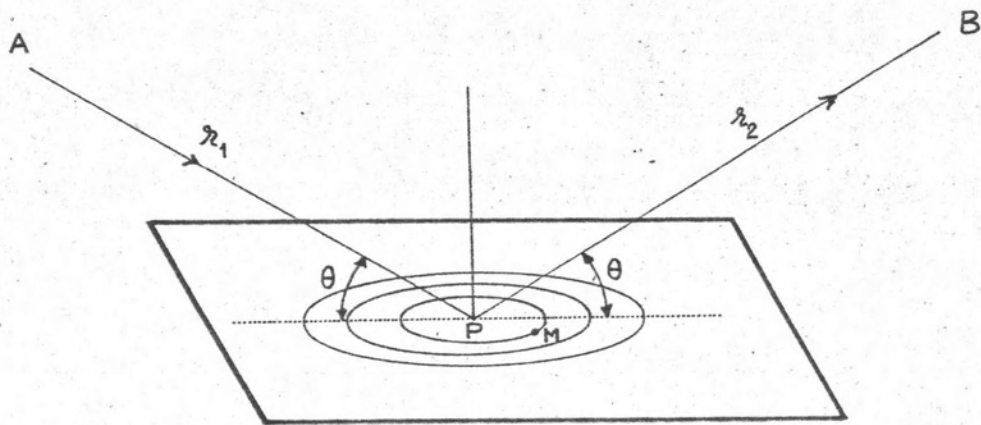
$$\zeta_{\text{tilted}} = \frac{\zeta_{\text{normal}}}{\cos(\frac{\pi}{2} - \theta)} = \frac{\zeta_{\text{normal}}}{\sin \theta} \quad (4.14)$$

โดยที่ ζ_{tilted} คือ พื้นที่ของเฟรสเนลโซนบนระบายเฉียง และ ζ_{normal} คือ พื้นที่ของเฟรสเนลโซนบนระบายตั้งฉาก ดังนั้น จากสมการ (4.10) กับ (4.14) จะได้พื้นที่ของเฟรสเนลโซนในระบายเฉียงเป็น

$$\zeta = \frac{\pi r_1 r_2}{r_1 + r_2} \cdot \frac{\lambda}{\sin \theta} \quad (4.15)$$

เนื่องจากว่า รังสีเอ็กซ์ที่เข้ามากระทบกับระบาย และรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนจากระบายการสะท้อนมีสมมาตรเมื่อเทียบกับระบายการสะท้อนตั้งรูป 4-5(ค) ดังนั้น สมการ (4.15) จึงมีประโยชน์โดยตรงต่อการพิจารณาการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากระบายการสะท้อน

4.1.2 อำพันที่สะท้อนโดยระนาบอะตอม⁽¹⁰⁾ (The amplitude reflected by a plane sheet of atoms) ถ้ามองลึกเข้าไปในโครงสร้าง 3 มิติของผลึกจะพบว่าผลึกประกอบด้วยระนาบที่สะท้อนรังสีเอ็กซ์ซึ่งวางขนานกันอยู่มากมาย โดยที่ระนาบเหล่านั้นประกอบด้วยอะตอมเต็มไปหมด และอะตอมประกอบด้วยอิเล็กตรอนซึ่งเป็นตัวการสำคัญในการกระเจิงรังสีเอ็กซ์ ดังนั้นในเบื้องต้นนี้ จึงมีความจำเป็นที่จะต้องคำนวณความเข้มที่สะท้อนหรือเลี้ยวเบนจากระนาบอะตอมเพียงระนาบเดียวก่อน โดยจะได้นำทฤษฎีเฟรสเนลโซนมาใช้



รูป 4-6 แสดงรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบและเลี้ยวเบนบนระนาบอะตอม

พิจารณารูป 4-6 สมมุติว่า A เป็นแหล่งกำเนิดของรังสีเอ็กซ์ และ B เป็นจุดที่รังสีเอ็กซ์ที่ถูกส่งจาก A มายังระนาบอะตอมเลี้ยวเบนไป ให้ระนาบ APB ตั้งฉากกับระนาบอะตอม และให้ AP กับ PB ทำมุม θ กับระนาบของอะตอม M เป็นจุดที่อยู่บนเส้นรอบวงของวงรีวงแรกที่อยู่บนระนาบอะตอม โดยที่ AMB ยาวมากกว่า APB อยู่ $\lambda/2$ ดังนั้นความทฤษฎีเฟรสเนลโซน จุด M จะอยู่บนขอบของเฟรสเนลโซนที่ 1 ที่สอดคล้องกับจุด A และ B จากสมการ (4.15) จะได้ว่าพื้นที่ของเฟรสเนลโซนที่ 1 เป็น

$$\frac{\pi r_1 r_2}{r_1 + r_2} \frac{\lambda}{\sin \theta} \quad (4.16)$$

โดยในที่นี้ r_1 และ r_2 คือ ระยะ AP และ BP ตามลำดับ มีค่าตามหนึ่งที่น่าสนใจคือ

การนำเอาทฤษฎีเฟรสเนลโซนมาใช้กับการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากระนาบอะตอมในผลึกนั้นจะผิดหรือไม่ เพราะ จากทฤษฎีเฟรสเนลโซนจะสังเกตเห็นว่า จุดที่ทำหน้าที่กระเจิงรังสีเอ็กซ์บนระนาบการสะท้อนจะต้องมีมากมายและต้องมีการกระจายอย่างต่อเนื่อง (continuous-distribution) สมมติว่า r_2 เป็น 1 เซนติเมตร และ r_1 โทมาก ๆ พื้นที่ของเฟรสเนลโซนที่ 1 ตามสมการ (4.16) จะกลายเป็น $\pi\lambda/\sin\theta$ ถ้าคิดกรณีที $\sin\theta = 1$ หมายถึงกรณีทีพื้นที่เล็กที่สุด และ λ ประมาณ 10^{-8} เซนติเมตร พื้นที่ของเฟรสเนลโซนที่ 1 จะประมาณ 3×10^{-8} ตารางเซนติเมตร พื้นที่ขนาดนี้ดูเหมือนว่าจะเล็กมาก แต่โดยเฉลี่ยแล้วใน 1 ตารางเซนติเมตรของระนาบอะตอมจะมีอะตอมประมาณ 10^{15} อะตอม ดังนั้นในเฟรสเนลโซนที่ 1 จะมีอะตอมประมาณ 3×10^7 อะตอม หรือ 30 ล้านอะตอม ฉะนั้นจึงอาจกล่าวได้ว่า จำนวนอะตอมในระนาบอะตอมมีมากมายและมีการกระจายอย่างต่อเนื่อง การนำทฤษฎีเฟรสเนลโซนมาใช้จึงปราศจากข้อสงสัย

ให้ n เป็นจำนวนอะตอมต่อหนึ่งหน่วยพื้นที่ A เป็นอำพันที่หนึ่งหน่วยระยะทางของรังสีเอ็กซ์ที่กระเจิงจากอะตอมตัวเดียวเมื่ออำพัน ของรังสีเอ็กซ์ที่ออกจากแหล่งกำเนิดเป็นหนึ่งหน่วย ถ้าคิดว่า อะตอมทุกตัวที่อยู่ในเฟรสเนลโซนที่ 1 อยู่ห่างจากจุด B เป็นระยะ r_2 ดังนั้นอะตอมแต่ละตัวจะให้อำพัน ที่มีขนาด A/r_2 เมื่อมาถึงจุด B ถ้าให้ s_u เป็นอำพันของรังสีเอ็กซ์ที่กระเจิงจากเฟรสเนลโซนที่ 1 ที่มาถึงจุด B โดยอาศัยสมการ (4.12) และ (4.16) จะได้

$$s_u = \frac{2 n \pi r_1 r_2}{\pi r_1 + r_2} \cdot \frac{\lambda}{\sin\theta} \cdot \frac{A}{r_2}$$

$$= \frac{2nr_1}{r_1 + r_2} \frac{\lambda A}{\sin \theta} \tag{4.17}$$

ให้ s_p เป็นอำพันของรังสีเอ็กซ์ที่กระเจิงจากตลอดทั้งระนาบอะตอมมายังจุด B โดยอาศัยสมการ (4.13) และ (4.17) จะได้

$$s_p = \frac{1}{2} s_u = \frac{nr_1}{r_1+r_2} \cdot \frac{\lambda A}{\sin \theta} \tag{4.18}$$

ถ้าหากรังสีเอ็กซ์ที่ออกจากแหล่งกำเนิดมาถึงระนาบอะตอมเป็นระนาบคลื่น (plane wave) แสดงว่า r_1 โทดกว่า r_2 มาก ดังนั้นอาจเขียนสมการ (4.18) ใหม่ได้ดังนี้

$$S_p = \frac{n\lambda A}{\sin \theta} \quad (4.19)$$

ให้ q เป็น อัตราส่วนของอำพันของรังสีเอ็กซ์ที่สะท้อนจากระนาบอะตอมมายังจุด B กับอำพันของรังสีเอ็กซ์ที่ออกจากแหล่งกำเนิด จะได้

$$q = \frac{n\lambda A}{\sin \theta} \quad (4.20)$$

เนื่องจากรังสีเอ็กซ์เป็นคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า และอิเล็กตรอนเป็นอนุภาคที่มีประจุ อิเล็กตรอนจะถูกสนามไฟฟ้าของรังสีเอ็กซ์สั่นเมื่อนำอิเล็กตรอนไปวางไว้ในทางเดินของรังสีเอ็กซ์ ดังนั้น อิเล็กตรอนจึงแผ่รังสีเอ็กซ์ออกมาใหม่รอบตัวทุกทิศทุกทาง ความถี่ของการแผ่รังสีแม่เหล็กไฟฟ้าของประจุที่มีความเร่ง จะสามารถคำนวณอำพันเฉลี่ยที่ออกมารอบอิเล็กตรอนที่ถูกเร่งด้วยสนามไฟฟ้าของรังสีเอ็กซ์ได้เป็น

$$\bar{A} = -\frac{A_0 e^2}{r m c^2} \quad (4.21)$$

โดยที่ \bar{A} คือ อำพันเฉลี่ยของรังสีเอ็กซ์ที่กระเจิงจากอิเล็กตรอนอิสระที่ระยะห่างจากอิเล็กตรอนเป็น r A_0 เป็น อำพันของรังสีเอ็กซ์ที่ออกจากแหล่งกำเนิด e เป็น ประจุของอิเล็กตรอน m เป็น มวลของอิเล็กตรอน และ c เป็น ความเร็วของแสง ดังนั้น สำหรับกรณีที่กำลังพิจารณาจะได้

$$\bar{A} = -\frac{e^2}{m c^2} \quad (4.22)$$

จากนิยามของ แฟคเตอร์การกระเจิงของอะตอม (atomic scattering factor) จะได้

$$f = \frac{A}{\bar{A}} \quad (4.23)$$

โดยที่ f คือ แพลกเตอร์การกระเจิงของอะตอม จากสมการ (4.20) , (4.22) และ (4.23) จะได้

$$q = -\frac{n \lambda}{\sin \theta} f \frac{e^2}{mc^2} \quad (4.24)$$

ค่า q ตามสมการ (4.24) นี้ยังไม่ค่อยมีประโยชน์นัก เพราะในคอนทอปนี่จะพิจารณาการสะท้อนของรังสีเอ็กซ์จากระนาบอะตอมหลายๆระนาบที่วางขนานกันในผลึกโดยที่แต่ละระนาบวางห่างกันเป็นระยะ a เท่ากันตลอด ดังนั้นถ้า N เป็นจำนวนอะตอมในหนึ่งหน่วยปริมาตร จะได้ $n = aN$ สมการ (4.24) จึงเปลี่ยนรูปเป็น

$$q = -\frac{Na \lambda}{\sin \theta} f \frac{e^2}{mc^2} \quad (4.25)$$

ปกติแล้ว ในผลึกประกอบด้วยอะตอมมากมายหลายชนิด แนวความคิดที่กำลังพิจารณาดังจำนวนอะตอมในหนึ่งหน่วยปริมาตรนั้นดูออกจะยุ่งยากเกินไป จึงเปลี่ยนมาคิดถึงจำนวนหน่วยกลุ่ม (unit group) ที่ให้การสะท้อนในหนึ่งหน่วยปริมาตร ถ้าในแต่ละหน่วยกลุ่มมีอะตอม J อะตอม โดยนิยามของแพลกเตอร์โครงสร้างจะได้

$$F = \sum_{j=1}^J f_j e^{2\pi i \phi_j} \quad (4.26)$$

เมื่อ F เป็นแพลกเตอร์โครงสร้าง และ ϕ_j เป็นเฟสของอะตอมตัวที่ j ดังนั้น เมื่อ N เป็นจำนวนหน่วยกลุ่มที่ให้การสะท้อนในหนึ่งหน่วยปริมาตรแล้ว จะสามารถแทน f ด้วย F ได้

$$q = -\frac{Na \lambda}{\sin \theta} F \frac{e^2}{mc^2} \quad (4.27)$$

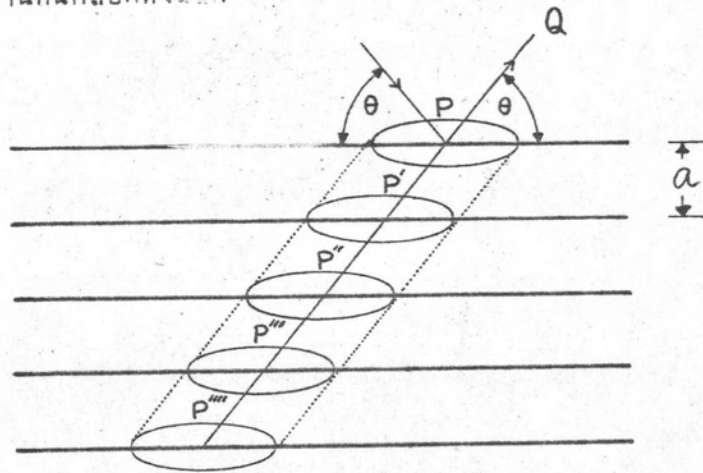
q นี้อาจเรียกว่า สัมประสิทธิ์การสะท้อน (reflection coefficient) ซึ่งเป็นค่าที่แสดงถึง อัตราส่วนของอำพัน ของรังสีเอ็กซ์ที่สะท้อนจากระนาบอะตอมกับอำพัน ของรังสีเอ็กซ์ที่ออกจากแหล่งกำเนิด การเขียน q ตามสมการ (4.27) นั้น ยังไม่ได้คิดถึง ความแตกต่างทางเฟสของอำพัน ของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบระนาบอะตอมกับที่สะท้อนจากระนาบอะตอม ซึ่งจะมีเฟสต่างกันอยู่ $\pi/2$ ดังนั้น เมื่อคำนึงถึงความแตกต่างทางเฟสแล้ว

สมการ (4.27) จะเขียนได้เป็น

$$-iq = i \left(\frac{Na\lambda}{\sin\theta} \right) F \left(\frac{e^2}{mc^2} \right) \quad (4.28)$$

สัมประสิทธิ์การสะท้อนตามสมการ (4.28) จะมีประโยชน์สำหรับการศึกษาในเรื่องการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกสมบูรณ์และผลึกโมเซอิกต่อไป จึงไม่จำเป็นต้องมองในแง่ของความเข้มของรังสีเอ็กซ์โดยตรง

4.1.3 การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกสมบูรณ์ ⁽¹⁰⁾ ในหัวข้อ 4.1.2 ได้กล่าวถึง การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากระนาบอะตอมเพียงระนาบเดียวโดยอาศัยทฤษฎีเฟรสเนลโซน และหลักการแผ่รังสีแม่เหล็กไฟฟ้าของประจุที่มีความเร่ง ได้คำนวณหาอำนาจของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบน โดยในตอนสุดท้ายได้แสดงไว้ในรูปของ สัมประสิทธิ์การสะท้อน ดังนั้น ในหัวข้อ 4.1.3 นี้จะได้อาศัยความหมายทางฟิสิกส์และสูตรของสัมประสิทธิ์การสะท้อน มาช่วยในการพิจารณาความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนจากผลึกสมบูรณ์ หรือเลี้ยวเบนจากชุดของระนาบอะตอมที่วางขนานกันตลอดทั้งผลึก

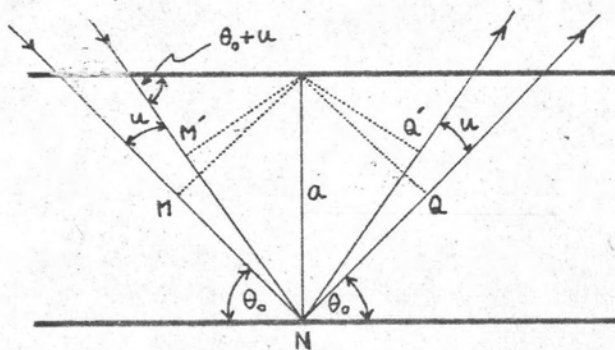


รูป 4-7 แสดงการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกสมบูรณ์

พิจารณารูป 4-7 รังสีเอ็กซ์ถูกส่งออกจากแหล่งกำเนิดทำมุม θ กับระนาบอะตอม ที่มีทั้งหมด p ระนาบวางขนานกันตลอด ระยะห่างระหว่างระนาบเท่ากันเป็น a จะพิจารณาความเข้มที่เลี้ยวเบนมาที่จุด Q เมื่อดูเฉพาะระนาบอะตอมที่ผิวหรือระนาบบนสุด

รังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนมาถึงจุด Q จะเนื่องมาจากพื้นที่รอบๆจุด P ถ้าคิดการเลี้ยวเบนจาก
ทุกระนาบ รังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนมายังจุด Q จะเนื่องมาจากพื้นที่รอบๆจุด P, P', P'', ...

จากสมการ (4.28) ถ้าทางขวามือคูณด้วย p ซึ่งเป็นจำนวนระนาบอะตอมแล้ว
q จะเป็นสัมประสิทธิ์การสะท้อนของ p ระนาบ จะเห็นว่า q^2 ในที่นี้คือ อัตราส่วน
ของความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนจาก p ระนาบกับที่ออกจากแหล่งกำเนิด หรือเป็นค่า
ที่แสดงถึงประสิทธิภาพของการสะท้อน (reflecting efficiency) ของผลึกสมบูรณ์
ชิ้นเล็กๆที่ประกอบด้วยระนาบอะตอม p ระนาบขนานกันตลอด โชคดีที่ว่า การวัดค่า q^2
ในกรณีนี้ในแง่ของการทดลองแล้วจะไม่เกิดประโยชน์เลย เหตุผลที่สำคัญคือ q^2 ที่ได้มานี้
ได้มาจากการที่คิดว่าผลึกประกอบด้วยหน่วยกลุ่มที่ขนานกันอย่างแท้จริงซึ่งเป็นผลึกชนิดที่เรียกว่า
ผลึกสมบูรณ์ในอุดมคติ (ideally perfect crystal) แต่ว่า ในผลึกจริงๆมันจะต่าง
จากที่คิดเอาไว้ กล่าวคือ หน่วยกลุ่มทั้งหลายไม่ขนานกันจริง มีบางระนาบอะตอมที่ไม่ขนานกับ
ระนาบอื่นๆ ดังนั้น จึงต้องมีการจัดผลึกเพื่อเปิดโอกาสให้ทุกๆระนาบอะตอมได้เข้าสู่เงื่อนไข
การสะท้อนของแบรกก์ (Bragg condition) ทำให้การวัดค่าประสิทธิภาพของการสะท้อน
ต้องรวมเอาการสะท้อนที่อยู่ในตำแหน่งใกล้เคียงกับมุมที่สอดคล้องตามเงื่อนไขของแบรกก์ที่กำลัง
พิจารณาเข้าไปด้วย



รูป 4-8 แสดงการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จาก
ผลึกสมบูรณ์ที่มุมการสะท้อน θ_0 และ
มุมข้างเคียง $\theta_0 + u$

พิจารณาการสะท้อนของรังสีเอ็กซ์จะเห็นว่า ถ้าการสะท้อนเกิดขึ้นที่มุม θ_0 ที่
สอดคล้องตามเงื่อนไขการสะท้อนของแบรกก์ $n\lambda = 2a\sin\theta_0$ แล้วการสะท้อนที่เกิดขึ้นขณะนั้น
จะให้ความเข้มสูงสุดเมื่อเปรียบเทียบกับค่าแห่งใกล้เคียงรอบๆ สมมุติว่า ผลึกจัดตัวต่างไม่

จากเดิมเป็นมุม u เล็กๆ ตามรูป 4-8 ขณะนี้ระนาบจะสะท้อนรังสีเอ็กซ์ที่มุม $\theta_0 + u$ และเกิดความแตกต่างของทางเดินคลื่น (path difference) เป็น MNQ ซึ่งเดิมเป็น MNQ โดยทั่วไปจะสามารถคำนวณความยาวของทางเดินคลื่น (path length) เป็น

$$p = 2a \sin \theta$$

โดย p เป็นความยาวของทางเดินคลื่น เมื่อพิจารณาถึงการเปลี่ยนแปลงของ p ที่เนื่องจากการเปลี่ยนแปลงของ θ จะได้

$$\frac{dp}{d\theta} = 2a \cos \theta$$

หรือ $\Delta p = 2a \Delta \theta \cos \theta$

ดังนั้น เมื่อพิจารณาถึงความแตกต่างทางเฟสที่เปลี่ยนไปตาม θ จะได้

$$\begin{aligned} \delta &= k \Delta p = 2ka u \cos \theta \\ &= 2Bu \end{aligned} \quad (4.29)$$

โดยในที่นี้ δ คือ เฟสที่เปลี่ยนไป k มีค่าเป็น $2\pi/\lambda$ ส่วน $\Delta \theta$ คือ u และ $B = ka \cos \theta$.

กลับไปพิจารณาการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกสมบูรณ์ตามรูป 4-7 ภายใต้อสมมุติฐานที่ว่า ผลึกบางไม่เกิดการหักเหและไม่มีหักเห (refraction) ของรังสีเอ็กซ์เมื่อเดินทางเข้าไปในผลึก และนำเอาความคิดที่เกี่ยวกับความไม่ขนานกันของบางระนาบอะตอมที่ทำให้มีการเปลี่ยนแปลงของเฟสเป็น δ รวมเข้าไปด้วย จะสามารถคำนวณอำนาจที่เลี้ยวเบนจากระนาบอะตอมทั้งหมด p ระนาบมายังจุด Q ได้เป็น

$$\frac{S_0}{T_0} = -iq (1 + e^{-i\delta} + \dots + e^{-(p-1)i\delta}) \quad (4.30)$$

เมื่อ T_0 และ S_0 คือ อำพัน ของรังสีเอ็กซ์ที่ออกจากแหล่งกำเนิด และที่เลี้ยวเบนจากระนาบอะตอม p ระนาบมายังจุด Q ตามลำดับ δ เป็นเฟสของรังสีเอ็กซ์ที่เปลี่ยนแปลงไปเมื่อสะท้อนกับระนาบอะตอมที่ต่างระดับกันมีค่าตามสมการ (4.29) โดยการรวมเทอมในวงเล็บทางขวามือของสมการ (4.30) จะได้

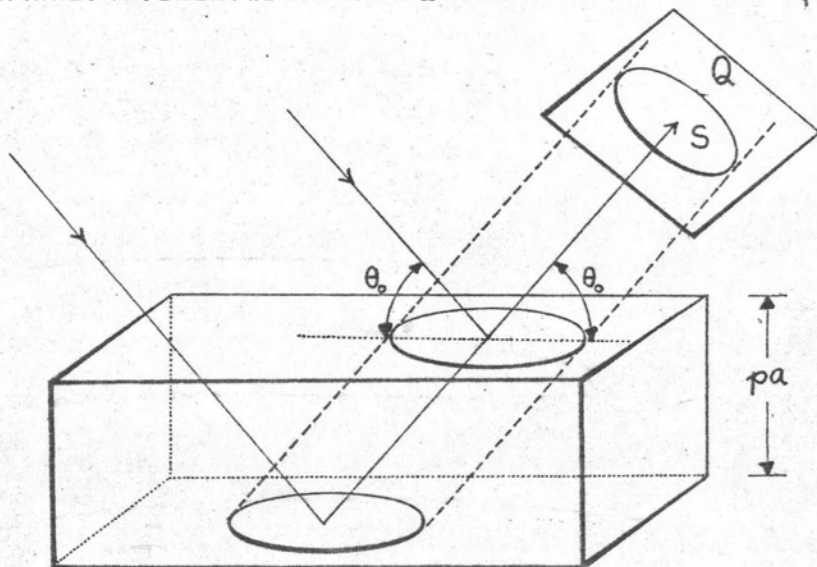
$$\frac{S_o}{T_o} = -iq \frac{1 - e^{-ip\delta}}{1 - e^{-i\delta}} \quad (4.31)$$

คูณสมการ (4.31) ด้วยปริมาณเชิงซ้อนสังยุค (conjugate complex quantity)
ของมันแล้วแทน δ ด้วย 2Bu จะได้

$$\frac{I_u}{I_o} = \frac{|S_o|^2}{|T_o|^2} = q^2 \frac{\sin^2(p\text{Bu})}{\sin^2(\text{Bu})} \quad (4.32)$$

โดย I_u และ I_o เป็นความเข้มหรือพลังงานที่ตกลงบน 1 ตารางเซนติเมตร ใน 1 วินาที
ของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนและที่ตกกระทบผลึกตามลำดับ ในทางปฏิบัติ ผลึกหรือระนาบอะตอม
จะถูกหมุนด้วยความเร็วเชิงมุม (angular velocity) คงที่ ω เรเดียนต่อวินาที
(radian / second) รอบแกนที่ตั้งฉากกับรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบ รังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบน
ออกมาจากผลึกไปตกลงบนฟิล์ม เกิดขึ้นในขณะที่ระนาบของอะตอมเคลื่อนที่ผ่านตั้งแต่ตำแหน่ง
ข้างเคียงไปจนถึงตำแหน่งที่สอดคล้องกับมุม θ_o จริงๆ

พิจารณารูป 4-9 ให้ S เป็นพื้นที่เล็กๆที่ตั้งฉากกับรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบน พื้นที่
นี้จะไม่ตั้งฉากกับรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนเมื่อ u เปลี่ยน ถ้าความเร็วเชิงมุมในการหมุนผลึก



รูป 4-9 แสดงการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกสมบูรณ์
ที่ประกอบด้วยระนาบอะตอม p ระนาบไปยังจุด Q

เป็น ω ดังนั้น ระบายอะคอมจะหมุนผ่านมุม du ค่ายเวลา du / ω พลังงานทั้งหมดของ
รังสีเอ็กซ์ที่มาถึงพื้นที่ S ในเวลา du / ω ให้เป็น dE' โดยจะเท่ากับ ความเข้มที่เลี้ยวเบน
คูณกับพื้นที่ S คูณกับเวลา du / ω

$$dE' = I_u S \frac{du}{\omega} \quad (4.33)$$

จากสมการ (4.32) และ (4.33) จะได้

$$dE' = q^2 I_0 S \frac{\sin^2(pBu)}{\sin^2(Bu)} \frac{du}{\omega} \quad (4.34)$$

ดังนั้น พลังงานทั้งหมดของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนจากทรงกระบอกเล็กๆของผลึกสมบูรณ์ไปยัง
พื้นที่ S ในขณะที่ระบายอะคอมหมุนผ่านมุม θ_0 เป็น

$$E' = \frac{q^2 I_0 S}{\omega} \int \frac{\sin^2(pBu)}{\sin^2(Bu)} du \quad (4.35)$$

ในสมการ (4.35) น้อยมาก ถือได้ว่า q^2 คงที่และอาจให้ $\sin(Bu) = Bu$ ได้ ดังนั้น
สมการ (4.35) จะกลายเป็น

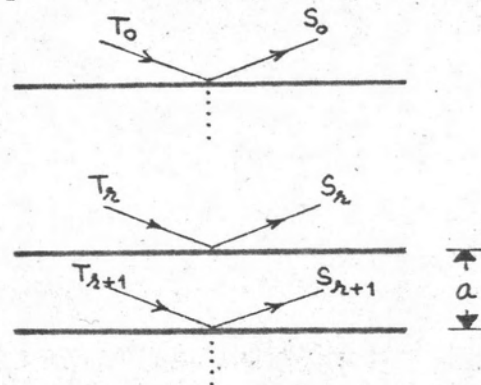
$$\begin{aligned} E' &= \frac{q^2 I_0 S}{\omega} \int \frac{\sin^2(pBu)}{(Bu)^2} du \\ &= \frac{q^2 I_0 S p}{\omega B} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 \chi}{\chi} d\chi \quad ; \chi = pBu \\ &= \frac{q^2 I_0 S p}{\omega B} \pi \end{aligned} \quad (4.36)$$

ลิมิตที่แน่นอนของอินทิกรัลในสมการ (4.36) นั้น ไม่มีความสำคัญอะไรทั้งนี้เพราะ ฟังก์ชัน
 $(\sin^2 \chi) / \chi^2$ มีค่าพอที่จะหาได้เมื่อ χ มีค่าน้อยๆเท่านั้น ดังนั้น เพื่อความสะดวกจึงได้
เลือกใช้ลิมิตจาก $-\infty$ ถึง $+\infty$ เขียนสมการ (4.36) ใหม่เป็น

$$\frac{E'\omega}{I_0} = \frac{Sq\pi}{ka \cos \theta_0} \cdot pq \tag{4.37}$$

$E'\omega/I_0$ เรียกว่า อินทิเกรต รีเฟลคชัน (integrated reflection) เป็นปริมาณที่กำหนดขึ้นเพื่อความสะดวกในการพิจารณาการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากผลึก (8,10)

4.1.4 มัลติเฟิล รีเฟลคชัน จากผลึกสมบูรณ์ ความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนจากระนาบอะตอมที่วางขนานกันหลายระนาบโดยไม่คิดถึงการดูดกลืนและการหักเหของรังสีเอ็กซ์สามารถพิจารณาได้ในรูปของ อินทิเกรต รีเฟลคชัน ตามสมการ (4.37) แต่นั่นเป็นการคิดเฉพาะที่เนื่องมาจากทรงระบอบเล็กๆของผลึกเท่านั้น ในหัวข้อนี้จะได้พิจารณา อินทิเกรต รีเฟลคชัน เหมือนกันแต่จะเป็นในกรณีของ มัลติเฟิล รีเฟลคชันจากผลึกสมบูรณ์ อันเป็นสาเหตุที่ทำให้เกิด เอ็กซ์ทิงค์ชันปฐมภูมิ



รูป 4-10 แสดง มัลติเฟิล รีเฟลคชันของรังสีเอ็กซ์จากผลึกสมบูรณ์

จากรูป 4-10 ให้ระนาบของอะตอมมี p ระนาบวางขนานกันห่างกันเป็นระยะ a เท่าๆกัน S_r และ T_r เป็นอำนาจของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบน ณ.ระนาบ r และที่ออกจากแหล่งกำเนิดแล้วมาตกกระทบที่ระนาบ r ตามลำดับ ระนาบอะตอมที่ $r = 0$ หมายถึงระนาบที่ผิวของผลึก การพิจารณาความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนจากผลึกในกรณีของมัลติเฟิล รีเฟลคชัน จำเป็นต้องคิดถึงการแลกเปลี่ยนพลังงานระหว่างรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนกับที่ตกกระทบกับระนาบอะตอม เช่น S_r จะต้องประกอบไปด้วยส่วนของ T_r ซึ่งสะท้อนที่ผิวหน้าของระนาบ r รวมกับส่วนของ S_{r+1} ซึ่งวิ่งผ่านระนาบ r ขึ้นมา ในทำนองเดียวกัน

T_{r+1} จะต้องประกอบด้วยส่วนของ T_r ซึ่งวิ่งผ่านระนาบ r ลงมารวมกับส่วนของ S_{r+1} ซึ่งสะท้อนที่คานกลางของระนาบ r ลงมา ถ้าให้ $-iq$ เป็นสัมประสิทธิ์ของการสะท้อนและ $(1 - h - ika \cos \theta_0 \cdot u)$ เป็นสัมประสิทธิ์การส่งผ่าน (transmission coefficient) โดยที่ h คือ แฟคเตอร์การดูดกลืน (absorption factor) ของอำพน มีค่า $(\mu a \operatorname{cosec} \theta_0)/2$ เมื่อ μ เป็นสัมประสิทธิ์การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ตามเส้น จะสามารถแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง S_r กับ T_r ได้เป็น

$$S_r = -iqT_r + (-1)^n (1 - h - ika \cos \theta_0 \cdot u) S_{r+1} \quad (4.38)$$

$$T_{r+1} = (-1)^n (1 - h - ika \cos \theta_0 \cdot u) T_r - iqS_{r+1} \quad (4.39)$$

โดย $(-1)^n$ เป็นเฟสของอำพนที่วิ่งผ่านระนาบอะตอม จากสมการ (4.38) และ (4.39) และอาศัยเงื่อนไข $S_p = 0$ จะสามารถแก้สมการได้เป็น

$$S_0 = \frac{-iqT_0}{h + ika \cos \theta_0 \cdot u + \epsilon \coth p\epsilon} \quad (4.40)$$

$$T_p = \frac{\epsilon \operatorname{cosech} p\epsilon \cdot T_0}{h + ika \cos \theta_0 \cdot u + \epsilon \coth p\epsilon} \quad (4.41)$$

$$\epsilon^2 = q^2 + (h + ika \cos \theta_0 \cdot u)^2 \quad (4.42)$$

คูณสมการ (4.40) ด้วยปริมาณเชิงซ้อนสังยุคของมันซึ่งจะได้ความเข้มการเลี้ยวเบนที่ระนาบ $r = 0$ จากนั้นจัดรูปใหม่แล้วรวมการเลี้ยวเบนจากทุกระนาบ จะได้

$$\frac{I_u}{I_0} = \frac{\sum_{j=0}^p |S_j|^2}{\sum_{j=0}^p |T_j|^2} = \frac{q^2}{|h + ika \cos \theta_0 \cdot u + \epsilon \coth p\epsilon|^2} \quad (4.43)$$

ห่านองเดียวกับหัวข้อ 4.1.3 พิจารณารูป 4-9 พลังงานทั้งหมดที่มาถึงพื้นที่ S ในเวลา du/ω จะเป็นความเข้มที่เลี้ยวเบนคูณพื้นที่ S คูณด้วยเวลา du/ω ในกรณีนี้ได้

$$\begin{aligned} \therefore dE' &= I_u S \frac{du}{\omega} \\ &= \frac{q^2 I_0 S}{|h + ika \cos \theta_0 \cdot u + \epsilon \coth p\epsilon|^2} \frac{du}{\omega} \end{aligned} \quad (4.44)$$

ดังนั้น พลังงานทั้งหมดของรังสีเอ็กซ์ที่เนื่องมาจากปริมาตรทรงกระบอกเล็กๆของผลึกเดี่ยวเบนไปอยู่ที่พื้นที่ S ในขณะที่ระนาบอะคอตหมุนผ่านมุม θ_0 จะเป็น

$$E' = \frac{q^2 I_0 S}{\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{|h + ika \cos \theta_0 \cdot u + \epsilon \coth p\epsilon|^2} \quad (4.45)$$

เมื่อเขียนในรูป อินทิเกรต รีเฟลคชัน จะได้

$$\frac{E' \omega}{I_0} = q^2 S \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{|h + ika \cos \theta_0 \cdot u + \epsilon \coth p\epsilon|^2} \quad (4.46)$$

โดยทั่วไปแล้วการอินทิเกรตในสมการ (4.46) นั้นดูเหมือนจะทำได้ แต่ปัญหาที่กล่าวถึงพิจารณาอยู่นี้จะดูเมื่อ h มีค่าน้อยๆ ดังนั้นถ้าให้ $h = 0$ ในสมการ (4.42) จะเป็น

$$\begin{aligned} \epsilon &= \sqrt{q^2 - (ka \cos \theta_0 \cdot u)^2} \quad \text{เมื่อ } |u| < q/(ka \cos \theta_0) \\ \epsilon &= i \sqrt{(ka \cos \theta_0 \cdot u)^2 - q^2} \quad \text{เมื่อ } |u| > q/(ka \cos \theta_0) \end{aligned} \quad (4.47)$$

เมื่อให้ $h = 0$ แล้วแทนค่า ϵ จากสมการ (4.47) เมื่อ $|u| > q/(ka \cos \theta_0)$ จะได้

$$\begin{aligned} \frac{E' \omega}{I_0} &= q^2 S \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{|ika \cos \theta_0 \cdot u + \sqrt{(ka \cos \theta_0 \cdot u)^2 - q^2} \cdot \cot p \sqrt{(ka \cos \theta_0 \cdot u)^2 - q^2}|^2} \\ &= q^2 S \left[\frac{\pi \tanh pq}{qka \cos \theta_0} \right] \\ &= \frac{Sq \pi}{ka \cos \theta_0} \cdot \tanh pq \end{aligned} \quad (4.48)$$

สมการ (4.48) แสดงให้เห็นถึงรูปร่างของ อินทิเกรต รีเฟลคชันเมื่อคิดในแง่ มัลติเพล็กซ์ รีเฟลคชันของรังสีเอ็กซ์จากผลึกสมบูรณ์ซึ่งเป็นสาเหตุที่ทำให้เกิด เอ็กซ์ทิงค์ชันปรุณภูมิ ส่วนสมการ (4.37) เป็นอินทิเกรต รีเฟลคชันเมื่อคิดการเลี้ยวเบนจากผลึกสมบูรณ์อย่างธรรมดา ทั้งสองแบบมีความแตกต่างกันอย่างเห็นได้ชัด ดังนั้น จะเกิดมีแฟกเตอร์แก้สำหรับเอ็กซ์ทิงค์ชัน ปรุณภูมิ เป็น

$$\frac{\tanh pq}{pq} \quad (4.49)$$

สำหรับอินทิเกรต รีเฟลคชันตามสมการ (4.37) หรือ (4.48) นั้น เป็นการคิด เฉพาะปริมาตรเล็กๆของผลึกเท่านั้น ต่อไปนี้ จะได้คิดถึงผลของผลึก แทนค่า q จาก สมการ (4.28) ลงในสมการ (4.37) จะได้

$$\begin{aligned} \frac{E'\omega}{I_0} &= \frac{N^2 a^2 \lambda^2}{\sin^2 \theta_0} \frac{e^4}{m^2 c^4} |F|^2 \frac{\Sigma \pi p}{ka \cos \theta_0} \\ &= \frac{N^2 \lambda^3}{\sin 2\theta_0} \frac{e^4}{m^2 c^4} |F|^2 \left(\frac{Spa}{\sin \theta_0} \right) \\ &= Q \left(\frac{Spa}{\sin \theta_0} \right) ; \quad Q = \frac{N^2 \lambda^3}{\sin 2\theta_0} \frac{e^4}{m^2 c^4} |F|^2 \end{aligned} \quad (4.50)$$

จากรูป 4-9 นำมาพิจารณาประกอบกับสมการ (4.50) จะเห็นว่า $Spa/\sin \theta_0$ คือ ปริมาตรทรงกระบอกเล็กๆให้เป็น dV และ E' เป็นพลังงานที่เนื่องจากปริมาตร dV ดังนั้น ให้เป็น dE จะได้สมการ (4.50) อยู่ในรูป

$$\frac{\omega}{I_0} dE = QdV \quad (4.51)$$

อินทิเกรตสมการ (4.51) ตลอดทั้งปริมาตรของผลึกจะได้ อินทิเกรต รีเฟลคชัน เป็น

$$\frac{E\omega}{I_0} = QV \quad (4.52)$$

ทำนองเดียวกันเมื่อคิดแบบ มัลติเพล็กซ์ รีเฟลคชันจากผลึกสมบรูณ์จะได้

$$\frac{E \omega}{I_0} = QV \frac{\tanh pq}{pq} \quad (4.53)$$

แฟคเตอร์แก้ไขสำหรับ เอ็กซ์ทิงคชันปรุณภูมิ สามารถเขียนให้อยู่ในรูปที่แตกต่างไปจากสมการ (4.49) ได้ ด้วยการเขียนให้อยู่ในเทอมของความหนาของเลเยอร์ (layer) ทั้งหลายที่ขนานกัน แทนการเขียนในเทอมของจำนวนระนาบอะตอม ถ้าให้ d เป็นความหนาของเลเยอร์ จะได้

$$d = pa \quad (4.54)$$

แต่จากสมการ (4.28) จะได้

$$q^2 = \frac{N^2 a^2 \chi^2}{\sin^2 \theta_0} |F|^2 \frac{e^4}{m^2 c^4} \quad (4.55)$$

จากสมการ (4.50) , (4.54) และ (4.55) จะได้

$$p^2 q^2 = \frac{2Qd^2 \cot \theta_0}{\lambda} \quad (4.56)$$

ดังนั้น จะสามารถเขียนแฟคเตอร์แก้ไขสำหรับเอ็กซ์ทิงคชันปรุณภูมิได้ใหม่ดังนี้

$$\begin{aligned} \frac{\tanh pq}{pq} &= \frac{\tanh \sqrt{(2Qd^2 \cot \theta_0)/\lambda}}{\sqrt{(2Qd^2 \cot \theta_0)/\lambda}} \\ &= 1 - \frac{2}{3} \frac{Qd^2 \cot \theta_0}{\lambda} + \frac{8}{15} \frac{Q^2 d^4 \cot^2 \theta_0}{\lambda^2} - \dots \end{aligned} \quad (4.57)$$

จะเห็นว่า การแก้ความผิดพลาดอันเนื่องมาจากอิทธิพลของเอ็กซ์ทิงคชันปรุณภูมินั้น กระทำโดยยาก เพราะ ต้องทราบความหนาที่แท้จริงของเลเยอร์คือ d นั้นเอง อย่างไรก็ตาม

พหุคูณทางที่จะกระทำโดยการคำนวณหาว่า d ควรจะเป็นเท่าไรจึงจะไม่ต้องคำนึงถึงอิทธิพลของเอ็กซ์ทิงคชันปรุณภูมิ พิจารณาตาราง 4-1 เป็นตารางที่แสดงค่าแฟคเตอร์แก้สำหรับเอ็กซ์ทิงคชันปรุณภูมิของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนจากผลึก NaCl ประเภท h00 ซึ่ง ลอนส์เดล (Lonsdale)⁽¹¹⁾ ได้รวบรวมไว้เมื่อปี ค.ศ. 1947 จะสามารถสรุปได้ว่า เอ็กซ์ทิงคชันปรุณภูมิจะปรากฏเด่นชัดเมื่อ

1. ผลึกต้องเป็นผลึกสมบูรณ์โดยมีระนาบอะตอมขนานกันตลอด
2. ค่าแฟคเตอร์โครงสร้างต้องมีความมาก หรือความเข้มของรังสีเอ็กซ์ต้องมีความมาก หรือ q ต้องมีความมาก
3. ระยะระหว่างระนาบอะตอมที่เลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ a ต้องมีความมาก
4. ความหนาของเลเยอร์หรือของผลึกหรือของบริเวณที่ระนาบอะตอมขนานกันตลอดต้องมีค่ามาก

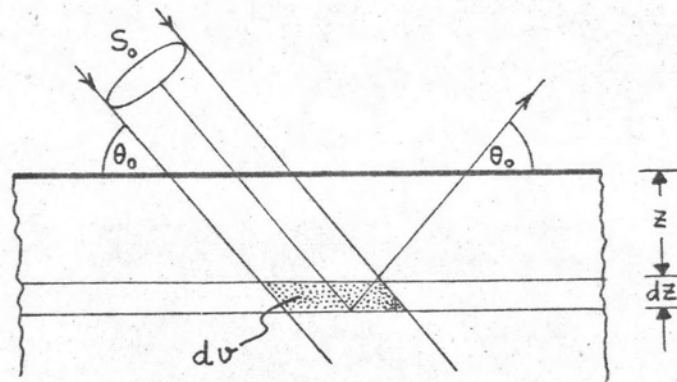
(11) ตาราง 4-1 แสดงค่าแฟคเตอร์แก้ $(\tanh pq)/pq$ สำหรับเอ็กซ์ทิงคชันปรุณภูมิของรังสีเอ็กซ์ประเภท h00 ที่เลี้ยวเบนจากผลึกของ NaCl

hkl	a Å	q $\times 10^4$	ความหนาของเลเยอร์ d					
			$d = 10^{-5}$ ซม.		$d = 10^{-4}$ ซม.		$d = 10^{-3}$ ซม.	
			$p = \frac{d}{a}$ $\times 10^2$	$\frac{\tanh pq}{pq}$	$p = \frac{d}{a}$ $\times 10^3$	$\frac{\tanh pq}{pq}$	$p = \frac{d}{a}$ $\times 10^4$	$\frac{\tanh pq}{pq}$
200	2.814	2.050	3.55	1.00	3.55	0.85	3.55	0.14
400	1.407	0.307	7.10	1.00	7.10	0.98	7.10	0.46
600	0.938	0.081	10.65	1.00	10.65	1.00	10.65	0.81
800	0.703	0.026	14.20	1.00	14.20	1.00	14.20	0.90
1000	0.563	0.009	17.75	1.00	17.75	1.00	17.75	0.99

4.2 เอ็กซ์ทิงค์ชัน ทูคิยุมิ (8,10)

ที่ผ่านมาจะเห็นว่า เอ็กซ์ทิงค์ชันปรุทุมิเกิดขึ้นจากแนวความคิดของ มัลทิเพิลรีเฟลคชันของรังสีเอ็กซ์จากผลึกสมบูรณ์ ทำให้รังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมามีความเข้มลดลงไปจากที่คิดการดูดกลืนแบบธรรมดาอีก และในที่สุดได้สรุปแสดงให้เห็นว่า เมื่อไรเอ็กซ์ทิงค์ชันปรุทุมิก็จะปรากฏเด่นชัด ถ้าหันมาพิจารณาผลึกที่ประกอบด้วยเลเยอร์จำนวนมากมาโดยสมมุติให้เลเยอร์เหล่านั้นบางมากจนสามารถตัดเอ็กซ์ทิงค์ชันปรุทุมิทิ้งไปได้ และให้ในแต่ละเลเยอร์นั้นประกอบด้วยกล่อง (block) เล็กๆจำนวนมากมาเหมือนกัน โดยภายในกล่องแต่ละกล่องนั้นจะประกอบด้วยระนาบอะตอมที่ขนานกันจริงๆเป็นจำนวนมาก แต่ว่าระนาบอะตอมของกล่องหนึ่งไม่จำเป็นที่จะต้องขนานกับระนาบอะตอมของกล่องอื่นๆ ผลึกที่มีคุณสมบัติดังกล่าวจะเรียกว่า ผลึกโมเซอิก การพิจารณาการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกโมเซอิก จะทำให้เห็นว่ารังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาจากผลึกโมเซอิกมีความเข้มลดลงไปจากที่คิดการดูดกลืนแบบธรรมดาอีก เรียกการลดลงของรังสีเอ็กซ์ในกรณีนี้ว่า เอ็กซ์ทิงค์ชัน ทูคิยุมิ

สมมุติว่า มีผลึกโมเซอิกชิ้นหนึ่งที่มีผิวหน้าแผ่กว้าง ในตอนแรกนี้จะคิดว่า โดยเฉลี่ยแล้วให้ผิวหน้าของผลึกขนานกับซอกของระนาบอะตอมภายในกล่องที่ประกบกันขึ้นเป็นผลึกโมเซอิก ให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบผลึกโดยทำมุม θ_0 กับผิวหน้าผลึกตามรูป 4-11 S_0 เป็นพื้นที่ที่ตัดฉาก



รูป 4-11 การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกโมเซอิกที่มีผิวหน้าแผ่กว้าง

กับรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบ และ I_0 เป็นความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบ ให้ dE เป็นพลังงานของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนจากปริมาตร dv ในผลึกที่อยู่ลึกจากผิวหน้าลงไป z ดังนั้น

รังสีเอ็กซ์ที่เดินทางจากผิวหน้าผลึกเข้าไปถึงปริมาตร dv แล้วสะท้อนออกมาจะเดินทางเป็น $2z \operatorname{cosec} \theta_0$ ซึ่งทำให้ความเข้มลดลงไปด้วยแฟกเตอร์ $\exp[-2\mu z \operatorname{cosec} \theta_0]$ โดยที่ μ เป็นสัมประสิทธิ์การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ของผลึก ดังนั้น จากสมการ (4.51) จะได้

$$\frac{\omega dE}{I_0} = Q e^{-2\mu z \operatorname{cosec} \theta_0} dv \quad (4.58)$$

แต่จากรูป 4-11 จะเห็นว่า

$$dv = S_0 \operatorname{cosec} \theta_0 dz \quad (4.59)$$

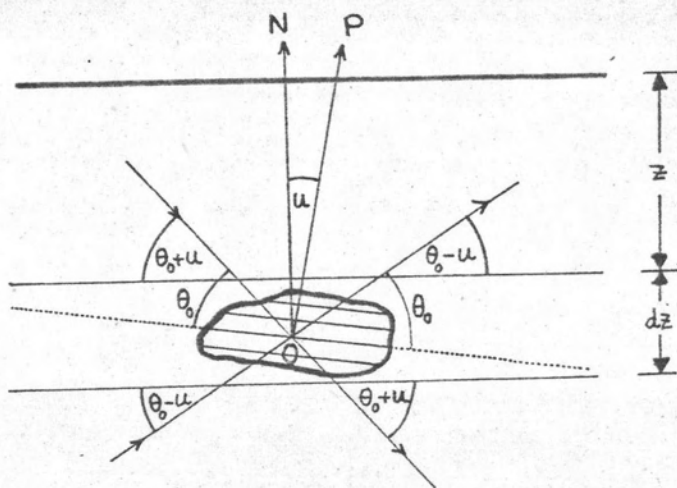
แทนค่า dv จากสมการ (4.59) ลงในสมการ (4.58) แล้วอินทิเกรตจะได้

$$\begin{aligned} \frac{E\omega}{I_0} &= QS_0 \int_0^{+\infty} (e^{-2\mu z \operatorname{cosec} \theta_0}) \operatorname{cosec} \theta_0 dz \\ &= \frac{QS_0}{2\mu} \end{aligned} \quad (4.60)$$

โดยนิยามแล้ว I_0 คือ พลังงานที่ตกลงบนหนึ่งหน่วยพื้นที่ในหนึ่งหน่วยเวลา เพราะฉะนั้น ถ้า $I = I_0 S_0$ มันจะเป็นพลังงานทั้งหมดต่อหน่วยเวลา หรือกำลัง (power) ซึ่งทำได้

$$\frac{E\omega}{I} = \frac{Q}{2\mu} \quad (4.61)$$

เทอม $E\omega/I$ ในสมการ (4.61) ยังคงเรียกว่า อินทิเกรต รีเฟลคชัน และเมื่อพิจารณาปัญหาให้ลึกซึ้งลงไปอีก โดยพิจารณาหลอดอันหนึ่งในเลย์เออร์ที่หนา dz และลึกจากผิวหน้าผลึกลงไปเป็นระยะ z ดังรูป 4-12 แล้ว อินทิเกรต รีเฟลคชัน จะมีรูปผิดไปจากเดิมคือสมการ (4.61) ให้ขอบของเลเยอร์ขนานกับผิวหน้าของผลึก แต่ว่า ระนาบอะตอมภายในหลอดที่กำลังพิจารณานั้นไม่จำเป็นต้องขนานกับขอบของเลย์เออร์หรือผิวหน้าผลึกด้วย ให้ \vec{OP} เป็นเวกเตอร์นอร์มัลของระนาบอะตอมในหลอดที่มีปริมาตร ΔV โดยที่เวกเตอร์นี้จะทำมุม α กับ \vec{ON} ซึ่งเป็นเวกเตอร์นอร์มัลของผิวหน้าผลึกซึ่งจะได้ใช้เป็นทิศทางสำหรับ



รูป 4-12 การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากกล่องอันหนึ่งที่อยู่ในผลึกโมเซอิก

การอ้างอิงตลอดไป เพื่อความสะดวกให้ ON อยู่ในระนาบของรังสีที่ตกกระทบและที่สะท้อน ถ้าพิจารณา อินทิเกรต ริเฟลคชัน จากเลย์เออร์เดียวจะพบว่า กล่องที่มีปริมาตร ΔV ที่กำลังพิจารณาทำให้เกิด อินทิเกรต ริเฟลคชัน เป็น $Q\Delta V$ เมื่อมุมของรังสีเอ็กซ์ตกกระทบกับเลย์เออร์เป็น $\theta_0 + u$ และมุมของรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนทำกับเลย์เออร์เป็น $\theta_0 - u$ สังเกตว่า เมื่อมุมที่รังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบกับเลย์เออร์เป็น $\theta_0 + u$ นั้น มีได้หมายความว่า กล่องทุกกล่องที่อยู่ในเลย์เออร์ที่กำลังพิจารณานี้จะจัดตัวให้อยู่ในตำแหน่งที่ให้การสะท้อนได้ ดังนั้น เมื่อให้ I เป็นความเข้มที่ตกลงบนเลย์เออร์ จะได้พลังงานที่สะท้อนจากปริมาตร V ของเลย์เออร์ใน 1 วินาที หรือจะกล่าวถึงเป็น $IG(u)V$ โดย $G(u)$ หมายถึง จำนวนกล่องในเลย์เออร์ที่จัดตัวเพื่อให้เกิดการสะท้อนต่อหนึ่งหน่วยปริมาตร และ u จะเป็นคัมพันธ์ที่บอกถึงสถานะความสมบูรณ์ของผลึก ฉะนั้น เมื่อต้องการอินทิเกรต ริเฟลคชัน จากปริมาตร V ของเลย์เออร์เดียวจะได้ด้วยการอินทิเกรต $G(u)$ ตลอดค่าของ u ดังต่อไปนี้

$$\frac{IV \int_{-\infty}^{+\infty} G(u) du}{I} = QV$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G(u) du = Q \quad (4.62)$$

ถ้าหากว่ากล่องใดๆในเลย์เออร์มีขนาดใหญ่พอที่จะแสดงเอกลักษณ์ชั้นปฐมภูมิได้ จะได้

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G(u) du = Q' \quad (4.63)$$

โดยที่ $Q' = Q \frac{\tanh pq}{pq} \quad (4.64)$

สมมุติว่า รังสีเอ็กซ์มีกำลังทั้งหมด I ตกกระทบบนผิวและทำมุม $\theta_0 + u$ กับผิวหน้าผิวเล็ก ให้ E_u เป็นกำลังทั้งหมดของรังสีเอ็กซ์ที่สะท้อนออกมา ให้ $I_u(z)$ และ $E_u(z)$ เป็นกำลังของรังสีเอ็กซ์ตกกระทบบนและรังสีเอ็กซ์สะท้อนจากผิวเล็กที่ความลึก z จากผิวหน้าผิวเล็กลงไปตามลำดับ ถ้ารังสีเอ็กซ์ตกกระทบบนผิวหน้าผิวเล็กเป็นพื้นที่ A แล้ว จะพิจารณาอิทธิพลทั้งหลายของเลย์เออร์ที่มีความหนา δz เล็กๆ จะเห็นว่า ความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบบนที่ด้านบนของเลย์เออร์คือ $[I_u(z) \operatorname{cosec}(\theta_0 + u)]/A$ และ $A \delta z$ จะเป็นปริมาตรของเลย์เออร์ตรงส่วนที่รังสีเอ็กซ์ตกกระทบบน ดังนั้น กำลังของรังสีเอ็กซ์ที่สะท้อนจากปริมาตร $A \delta z$ จะเป็น δE_1 โดย

$$\begin{aligned} \delta E_1 &= \frac{I_u(z) \operatorname{cosec}(\theta_0 + u)}{A} \cdot G(u) A \delta z \\ &= G(u) I_u(z) \operatorname{cosec}(\theta_0 + u) \delta z \end{aligned} \quad (4.65)$$

เมื่อกำหนดถึงการถูกกลืนธรรมดาแล้วจะพบว่าในขณะที่รังสีเอ็กซ์เดินทางผ่านเลย์เออร์ไปนั้นเลย์เออร์จะถูกกลืนรังสีเอ็กซ์ไว้ ถ้ามองในแง่กำลังที่ถูกดูด จะให้เป็น δE_2 โดย

$$\delta E_2 = \mu I_u(z) \operatorname{cosec}(\theta_0 + u) \delta z \quad (4.66)$$

เมื่อรวม δE_1 และ δE_2 เข้าด้วยกันจะเป็นกำลังที่ลดลงทั้งหมดเมื่อคิดทั้งการถูกกลืนธรรมดาและการสะท้อนแล้ว

$$\delta E_1 + \delta E_2 = I_u(z) [\mu + G(u)] \operatorname{cosec}(\theta_0 + u) \delta z \quad (4.67)$$

ในทำนองเดียวกัน เมื่อคิดว่ามีรังสีเอ็กซ์ตกกระทบบ้านล่างของเลขเออร์ในเวลาเดียวกันโดยเอียงทำมุม $\theta_0 - u$ กับเลขเออร์ ดังรูป 4-12 แล้วให้ $E_u(z + \delta z)$ เป็นกำลังของรังสีเอ็กซ์ที่กล่าว จะได้ว่า กำลังของรังสีเอ็กซ์ที่สะท้อนจากปริมาตร $A \delta z$ ไปในทิศทางเดียวกันกับทิศทางของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบบนคอนแรกเป็น $\delta E_1'$ โดย

$$\delta E_1' = G(u)E_u(z + \delta z)\operatorname{cosec}(\theta_0 - u)\delta z \quad (4.68)$$

และกำลังของรังสีเอ็กซ์ที่ถูกดูดกลืนโดยเลขเออร์ในกรณีหลังนี้เป็น $\delta E_2'$ โดย

$$\delta E_2' = \mu E_u(z + \delta z)\operatorname{cosec}(\theta_0 - u)\delta z \quad (4.69)$$

กำลังของรังสีเอ็กซ์ที่ลดลงทั้งหมดเป็น

$$\delta E_1' + \delta E_2' = E_u(z + \delta z) [\mu + G(u)] \operatorname{cosec}(\theta_0 - u)\delta z \quad (4.70)$$

จากสมการ (4.65) , (4.67) , (4.68) และ (4.70) โดยคิดว่า $I_u(z)$ และ $E_u(z + \delta z)$ ตกกระทบบนเลขเออร์พร้อมกัน และคิดถึงคุณสมบัติของกำลังที่หายไปและที่ได้รับ จะได้

$$\left. \begin{aligned} I_u(z + \delta z) - G(u)E_u(z + \delta z)\operatorname{cosec}(\theta_0 - u)\delta z + \\ I_u(z) [\mu + G(u)] \operatorname{cosec}(\theta_0 + u)\delta z &= I_u(z) \\ E_u(z) - G(u)I_u(z)\operatorname{cosec}(\theta_0 + u)\delta z + \\ E_u(z + \delta z) [\mu + G(u)] \operatorname{cosec}(\theta_0 - u)\delta z &= E_u(z + \delta z) \end{aligned} \right\} (4.71)$$

จัดรูปสมการ (4.71) ใหม่จะได้

$$\left. \begin{aligned} \frac{I_u(z + \delta z) - I_u(z)}{\delta z} &= -\frac{\mu + G(u)}{\sin(\theta_0 + u)} I_u(z) + \frac{G(u)}{\sin(\theta_0 - u)} E_u(z + \delta z) \\ \frac{E_u(z) - E_u(z + \delta z)}{\delta z} &= -\frac{\mu + G(u)}{\sin(\theta_0 - u)} E_u(z + \delta z) + \frac{G(u)}{\sin(\theta_0 + u)} I_u(z) \end{aligned} \right\} (4.72)$$

ใช้ลิมิต $\delta z \rightarrow 0$ ในสมการ (4.72) จะได้

$$\left. \begin{aligned} \frac{d I_u(z)}{dz} &= -\frac{\mu+G(u)}{\sin(\theta_0+u)} I_u(z) + \frac{G(u)}{\sin(\theta_0-u)} E_u(z) \\ \frac{d E_u(z)}{dz} &= -\frac{\mu+G(u)}{\sin(\theta_0-u)} E_u(z) + \frac{G(u)}{\sin(\theta_0+u)} I_u(z) \end{aligned} \right\} (4.73)$$

โดยการสังเกตเห็นว่า $I_u(z)$ และ $E_u(z)$ จะเป็นศูนย์เมื่อ z โทมากๆ จะทำให้สามารถแก้สมการ (4.73) ได้โดยสมมติว่า $G(u)$ ไม่ขึ้นกับ z ดังนั้น สมการ (4.73) จะเป็นสมการเชิงเส้น (linear equation) แล้วให้

$$\left. \begin{aligned} I_u(z) &= I e^{-\alpha z} \\ E_u(z) &= E_u e^{-\alpha z} \end{aligned} \right\} (4.74)$$

แทนค่าสมการ (4.74) ลงในสมการ (4.73) แล้วแก้สมการจะได้

$$\frac{E_u}{I} = \frac{\sin(\theta_0-u)}{\sin\theta_0 \cos u} \frac{G(u)}{\mu+G(u) + \sqrt{[\mu+G(u)]^2 - G^2(u)(1-\cot^2\theta_0 \tan^2 u)}} \quad (4.75)$$

จากสมการ (4.75) เมื่ออินทิเกรต E_u/I ตลอดค่าของ u จะได้ อินทิเกรตรีเฟลคชัน แต่ก่อนที่จะกระทำแบบนั้น ให้สังเกตแฟคเตอร์ตัวแรกในสมการ (4.75) คือ $[\sin(\theta_0-u)] / [\sin\theta_0 \cos u]$ เมื่อพิจารณาอย่างลึกซึ้งแล้วจะพบว่าแฟคเตอร์ตัวนี้เกิดขึ้นเนื่องจากการไม่มีสมมาตรในการสะท้อนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกโมเชอิคอนเอง กล่าวคือมุมที่ตกกระทบเป็น θ_0+u และมุมที่สะท้อนเป็น θ_0-u เมื่อคิดระยะทางที่เดินในเลย์เออร์จึงเป็น

$$z [\operatorname{cosec}(\theta_0+u) + \operatorname{cosec}(\theta_0-u)]$$

แทนที่จะเป็น $2z \operatorname{cosec}\theta_0$ เหมือนในคอนแรกที่พิจารณาตรงสมการ (4.58) ดังนั้นเมื่อคำนวณ อินทิเกรต รีเฟลคชัน สำหรับกรณีนี้จะได้

$$\left(\frac{E_\omega}{I} \right)_{+u} = \frac{Q}{2\mu} \frac{\sin(\theta_0-u)}{\sin\theta_0 \cos u} \quad (4.76)$$

+u ที่ห้อยท้ายวงเล็บในสมการ (4.76) นั้นแสดงให้เห็นถึงกรณีที่มีมุมตกกระทบเป็น $\theta_0 + u$ และมุมสะท้อนเป็น $\theta_0 - u$ ถ้ามุมตกกระทบเป็น $\theta_0 - u$ และมุมสะท้อนเป็น $\theta_0 + u$ จะได้

$$\left(\frac{E\omega}{I}\right)_{-u} = \frac{Q \sin(\theta_0 + u)}{2\mu \sin\theta_0 \cos u} \quad (4.77)$$

จะเห็นว่า อินทิเกรต ริเฟลคชัน จากสมการ (4.76) และ (4.77) นั้นไม่เท่ากันซึ่งแสดงให้เห็นถึงการไม่มีสมมาตรในการสะท้อนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกโมเชอิต ถ้าหากคิดว่าค่าเฉลี่ยของทั้งสองนั้นเป็นค่าที่แท้จริงแล้วอาจจะคิดว่า แฟคเตอร์ $[\sin(\theta_0 - u)]/[\sin\theta_0 \cos u]$ มีค่าเป็น 1 ได้ ดังนั้นสมการ (4.75) จะกลายเป็น

$$\frac{E_u}{I} = \frac{G(u)}{\mu + G(u) + \sqrt{[\mu + G(u)]^2 - G^2(u)(1 - \cot^2\theta_0 \tan^2 u)}} \quad (4.78)$$

สมมติว่า u เล็กพอที่จะทำให้ $\tan^2 u \approx 0$ ได้ และ $G(u)/\mu$ เล็กพอที่จะกระจาย (expand) โดยตัดเทอมที่มีกำลังสูงๆทิ้งไปแล้วอินทิเกรตสมการ (4.78) ตลอดค่าของ u จะได้

$$\begin{aligned} \rho &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{E_u}{I} du = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{G(u)}{2\mu} - \frac{G^2(u)}{2\mu^2} + \frac{5}{8} \frac{G^3(u)}{\mu^3} \right] du \\ &= \frac{Q'}{2\mu} - g_2 \frac{Q'^2}{2\mu^2} + \frac{5}{8} g_3 \frac{Q'^3}{\mu^3} \end{aligned} \quad (4.79)$$

$$\left. \begin{aligned} \text{โดยที่ } \int_{-\infty}^{+\infty} G^2(u) du &= g_2 Q'^2 \\ \int_{-\infty}^{+\infty} G^3(u) du &= g_3 Q'^3 \end{aligned} \right\} \quad (4.80)$$

ในที่นี้ ρ คือ อินทิเกรต ริเฟลคชัน นั้นเอง g_2 และ g_3 เป็นค่าคงที่ของผลึก และ Q' มีความหมายทางกายภาพตามสมการ (4.64) และมีความสัมพันธ์กับ $G(u)$ ตามสมการ (4.79) จะเขียนใหม่เป็น

$$\rho = \frac{Q'}{2 \left[\mu + g_2 Q' + \left(g_2^2 - \frac{5}{4} g_3 \right) \frac{Q'^2}{\mu} \right]} \quad (4.81)$$

ตัดเทอมที่มี Q^2/μ รวมอยู่ด้วยทิ้งไปจะได้

$$\rho = \frac{Q'}{2(\mu + g_2 Q')} \quad (4.82)$$

เมื่อคิดถึงการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกโมเชอิกอย่างละเอียดแล้วจะเห็นว่า อินทิเกรตรีเฟลคชัน ที่โคคาสมการ (4.82) นั้นมีเทอม $2g_2 Q'$ เพิ่มขึ้นมาจากเดิมตามสมการ (4.61) เทอมนี้จะไปทำให้ค่า μ เพิ่มขึ้นนั้นหมายความว่า จะทำให้แฟคเตอร์การถูกกลืนลดลงไปอีก ซึ่งส่งผลไปถึงการลดลงของความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบน การลดลงของความเข้มในลักษณะนี้เรียกว่า เอ็กซ์ทิงค์ชันทุติยภูมิ และเรียก g_2 ว่า สัมประสิทธิ์เอ็กซ์ทิงค์ชันทุติยภูมิ (secondary extinction coefficient)