บทที่ 2

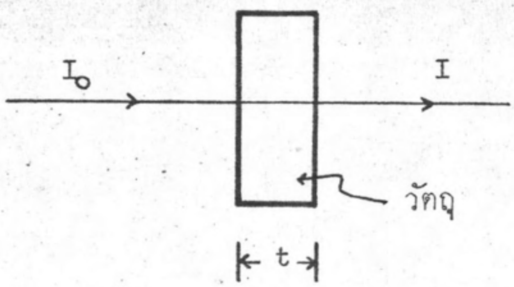
การคำนวณแก้การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์สำหรับผลึกรูปทรงทั่วไป

ในการหาโครงสร้างผลึกจะต้องทราบขนาดและเฟสของแฟคเตอร์โครงสร้าง (structure factor) สำหรับขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้างในทิศทางต่างๆ ทราบได้จากการวัดความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาจากผลึกในทิศทางนั้นๆ เมื่อคิดถึงอิทธิพลที่เนื่องจากการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ของผลึกเดี่ยว (single crystal) ในทิศทางการเลี้ยวเบนแล้วคาดว่าจะทำให้ความเข้มที่วัดได้ผิดไปจากที่ควรจะเป็น แต่ถ้าในแต่ละทิศทางการเลี้ยวเบน รังสีเอ็กซ์ถูกดูดกลืนเท่ากันก็ไม่เป็นปัญหา ที่เป็นปัญหา คือ รังสีเอ็กซ์ถูกดูดกลืนไม่เท่ากันนั่นเอง ดังนั้น ปัญหานี้จึงได้รับการแก้ไขด้วยการคำนวณแฟคเตอร์แก้ของการดูดกลืน (absorption correction factor) ซึ่งเป็นส่วนกลับของแฟคเตอร์การแพร่รังสี (transmission factor) ในแต่ละทิศทางโดยอาจจะสมมุติให้ผลึกจริงๆ ที่ใช้ในการทดลองเป็นรูป ทรงกลม ทรงกระบอกโดยอนุมาน หรือมีรูปทรงทั่วไปตามสภาพที่เป็นจริง ในบทนี้จะได้กล่าวถึง รูปทั่วไปของแฟคเตอร์การแพร่รังสี การคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสีเมื่อใช้รูปทรงจริงของผลึกซึ่งโดยทั่วไปมิได้เป็นรูปทรงกลม หรือรูปทรงกระบอกที่นิยมอนุมานเพราะสะดวกต่อการคำนวณ และสุดท้ายเป็นการสรุปขั้นตอนการคำนวณ

2.1 รูปแบบทั่วไปของแฟคเตอร์การแพร่รังสี

ถ้ารังสีเอ็กซ์เดินทางผ่านวัตถุ ส่วนที่เดินทางผ่านวัตถุออกมาจะมีความเข้มลดลงจากเดิม ทั้งนี้เนื่องจากวัตถุที่มากั้นนั้นจะดูดกลืนรังสีเอ็กซ์บางส่วนไว้ เมื่อพิจารณารังสีเอ็กซ์ที่มีความถี่เดียว (monochromatic x-rays) มีความเข้ม I_o เดินทางผ่านวัตถุที่มีเนื้อเดียวกันตลอด (homogeneous) และมีความหนา t ดังรูป 2-1 จะสามารถแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มของรังสีเอ็กซ์ก่อนที่จะเข้าไปในวัตถุกับเมื่อผ่านวัตถุออกมาแล้วได้ดังนี้

$$I = I_o e^{-\mu t} \qquad (2.1)$$



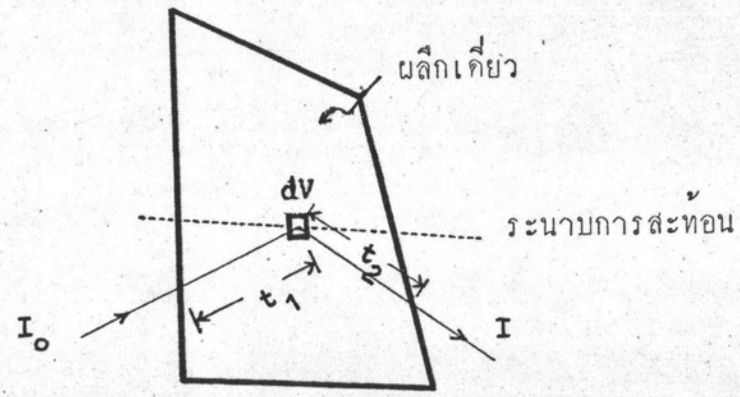
รูป 2-1 แสดงทางเดินของรังสีเอ็กซ์ผ่านวัตถุที่มีเนื้อเดียวกันตลอด

โดยที่ I คือ ความเข้มของรังสีเอ็กซ์เมื่อเดินทางผ่านวัตถุออกมาแล้ว และ μ คือ สัมประสิทธิ์การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ตามเส้น (**linear absorption coefficient**)

สำหรับกรณีที่รังสีเอ็กซ์เดินทางผ่านเข้าไปในผลึกเดี่ยวแล้วเบนออกมา จะเกิดปรากฏการณ์ดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ในทำนองเดียวกับที่ได้กล่าวมาแล้วข้างต้น เมื่อคำนึงถึงรูปพรรณของผลึกเดี่ยวแล้วอาจกล่าวได้ว่า การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ของผลึกเดี่ยวในทิศทางการเลี้ยวเบนต่างๆ ย่อมไม่เท่ากัน ดังนั้น ความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่สามารถวัดได้ในทิศทางต่างๆกันจึงไม่ใช่ค่าความเข้มที่แท้จริงและถูกต้อง แต่เนื่องจากในการคำนวณโครงสร้างผลึกเดี่ยวนั้นจำเป็นต้องทราบขนาดแฟคเตอร์โครงสร้างในทิศทางการเลี้ยวเบนทั้งหลาย ซึ่งมีความสัมพันธ์กับความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาในทิศทางนั้นๆ ในลักษณะ[3]

$$|\mathrm{F}| \propto \sqrt{I}$$

โดยที่ $|\mathrm{F}|$ คือ ขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้าง เมื่อความเข้มไม่ถูกต้องขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้างก็ไม่ถูกต้องด้วย ดังนั้น เพื่อความถูกต้องในการคำนวณโครงสร้างผลึก จึงจำเป็นต้องแก้ค่าความเข้มที่วัดได้ด้วยการคำนึงถึงการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ของผลึกเดี่ยวในแต่ละทิศทางของการเลี้ยวเบน ค่าที่ใช้แก้ค่าความเข้มนั้น เป็นส่วนกลับของแฟคเตอร์การแพร่รังสี ทั้งนี้เพราะ แฟคเตอร์การแพร่รังสีได้นิยามว่า เป็นอัตราส่วนของความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่ถูกเลี้ยวเบนออกมาเทียบกับรังสีเอ็กซ์ที่ถูกเลี้ยวเบนในทิศทางเดียวกันหากไม่ถูกดูดกลืน



รูป 2-2 แสดงทางเดินรังสีเอ็กซ์ผ่านผลึกเดี่ยวเพื่อคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสี

พิจารณารูป 2-2 ให้ผลึกเดี่ยวเป็นผลึกที่มีเนื้อเดียวกันตลอด และให้รังสีเอ็กซ์ความเข้ม I_o เดินทางผ่านเข้าไปในผลึก เมื่อเดินทางไปเป็นระยะ t_1 จึงถึงระนาบการสะท้อนตรงปริมาตร dV เล็กๆ แล้วเลี้ยวเบนออกมาจากผลึก ระยะจากตำแหน่งที่รังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนจนกระทั่งออกมาจากผลึกเป็น t_2 โดยอาศัยสมการ (2.1) สามารถคำนวณความเข้มรังสีเอ็กซ์ I ที่เลี้ยว ออกมาจากปริมาตร dV เล็กๆ ของผลึกได้เป็น

$$I = I_o e^{-\mu(t_1 + t_2)}$$

เมื่อคิดถึงตลอดทั้งปริมาตรของผลึก V จะได้

$$\int I dV = \int I_o e^{-\mu(t_1 + t_2)} dV$$

$$IV = \int I_o e^{-\mu(t_1 + t_2)} dV$$

ถ้าคิดว่าผลึกไม่ดูดกลืนรังสีเอ็กซ์เลย ความเข้มการเลี้ยวเบนที่ออกมาในทิศทางเดียวกันจากปริมาตร dV เล็กๆ ให้เป็น I' โดยที่

$$I' = I_o$$

เมื่อคิดตลอดทั้งปริมาตรของผลึก V จะได้

$$\int I'dV = \int I_o dV$$

$$I'V = I_o V$$

โดยนิยามของแฟคเตอร์การแพร่รังสีจะได้

$$A = \frac{IV}{I'V} = \frac{\int I_o e^{-\mu(t_1 + t_2)} dV}{I_o V}$$

$$A = \frac{1}{V}\int e^{-\mu(t_1 + t_2)} dV \qquad (2.2)$$

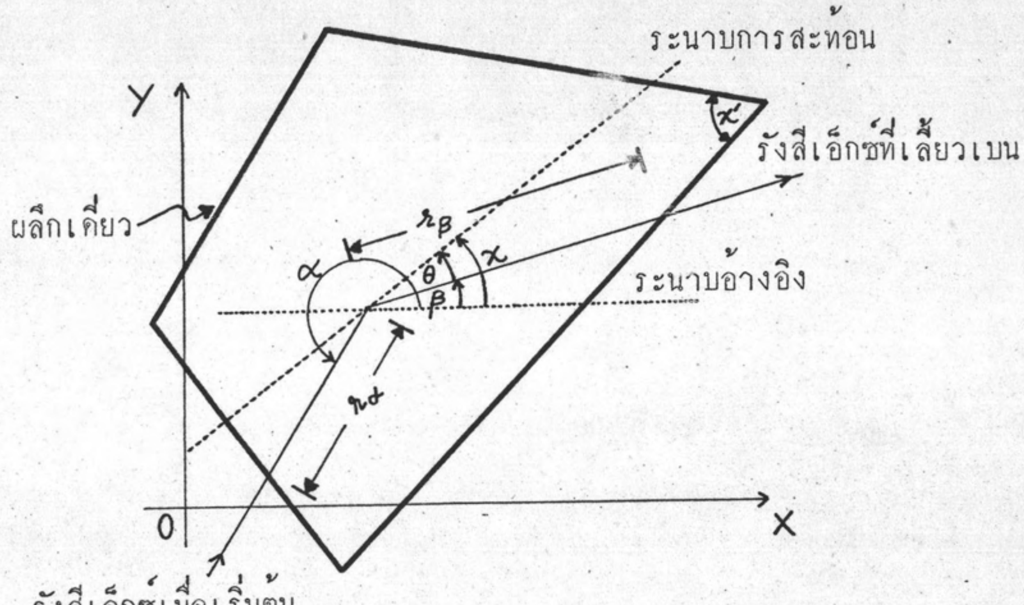
ซึ่งเป็นรูปแบบทั่วไปของแฟคเตอร์การแพร่รังสี

2.2 <u>การคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสีเมื่อคิดผลึกรูปทรงทั่วไป</u>[4]

รูปแบบทั่วไปของแฟคเตอร์การแพร่รังสีตามสมการ (2.2) ถ้าคำนวณโดยตรงจะยุ่งยากมาก เพื่อความสะดวก ส่วนมากมักจะสมมุติให้ผลึกเดี่ยวมีรูปร่างเป็นทรงกระบอกหรือทรงกลม ซึ่งจะทำให้แฟคเตอร์การแพร่รังสีเปลี่ยนไปอยู่ในรูปที่สามารถคำนวณได้ไม่ยากนัก อย่างไรก็ตาม บ่อยครั้งทีเดียวที่พบว่า เป็นการไม่สมควรอย่างยิ่งที่จะสมมุติให้ผลึกเดี่ยวเป็นรูปทรงกระบอกหรือทรงกลม เพราะไม่สามารถเลือกผลึกเดี่ยวให้มีรูปร่างใกล้เคียงกับทรงกระบอกหรือทรงกลม ที่เป็นเช่นนี้อาจเนื่องจากคุณสมบัติทางฟิสิกส์ของผลึกเอง เช่น ความต้านทานแรงกดของผลึกในแต่ละส่วนไม่เท่ากันเมื่อถูกบด ธรรมชาติของผิวหน้าผลึก หรือรอยร้าวของผลึก

มีนักผลึกวิทยาหลายคนเช่น Hendershot Albert Howells และ Evans พยายามแก้ปัญหาดังกล่าวนี้ด้วยการคิดคำนวณค่าแฟคเตอร์การแพร่รังสีเมื่อผลึกเดี่ยวมีรูปทรงทั่วไป แต่วิธีการของเขาเหล่านั้นยังไม่ดีพอเท่ากับวิธีของ William R.Busing และ Henri A.Levy ซึ่งร่วมกันคิดคำนวณโดยมีหลักการและวิธีการดังต่อไปนี้

เพื่อความสะดวกจะพิจารณาการคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสีเมื่อคิดเฉพาะการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์จากภาพถ่ายแบบไวซเซ็นเบิร์กที่ระดับที่ศูนย์ (zero-level) เริ่มพิจารณาด้วยการสมมุติว่า ผลึกถูกปิดล้อมด้วยระนาบทั้งหมด n ระนาบ ดังแสดงในรูป 2-3 โดยมีเงื่อนไขว่า มุมระหว่างระนาบที่ปิดล้อมนั้นต้องไม่โตกว่า 180 องศา



รูป 2-3 แสดงรูปเรขาคณิตเพื่อการคำนวณแก้การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ของผลึกเดี่ยวรูปทรงทั่วไป

ให้แกน Z ขนานกับ zone axis ของระดับที่ศูนย์ที่กำลังพิจารณา ระนาบที่ปิดล้อมผลึกทั้งหมดสามารถอธิบายได้ด้วยเซท (set) ของอสมการ

$$a_s x + b_s y + c_s z - d_s \geq 0 \quad , \quad s = 1,2,3,\ldots,n \qquad (2.3)$$

โดยที่ a_s , b_s, c_s และ d_s เป็น สัมประสิทธิ์ที่เลือกขึ้นมาเพื่อทำให้อสมการนี้เป็นจริงเฉพาะเมื่อจุด (x , y , z) ใดๆ อยู่ภายในหรือผิวของผลึกเท่านั้น

ตามรูป 2-3 ให้รังสีเอ็กซ์เดินทางออกจากแหล่งกำเนิดเข้าไปในผลึกโดยทำมุมกับระนาบอ้างอิงเป็น α เมื่อเดินทางไปเป็นระยะ r_α จึงถึงระนาบการสะท้อนซึ่งทำมุม χ กับระนาบอ้างอิง แล้วเลี้ยวเบนออกมาจากผลึกโดยที่ทิศทางการเลี้ยวเบนนั้นทำมุม θ กับระนาบการสะท้อนและทำมุม β กับระนาบอ้างอิง ระยะจากตำแหน่งที่รังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนจากระนาบการสะท้อนจนกระทั่งออกจากผลึกเป็น r_β จากรูปเรขาคณิตของการเลี้ยวเบนดังกล่าว จะได้

$$\left.\begin{aligned} \alpha &= \chi + \theta + \pi \\ \beta &= \chi - \theta \end{aligned}\right\} \qquad (2.4)$$

และเมื่ออาศัยสมการ (2.2) จะสามารถเขียนแฟคเตอร์การแพร่รังสีในทิศทางที่กำลังพิจารณานี้ได้เป็น

$$A = \frac{1}{V}\int e^{-\mu(r_\alpha + r_\beta)}\, dV \qquad (2.5)$$

ดังที่ได้กล่าวแล้วว่า ถ้าคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสีโดยตรงจะยุ่งยากมาก เพราะการทำอินทิกรัล (integral) ของฟังก์ชัน (function) ที่มีรูปแบบตามสมการ (2.5) นั้นกระทำได้ยาก ดังนั้น จึงหลีกเลี่ยงวิธีการที่จะคำนวณโดยตรงหันมาคำนวณด้วยการประมาณค่าอินทิกรัลแทน โดยใช้วิธีของเกาส์ (Gauss)[5] ซึ่งมีเงื่อนไขว่า ฟังก์ชันในสมการ (2.5) คือ $\exp\left[-\mu(r_\alpha + r_\beta)\right]$ นั้น จะต้องเป็นฟังก์ชันที่มีความต่อเนื่องตลอดช่วงของลิมิต (limit) ของอินทิกรัล ถึงตอนนี้พอจะมองเห็นความสำคัญของเงื่อนไขที่ว่า มุมระหว่างระนาบที่ปิดล้อมผลึกต้องไม่โตกว่า 180 องศา กล่าวคือ ถ้าพบว่ามีมุมดังกล่าวเช่นมุม x' ในรูป 2-3 โตกว่า 180 องศา จะทำให้ $\exp\left[-\mu(r_\alpha + r_\beta)\right]$ เป็นฟังก์ชันที่ไม่ต่อเนื่องได้ นั่นหมายความว่า การประมาณโดยการใช้วิธีของเกาส์จะกระทำไม่ได้

ถ้าให้

$$A_1 = \int_a^b g(x)dx$$

เป็นการอินทิกรัลใน 1 มิติ มีลิมิตของการอินทิกรัลจาก a ถึง b ในทิศทาง x และมีฟังก์ชัน g(x) ที่มีความต่อเนื่องในช่วง a ถึง b โดยใช้การประมาณของเกาส์จะได้

$$A_1 = \int_a^b g(x)dx \approx (b-a)\sum_{i=1}^{m} R_i g(x_i) \qquad (2.6)$$

$$x_i = a + (b-a)u_i \qquad (2.7)$$

u_i และ R_i เป็นตัวคงที่ที่ถูกเลือกขึ้นมาอย่างมีหลักเกณฑ์ภายใต้เงื่อนไขที่จะทำให้ค่าประมาณของอินทิกรัลทางขวามือของสมการ (2.6) มีความคลาดเคลื่อนน้อยที่สุด โดยจะขึ้นอยู่กับค่า m ที่เหมาะสมด้วย เงื่อนไขนั้นคือ

$$\left.\begin{aligned} &\sum_{i=0}^{m} R_i = 1 \\ &\sum_{i=0}^{m} R_i u_i = \frac{1}{2}, \sum_{i=0}^{m} R_i u_i^2 = \frac{1}{3}, \ldots, \sum_{i=0}^{m} R_i u_i^r = \frac{1}{r+1} \end{aligned}\right\} \qquad (2.8)$$

r เป็นตัวเลขที่มีความสัมพันธ์กับ m ที่เหมาะสมเพื่อให้สามารถแก้สมการ (2.8) หาค่า R_i และ u_i ที่เหมาะสมต่อไปได้ สำหรับใน 1 มิตินี้ **Lowan , Davids** และ **Levenson**(6) ได้ทดสอบแล้วพบว่า m ที่เหมาะสมคือ $m \leq 16$

ถ้าเป็นการอินทิกรัลใน 3 มิติ การประมาณจะเป็น

$$A_3 = \int_a^b dx \int_{c(x)}^{d(x)} dy \int_{e(x,y)}^{f(x,y)} g(x,y,z)dz$$

$$\approx \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \sum_{k=1}^{m} (b-a)\left[d(x_i)-c(x_i)\right]\left[f(x_i,y_j)-e(x_i,y_j)\right] R_iR_jR_k g(x_i,y_j,z_k) \quad (2.9)$$

$$\left.\begin{aligned} x_i &= a+(b-a)u_i \\ y_j &= c(x_i) + \left[d(x_i) - e(x_i)\right]u_j \\ z_k &= e(x_i,y_j) + \left[f(x_i,y_j) - e(x_i,y_j)\right]u_k \end{aligned}\right\} \quad (2.10)$$

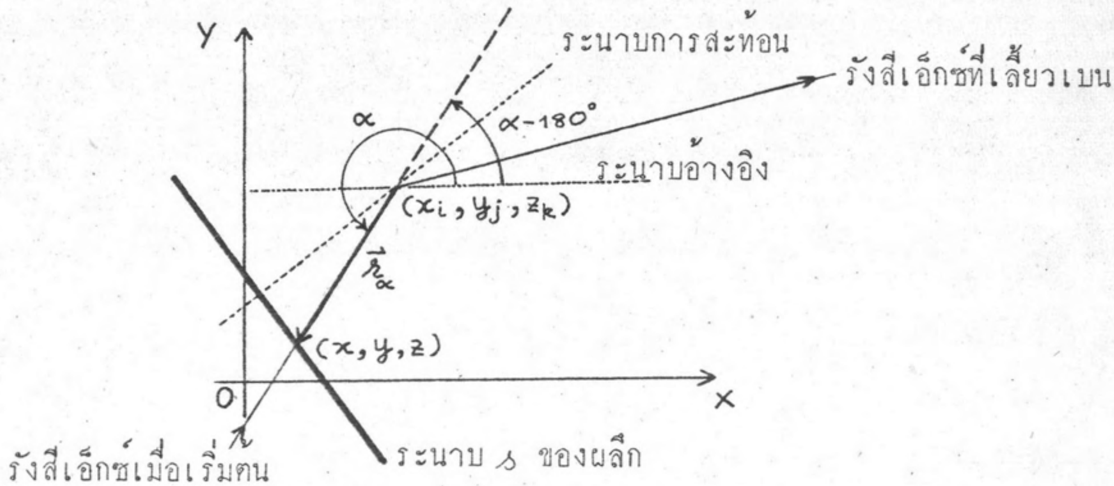
u_j, u_k , R_j และ R_k เป็นตัวคงที่ที่มีคุณสมบัติเหมือนกับ u_i และ R_i ที่พิจารณามาแล้ว ลิมิต $c(x)$ ถึง $d(x)$ และ $e(x,y)$ ถึง $f(x,y)$ เป็นลิมิตในทิศทาง y และ z ตามลำดับ เมื่อเทียบสมการ (2.9) กับ (2.5) แล้วจะเห็นว่า $g(x,y,z)$ คือ $\exp\left[-\mu(r_\alpha+r_\beta)\right]$ นั่นเอง ดังนั้น การคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสีในกรณีนี้ ปัญหาจึงอยู่ตรงที่การหาลิมิตของอินทิกรัล ได้แก่ a , b , $c(x_i)$, $d(x_i)$, $e(x_i,y_j)$ และ $f(x_i,y_j)$ รวมทั้งการคำนวณ $g(x_i,y_j,z_k)$ ด้วย

การคำนวณหาลิมิตในทิศทาง x คือ a และ b นั้นกระทำได้โดยการหาจุดตัดของระนาบที่ปิดล้อมผลึก 3 ระนาบที่เป็นไปได้ทั้งหมดในจำนวนระนาบที่มีอยู่ n ระนาบ ฉะนั้นอาจกล่าวได้ว่า จุดตัดกันของระนาบ 3 ระนาบนั้นจะเป็นมุมหนึ่งมุมใดของผลึก เมื่อคำนวณจุดตัดได้หมดทุกจุดแล้ว ค่าที่น้อยที่สุดและมากที่สุดในทิศทาง x จะเป็น a และ b ตามลำดับ สำหรับลิมิตในทิศทาง y นั้นจะเป็นฟังก์ชันของ x จึงต้องหาลิมิตในรูปที่เป็นฟังก์ชันของ x และสำหรับ x_i ใดๆที่กำหนดให้จะสามารถหา $c(x_i)$ และ $d(x_i)$ ได้ สำหรับลิมิตในทิศทาง z นั้นจะเป็นฟังก์ชันของ x กับ y และสำหรับ x_i กับ y_j ใดๆที่กำหนดให้จะสามารถหา $e(x_i,y_j)$ และ $f(x_i,y_j)$ ได้

การคำนวณฟังก์ชัน $g(x_i,y_j,z_k)$ นั้นต้องทราบระยะทางที่รังสีเอ็กซ์เริ่มเดินทางเข้าไปในผลึกจนกระทั่งเลี้ยวเบนออกมาพ้นผลึก นั่นคือ ถ้าดูตามรูป 2-3 จะต้องทราบ r_α

และ r_β ถ้าในกรณีที่ทราบการจัดตัวของระนาบที่ปิดล้อมผลึกทั้งหมด จะทำให้ทราบสมการของระนาบทุกระนาบ ดังนั้น การคำนวณ r_α และ r_β อาจกระทำได้โดยการสร้าง r_α และ r_β ให้สัมพันธ์กับสิ่งที่ทราบแล้วจากสมการของระนาบ

พิจารณาเฉพาะ $\vec{r}_\alpha$ จากรูป 2-4 ซึ่งเป็นเวคเตอร์ (vector) ที่มีทิศทางจากตำแหน่งที่รังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบน (x_i, y_j, z_k) ไปยังแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ ตำแหน่ง (x,y,z) เป็นตำแหน่งปลายของ $\vec{r}_\alpha$ และเป็นจุดที่รังสีเอ็กซ์ที่พุ่งออกจากแหล่งกำเนิดทำมุม



รูป 2-4 แสดงรูปเรขาคณิตของการคำนวณ r_α

กับระนาบอ้างอิงเป็น α มาตัดระนาบ s สมมุติว่าสมการของระนาบ s ของผลึกที่กำหนดให้ตามรูป 2-4 เป็น

$$\left.\begin{aligned} a_s x + b_s y + c_s z - d_s &= 0 \\ \vec{N}_s &= a_s\hat{i} + b_s\hat{j} + c_s\hat{k} \end{aligned}\right\} \quad (2.11)$$

โดยที่ $\vec{N}_s$ เป็นเวคเตอร์นอร์มัล (normal vector) ของระนาบ s $\hat{i}$, $\hat{j}$ และ $\hat{k}$ เป็นหน่วยเวคเตอร์ (unit vector) ในทิศทางตามแกน X , Y และ Z ตามลำดับ สำหรับ $\vec{r}_\alpha$ สามารถเขียนให้อยู่ในรูป

$$\vec{r}_\alpha = (x-x_i)\hat{i} + (y-y_j)\hat{j} + (z-z_k)\hat{k} \quad (2.12)$$

จากสมการ (2.11) และ (2.12) จะได้

$$\vec{r}_\alpha \cdot \vec{N}_s = \left[(x-x_i)\hat{i} + (y-y_j)\hat{j} + (z-z_k)\hat{k}\right] \cdot (a_s\hat{i} + b_s\hat{j} + c_s\hat{k})$$
$$= a_s(x-x_i) + b_s(y-y_j) + c_s(z-z_k)$$
$$= a_s x + b_s y + c_s z - a_s x_i - b_s y_j - c_s z_k$$
$$= d_s - a_s x_i - b_s y_j - c_s z_k \qquad (2.13)$$

ถ้าเขียน $\vec{r}_\alpha$ ใหม่ให้อยู่ในรูปโคซายน์แสดงทิศทาง (**direction cosines**) ตามรูป 2-4 จะได้

$$\vec{r}_\alpha = r_\alpha \cos(\alpha - 180)\hat{i} + r_\alpha \sin(\alpha - 180)\hat{j}$$
$$= r_\alpha \cos\alpha\,\hat{i} + r_\alpha \sin\alpha\,\hat{j} \qquad (2.14)$$

โดยที่ r_α เป็นขนาดของ $\vec{r}_\alpha$ และจากสมการ (2.11) และ (2.14) จะได้

$$\vec{r}_\alpha \cdot \vec{N}_s = r_\alpha(\cos\alpha\,\hat{i} + \sin\alpha\,\hat{j}) \cdot (a_s\hat{i} + b_s\hat{j} + c_s\hat{k})$$
$$= r_\alpha(a_s\cos\alpha + b_s\sin\alpha) \qquad (2.15)$$

จะเห็นว่าสมการ (2.15) เท่ากับสมการ (2.13) ดังนั้นได้

$$r_\alpha = \frac{d_s - a_s x_i - b_s y_j - c_s z_k}{a_s\cos\alpha + b_s\sin\alpha} \quad \text{, สำหรับระดับที่ศูนย์} \qquad (2.16)$$

ค่า r_α ที่คำนวณได้ตามสมการ (2.16) นั้น เป็นการคิดเฉพาะเมื่อมีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่ระดับที่ศูนย์เท่านั้น และจะเห็นว่า r_α มีความสัมพันธ์กับ a_s , b_s , c_s , d_s และ α ซึ่งทราบได้จากสมการของระนาบ s และมุมที่รังสีเอ็กซ์กระทำกับระนาบอ้างอิงตามลำดับ นอกจากนี้ r_α ยังสัมพันธ์กับ x_i , y_j และ z_k ซึ่งทราบได้จากวิธีประมาณ ดังนั้นจึงสามารถคำนวณ r_α ได้ไม่ยาก

สำหรับกรณีที่คิดถึงการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่ระดับใดๆ รูปแบบของ r_α จะเปลี่ยนไปบ้างดังนี้

6-3

$$r_\alpha = \frac{d_s - a_s x_i - b_s y_j - c_s z_k}{a_s \gamma_{\alpha x} + b_s \gamma_{\alpha y} + c_s \gamma_{\alpha z}}$$, สำหรับระดับใดๆ (2.17)

โดยที่ γ_α เป็นโคซายน์แสดงทิศทางของเวคเตอร์ที่มีทิศทางจากตำแหน่งที่มีการเลี้ยวเบนไปยังแหล่งกำเนิดของรังสีเอ็กซ์ โดยมีส่วนประกอบ (components) ในทิศทางตามแกน X, Y และ Z เป็น $\gamma_{\alpha x}$, $\gamma_{\alpha y}$ และ $\gamma_{\alpha z}$ ตามลำดับ เมื่อพิจารณา r_β ในทำนองเดียวกันจะได้

$$r_\beta = \frac{d_s - a_s x_i - b_s y_j - c_s z_k}{a_s \cos\beta + b_s \sin\beta}$$, สำหรับระดับที่ศูนย์ (2.18)

$$r_\beta = \frac{d_s - a_s x_i - b_s y_j - c_s z_k}{a_s \gamma_{\beta x} + b_s \gamma_{\beta y} + c_s \gamma_{\beta z}}$$, สำหรับระดับใดๆ (2.19)

โดยที่ γ_β เป็นโคซายน์แสดงทิศทางของเวคเตอร์ที่มีทิศทางจากตำแหน่งที่มีการเลี้ยวเบนไปในทิศทางการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ โดยมีส่วนประกอบในทิศทางตามแกน X , Y และ Z เป็น $\gamma_{\beta x}$, $\gamma_{\beta y}$ และ $\gamma_{\beta z}$ ตามลำดับ เมื่อคำนวณ r_α และ r_β ได้แล้ว จะสามารถคำนวณ $g(x_i,y_j,z_k)$ ได้เมื่อทราบสัมประสิทธิ์การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ตามเส้น นั่นคือ เมื่อทราบ $g(x_i,y_j,z_k)$ และลิมิตในทิศทางตามแกน X , Y และ Z แล้ว จะสามารถคำนวณผลรวม (sum) ทางขวามือของสมการ (2.9) ได้ค่าแฟคเตอร์การแพร่รังสีในแต่ละทิศทาง

2.3 ขั้นตอนการคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสี

จากหัวข้อ 2.2 จะเห็นว่า โดยวิธีการประมาณของเกาส์สามารถคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสีได้ เพื่อความกระจ่างชัด จะสรุปขั้นตอนการคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสีซึ่งสามารถกระทำได้ดังต่อไปนี้

ขั้นที่ 1 คำนวณสัมประสิทธิ์การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ตามเส้นของผลึกเดี่ยวที่ใช้ในการทดลองหาโครงสร้าง

ขั้นที่ 2 สร้างผลึกจำลองที่มีขนาดและรูปร่างเหมือนผลึกจริงมากที่สุด กำหนดแกนของผลึกลงในผลึกจำลองโดยจัดให้แกนชี้ไปในทิศเดียวกับแกนของผลึกจริง ด้วยวิธีการนี้ จะสามารถเรียกชื่อหรือกำหนดดัชนีมิลเลอร์ (Miller's indices) ของผิวหน้าผลึก และคำนวณสมการของผิวหน้าผลึกหรือระนาบที่ปิดล้อมผลึกได้ทุกระนาบ

ขั้นที่ 3 คำนวณมุม θ และ χ ของแต่ละทิศทางที่รังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบน โดยอาศัยดัชนีมิลเลอร์ประจำทิศทางนั้นๆ จาก θ และ χ ที่คำนวณได้จะทำให้ทราบมุม α และ β ได้โดยใช้สมการ (2.4)

ขั้นที่ 4 คำนวณ $g(x_i,y_j,z_k)$ ที่อยู่ในรูป

$$g(x_i,y_j,z_k) = \exp\left[-\mu(d_s-a_sx_i-b_sy_j-c_sz_k)\left\{\frac{1}{a_s\cos\alpha+b_s\sin\alpha}+\frac{1}{a_s\cos\beta+b_s\sin\beta}\right\}\right] \quad (2.20)$$

สำหรับระดับที่ศูนย์โดยอาศัยข้อมูลจากขั้นตอนที่ 1 , 2 และ 3

ขั้นที่ 5 คำนวณ u_i , u_j , u_k , R_i , R_j และ R_k โดยใช้เงื่อนไขตามสมการ (2.8) สำหรับกรณีที่คำนวณ u_i และ R_i

ขั้นที่ 6 คำนวณลิมิต a , b , $c(x_i)$, $d(x_i)$, $e(x_i,y_j)$ และ $f(x_i,y_j)$

ขั้นที่ 7 คำนวณปริมาตรของผลึก

ขั้นที่ 8 อาศัยข้อมูลจากขั้นตอนที่ 1 ถึง 7 นำมาคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสีโดยใช้สมการ (2.9)