

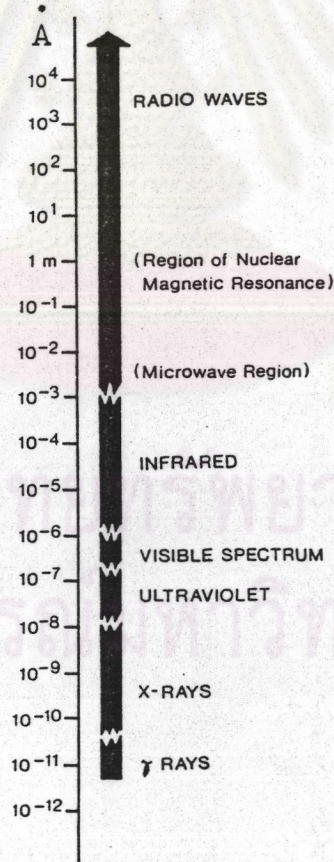


บทที่ 3

การหาค่าคงที่แลตทิซโดยวิธีเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

3.1 ทฤษฎีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

ในปี ค.ศ.1895 เรินต์เกน (Wilhelm Conrad Rontgen) เป็นผู้ค้นพบรังสีเอ็กซ์ซึ่งจัดเป็นคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า (electromagnetic wave) มีช่วงความยาวคลื่นอยู่ระหว่างรังสีแกมมาและรังสีอุลตราไวโอเล็ต ดังรูปที่ 3.1

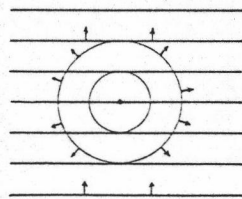


รูปที่ 3.1 สเปกตรัมแม่เหล็กไฟฟ้า

รังสีเอ็กซ์เป็นรังสีที่สามารถทะลุผ่านตัวกลางต่าง ๆ ได้ดีรวมทั้งร่างกายของมนุษย์ด้วย รังสีเอ็กซ์เกิดจากอิเล็กตรอนที่มีความเร็วสูง (10) วิ่งชนอิเล็กตรอนที่อยู่วงใน ๆ (inner shell) โกลนิวเคลียสของอะตอมที่ใช้ทำเป็นเป้าให้หลุดออกจากอะตอม อิเล็กตรอนที่อยู่วงนอกออกมา (outer shell) จะตกลงไปแทนที่แล้วปลดปล่อย รังสีเอ็กซ์ออกมา เนื่องจากอิเล็กตรอนในแต่ละวงของอะตอมแต่ละชนิด จะมีระดับ พลังงานเฉพาะค่าแน่นอน ดังนั้น รังสีเอ็กซ์ที่เกิดขึ้นในลักษณะนี้จะแสดงลักษณะเฉพาะ ของอะตอมที่ใช้ทำเป็นเป้าด้วย เรียกรังสีเอ็กซ์ชนิดนี้ว่า "รังสีเอ็กซ์ลักษณะเฉพาะ" (characteristic x-rays) อิเล็กตรอนที่มีความเร็วสูงบางครั้งอาจจะ ไม่ไคว้งชนอิเล็กตรอนในวงต่าง ๆ เลย แต่จะวิ่งผ่านสนามไฟฟ้าที่อยู่ใกล้นิวเคลียส ของอะตอมทำให้ความเร็วลดลงไปเรื่อย ๆ ความเร็วที่ลดลงไปเรื่อย ๆ นี้จะทำให้ อิเล็กตรอนความเร็วสูง เกิดการสูญเสียพลังงานจำนวน ΔE ไป พลังงาน ΔE จำนวนนี้จะถูกปล่อยออกมาในรูปของโฟตอนรังสีเอ็กซ์ (x-ray photon) แต่จะมีค่าความยาวคลื่นรังสีเอ็กซ์ต่อเนื่องกันหลาย ๆ ค่า ซึ่งสอดคล้องกับพลังงานที่ ค่อย ๆ ลดลงในช่วง ΔE เรียกรังสีชนิดนี้ว่า "รังสีเอ็กซ์ต่อเนื่อง" (continuous x-rays) อย่างไรก็ตามรังสีเอ็กซ์ที่เหมาะสมในการศึกษาโครงสร้างของผลึก ควรจะมีค่าความยาวคลื่นในช่วง 0.5 - 3.0 อังสตรอม (Å)

3.1.1 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึก

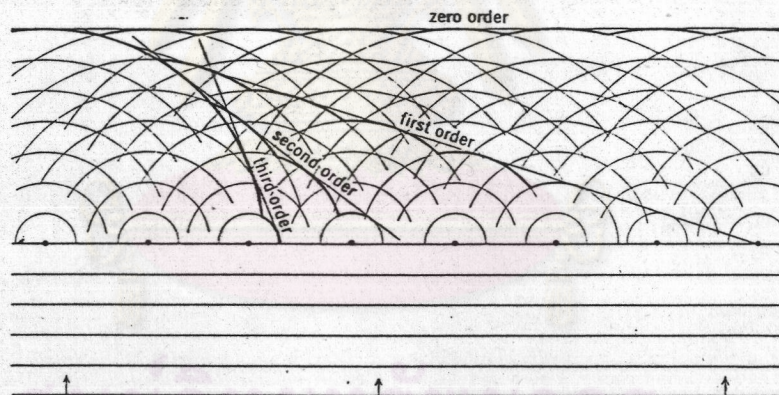
สมมติว่ามีอิเล็กตรอน 1 ตัวอยู่ในลำทางเดินของรังสีเอ็กซ์ อิเล็กตรอนจะเกิดการสั่นเนื่องจากสนามแม่เหล็กไฟฟ้าของรังสีเอ็กซ์ เนื่องจาก อิเล็กตรอนจะสั่นในเฟสเดียวกัน (inphase) กับคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าของรังสีเอ็กซ์ จึงทำให้เกิดการปล่อยคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่มีค่าความยาวคลื่นและความถี่เหมือนกับรังสี เอ็กซ์ที่ตกกระทบออกไปทุกทิศทาง(11) ดังรูปที่ 3.2



รูปที่ 3.2 แสดงลักษณะการกระเจิงของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบอิเล็กตรอน 1 ตัว



ถ้าเป็นในกรณีของอะตอม 1 อะตอม อะตอมจะประกอบด้วยกลุ่มของอิเล็กตรอนที่อยู่รอบ ๆ นิวเคลียส ในกรณีนี้เราจะไม่พิจารณาว่านิวเคลียสมีผลต่อการกระเจิงของรังสีเอ็กซ์ เพราะว่ามามีมวลขนาดใหญ่กว่าเมื่อเปรียบเทียบกับมวลของอิเล็กตรอน ทุก ๆ อิเล็กตรอนในอะตอมจะทำให้เกิดการกระเจิงของรังสีเอ็กซ์ขึ้น หรืออาจพูดได้ว่าอะตอมทำให้เกิดการกระเจิงรังสีเอ็กซ์ ค่าความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่กระเจิงจะขึ้นกับมุมระหว่างรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบและรังสีเอ็กซ์ที่กระเจิง โดยจะมีค่าความเข้มลดลงเมื่อมุมระหว่างแนวของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบและรังสีเอ็กซ์ที่กระเจิงมีค่ามากขึ้น ในกรณีของผลึกซึ่งประกอบด้วยอะตอมที่เรียงกันอยู่อย่างเป็นระเบียบใน 3 มิติ การกระเจิงรังสีเอ็กซ์ของแต่ละอะตอมที่เรียงกันอยู่อย่างเป็นระเบียบเป็นแถวนั้น จะทำให้เกิดหน้าคลื่น (wave front) ที่เป็นรูปร่างกลมออกไป ดังรูปที่ 3.3



รูปที่ 3.3 แสดงการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยอะตอมที่เรียงกันอยู่อย่างเป็นระเบียบ

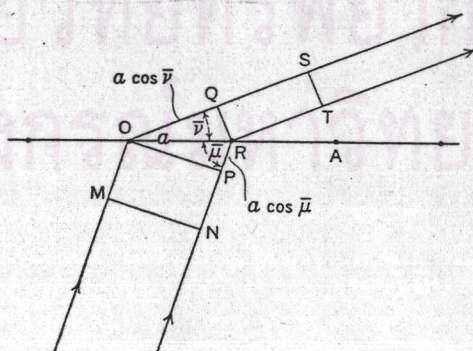
แนวของเส้นตรงใด ๆ ที่เกิดจากการรวมเชื่อมกัน (cooperative combine) ของหน้าคลื่น ที่กำลังเคลื่อนที่ไปในแนวทิศทางเดียวกันจะเป็นเส้นสัมพันธ์ร่วมกัน การเชื่อมรวมกันของหน้าคลื่นที่กระเจิงนี้เราเรียกว่า "การเลี้ยวเบน" (diffraction) แนวของหน้าคลื่นเลี้ยวเบนที่เกิดจากการลากเส้นสัมพันธ์หน้าคลื่นวงกลมอันแรกของแต่ละอะตอม เราเรียกว่า "คลื่นการเลี้ยวเบนอันดับศูนย์" (zero order diffraction wave) ส่วนหน้าคลื่นเลี้ยวเบนที่เกิดจากการลากเส้นสัมพันธ์หน้าคลื่นวงกลมอันแรก

ของอะตอมตัวที่ 1 กับหน้าคลื่นอันที่สองของอะตอมตัวที่ 2 กับหน้าคลื่นอันที่สามของอะตอมตัวที่ 3 ในลักษณะเช่นนี้ไปเรื่อย ๆ โดยมีผลต่างของหน้าคลื่นระหว่างอะตอมที่อยู่ใกล้กันหนึ่งหน้าคลื่นแล้ว เราเรียกว่า "คลื่นการเลี้ยวเบนอันดับหนึ่ง" (first order diffraction wave) ในทำนองเดียวกันถ้าอะตอมที่อยู่ใกล้กันมีผลต่างของหน้าคลื่นอยู่สองหน้าคลื่นแล้ว แนวของหน้าคลื่นนี้เราเรียกว่า "คลื่นการเลี้ยวเบนอันดับสอง" (second order diffraction wave) ในกรณีทั่ว ๆ ไปถ้าอะตอมที่อยู่ใกล้กันมีผลต่างของหน้าคลื่นอยู่ n หน้าคลื่นแล้ว แนวของหน้าคลื่นนี้เราเรียกว่า "คลื่นการเลี้ยวเบนอันดับ n " (n-order diffraction wave)

3.1.2 เงื่อนไขของลาวเอ (Laue's condition)

เมื่อรังสีเอ็กซ์ตกกระทบผลึกจะทำให้เกิดการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ขึ้น เนื่องจากผลึกประกอบด้วยอะตอมต่าง ๆ เรียงกันอยู่อย่างเป็นระเบียบใน 3 มิติ ในการพิจารณาตามเงื่อนไขของลาวเอ เพื่อความสะดวกจะพิจารณาใน 1 มิติก่อน แล้วจึงค่อยพิจารณาใน 2 หรือ 3 มิติตามลำดับดังนี้

พิจารณาอะตอมที่เรียงกันเป็นแนวแลตทิซใน 1 มิติ มีระยะห่างระหว่างอะตอมเป็น a ดังรูปที่ 3.4



รูปที่ 3.4 แสดงเงื่อนไขของลาวเอใน 1 มิติ

โดยให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบบำมุมกับ \bar{a} เป็นมุม $\bar{\mu}$ และรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนทำมุมกับ \bar{a} เป็นมุม $\bar{\nu}$ \vec{S}_0 และ \vec{S} เป็นเวกเตอร์ที่มีขนาดหนึ่งหน่วยของรังสีเอ็กซ์ตกกระทบบและรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนตามลำดับ MN เป็นหน้าคลื่นของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบบ (นั่นคือจุด M และ N มีเฟสเดียวกัน) เมื่อเคลื่อนที่มาถึงตำแหน่ง OP หน้าคลื่นจะตกกระทบบอะตอมที่ O ก่อนแล้วเกิดการกระเจิงรังสีเอ็กซ์ขึ้น ครั้นเคลื่อนที่ต่อไปหน้าคลื่นตกกระทบบ P จึงค่อยเริ่มตกกระทบบอะตอมที่ R และเพิ่งจะเริ่มทำให้เกิดการกระเจิงรังสีเอ็กซ์ที่ R ในขณะที่จุด ๆ หนึ่งบนหน้าคลื่นของรังสีเอ็กซ์ที่กระเจิงจากอะตอม O ก่อนหน้านั้นเคลื่อนที่ไปถึงจุด Q แล้ว หน้าคลื่นของรังสีเอ็กซ์ที่กระเจิงจากอะตอม O และ R จะเชื่อมรวมกันเป็นหน้าคลื่น QR ของรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนในแนวทิศ \vec{S} ใต้นั้น ก็ต่อเมื่อจุด Q และ R อยู่ในเฟสเดียวกัน นั่นคือความแตกต่างของทางเดินของหน้าคลื่นในแนว OQ และแนว PR จะต้องเป็น h เท่าของความยาวคลื่น (λ) ของรังสีเอ็กซ์

ดังนั้น

$$OQ - PR = h\lambda$$

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

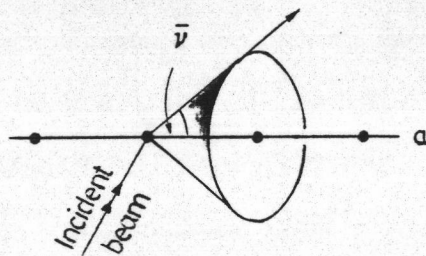
$$a(\cos \bar{\nu} - \cos \bar{\mu}) = h\lambda$$

เมื่อเขียนในรูปของสมการเวกเตอร์จะได้ $\bar{a} \cdot (\vec{S} - \vec{S}_0) = h\lambda$

(3.1)

โดย $h = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ เป็นอันดับของการเลี้ยวเบน

สมการ (3.1) แสดงเงื่อนไขการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ตามแนวความคึกของลาวเอิน 1 มิติ จึงเรียกว่า "เงื่อนไขของลาวเอิน 1 มิติ" จากสมการนี้พบว่ามุม $\bar{\nu}$ มีโอกาสเป็นไปได้รอบแนวแลตทิซ ดังนั้นมุม $\bar{\nu}$ จะเป็นครึ่งมุมยอดของกรวยการเลี้ยวเบนของลาวเอิน ดังรูปที่ 3.5

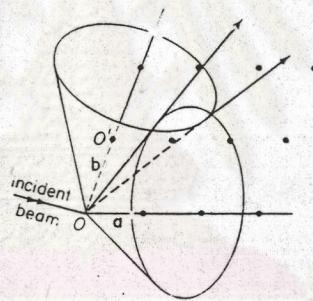


รูปที่ 3.5 แสดงกรวยการเลี้ยวเบนของลาวเอิน 1 มิติ

ในทำนองเดียวกันถ้าเราพิจารณาใน 2 มิติ อะตอมจะมีการเรียงตัวกันในระนาบแลตทิซ (lattice plane) โดยที่อะตอมแต่ละอะตอมในแต่ละแนวมีระยะห่างกันเป็น a และ b เเงอนไซของลาวเอจะกลายเป็น

$$\left. \begin{aligned} a \cdot (\vec{S} - \vec{S}_0) &= h\lambda \\ \text{และ } b \cdot (\vec{S} - \vec{S}_0) &= k\lambda \end{aligned} \right\} (3.2)$$

ดังนั้น การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์จะเกิดขึ้นได้ จะต้องสอดคล้องตามสมการ (3.2) ทั้ง 2 เเงอนไซพร้อมกัน รังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนจะเกิดขึ้นในแนวของจุดที่กรวยการเลี้ยวเบนทั้งสองมาตัดกัน ดังรูปที่ 3.6



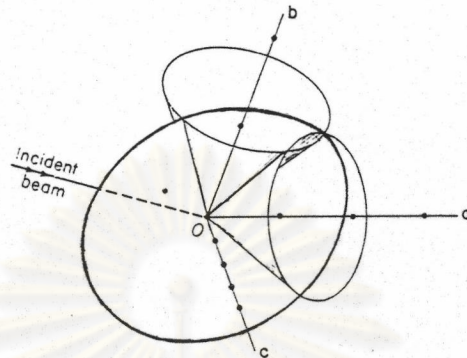
รูปที่ 3.6 แสดงกรวยการเลี้ยวเบนของลาวเอใน 2 มิติ

ในกรณีของ 3 มิติ อะตอมจะมีการเรียงตัวกันเป็นแลตทิซปริภูมิ (space lattice) โดยที่อะตอมแต่ละอะตอมในแต่ละแนวห่างกันเป็นระยะ a, b และ c ดังนั้น เเงอนไซการเลี้ยวเบนของลาวเอใน 3 มิติจะกลายเป็น

$$\left. \begin{aligned} a \cdot (\vec{S} - \vec{S}_0) &= h\lambda \\ b \cdot (\vec{S} - \vec{S}_0) &= k\lambda \\ c \cdot (\vec{S} - \vec{S}_0) &= l\lambda \end{aligned} \right\} (3.3)$$

การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์จะเกิดขึ้นได้ จะต้องสอดคล้องตามสมการ (3.3) ทั้ง 3

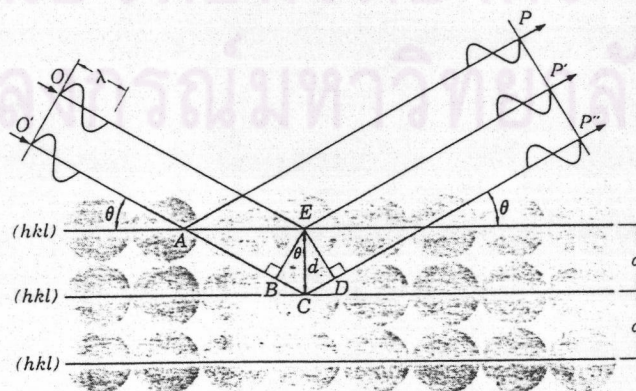
เงื่อนไขพร้อมกัน นั่นคือรังสีเอ็กซ์เดี่ยวเบนจะเกิดขึ้นในแนวของจุดที่กรวยการเลี้ยวเบนทั้ง 3 มาตัดรวมกัน ดังรูปที่ 3.7



รูปที่ 3.7 แสดงเงื่อนไขการเลี้ยวเบนของลาวเอิน 3 มิติ

3.1.3 กฎของแบรกก์ (Bragg law)

แบรกก์ (Bragg) อธิบายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ โดยการกำหนดระนาบผลึกหนึ่งในผลึกขึ้นมาและระยะห่างระหว่างระนาบเป็น d รังสีเอ็กซ์ตกกระทบบนระนาบที่จุด E และ C ทำมุมตกกระทบบนระนาบผลึกเป็นมุม θ แล้วสะท้อนออกจากระนาบผลึกโดยทำมุมกับระนาบผลึกเป็นมุม θ เท่าเดิม มุม θ นี้เรียกว่า "มุมของแบรกก์" (Bragg angle) (4) ดังรูปที่ 3.8



รูปที่ 3.8 แสดงการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ตามกฎของแบรกก์

จากรูปที่ 3.8 BE เป็นหน้าคลื่นรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบ ถ้ารังสีเอ็กซ์ที่สะท้อนจาก E และ C สามารถทำให้เกิดหน้าคลื่น ED ของรังสีเอ็กซ์ที่สะท้อนได้แล้ว รังสีเอ็กซ์ทั้งสองจะต้องมีความแตกต่างของทางเดิน เป็นจำนวน n เท่าของความยาวคลื่น (λ) ของรังสีเอ็กซ์ นั่นคือ

$$\begin{aligned} BC + CD &= n\lambda \\ 2d \sin \theta &= n\lambda \end{aligned} \quad (3.4)$$

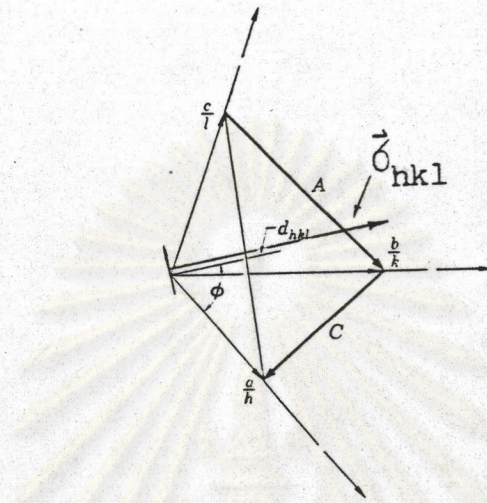
เมื่อ $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ เป็นตัวเลขที่บอกอันดับของการสะท้อน ถึงแม้ว่าสมการ (3.4) จะได้มาจากการคิดให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบระนาบแล้วเกิดการสะท้อนขึ้น แต่ก็แตกต่างจากกฎการสะท้อนคือการสะท้อนจะเกิดขึ้นที่ทุกค่าของมุม θ ใด ๆ ใดตลอดทุกค่า แต่การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์จะเกิดขึ้นได้เฉพาะค่าของมุม θ ที่สอดคล้องตามสมการ (3.4) เท่านั้น

3.1.4 แลตทิซส่วนกลับ (reciprocal lattice)

เนื่องจากอะตอมต่าง ๆ ในผลึกมีการจัดเรียงตัวซ้ำกันเป็นคาบ (periodic) ใน 3 มิติ ดังนั้นไม่ว่ารูปร่างหรือขนาดของอะตอมในผลึกต่างชนิดกัน จะเป็นเช่นไรก็ตาม คราวใดที่เป็นลักษณะผลึกจะต้องมีการจัดเรียงตัวซ้ำกันเป็นคาบเสมอ จะเห็นว่าลักษณะรูปร่างหรือขนาดของอะตอมไม่มีผลต่อการเรียงซ้ำกันเป็นคาบ ถ้าเราจะใช้จุดแทนตำแหน่งที่อยู่ของอะตอมหรือกลุ่มของอะตอมต่าง ๆ ที่เหมือนกันในผลึก จุดเหล่านี้จะแสดงลักษณะของการเรียงซ้ำกันเป็นคาบเหมือนเดิม ในทางปฏิบัติและเพื่อความสะดวกเราจึงใช้จุดแทนตำแหน่งที่อยู่ของอะตอมหรือกลุ่มของอะตอม ที่มีการจัดเรียงตัวซ้ำกันเป็นคาบ แต่ละจุดที่เราใช้แทนอะตอมหรือกลุ่มของอะตอมนี้เรียกว่า "จุดแลตทิซ" (lattice point) จุดแลตทิซที่จัดเรียงตัวซ้ำกันเป็นคาบใน 3 มิติ เรียกว่า "แลตทิซปริภูมิ" (space lattice)

แต่มีแลตทิซอีกแบบหนึ่งซึ่งเราเรียกว่า "แลตทิซส่วนกลับ" ซึ่งได้จากการพิจารณาว่า ถ้าเราเลือกจุดแลตทิซจุดใดจุดหนึ่งในแลตทิซปริภูมิเป็นจุดกำเนิด (origin point) จากจุดกำเนิดนี้เมื่อลากเส้นตรงไปตั้งฉากกับระนาบ hkl

ของผลึก โดยให้ความยาวของเส้นตั้งฉากเป็น d_{hkl} ดังรูปที่ 3.9



รูปที่ 3.9 แสดงจุดส่วนกลับที่ใช้แทนระนาบ hkl ใด ๆ

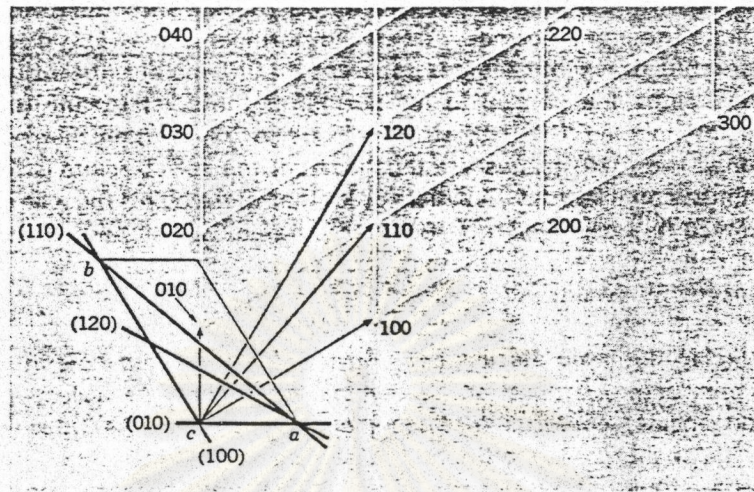
เราจะแทนระนาบ hkl ด้วยจุด ๆ หนึ่งซึ่งอยู่ที่ปลายของเวกเตอร์ที่ลากตั้งฉากกับระนาบ hkl นั้น ๆ แต่อยู่ห่างจากจุดกำเนิดเป็นระยะ σ_{hkl} โดยที่

$$\sigma_{hkl} = \frac{1}{d_{hkl}} \quad (3.5)$$

จุดที่กำลังพูดถึงนี้เรียกว่า "จุดส่วนกลับ" (reciprocal point) ถ้าให้ \vec{n} เป็นเวกเตอร์ที่มีขนาดหนึ่งหน่วย (unit vector) ในทิศตั้งฉากกับระนาบ hkl ดังนั้นสมการ (3.5) จะเขียนในรูปสมการเวกเตอร์ได้เป็น

$$\vec{\sigma}_{hkl} = \frac{1}{d_{hkl}} \cdot \vec{n} \quad (3.6)$$

และเนื่องจากแต่ละระนาบ hkl ใด ๆ ในแลตทิซปริภูมิสามารถแทนด้วยจุดส่วนกลับ 1 จุด จุดส่วนกลับแต่ละจุดที่แทนแต่ละระนาบ hkl ในแลตทิซปริภูมิ ก็จะมีการจัดเรียงตัวกันอย่างเป็นคาบใน 3 มิติ. เกิดเป็นแลตทิซใหม่เรียกแลตทิซส่วนกลับ ดังรูปที่ 3.10 ถ้าให้ a, b, c เป็นค่าคงที่แลตทิซที่ซ้ำกันเป็นคาบในแลตทิซปริภูมิ a^*, b^*, c^* เป็นค่าคงที่แลตทิซในแลตทิซส่วนกลับ จะได้ว่า



รูปที่ 3.10 แสดงแลตทิซส่วนกลับที่ใช้แทนระนาบ hkl ใด ๆ
ในแลตทิซปริภูมิ ในระนาบ ab ของผลึก.

$$\left. \begin{aligned} \vec{a}^* &= \vec{O}_{100} = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \\ \vec{b}^* &= \vec{O}_{010} = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \\ \vec{c}^* &= \vec{O}_{001} = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \end{aligned} \right\} (3.7)$$

$$\left. \begin{aligned} \vec{a}^* \cdot \vec{a} &= 1 & \vec{a}^* \cdot \vec{b} &= 0 & \vec{a}^* \cdot \vec{c} &= 0 \\ \vec{b}^* \cdot \vec{a} &= 0 & \vec{b}^* \cdot \vec{b} &= 1 & \vec{b}^* \cdot \vec{c} &= 0 \\ \vec{c}^* \cdot \vec{a} &= 0 & \vec{c}^* \cdot \vec{b} &= 0 & \vec{c}^* \cdot \vec{c} &= 1 \end{aligned} \right\} (3.8)$$

$$\left. \begin{aligned} \vec{a}^* &= \vec{O}_{100} = \frac{1}{d_{100}} \vec{n} \\ 2\vec{a}^* &= 2\vec{O}_{100} = \frac{2}{d_{100}} \vec{n} \\ &= \vec{O}_{200} = \frac{1}{d_{200}} \vec{n} \end{aligned} \right\} (3.9)$$

$$\begin{aligned}\vec{a} &= (\vec{a}^*)^* = \frac{\vec{b}^* \vec{c}^*}{\vec{a}^* \cdot \vec{b}^* \vec{c}^*} \\ \vec{b} &= (\vec{b}^*)^* = \frac{\vec{c}^* \vec{a}^*}{\vec{a}^* \cdot \vec{b}^* \vec{c}^*} \\ \vec{c} &= (\vec{c}^*)^* = \frac{\vec{a}^* \vec{b}^*}{\vec{a}^* \cdot \vec{b}^* \vec{c}^*}\end{aligned}\quad (3.10)$$

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

$$\vec{O}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \quad (3.11)$$

3.1.5 การหาค่าคงที่แลตทิซในระบบเตตระโกนัล

การหาค่าคงที่แลตทิซในระบบเตตระโกนัลสามารถคำนวณหาได้ดังนี้

$$\begin{aligned}\text{จาก } \vec{O}_{hkl} \cdot \vec{O}_{hkl} &= (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \\ &= hh\vec{a}^* \cdot \vec{a}^* + hk\vec{a}^* \cdot \vec{b}^* + hl\vec{a}^* \cdot \vec{c}^* + kh\vec{b}^* \cdot \vec{a}^* + \\ &\quad kk\vec{b}^* \cdot \vec{b}^* + kl\vec{b}^* \cdot \vec{c}^* + lh\vec{c}^* \cdot \vec{a}^* + lk\vec{c}^* \cdot \vec{b}^* + \\ &\quad ll\vec{c}^* \cdot \vec{c}^*\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{ดังนั้น } \sigma_{hkl}^2 = \frac{1}{d_{hkl}^2} &= h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^* b^* \cos\alpha^* + \\ &\quad 2klb^* c^* \cos\alpha^* + 2lhc^* a^* \cos\beta^*\end{aligned}\quad (3.12)$$

สมการ (3.12) แสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะห่างระหว่างระนาบ (d)

ค่าดัชนีมิลเลอร์ hkl และชนิดของระบบผลึกโดยทั่วไป แต่ถ้าคิดในระบบเตตระโกนัลนั้นคือ $a^* = b^* \neq c^*$ และ $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$ แทนลงในสมการ (3.12) (12)

$$\text{จะได้ว่า } \frac{1}{d_{hkl}^2} = (h^2 + k^2) a^{*2} + l^2 c^{*2}$$

$$\frac{4\sin^2\theta}{\lambda^2} = \frac{(h^2 + l^2)}{a^2} + \frac{1}{c^2}$$

$$\sin^2\theta = \frac{\lambda^2}{4a^2}(h^2 + k^2) + \frac{\lambda^2}{4c^2}(l^2)$$

$$\sin^2\theta = A(h^2 + k^2) + C(l^2) \quad (3.13)$$

เมื่อ $A = \frac{\lambda^2}{4a^2}$ และ $C = \frac{\lambda^2}{4c^2}$ ถ้าพิจารณาเฉพาะพวก hoo จะได้ว่า

$$\sin^2\theta = Ah^2$$

นั่นคือ ถ้าเราทราบค่ามุมการเลี้ยวเบน θ ของพวกระนาบที่มีดัชนีมิลเลอร์ hoo และค่าความยาวคลื่นรังสีเอ็กซ์ที่ใช้ ก็สามารถคำนวณหาค่า a ได้ ในทำนองเดียวกันถ้าพิจารณาพวก oko และ ool ก็จะสามารถคำนวณหาค่า b และ c ของผลึกได้

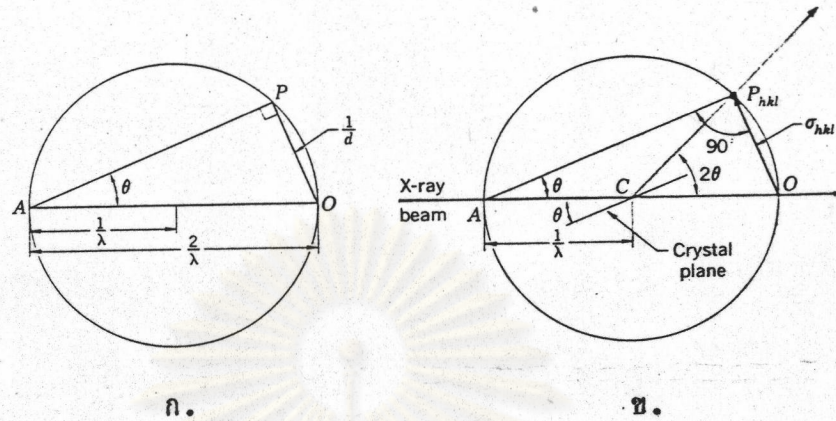
3.1.6 ความสัมพันธ์ระหว่างแลตทิซส่วนกลับ กฎของแบรกก์และเงื่อนไขของลาวเอ

จากกฎของแบรกก์ $2d\sin\theta = n\lambda$ ซึ่งถ้าเขียนให้อยู่ในรูปที่เหมาะสมจะได้ว่า

$$2d_{hkl}\sin\theta = \lambda$$

$$\sin\theta = \frac{\lambda}{2d_{hkl}} = \frac{1/d_{hkl}}{2/\lambda} = \frac{\sigma_{hkl}}{2/\lambda} \quad (3.14)$$

และเนื่องจากสามเหลี่ยมมุมฉากใด ๆ สามารถบรรจุลงในครึ่งวงกลมได้เสมอ ดังนั้นความหมายของสมการ (3.14) จึงสามารถแทนได้ด้วยสามเหลี่ยมมุมฉาก APO ที่บรรจุในครึ่งวงกลมที่มีเส้นผ่านศูนย์กลาง $AO = \frac{2}{\lambda}$ ดังรูปที่ 3.11 (ก) และ (ข) จากรูป 3.1-1 (ข) ถ้าให้ AO เป็นแนวรังสีตกกระทบตามสมการของแบรกก์ ตกกระทบทำมุม θ กับระนาบผลึกที่จุด C ซึ่งเป็นจุดศูนย์กลางของวงกลม จะทำให้เกิดรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนในแนว CP แต่ $\vec{OP} = \vec{\sigma}_{hkl}$ ซึ่งเป็นเวกเตอร์แลตทิซส่วนกลับมี



รูปที่ 3.11 (ก)และ(ข) แสดงความสัมพันธ์ระหว่างแลตทิซส่วนกลับ และกฎของแบรกก์

จุดกำเนิดที่จุด O จะตั้งฉากกับระนาบของผลึกนั้น ทำให้สามารถอธิบายกฎของแบรกก์สัมพันธ์กับแลตทิซส่วนกลับได้ดังนี้

1. สมมติให้ผลึกถูกวางอยู่ที่จุด C ซึ่งเป็นจุดศูนย์กลางของวงกลมที่มีรัศมี $\frac{1}{\lambda}$
2. รังสีเอ็กซ์ตกกระทบในแนว AC ผ่านระนาบของผลึกทะลุเลยออกไป

ตัดวงกลมที่จุด O โดยจุด O ถูกสมมติให้เป็นจุดกำเนิดของแลตทิซส่วนกลับ

3. รังสีเอ็กซ์จะเกิดการเลี้ยวเบนในแนว CP ก็ต่อเมื่อ จุด P ซึ่งเป็นจุดส่วนกลับ หมุนไปตัดเส้นรอบวงของวงกลมเท่านั้น

ในกรณีที่ เป็น 3 มิติ วงกลมจะกลายเป็นทรงกลมซึ่งยังคงมีรัศมี $\frac{1}{\lambda}$ และจะเกิดรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนทุกครั้งเมื่อจุดแลตทิซส่วนกลับหมุนไปตัดผิวทรงกลม เราจึงเรียกทรงกลมนี้ว่า "ทรงกลมการสะท้อน" (sphere of reflection) หรือทรงกลมของเอวาลด์ (Ewald's sphere)

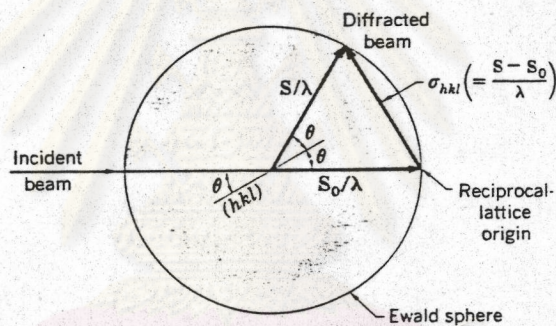
ส่วนเงื่อนไขของลาวเอกับแลตทิซส่วนกลับ สามารถอธิบายความสัมพันธ์ได้ดังนี้ พิจารณาเวกเตอร์แลตทิซส่วนกลับ \vec{R} ใด ๆ เมื่อ

$$\vec{R} = p\vec{a}^* + q\vec{b}^* + r\vec{c}^* \tag{3.15}$$

โดยที่ p, q และ r เป็นตัวเลขใด ๆ ซึ่งสามารถคำนวณหาได้จาก

$$\left. \begin{aligned} \vec{a} \cdot \vec{R} &= \vec{a} \cdot (p\vec{a}^* + q\vec{b}^* + r\vec{c}^*) = p \\ \text{ในทำนองเดียวกัน } \vec{b} \cdot \vec{R} &= q \\ \vec{c} \cdot \vec{R} &= r \end{aligned} \right\} (3.16)$$

ถ้าสมมติว่า \vec{R} เป็นผลต่างของเวกเตอร์ที่มีขนาดหนึ่งหน่วย \vec{S} และ \vec{S}_0 แล้วคูณด้วย $\frac{1}{\lambda}$ ดังรูปที่ 3.12



รูปที่ 3.12 แสดงความสัมพันธ์เงื่อนไขของลาวเอกับแลตทิซส่วนกลับ

นั่นคือ
$$\vec{R} = \frac{\vec{S} - \vec{S}_0}{\lambda}$$

โดยการแทนค่า \vec{R} ลงในสมการ(3.16) ก็จะได้เงื่อนไขของลาวเอ ดังนี้

$$\left. \begin{aligned} p &= \vec{a} \cdot \vec{R} = \vec{a} \cdot \left(\frac{\vec{S} - \vec{S}_0}{\lambda} \right) = h \\ q &= \vec{b} \cdot \vec{R} = \vec{b} \cdot \left(\frac{\vec{S} - \vec{S}_0}{\lambda} \right) = k \\ r &= \vec{c} \cdot \vec{R} = \vec{c} \cdot \left(\frac{\vec{S} - \vec{S}_0}{\lambda} \right) = l \end{aligned} \right\} (3.17)$$

แต่จากเงื่อนไขของลาวเอ h, k และ l ต้องเป็นเลขจำนวนเต็ม ฉะนั้นจะได้ว่า

$$\frac{\vec{S} - \vec{S}_0}{\lambda} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* = \vec{\delta}_{hkl} \quad (3.18)$$

นอกจากนี้ถ้าพิจารณาต่อไปจะพบว่า เงานโซของลาวเอมีมีความหมายเช่นเดียวกันกับกฎการเลี้ยวเบนของแบรกก์ครั้งนี้ จากสมการ(3.18)จะเขียนได้เป็น

$$\frac{1}{\lambda} \left| \vec{S} - \vec{S}_0 \right| = \delta_{hkl} = \frac{1}{d_{hkl}} \quad (3.19)$$

และจากรูป(3.11) เพราะว่า \vec{S} และ \vec{S}_0 เป็นเวกเตอร์ที่มีขนาดหนึ่งหน่วย

$$\therefore \left| \vec{S} - \vec{S}_0 \right| = 2\sin\theta \quad (3.20)$$

เมื่อแทนค่าในสมการ(3.19) จะได้ว่า

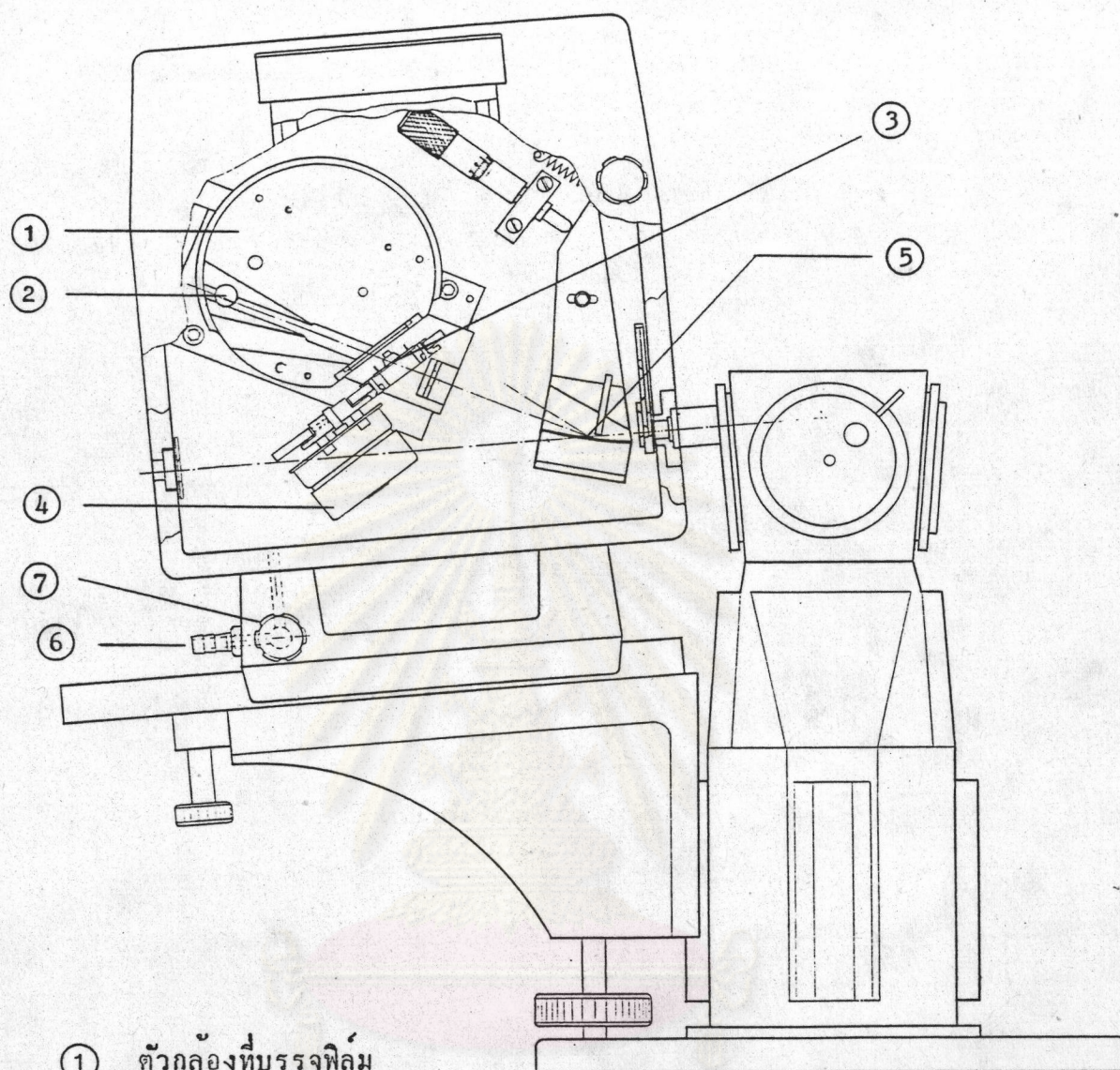
$$2d_{hkl}\sin\theta = \lambda$$

3.2 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผงในกล้องกีเนียร์ - เฮกก์

3.2.1 ลักษณะและหลักการทํางานของกล้องกีเนียร์ - เฮกก์

กล้องที่ใช้ในการทดลองนี้เป็นกล้องกีเนียร์ - เฮกก์ชนิดปรับโฟกัส (Guinier - Hägg focusing camera) แบบ Philips XDC - 700 ดังรูปที่ 3.13 ใช้ถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกผงได้เฉพาะที่อุณหภูมิห้อง ในขณะที่ทำการถ่ายภาพภายในห้องตัวกล้องจะทำให้เป็นสูญญากาศ ทั้งนี้เพื่อลดความคําของพื้นฟิล์มที่ปรากฏบนพื้นฟิล์มทางด้านที่มุม θ น้อยเนื่องจากการกระเจิงรังสีเอ็กซ์ของอากาศ ถ้าดูลักษณะภายในของห้องตัวกล้องจะมีส่วนประกอบที่สำคัญ ๆ ดังนี้(13)

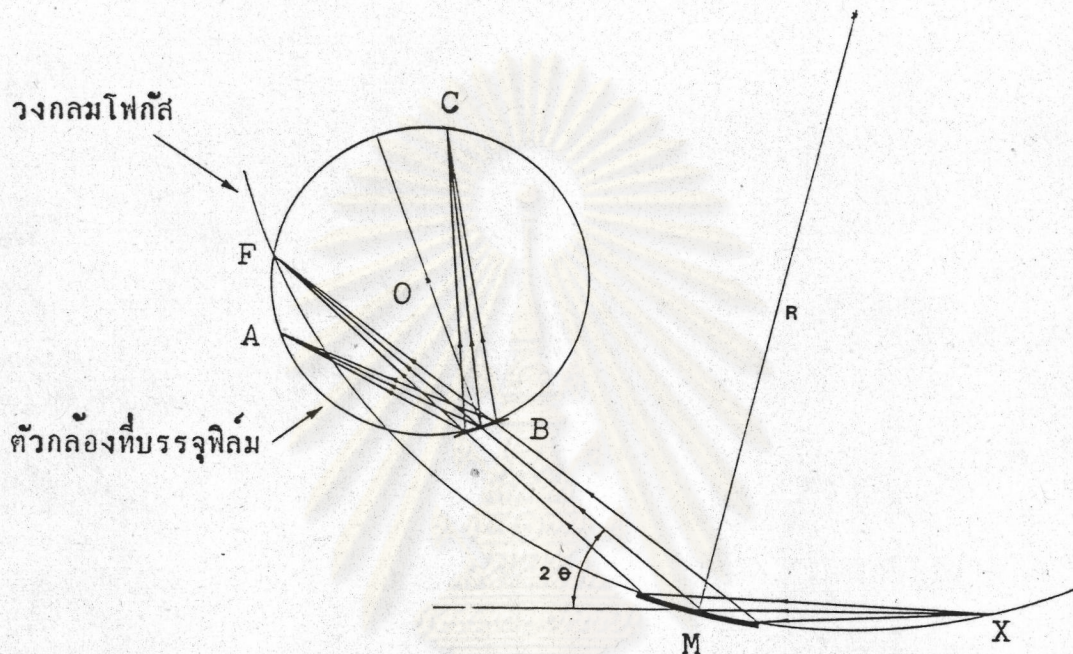
- ก. ตัวกล้องที่บรรจุฟิล์ม เป็นรูปทรงกระบอกมีเส้นผ่าศูนย์กลาง 100 มม. และมีที่ปิด - เปิดสำหรับบันทึกเส้นปฐมภูมิประกอบรวมเป็นชุดอยู่ด้วยกัน
- ข. ที่บรรจุสารตัวอย่าง
- ค. มอเตอร์ที่ทำให้สารตัวอย่างหมุน
- ง. ตัวทำรังสีเอกรงค์แบบโจฮันสัน (Johansson's monochromator) ทำด้วยควอทซ์ ระบาย (1071)



- ① ตัวกล้องที่บรรจุฟิล์ม
- ② ฝาปิด - เปิดสำหรับบันทึกเส้นปฐมภูมิ
- ③ ฟิล์มบรรจุสารตัวอย่าง
- ④ มอเตอร์ที่ทำให้สารตัวอย่างหมุน
- ⑤ ตัวทำรังสีเอกเรงค์ (monochromator)
- ⑥ ท่อที่ต่อเข้าเครื่องสูบลำแสง
- ⑦ วาล์วปิด - เปิดท่อ

รูปที่ 3.13 กล้องกีเนียร์ - เซกซ์ชนิดปรับโฟกัส แบบ Philips XDC-700
แสดงภายในห้องตัวกล้อง

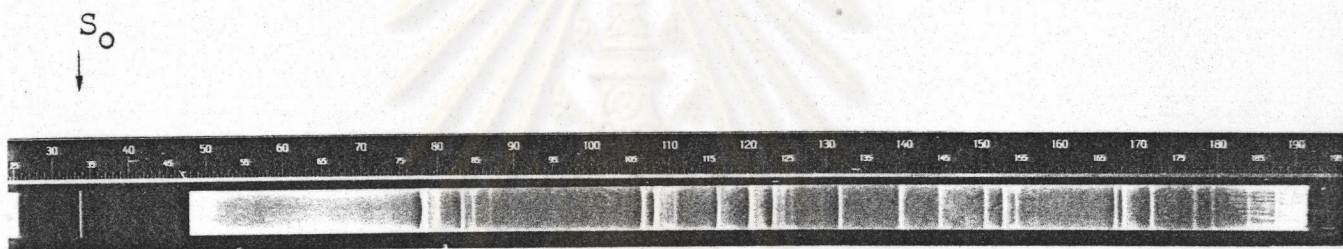
จ. ท่อที่ต่อเข้าเครื่องสูบลำแสงอากาศและวาล์วเปิด - ปิดต่อ ส่วนหลักการทำงานของกล้องกีเนียร์ - เฮลล์ สามารถอธิบายได้จากรูปที่ 3.14



รูปที่ 3.14 แสดงหลักการทำงานของกล้องกีเนียร์ - เฮลล์

จุด X เป็นเส้นโฟกัสของหลอดรังสีเอ็กซ์ รังสีเอ็กซ์ที่เบนกระจายออกจะตกกระทบบจุดกึ่งกลางของตัวทำรังสีเอกรงค์ที่ M โดยทำมุม θ กับระนาบของผลึกตัวทำรังสีเอกรงค์ ถ้าตัวทำรังสีเอกรงค์ปรับอยู่ในตำแหน่งที่ถูกต้อง จะทำให้รังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบน $K\alpha_1$ ซึ่งทำมุม 2θ กับแนวของรังสีตกกระทบบ ไปรวมกันเป็นเส้นโฟกัสที่จุด F ซึ่งอยู่บนเส้นรอบวงของตัวกล้องที่มีฟิล์มบรรจุอยู่พอดี เส้นโฟกัสที่ตำแหน่ง F เรียกว่า "เส้นปฐมภูมิ" (primary beam) เมื่อใส่สารตัวอย่างลงในช่องที่บรรจุสารตัวอย่าง B รังสีเอ็กซ์ที่ปกติจะต้องไปรวมกันที่จุด F จะต้องตกกระทบบผ่านสารตัวอย่างที่ B ก่อน จึงทำให้เกิดการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์เนื่องจากสารตัวอย่างไปตกบนฟิล์มในแนว BA และ BC โดยทิศการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ในแนว FA จะมีมุมการเลี้ยวเบนไปในทางลบ ส่วนทิศการเลี้ยวเบนในแนว FC จะมีมุมการเลี้ยวเบนไปในทางบวก ดังนั้นการจัด

ตำแหน่งของกล้องรูปทรงกระบอก O จึงขึ้นอยู่กับจุดประสงค์ในการสร้างกล้องว่า ต้องการถ่ายภาพรังสีเอ็กซ์เดี่ยวเบนเฉพาะในทางมุมบวกหรือทางมุมลบ แต่กล้องที่ใช้ในการทดลองนี้จะถ่ายภาพรังสีเอ็กซ์เดี่ยวเบนเฉพาะในทางมุมบวกเท่านั้น จุด X, M และ F จะอยู่บนแนวเส้นรอบวงของวงกลมโฟกัส (focussing circle) ในขณะที่ถ่ายภาพมอเตอร์จะหมุนสารตัวอย่าง เพื่อให้เม็ดผลึกผงที่มีการจัดวางเรียงระนาบในมุมต่าง ๆ เกิดการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ขึ้นที่มุมต่าง ๆ ตามกฎของแบรกก์ ตัวกล้องจะมีขีดความสามารถบันทึกข้อมูลจากค่ามุมของแบรกก์ θ ที่ 0° จนถึง 45° ฟิล์มที่ถ่ายภาพแล้วจะมีลักษณะดังรูปที่ 3.15 โดย S_0 เป็นตำแหน่งของเส้นปฐมภูมิ



รูปที่ 3.15 แสดงภาพถ่ายของสาร $AgInSe_2$ ที่ถ่ายด้วยกล้องกีเนียร์ - เฮกก์

3.2.2 การหาค่าคงที่แลคทิจจากภาพถ่ายผลึกผงโดยกล้องกีเนียร์ - เฮกก์

เนื่องจากผลึกผงของสารที่ต้องการนำมาถ่ายนั้น เราจะต้องใส่ผงซิลิกอนบริสุทธิ์ 99.99% ผสมลงไปประมาณ $\frac{1}{3}$ ของสารทั้งหมด เพื่อใช้เป็นสารมาตรฐานในการแก้ความคลาดเคลื่อนเชิงระบบซึ่งมีสาเหตุจากการหมุนที่บรรจุสารตัวอย่างซึ่งแบนราบในขณะถ่ายภาพและฟิล์มที่บรรจุในกล้อง อาจจะไม่อยู่ในแนวเส้นรอบวงของตัวกล้องอย่างแท้จริง รวมทั้งการหดตัวของฟิล์มในขณะล้างฟิล์มด้วย ดังนั้น จากฟิล์มภาพถ่ายของผลึกผงที่ได้จากกล้องกีเนียร์ - เฮกก์ ดังแสดงในรูปที่ 3.15 นั้น ก่อนที่จะนำมาทำการคำนวณหาค่าคงที่แลคทิจ จะต้องทำการแก้ความคลาดเคลื่อนเชิงระบบก่อน แล้วจึงค่อยคำนวณหาค่าคงที่แลคทิจต่อไป

3.2.2.1 การวัดฟิล์มกีเนียร์ - เซกต์ โดยใช้เครื่องวัดที่มี เวอร์เนียร์

ในการวัดฟิล์มกีเนียร์ - เซกต์ โดยใช้เครื่องวัดที่มี
เวอร์เนียร์นั้น มีขั้นตอนในการวัดและการคำนวณดังต่อไปนี้ (14)

ขั้นที่ 1 วัดตำแหน่งเส้นปฐมภูมิ S_0 และตำแหน่งของเส้นการเลี้ยวเบน
รังสีเอ็กซ์ต่าง ๆ S พร้อมทั้งหาค่า $(S-S_0)_{obs}$ ของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์
ต่าง ๆ ทุกเส้น

ขั้นที่ 2 หาค่าตำแหน่งของเส้นซิกนอน โดยการเปรียบเทียบค่า $(S-S_0)_{obs}$
กับค่าของ $(S-S_0)_{calc}$, θ และ hkl ของสารซิกนอนที่ได้จากการคำนวณ
ดังตารางที่ 3.1

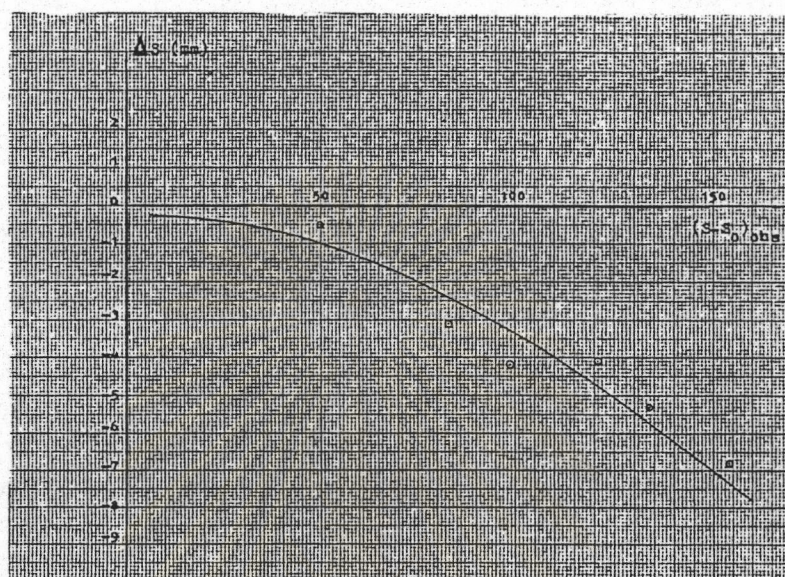
ตารางที่ 3.1 แสดงค่า θ , $(S-S_0)_{calc}$ และ hkl ของสารซิกนอน
($a = 5.431065 \text{ \AA}$) ที่ได้จากการคำนวณโดยใช้ความยาวคลื่น
รังสีเอ็กซ์ $\text{CuK}_{\alpha 1}$ ($\lambda = 1.54060 \text{ \AA}$) (15)

θ°	$(S-S_0)_{calc}$, mm	h k l
14.2209	49.7234	1 1 1
23.6508	82.6951	2 2 0
28.0605	98.1136	3 1 1
34.5642	120.8538	4 0 0
38.1872	133.5217	3 3 1
44.0139	153.8948	4 2 2

ขั้นที่ 3 ถ้าวัดหาค่าแก้ ΔS ของเส้นซิกนอน โดยค่า ΔS หาได้จาก

$$\Delta S = (S-S_0)_{calc} - (S-S_0)_{obs}$$

ขั้นที่ 4 เขียนกราฟระหว่าง ΔS กับ $(S-S_0)_{obs}$ ของเส้นซิกนอน
 ผังรูปที่ 3.16



รูปที่ 3.16 แสดงกราฟที่เขียนระหว่าง ΔS กับ $(S-S_0)_{obs}$ ของเส้นซิกนอน
 ที่ผสมกับผลึกผงควอทซ์

ขั้นที่ 5 หาค่าที่ถูกต้องของ $(S-S_0)_{corr}$ ของแต่ละเส้นการเลี้ยวเบน
 ได้จาก $(S-S_0)_{corr} = (S-S_0)_{obs} + \Delta S$
 โดยที่ค่า ΔS ของเส้นใด ก็ให้ดูจากกราฟ ณ ตำแหน่ง $(S-S_0)_{obs}$ ของเส้นนั้น

ขั้นที่ 6 คำนวณค่า θ_{corr} จาก $\theta_{corr} = K \cdot (S-S_0)_{corr}$
 โดย $K =$ ค่าคงที่ของกล้องซึ่งมีค่า 0.286 องศา/มิลลิเมตร

ขั้นที่ 7 จากค่า θ_{corr} คำนวณค่า $(\sin^2\theta)_{corr}$ และค่า d_{corr}
 โดยคำนวณจาก $2d_{hkl} \sin\theta = \lambda$

การแก้ความคลาดเคลื่อนในขั้นที่ 3 ถึงขั้นที่ 7 อาจคำนวณด้วยเครื่องคิดเลขธรรมดา
 และเขียนกราฟด้วยมือหรือคำนวณโดยใช้โปรแกรม GUNE (16)

ขั้นที่ 8 ใช้ค่าคงที่แลตทิซ a, c และระบบผลึกที่ได้จากสมการ (3.13)
 คำนวณค่า $(\sin^2\theta)_{calc}$ ของแต่ละดัชนีมิลเลอร์ hkl โดยใช้โปรแกรม CELNE

ขั้นที่ 9 ทำการเปรียบเทียบค่า $(\sin^2\theta)_{\text{corr}}$ ในขั้นที่ 7 และค่า $(\sin^2\theta)_{\text{calc}}$ ในขั้นที่ 8 ว่าคู่อุณหภูมิค่าเท่ากันหรือใกล้เคียงกันก็แสดงว่า $(\sin^2\theta)_{\text{corr}}$ จะมีค่า hkl ตามค่าของ $(\sin^2\theta)_{\text{calc}}$ นั้น ๆ ซึ่งขั้นตอนนี้เป็นการกำหนดค่าดัชนีมิลเลอร์ hkl ของเส้นการเลี้ยวเบนแต่ละเส้นนั่นเอง

ขั้นที่ 10 ใช้โปรแกรม CELNE กำหนดปรับค่าคงที่แลตทิซอย่างละเอียดด้วยวิธีกำลังสองน้อยที่สุด โดยใช้ข้อมูลจากขั้นที่ 7 และ 9

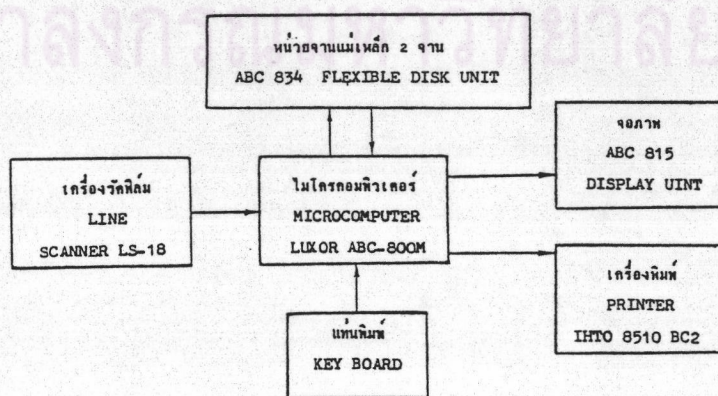
การคำนวณทั้งหมดโดยโปรแกรมสำเร็จรูป(16) กำหนดด้วยเครื่องคอมพิวเตอร์ IBM 3031-008 ของสถาบันบริการคอมพิวเตอร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

3.2.2.2 การวัดฟิล์มกีเนียร์ - เฮกส์ โดยใช้ระบบฟิล์มสแกนเนอร์ (film scanner system)

ในปัจจุบันเราสามารถลดความล่าช้าในการวัดและการคำนวณตามขั้นตอนที่กล่าวมาแล้วในหัวข้อ 3.2.2.1 จากขั้นที่ 1 จนถึงขั้นที่ 7 ลงไปได้โดยใช้ระบบฟิล์มสแกนเนอร์ในการวัดฟิล์มกีเนียร์ - เฮกส์ ระบบฟิล์มสแกนเนอร์คือเครื่องวัดความเข้มของฟิล์มแบบสเตปสแกน (step scan) ที่ควบคุมโดยระบบไมโครคอมพิวเตอร์ ประกอบด้วยส่วนสำคัญ ๆ คือ

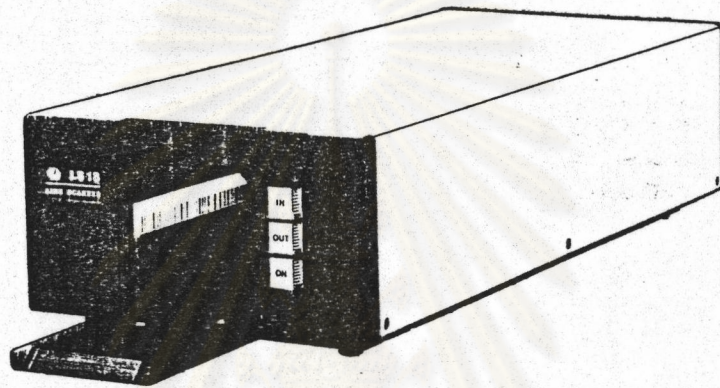
- เครื่องวัดฟิล์มไลน์สแกนเนอร์ แอลเอส 18 (line scanner LS-18)
- ระบบไมโครคอมพิวเตอร์ (microcomputer system)

ดังแสดงโดยภาพรูปเหลี่ยม (block diagram) รูปที่ 3.17



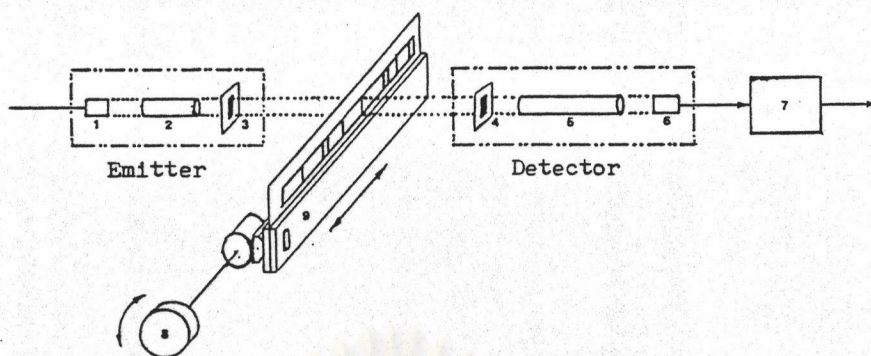
รูปที่ 3.17 แสดงชุดภาพรูปเหลี่ยมของระบบฟิล์มสแกนเนอร์

เครื่องวัดฟิล์มไลน์สแกนเนอร์ แอลเอส 18 (17) เป็นไมโครเคสลิโตมิเตอร์ (microdensitometer) วัดความเข้มแสงที่ผ่านทะลุฟิล์มที่ละช่องแถบติดต่อกัน ซึ่งถูกควบคุมการทำงานและบันทึกข้อมูลบนจานแม่เหล็กโดยโปรแกรมที่ใช้กับเครื่องไมโครคอมพิวเตอร์ ลินซ์แกนเนอร์มีรูปร่างลักษณะภายนอกดังแสดงในรูปที่ 3.18



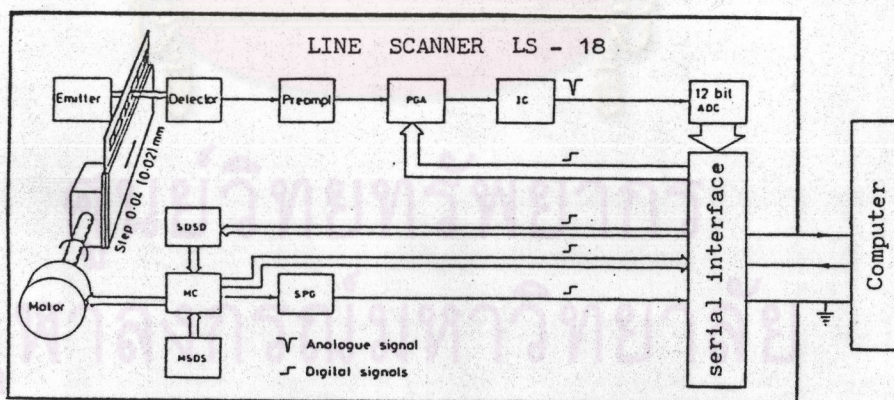
รูปที่ 3.18 แสดงลักษณะภายนอกของเครื่องวัดฟิล์มไลน์สแกนเนอร์ แอลเอส 18

ส่วนประกอบภายในที่สำคัญขยายให้เห็นเฉพาะส่วนวัดความเข้มแสง ดังแสดงในรูปที่ 3.19 ก. ใช้ไดโอดที่ให้รังสีใต้แดง ① เป็นแหล่งกำเนิดลำแสงใต้แดง (infrared beam หรือ IR-beam) ลำแสงใต้แดงจะผ่านเข้าตัวทำขนาน ② และผ่านออกทางช่องแคบขนาด 0.04×2 มม. ③ ลำแสงที่ผ่านช่องแคบออกมานี้ จะตกลงบนช่องแคบ ④ ของตัวตรวจวัด (detector) ผ่านเข้าตัวทำขนาน ⑤ แล้วตกลงบนโฟโตไดโอด ⑥ ซึ่งจะเปลี่ยนความเข้มของแสงที่รอดผ่านมาตกกระทบให้กลายเป็นกระแสไฟฟ้า แล้วถูกเปลี่ยนให้เป็นสัญญาณโวลเตจแอนาลอก สัญญาณโวลเตจนี้จะถูกขยายด้วยเครื่องขยายขั้นต้น (preamplifier) ดังรูปที่ 3.19 ข. ไปยังเครื่องขยายที่ตั้งอัตราขยายโดยโปรแกรม (programmable gain amplifier: PGA) และผ่านตัวเปลี่ยนอิมพีแดนซ์ (impedance converter: IC) ไปยังเครื่องเปลี่ยนสัญญาณแอนาลอกเป็นดิจิทัล (A/D converter : ADC) และผ่านไปยังระบบไมโครคอมพิวเตอร์



ก.

- ① คือ ไดโอดที่ให้รังสีอินฟราเรด (IR emitting diode)
- ② คือ ตัวทำขนาน (collimator) ขนาดความยาว 5 มม.
- ③ และ ④ คือ ช่องแคบ (slit) ซึ่งมีขนาดกว้าง 0.04 มม. x สูง 2 มม.
- ⑤ คือ ตัวทำขนาน ขนาดความยาว 17 มม.
- ⑥ คือ โฟโตไดโอด (photodiode)
- ⑦ คือ เครื่องขยายขั้นต้น (preamplifier)
- ⑧ คือ มอเตอร์ที่ใช้หมุนเลื่อนฟิล์ม
- ⑨ คือ ที่จับแผ่นฟิล์ม

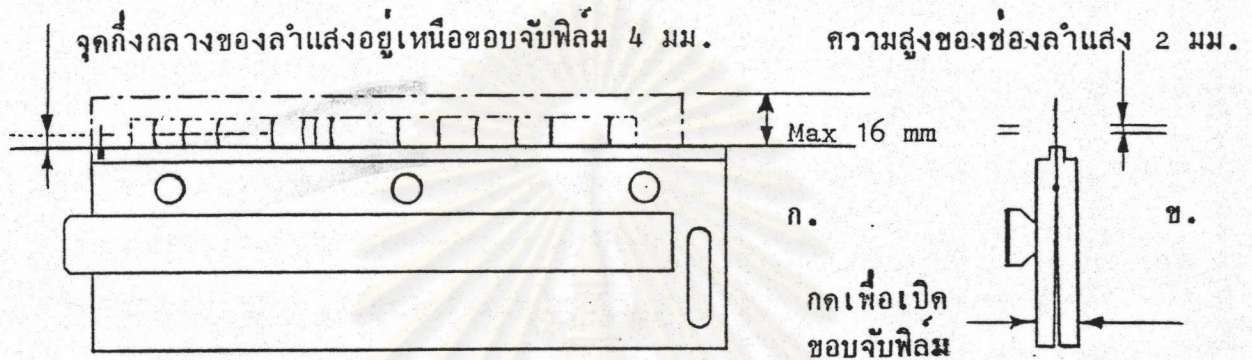


- SPG = Synchronisation Pulse Generator
- SDSD = Scan Direction Selector Driver
- MC = Motor Control Unit
- MSDS = Manual Scan Direction Selector

ข.

รูปที่ 3.19 (ก)แสดงเฉพาะส่วนวัดความเข้มแสง (ข)แสดงส่วนประกอบที่สำคัญภายในของเครื่องวัดฟิล์มไลน์สแกนเนอร์ แอลเอส 18

ส่วนการจัดแผ่นฟิล์มใส่ในที่จับฟิล์ม ทำโดยจัดให้เส้นปฐมภูมิของฟิล์มตรงกับตำแหน่งร่องนำของที่จับฟิล์มและจุดกึ่งกลางลำแสงที่เป็นช่องแคบสูง 2 มม. อยู่ตรงกึ่งกลางของเส้นเลี้ยวเบนบนฟิล์ม นั่นคือจัดโดยสังเกตจากแนวของกึ่งกลางเส้นเลี้ยวเบนจะอยู่สูงจากขอบของที่จับฟิล์ม 4 มม. ดังรูปที่ 3.20



รูปที่ 3.20 ก. แสดงที่จับฟิล์มและการวางระยะของฟิล์มเมื่อดูตามยาว
ข. แสดงที่จับฟิล์มเมื่อดูทางด้านข้าง

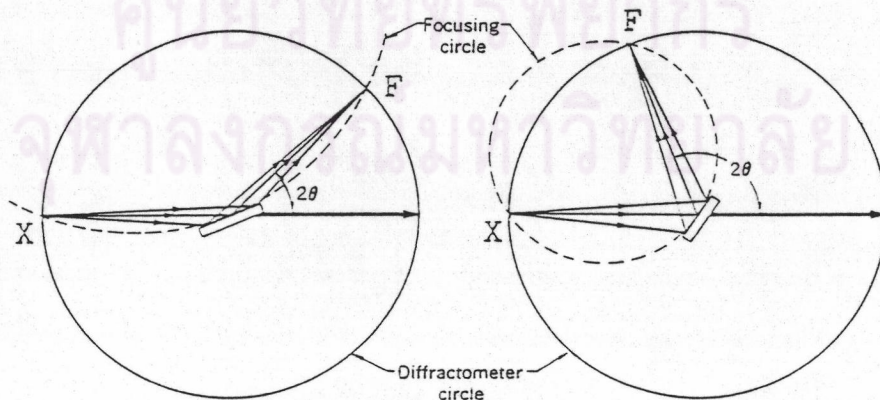
วิธีการสแกนฟิล์มทำ 2 ขั้นตอน ขั้นแรกเป็นการสแกนเลื่อนฟิล์มเข้าข้างใน เป็นขั้นเตรียมสแกนเพื่อหาอัตราการขยายโดยโปรแกรม (PGA) ให้เหมาะสม ขึ้นกับความค่าของฟิล์มที่นำมาวัดแล้วตั้งอัตราการขยายที่พอเหมาะนั้นไว้ ขั้นที่สองเป็นการสแกนออกนอกมายังจุดตั้งต้น พร้อมทั้งเก็บข้อมูลความเข้มแสงที่ทะลุผ่านฟิล์มซึ่งเรียกว่า "ข้อมูลทรานสมิชชัน" (transmission data) ที่ละช่องแคบอย่างต่อเนื่องเข้าไปเก็บไว้ในจานแม่เหล็ก เมื่อฟิล์มกลับมาอยู่ที่ตำแหน่งตั้งต้นแล้วก็แสดงว่า การเก็บข้อมูลความเข้มแสงที่ทะลุผ่านฟิล์มเสร็จเรียบร้อยจบการใช้ไลนส์สแกนเนอร์ ขั้นต่อไปเป็นการคำนวณโดยโปรแกรมเพื่อย่อยข้อมูลทรานสมิชชัน โปรแกรมจะทำการคำนวณหาระดับภูมิหลัง (background) และระดับสัญญาณรบกวน (noise level) แล้วกำหนดตำแหน่งของพีค (peak) และตรวจหาเส้นเลี้ยวเบนของซิลิกอน ซึ่งเป็นเส้นอ้างอิงใช้แก้ความคลาดเคลื่อนของมุมการเลี้ยวเบนโดยการอินเทอโพลเลทจากเส้นอ้างอิงนี้ เพื่อคำนวณมุมการเลี้ยวเบนและความเข้มอินทิเกรต (integrated intensity) ข้อมูลทรานสมิชชัน ค่าภูมิหลังและค่าความเข้มสามารถจะตรวจบนจอภาพได้ เมื่อทำการตรวจสอบและให้โปรแกรมทำการคำนวณผลลัพธ์ที่ถูกต้องของ

ข้อมูลการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ เช่น ระยะทางจากเส้นปฐมภูมิถึงเส้นเลี้ยวเบนต่าง ๆ มุมการเลี้ยวเบน (θ) ค่าความเข้ม (I)_{obs} ค่า d_{obs} ค่า $Q = \frac{1}{d_{obs}^2}$ และ ถ้านำหนักตัวคูณ (weight) จะถูกแสดงผลออกมาทางจอภาพและเครื่องพิมพ์ รายละเอียดเกี่ยวกับการประมวลผลของระบบฟิล์มสแกนเนอร์อยู่ในภาคผนวก ก.

3.3 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผงในเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์

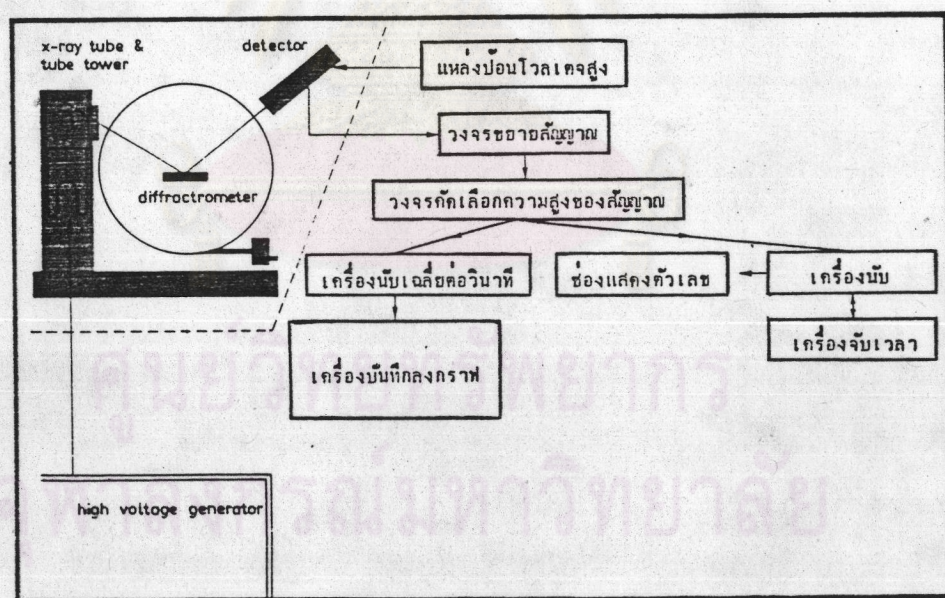
3.3.1 ลักษณะและหลักการทำงานของเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์

เครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์ถูกออกแบบและสร้างขึ้นโดยอาศัยหลักการ ทำงานที่ว่า ให้ผลึกผงสารตัวอย่างวางอยู่ที่จุดศูนย์กลางของวงกลมดิฟแฟรกโตมิเตอร์ (diffractometer circle) รังสีเอ็กซ์จากจุดกำเนิด (point source) X ซึ่งมีแนวลู่ออก (diverge) ตกกระทบผลึกผงสารตัวอย่าง โดยทำมุมตกกระทบกับ ระนาบของผลึกผงสารตัวอย่างเป็นมุม θ ทำให้รังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนไปในแนวทำมุม 2θ กับแนวของรังสีตกกระทบและไปรวมกันที่จุด ๆ หนึ่งซึ่งเรียกว่า "จุดโฟกัส" (focus) F โดยที่ X และ F อยู่บนเส้นรอบวงของวงกลมดิฟแฟรกโตมิเตอร์ ทั้งนี้จุดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ ผลึกผงสารตัวอย่างและจุดโฟกัสจะต้องอยู่บนเส้นรอบวงของ วงกลมโฟกัส (focusing circle) ด้วย (4) ดังรูปที่ 3.21



รูปที่ 3.21 แสดงหลักการทำงานของเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์

มีข้อที่น่าสนใจก็คือ ในขณะที่ผลึกผงสารตัวอย่างซึ่งอยู่ที่จุดศูนย์กลางของวงกลมคิฟเฟรคโตมิเตอร์หมุนไป เพื่อให้มุมตกกระทบ θ เปลี่ยนไปนั้น แนวของรังสีเอ็กซ์เดี่ยวเบนที่ไปรวมที่จุดโฟกัสก็จะเปลี่ยนตำแหน่งไปด้วย เนื่องจากสารตัวอย่างเป็นแผ่นราบดังนั้นจะทำให้จุดโฟกัสเคลื่อนเล็กน้อย แต่ทั้งนี้ก็ยังถือว่าอยู่บนเส้นรอบวงของวงกลมโฟกัสและจุดโฟกัสก็จะอยู่บนเส้นรอบวงของวงกลมคิฟเฟรคโตมิเตอร์ โดยมีระยะห่างระหว่างจุดโฟกัสกับผลึกผงสารตัวอย่างที่จุดศูนย์กลาง เป็นระยะคงที่เท่ากับรัศมีของวงกลมคิฟเฟรคโตมิเตอร์เสมอ ส่วนความเข้มของรังสีเอ็กซ์เดี่ยวเบนที่จุดนี้จะทำการวัดโดยตัวตรวจวัด (detector) ซึ่งทำหน้าที่เปลี่ยนโฟตอนของรังสีเอ็กซ์เป็นสัญญาณโวลเตจผ่านวงจรขยายสัญญาณ วงจรคัดเลือกความสูงของสัญญาณแล้วเข้าเครื่องนับ (scaler) และเครื่องจับเวลา (timer) แล้วแสดงเป็นตัวเลขให้เห็น ดังชุดภาพรูปเหลี่ยมที่แสดงในรูปที่ 3.22

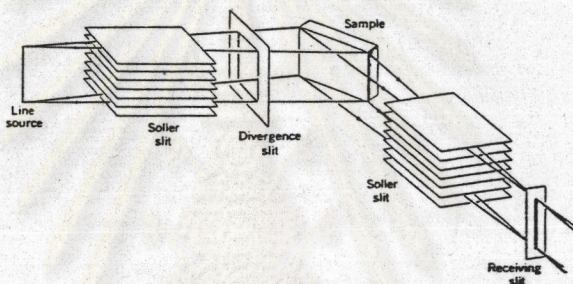


รูปที่ 3.22 แสดงชุดภาพรูปเหลี่ยมการทำงานของเครื่องคิฟเฟรคโตมิเตอร์

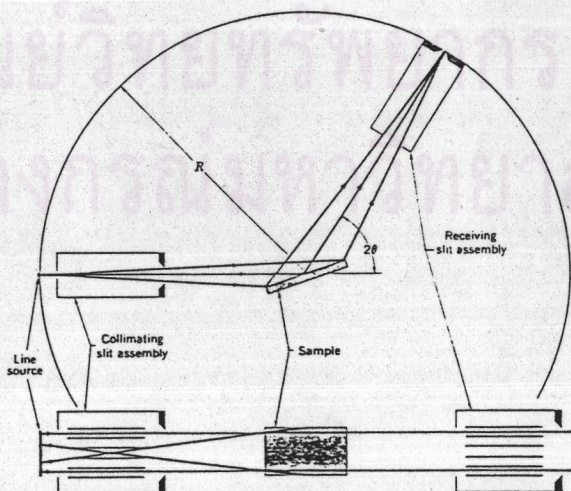
นอกจากนี้สัญญาณที่ออกจากวงจรคัดเลือกความสูงของสัญญาณ อาจจะเลือกให้ผ่านเข้าเครื่องนับเฉลี่ยต่อวินาที (rate meter) แล้วไปยังเครื่องบันทึกผลกราฟ (recorder) ก็ได้ ดังนั้นหลักการทำงานของเครื่องคิฟเฟรคโตมิเตอร์จะทำงานในลักษณะที่

- 1 ตำแหน่งของตัวตรวจวัดจะอยู่ที่จุดโฟกัส
- 2 ในขณะที่แผ่นผลึกผงสารตัวอย่างซึ่งอยู่ที่จุดศูนย์กลางของวงกลมดิฟแฟรคโตมิเตอร์หมุนไปจากเดิมเป็นมุม θ ตัวตรวจวัดจะต้องหมุนไปจากตำแหน่งเดิมตามแนวเส้นรอบวงของวงกลมดิฟแฟรคโตมิเตอร์เป็นมุม 2θ อย่างสัมพันธ์กันพอดี

เครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์ที่สร้างขึ้นใช้งานอาศัยหลักการดังที่ได้กล่าวมาแล้ว แต่จะมีอุปกรณ์ต่าง ๆ เพิ่มขึ้น เพื่อความละเอียดและความถูกต้องในการวัดดังแสดงในรูปที่ 3.23 และ 3.24 ตามลำดับ



รูปที่ 3.23 แสดงรายละเอียดของอุปกรณ์ที่สำคัญในเครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์



รูปที่ 3.24 แสดงรายละเอียดของอุปกรณ์ที่สำคัญในเครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์

ซึ่งจากรูปทั้งสองจะประกอบด้วยแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ที่เป็นเส้น (line source) ให้รังสีที่เป็นแนวลู่ออก ผ่านช่องโซลเลอร์ (soller slit) และช่องลู่ออก (divergence slit) แล้วไปตกกระทบบนแผ่นผลึกผงสารตัวอย่าง รังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนจะผ่านช่องโซลเลอร์อีกชุดหนึ่ง โดยมีแนวรังสีลู่ออก (converge) แล้วผ่านเข้าช่องรับ (receiving slit) เข้าไปยังตัวตรวจวัด ช่องลู่ออกทำหน้าที่ป้องกันมิให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบบนส่วนอื่น ๆ ของเครื่องนอกจากสารตัวอย่างเท่านั้น ทั้งช่องโซลเลอร์และช่องลู่ออกปกติจะทำงานรวมอยู่ในชุดเดียวกันรวมเรียกว่า "ชุดช่องทำขนาน" (collimating slit assembly) ส่วนช่องโซลเลอร์และช่องรับก็จะทำงานรวมอยู่ในชุดเดียวกันเรียกว่า "ชุดช่องตัวรับ" (receiving slit assembly) สำหรับการทดลองนี้ข้อมูลที่เครื่องดิฟแฟร็กโตมิเตอร์วัดได้ จะถูกบันทึกออกมาโดยเขียนเป็นกราฟระหว่างค่าของมุม 2θ กับค่าจำนวนสัญญาณที่เครื่องนับเคลื่อนนับได้ในเวลา 1 วินาที ณ. ที่มุม 2θ นั้น ๆ ตัวตรวจวัดจะมีขีดความสามารถในการบันทึกข้อมูลโดยอุดมคติ จากค่ามุมของแบรกก์ (2θ) ในช่วงมุม 0° จนถึง 180°

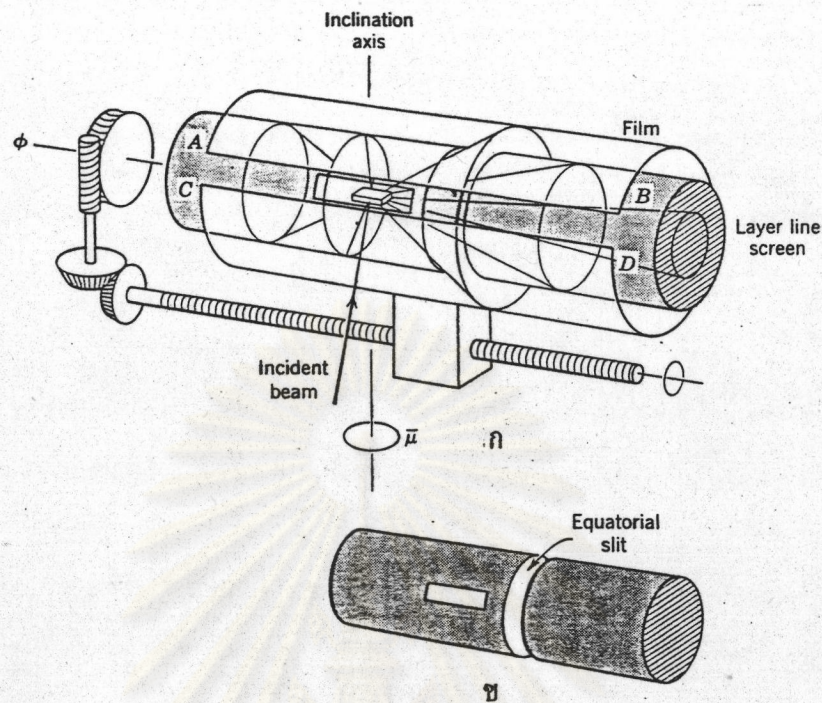
3.3.2 การหาค่าคงที่แลตทิซจากข้อมูลรูปกราฟที่ได้จากเครื่องดิฟแฟร็กโตมิเตอร์

จากข้อมูลรูปกราฟที่ได้จากเครื่องดิฟแฟร็กโตมิเตอร์คือ มุม 2θ ของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ ทำให้สามารถหาค่าของ $\sin^2\theta$ ของแต่ละระนาบ (hkl) ที่ทำให้เกิดการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ออกมาได้ ซึ่งจะถูกนำไปคำนวณหาค่าคงที่แลตทิซและปรับค่าคงที่แลตทิซโดยวิธีกำลังสองน้อยที่สุด เช่นเดียวกับที่ใช้กับกล้องกีเนียร์ - เฮก

3.4 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกเดี่ยวในกล้องไวซ์เซนเบอร์ก

3.4.1 ลักษณะและหลักการทำงานของกล้องไวซ์เซนเบอร์ก

กล้องไวซ์เซนเบอร์ก (Weissenberg camera) มีส่วนประกอบและหลักการทำงานที่สำคัญ ๆ ดังนี้ (18) ตัวกล้องประกอบด้วยที่บรรจุฟิล์มซึ่งมีลักษณะเป็นรูปทรงกระบอก โดยมีแผ่นฟิล์ม ABCD บรรจุอยู่ดังรูปที่ 3.25 เฝืองขับที่ติดอยู่



รูปที่ 3.25 ก. แสดงส่วนประกอบต่าง ๆ ของตัวกล้องไวซ์เซนเบอร์ก
 ข. แสดงตัวกันเส้นเลย์เออร์

กับก้านมอเตอร์ใช้ขับให้ฐานที่ติดผลึกหมุน เพื่อให้ผลึกหมุนรอบแกนหมุนของผลึก โดยที่แกนหมุนของผลึกจะอยู่ในแนวเดียวกับแนวแกนรูปทรงกระบอกที่บรรจุฟิล์ม นอกจากนี้เฟืองขับยังไปขับสกรูที่ติดอยู่ทางคานล่างของที่บรรจุฟิล์ม ทำให้ที่บรรจุฟิล์ม สามารถเคลื่อนที่ไปทางคานซ้ายหรือขวาตามแนวแกน ในลักษณะที่สัมพันธ์กับการหมุนของผลึก ตัวเฟืองขับนี้จะมีกลไกที่สามารถทำให้เฟืองขับไปขับหมุนฐานที่ติดผลึกให้หมุนลำพังเพียงอย่างเดียว หรือหมุนขับฐานที่ติดผลึกและที่บรรจุฟิล์มให้มีการหมุนสอดคล้องกันกับการเคลื่อนที่ของฟิล์มพร้อมกันทั้งสองอย่างก็ได้ ทั้งนี้ขึ้นอยู่กับว่าเราต้องการถ่ายภาพในลักษณะอย่างไร

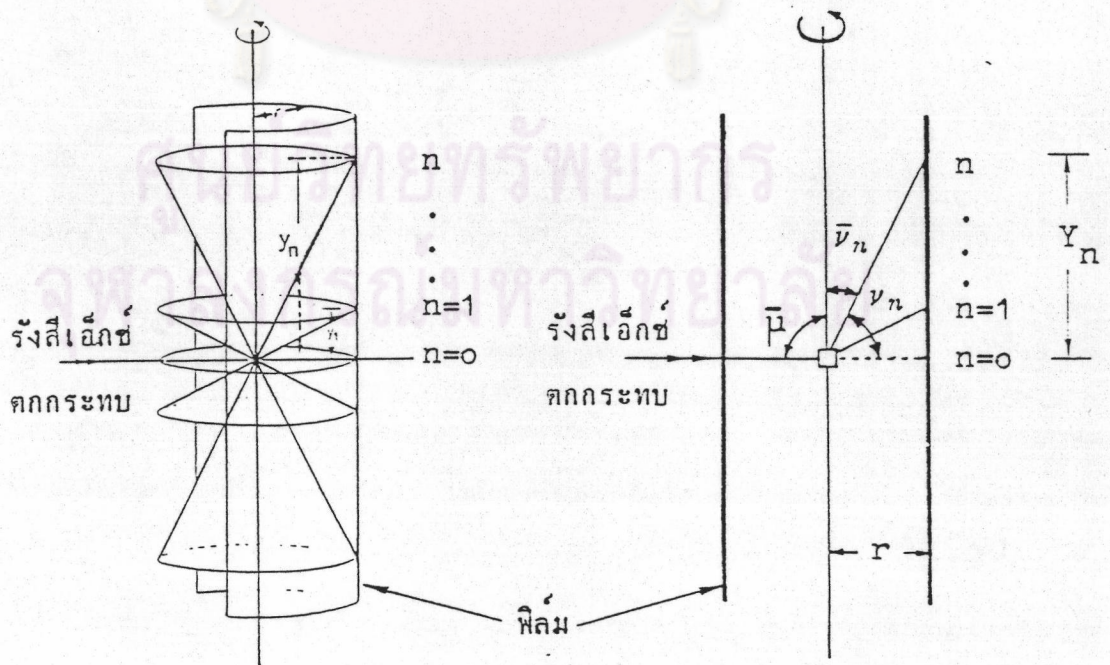
เมื่อลำรังสีเอ็กซ์ตกกระทบผลึกจะทำให้เกิดกรวยการเลี้ยวเบนขึ้นตามเงื่อนไขของลาวเอ รังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนจะไปตกกระทบบนฟิล์ม ทำให้เกิดเป็นจุดแสดงร่องรอยการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกเอาไว้ ในบางกรณีเราต้องการถ่ายภาพร่องรอย

การเลี้ยวเบนที่เกิดจากการฉายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์เพียงชั้นใดชั้นหนึ่งเท่านั้น ซึ่งทำได้โดยใช้ตัวกั้นเส้นเลเยอร์ (layer line screen) ซึ่งมีลักษณะเป็นรูปทรงกระบอก สอดคั่นอยู่ระหว่างแผ่นฟิล์มกับผลึก โดยมีช่องว่างเว้นไว้ สำหรับให้การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่ต้องการถ่ายภาพ รอคอยออกไปตกกระทบบนฟิล์มได้เพียงการเลี้ยวเบนเท่านั้น โดยทั่วไปภาพที่ถ่ายด้วยกล้องไวซ์เซนเบอร์เกอร์จะให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบผลึกในแนวตั้งฉากกับแกนหมุนของผลึก แต่บางกรณีก็มีความต้องการถ่ายภาพในลักษณะที่ต้องการให้รังสีเอ็กซ์ตกกระทบทำมุมใด ๆ กับแกนหมุนของผลึก ซึ่งสามารถทำได้โดยหมุนตัวกล้องทั้งชุดที่ตั้งอยู่บนฐานหมุน ที่มีสเกลสำหรับบอกค่ามุมที่หมุนเอียงกล้องไป ($\bar{\mu}$) รอบแกน ๆ หนึ่งซึ่งเรียกว่า "แกนหมุนเอียง" (inclination axis) ดังแสดงในรูปที่ 3.25 ข้างต้น

3.4.2 การถ่ายภาพแบบโรเทชันและการคำนวณหาค่าคงที่แลตทิซ

การถ่ายภาพแบบโรเทชัน ใช้รังสีเอ็กซ์ที่มีความยาวคลื่นค่าเดียว (monochromatic wavelength) โดยให้ลำรังสีเอ็กซ์ตกกระทบตั้งฉากกับแกนหมุนของผลึกเดี่ยว ซึ่งอาจเป็นแกนใดแกนหนึ่งของผลึกก็ได้ในที่นี้สมมติให้เป็นแกน c

(11) ดังรูปที่ 3.26



รูปที่ 3.26 แสดงการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ในการถ่ายภาพแบบโรเทชัน

ในขณะที่ฉายรังสีเอ็กซ์ไปยังผลึกที่กำลังหมุน จะทำให้เกิดรังสีเอ็กซ์เลี้ยวเบนในทิศทางที่สอดคล้องกับเงื่อนไขของลาวเอและทำให้เกิดจุดบนฟิล์ม เมื่อคิดเฉพาะทางแกน t จะได้ว่า

$$t \cdot \cos \bar{\nu}_n - t \cdot \cos \bar{\mu} = n\lambda \quad (3.21)$$

เนื่องจากรังสีเอ็กซ์ตกกระทบบนผิวของผลึกคือแกน t ดังนั้น $\cos \bar{\mu} = 0$ จากสมการ (3.21) จะได้ว่า

$$\cos \bar{\nu}_n = \frac{n \cdot \lambda}{t}$$

$$\text{แต่ } \nu_n = (90^\circ - \bar{\nu}_n)$$

$$\text{ดังนั้น } \sin \nu_n = \frac{n \cdot \lambda}{t} \quad (3.22)$$

$$\text{และเพราะว่า } \tan \nu_n = \frac{Y_n}{r} \quad (3.23)$$

เมื่อ r คือรัศมีของฟิล์มโดยขึ้นกับชนิดของกล้อง สำหรับกล้องไวซ์เซนเบอร์กแบบเอนราฟโนเนียส (Enraf - Nonius Weissenberg camera) ที่ใช้ในการวิจัยนี้มีค่า $r = 28.65$ มม.

n เป็นตัวเลขบอกอันดับของเส้นเลเยอร์

Y_n เป็นระยะระหว่างเส้นเลเยอร์ที่ศูนย์กับเส้นเลเยอร์ที่ n

ดังนั้นจากสมการ (3.22) และ (3.23) จะได้ว่า

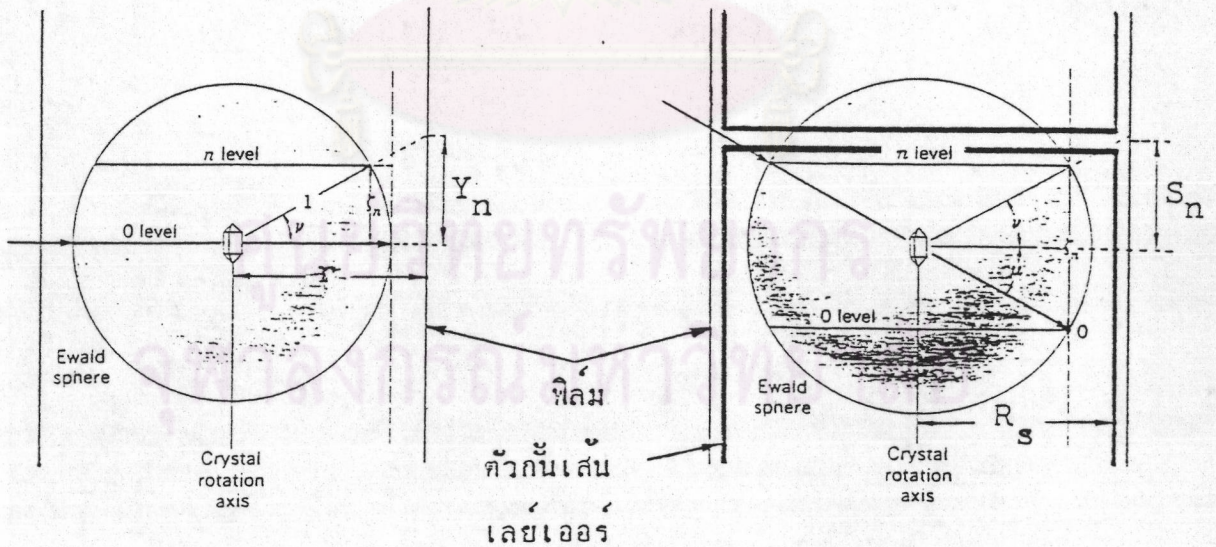
$$t = \frac{n\lambda}{\sin \left[\tan^{-1} (Y_n/r) \right]} \quad (3.24)$$

จากสมการ (3.24) พบว่าการถ่ายภาพแบบโรเตชัน ทำให้ทราบค่าคงที่แลตทิซในแนวแกนหมุนของผลึก ในทางปฏิบัติเพื่อเป็นการประหยัดเวลาในการถ่ายภาพผลึก เราสามารถทำให้ผลึกหมุนกลับไป - กลับมา รอบแกนหมุนของผลึก ซึ่งภาพถ่ายที่ได้เรียกว่าภาพถ่ายแบบออสซิลเลชัน (oscillation photography) โดยสูตรที่ใช้ในการคำนวณยังคงเหมือนเดิมทุกประการ

3.4.3 การถ่ายภาพแบบไวซ์เซนเบอร์กและการคำนวณค่าคงที่แลตทิซ

หลังจากถ่ายภาพแบบออสซิลเลชันแล้ว จึงทำการถ่ายภาพแบบไวซ์เซนเบอร์ก โดยให้มีการเคลื่อนที่ของฟิล์มสอดคล้องกับการหมุนของผลึก คือ ในขณะที่ฟิล์มมีการเคลื่อนที่ไป 1 มิลลิเมตรผลึกจะหมุนไปเป็นมุม 2 องศา ในขณะที่ฟิล์มมีการเคลื่อนที่ไป 1 มิลลิเมตรผลึกจะหมุนไปเป็นมุม 2 องศา ในขณะที่ฟิล์มมีการเคลื่อนที่ไป 1 มิลลิเมตรผลึกจะหมุนไปเป็นมุม 2 องศา ในขณะที่ฟิล์มมีการเคลื่อนที่ไป 1 มิลลิเมตรผลึกจะหมุนไปเป็นมุม 2 องศา

ฟิล์มจะเคลื่อนที่เข้าหาผู้มอง การถ่ายภาพแบบไวซ์เซนเบอร์กจะถ่ายได้ครั้งละ 1 เลย์เออร์เท่านั้น จึงจำเป็นต้องกำจัดเลย์เออร์อื่น ๆ ออกไปโดยใช้ตัวกั้นเส้นเลย์เออร์ เมื่อต้องการถ่ายภาพที่เลย์เออร์สูง ๆ ขึ้นไป เช่น เลย์เออร์ที่ 1, 2, ... n จะต้องใช้วิธีมุมเอียงเท่ากัน (equi-inclination method) โดยต้องทำการหมุนเอียงกล้องเพื่อให้จุดแลตทิซส่วนกลับ ที่อยู่บนแกนหมุนของเลย์เออร์ที่ต้องการถ่ายให้อยู่บนผิวหรือสัมผัสผิวทรงกลมการสะท้อน มุมที่ต้องหมุนเอียงกล้องไปและระยะที่ต้องเลื่อนตัวกั้นเส้นเลย์เออร์ไปจากเดิมเพื่อถ่ายภาพเลย์เออร์ที่ n (4) คำนวณได้จากความสัมพันธ์ตามรูปที่ 3.27



รูปที่ 3.27 แสดงค่ามุม μ ที่ต้องเอียงกล้องและระยะที่ต้องเลื่อนตัวกั้นเส้นเลย์เออร์ในการถ่ายภาพไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ n

จากรูป 3.27(ก) $\therefore \tan \nu = \frac{Y_n}{r}$
 และ $\sin \nu = \frac{\zeta_n}{1}$
 $\therefore \zeta_n = \sin \left[\tan^{-1} \frac{Y_n}{r} \right]$ (3.25)

และจากรูป 3.27(ข) จะเห็นว่ามุม $\mu = \nu$ ดังนั้นจึงทำให้ได้ว่า

$$\sin \mu_n = \frac{\zeta_n}{2}$$

จากสมการ (3.25) จะได้ว่า $\mu_n = \sin^{-1} \left[\frac{\sin(\tan^{-1} \frac{Y_n}{r})}{2} \right]$ (3.26)

และ $S_n = R_s \cdot \tan \mu_n$ (3.27)

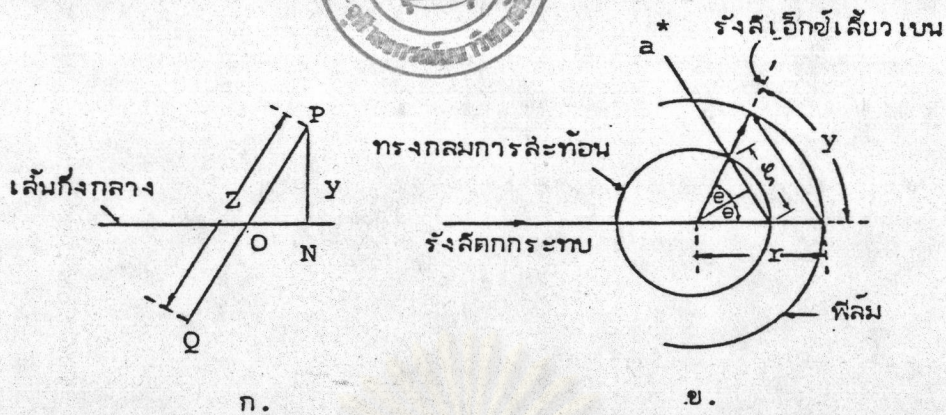
โดยที่ μ_n คือมุมที่ต้องเอียงกล้อง เพื่อถ่ายภาพเลย์เออร์ที่ n
 Y_n คือระยะทางบนฟิล์มจากเลย์เออร์ที่ 0 ไปยังเลย์เออร์ที่ n
 r คือรัศมีของกล้อง มีค่า 28.65 มิลลิเมตร
 S_n คือระยะที่ต้องเลื่อนตัวกั้นเส้นเลย์เออร์ไปเพื่อถ่ายภาพเลย์เออร์ที่ n
 R_s คือรัศมีของตัวกั้นเส้นเลย์เออร์ มีค่า 25.5 มิลลิเมตร
 n คือระยะระหว่างเส้นเลย์เออร์ที่ 0 ถึงเลย์เออร์ที่ n ในหน่วย r.l.u.

ในการคำนวณค่าคงที่แลตทิส จะคำนวณจากภาพถ่ายไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ 0 สมมติว่าถ้าให้แกน b เป็นแกนหมุนของผลึก ภาพที่ออกมาจะเป็นจุดแลตทิสส่วนกลับที่อยู่ในระนาบที่ผ่านแกน a และ c ส่วนมุม β ซึ่งเป็นมุมระหว่างแกน a และ c หาได้จากการวัดระยะทางบนฟิล์มตามแนวกึ่งกลางฟิล์มระหว่างแกน a และ c เพราะระยะทาง 1 มิลลิเมตรบนฟิล์มมีค่าเท่ากับ 2 องศา สำหรับค่าคงที่แลตทิสตามแนวแกน a และ c สามารถคำนวณได้โดยใช้ความสัมพันธ์ตามรูปที่ 3.28 (19)

ระยะ $ON = x$ มม., $PN = y$ มม. และ $PO = \frac{z}{2}$ มม. โดยการออกแบบกล้องให้ฟิล์มเคลื่อนที่ไปได้ 1 มม. ในขณะที่ผลึกหมุนไปได้ 2 องศา ดังนั้นจะได้ว่า

$$y = 2x$$

และจาก \triangle มุมฉาก PON จะได้ $\frac{z}{2} = \sqrt{5} x = \sqrt{5} y$



รูปที่ 3.28 ก. จุดสะท้อน P และ Q ห่างจากเส้นกึ่งกลางเท่ากัน
 ข. การเกิดจุดสะท้อนบนฟิล์ม

$$\therefore y = \frac{Z}{\sqrt{5}} \tag{3.28}$$

และจากรูปที่ 3.28(ข) $2\theta = y/r$ เรเดียน (3.29)

$$= \frac{y \cdot 180}{r \cdot \pi} \text{ องศา}$$

แต่สำหรับกล้องไอซ์เซนเบอร์ก ค่า $r = 28.65$ มม. หรือเท่ากับ $90/\pi$ มม.
 เมื่อแทนลงในสมการ (3.29) จะได้ว่า

$$\theta = y \text{ องศา}$$

$$\text{แต่ } \sin \theta = (\zeta/2)/(1/\lambda)$$

$$\text{และ } \zeta = ha^*$$

$$\text{ดังนั้น } a^* = \frac{2 \sin y}{h \lambda} \tag{3.30}$$

จากสมการ (3.28) และความสัมพันธ์ $a = \frac{1}{a^*}$ เมื่อแทนลงในสมการ (3.30)

$$\text{จะได้ว่า } a = \frac{h \lambda}{2 \sin(Z/\sqrt{5})} \tag{3.31}$$

โดยที่ h คือค่าดัชนีมิลเลอร์สำหรับแกนผลึกที่ต้องการหาค่าคงที่แลตทิซ
 Z คือระยะระหว่างจุดบนแกนผลึกที่จุดสะท้อน $h00$ ถึง $\bar{h}00$