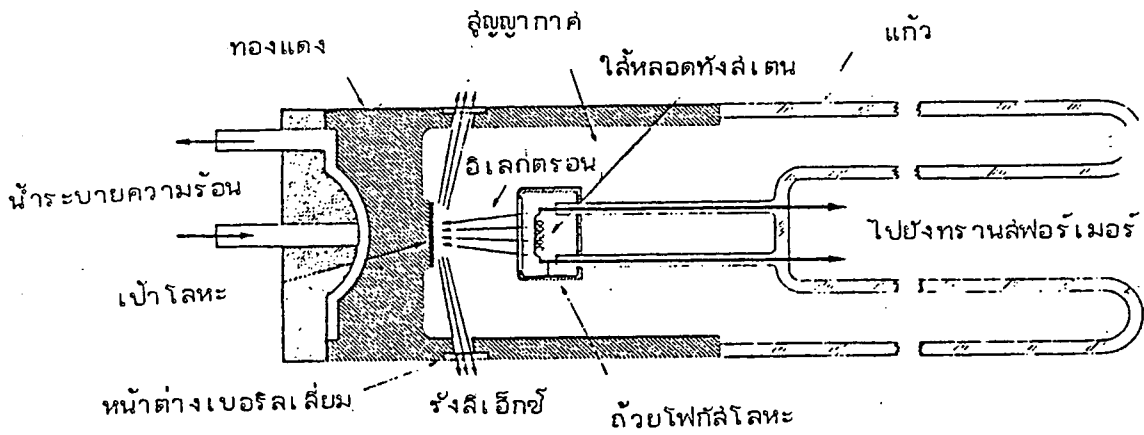


ทฤษฎีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผง

2.1 การเกิดรังสีเอ็กซ์

รังสีเอ็กซ์สามารถเกิดขึ้นได้จากหลอดรังสีเอ็กซ์ ซึ่งประกอบด้วยขั้วโลหะในหลอดแก้วสุญญากาศ รูปที่ 2.1(6) รังสีเอ็กซ์นี้จะเกิดขึ้นขณะที่อิเล็กตรอน ซึ่งมีประจุ e วิ่งผ่านความต่างศักย์ไฟฟ้า V ระหว่างขั้วไฟฟ้า คาโทด และ แอโนด โดยอิเล็กตรอนจะเกิดขึ้นจากไส้หลอด (filament) ที่คาโทด แล้วถูกเร่งด้วยความต่างศักย์ไฟฟ้า V ซึ่งในที่สุดอิเล็กตรอนจะมีพลังงานจลน์เป็น eV ที่แอโนด อิเล็กตรอนนี้จะพุ่งเข้าชนเป้าโลหะที่แอโนด และจะถูกหน่วงให้ช้าลง หรือทำให้หยุด ในการชนนี้พลังงานของอิเล็กตรอนจะลดลง ΔE พลังงานที่ลดลงนี้จะถูกเปลี่ยนไปเป็น โฟตอน ซึ่งมีความถี่ และความยาวคลื่น ตามสมการ



รูปที่ 2.1 ส่วนประกอบของหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์

$$\Delta E = h \nu \quad (2.1)$$

หรือ
$$\Delta E = h \frac{c}{\lambda} \quad (2.2)$$

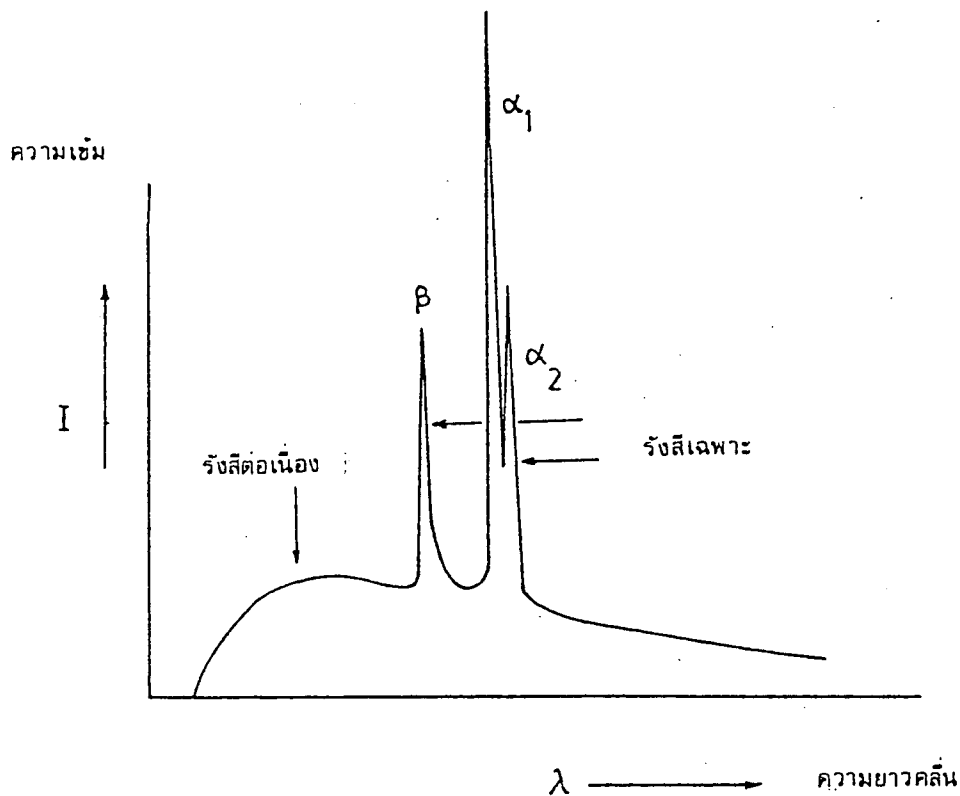
โดยที่ h = ค่าคงที่พลังค์ (Plank's constant)
 c = ความเร็วของแสง
 ν = ความถี่ของโฟตอน
 λ = ความยาวคลื่นของโฟตอน

ลักษณะของรังสีเอ็กซ์ที่เกิดขึ้น ดังกล่าวนี้อาจมีความถี่ต่าง ๆ ต่อเนื่องกันที่ความเข้มต่าง ๆ กัน

ถ้า อิเล็กตรอนที่มีพลังงานพอเหมาะพุ่งเข้าชนเป้าโลหะ จะทำให้อิเล็กตรอนในวงโคจรของอะตอมหลุดออกจากวงโคจร และอิเล็กตรอนในระดับวงโคจรที่มีพลังงานสูงกว่าจะตกลงมาแทนที่ พร้อมกับคายพลังงานออกมาในรูปของคลื่นรังสีเอ็กซ์ รังสีที่เกิดขึ้นนี้เป็นรังสีเฉพาะ (characteristic x-ray) ซึ่งความถี่ หรือความยาวคลื่นของรังสีชนิดนี้ จะขึ้นอยู่กับชนิดของเป้าโลหะ ถ้าอิเล็กตรอนที่หลุดออกจากวงโคจรเป็นอิเล็กตรอนในวงโคจรชั้นที่ K รังสีเอ็กซ์ที่เกิดขึ้นจากการเปลี่ยนระดับพลังงานจากวงโคจร L ไปสู่วงโคจร K เรียก รังสี $K\alpha$ และรังสีเอ็กซ์ที่เกิดขึ้นจากการเปลี่ยนระดับพลังงานจากวงโคจรชั้นที่ M ไปสู่ชั้นที่ K เรียก รังสี $K\beta$ รังสี $K\alpha$ จะสามารถแยกออกได้เป็น $K\alpha_1$ และ $K\alpha_2$ ซึ่งมีความยาวคลื่นแตกต่างกันเล็กน้อย อันเป็นผลสืบเนื่องมาจาก ความแตกต่างของสถานะทางควินตัมในระดับวงโคจรเดียวกัน เช่นเดียวกับ รังสี $K\beta$ ซึ่งแยกออกเป็นรังสี $K\beta_1$ และ $K\beta_2$

ดังนั้น จะเห็นได้ว่า รังสีเอ็กซ์ที่เกิดขึ้น จะประกอบด้วย 2 ส่วน คือ ส่วนที่มีการกระจายความเข้มของรังสีซึ่งมีความถี่ หรือความยาวคลื่นต่าง ๆ แบบต่อเนื่อง และส่วนที่มีความเข้มสูงมีความถี่ขึ้นกับชนิดของเป้าโลหะ การกระจายความเข้มของรังสีที่เกิดขึ้นทั้งสองชนิดนี้ได้แสดงไว้ในรูปที่ 2.2 (7) ตารางที่ 2.1 แสดงค่าของความยาวคลื่น $K\alpha_1$, $K\alpha_2$ และ $K\beta$ ที่เกิดขึ้นจากเป้าโลหะชนิดต่าง ๆ กันพร้อมทั้งค่า $\lambda K\alpha$ ซึ่งเป็นค่าเฉลี่ยของ $\lambda K\alpha_1$ และ $\lambda K\alpha_2$ โดยน้ำหนัก (weight) ของรังสี $K\alpha_1$ เป็น 2 เท่าของ $K\alpha_2$

$$K\alpha = \frac{1}{3} (K\alpha_2 + 2K\alpha_1) \quad (2.3)$$



รูปที่ 2.2 การกระจายความเข้มของคลื่นรังสีเอ็กซ์

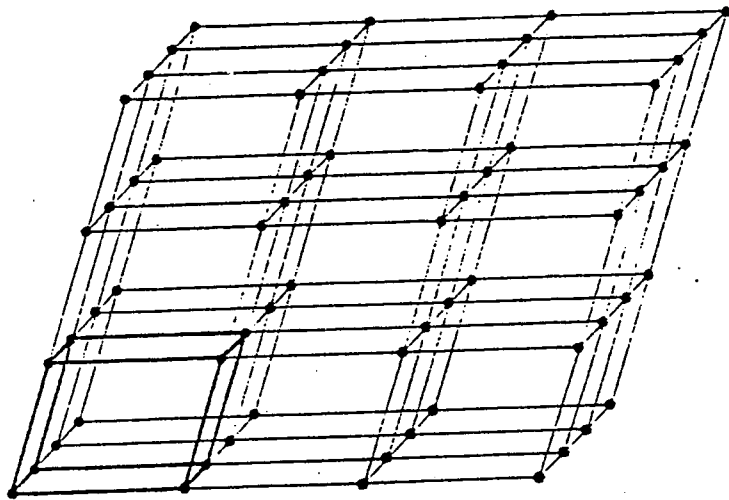
ตารางที่ 2.1 ความยาวคลื่นของ รังสีเอ็กซ์ชนิด K

ชนิดของธาตุ	$\lambda_{K\alpha}$ (Å°)	$\lambda_{K\alpha_2}$ (Å°)	$\lambda_{K\alpha_1}$ (Å°)	$\lambda_{K\beta}$ (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 ประกอบขึ้นด้วยอะตอมซึ่งจัดเรียงตัวอย่างเป็นระเบียบ สักขณะคล้าย ตารางสี่เหลี่ยมวางซ้อนกันเป็นจำนวนมาก โดยแต่ละชั้นจะห่างกันเป็นระยะเท่ากัน และมีแนวของ

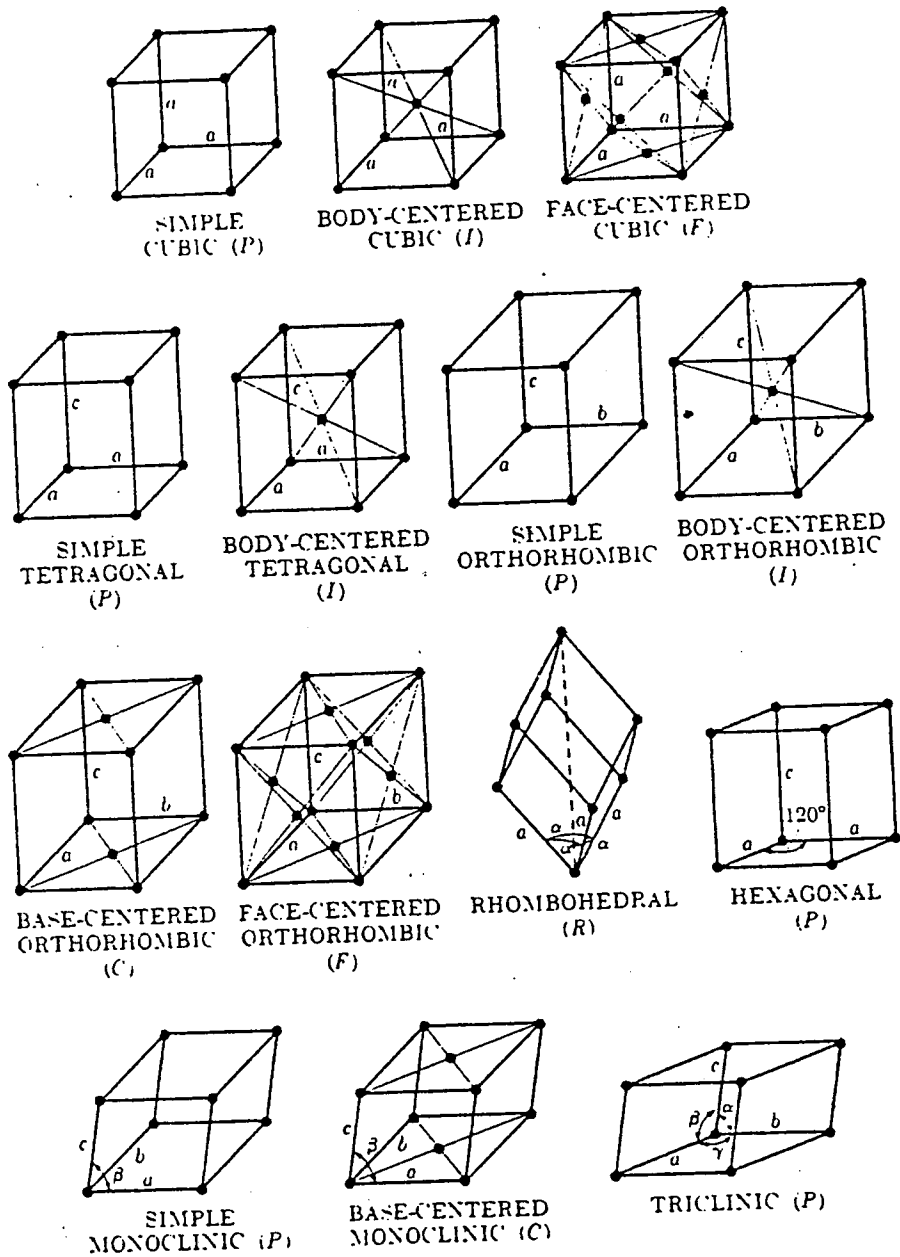
ตารางขนานกัน ดังในรูปที่ 2.3 (8) จุดซึ่งเกิดจากการตัดกันของชั้นตารางจะแทนอะตอม หรือกลุ่มของอะตอม โดยอะตอมทุก ๆ กลุ่มซึ่งแทนด้วยจุดดังกล่าวจะมีลักษณะการจัดเรียง อะตอมแบบเดียวกัน ตารางสี่เหลี่ยมซึ่งวางซ้อนกันเป็นชั้นนี้ จะเรียกว่า แถวลำดับแลททิซ (lattice array) และจุดที่เกิดจากการตัดกันของเส้นตารางนี้ จะเรียกว่าจุดแลททิซ (lattice point) จากรูปที่ 2.3 จะพบว่า ผลึกต่าง ๆ ประกอบด้วยหน่วยเซลล์สี่เหลี่ยม เล็ก ๆ จำนวนมาก หน่วยเซลล์เหล่านี้ สามารถแบ่งออกได้เป็น 7 ระบบ โดยจำแนกได้ด้วย องค์สัมมาตร ด้านและมุมของหน่วยเซลล์ทั้ง 7 ระบบนี้ได้แสดงในตารางที่ 2.2 นอกจากนี้ ระบบผลึกทั้ง 7 ยังสามารถที่จะแบ่งย่อยออกได้เป็น 14 แบบ บราวเวลล์แลททิซ ดังในรูปที่ 2.4 (9)



รูปที่ 2.3 ลักษณะของแถวลำดับแลททิซ และจุดแลททิซ ซึ่งอาจพิจารณาได้ว่าประกอบด้วยหน่วย เซลล์ (ซึ่งแสดงด้วยเส้นทึบ)

ตารางที่ 2.2 ระบบผลึกและบราเวส์แลททิส

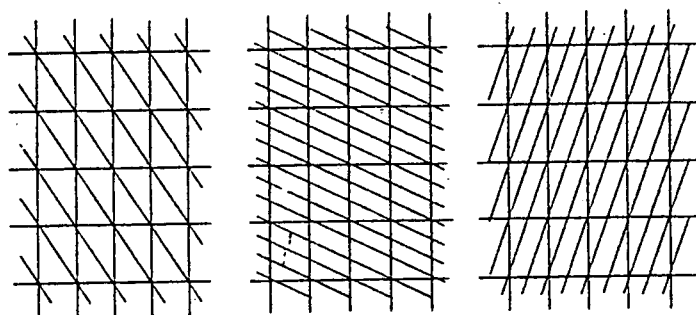
ระบบ	ด้านและมุม	บราเวส์แลททิส	สัญลักษณ์แลททิส
คิวบิก (cubic)	ด้านทั้งสามเท่ากันและตั้งฉากกัน $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	ปกติ บอดี้เซ็นเตอร์ เฟซเซ็นเตอร์	P I F
เตตราโกนัล (Tetragonal)	ด้านทั้ง 3 ตั้งฉากกัน และมีด้านเท่ากัน 2 ด้าน $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	ปกติ บอดี้เซ็นเตอร์	P I
ออร์ทอโรมบิก (Orthorhombic)	ด้านทั้งสามไม่เท่ากัน และตั้งฉากกัน $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	ปกติ บอดี้เซ็นเตอร์ เบสเซ็นเตอร์ เฟซ-เซ็นเตอร์	P I C F
รอมโบฮีดรัล (Rhombohedral)	ด้านทั้งสามยาวเท่ากัน และมีมุมระหว่างด้านทั้งสามเท่ากัน $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$		R
เฮกซะโกนัล (Hexagonal)	ด้านยาวเท่ากัน 2 ด้าน ทำมุม 120° ซึ่งกันและกันด้านที่ 3 ทำมุม 90° กับด้านทั้งสอง $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$	ปกติ	P
โมนอคลินิก (Monoclinic)	ด้านทั้งสามยาวไม่เท่ากัน และมีมุมฉาก 1 มุม $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$ แบบที่ 1 $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$ แบบที่ 2	ปกติ เบสเซ็นเตอร์	P C
ไตรคลินิก (Triclinic)	ด้านทั้งสามไม่เท่ากันและไม่ตั้งฉากกัน $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	ปกติ	P



รูปที่ 2.4 โครงผลึก 14 แบบของบราวเวส์

2.3 ระนาบของผลึก

พิจารณาจุดแลททิซใน 2 มิติ รูปที่ 2.5 (10) จะเห็นได้ว่าสามารถลากเส้นขนานผ่านจุดแลททิซในแนวต่าง ๆ กันได้เป็นจำนวนมากเช่นเดียวกันใน 3 มิติ จะสามารถสร้างระนาบขนาน ซึ่งประกอบขึ้นจากจุดแลททิซในสามมิติ โดยระนาบแต่ละชุดจะมีระยะห่างระหว่างระนาบเท่ากัน ระนาบเหล่านี้จะใช้ชื่อแทนชุดของระนาบด้วยดัชนีมิลเลอร์ (miller indices) h, k, l ดัชนีมิลเลอร์นี้จะเป็นเลขจำนวนเต็ม ซึ่งมีความหมายว่าชุดของระนาบนี้แบ่งแกน a ของหน่วยเซลล์ออกเป็น h ส่วนเท่ากัน แบ่งแกน b ของหน่วยเซลล์ออกเป็น k ส่วนเท่ากันและแบ่งแกน c ของหน่วยเซลล์ออกเป็น l ส่วนเท่ากัน



รูปที่ 2.5 ระนาบลำแบบในแลททิซสองมิติ

2.4 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยอะตอมซึ่งจัดเรียงตัวเป็นแถวลำดับแลททิซ

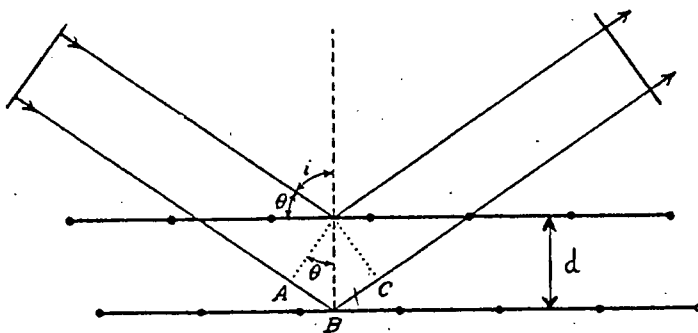
อะตอมของธาตุต่าง ๆ มีลักษณะคล้ายกับระบบไฟฟ้า ซึ่งสามารถถูกรบกวนด้วยสนามไฟฟ้าจากภายนอกในระบบได้ คลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่ผ่านเข้ามาในอะตอมสามารถทำให้เกิดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในอะตอม โดยที่อิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่ไปมาด้วยความที่เท่ากับคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า (11) ประจุซึ่งถูกเร่งด้วย คลื่นแม่เหล็กไฟฟ้านี้จะทำตัวเหมือนตัวกำเนิดของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่มีความถี่เดียวกัน หากคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้านี้เป็นคลื่นรังสีเอ็กซ์



โดยขบวนการดังกล่าว ปรากฏในอะตอมจะทำหน้าที่เหมือนตัวกำเนิดรังสีเอ็กซ์ ความถี่เดียวกับรังสีเอ็กซ์ซึ่งผ่านเข้ามาในอะตอม ขบวนการนี้เรียกว่า การกระเจิงของรังสีเอ็กซ์

เมื่อรังสีเอ็กซ์ตกกระทบบนอะตอมซึ่งจัดเรียงตัวอยู่บนระนาบ อะตอมเหล่านี้จะกระเจิงรังสีเอ็กซ์ ทำให้ดูเหมือนกับรังสีเอ็กซ์ตกกระทบบนระนาบแล้วเกิดการสะท้อนโดยระนาบพิจารณา อะตอมซึ่งจัดเรียงตัวเป็นชั้นแลททิซโดยมีระยะห่างระหว่างชั้นระนาบเท่ากับ d รูปที่ 2.6(12) เมื่อรังสีเอ็กซ์ตกกระทบบน และสะท้อนจากระนาบ โดยทำมุม θ กับระนาบ หน้าคลื่นของรังสีเอ็กซ์ซึ่งสะท้อนจากระนาบที่ต่างกันจะทำให้เกิดความแตกต่างของระยะทางเดินของคลื่นรังสีเอ็กซ์ โดยมีความแตกต่างของระยะทาง เป็นระยะจาก A ไป B รวมกับระยะจาก B ไป C ระยะนี้แทนด้วยสัญลักษณ์ Δ ดังนี้

$$\begin{aligned} \Delta &= ABC \\ &= 2AB \\ AB &= d_{hkl} \sin\theta \\ \Delta &= 2d_{hkl} \sin\theta \end{aligned} \tag{2.4}$$



รูปที่ 2.6 การสะท้อนของรังสีเอ็กซ์โดยระนาบซึ่งห่างกันเป็นระยะ d

ความแตกต่างของระยะทางเดินรังสีเอ็กซ์ เท่ากับ ความยาวคลื่น λ หรือเป็นจำนวนเท่าของความยาวคลื่น λ จะทำให้เกิดการเสริมกันของคลื่นรังสีเอ็กซ์ ดังนั้นจึงสามารถเขียนได้ว่า

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin\theta \tag{2.5}$$

ซึ่งเงื่อนไขดังกล่าวนี้ ก็คือ กฎของแบรกก์ (Bragg's law) นั่นเอง

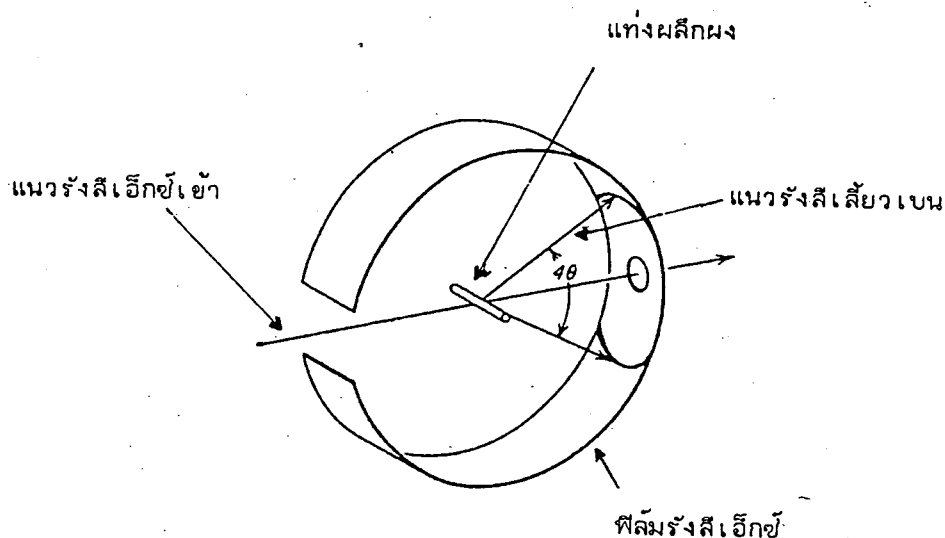
2.5 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผง

เมื่อรังสีเอ็กซ์ผ่านไปในผลึกผง รังสีเอ็กซ์จะกระทบกับผลึกเล็ก ๆ จำนวนมาก ผลึกเล็ก ๆ เหล่านี้มีการสัดเรียงตัวของระนาบในแนวต่าง ๆ กัน และมีผลึกผงจำนวนมากซึ่งระนาบเอียงทำมุมกับ แนวรังสีตกกระทบผลึกเป็นมุมที่สอดคล้องตามเงื่อนไขของแบรกก์ ได้แก่

$$\theta = \sin^{-1} \left(\frac{n\lambda}{2d_{hkl}} \right) \quad (2.6)$$

แนวทางเดินของรังสีเอ็กซ์ ซึ่งสะท้อนจากระนาบเหล่านี้จะประกอบกันขึ้นเป็นรูปกรวยรอบแนวรังสีที่ผ่านเข้ามาถึงผลึก โดยแนวรังสีสะท้อนจะทำมุม 2θ กับแนวรังสีที่ผ่านเข้ามาถึงผลึก รูปที่

2.7 (13) แสดงทางเดินของรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนจากตัวอย่างผลึกผงไปยังฟิล์ม ซึ่งจัดวางในลักษณะของกล้องแบบ เดอบายเชอเรอร์ (Debye Scherrer)



รูปที่ 2.7 ทางเดินของรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนจากผลึกผงไปยังฟิล์มซึ่งจัดวางในลักษณะของกล้องแบบ เดอบายเชอเรอร์

2.6 ความสัมพันธ์ระหว่างระยะห่างของระนาบกับด้านของเฮลล์

เฮลล์ของผลึกซึ่งมีแกนทั้งสามตั้งฉากกัน และมีความยาวของด้านทั้งสามเป็น a , b และ c ได้แสดงไว้ในรูปที่ 2.8 (ก) (14) ชั้นของระนาบ hkl แบ่งแกน a ออกเป็น h ส่วนเท่ากัน แบ่งแกน b ออกเป็น k ส่วนเท่ากัน และแบ่งแกน c ออกเป็น l ส่วนเท่ากัน พิจารณาระยะ d ซึ่งเป็นระยะห่างระหว่างระนาบ hkl ที่ผ่านจุดกำเนิดกับระนาบแรกจากจุดกำเนิด รูปที่ 2.8 (ข) แสดงภาพของระนาบบริเวณใกล้จุดกำเนิด จากรูป 2.8 (ข) ระยะ d จะเป็นระยะตั้งฉากจากจุดกำเนิดมายังระนาบ ระนาบนี้จะตัดแกน a , b และ c ที่ A , B และ C ตามลำดับ โดยจุดตัดจะห่างจากจุดกำเนิดไปตามแกน a เป็นระยะ $\frac{a}{h}$ ตามแกน b เป็นระยะ $\frac{b}{k}$ และตามแกน c เป็นระยะ $\frac{c}{l}$ เพื่อความสะดวกในการหาค่า d สร้างระนาบขึ้นระนาบหนึ่ง ให้ระนาบนี้เป็นระนาบผ่านแกน c ตั้งฉาก และตัดกับระนาบ (hkl) ตามแนว CS ตัดระนาบ AOB ตามแนว OS ภาพของ AOB ได้แยกแสดงไว้ในรูปที่ 2.8 (ค) จาก OS ตั้งฉากกับ AB สามเหลี่ยม AOB และ ASO จึงเป็นสามเหลี่ยมคล้าย ดังนั้น

$$\frac{OA}{OS} = \frac{AB}{OB} \quad (2.8)$$

แทนค่า ความยาวของ OA , OS , AB และ OB

$$\frac{\frac{a}{h}}{s} = \frac{\sqrt{\frac{b^2}{k^2} + \frac{a^2}{h^2}}}{\frac{b}{k}}$$

หรือ

$$\frac{1}{s} = \frac{hk}{ab} \sqrt{\frac{b^2}{k^2} + \frac{a^2}{h^2}}$$

$$\frac{1}{s} = \sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2}} \quad (2.9)$$

ในทำนองเดียวกัน ระนาบ COS ซึ่งแสดงแยกไว้ในรูปที่ 2.8 (ง) จะมีเส้น OD ตั้งฉากกับ SC ทำให้ SOC และ SDO เป็นสามเหลี่ยมคล้าย ดังนั้น

$$\frac{OS}{OD} = \frac{SC}{OC} \quad (2.10)$$

แทนค่า OS , OD , SC และ OC ลงใน (2.10)

$$\begin{aligned} \frac{s}{d} &= \frac{\sqrt{\frac{c^2}{l^2} + s^2}}{\frac{c}{l}} \\ \frac{1}{d} &= \frac{1}{cs} \sqrt{\frac{c^2}{l^2} + s^2} \\ \frac{1}{d} &= \sqrt{\frac{1}{s^2} + \frac{1}{c^2}} \end{aligned} \quad (2.11)$$

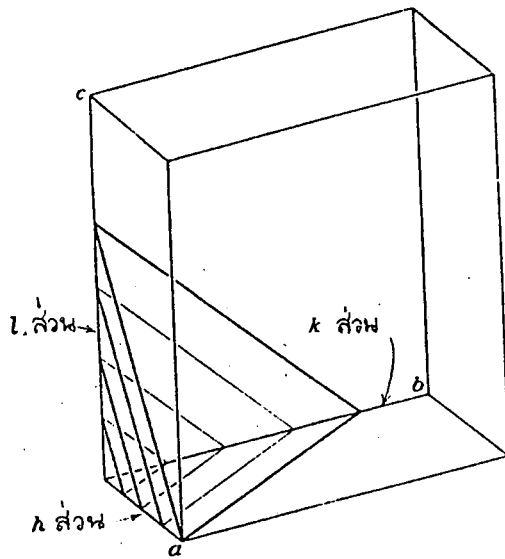
นำค่าของ $\frac{1}{S}$ จากสมการ (2.9) แทนลงใน สมการ (2.11)

$$\frac{1}{d} = \sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}} \quad (2.12)$$

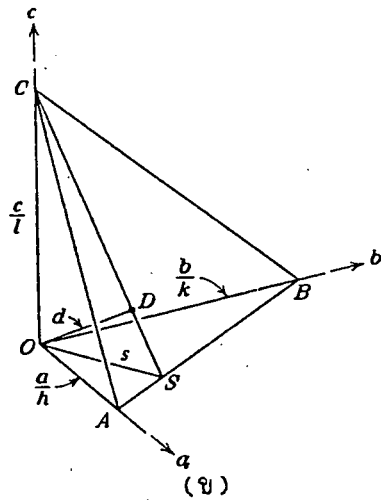
สมการ (2.12) นี้ เป็นสมการแสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะห่างของระนาบในผลึก กับแกนทั้งสามของผลึกในกรณีที่มีแกนทั้งสามตั้งฉากกัน สำหรับระบบผลึกซึ่งมีแกนทั้งสามไม่ตั้งฉากกัน การคำนวณค่อนข้างจะซับซ้อน ถ้าใช้วิธีการข้างต้นนี้ อย่างไรก็ตามสมการดังกล่าวนี้สามารถคำนวณได้โดยทฤษฎีโครงสร้างผลึกส่วนกลับ ซึ่งรวบรวมผลแสดงไว้ในตารางที่ 2.3

ตารางที่ 2.3 ความสัมพันธ์ระหว่างระยะห่างของระนาบกับ แลททิส์พารามิเตอร์

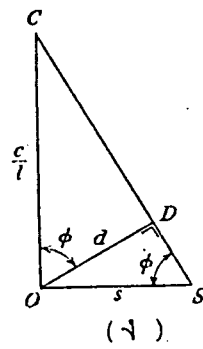
ระบบผลึก	$\frac{1}{d^2}$
คิวบิก	$\frac{1}{a^2} (h^2 + k^2 + l^2)$
เตตระโกนัล	$\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$
ออร์ทอโรมบิก	$\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$
เฮกซะกอนัล	$\frac{4}{3a^2} (h^2 + hk + k^2) + \frac{l^2}{c^2}$
รวมโบฮีตรัล	$\frac{1}{a^2} \frac{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + kl + lh)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{1 + 2 \cos^2 \alpha - 3 \cos^2 \alpha}$
โมโนคลินิก	$\frac{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} - \frac{2hk \cos \gamma}{ab}}{\sin^2 \gamma} + \frac{l^2}{c^2}$ แบบที่ 1 (first setting)
	$\frac{\frac{h^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2hl \cos \beta}{ac}}{\sin^2 \beta} + \frac{k^2}{b^2}$ แบบที่ 2 (second setting)
ไตรคลินิก	$\frac{h^2}{a^2} \sin^2 \alpha + \frac{k^2}{b^2} \sin^2 \beta + \frac{l^2}{c^2} \sin^2 \gamma + \frac{2hk}{ab} (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)$ $+ \frac{2kl}{bc} (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) + \frac{2lh}{ca} (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta)$
	$1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma$



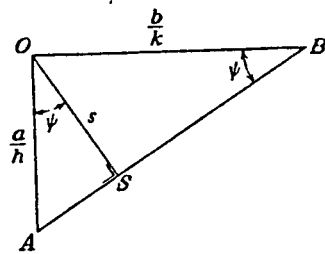
(ก)



(ข)



(ง)

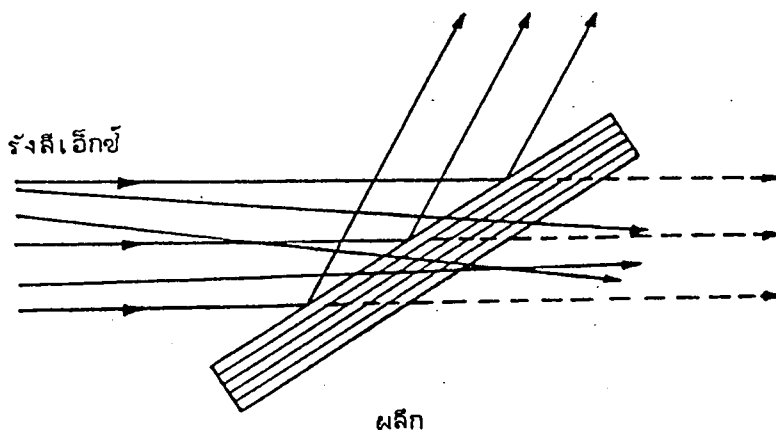


(ค)

รูปที่ 2.8 (ก) หน่วยเซลล์ซึ่งด้านทั้งสามถูกแบ่งโดยระนาบ hkl
 (ข) ระนาบบริเวณจุดกำเนิดของ (ก)
 (ค) และ (ง) ภาพของสามเหลี่ยม AOB และ SOC ในภาพ ข ซึ่งแยกแสดงเพื่อให้สะดวกในการคำนวณระยะ d

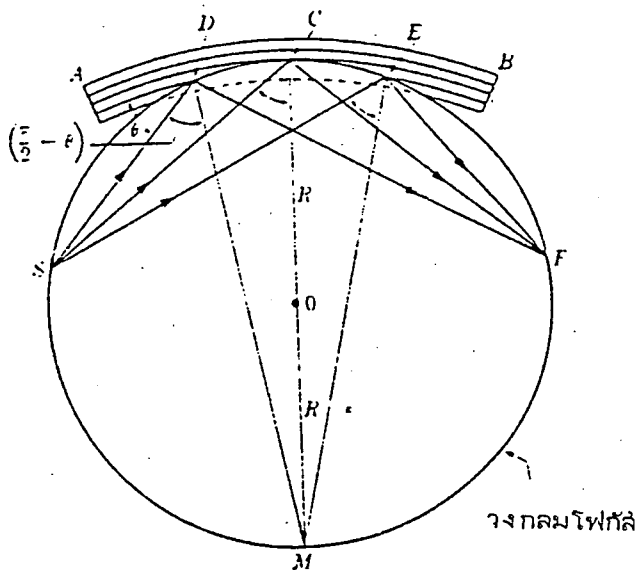
2.7 การทำให้เกิดรังสีเอ็กซ์ เอกเรงค์ ด้วยวิธีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกเดี่ยว

จากที่ได้กล่าวมาแล้ว ระนาบของผลึกสามารถสะท้อนรังสีเอ็กซ์ตามเงื่อนไขของแบรกก์โดยรังสีเอ็กซ์ที่เกิดในทิศทางมุม θ ตามเงื่อนไขของแบรกก์ จะมีการเสริมกันของคลื่นรังสีเอ็กซ์ หลักการในการทำให้เกิดรังสีเอ็กซ์เอกเรงค์ ก็คือ ให้รังสีเอ็กซ์จากหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ผ่านเข้าไปในผลึกเดี่ยว ซึ่งจัดวางให้ระนาบของผลึกอยู่ในตำแหน่งที่จะสะท้อนรังสีเอ็กซ์ความยาวคลื่นที่ต้องการไปในทิศทาง ตามเงื่อนไขของแบรกก์ รังสีเอ็กซ์จากการสะท้อนนี้จะเป็นรังสีเอกเรงค์ ซึ่งสามารถที่จะนำไปใช้ประโยชน์ในการถ่ายภาพวิเคราะห์หาโครงสร้างของผลึกต่อไป ในทางปฏิบัติแล้วผลึกที่นำมาใช้ในการให้กำเนิดรังสีเอ็กซ์เอกเรงค์นี้จะต้องมีคุณสมบัติที่สามารถที่จะโฟกัส (focus) รังสีเอ็กซ์เข้าด้วยกันเพื่อให้เกิดความเข้มเพียงพอสำหรับการใช้ พิจารณารูปที่ 2.9 (15) รังสีเอ็กซ์ที่ผ่านเข้ามายังผลึก จะมีบางส่วนทำมุมกับระนาบของผลึกสอดคล้องกับการสะท้อนตามเงื่อนไขของแบรกก์ เนื่องจากรังสีเอ็กซ์ซึ่งสะท้อนจากระนาบนี้เป็นส่วนรังสีขนาน และเป็นเพียงบางส่วนของรังสีที่ผ่านเข้ามายังผลึก ทำให้ความเข้ม ของรังสี ไม่เพียงพอสำหรับการใช้งานการเพิ่มประสิทธิภาพในการสะท้อน



รูปที่ 2.9 การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์บางส่วนซึ่งทำมุมกับระนาบของผลึกสอดคล้องกับเงื่อนไขของแบรกก์

ของคลื่นรังสีเอ็กซ์สามารถทำได้โดยการตัดให้ระนาบของผลึกมีลักษณะโค้ง และยึดออกบางส่วน เพื่อให้มีคุณสมบัติในการโฟกัสรังสีเอ็กซ์ ดังที่ได้แสดงในรูปที่ 2.10 (15)



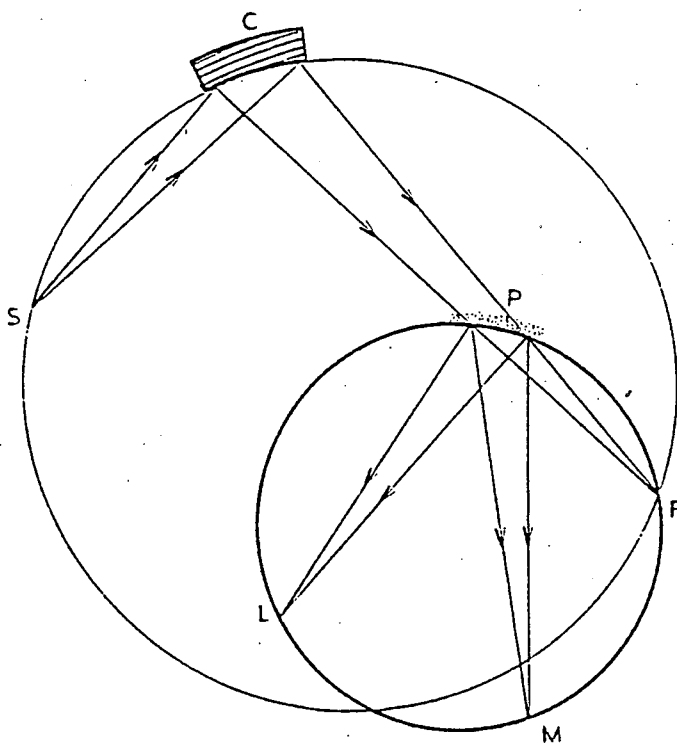
รูปที่ 2.10 การโฟกัสของรังสีเอ็กซ์โดยผลึก ซึ่ง สัดออกบางส่วนและตัดให้โค้ง แบบ โจนแฮมสัน (Johansson)

จากรูปที่ 2.10 AB เป็นผลึกที่ใช้ในการสะท้อนรังสีเอ็กซ์ จุด S เป็นแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ แนวของรังสีจากจุด S จะผ่านผลึก AB ซึ่งตัดผิวออกบางส่วน คือ ส่วนที่โค้งด้วยเส้นประ แนวระนาบของผลึก AB จะถูกตัดให้มีรัศมีความโค้ง $= CM = 2R$ แนวเส้น DM, CM และ EM จะตั้งฉากกับระนาบของผลึก จุด D, C, E และ M จะอยู่บนผิววงกลม รัศมี R ซึ่งเป็นวงกลมโฟกัส เช่นเดียวกับ S ซึ่งเป็นจุดที่แทนตำแหน่งของแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ ดังนั้นแนวของรังสีซึ่งบานออกจากจุด S ไปกระทบผลึกและทำมุมกับระนาบของผลึกสอดคล้องตามเงื่อนไขของแบรกก์จะ โฟกัสไปยังตำแหน่งเดียวกันบนผิวของวงกลมโฟกัส (focusing circle)

ทั้งนี้ เนื่องจากมุม $\widehat{SDM} = \widehat{SCM} = \widehat{SEM} = \left(\frac{\pi}{2} - \theta\right)$ ต่างก็เป็นมุม
 รองรับส่วนโค้งเดียวกัน หรือ $\widehat{SDF} = \widehat{SCF} = \widehat{SEF}$ เพราะต่างก็เป็นสองเท่าของ \widehat{SDM} ,
 \widehat{SCM} และ \widehat{SEM} ตามลำดับ แต่โดยที่ \widehat{SDF} , \widehat{SCF} และ \widehat{SEF} เป็นมุมที่ผิวของวงกลมเดียวกัน
 และมีค่ามุมเท่ากัน จึงเป็นมุมรองรับส่วนโค้งเดียวกัน คือ ส่วนโค้ง SF นั่นคือ รังสีเอ็กซ์มี
 แนวของรังสีบานออกจากจุด S และสะท้อนโดยระนาบของผลึกตามเงื่อนไขของแบรกก์ จะถูก
 โฟกัสไปยังจุด F วิธีการทำให้เกิดรังสีเอกเรงค์ดังกล่าวนี้เป็นวิธีการ แบบ โจแฮนสัน
 (Johansson)

2.8 กล้องถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ชนิด กิเดิเบร์เออก์

กล้องถ่ายภาพแบบกิเดิเบร์เออก์เป็นกล้องถ่ายภาพชนิดโฟกัสโดยใช้รังสีเอ็กซ์เอกรงค์จากการเลี้ยวเบนโดยผลึกเดี่ยวตั้งที่ใดกล่าวในหัวข้อที่ 2.7 ลักษณะของกล้องถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์แบบนี้ได้แสดงไว้ในรูปที่ 2.11 (1-6) ลักษณะที่ดีของกล้องชนิดนี้ คือ มีการแยก



รูปที่ 2.11 วิธีการสร้างกล้องแบบกิเดิเบร์เออก์ซึ่งใช้รังสีเอ็กซ์เอกรงค์จากการเลี้ยวเบนของผลึกเดี่ยว

ของเส้นการสะท้อนที่ดี (Resolution) เมื่อเทียบกับกล้องแบบเดอบายเชอเรอร์ ซึ่งจะได้กล่าวถึงรายละเอียดในหัวข้อต่อไป แต่อย่างไรก็ตามกล้องชนิดนี้มีขีดจำกัดในการถ่ายภาพ คือ ภาพที่ได้จะเป็นเพียงส่วนที่อยู่ในมุม θ ระหว่าง 0 ถึง 45 องศา

2.9 กล้องถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ ชนิดเดอบายเชอเรอร์

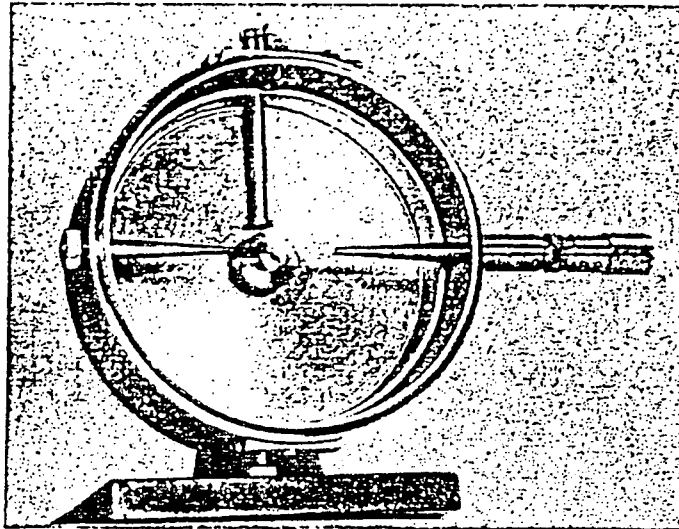
กล้องแบบเดอบายเชอเรอร์มีลักษณะเป็นวงกลมทรงกระบอกสั้น ฟิล์มรังสีเอ็กซ์จะยึดเป็นวงกลม ติดกับผิวด้านในกล้อง โดยมีสิ่งที่ต้องการจะถ่ายภาพ ติดอยู่ในแนวศูนย์กลางของทรงกระบอกด้วยแกนสำหรับยึด ผลึก ยึดสำหรับรังสีเอ็กซ์เข้า และออกจะเกาะอยู่ทางด้านข้างของตัวกล้องตั้งฉากกับแนวศูนย์กลางของทรงกระบอก รูปที่ 2.12 (17) ความสามารถในการแยกของเส้นที่ปรากฏบนฟิล์มจากกล้องชนิดนี้จะขึ้นกับขนาดของกล้อง โดยกล้องขนาดใหญ่จะมีความสามารถในการแยกของเส้นดีกว่ากล้องขนาดเล็ก รูปที่ 2.13 (18) แสดงให้เห็นถึงความสามารถในการแยกของเส้นจากกล้องแบบเดอบายเชอเรอร์เปรียบเทียบกับกล้องแบบกึ่งเดี่ยวเอ็กซ์ที่มีขนาดเส้นผ่าศูนย์กลางเท่ากัน โดยพิจารณาจากระยะห่างของเส้นการสะท้อนของมุม θ_1 และ θ_2 สำหรับกล้องชนิดกึ่งเดี่ยวเอ็กซ์ระยะนี้คือ $4r_G(\theta_2 - \theta_1)$ และสำหรับกล้องแบบเดอบายเชอเรอร์คือ $2r_D(\theta_2 - \theta_1)$ โดยที่ r_G คือ รัศมีของกล้องชนิดกึ่งเดี่ยวเอ็กซ์ และ r_D คือ รัศมีของกล้องชนิดเดอบายเชอเรอร์ ดังนั้นจะเห็นได้ว่า กล้องกึ่งเดี่ยวเอ็กซ์ที่มีรัศมี เท่ากับรัศมีของกล้องชนิดเดอบายเชอเรอร์ ระยะห่างระหว่างเส้นการสะท้อนของมุม θ_1 และ θ_2 จะเป็นสองเท่าของกล้องชนิดเดอบายเชอเรอร์ หรืออาจกล่าวได้ว่า กล้องชนิดกึ่งเดี่ยวเอ็กซ์ มีความสามารถในการแยกเส้นการสะท้อนได้ดีกว่ากล้องชนิดเดอบายเชอเรอร์ สำหรับข้อดีของกล้องชนิดเดอบายเชอเรอร์ คือ สามารถที่จะบันทึกเส้นการสะท้อนได้ในมุม θ ที่กว้างกว่า เนื่องจากสารตัวอย่างอยู่ที่ศูนย์กลางของกล้อง

2.10 กล้องถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ชนิดจุดหลุมสูง

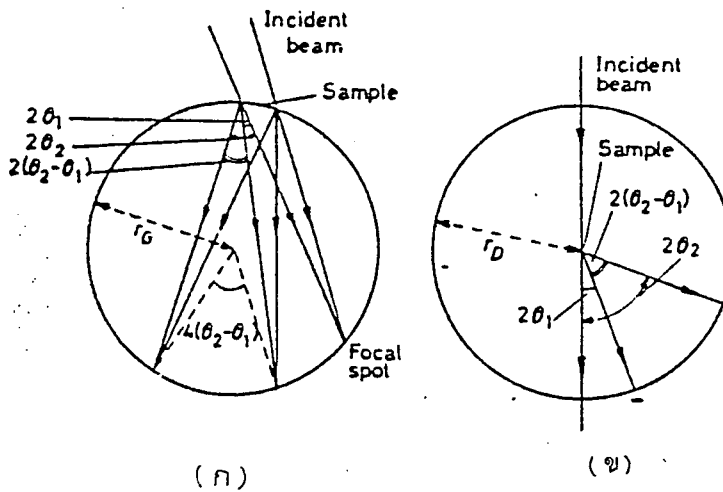
ลักษณะและส่วนประกอบต่าง ๆ ของกล้องถ่ายภาพจุดหลุมสูงนี้ได้แสดงไว้ในรูปที่ 2.14 ส่วนประกอบที่แตกต่างจากกล้องถ่ายภาพแบบเดอบายเชอเรอร์ที่ใช้สำหรับถ่ายภาพในจุดหลุมปกติ คือ ห้องสุญญากาศ เต้าเผา ฐานกล้อง และระบบควบคุมทางไฟฟ้า

1. ห้องสุญญากาศ

ห้องสุญญากาศจะใช้เพื่อป้องกันการเกิดปฏิกิริยาของสารที่ทำกรถ่ายภาพกับอากาศ ขณะที่ทำการถ่ายภาพที่จุดหลุมสูง มีลักษณะเป็นทรงกระบอกปิดด้านบน และเปิดด้านใต้ ด้านข้างมีช่องซึ่งปิดด้วยแผ่น เซลโลเฟน (cellophane) สำหรับให้รังสีเอ็กซ์จากการสะท้อน โดย



รูปที่ 2.12 กล้องถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ ชนิดเดอบายเชอเรอร์



รูปที่ 2.13 ความสามารถในการแยกของเส้นการสะท้อนจากกล้อง ชนิดเดอบายเชอเรอร์

เปรียบเทียบกับกล้องชนิดกีเพอร์เฮกท์

(ก) กล้องชนิดกีเพอร์เฮกท์

(ข) กล้องชนิดเดอบายเชอเรอร์

ผลึกผ่านไปยังฟิล์มไวด์ ห้องสูญญากาศนี้จะมีป้องกันสำหรับให้น้ำผ่านเพื่อระบายความร้อน และป้องกันความเสียหายที่เกิดขึ้นจากความร้อน

2. เตาเผา

ภายในห้องสูญญากาศจะมีเตาเผา ซึ่งประกอบด้วยลวดทำความร้อนนอกแบบเพื่อให้เกิดความร้อนอย่างสม่ำเสมอ ที่บริเวณศูนย์กลางของเตา และมีลวดสำหรับวัดอุณหภูมิ (thermocouple) จำนวน 2 เส้น เส้นหนึ่งอยู่ในแนวตั้ง และอีกเส้นหนึ่งอยู่ในแนวราบปลายของขดลวดทำความร้อน และปลายของเส้นลวดวัดอุณหภูมิจะเสียบอยู่บนฐานของกล่อง

3. ฐานกล่อง

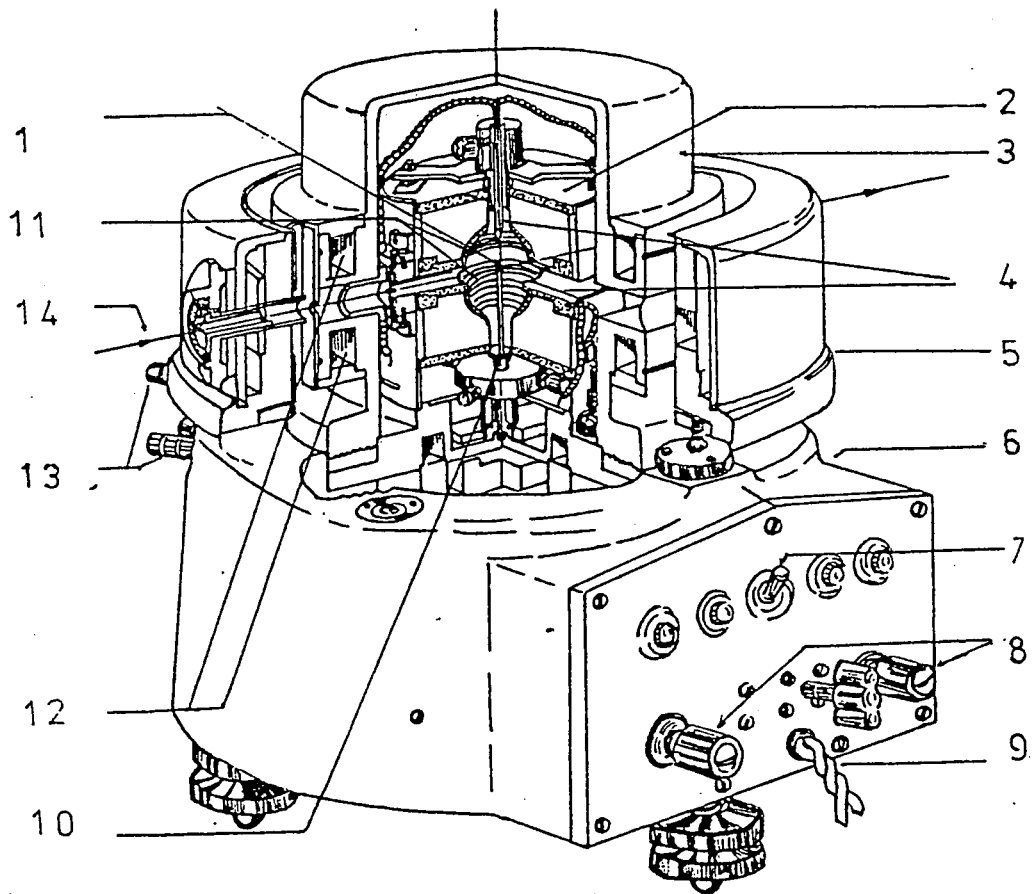
ด้านบนของฐานกล่องจะหล่อขึ้นด้วยโลหะให้พอดีสำหรับติดตั้งชิ้นส่วนต่าง ๆ ดังนั้นฐานของกล่องจึงเป็นส่วนที่กำหนดตำแหน่งของกล่อง และชิ้นส่วนอื่น ๆ ด้านในฐานของกล่องจะมีมอเตอร์ซึ่ง ทดรอบให้ใช้เวลาในการหมุน 4 รอบต่อนาที เพื่อทำหน้าที่หมุนสารตัวอย่างจากฐานของกล่องนี้จะมีปลั๊กสำหรับเสียบสายเพื่อต่อลวดวัดอุณหภูมิเข้ากับมิเตอร์วัดอุณหภูมิ และมีขั้วสำหรับต่อสายจากลวดทำความร้อน และมอเตอร์ไปยังระบบควบคุมไฟฟ้า

4. ระบบควบคุมไฟฟ้า

ระบบควบคุมไฟฟ้าประกอบด้วยวงจรดังรูปที่ 2.15 ลากรูปจะเห็นได้ว่าจะสามารถปรับค่าของกระแสไฟฟ้าที่ผ่านลวดทำความร้อนได้โดยการปรับ คัทยไฟฟ้าที่ V.T.1 ซึ่งเป็น แวริเอเบิลทรานส์ฟอร์มเมอร์ (variable transformer) โดยอ่านค่าของกระแสไฟฟ้าที่ผ่านขดลวดความร้อนจากแอมป์มิเตอร์ ดังนั้น เราจึงสามารถควบคุมอุณหภูมิภายในเตาเผาได้ด้วยการกำหนดค่าของกระแสไฟฟ้าที่ผ่านขดลวดความร้อน

2.11 การหาแลททิสพารามิเตอร์ด้วยวิธีการออร์กัลป์ เส้นโค้ง

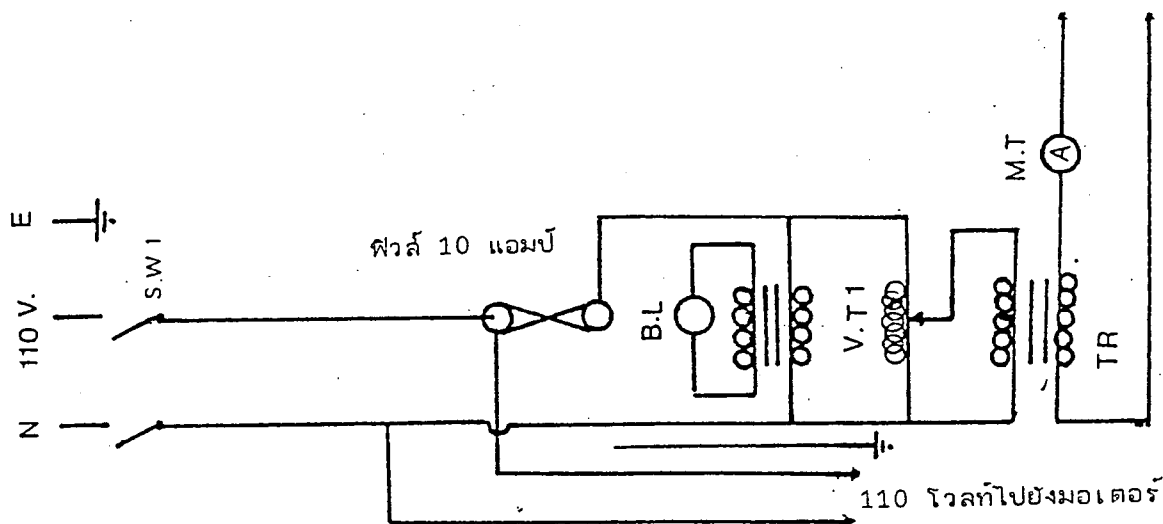
วิธีการหนึ่งที่นิยมใช้ในการหาค่าของแลททิสพารามิเตอร์ในระบบคิวบิก คือการลากเส้นโค้งผ่านแนวของจุด ซึ่งได้จากการลงจุด (plot) แลททิสพารามิเตอร์ a กับ ค่าฟังก์ชันของมุม θ ที่ได้คำนวณจากเส้นการสะท้อนเดียวกันโดยถือเอาค่าของ a ที่เส้นโค้งตัดกับแกน a เมื่อมุม θ เข้าสู่ 90° เป็นค่าแลททิสพารามิเตอร์ที่ถูกต้อง ฟังก์ชันของมุม θ ที่ใช้นี้เรียกว่า ฟังก์ชันออร์กัลป์ (Extrapolation function) ในการหาฟังก์ชันออร์กัลป์จะต้องพิจารณาปริมาณต่างๆ ที่มีผลต่อการวัดมุม θ และหาว่าความคลาดเคลื่อนของมุม θ นั้นจะเป็นอย่างไร ที่มุม θ ต่าง ๆ



รูปที่ 2.14 ส่วนประกอบของกล้องถ่ายภาพการไล้ขาว เบนรังสี เอ็กซ์ที่อุณหภูมิสูงชนิดเตอบายเชอเวอร์

- | | | | |
|---|----------------|----|--------------------------|
| 1 | ตำแหน่งผลึก | 8 | ขั้วต่อสายขดลวดความร้อน |
| 2 | เตาเผา | 9 | สายต่อจากลวดวัดอุณหภูมิ |
| 3 | ห้องสูญญากาศ | 10 | แท่นยึดผลึก |
| 4 | ลวดวัดอุณหภูมิ | 11 | ขดลวดความร้อน |
| 5 | ตลับบรรจุฟิล์ม | 12 | ช่องทางเดินของน้ำ |
| 6 | ฐานกล้อง | 13 | ท่อน้ำระบายความร้อน |
| 7 | สวิตช์มอเตอร์ | 14 | แนวทางเดินของรังสีเอ็กซ์ |

ต่อไปยังขดลวดความร้อน 360 วัตต์



รูปที่ 2.15 วงจรไฟฟ้า ซึ่งใช้กับกล้องถ่ายภาพอุณหภูมิสูง

สำหรับกล้องแบบเดอบายเชอเรอร์ ปริมาณที่มีผลต่อความคลาดเคลื่อนของมุม θ คือ

ความยาวของลวดอย่างในลวดรังสีเอ็กซ์

ดัชนีหักเหของผลึก

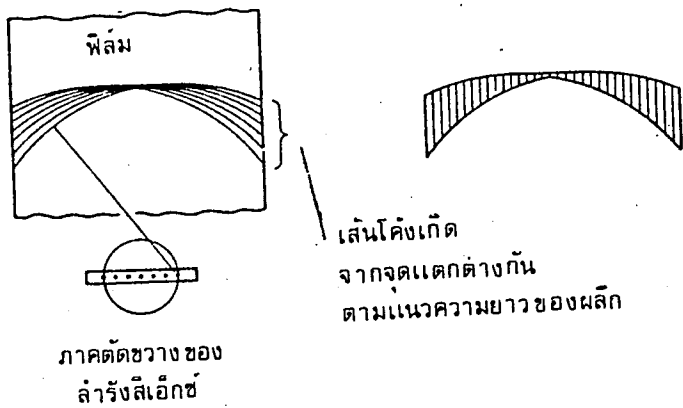
การหดสั้นของฟิล์ม (film shrinkage)

ความคลาดเคลื่อนของลวดอย่างจากศูนย์กลางของกล้อง (eccentric error)

การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ ของลวดอย่าง

2.11.1 ความคลาดเคลื่อนของมุม θ เนื่องจากความยาวของลวดอย่าง

เส้นที่ปรากฏบนฟิล์มภาพถ่ายผลึกผง เกิดขึ้นจากการสะท้อนของรังสีเอ็กซ์ โดยผลึกที่ตำแหน่งต่าง ๆ ของลวดอย่างมาตกลงบนฟิล์ม จากรูปที่ 2.16 (13) จะเห็นว่าความยาวของลวดอย่างที่เตรียมขึ้น จะมีผลต่อรูปร่างของเส้นที่ปรากฏบนฟิล์ม ดังนั้นความยาวของลวดอย่างจึงมีผลต่อความคลาดเคลื่อนในการวัดตำแหน่งของเส้นบนฟิล์ม อย่างไรก็ตาม พบว่าความคลาดเคลื่อนนี้มีค่าน้อยมาก และสามารถแก้ไขได้โดยการเตรียมลวดอย่างให้มีขนาดสั้นลง



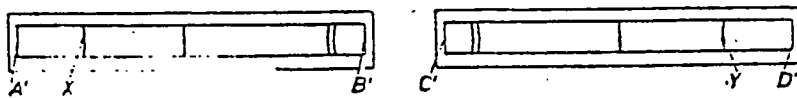
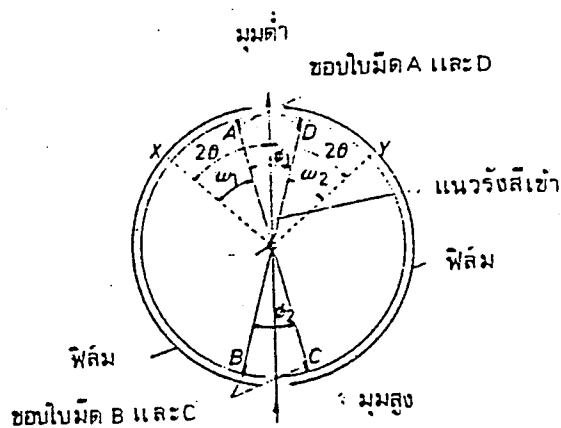
รูปที่ 2.16 ลักษณะของ เส้นการสะท้อนซึ่งเกิดจากความยาวของลำรังสีตัวอย่าง

2.11.2 ความคลาดเคลื่อนเนื่องจากรังสีหักเหของผลึก

เมื่อคลื่นผ่านไปในตัวกลางที่มีดัชนีหักเหแตกต่างกันจะทำให้เกิดการหักเหของคลื่นได้เช่นเดียวกัน รังสีเอ็กซ์ก็ผ่านไปในตัวกลางของสารตัวอย่าง จะทำให้เกิดการหักเหของรังสีเอ็กซ์ การหักเหของรังสีเอ็กซ์นี้พบว่าจะทำให้ตำแหน่งของเส้นการสะท้อนเปลี่ยนไป (19) ซึ่งมีผลทำให้การคำนวณเซลล์พารามิเตอร์คลาดเคลื่อนไป อย่างไรก็ตามพบว่า ปริมาณความคลาดเคลื่อนของแลตทิซพารามิเตอร์ที่เกิดจากการหักเหของรังสีเอ็กซ์นี้มีค่าน้อยมาก คือ ประมาณ 1 ใน 10,000 ถึง 1 ใน 200,000 ส่วนของแลตทิซพารามิเตอร์ ด้วยเหตุนี้จึงอาจจะไม่คำนึงถึงได้ (19)

2.11.3 ความคลาดเคลื่อนเนื่องจากการหดสั้นของฟิล์ม

ฟิล์มภาพถ่ายรังสีเอ็กซ์สามารถที่จะหดสั้นได้ เนื่องจากขั้นตอนของการล้างฟิล์ม และการทำให้แห้ง การหดสั้นของฟิล์มนี้มีผลต่อความคลาดเคลื่อนของมุม θ การแก้ความคลาดเคลื่อนชนิดนี้สามารถทำได้โดยการทำเครื่องหมายขอบใบมีด (knife edge) บนปลายทั้งสองด้านของฟิล์ม ดังรูปที่ 2.17 (20) ซึ่งเป็นวิธีการใส่ฟิล์มแบบแบรดเลย์ และแบรกก์



เงาขอบใบมีด A'B'C'D'

รูปที่ 2.17 เงาของขอบใบมีดจากการบรรจุฟิล์มแบบแบรดเลย์ และแบรกก์ในกล้องโตอบายเยอเรอร์

จากรูป ϕ_1 และ ϕ_2 เป็นมุมรองรับขอบใบมีด AD และ BC ตามลำดับ มุมรองรับมีค่าที่แน่นอน ซึ่งได้กำหนดไว้ในคู่มือการใช้กล้อง ระยะจากเงาของขอบใบมีดด้านมุมต่ำ ถึงเงาของขอบใบมีดด้านมุมสูงของฟิล์มทั้งสองรวมกัน คือ $A'B' + CD'$ ระยะนี้จะเทียบได้กับ มุม $360^\circ - (\phi_1 + \phi_2)$ ดังนั้นจำนวน องศาต่อหน่วยความยาวของฟิล์มมีค่าเป็น

$$\frac{360 - (\phi_1 + \phi_2)}{(A'B' + CD')} \quad (2.13)$$

ปริมาณนี้เป็นค่าคงที่เฉพาะฟิล์ม (individual film constant) ซึ่งจะเขียนแทนด้วยสัญลักษณ์ K ค่าคงที่เฉพาะฟิล์มนี้จะแปรไปตามความยาวของ $A'B'$ และ CD' ที่เกิดจากการหดสั้นของฟิล์ม เนื่องจากขบวนการล้างฟิล์ม มุม θ จากการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์สามารถคำนวณได้จากเส้นการสะท้อนบนฟิล์มทั้งสอง จากรูป 2.17 AX' และ DY' เป็นระยะจากเงาขอบใบมีดด้านมุมต่ำไปยังตำแหน่งของเส้นการสะท้อน บนฟิล์มทั้งสอง ผลบวกของ AX' และ DY' จะมีความยาวเท่ากับผลบวกของส่วนโค้ง AX และ DY ซึ่งเป็นส่วนโค้งรองรับมุม ω_1 และ ω_2 ตามลำดับ ดังนั้น

$$\omega_1 + \omega_2 = K(A'X' + D'Y') \quad (2.14)$$

$$\text{โดยที่} \quad \omega_1 + \omega_2 + \phi_1 = 4\theta \quad (2.15)$$

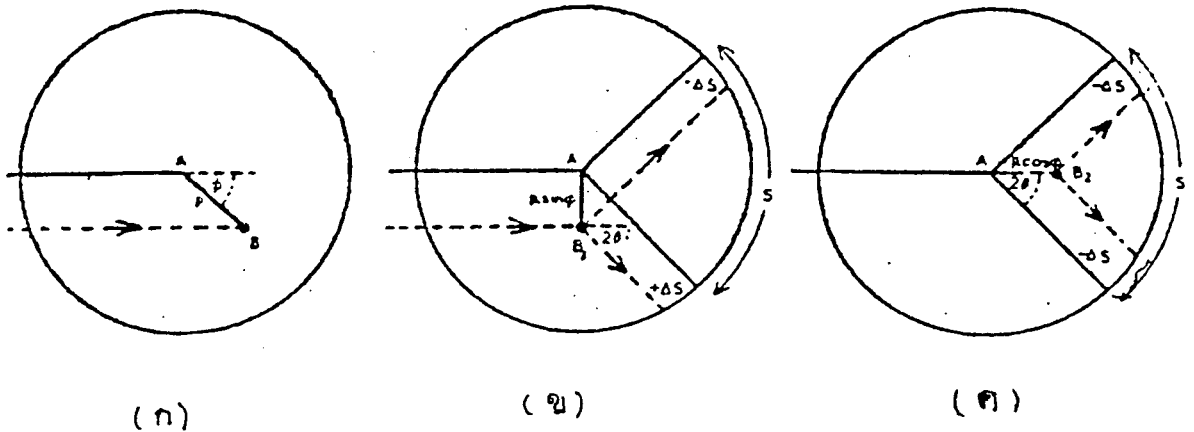
จากสมการ (2.14) และสมการ (2.15) จะได้ว่า

$$K(A'X' + D'Y') + \phi_1 = 4\theta \quad (2.16)$$

เนื่องจากค่า ϕ_1 และ ϕ_2 เป็นค่าคงที่ของกล้อง ซึ่งเป็นค่าที่กำหนดมาในคู่มือการใช้กล้อง ดังนั้นจึงสามารถคำนวณมุม θ ซึ่งเป็นมุมเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ตามเงื่อนไขของแบรกก์ได้จากสมการ 2.16 ค่าของมุม θ นี้เป็นค่าที่ได้แก้ความคลาดเคลื่อนแล้วเนื่องจาก ค่าของ k ในสมการ 2.16 คำนวณจาก $A'B'$ และ $C'D'$ ซึ่งเป็นปริมาณที่แปรตามการหดสั้นของฟิล์ม สำหรับกล้องเดอบายเชอเรอร์ ซึ่งบรรจุฟิล์มแบบแบรตเลย์และแบรกก์นี้ เส้นที่ปรากฏบนฟิล์ม จะอยู่ระหว่างมุม θ เท่ากับ 5 ถึง 85° ข้างของมุม θ เท่ากับ 0 ถึง 5° และ 85 ถึง 90° เป็นส่วนที่รังสีเอ็กซ์ถูกบังโดยขอบใบมีด ซึ่งสามารถพิจารณาได้จากรูปที่ 2.17

2.11.4 ความคลาดเคลื่อนเนื่องจากสารตัวอย่าง เลื่อนไปจากจุดศูนย์กลางของกล้อง

สำหรับกล้องแบบเดอบายเชอเรอร์ สารตัวอย่างจะอยู่ที่ศูนย์กลางของกล้องเมื่อเกิดการคลาดเคลื่อนของสารตัวอย่าง จากตำแหน่งศูนย์กลางของกล้อง จะทำให้ตำแหน่งของเส้นที่ปรากฏบนฟิล์มเคลื่อนไปจากตำแหน่งที่ถูกต้อง เป็นเหตุให้การคำนวณค่าของมุม θ ผิดไป



รูปที่ 2.18 ผลที่มีต่อตำแหน่งของเส้นการสะท้อนอันสลิปเนื่องมาจากการเลื่อนของผลึกจากตำแหน่งศูนย์กลางของกล้อง

รูปที่ 2.18 (ก) (ข) แสดงให้เห็นถึงการเลื่อนของลำตัวอย่างจากศูนย์กลาง A ไปอยู่ที่ตำแหน่ง B ความคลาดเคลื่อนนี้สามารถแยกพิจารณาได้เป็น 2 กรณี คือ กรณีแรกลำตัวอย่างเลื่อนจากศูนย์กลางไปในแนวขนานกับรังสีเอ็กซ์ และกรณีที่สอง คือ การเลื่อนของลำตัวอย่างจากศูนย์กลางของกล้องไปในแนวตั้งฉากกับรังสีเอ็กซ์ ความคลาดเคลื่อนที่เกิดขึ้นจากกรณีที่สองนี้จะไม่ผลต่อระยะของส่วนโค้ง S ถึงแม้ว่าเส้นทั้งสองจะเลื่อนไปจากตำแหน่งเดิม ทั้งนี้เพราะ $-\Delta S + \Delta S = 0$ ตามรูปที่ 2.18 (ข) และโดยที่มุม θ คำนวณได้จากระยะ S ดังนั้นการที่ลำตัวอย่างเลื่อนจากจุดศูนย์กลางไปในแนวตั้งฉากกับแนวของรังสีเอ็กซ์จึงไม่ทำให้เกิดการผิดพลาดในการคำนวณมุม θ ด้วย สำหรับ ในกรณีแรกการเลื่อนของลำตัวอย่างจะทำให้ตำแหน่งของเส้นบนฟิล์มเคลื่อนเข้าหากัน หรือแยกออกจากกันทำให้ระยะ S ลดลง หรือเพิ่มขึ้น ดังในรูปที่ 2.18 (ค) โดยที่ระยะ S จะเปลี่ยนไป ΔS_{ecc}

$$\Delta S_{ecc} = -2 p \cos \phi \sin 2\theta \quad (2.17)$$

ΔS_{ecc} คือ ระยะทางของ S ที่เพิ่มขึ้นหรือลดลง

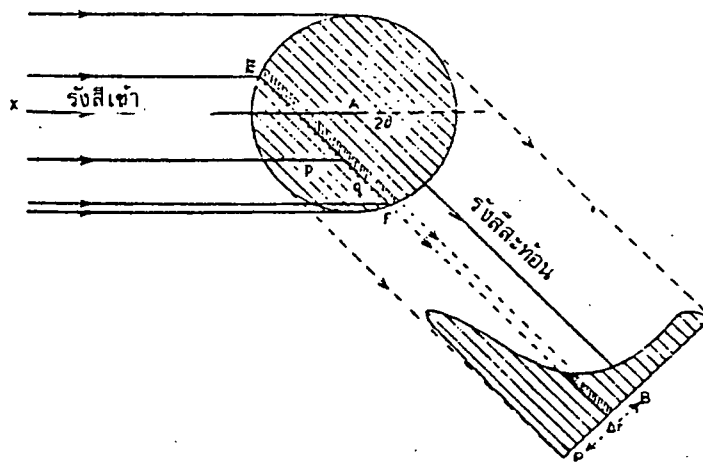
p คือ ระยะทางที่ลำตัวอย่างเลื่อนไปจากศูนย์กลางของกล้อง

ϕ คือ มุมที่ AB กระทบกับแนวรังสีเอ็กซ์

θ คือ มุมสะท้อนตามเงื่อนไขของแบรกก์

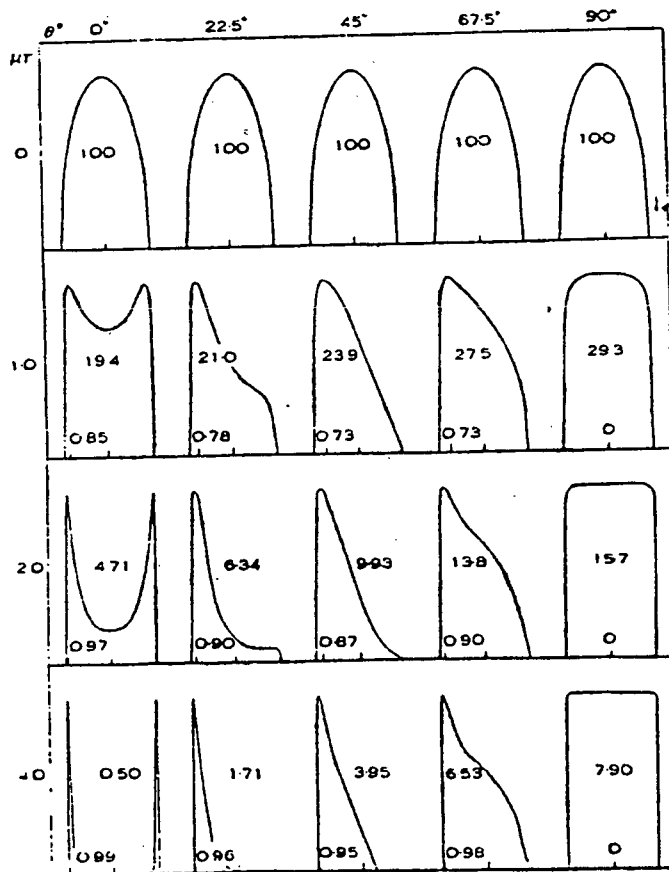
2.11.5 การดูดกลืนรังสี เอ็กซ์โดยลวดอย่าง

เมื่อรังสีเอ็กซ์ผ่านเข้าไปในลวดใด ๆ จะเกิดการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์โดยลวดนั้นในที่นี้เราจะพิจารณาถึงการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ของลวดอย่างรูปทรงกระบอก โดยให้แนวของรังสีเอ็กซ์ที่ผ่านเข้ามาในลวดนั้นตั้งฉากกับแนวแกนของทรงกระบอก และรังสีเอ็กซ์เป็นรังสีขนาน วิธีการหนึ่งที่ใช้ในการคำนวณการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ คือ วิธีการ ใดเรคส์ทริป (Direct strip method)(22) จากรูปที่ 2.19 (23) ซึ่งแสดงให้เห็นถึงภาคตัดขวางของลวดตัวอย่าง เมื่อรังสีเอ็กซ์ผ่านเข้าไปในแนวขนานกับ XA จะเกิดการเลี้ยวเบนไปในทิศทาง 2 θ ขนานกับแนว AB รังสีเอ็กซ์ นี้จะถูกดูดกลืนตามแนวทางเดินของรังสี การกระจายของความเข้มบนฟิล์ม แสดงด้วยเส้นขอบเขตความเข้ม (Line contour) จะเห็นได้ว่าความเข้มในแถบแรกเงาใต้เส้นขอบเขตความเข้มเกิดจากการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์จากแถบ EF ของลวดตัวอย่าง ปริมาณของพลังงานที่เกิดจากรังสีเอ็กซ์ตกลงบนฟิล์มที่ตำแหน่งของแถบนี้ จะเป็น



รูปที่ 2.19 แนวทางเดินของรังสีเอ็กซ์ผ่านภาคตัดขวางของลวดตัวอย่าง และการกระจายความเข้มของเส้นการสะท้อนเนื่องมาจากการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์โดยลวดตัวอย่าง

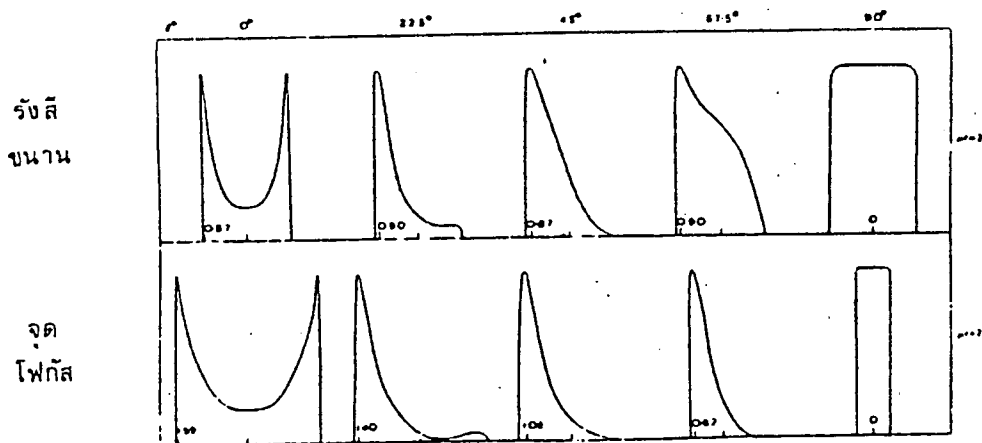
สัดส่วนกับ $\int \exp -\mu(p+q) ds$ หรือ $\int_E^F \exp(-\mu rx) ds$ โดยที่ x คือ $\frac{p+q}{r}$ และ S คือ $\frac{\sigma}{r}$ ค่าของ $\int_E^F \exp(-\mu rx) ds$ นี้ได้ทำการคำนวณจากแต่ละแถบของสารตัวอย่างในรูปแล้วจึงนำเอาความเข้มที่คำนวณได้จากแต่ละแถบมาสร้างเป็นเส้นแสดงขอบเขตความเข้มดังในรูปที่ 2.20 (24) ซึ่งแสดงให้เห็นถึงการกระจายของความเข้มที่เลี้ยวเบนจากผลึกในมุม θ ต่าง ๆ ตั้งแต่ 0° ถึง 90° ที่เกิดจากสารตัวอย่างที่สัมประสิทธิ์การดูดกลืนต่างกันพร้อมกับได้ให้ค่า Δr ซึ่งเป็นระยะที่ตำแหน่งยอดของความเข้มเลื่อนไปจากตำแหน่งแนวศูนย์กลาง



รูปที่ 2.20 การกระจายความเข้มของเส้นการสะท้อน ซึ่งเกิดขึ้นจากแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์แบบขนานคำนวณด้วยวิธีการโดเรคัสตริป ที่สัมประสิทธิ์การดูดกลืน μr ต่างกัน

สำหรับในกรณีที่รังสีเอ็กซ์ที่ผ่านเข้าไปในลำรังสีตัวอย่างเกิดขึ้นจากต้นกำเนิดรังสี ซึ่งโฟกัสเป็นจุด (point focus) พบว่าเส้นขอบเขตความเข้มจะแตกต่างไปจากกรณีที่เกิดจากรังสีเอ็กซ์แบบขนาน รูปที่ 2.21(25) แสดงการเปรียบเทียบให้เห็นความแตกต่างของเส้นขอบเขตความเข้ม และ Δr ที่เกิดจากรังสีเอ็กซ์แบบขนานกับแบบโฟกัสเป็นจุด

ในความเป็นจริงแล้ว รังสีเอ็กซ์ที่ใช่จะไม่เป็นจุดโฟกัส หรือรังสีขนาน ทั้งนี้เพราะรังสีเอ็กซ์ไม่ได้เกิดจากจุด ๆ เดียว แต่เกิดขึ้นในบริเวณพื้นที่เล็ก ๆ บนเป้าโลหะด้านอะโนดของหลอดรังสีเอ็กซ์ ดังนั้นเราอาจพิจารณารังสีเอ็กซ์ที่เกิดขึ้นนี้ เหมือนเป็นผลรวมที่เกิดจากจุดโฟกัสหลาย ๆ จุดที่กระจายอยู่ในบริเวณเล็ก ๆ บนเป้าโลหะอะโนดนี้ ซึ่งพบว่าลำรังสีเอ็กซ์ที่มีลักษณะใกล้เคียงกับที่ได้กล่าวมาจะมีการกระจายของความเข้มในภาคตัดขวางของลำรังสีเอ็กซ์เป็นแบบเอ็กซ์โปเนนเชียล คือ $\exp(-kx^2)$ เส้นขอบเขตความเข้มคำนวณจากโฟกัสแบบเอ็กซ์โปเนนเชียลนี้ เมื่อนำมาเปรียบเทียบกับผลการทดลอง พบว่ามีลักษณะใกล้เคียงกัน (26) โดยค่าของ Δr จะสอดคล้องตามสมการ



รูปที่ 2.21 ความแตกต่างของเส้นขอบเขตความเข้มซึ่งเกิดจากแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์แบบขนานและแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์แบบจุด

$$\Delta r = k \left(\cos \theta + \frac{\sin 2\theta}{2\theta} \right) \quad (2.18)$$

k คือ ค่าคงที่

θ คือ มุมเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ ตามเงื่อนไขของแบรกก์

ถ้าให้ ΔS_a เป็นความคลาดเคลื่อนของระยะ S ในรูปที่ 2.18 ซึ่งสืบเนื่องมาจากการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ ดังนั้นตามที่ได้กล่าวมาข้างต้น ΔS_a จึงเท่ากับ $2\Delta r$

2.12 ฟังก์ชันอนุกรม

ดังที่ได้กล่าวมาแล้ว จะเห็นว่าปริมาณสำคัญที่ก่อให้เกิดความคลาดเคลื่อนในการคำนวณ มุม θ คือ การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ของลำรังสีอย่าง และความคลาดเคลื่อนเนื่องจากการเลื่อนของลำรังสีอย่างจากศูนย์กลางของกล้องจุลทรรศน์รูป 2.22 (27) ถ้าให้ ΔS_{ecc} เป็นระยะทางที่เส้นบนฟิล์มเลื่อนไปอันเป็นผลสืบเนื่องมาจากการที่ลำรังสีอย่างเลื่อนไปจากศูนย์กลางของกล้อง และให้ ΔS_a เป็นระยะของเส้นที่เลื่อนไปเนื่องจากการดูดกลืนของรังสีเอ็กซ์ โดยลำรังสีอย่าง ดังนั้นถ้าให้ ΔS เป็นระยะทางที่เลื่อนไปทั้งหมดของเส้นบนฟิล์ม

$$\Delta S = \Delta S_a + \Delta S_{ecc} \quad (2.19)$$

จากที่ได้กล่าวมาแล้วใน หัวข้อ 2.11.5

$$\Delta S_a = 2\Delta r \quad (2.20)$$

$$\text{และ } \Delta S_{ecc} = -2p \cos \phi \sin 2\theta \quad (2.21)$$

$$\text{ดังนั้น } \Delta S = 2\Delta r - 2p \cos \phi \sin 2\theta \quad (2.22)$$

จากกฎของแบรกก์

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (2.23)$$

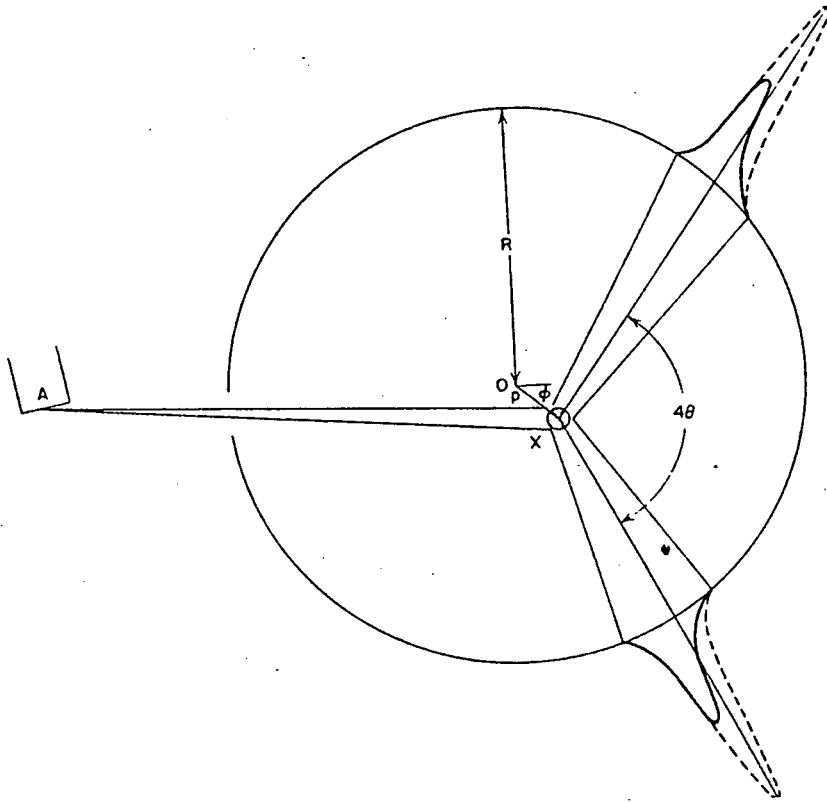
ถ้าหาอนุพันธ์ (differential) ของ d เทียบกับ θ และให้ Δd เป็นระยะระหว่างระนาบที่เปลี่ยนไปเมื่อมุม θ เปลี่ยนไป $\Delta \theta$ แล้ว จะได้สมการที่สัมพันธ์กันระหว่าง Δd และ $\Delta \theta$ เป็น

$$\frac{\Delta d}{d} = -\cot \theta \Delta \theta \quad (2.24)$$

สำหรับกล้อง เดอบายเชอเรอร์ ถ้า S เป็นระยะระหว่างเส้นที่เกิดจากการสะท้อนเตี๋ยวกัน

$$S = 4R\theta \quad (2.25)$$

$$\text{และ } \Delta S = 4R \Delta \theta \quad (2.26)$$



รูปที่ 2.22 การเลื่อนตำแหน่งของเส้นการสะท้อนเนื่องจากการเลื่อนของผลึกจากตำแหน่งศูนย์กลางของกลิ้ง และการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์

แทนค่าของ $\Delta\theta$ ที่คำนวณจากสมการ (2.26) ลงในสมการ (2.24) จะได้

$$\frac{\Delta d}{d} = -\frac{\cot\theta}{4R} \Delta S \quad (2.27)$$

จากสมการ (2.22) แทนค่าของ ΔS ลงในสมการ (2.27) จะได้สมการแสดงความคลาดเคลื่อนของระยะระหว่างระนาบที่สัมพันธ์กับมุม θ และการเลื่อนของสารตัวอย่างจากศูนย์กลางของกลิ้งเป็น

$$\begin{aligned} \frac{\Delta d}{d} &= \frac{-1}{4R} (2\Delta r - 2p \cos\phi \sin 2\theta) \cot\theta \\ \frac{\Delta d}{d} &= \frac{-\Delta r}{2R} \cot\theta + \frac{p \cos\phi}{R} \cos^2\theta \end{aligned} \quad (2.28)$$

เมื่อมุม θ เข้าสู่ 90° , $\cot \theta$, $\cos^2 \theta$ และ Δr จะเข้าสู่ศูนย์ ดังนั้นจากสมการ (2.28) จะเห็นได้ว่า ที่มุม 90° , $\frac{\Delta d}{d}$ จะเท่ากับ 0 ซึ่งหมายความว่าความคลาดเคลื่อนของระยะระหว่างระนาบ d อันสืบเนื่องมาจากการตุดกคลื่นรังสี และการเลื่อนของลำตัวอย่างจากศูนย์กลางของกล้อง จะเป็นศูนย์ ดังนั้นเราจะสรุปได้ว่า ความคลาดเคลื่อนดังกล่าวนี้สามารถที่จะกำสัดให้หมดไปเมื่อมุม θ เข้าสู่ 90° จากสมการ (2.28) ถ้าเราแทนค่าของ Δr จากสมการ (2.18)

$$\frac{\Delta d}{d} = -\frac{k}{2R} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right) + 2p \cos \phi \cos^2 \theta \quad (2.29)$$

เทอมแรกทางขวามือ แสดงให้เห็นถึงความคลาดเคลื่อนของระยะระหว่างระนาบที่มุม θ ต่างๆ อันสืบเนื่องมาจากการตุดกคลื่นรังสีเอ็กซ์โดยลำตัวอย่าง ส่วนเทอมที่สองแสดงให้เห็นถึงความคลาดเคลื่อนของระยะระหว่างระนาบของผลึกที่มุม θ ต่าง ๆ อันสืบเนื่องมาจากการเลื่อนของลำตัวอย่างไปจากตำแหน่งศูนย์กลางของกล้อง ในกรณีของกล้องที่ไม่มีความคลาดเคลื่อนอันเนื่องมาจากการเลื่อนของลำตัวอย่างจากศูนย์กลาง สมการ (2.29) จะเหลือเพียงเทอมเดียว คือ

$$\frac{\Delta d}{d} = -\frac{k}{2R} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right) \quad (2.30)$$

ซึ่งอาจเขียนได้เป็น

$$\frac{d - d_0}{d_0} = -\frac{k}{2R} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$$

หรือ

$$d = d_0 - \frac{k d_0}{2R} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right) \quad (2.31)$$

ดังนั้นถ้าเราคำนวณค่าของ d ที่มุม θ ต่าง ๆ และนำมาเขียนกราฟเทียบกับค่าของ $\frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$ จะได้กราฟเส้นตรง โดยเส้นตรงที่ได้นี้จะตัดแกน d ที่ d_0 ซึ่งเป็นค่าที่แท้จริงของระยะห่างระหว่างระนาบ

สำหรับโครงสร้างในระบบคิวบิก ซึ่งมีแลททิส์ฟาราไมเตอร์

$$a = d \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad (2.32)$$

จะมีค่าของ

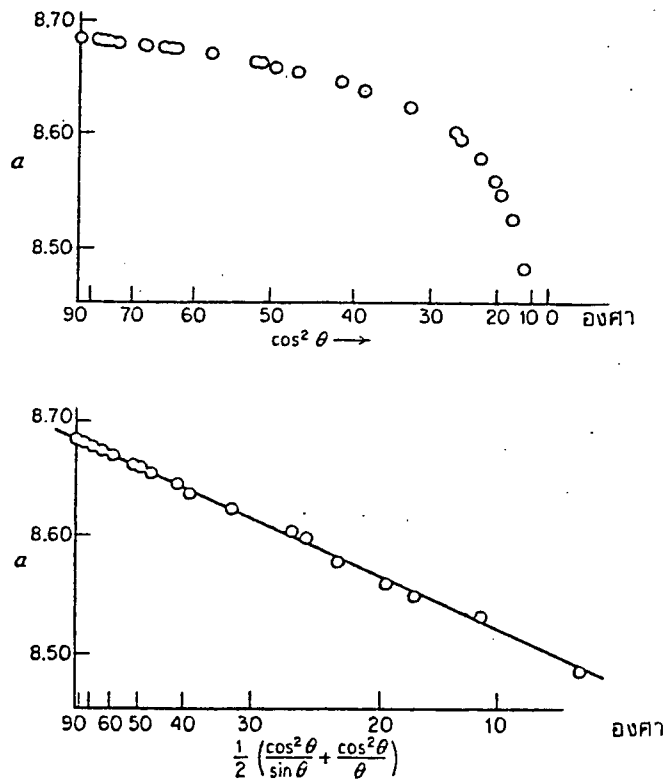
$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{\Delta d}{d} = -\cot \theta \Delta \theta$$

ดังนั้นจึงสามารถเขียนได้ว่า

$$a = a_0 - \frac{ka_0}{2R} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right) \quad (2.33)$$

สมการ (2.33) นี้เหมาะสำหรับในการคำนวณค่าของแลททิลพารามิเตอร์ a ทั้งนี้เพราะจากสมการ (2.32) จะสามารถคำนวณค่าของแลททิลพารามิเตอร์ a ได้จากทุกเส้นการสะท้อน (reflection line) ทำให้ได้ข้อมูลจำนวนมาก สำหรับระบบผลึกระบบอื่นการใช้วิธีการ-อภิกัลป์เส้นโค้งนี้ จะไม่เหมาะสม แต่อย่างไรก็ตามสำหรับระบบผลึกนอกเหนือจากคิวบิกนี้ จะสามารถคำนวณได้ด้วยวิธีการกำลังสองน้อยสุด (least square) และการใช้สารมาตรฐาน ซึ่งจะได้กล่าวถึงต่อไป

จากสมการ (2.33) นี้ ฟังก์ชัน $\frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$ เรียกว่า เนลสันและไรเลย์ฟังก์ชัน (Nelson-Riley) หรือเทลเลอร์ และซินแคลร์ ฟังก์ชัน (Talor-Sinclair) ในการหาค่าของแลททิลพารามิเตอร์ ฟังก์ชันอภิกัลป์ที่ใช้นอกเหนือจาก เนลสัน-ไรเลย์ หรือเทลเลอร์-ซินแคลร์ ฟังก์ชันแล้ว ยังมีฟังก์ชัน $\cos^2 \theta$ ซึ่งนิยมใช้ในการอภิกัลป์เส้นโค้ง ความแตกต่างระหว่าง $\cos^2 \theta$ และ $\frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$ คือ ฟังก์ชัน $\cos^2 \theta$ จะเหมาะสมกับการหาแลททิลพารามิเตอร์ของผลึก ที่สามารถให้เส้นการสะท้อนที่อยู่ในมุม θ สูงกว่า 60° เป็นจำนวนมากเพียงพอ ซึ่งฟังก์ชัน $\cos^2 \theta$ จะเป็นเส้นตรงเมื่อนำมาเขียนกราฟเทียบกับแลททิลพารามิเตอร์ในช่วงของมุม θ นี้ สำหรับ ฟังก์ชัน $\frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$ เมื่อนำมาเขียนกราฟเทียบกับ $\frac{\Delta a}{a}$ จะเป็นเส้นตรงในช่วงกว้างกว่าซึ่งเหมาะสมสำหรับกรณีที่ไม่สามารถให้เส้นการสะท้อนในมุม θ สูงได้เป็นจำนวนมากเพียงพอ อย่างไรก็ตาม พบว่าฟังก์ชันนี้ถ้ามีเส้นการสะท้อนในมุม θ สูงเป็นจำนวนมากจะให้ผลที่ถูกต้องกว่า รูปที่ 2.23 (28) แสดงให้เห็นถึงลักษณะของเส้นโค้งที่เกิดจากการเขียนกราฟ ค่า a เทียบกับ ฟังก์ชันทั้งสอง



รูปที่ 2.23 การแปรผันของแฉกทึลพารามิเตอร์ a กับฟังก์ชัน $\cos^2 \theta$ และ $\frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$

2.13 การคำนวณแฉกทึลพารามิเตอร์โดยใช้สารมาตรฐานแก้ความคลาดเคลื่อน

วิธีการหนึ่งที่สะดวก และรวดเร็วในการคำนวณหาค่าแฉกทึลพารามิเตอร์ คือ นำเอาสารที่ทราบค่าของแฉกทึลพารามิเตอร์ แล้วผสมลงในสารตัวอย่าง แล้วทำการถ่ายภาพด้วยวิธีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ โดยผลึกผง ภาพที่ปรากฏบนฟิล์มจะประกอบด้วยเส้นการสะท้อนของสารทั้งสองชนิดภายใต้ความคลาดเคลื่อนอย่างเป็นระบบ จากลภาพเวดลัมเดียวกันและจากการที่ทราบค่าของแฉกทึลพารามิเตอร์ของสารมาตรฐาน ค่าของ $\sin^2 \theta_{cal}$ ซึ่งคำนวณจากแฉกทึลพารามิเตอร์ของสารมาตรฐานได้นำมาเทียบกับ ค่าของ $\sin^2 \theta_{obs}$ ซึ่งคำนวณจากตำแหน่งของเส้นการสะท้อนบนฟิล์ม ความแตกต่างของ $\sin^2 \theta$ ที่มุม θ เดียวกัน คือ

$$\Delta \sin^2 \theta = \sin^2 \theta_{obs} - \sin^2 \theta_{cal} \tag{2.34}$$

ถ้า นำ $\Delta \sin^2 \theta$ มาเขียนกราฟเทียบกับ มุม θ หรือฟังก์ชันของมุม θ จะได้กราฟแสดงความคลาดเคลื่อนของ $\sin^2 \theta_{obs}$ ที่มุมต่าง ๆ ดังนั้นจากกราฟจึงสามารถหาค่าของ $\sin^2 \theta_{corr}$ ซึ่งเป็นค่าที่ถูกต้องได้โดยที่

$$\sin^2 \theta_{corr} = \sin^2 \theta_{obs} - \Delta \sin^2 \theta \tag{2.35}$$

จากค่าของ $\sin^2 \theta_{\text{corr}}$ นี้ สามารถนำไปคำนวณค่าของแลททิสพารามิเตอร์ได้ ด้วยวิธีการแบบกำลังสองน้อย เพื่อลดความคลาดเคลื่อนอันเกิดขึ้นจากความคลาดเคลื่อนแบบสุ่มต่อไป

2.14 วิธีการกำลังสองน้อยสุด (Least square's method)

ในการเก็บข้อมูลต่าง ๆ ข้อมูลที่ได้มักจะมี ความคลาดเคลื่อนเกิดขึ้นเสมอสำหรับความคลาดเคลื่อนต่าง ๆ นี้สามารถเกิดขึ้นได้ทั้งอย่างเป็นระบบ (systematic error) และแบบสุ่ม (random error) ความคลาดเคลื่อนแบบเป็นระบบสามารถแก้ไขได้โดยการศึกษาถึงสาเหตุที่ทำให้เกิดความคลาดเคลื่อน สำหรับวิธีการแก้ความคลาดเคลื่อนแบบกำลังสองน้อยสุดนี้เป็นวิธีที่ใช้สำหรับแก้ความคลาดเคลื่อนที่เกิดขึ้นแบบสุ่มสมมติว่ามีข้อมูลกลุ่มหนึ่ง ซึ่งเป็นปริมาณทางกายภาพชนิดเดียวกันอันได้มาจากการวัด ทฤษฎีกำลังสองน้อยสุด กล่าวว่า ปริมาณที่นำไปได้มากที่สุด คือ ปริมาณที่ทำให้ผลรวมของความคลาดเคลื่อนจากแต่ละการวัดบกกำลังสอง มีค่าน้อยที่สุด ตัวอย่างเช่น ข้อมูลกลุ่มหนึ่งซึ่งแทนด้วยพิกัดจาก (coordinate) $x_1 y_1$, $x_2 y_2$, $x_3 y_3$, และ x สัมพันธ์กับ y ด้วยสมการ

$$y = a + bx \quad (2.36)$$

ปริมาณของ a และ b เป็นปริมาณที่คำนวณได้จาก x และ y โดยตรงซึ่งค่าของ a และ b นี้จะคลาดเคลื่อนไปจากความเป็นจริง อันเป็นผลเนื่องมาจากความคลาดเคลื่อนแบบสุ่มของปริมาณ x และ y ถ้าให้ปริมาณของ y ที่สอดคล้องกับ $x = x_1$ คือ $(a + bx_1)$ และให้ e_1 เป็นความคลาดเคลื่อนแบบสุ่ม ที่เกิดขึ้นจาก (x_1, y_1) ดังนั้น

$$e_1 = (a + bx_1) - y_1 \quad (2.37)$$

เช่นเดียวกับ พิกัด (x_2, y_2) , (x_3, y_3) , ... จะมีความคลาดเคลื่อนแบบสุ่มเป็น e_2, e_3, \dots โดยทฤษฎีกำลังสองน้อยสุด ปริมาณ a และ b ที่เหมาะสมที่สุด คือ ปริมาณที่ทำให้ ผลรวมของ e^2 มีค่าน้อยที่สุด จากสมการ (2.37) ผลรวมของ e^2 คือ

$$\Sigma e^2 = (a + bx_1 - y_1)^2 + (a + bx_2 - y_2)^2 + \dots \quad (2.38)$$

ปริมาณของ Σe^2 จะมีค่าน้อยที่สุด เมื่ออนุพันธ์มีค่าเป็น ศูนย์ นั่นคือ

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial a} (e^2) = 2(a + bx_1 - y_1) + 2(a + bx_2 - y_2) + \dots = 0 \quad (2.39)$$

และ

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial b} (e^2) = 2(a + bx_1 - y_1)x_1 + 2(a + bx_2 - y_2)x_2 + \dots = 0 \quad (2.40)$$

สมการ (2.39) สามารถเขียนได้เป็น

$$\Sigma y = \Sigma a + b \Sigma x \quad (2.41)$$

และสมการ (2.40) สามารถเขียนได้เป็น

$$\Sigma xy = a \Sigma x + b \Sigma x^2 \quad (2.42)$$

จากการแก้สมการค่าพหุคูณค่าของ a และ b จะได้ค่าของ a และ b ซึ่งเป็นปริมาณที่เหมาะสมที่สุดจากกลุ่มข้อมูล สมการ (2.41) และ (2.42) เรียกว่า สมการตั้งฉาก (Normal equation) ตัวอย่างที่กล่าวมานี้ y สัมพันธ์กับ x โดยสมการเส้นตรง ทฤษฎีกำลังสองน้อยสุดนี้สามารถใช้ได้กับกรณีอื่น ๆ ด้วยเช่น y และ x สัมพันธ์กันด้วยสมการพาราโบลา

$$y = a + bx + cx^2 \quad (2.43)$$

สมการที่ (2.43) จะสามารถสร้างสมการตั้งฉากได้ 3 สมการ โดยวิธีการข้างต้น คือ

$$\Sigma y = \Sigma a + b \Sigma x + c \Sigma x^2 \quad (2.44)$$

$$\Sigma xy = a \Sigma x + b \Sigma x^2 + c \Sigma x^3 \quad (2.45)$$

$$\Sigma x^2 y = a \Sigma x^2 + b \Sigma x^3 + c \Sigma x^4 \quad (2.46)$$

จากตัวอย่างทั้งสองนี้จะสามารถสรุปเป็นกฎสำหรับการสร้างสมการตั้งฉากได้โดยวิธีการแปรียบเทียบสมการ พิจารณาสมการ (2.44) เทียบกับ สมการ (2.43) จะเห็นว่าสมการ (2.44) สามารถสร้างขึ้นได้โดยคูณสมการ (2.43) ด้วยสัมประสิทธิ์ตัวที่ 1 คือ สัมประสิทธิ์ของ a ซึ่งจะได้สมการเท่ากับจำนวนข้อมูลของ (x, y) เมื่อนำสมการที่ได้นี้มาบวกกันจะได้สมการตั้งฉากดังในสมการ (2.44) โดยวิธีเดียวกันสมการตั้งฉาก (2.45) ได้จากการคูณสมการ (2.43) ด้วยสัมประสิทธิ์ ตัวที่ 2 คือ สัมประสิทธิ์ของ b และสมการตั้งฉาก (2.46) ได้จากสัมประสิทธิ์ ตัวที่ 3 คือ สัมประสิทธิ์ของ c วิธีการนี้สามารถใช้ได้โดยไม่จำกัดจำนวนของปริมาณไม่ทราบค่า

2.15 วิธีการคำนวณแลททิสพารามิเตอร์ ของ โคเฮน

ในหัวข้อที่แล้วได้กล่าวถึง การหาค่าของแลททิสพารามิเตอร์ด้วยวิธีการอภิปัลป์ เส้นโค้ง โดยใช้นelson-โรเลย์ ฟังก์ชัน ซึ่งเป็นวิธีการที่เหมาะสมสำหรับกรณีระบบของผลึกที่ทำการ

คำนวณแลททิลพารามิเตอร์เป็นระบบคิวบิก สำหรับวิธีการแบบโคเฮน (Cohen's method) นี้สามารถย้ายกับผลึกในระบบอื่นนอกเหนือจากคิวบิกได้ โดยวิธีการนี้จะคำนวณแลททิลพารามิเตอร์จากปริมาณ $\sin^2\theta$ โดยตรงด้วยวิธีการแบบกำลังสองน้อยสุด เพื่อลดความคลาดเคลื่อนแบบลุ่มลงให้มากที่สุด และได้เลือกใช้ฟังก์ชันนอริกัลที่เหมาะสมเพื่อแก้ความคลาดเคลื่อนแบบเป็นระบบอันเกิดขึ้นจากการดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ของสารตัวอย่าง และการเลื่อนของสารตัวอย่างจากศูนย์กลางของกล้อง จากกฎของแบรกก์ คือ

$$2d \sin\theta = \lambda \quad (2.47)$$

สมการ (2.47) เมื่อยกกำลังสองทั้งสองด้านของสมการ และเขียนเป็นฟังก์ชันของลอค จะได้สมการ

$$\ln(\sin^2\theta) = \ln\left(\frac{\lambda^2}{4}\right) - 2 \ln d \quad (2.48)$$

จากอนุพันธ์ของสมการ (2.48)

$$\frac{\Delta \sin^2\theta}{\sin^2\theta} = \frac{-2 \Delta d}{d} \quad (2.49)$$

สมการ (2.49) นี้ แสดงให้เห็นถึงอัตราส่วนความคลาดเคลื่อนของ d ที่แปรผันกับอัตราส่วนของ $\sin^2\theta$ จากสมการ (2.49) เมื่อนำมาจัดรูปใหม่ได้เป็นสมการ (2.50) คือ

$$\Delta \sin^2\theta = \frac{-2 \Delta d \sin^2\theta}{d} \quad (2.50)$$

พิจารณารูปผลึกที่เป็นระบบคิวบิกจะพบว่า

$$\sin^2\theta = A_0 (h^2 + k^2 + l^2) \quad (2.51)$$

โดยที่ A_0 คือ $\frac{\lambda^2}{4a^2}$ จากสมการ (2.51) นี้ สามารถคำนวณแลททิลพารามิเตอร์ a ได้ จาก $\sin^2\theta$ ซึ่งเป็นปริมาณที่ได้จากการทดลอง $\sin^2\theta$ นี้ย่อมจะมีความคลาดเคลื่อน

เกิดขึ้นได้อันเนื่องมาจากการทดลอง ซึ่งได้แก่ความคลาดเคลื่อนแบบลุ่ม และแบบเป็นระบบ ถ้าให้ปริมาณความคลาดเคลื่อนอย่างเป็นระบบ คือ $\Delta \sin^2\theta$ ดังนั้น จากสมการ (2.51)

$$A_0 (h^2 + k^2 + l^2) = \sin^2\theta - \Delta \sin^2\theta \quad (2.52)$$

แทนค่าของ $\Delta \sin^2\theta$ จากสมการ (2.50) ลงในสมการ (2.52)

$$A_0 (h^2 + k^2 + l^2) = \sin^2\theta - 2 \frac{\Delta d}{d} \sin^2\theta \quad (2.53)$$

จากสมการ (2.53) ถ้าทราบปริมาณของ $\frac{\Delta d}{d}$ ก็จะสามารหาคำนวณค่าของ A_0 และแลท-
ทิลพารามิเตอร์ a ที่ถูกต้องได้ ในหัวข้อที่แล้วได้กล่าวถึง $\frac{\Delta d}{d}$ ซึ่งเป็นความคลาดเคลื่อนที่
เกิดขึ้นอย่างเป็นระบบในรูปฟังก์ชันของมุม θ ถ้าเลือกเอาฟังก์ชันที่เหมาะสมมาแทนค่าของ
 $\frac{\Delta d}{d}$ ในสมการ (2.53) ก็จะได้สมการของ A_0 ในรูปฟังก์ชันของมุม θ สมมติว่าใช้ฟังก์ชัน
อภิกัลป์

$$\frac{\Delta d}{d} = k \cos^2 \theta \quad (2.54)$$

ดังนั้น

$$A_0 (h^2 + k^2 + l^2) = \sin^2 \theta - 2k \cos^2 \theta \sin^2 \theta$$

แทนค่า $\sin 2\theta$ ด้วย $2\sin\theta \cos\theta$ ได้สมการเป็น

$$A_0 (h^2 + k^2 + l^2) + D \sin^2 2\theta = \sin^2 \theta \quad (2.55)$$

โดยที่ ค่า k และ D คือ ค่าคงที่ ซึ่งจะแตกต่างกันไปในแต่ละฟิล์ม
จากสมการ (2.55)

$$\sin^2 \theta = A_0 (h^2 + k^2 + l^2) + D \sin^2 2\theta$$

หรือ

$$\sin^2 \theta_i = \alpha_i A_0 + \delta_i D \quad (2.56)$$

โดยที่ เครื่องหมาย i ใช้แสดงความแตกต่างของเส้นการสะท้อน, α_i คือ $(h^2 + k^2 + l^2)$
และ δ_i คือ $2 \sin^2 2\theta$ จากสมการ (2.56) จะสามารถใช้วิธีการแบบกำลังสอง
น้อยสุด เพื่อลดผลจากความคลาดเคลื่อนแบบลุ่ม ซึ่งทำได้โดยสร้างสมการตั้งฉากขึ้น และ
แก้สมการเพื่อคำนวณปริมาณที่ไม่ทราบค่า สำหรับกรณีนี้สมการตั้งฉาก คือ

$$\sum_i \alpha_i \sin^2 \theta_i = A_0 \sum_i \alpha_i^2 + D \sum_i \alpha_i \delta_i \quad (2.57)$$

$$\sum_i \delta_i \sin^2 \theta_i = A_0 \sum_i \delta_i \alpha_i + D \sum_i \delta_i^2 \quad (2.58)$$

ในระบบที่นอกเหนือจากระบบคิวบิกจะสามารถใช้วิธีการนี้ได้เช่นกัน เช่น ในระบบเอกซเทก-
โกนอล

$$\sin^2 \theta_i = \alpha_i A_0 + \gamma_i C_0 + \delta_i D \quad (2.59)$$



สมการตั้งฉากเป็น

$$\sum \alpha_i \sin^2 \theta_i = A_o \sum \alpha_i^2 + C_o \sum (\alpha_i \gamma_i) + D \sum (\alpha_i \delta_i) \quad (2.60)$$

$$\sum \gamma_i \sin^2 \theta_i = A_o \sum (\gamma_i \alpha_i) + C_o \sum \gamma_i^2 + D \sum (\gamma_i \delta_i) \quad (2.61)$$

$$\sum \delta_i \sin^2 \theta_i = A_o \sum (\delta_i \alpha_i) + C_o \sum (\delta_i \gamma_i) + D (\delta_i^2) \quad (2.62)$$

โดยที่

$$A_o = \frac{\lambda^2}{3a^2}$$

$$C_o = \frac{\lambda^2}{4c^2}$$

$$\alpha_i = (h^2 + hk + k^2)$$

$$\gamma_i = l^2$$

$$\delta_i = 10 \sin^2 2\theta_i$$

อย่างไรก็ตามจะเห็นได้ว่า ความถูกต้องของแลททิสพารามิเตอร์ที่ได้จากการคำนวณจะขึ้นอยู่กับการเลือกใช้ฟังก์ชัน เพื่อแก้ค่า $\frac{\Delta d}{d}$ จากตัวอย่างข้างต้น ได้เลือกใช้ฟังก์ชัน $\cos^2 \theta$ ดังนั้นสมการตั้งฉากที่ได้จึงเหมาะสมกับข้อมูลที่ได้จากการวัดตำแหน่งของเส้นการสะท้อนในมุม θ มากกว่า 60° ขึ้นไป ทั้งนี้เพราะ $\frac{\Delta d}{d}$ จะแปรผันตรงกับ $\cos^2 \theta$ ในช่วงมุม θ ดังกล่าวเท่านั้น สำหรับข้อมูลส่วนใหญ่ ถ้าอยู่ในมุม θ ต่ำกว่า 60° แล้วการเลือกใช้ เนลสัน-โรเลย์ฟังก์ชัน จะเหมาะสมกว่าการใช้ฟังก์ชัน $\cos^2 \theta$