

บทที่ 2

ทฤษฎี

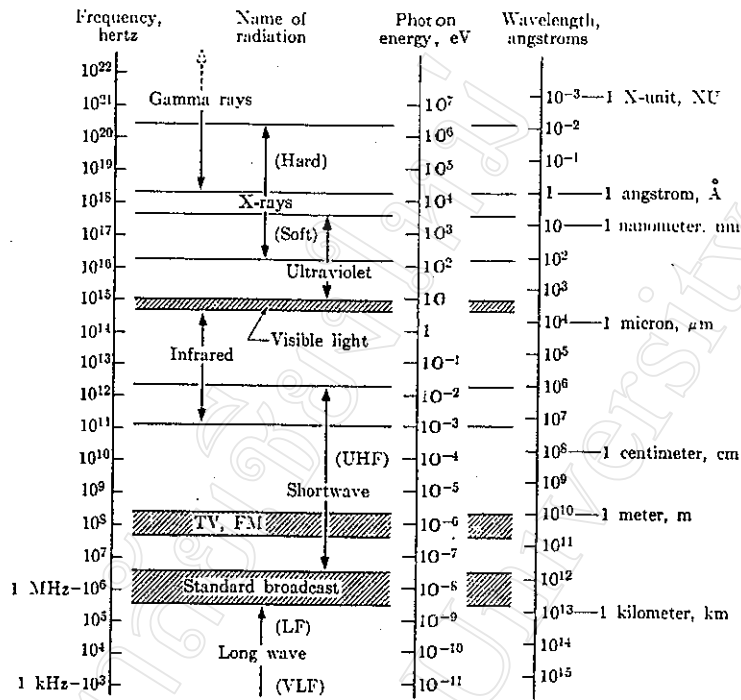
2.1 คำนำ

รังสีเอกซ์ถูกค้นพบในปี ค.ศ.1895 โดย Roentgen นักฟิสิกส์ชาวเยอรมัน เหตุที่ให้ชื่อว่า รังสีเอกซ์ เนื่องจากในขณะนั้นยังไม่มีผู้ใดทราบถึงธรรมชาติของรังสีชนิดนี้กันมากนัก ทราบแต่เพียงว่ารังสีชนิดนี้ไม่สามารถมองเห็นด้วยตาเปล่าได้ แต่เดินทางเป็นเส้นตรง และสามารถทำปฏิกิริยากับฟิล์มได้ เหมือนแสดงธรรมดา อีกทั้งรังสีนี้ยังมีอำนาจในการทะลุทะลวงสูงกว่าแสงธรรมดามาก

รังสีเอกซ์ถูกนำมาใช้อย่างแพร่หลายไม่ว่าจะเป็นทางการแพทย์หรือทางวิศวกรรม ซึ่งโดยส่วนใหญ่จะศึกษาถึงโครงสร้างภายในของวัตถุ โดยเรียกสาขาวิชานี้ว่า รังสีวิทยา (Radiography) โดยสาขาวิชานี้จะใช้รังสีเอกซ์เพื่อทำการตรวจสอบสภาพของวัตถุ อาทิเช่น ตรวจกระดูกว่ามีรอยร้าวหรือไม่ ในขณะนั้นสมบัติของรังสีเอกซ์ยังไม่เป็นที่ประจักษ์กันมากนัก จนกระทั่งปี ค.ศ.1912 สมบัติต่างๆของรังสีเอกซ์ จึงเป็นที่รู้จักกันดี และในปีนี้เองที่นักวิทยาศาสตร์ได้ศึกษาผลของการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ที่มีต่อผลึกเรียกว่า ผลึกวิทยา (Crystallography) ซึ่งเป็นสาขาวิชาที่สามารถศึกษาถึงโครงสร้างภายในของผลึก แม้ว่าวิชารังสีวิทยาจะได้ผลดีอยู่แล้วแต่อำนาจการจำแนก มีค่าต่ำมากเพียง 10^{-1} เซนติเมตร แต่ทว่าการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์นั้นมีความสามารถในการจำแนกถึง 10^6 เซนติเมตร ซึ่งมีความเหมาะสมต่อการศึกษาโครงสร้างของผลึกในระดับของอะตอม

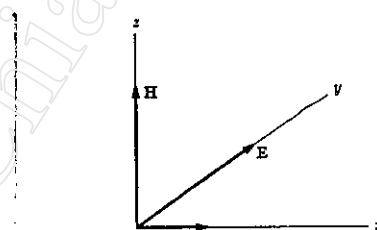
2.2 การแผ่รังสีของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า

เป็นที่ทราบดีว่า รังสีเอกซ์เป็นช่วงหนึ่งของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า และมีธรรมชาติเช่นเดียวกับแสงแต่มีความยาวคลื่นสั้นกว่ามาก อยู่ในระดับอังสตรอม(Å) ประมาณ 10^{-8} เซนติเมตร และรังสีเอกซ์ที่ใช้ในการเลี้ยวเบนเพื่อศึกษาโครงสร้างของผลึกนั้นมีความยาวคลื่นประมาณ 0.5-2.5 Å เทียบกับช่วงคลื่นของแสงซึ่งมีค่าประมาณ 6000 Å รังสีเอกซ์จึงอยู่ในช่วงของรังสีแกมมาและรังสีเหนือม่วง ดังแสดงในรูปที่ 2.1



รูปที่ 2.1 แสดงสเปกตรัมของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า

พิจารณารังสีช่วงคลื่นเดียว (Monochromatic) วิ่งไปในทิศทางแกน x ดังรูป 2.2 และสนามไฟฟ้า E อยู่ในแกน Y และสนามแม่เหล็ก H อยู่ในแกน Z ถ้าสนามไฟฟ้าอยู่ในระนาบ XY ดังแสดงในรูปที่ 2.2 เรียกว่า Plane-polarized



รูปที่ 2.2 แสดงสนามไฟฟ้าและสนามแม่เหล็กในขณะที่รังสีเอ็กซ์วิ่งไปในแกน X

ตามรูป 2.2 สนาม E มีการเปลี่ยนแปลงตลอดเวลา จากตำแหน่ง +Y ไปยัง -Y ที่จุด X=0 และที่จุด t = 0 E ก็เปลี่ยนแปลงในลักษณะเดียวกันนี้ ถ้าการเปลี่ยนแปลงของ E เป็นรูปของ sine อาจเขียนสมการเพื่ออธิบายได้ดังนี้

$$E = A \sin 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - vt \right) \quad (2.1)$$

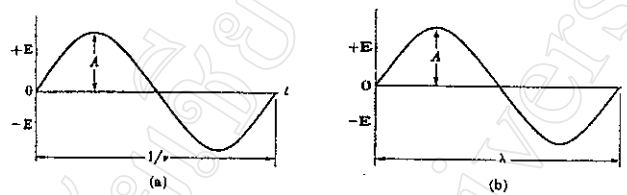
เมื่อ

A = ค่าแอมพลิจูด (amplitude)

λ = ความยาวคลื่น

v = ความถี่ของคลื่น

E อาจจะไม่เป็นรูป sine ก็ได้แต่จะมีลักษณะเป็นคาบเสมอและ $v = \frac{c}{\lambda}$ เมื่อ c คือความเร็วแสง



รูปที่ 2.3 แสดงการเปลี่ยนแปลงของ E เมื่อ (a) X คงที่ (b) t คงที่

รังสีเอ็กซ์มีพลังงานมาก อัตราการไหลของพลังงานผ่านหนึ่งหน่วยพื้นที่ (ตั้งฉากกับพื้นที่) จะเรียกว่าความเข้ม ค่าเฉลี่ยของความเข้มนี้จะแปรกับ (แอมพลิจูด)² หน่วยสมบูรณของความเข้มมีค่าเป็นเออร์ก/ซ.ม.²/วินาที ซึ่งทำการวัดโดยตรงได้ค่อนข้างลำบากดังนั้นจึงนิยมวัดในหน่วยสัมพัทธ์กล่าวคืออาศัยความดำของฟิล์มที่ใช้ในการวัด และใช้ระบบอิเล็กทรอนิกส์ซึ่งจะแปลงสัญญาณแสงที่ได้เป็นสัญญาณไฟฟ้าเพื่อทำการวิเคราะห์ความเข้มต่อไป

2.3 การเกิดรังสีเอ็กซ์

รังสีเอ็กซ์เกิดจากประจุที่เคลื่อนที่ด้วยความเร็วสูง เมื่อถูกหน่วงหรือทำให้หยุด ประจุจะเกิดการถ่ายเทพลังงานออกมา โดยเปลี่ยนจากพลังงานจลน์ที่ใช้ในการเคลื่อนที่ เป็นพลังงานคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า คือรังสีเอ็กซ์ ในทางปฏิบัติประจุที่เคลื่อนที่คือ อิเล็กตรอน และใช้สนามไฟฟ้าเป็นตัวเร่งอิเล็กตรอนให้มีความเร็วสูง ให้วิ่งไปกระทบกับอะตอมของธาตุ ซึ่งเรียกว่า เป้า(target) รังสีเอ็กซ์ที่เกิดขึ้นสามารถแบ่งออกได้เป็น 2 ชนิด คือ

1. รังสีเอ็กซ์ชนิดต่อเนื่อง (continuous spectrum)
2. รังสีเอ็กซ์ชนิดเฉพาะ (characteristic x-rays)

2.3.1 รังสีเอกซ์ชนิดต่อเนื่อง (Continuous spectrum)

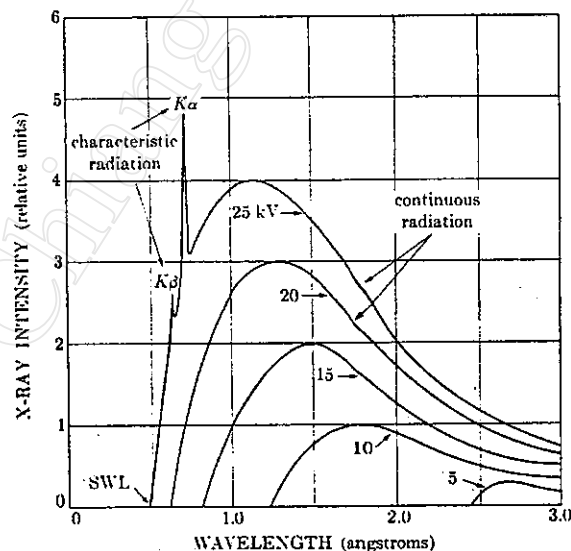
รังสีเอกซ์ชนิดต่อเนื่องจะเกิดขึ้นได้เมื่อประจุที่มีพลังงานสูงถูกทำให้หยุดโดยทันที ซึ่งมักจะใช้ประจุบเป็นส่วนใหญ่ ความต่างศักย์ที่ใช้มีค่าประมาณ 30-40 กิโลโวลต์ โดยจะมีแหล่งกำเนิดอิเล็กตรอนและแท่งโลหะเป็นอิเล็กโทรด (electrode) สองตัว ซึ่งมีศักดาไฟฟ้าต่างกันประมาณ 10 กิโลโวลต์ อิเล็กตรอนจะวิ่งเข้าหาขั้วบวกซึ่งเป็นเป้า อย่างรวดเร็วและชนเป้าด้วยความเร็วสูง รังสีเอกซ์จะออกมาทุกทิศทุกทาง ถ้า e เป็นประจุของอิเล็กตรอนหนึ่งตัวและ V เป็นความต่างศักดาระหว่าง อิเล็กโทรดทั้งสอง จะสามารถหาพลังงานอิเล็กตรอนได้ตามสมการ

$$K.E. = eV = \frac{1}{2}mv^2 \quad (2.2)$$

m = มวลของอิเล็กตรอน

v = ความเร็วของอิเล็กตรอนก่อนชน

ถ้าให้ความต่างศักดาไฟฟ้าต่อหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ประมาณ 30 กิโลโวลต์ ความเร็วของอิเล็กตรอนจะมีค่าประมาณ $1/3$ เท่าของความเร็วแสง พลังงานของอิเล็กตรอนส่วนใหญ่ที่ชนเป้าจะเปลี่ยนไปเป็นความร้อนมีเพียง 0.1% เท่านั้นที่เปลี่ยนเป็นรังสีเอกซ์เมื่อรังสีเอกซ์ที่เกิดขึ้นมาวิเคราะห์จะพบว่ามีความยาวคลื่นรวมกันอยู่และความเข้มของรังสีเอกซ์นี้จะมีมากหรือน้อยขึ้นอยู่กับความค่าความต่างศักดาไฟฟ้าที่ให้ต่อหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์



รูปที่ 2.4 แสดง X-rays spectrum ของโลหะโมลิบดีนัมที่ค่าความต่างศักย์ตั้งแต่ 5-25 กิโลโวลต์

ดังแสดงในรูปที่ 2.4 จะเห็นได้ว่า X-rays spectrum จะมีความยาวคลื่นที่แน่นอนตรงที่ความเข้มเป็นศูนย์เรียกว่า Short wavelength limit λ_{swl} ความเข้มจะเพิ่มขึ้นมากขึ้น เมื่อความยาวคลื่นยาวขึ้นจนถึงค่าสูงสุดแล้วจะเริ่มลดลงจนเข้าใกล้ศูนย์ เมื่อ $\lambda = \text{long wave length fade out}$ เมื่อปรับค่า voltage ของหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ให้สูงขึ้น ค่าความเข้มของทุกๆความยาวคลื่นจะเพิ่มขึ้นและ λ_{swl} จะเลื่อนสั้นเข้าไป บริเวณเส้นโค้งที่เรียบเรียกว่ารังสีเอ็กซ์ชนิดต่อเนื่อง ซึ่งมีหลายความยาวช่วงคลื่นรวมกัน

รังสีเอ็กซ์ชนิดต่อเนื่องเกิดจากการเกิดอัตราเร่งของอิเล็กตรอนที่วิ่งด้วยความเร็วสูงเมื่อชนเป้า อิเล็กตรอนแต่ละตัวที่วิ่งชนเป้าบางตัวก็จะเสียพลังงานในการชนครั้งเดียวหมด บางตัวก็จะชนกับอะตอมข้างเคียงหลายครั้ง จนกระทั่งพลังงานหมด กลุ่มอิเล็กตรอนที่ชนครั้งเดียวแล้วพลังงานหมดจะให้ โฟตอน (Photon) ที่มีพลังงานสูงสุดตามสมการ

$$eV = h\nu_{\max}$$

$$\lambda_{swl} = \frac{c}{\nu_{\max}} = \frac{hc}{eV} \quad (2.3)$$

$$\lambda_{swl} = \frac{12400}{V(\text{volt})} \text{ \AA}$$

ถ้าอิเล็กตรอนไม่หยุดในการชนครั้งเดียว แต่ยังคงกระทบกับอะตอมของเป้าต่อไป ความเร็วของอิเล็กตรอนจะลดลงตามลำดับ บางส่วนของพลังงาน (eV) จะกลายเป็นพลังงานของโฟตอน ซึ่งมีพลังงานน้อยกว่า $h\nu_{\max}$ รังสีเอ็กซ์ที่เกิดขึ้นมีความถี่ $\nu < \nu_{\max}$ และความยาวคลื่นยาวกว่า λ_{swl} ความยาวช่วงคลื่นทั้งหมดตั้งแต่ λ_{swl} จนถึง λ (long wavelength fade out) รวมเรียกว่า รังสีเอ็กซ์ชนิดต่อเนื่อง

การที่ให้ความต่างศักย์ไฟฟ้าแก่หลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ จะทำให้ความสูงของเส้นโค้งเพิ่มขึ้นและเลื่อนไปทางซ้าย เพราะว่าจำนวนโฟตอน ที่เกิดขึ้นต่อวินาทีที่มีจำนวนมากขึ้น รังสีเอ็กซ์ทั้งหมดที่ถูกส่งออกมาต่อเวลาจะเป็นสัดส่วนโดยตรงกับพื้นที่ใต้เส้นโค้ง สรุปได้ว่าความเข้มของรังสีเอ็กซ์ขึ้นอยู่กับ ความต่างศักย์ไฟฟ้าที่ให้กับหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ เลขอะตอมของโลหะที่ใช้เป็นเป้าในหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ รวมถึงกระแสที่ให้หลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์

2.3.2 รังสีเอกซ์ชนิดเฉพาะ (The characteristic spectrum)

เมื่อความต่างศักย์ที่ให้ต่อหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ ถึงค่าที่แน่นอนค่าหนึ่งซึ่งมีลักษณะเฉพาะของโลหะที่เป็นเป้าจะเกิดความเข้มสูงสุดที่ความยาวช่วงคลื่นหนึ่งซึ่งซ่อนอยู่ในช่วงของรังสีเอกซ์ชนิดต่อเนื่องและเนื่องจากช่วงความยาวคลื่นนี้มีลักษณะแคบและเป็นสมบัติเฉพาะตัวของแต่ละธาตุที่เป็นเป้า ซึ่งเรียกลักษณะดังนี้ว่า Characteristic line เส้นเหล่านี้แทน K, L, M...etc.lines ซึ่งทั้งหมดรวมเป็น รังสีเอกซ์ชนิดเฉพาะ(characteristic spectrum) ของโลหะที่ใช้เป็นเป้า เช่นถ้าใช้ Mo เป็นเป้า K line มีความยาวคลื่นประมาณ 0.7 \AA , L line มีความยาวคลื่นประมาณ 5 \AA เป็นต้น โดยทั่วไป K line จะใช้มากที่สุดในการวิจัยทางด้าน การเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ (x-rays diffraction) เนื่องจากเส้นอื่น ๆ นั้นจะถูกดูดกลืนได้ง่ายกว่า ใน K line มีหลายเส้นรวมกันที่สังเกตได้คือ $K_{\alpha_1}, K_{\alpha_2}, K_{\beta_1}$ สำหรับ Mo มีความยาวคลื่นของเส้น K ดังนี้

$$K_{\alpha_1} = 0.70926 \text{ \AA}$$

$$K_{\alpha_2} = 0.71354 \text{ \AA}$$

$$K_{\beta} = 0.63225 \text{ \AA}$$

α_1, α_2 มีความยาวคลื่นที่ใกล้เคียงกันมากโดยปกติแล้วจะเห็นซ้อนกันเป็นเส้นเดี่ยวเรียกว่า K_{α} (doublet) โดยที่ K_{α_1} มีความเข้มมากกว่าประมาณ สองเท่าของความเข้มของ K_{α}

จะเห็นได้ว่าเส้นสเปกตรัมของรังสีเอกซ์ชนิดเฉพาะ เป็นตำแหน่งที่มีค่าสูงที่สุดในเส้นโค้ง เนื่องจากค่า ความต่างศักย์ที่มากพอที่จะทำให้อิเล็กตรอนใน K-shell ของอะตอมในโลหะอยู่ในสภาพตื่นตัว (critical K. voltage) คือประมาณ 20.01 kV สำหรับโลหะโมลิบดีนัม ถ้าหากเพิ่มศักย์ไฟฟ้ามากขึ้น ความเข้มของยอดสูงจะเพิ่มขึ้นไปด้วย การเพิ่มศักย์ไฟฟ้าเหนือค่าความต่างศักย์วิกฤติ จะทำให้ความเข้มเพิ่มขึ้นเพียงอย่างเดียวส่วนค่าความยาวคลื่นจะมีค่าคงที่

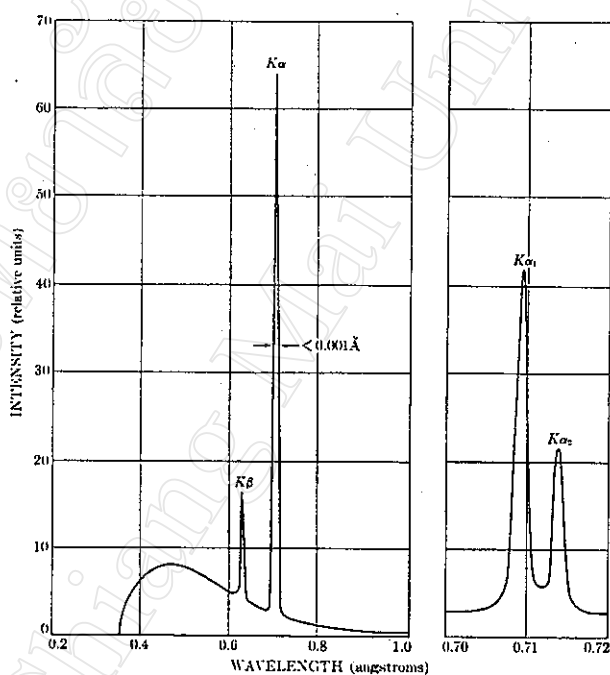
ในรูปที่ 2.5 แสดงสเปกตรัมของ Mo (target) ที่ 35 kV โดยใช้สเกลเปรียบเทียบกับรูปที่ 2.4 จะเห็นว่า λ_{SWL} ใน รังสีเอกซ์ชนิดต่อเนื่องยังคงเลื่อนสั้นเข้ามาเมื่อศักย์ไฟฟ้าสูงขึ้นแต่ $\lambda_{K-lines}$ ยังคงคงที่

ความเข้มของรังสีเอกซ์ชนิดเฉพาะแต่ละเส้นวัดโดยการเปรียบเทียบกับรังสีเอกซ์ชนิดต่อเนื่องนั้นจะมีค่ามากหรือน้อยขึ้นอยู่กับกระแสที่ให้แก่หลอดกำเนิดรังสี และค่าความต่างศักย์ที่เกินค่า ความต่างศักย์วิกฤติ โดยจะเป็นไปตามสมการ

$$I_{K\text{-line}} = Bi(V - V_K)^n \quad (2.4)$$

โดยที่ B = ค่าสัดส่วนคงที่
 V_K = K-excitation voltage
 N = ค่าคงที่ประมาณ 1.5

ความเข้มของ สเปกตรัมรังสีเอกซ์ชนิดเฉพาะ มีค่ามากเมื่อเทียบกับรังสีเอกซ์ชนิดต่อเนื่อง รังสีเอกซ์ที่ได้จากหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ชนิดเป้าทองแดงที่ 30 kV พบว่า K_α - line มีความเข้มเป็น 90 เท่าของความเข้มในรังสีเอกซ์ชนิดต่อเนื่อง สมบัตินี้ของรังสีเอกซ์ชนิดเฉพาะ ทำให้สามารถใช้รังสีเอกซ์ที่มีความยาวคลื่นเดียวเพื่อใช้ในการศึกษาการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ได้



รูปที่ 2.5 แสดงสเปกตรัมของรังสีเอกซ์ที่เกิดจาก Mo โดยให้ความต่างศักย์ 35 กิโลโวลต์

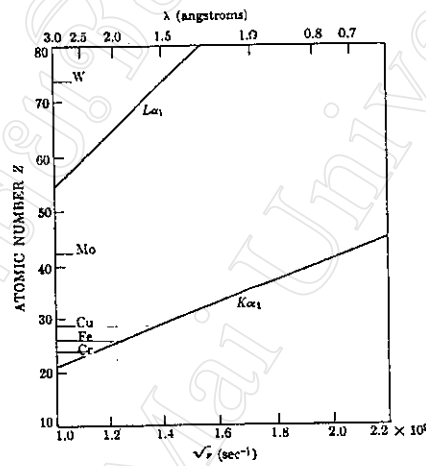
สเปกตรัมชนิดเฉพาะของรังสีเอกซ์ถูกค้นพบโดย W.H. Bragg และได้รับการจัดระเบียบเรียงโดย H. G. Moseley ซึ่งเป็นผู้ที่ค้นพบว่าความยาวคลื่นของเส้นจะลดลงถ้าเลขอะตอม(atomic number) ของโลหะเพิ่มขึ้นซึ่งเป็นไปตามสมการ

$$\sqrt{\nu} = C(Z - \sigma)$$

$$C, \sigma = \text{const} \tag{2.5}$$

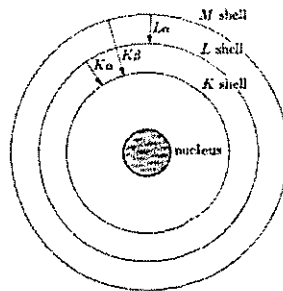
$\nu = \text{Frequency}$
 $Z = \text{atomic number}$

ความสัมพันธ์นี้แสดงในรูปที่ 2.6 สำหรับ K_{α_1} และ L_{α_1} จะเห็นว่า L -line ไม่จำเป็นต้องมี λ สั้นกว่า K -line เสมอไป เช่นโลหะทั้งเสตนเส้น L_{α_1} จะอยู่ที่ λ เดียวกับ K_{α_1} -line ของทองแดงคือประมาณ 1.5 Å



รูปที่ 2.6 แสดงความสัมพันธ์ของ Moseley สำหรับ Characteristic lines

สเปกตรัมต่อเนื่องมีสาเหตุมาจากการเกิดอัตราห้วงอย่างกระตั้นหันของอิเล็กตรอนขณะเข้าชนเป้า ส่วนการเกิดสเปกตรัมชนิดเฉพาะของรังสีเอ็กซ์ เกิดจากการที่อะตอมของวัตถุที่เป็นเป้าโดยตรง ซึ่งสามารถอธิบายได้ดังนี้ เมื่อพิจารณาโครงสร้างของอะตอมซึ่งตรงกลางเป็นนิวเคลียสซึ่งล้อมรอบด้วยอิเล็กตรอนตามวงโคจรต่างๆ (Shell) ดังแสดงในรูปที่ 2.7



รูปที่ 2.7 แสดง Electronic Transitions ในอะตอม

ถ้าอิเล็กตรอนที่ชนเป้ามีพลังงานจลน์มากพอจะสามารถทำให้อิเล็กตรอนในอะตอมของเป้าหลุดจาก K-shell ทำให้อะตอมอยู่ในสภาพตื่นเต้น (Exciting State) อิเล็กตรอนที่อยู่วงนอกจะเข้ามาแทนที่ว่างใน K-shell พร้อมกับปลดปล่อยพลังงานออกมาในรูปของรังสีที่มีความยาวคลื่นที่แน่นอนซึ่งก็คือ รังสีเอ็กซ์ชนิดเฉพาะจากนั้นอะตอมจะกลับเข้าสู่สภาวะปกติเช่นเดิม

ที่ว่างใน K-shell อาจถูกแทนที่ด้วยอิเล็กตรอนจากวงโคจรใดวงหนึ่งที่ถัดไปทำให้เกิดอนุกรมของ K-shell เช่น K_{α} เกิดจากการแทนที่ว่างใน K-shell โดยอิเล็กตรอนจาก L-shell และ K_{β} เกิดจากการแทนที่ว่างใน K-shell โดยอิเล็กตรอนจาก M-shell ซึ่งโดยปกติโอกาสที่จะเกิด K_{α} มีมากกว่า K_{β} จึงทำให้ K_{α} -line มีความเข้มสูงกว่า K_{β} มาก L-characteristic lines ก็เกิดขึ้นทำนองเดียวกันโดยอิเล็กตรอนใน L-shell หลุดออกไปทำให้เกิดที่ว่างใน L-shell และที่ว่างนี้ถูกแทนที่โดยอิเล็กตรอนจาก Shell ที่อยู่ถัดออกไป

จะเห็นว่าจะต้องมีค่าความต่างศักย์วิกฤติสำหรับรังสีเอ็กซ์ชนิดเฉพาะ เพราะ K-radiation จะไม่สามารถขึ้นเกิดจนกว่าค่า ความต่างศักย์ที่ให้แก่หลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์มีค่าสูงพอที่จะทำให้อิเล็กตรอนที่วิ่งชนเป้ามีพลังงานจลน์พอที่จะทำให้อิเล็กตรอนใน K-shell หลุดออกจากอะตอม ถ้า W_K คืองานที่จะใช้ในการนำอิเล็กตรอนออกจาก K-shell ของอะตอมเป้า พลังจลน์ของอย่างน้อยที่สุดของอิเล็กตรอนที่เข้าชนคือ

$$\frac{1}{2}mv^2 = W_K \quad (2.6)$$

ในการที่จะทำให้อิเล็กตรอนใน L-shell หลุดออกจากอะตอมนั้นต้องการพลังงานน้อยกว่าใน K-shell เนื่องจาก L-shell มีระยะห่างจาก นิวเคลียสมากกว่า นั้นหมายถึง L-excitation voltage มีค่าน้อยกว่า K-excitation voltage ดังนั้นในการเกิด K-characteristic radiation จึงเกิดขึ้นพร้อมกับเส้น L, M, N, ... เสมอ

2.4 การดูดกลืน (Absorption)

Electronics transition ที่เกิดขึ้นนอกจากการทำปฏิกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนกับอะตอมแล้ว ยังเกิดจากปฏิกิริยาของรังสีเอกซ์กับอะตอม เมื่อรังสีเอกซ์ผ่านเข้าไปในเนื้อวัตถุใดๆ บางส่วนจะทะลุผ่านวัตถุไป แต่บางส่วนจะถูกดูดกลืน จากการทดลองทำให้ทราบว่าอัตราส่วนของความเข้มของรังสีเอกซ์ เมื่อผ่านสารที่มีเนื้อเดียวกันตลอดจะเป็นสัดส่วนโดยตรงกับระยะทางที่ผ่านไป ดังแสดงในสมการ

$$\frac{dI}{I} = \mu dx \quad (2.7)$$

ค่าสัดส่วนคงที่ μ เรียกว่า สัมประสิทธิ์ของการดูดกลืนเชิงเส้น (Linear absorption coefficient) ซึ่งขึ้นอยู่กับสารที่เป็นตัวกลางและความยาวคลื่นของรังสีเอกซ์ อินทิกรัลของสมการ 2.7 จะได้

$$I_x = I_0 e^{-\mu x} \quad (2.8)$$

โดยที่ I_0 = ความเข้มของรังสีตกกระทบ
 I_x = ความเข้มของรังสีเมื่อผ่านความหนา x

สัมประสิทธิ์ของการดูดกลืนเชิงเส้น (μ) จะเป็นสัดส่วนโดยตรงกับความหนาแน่น ซึ่งหมายความว่าปริมาณ $\frac{\mu}{\rho}$ จะเป็นค่าเฉพาะตัวของสารซึ่งขึ้นอยู่กับสถานะทางกายภาพ (ของแข็ง, ของเหลว หรือ ก๊าซ) ค่า $\frac{\mu}{\rho}$ นี้เรียกว่า Mass absorption coefficient สมการ 2.8 เขียนในรูปแบบใหม่ได้เป็น

$$I_x = I_0 e^{-\left(\frac{\mu}{\rho}\right)\rho x} \quad (2.9)$$

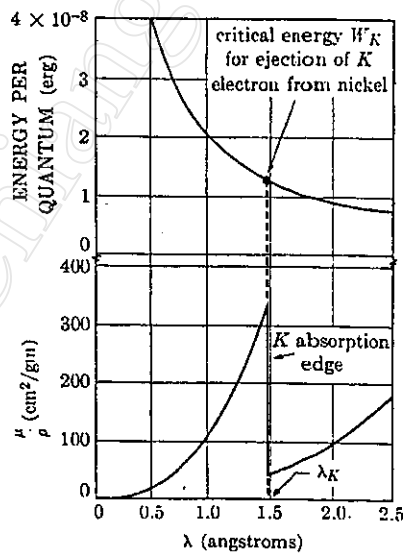
การแปรผันของสัมประสิทธิ์การดูดกลืนรังสี กับความยาวคลื่นจะบอกถึงแนวโน้มของการเกิดปฏิกิริยา ของรังสีเอกซ์กับอะตอม รูปที่ 2.8 จะแสดงถึงการแปรผันของสัมประสิทธิ์การดูดกลืนรังสีกับค่าความยาวคลื่นของ Ni ซึ่งทุกสารจะมีลักษณะการแปรผันเช่นเดียวกันกับ Ni จะเห็น

ได้ว่าเส้นกราฟประกอบไปด้วยสองส่วนที่คล้ายกันซึ่งแยกออกจากกันอย่างชัดเจนโดยรอยต่อซึ่งเรียกว่า Absorption edge โดยส่วนที่เหมือนกันนั้นจะมีค่าสัมประสิทธิ์ของการดูดกลืนแปรผันกับความยาวคลื่นตามสมการ

$$\frac{\mu}{\rho} = k\lambda^3 Z^3 \quad (2.10)$$

โดยที่ k = ค่าคงที่ในแต่ละช่วงที่เหมือนกันของกราฟ
 Z = atomic number ของ Absorber

สสารดูดกลืนรังสีเอกซ์ได้สองแบบคือโดย การกระเจิง (Scattering) และการดูดกลืนที่แท้จริง (true absorption) ทั้งสองกระบวนการนี้ใช้ปริมาณ $\frac{\mu}{\rho}$ เป็นตัววัดการดูดกลืนรวม ในการกระเจิงของรังสีเอกซ์โดยอะตอมมีลักษณะคล้ายกับการกระเจิงของแสงเมื่อโดนฝุ่นละอองในอากาศ ซึ่งจะเกิดขึ้นในทุกทิศทาง และเนื่องจากพลังงานของ รังสีที่กระเจิง (Scattering beam) ไม่ปรากฏออกมาใน รังสีที่ทะลุผ่าน (Transmitted beam) จึงสรุปได้ว่ารังสีถูกดูดกลืน ในกรณีของการดูดกลืนที่แท้จริงเกิดจากการเปลี่ยนที่ของอิเล็กตรอนในอะตอม เช่นอิเล็กตรอนซึ่งมีพลังงานสูงพอที่จะชนอิเล็กตรอนใน K-shell ของอะตอม



รูปที่ 2.8 แสดงการเปลี่ยนแปลงของความยาวคลื่นกับพลังงานของรังสีเอกซ์ (บน) และกับค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนของโลหะนิกเกิล (ล่าง)

Absorber ทำให้เกิด K-characteristic radiation นั้น ในวิธีคล้ายกันรังสีเอ็กซ์ที่มีพลังงานโฟตอนมากพอจะทำให้อิเล็กตรอนหลุดออกมาได้เรียกว่า โฟโตอิเล็กตรอน และรังสีที่ส่งออกมาเรียกว่า Fluorescent radiation ซึ่งจะออกมาทุกทิศทางและมีความยาวคลื่นเท่ากับความยาวคลื่นของรังสีเอ็กซ์ชนิดเฉพาะ ที่เกิดจากการเอาอิเล็กตรอนชนเป้า ซึ่งเป็นไปตามสมการ

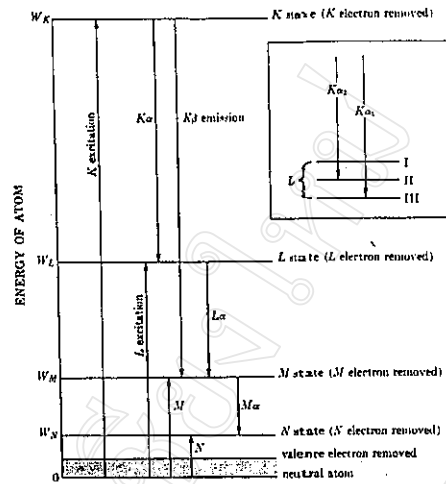
$$W_K = h\nu_K = \frac{hc}{\lambda_K} \quad (2.11)$$

จากสมการ 2.11 W_K คือค่าพลังงานที่พอดีจะทำให้อิเล็กตรอนใน K-shell หลุดจากอะตอม ν_K, λ_K เป็นความถี่และความยาวคลื่นของ K-absorption edge

พิจารณาเส้นโค้งในรูปที่ 2.8 สมมุติว่ารังสีเอ็กซ์ที่มีความยาวคลื่น 2.5 Å ตกกระทบโลหะนิกเกิลและเมื่อลดความยาวคลื่นลง ความถี่จะเพิ่มขึ้น ทำให้พลังงานต่อหนึ่งควอนตัมเพิ่มขึ้นด้วย สัมประสิทธิ์ของการดูดกลืนก็จะลดลง ดังนั้นถ้ามีพลังงานมากก็จะทะลุทะลวงผ่านตัวดูดกลืน (Absorber) ได้มากเมื่อลดค่าความยาวคลื่นลงจนถึงค่า λ_K ของนิกเกิลซึ่งมีค่าเท่ากับ 1.488 Å จะเห็นว่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเพิ่มขึ้นทันทีอย่างมากมายซึ่งเป็นช่วงที่การดูดกลืนที่แท้จริงเกิดขึ้น Incident quanta ของรังสีเอ็กซ์ จะหายไปโดยพลังงานส่วนนี้จะถูกเปลี่ยนไปเป็น Fluorescent radiation และพลังงานจลน์ของโฟโตอิเล็กตรอนที่หลุดออกไป

หากทดลองเขียนกราฟให้ความยาวคลื่นเพิ่มขึ้นต่อจาก 2.5 Å จะพบยอดแหลมของการขาดตอนของเส้นกราฟซึ่งจะเกิดขึ้นหลายแห่งเป็นช่วงๆไป ยอดเหล่านี้คือ L, M, N.Etc. absorption edge ความยาวคลื่นซึ่งอยู่ระหว่าง K และ L absorption edge เป็นความยาวคลื่นที่รังสีเอ็กซ์มีพลังงานพอที่จะชนอิเล็กตรอนใน L-shell แต่ยังไม่พอที่จะชนอิเล็กตรอนใน K-shell ได้ ความยาวคลื่นที่ตำแหน่ง Absorption edge นั้นจะแปรตาม เลขอะตอมของตัวดูดซับซึ่งเป็นไปตามกฎของ Moseley

การวัดค่า Absorption edge เพื่อสร้างตารางของระดับพลังงานของอะตอม ซึ่งทำให้ทราบถึงค่าความยาวคลื่นของเส้นรังสีเอ็กซ์ชนิดเฉพาะได้ ทำนองเดียวกันพลังงานของ L, M, N...states สามารถคำนวณได้จากความยาวคลื่นของ L,M,N...absorption edges.



รูปที่ 2.9 แสดงระดับพลังงานของอะตอมและ Characteristic lines emission

จากรูป 2.9 แสดงให้เห็นว่าสามารถคำนวณหาค่าความยาวคลื่นของรังสีเอกซ์ชนิดเฉพาะได้ เนื่องจากความแตกต่างระหว่างระดับพลังงานของสองสถานะจะมีค่าเท่ากับ $h\nu$ โดย h คือค่าคงที่ของ Planck และ ν คือความถี่ของรังสีที่ส่งออกมาในขณะที่อะตอมเปลี่ยนสถานะ ตัวอย่างเช่น การเกิดเส้น K_{α_1}

$$\begin{aligned}
 h\nu_{K_{\alpha_1}} &= W_K - W_{L_{III}} \\
 h\nu_{K_{\alpha_1}} &= h\nu_K - h\nu_{L_{III}} \\
 \frac{1}{\lambda_{K_{\alpha_1}}} &= \frac{1}{\lambda_K} - \frac{1}{\lambda_{L_{III}}}
 \end{aligned}
 \tag{2.12}$$

Excitation voltage สามารถคำนวณได้โดยความสัมพันธ์

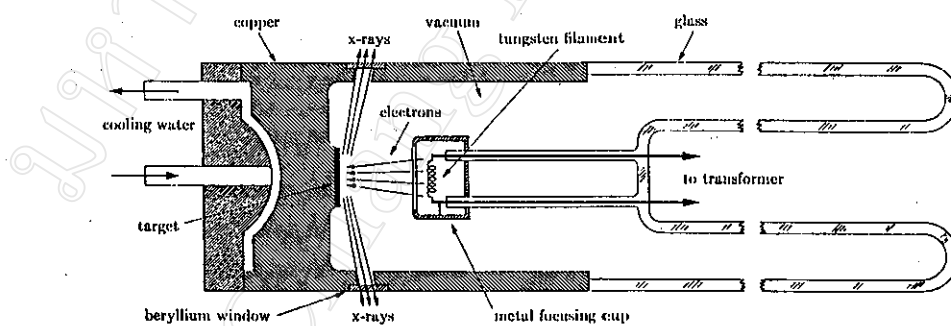
$$\begin{aligned}
 eV_K &= W_K = h\nu_K = \frac{hc}{\lambda_K} \\
 V_K &= \frac{hc}{e\lambda_K} \\
 V_K &= \frac{12,400}{\lambda_K(A)} \text{ (volt)}
 \end{aligned}
 \tag{2.13}$$

โดยที่ V_K = Excitation voltage, λ_K = K-absorption edge

2.5 การผลิตรังสีเอ็กซ์ (Production of X-rays)

รังสีเอ็กซ์สำหรับงานเกี่ยวกับการเลี้ยวเบนเกิดจากการยิงอิเล็กตรอนเข้าชนเป้าโลหะที่เหมาะสม ในหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์จึงต้องมีแหล่งกำเนิดอิเล็กตรอน ตัวเร่งอิเล็กตรอนที่มีความต่างศักย์สูงและโลหะที่เป็นเป้า เนื่องจากพลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนส่วนใหญ่ถูกเปลี่ยนไปเป็นความร้อนในเป้าโลหะ จึงมีระบบทำความเย็นซึ่งโดยมากจะใช้น้ำผ่านเพื่อป้องกันการหลอมของโลหะที่เป็นเป้า หลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์มีขั้วไฟฟ้าคือขั้วบวกเป็นโลหะเป้ามีความต่างศักย์เท่ากับ 0 และขั้วลบมีความต่างศักย์เป็นลบ โดยทั่วไปความต่างศักย์ระหว่างขั้วบวกและขั้วลบมีค่าประมาณ 3000 – 5000 โวลต์ สำหรับงานที่ใช้ในการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ขั้วลบจะทำหน้าที่เป็นแหล่งกำเนิดอิเล็กตรอน ซึ่งแบ่งออกเป็น 2 แบบคือหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์แบบมีไส้หลอด(filament tube) โดยหลักการคือเผา ไส้หลอดให้ร้อนจัดจนอิเล็กตรอนออกมา และหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์แบบอัดแก๊ส (gas tube) ซึ่งอิเล็กตรอนถูกทำให้เกิดขึ้นโดยวิธีการแตกตัวเป็นไอออน

หลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์แบบมีไส้หลอดสร้างโดย Coolidge ในปี ค.ศ.1903 ประกอบด้วยหลอดสุญญากาศซึ่งมีฉนวนกันโดยรอบ มีขั้วบวกอยู่ปลายด้านหนึ่งอีกปลายเป็นขั้วลบ ขั้วลบที่ใช้เป็นเส้นใยโลหะทังสเตน (tungsten filament) โดยขั้วบวกใช้โลหะทองแดง และระบายความร้อนโดยใช้น้ำดังแสดงในรูปที่ 2.10

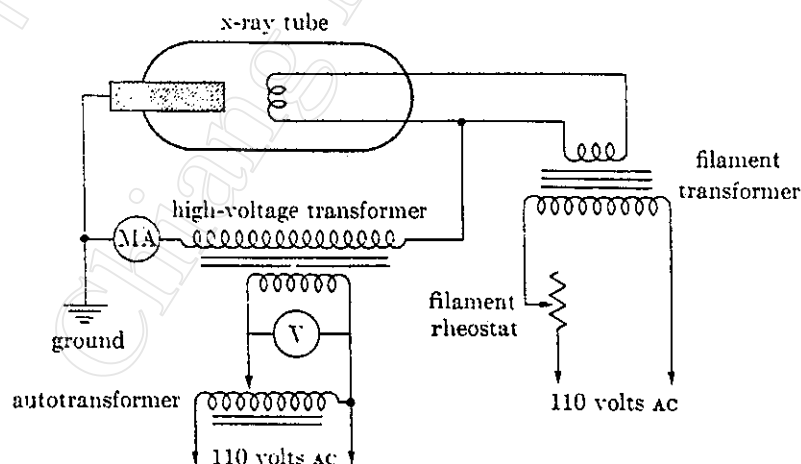


รูปที่ 2.10 แสดงภาคตัดขวางของหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์แบบมีไส้หลอด

หม้อแปลงไฟฟ้าซึ่งมีศักดาไฟฟ้าสูงถูกต่อกับไส้หลอด และอีกด้านหนึ่งต่อลงดิน ที่เป่าก็จะต่อลงดินโดยระบบทำความเย็นของน้ำที่ติดต่อกัน ไส้หลอดถูกเผาโดยกระแสประมาณ 3 แอมแปร์ อิเล็กตรอนที่ส่งออกมาจะวิ่งเข้าหาเป้าด้วยความเร็วสูงเนื่องจากความต่างศักย์ที่คร่อมหลอดมีค่าสูงมาก รอบไส้หลอดจะมีแผ่นโลหะซึ่งมีศักย์ไฟฟ้าเป็นลบทำหน้าที่รวบรวมอิเล็กตรอน

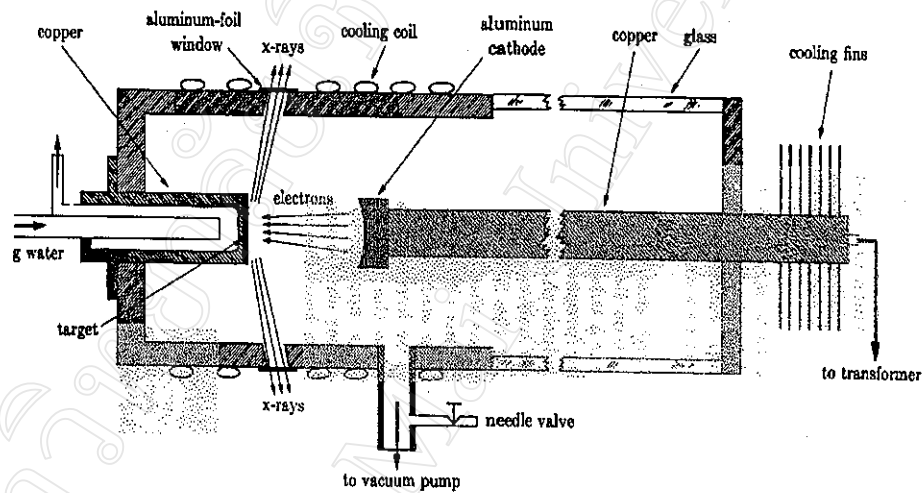
ให้รังสีเอกซ์เรียกว่า Focusing sheet รังสีเอกซ์จะเกิดขึ้นทุกทิศทางและจะถูกปล่อยให้ออกตามช่อง (window) ซึ่งอาจมี 2-4 ช่อง ไปยังเครื่องมือ ช่องเหล่านี้มักจะทำด้วยโลหะเบอริลเลียม, อลูมิเนียมหรือไมกา ตามรูปที่ 2.11 แสดงวงจรไฟฟ้าที่ต่อเข้ากับหลอด คัดดาไฟฟ้าที่ให้แก่หลอดควบคุมโดย Autotransformer voltmeter ซึ่งจะแสดงศักดาไฟฟ้าที่ใส่เข้าไป ส่วน milli-ammeter วัดกระแสหลอดที่ให้แก่หลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ซึ่งก็คือจำนวนอิเล็กตรอนจากไส้หลอดที่วิ่งเข้าสู่เป้า กระแสนี้จะมีค่าประมาณ 15-25 มิลลิแอมแปร์ และถูกควบคุมโดย Filament rheostat ซึ่งเป็นตัวปรับค่าความต่างศักย์ที่ให้แก่ Filament transformer ด้วย หลอดกำเนิดรังสีเอกซ์จะทำเป็นสองแบบกล่าวคือ หลอดแบบปิดสนิทอย่างถาวร (seal off tube) และหลอดที่เปิดเพื่อเปลี่ยนชิ้นส่วนภายในหลอดได้ (demountable tube)

หลอดชนิดปิดอย่างถาวรทำให้เป็นสุญญากาศจากโรงงาน ส่วนหลอดแบบที่สามารถเปิดเพื่อเปลี่ยนไส้หลอดหรือโลหะเป้าได้นั้นต้องใช้เครื่องมือทำให้เป็นสุญญากาศ (High-vacuum pumping) ต่อเนื่องกันตลอดการใช้งาน สำหรับหลอดแบบแรกเมื่อหมดอายุการใช้งานต้องเปลี่ยนใหม่ทั้งหลอดซึ่งราคาค่อนข้างสูง แต่สามารถติดตั้งได้ง่ายกว่า ส่วนหลอดอีกชนิดนั้นสามารถเปลี่ยนโลหะเป้าหรือไส้หลอดที่หมดอายุได้ทำให้มีการสิ้นเปลืองน้อยกว่า แต่มีปัญหาคือการติดตั้งเพื่อใช้งานซึ่งมีความยุ่งยากมากกว่า



รูปที่ 2.11 แสดงแผนภาพของวงจรไฟฟ้าที่ต่อเข้ากับหลอดแบบ Filament

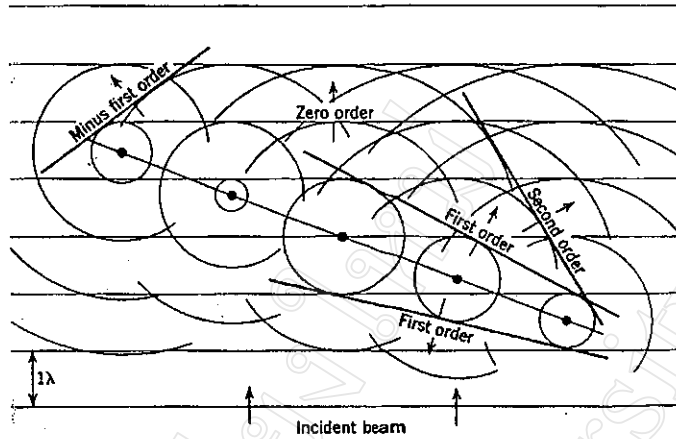
หลอดกำเนิดรังสีเอกซ์แบบอัดแก๊สนี้เป็นแบบดั้งเดิมของหลอดรังสีเอกซ์เมื่อเริ่มสร้าง ปัจจุบันไม่เป็นที่นิยมแล้ว ข้อดีของหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ชนิดนี้คือรังสีที่ออกมามีความบริสุทธิ์สูง จะไม่มีการปนเปื้อนของรังสีจาก Anode deposit ซึ่งมีสาเหตุมาจากไส้หลอดที่ร้อนจัด หลอดรังสีทุกหลอดจะมีค่าของ Power rating สูงสุดซึ่งหากใช้เกินค่านี้แล้วจะทำให้หลอดกำเนิดรังสีเอกซ์เสียหายได้ ค่านี้กำหนดจากปริมาณของความร้อนที่เกิดขึ้นในโลหะเป้า ซึ่งโรงงานผลิตหลอดจะให้ค่าที่มากที่สุดของกระแสที่ให้แก่หลอดเป็น มิลลิแอมแปร์ คู่กับค่าความต่างศักย์ของหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ (tube voltage) ที่กำหนดให้เป็นกิโลโวลต์



รูปที่ 2.12 แสดงภาคตัดขวางของหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์แบบอัดแก๊ส

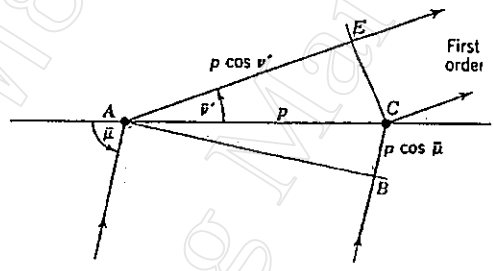
2.6 การเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์

Laue ได้ค้นพบปรากฏการณ์เลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์คือ เมื่อปี ค.ศ.1912 ซึ่งได้ให้คำอธิบายว่า เมื่อรังสีเอกซ์เข้าไปชนกับอะตอม อิเล็กตรอนที่อยู่ในอะตอมจะสั่นด้วยความถี่เดียวกับรังสีเอกซ์ที่ตกกระทบ โดยอิเล็กตรอนจะรับพลังงานทั้งหมดของรังสีเอกซ์ไว้ แล้วคายพลังงานออกที่ได้รับออกมาทั้งหมดเช่นเดียวกัน จึงทำให้ได้รังสีเอกซ์ที่มีความถี่เท่าเดิม แต่การคายพลังงานของอิเล็กตรอนสามารถเกิดได้ทั่วทั้งอะตอม จึงเกิดปรากฏการณ์การกระเจิงของรังสีเอกซ์ โดยอะตอมจะให้รังสีเอกซ์ที่มีหน้าคลื่นเป็นรูปวงกลม ในผลึกมีอะตอมอยู่มากมาย ดังนั้นแต่ละอะตอมจะเป็นเหมือนศูนย์กลางของคลื่นอื่น ดังแสดงในรูปที่ 2.13



รูปที่ 2.13 แสดงแบบจำลองการกระเจิงของรังสีเอ็กซ์

โดยทั่วไปคลื่นจะแทรกสอดกันเมื่อมี เฟส(phase) หรือ Path difference เป็นจำนวนเท่าของความยาวคลื่น ถ้าพิจารณาการแทรกสอดจากแถวของอะตอมในแกนหนึ่งดังรูปที่ 2.13



รูปที่ 2.14 แสดงการแทรกสอดในแถวของอะตอม

จากรูปที่ 2.14 $\bar{\mu}$ = มุมที่รังสีตกกระทบทำกับระนาบของอะตอม

$\bar{\nu}'$ = มุมที่เกิดการแทรกสอด

p = ระยะห่างระหว่างอะตอม

path difference = $AE - BC$

จะเกิดการแทรกสอดแบบเสริมกันเมื่อ Path difference = $h\lambda$ โดยที่ h = จำนวนเต็ม

$$\begin{aligned}
 AE - BC &= h\lambda \\
 AE &= p \cos \bar{\nu}' \\
 BC &= p \cos \bar{\mu}
 \end{aligned}
 \tag{2.14}$$

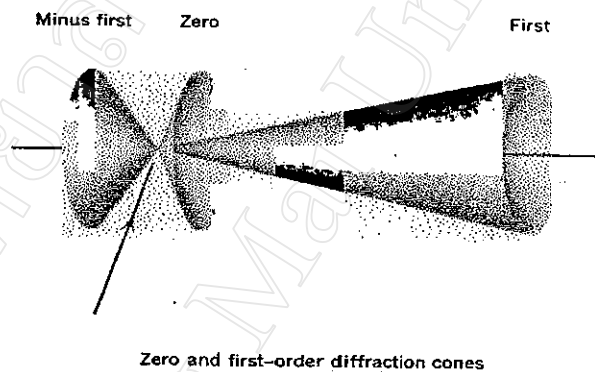
ดังนั้นจะได้

$$p(\cos \bar{\nu}' - \cos \bar{\mu}) = h\lambda \quad (2.15)$$

การแทรกสอดจะเกิดได้ทั้งสองข้างของแนวตักกระทบ h จึงมีค่าเป็นไปได้ทั้งบวกและลบ ดังนั้นจะได้สมการทั่วไปคือ

$$p(\cos \bar{\nu}' - \cos \bar{\mu}) = \pm h\lambda \quad (2.16)$$

จะได้รูปของการแทรกสอดดังแสดงในรูปที่ 2.15



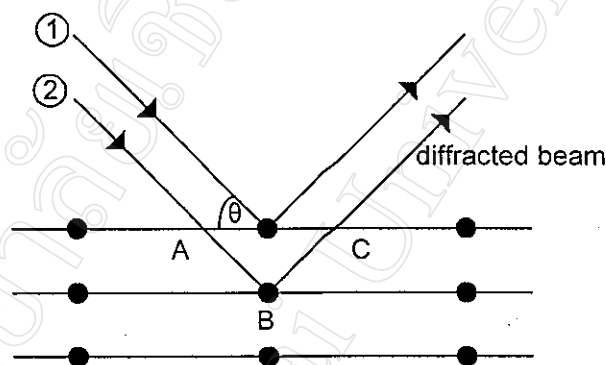
รูปที่ 2.15 แสดงรูปแบบของการแทรกสอดของ Laue

ผลึกมีแถวของอะตอมได้ทั้งสามมิติ ดังนั้นจะได้สมการของการแทรกสอดทั้งสามมิติ เรียกว่า Laue's equation ดังนี้

$$\begin{aligned} a(\cos \bar{\nu}'_1 - \cos \bar{\mu}_1) &= \pm h\lambda \\ b(\cos \bar{\nu}'_2 - \cos \bar{\mu}_2) &= \pm k\lambda \\ c(\cos \bar{\nu}'_3 - \cos \bar{\mu}_3) &= \pm l\lambda \end{aligned} \quad (2.17)$$

เมื่อแถวของอะตอมเรียงตัวอยู่ในสามมิติ ดังนั้นการแทรกสอดจะต้องสอดคล้องกับสมการของ Laue ทั้งสามสมการพร้อมกัน แต่ละสมการจะให้รูปแบบของการแทรกสอด (Diffraction pattern) เป็นรูปกรวย การแทรกสอดที่สอดคล้องทั้งสามสมการ จะเกิดการตัดกันของกรวยทั้งสามได้จุด 1 จุด

สมการของ Laue ไม่สามารถนำไปใช้กับระบบผลึกได้ ต่อมา Sir William Bragg ได้ดำเนินการทดลองต่อ และพัฒนาทางด้านทฤษฎีเพื่ออธิบายปรากฏการณ์นี้ Bragg ได้อธิบายว่าเมื่อฉายรังสีเอ็กซ์เข้าไปชนกับอะตอมในผลึกซึ่งเรียงตัวกันแบบ 3 มิติ รังสีเอ็กซ์จะสะท้อนกับระนาบของอะตอมนั้นแล้วเกิดการแทรกสอดที่สอดคล้องกับทฤษฎีพื้นฐานทางฟิสิกส์ที่ว่า คลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าสามารถประพฤติตัวเป็นได้ทั้งคลื่นและอนุภาค ขณะที่รังสีเอ็กซ์สะท้อนกับระนาบของอะตอมจะประพฤติตัวเป็นอนุภาค แต่เมื่อสะท้อนแล้วเกิดการแทรกสอด รังสีเอ็กซ์จะประพฤติตัวเป็นคลื่น ซึ่งสามารถพิสูจน์และหาสมการการเลี้ยวเบนได้ดังนี้



รูปที่ 2.16 แสดงการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ตามกฎของ Bragg

จากรูปที่ 2.16 จะเห็นว่ารังสีเอ็กซ์ที่ 2 เดินทางช้ากว่าลำแสงที่ 1 เท่ากับ $AB+BC$ ดังนั้นจะได้ว่า

$$\text{path difference} = AB+BC$$

โดยที่

$$AB = BC$$

ดังนั้น

$$\text{path difference} = 2AB \quad \text{แต่ } AB = d_{hkl} \sin \theta$$

ดังนั้น

$$\text{path difference} = 2d_{hkl} \sin \theta$$

การแทรกสอดแบบเสริมกันจะเกิดเมื่อมี path difference ต่างกันเป็นจำนวนเต็มเท่าของความยาวคลื่น ($=n\lambda$) ดังนั้นจะได้ว่า

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda \quad (2.18)$$

ค่า n จะมีค่าเป็น 1 เสมอซึ่งสามารถพิสูจน์ได้จากความสัมพันธ์ของ d-spacing ดังนี้

$$d_{nshknl} = \frac{d_{hkl}}{n}$$

จากสมการ

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

สามารถเขียนได้เป็น

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

จะได้

$$2d_{nhknl} \sin \theta = \lambda \quad (2.19)$$

อธิบายได้ว่าการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ลำดับที่ n (n^{th} order) ของระนาบ(hkl)มี d-spacing เป็น d_{hkl} สามารถพิจารณาเป็นการเลี้ยวเบนลำดับที่ 1 (First-order) ของระนาบ

(nhknl)มี d-spacing เป็น $d_{nhknl} = \frac{d_{hkl}}{n}$ เพื่อความสะดวกจึงเขียน $n=1$ เท่านั้น

ดังนั้นจะได้สมการของการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์เมื่อผ่านสารตัวอย่างคือ

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda \quad (2.20)$$

ซึ่งเรียกว่า Bragg's Law

เมื่อ θ = Bragg's angle

λ = ความยาวคลื่น

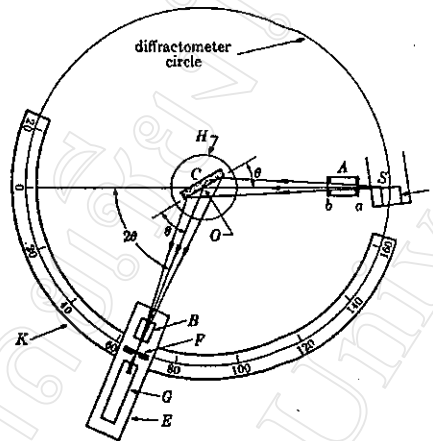
hkl = Miller indices

d_{hkl} = d-spacing

ในทางปฏิบัติจะใช้รังสีเอกซ์ที่มีค่าความยาวคลื่นคงที่ดังนั้นจึงสามารถหา d-spacing ซึ่งแปรผันกับมุมของการเลี้ยวเบน โดยการทดลองจะได้มุมของการเลี้ยวเบน

2.7 เครื่องวัดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ (X-rays diffractometer; XRD)

เครื่องวัดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์หรือ XRD เป็นเครื่องมือที่ใช้ศึกษาสารตัวอย่างโดยการวัดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ในสารตัวอย่างนั้นๆ เมื่อทราบความยาวคลื่นของรังสีเอ็กซ์ที่ใช้ กลไกการวัดการเลี้ยวเบนของเครื่อง XRD แสดงในรูปที่ 2.17

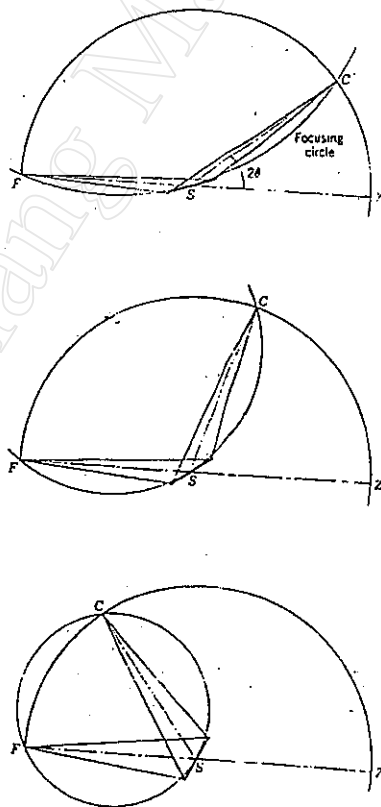


รูปที่ 2.17 แสดงกลไกการวัดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ในเครื่อง XRD

จากรูปที่ 2.17 ตำแหน่ง C เป็นตำแหน่งของ สารตัวอย่าง ซึ่งเป็นผง (powder) อัดเป็นแผ่นบาง ตำแหน่ง H เป็นแท่นวาง สารตัวอย่าง ซึ่งสามารถหมุนตามแกนของ XRD (แกน O) ซึ่งตั้งฉากกับระนาบของกระดาษนี้ ตำแหน่ง S เป็นแหล่งกำเนิดรังสีเอ็กซ์ที่ปล่อยออกจากหลอดกำเนิดรังสี เอ ณ ตำแหน่ง T ของหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ S จะตั้งฉากกับระนาบของกระดาษด้วย ดังนั้นจึงขนานกับแกน O รังสีเอ็กซ์จะกระจายออกจากตำแหน่ง S แล้วเลี้ยวเบนผ่าน สารตัวอย่าง จากนั้นจะรวมกันเป็นแนวรังสีเลี้ยวเบน แล้วผ่านการโฟกัสที่สลิต F จากนั้นรังสีเลี้ยวเบนก็จะผ่านเข้าไปยังหัววัดรังสีเอ็กซ์ ณ ตำแหน่ง G ส่วนที่ตำแหน่ง A และ B เป็นสลิตสำหรับ บีบลำแสงตกกระทบและลำแสงเลี้ยวเบน หัววัดรังสีเอ็กซ์และ Receiving slit จะถูกรองรับ ด้วยฐาน E ซึ่งจะหมุนตามแกน O ด้วยมุม 2θ ซึ่งอ่านค่าตามสเกล K ฐาน E และ H เป็นกลไกควบคู่กันที่ทำให้ หัววัดรังสีเอ็กซ์ หมุนด้วยอัตรา $2x$ องศา พร้อมกับ การหมุนของ สารตัวอย่าง x องศาโดยอัตโนมัติซึ่ง การหมุนจะต้องทำให้ระบบการจัดไฟกัสให้เหมาะสมเพื่อให้ค่ามุมตกกระทบ และมุมสะท้อนจาก สารตัวอย่าง เท่ากันและเท่ากับครึ่งหนึ่งของมุมการเลี้ยวเบนเสมอ

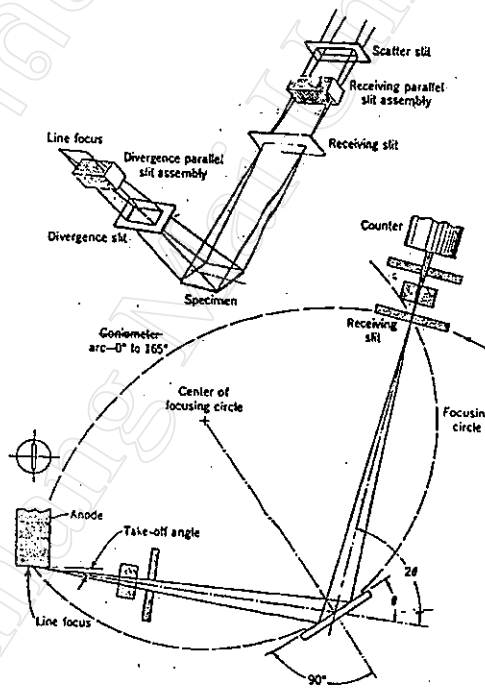
2.7.1 เรขาคณิตและระบบทางเดินแสงของ XRD

การจัดโฟกัส (parafocusing Arrangement) ของ XRD แสดงดังรูปที่ 2.18 อธิบายได้ดังนี้ ลำของรังสีเอ็กซ์ออกมาจากจุดโฟกัส F ไปยังผิวของ สารตัวอย่าง S ซึ่ง สารตัวอย่างนี้หมุนรอบแกนของ XRD รังสีที่เลี้ยวเบนจากระนาบของผลึกที่มุม 2θ จะไปโฟกัสที่ C บนเส้นรอบวงของวงกลมซึ่งผ่าน F และ S ด้วย เรียกวงกลมนี้ว่า Focusing Circle โดยการวางให้ผิวหน้าของสารตัวอย่างสัมผัสกับวงกลมจะทำให้สารตัวอย่างแบ่งครึ่งมุม 2θ (มุม CSZ)พอดี ขณะที่มุมของการเลี้ยวเบนเพิ่มจากเพิ่มจาก 0 ถึง 180 องศาจากจุด C จะกวาดเป็นรูปครึ่งวงกลม Diffractometer circle และเส้นผ่านศูนย์กลางของ Focusing circle โดยจุดมคติแล้ว สารตัวอย่างควรจะโค้งทับสนิทกับส่วนโค้งของ Focusing circle แต่ สารตัวอย่าง ที่มีผิวแบนราบมีความสะดวกในการใช้และการเตรียมมากกว่า รังสีเลี้ยวเบนจะไปรวมกันที่จุดโฟกัส C หัววัดรังสีเอ็กซ์จะถูกติดตั้งไว้บนแกน SC (ที่จุด C) และหมุนรอบสารตัวอย่างเพื่อรับสเปกตรัมที่มุมต่างๆ การจัดการโฟกัสนั้น ผิวของสารตัวอย่างจะแบ่งครึ่งมุมการเลี้ยวเบนและต้องสัมผัสกับ Focusing circle ซึ่งทำได้โดยการหมุนหัววัดรังสีด้วยความเร็วเป็น 2 เท่าของความเร็วเชิงมุมรอบแกนหมุนเดียวกันกับความเร็วเชิงมุมของ สารตัวอย่าง ซึ่งหมุนด้วยอัตราเร็วคงที่



รูปที่ 2.18 แสดงการจัดโฟกัสของ XRD

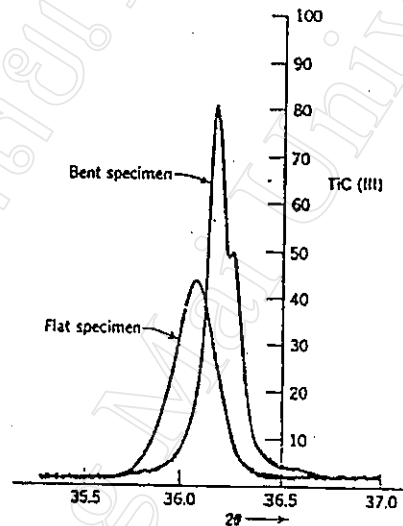
ระบบทางเดินแสงของรังสีเอกซ์ของ XRD แสดงเป็นแผนภาพดังรูปที่ 2.19 ในการลดความผิดพลาดของการโฟกัสจะใช้ขนาดของลำรังสีเอกซ์ที่แคบมากในระนาบของ Focusing circle ซึ่งขนาดของลำรังสีถูกกำหนดโดยความกว้างของ Divergence slit ความยาวของส่วนที่ไม่ได้รับรังสีของสารตัวอย่างเพิ่มขึ้นในขณะที่มุมตกกระทบของรังสีลดลง จึงมีช่วงจำกัดของมุมสำหรับ Slit ที่มีความกว้างเฉพาะที่จะไม่ทำให้รังสีตกกระทบเกินความยาวทั้งหมดของสารตัวอย่าง ถ้าช่วงมุมที่กวาดเกินช่วงมุนี้แล้วจะทำให้มีรังสีที่เลี้ยวเบนมาจากตัวจับสารตัวอย่างด้วย ลำรังสี Line focus แผ่เป็นมุมกว้างมากในระนาบที่ตั้งฉากกับ Focusing circle แต่จะถูกจำกัดลงเหลือเพียง 2-3 องศา โดยใช้ Parallel plate assembly เช่นเดียวกับรังสีที่ถูกเลี้ยวเบนก็ถูกควบคุมด้วย Parallel plate collimator scatter slit ที่อยู่ติดกับหน้าต่างของหัววัดรังสี ซึ่งมีหน้าที่ป้องกันไม่ให้รังสีที่ไม่ได้เลี้ยวเบนจากสารตัวอย่าง เข้าสู่หัววัดรังสีเอกซ์



รูปที่ 2.19 แสดงระบบทางเดินแสงของรังสีเอกซ์ใน XRD

ปัจจัยต่างๆ เช่น การเลี้ยวเบนของรังสีจากระดับความลึกต่างๆ ของสาร, การแผ่กระจายของรังสีตกกระทบและรังสีเลี้ยวเบน, และการใช้สารตัวอย่างที่แบนราบล้วนมีผลต่อตำแหน่งและรูปร่างของ Peak โดยทั่วไปในการลดอิทธิพลของปัจจัยเหล่านี้จะต้องมีเทคนิคในการทดลองซึ่งต้องใช้สารตัวอย่าง ที่ดูดกลืนรังสีได้สูงเพื่อจำกัดการเลี้ยวเบนของรังสีบนผิวสารตัวอย่าง

และใช้ Slit กับ Parallel plate assembly ซึ่งกล่าวถึงแล้วในข้างต้น เพื่อลดการกระจายของลำรังสี ในการใช้สารตัวอย่าง ที่แบนราบพื้นที่เพียงส่วนน้อยเท่านั้นที่สามารถเลี้ยวเบนเป็นมุม 2θ ที่ถูกต้อง ส่วนรังสีที่ตกกระทบลงบนพื้นที่ของสารตัวอย่าง ซึ่งไม่ใช่ตำแหน่งบน Focusing circle ที่แท้จริง จะทำให้เกิดการขยายออกของ Peak และจุดกึ่งกลางของ Peak ถูกเลื่อนไปยังมุม 2θ ที่ต่ำกว่าความเป็นจริง มีการพิสูจน์แล้วว่าผลจากการใช้ สารตัวอย่าง ที่แบนราบมีผลน้อยเมื่อเทียบกับผลของขนาดลำรังสี เช่นการใช้ลำรังสีตกกระทบขนาด 1 องศา ออกจากโฟกัส ซึ่งผลจากการใช้ ลำรังสีที่เล็กนี้ทำให้สูญเสียความเข้มไป รูปที่ 2.20 แสดงให้เห็นถึงความแตกต่างของการใช้ สารตัวอย่าง ที่โค้งกับ สารตัวอย่าง ที่แบนราบของ Peak ของระนาบ 111 ของ TiC



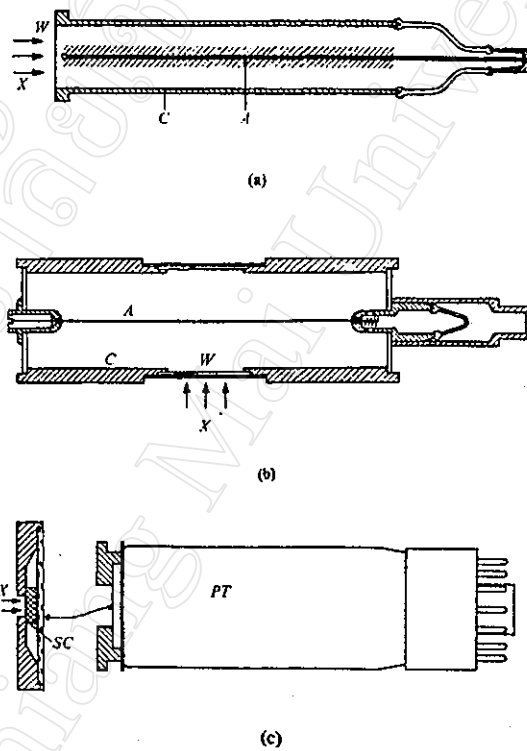
รูปที่ 2.20 แสดง Peak เมื่อใช้ สารตัวอย่าง ที่แบนราบกับ สารตัวอย่าง ที่โค้งของระนาบ 111ของ TiC

2.7.2 หัววัดรังสีเอ็กซ์

จากหลักการที่ว่าเมื่อมีรังสีตกกระทบบนอะตอม รังสีนั้นสามารถดึงเอา อิเล็กตรอนให้หลุดออกจากอะตอมและเปลี่ยนเป็นไอออนบวกได้ ดังนั้นถ้าผ่านรังสีเอ็กซ์เข้าไปใน ภาชนะปิดที่บรรจุก๊าซและมีขั้วอิเล็กโทรด 2 ขั้วคือ บวกและลบ จากนั้นอิเล็กตรอนที่หลุดจาก อะตอมจะถูกดึงไปที่อิเล็กโทรดบวก (Anode) และไอออนบวกจะถูกดึงไปที่ อิเล็กโทรดลบ (Cathode) ดังนั้นถ้ามีวงจรรายนอกมาต่อจากอิเล็กโทรดบวกไปยังอิเล็กโทรดลบก็จะมีกระแสเกิด ขึ้นได้ ภายใต้งานนี้กระแสที่ได้จะมีลักษณะเป็นห้วงมากกว่าที่จะเกิดแบบต่อเนื่อง ซึ่งแต่ละห้วง ที่เกิดขึ้นเป็นผลจากการ Ionization โดยไม่ต่อเนื่องของกลุ่มรังสีเอ็กซ์ โดยการใช้วงจรรายนอกเข้า

มาตอนนี้ทำให้สามารถวัดจำนวน Current pulse ที่เกิดขึ้นต่อหน่วยเวลาได้ และจำนวนของห้วงนี้ขึ้นกับความเข้มของรังสีเอกซ์ที่ผ่านเข้าไปใน Gas chamber เครื่องมือที่ใช้วัดนี้เรียกว่า หัววัดรังสีเอกซ์

หัววัดรังสีที่ใช้หลักการ Ionization ของแก๊สตามที่กล่าวมามี 2 ชนิดคือ Proportional counter และ Geiger counter อีกชนิดเรียกว่า Scintillation counter ซึ่งเมื่อมีรังสีเอกซ์ตกกระทบผลึกจะเกิดการเรืองแสงขึ้น ซึ่งแสงดังกล่าวจะถูกเปลี่ยนเป็น Current pulse ภายในหลอด Phototube หลักการนี้เรียกว่า X-ray Fluorescent ลักษณะโครงสร้างของเครื่องมือวัดทั้งสามชนิดแสดงในรูปที่ 2.21



รูปที่ 2.21 แสดง Counters ชนิดต่างๆ (a) Geiger counter (b) Proportional counter:

A-node, C-cathode, W-window, X-X-rays (c) Scintillation counter

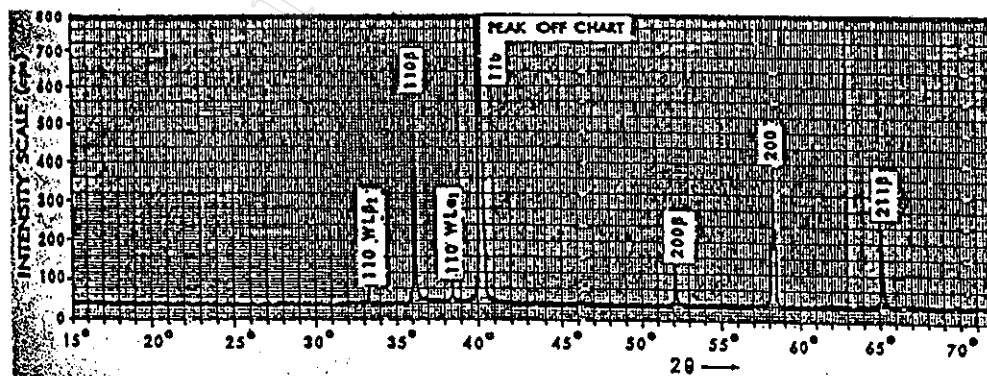
การวัดรูปแบบการแทรกสอดของสารตัวอย่าง โดยเครื่องวัดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ขึ้นอยู่กับชนิดของวงจรที่ใช้ในการวัดอัตรา Pulse ของ Counter โดยอัตราของ pulse อาจวัดได้ 2 วิธีที่แตกต่างคือ

1. Current pulse ที่ปล่อยออกมาถูกเปลี่ยนเป็นกระแสเรียบ (steady current) วัดด้วยเครื่องมือที่เรียกว่า Counting-rate meter ในหน่วย counts (pulse) ต่อวินาที ดังนั้นวงจรนี้แสดงถึงความต่อเนื่องของความเข้มของรังสีเอ็กซ์

2. Current pulse ที่วัดโดยวงจรทางไฟฟ้าที่เรียกว่า สเกลาร์ (scalar) อัตราเฉลี่ยของค่าที่วัดได้โดยจำนวน Pulse หารด้วยเวลาในการวัด วิธีการนี้ไม่ต่อเนื่อง เนื่องจากเวลาที่ใช้ในการวัดและ Scaling current ไม่สามารถเปลี่ยนความเข้มของรังสีเอ็กซ์ให้ต่อเนื่องได้

จากวงจรการวัดค่ากระแส 2 วิธีดังกล่าวทำให้ได้ 2 วิธีการในการหา Diffraction pattern ของสารที่ไม่ทราบชนิดจากดิฟแฟรกโตมิเตอร์ได้คือ

1. Continuous counter ติดตั้งใกล้เคียง $2\theta = 0^\circ$ และติดกับ Counting-rate meter ผลลัพธ์จากวงจรมักป้อนเข้าสู่ตัวบันทึกอัตโนมัติที่เร็วมาก (Fast-action automatic recorder) ชนิดหนึ่งที่ใช้ในการบันทึกการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิเหมือน Thermocouple จากนั้น หัววัดรังสีจะเคลื่อนที่ด้วยอัตราเร็วเชิงมุมคงที่เพื่อเพิ่มค่า 2θ จนกระทั่งถึงช่วงมุมที่กำหนดไว้ ขณะเดียวกับที่กระดาษกราฟในตัวบันทึกก็จะวิ่งด้วยความเร็วคงที่ ระยะตามความยาวของกราฟเป็น 2θ ตัวอย่างกราฟที่ได้ดังแสดงในรูปที่ 2.22 โดยแกน Y เป็น count ต่อวินาที และ Diffraction angle 2θ



รูปที่ 2.22 แสดง Diffraction pattern ที่ได้จาก automatic recorder ของผงทังสเตน

2. Intermittent counter ติดกับ Scaler และจัดค่า 2θ ให้คงที่ค่าหนึ่ง สำหรับเวลาหนึ่งๆ ที่เพียงพอที่จะให้ได้ค่า Count ของ Pulse ที่ได้จาก Counter ได้ถูกต้อง (เซต 2θ ให้ตรงกับจำนวนเวลาที่เครื่องจะอ่านค่า count of pulse ได้ถูกต้อง) จากนั้น หัววัดรังสี จะเคลื่อนที่ไปยังตำแหน่งมุมใหม่และทำงานซ้ำ ช่วงของ 2θ ทั้งหมดครอบคลุมวิธีนี้และกราฟ ของความเข้มและ 2θ ต้องพลอตด้วยมือ ขณะที่วัดสเปกตรัมการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ หัววัดรังสี อาจเคลื่อนที่เป็นจังหวะทีละหลายองศา แต่ค่าของ Line profile อาจต้องการวัดความเข้ม ณ ช่วง มุมละเอียดถึง 0.01 องศา วิธีการนี้ให้ Diffraction pattern ที่ช้ากว่า Rate-meter และ Automatic recorder แต่ให้ค่าความเข้มที่ละเอียดมากกว่า

เนื่องจาก XRD จะบันทึกสเปกตรัมการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ได้ที่ละเส้น โดยบันทึกเส้นแรกและเส้นอื่นๆตามมา จึงจำเป็นต้องควบคุมให้ความเข้มของรังสีตกกระทบให้คง ที่เพื่อให้วัด Intensity line ที่สัมพันธ์กันอย่างถูกต้อง ดังนั้นวงจรของหลอดรังสีเอกซ์จึงจำเป็นต้อง มีตัวควบคุมความต่างศักย์ (Voltage Stabilizer) และตัวควบคุมกระแสของหลอด (Tube-current stabilizer)

XRD ใช้วัดได้ทั้งที่อุณหภูมิสูงและต่ำ โดยการควบคุมสภาวะแวดล้อมของ สารตัวอย่าง ด้วยหน่วยควบคุมความร้อนหรือเย็น นับว่า XRD ให้ความสะดวกมากกว่าเครื่องมือ วัด Powder diffraction รุ่นเก่าอย่างกล้อง Debye-scherrer ที่ต้องใช้หลายขั้นตอนกว่าจะได้ผล ออกมาในขณะที่ XRD ใช้ขั้นตอนเดียวก็ได้ผลของสเปกตรัมการเลี้ยวเบนที่ถูกต้องมากกว่า แต่ราคาก็สูงกว่าอันเนื่องมาจากกลไกควบคุมเครื่องมือและอุปกรณ์ต่างๆ

2.8 การกรองรังสี

หลอดรังสีเอกซ์ที่ใช้ศึกษาการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ ทำงานโดยการปลดปล่อยรังสี ขาว (white x-rays) ออกมา ซึ่งรังสีดังกล่าวเป็นผลรวมของ $K_{\alpha_1}, K_{\alpha_2}, K_{\beta}$ และอาจจะปนเปื้อน ด้วย Spectrum K หรือ L ของสารอื่นที่เจืออยู่ในเป้าของหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ ซึ่งในการศึกษาการ เลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์นั้น มีความจำเป็นต้องกรองรังสีที่ไม่ต้องการออก เพื่อให้เหลือเพียงรังสีซึ่งมี ความยาวคลื่นเดียว (monochromatic beam) ซึ่งเทคนิคที่ใช้ในการกรองรังสีมีหลายวิธีด้วยกัน อาทิเช่น

1. Single filter
2. Balance filter
3. Crystal Monochromator

4. Total reflection

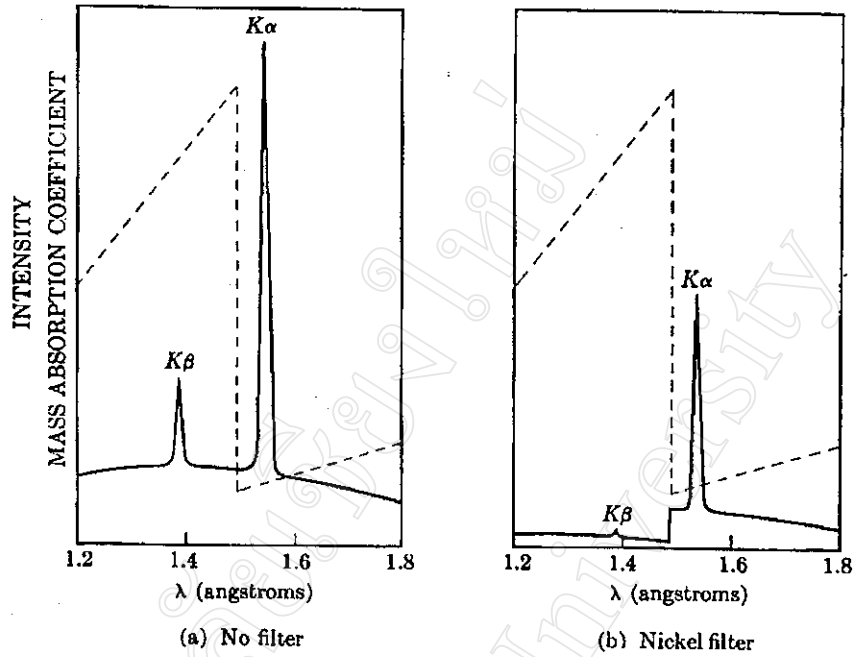
5. Pulse amplitude discrimination

ซึ่งจะกล่าวถึงในรายละเอียดเพียง 3 กรณีแรกเท่านั้น เนื่องจากเป็นวิธีที่แพร่หลายและใช้ได้ผลมากที่สุด

2.8.1 Single filter

เป็นที่ทราบกันดีว่าในงานของ X-rays diffraction ต้องการรังสีเอกซ์ที่มีความยาวคลื่นเดียวเท่าที่จะเป็นไปได้ ถ้าปรับค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าในหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ให้มีความมากกว่าค่า V_K รังสีเอกซ์ที่ออกมาจะมีทั้ง K_α - line ซึ่งมีความเข้มมากที่สุด พร้อมทั้งยังมี K_β - line ซึ่งมีความเข้มรองลงมา อีกทั้งยังมีรังสีเอกซ์ชนิดต่อเนื่องรวมอยู่ด้วย ซึ่งในการศึกษานั้นต้องการเพียง K_α - line เพียงเส้นเดียว จึงมีความจำเป็นต้องใช้ ฟิลเตอร์ (filter) กันเพื่อเป็นตัวกรองรังสีที่ไม่ต้องการออก ซึ่งฟิลเตอร์ดังกล่าวจะทำด้วยสารที่มี K-absorption edge อยู่ระหว่างความยาวคลื่นของ K_α และ K_β ของสารที่เป็นเป้า สารดังกล่าวนี้โดยมากจะมี atomic number น้อยกว่าสารที่เป็นเป้าอยู่ 1 หรือ 2

ฟิลเตอร์ที่เลือกพอเหมาะแล้วจะทำหน้าที่ดูดกลืน K_β มากที่สุด ส่วน K_α ดูดกลืนได้เพียงเล็กน้อยเนื่องจากการเปรียบเทียบค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนมากขึ้นอย่างทันทีทันใดเกิดขึ้นที่ความยาวคลื่นที่มากกว่า K_β และน้อยกว่า K_α ในรูปที่ 2.23 แสดงถึงสเปกตรัมของโลหะทองแดง ($Z=29$) ที่ใช้เป็นเป้าและถูกกรองโดยโลหะนิกเกิล ($Z=28$) ถ้าใช้ ฟิลเตอร์ หนาอัตราส่วนของความเข้มระหว่าง K_β กับ K_α ที่ออกจากฟิลเตอร์จะมีค่าต่ำ แต่การใช้ฟิลเตอร์ก็ยังไม่สมบูรณ์นัก เนื่องจากไม่ว่าจะใช้ ฟิลเตอร์ที่ความหนาสักเท่าใด K_β ก็ยังสามารถทะลุผ่านออกมาได้บ้าง ในทางปฏิบัติพบว่าความเข้มของ K_α - line ถึงครึ่งหนึ่งของค่าเดิมจะสามารถทำให้อัตราส่วนของความเข้ม K_β และ K_α ลดลงจาก 1/9 ในรังสีตกเมื่อผ่านฟิลเตอร์เปลี่ยนเป็น 1/500 เมื่อผ่านออกมาจาก ฟิลเตอร์ซึ่งถือได้ว่าเป็นรังสีที่มีความยาวคลื่นเดียว รายละเอียดเกี่ยวกับอัตราส่วนความเข้มของ $\frac{K_\beta}{K_\alpha}$ จะกล่าวในหัวข้อถัดไป



รูปที่ 2.23 แสดงการเปรียบเทียบ Spectra จากโลหะทองแดง a.เมื่อยังไม่ใส่ฟิลเตอร์
 b.เมื่อใส่ निकเกิลฟิลเตอร์ (Ni filter) เส้นประแสดงค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืน
 ของโลหะ निकเกิล

ตารางที่ 2.1 แสดงชนิดและข้อมูลของ ฟิลเตอร์ ที่ใช้ในการกรองรังสี K_{β} จากหลอดกำเนิดรังสี
 เอกซ์ชนิดเป้าต่างๆ⁽¹⁾

Target	Filter	Incident beam $\frac{I(K_{\alpha})}{I(K_{\beta})}$	Filter thickness For $\frac{I(K_{\alpha})}{I(K_{\beta})} = \frac{500}{1}$ in trans. Beam (mg/cm ²)	$\frac{I(K_{\alpha})_{trans.}}{I(K_{\alpha})_{incident}}$
Mo	Zr	5.4	77	0.29
Cu	Ni	7.5	18	0.42
Co	Fe	9.4	14	0.46
Fe	Mn	9.0	12	0.48
Cr	V	8.5	10	0.49

ตามตาราง 2.1 จะแสดงฟิลเตอร์ที่ใช้สำหรับ หลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ชนิด เบ้าต่างๆที่ใช้ในการทดลองทั่วไป พร้อมทั้งแสดงค่าความหนาที่ต้องการและ Transmission factor สำหรับ K_{α} -line วัสดุที่ใช้ทำฟิลเตอร์มักจะเป็นแผ่นบางๆหรือป็นเป็นผงอัดลงบนกระดาษอีก ชั้นหนึ่ง

2.8.1.1 อัตราส่วนความเข้มของ $\frac{K_{\beta}}{K_{\alpha}}$

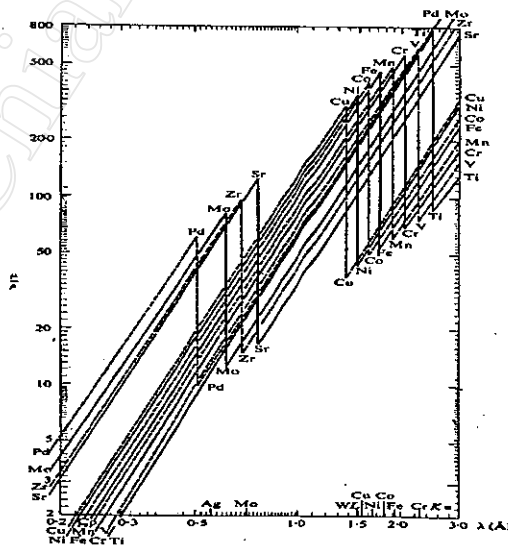
$K_{\alpha_2} : K_{\alpha_1}$ และ $K_{\beta_1} : K_{\alpha_1}$ เป็นความเข้มรวมบริเวณผิวหน้าของเบ้า ดังแสดงในตารางที่ 2.2 ในการหาค่าความหนาและตำแหน่งที่เหมาะสมของฟิลเตอร์ นั้นจำเป็น จะต้องทราบถึงค่าอัตราส่วนของ $K_{\beta_1} : K_{\alpha_1}$ ที่ต้องการ และต้องทำการทดลองเพื่อหาค่าอัตราส่วน ของ $K_{\beta_1} : K_{\alpha_1}$ เมื่อไม่ใช้ ฟิลเตอร์ ภายใต้สภาวะเดียวกันซึ่งจะได้ค่าความหนาของฟิลเตอร์ โดยการคำนวณจากสมการ

$$t = \left\{ \ln \left(\frac{K_{\beta_1}}{K_{\alpha_1}} \right)_{unfilt} * \left(\frac{K_{\alpha_1}}{K_{\beta_1}} \right)_{filter} \right\} / (\mu_{K_{\beta_1}} - \mu_{K_{\alpha_1}}) \quad (2.21)$$

โดย t คือ ความหนาของฟิลเตอร์ (cm.)

μ คือ สัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงเส้นของฟิลเตอร์ ในแต่ละค่าความยาวคลื่น

โดยพิจารณาจาก รูปที่ 2.24 แสดงถึงค่า $\frac{\mu}{\rho}$ ซึ่งตัวอย่างผลของการคำนวณหาค่าความหนาของ ฟิลเตอร์แสดงในตารางที่ 2.2



รูปที่ 2.24 แสดงกราฟค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงเส้นของสารในแต่ละความยาวคลื่น

ตารางที่ 2.2 แสดงถึงผลการคำนวณค่าของ β - filter ที่ใช้เพื่อลดอัตราส่วนของ $K_{\beta_1} : K_{\alpha_1}$ ลง เป็น 1/100 และ 1/500 โดยใช้หลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ที่เป้าแตกต่างกัน 7 ชนิด⁽²⁾

Target Element	β -filter	$\frac{K_{\beta_1}}{K_{\alpha_1}} = \frac{1}{100}$ %loss				$\frac{K_{\beta_1}}{K_{\alpha_1}} = \frac{1}{500}$ %loss			
		Mm	mils	g/cm ²	K_{α_1}	Mm	Mils	g/cm ²	K_{α_1}
Ag	Pd	0.062	2.4	0.074	60	0.092	3.6	0.110	74
	Rh	0.062	2.4	0.077	59	0.092	3.6	0.114	73
Mo	Zr	0.081	3.2	0.053	57	0.120	4.7	0.078	71
Cu	Ni	0.015	0.6	0.013	45	0.023	0.9	0.020	60
Ni	Co	0.013	0.5	0.011	42	0.020	0.8	0.017	57
Co	Fe	0.012	0.5	0.009	39	0.019	0.7	0.015	54
Fe	Mn	0.011	0.4	0.008	38	0.018	0.7	0.013	53
	Mn ₂ O ₃	0.027	1.1	0.012	43	0.042	1.7	0.019	59
	MnO ₂	0.026	1.0	0.013	45	0.042	1.6	0.021	61
Cr	V	0.011	0.4	0.007	37	0.017	0.7	0.010	51
	V ₂ O ₅	0.036	1.4	0.012	48	0.056	2.2	0.019	64

ตารางที่ 2.3 แสดงถึงผลของ Zr filter ที่มีความหนาแตกต่างกันโดยใช้ฟิลเตอร์ นี้กรองรังสีที่ออกจากหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ชนิดเป้า Mo ซึ่งให้ความต่างศักย์ 35 kV โดยใช้วัสดุสารตัวอย่างคือ Si(333) และใช้หัววัดชนิดสารเรืองแสง ส่วนตารางที่ 2.4 แสดงค่าเช่นเดียวกันกับในตารางที่ 2.3 แต่เป็นกรณีของ Ni filter ซึ่งใช้กรองรังสีที่ออกจากหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ชนิดเป้าทองแดง

ตารางที่ 2.3 แสดงผลของ Zr filter ที่มีต่อความเข้มของ Mo spectrum ⁽²⁾

Zr Filter thickness		Effect on MoK_{α_1}		Effect on MoK_{β_1}		$100 \left(\frac{K_{\beta_1}}{K_{\alpha_1}} \right)_{peak}$
Mm	mils	Relative peak intensity	Percentage reduction	Relative peak intensity	Percentage reduction	
Unfiltered		100.0	-	29.4	-	29.4
0.028	1.1	75.6	24.4	8.1	72.4	10.7
0.056	2.2	59.2	40.8	2.1	92.8	3.5
0.084	3.3	45.2	54.8	0.6	98.1	1.3
0.112	4.4	33.9	66.1	0.2	99.4	0.6

mils=0.001 inch

ตารางที่ 2.4 แสดงผลของ Ni filter ที่มีต่อความเข้มของ Cu spectrum ⁽²⁾

Ni Filter Thickness		Effect on CuK_{α_1}		Effect on CuK_{β_1}		$100 \left(\frac{K_{\beta_1}}{K_{\alpha_1}} \right)_{peak}$
Mm	mils	Relative peak intensity	Percentage reduction	Relative peak intensity	Percentage reduction	
Unfiltered		100.0	-	21.4	-	21.4
0.08	0.3	75.5	24.5	4.1	95.9	5.4
0.013	0.5	66.0	34.0	1.9	98.1	2.9
0.018	0.7	55.0	45.0	0.6	99.4	1.1
0.025	1.0	41.4	59.6	0.1	99.9	0.2

mils=0.001 inch

ตำแหน่งการวางฟิลเตอร์เป็นอีกปัจจัยหนึ่งที่มีผลต่อการวัด กล่าวคือ หากวางตำแหน่ง ของฟิลเตอร์ ระหว่างหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์กับสารตัวอย่าง จะต้องปิดหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ให้สนิทเพื่อหลีกเลี่ยงไม่ให้เกิดการเลี้ยวเบนของตัวฟิลเตอร์เอง ซึ่งอาจจะทำให้เกิดการผิดพลาดในการทดลองได้ เนื่องจากหัววัดรังสีได้บันทึกการเลี้ยวเบนของฟิลเตอร์ดังกล่าว

2.8.1.2 ประโยชน์ของฟิลเตอร์

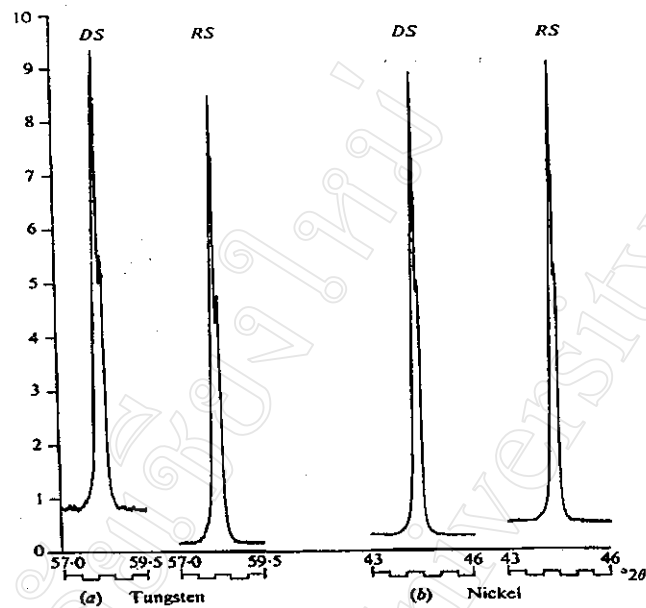
ฟิลเตอร์ที่ใช้ในการ แกะไขหรือปรับปรุงสเปกตรัมของรังสีเอกซ์ โดยการไม่ยอมให้รังสีบางความยาวคลื่นผ่านไปหรือผ่านไปแต่ดูดซับความเข้มไว้ส่วนหนึ่ง ซึ่งรังสีที่ถูกฟิลเตอร์กรองไว้นั้นมีด้วยกันหลายชนิด ดังจะแสดงต่อไปนี้

1. β -line ลง ความเข้มของ β -line ต้องทำให้ลดลงเพื่อหลีกเลี่ยงการซ้อนทับกันของ สเปกตรัมซึ่งจะทำให้การวิเคราะห์สารตัวอย่างมีความยุ่งยากมากขึ้น
2. Continuum ถูกทำให้ความเข้มลดลงโดยฟิลเตอร์แต่ไม่ได้หมายความว่า เป็นการกำจัดออกไป โดยที่บริเวณที่มีการลดลงมากที่สุด คือบริเวณที่ความยาว คลื่นต่ำกว่า K-absorption edge ของฟิลเตอร์ การลดลงของรังสีต่อเนื่องจะเกิดขึ้นมากในหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ชนิดเป่ามีมวโลหะตอมน้อยกว่า
3. ลดความเข้มของ Contaminate lines spectrum ซึ่งเกิดจากธาตุที่ปนเปื้อนมากับธาตุที่ใช้เป็นเป้าในหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์โดยสเปกตรัมดังกล่าวนี้จะถูกดูดซับโดยฟิลเตอร์ตัวอย่างเช่น Ni filter ซึ่งใช้ในการกรองรังสีจากหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ชนิดเป่าทองแดง สามารถดูดซับ L spectrum ของ ทั้งสแตนซึ่งปนเปื้อนมากับทองแดงที่เป็นเป้าได้
4. ลดความเข้มของ X-ray Fluorescent ทั้งรังสีต่อเนื่องและเส้นสเปกตรัมต่างก็เป็นสาเหตุให้สารตัวอย่างเกิดการเรืองแสงขึ้น นั่นคือทำให้สารตัวอย่างปลดปล่อย K และ L spectrum ของธาตุที่เป็นองค์ประกอบในสารตัวอย่างเองออกมา โดยที่ธาตุที่มีความยาวคลื่นของ Fluorescent มาก ($\lambda > 2.75A^0$) จะถูกดูดซับโดยอากาศจนหมด หรืออาจจะถูกดูดซับโดย counter tube window ซึ่งไม่อาจจะสังเกตได้แต่เมื่อใช้ระบบสุญญากาศซึ่งมีส่วนประกอบเป็น H_2 หรือ He ประกอบกับการใช้ counter tube window ที่มีการดูดซับต่ำ จะทำให้สังเกตการเรืองแสงของสารตัวอย่างดังกล่าวได้

เมื่อสารตัวอย่างเกิดการเรืองแสงซึ่งสังเกตได้ขึ้น ตำแหน่งการวางฟิลเตอร์จะมีผลต่อ background ของรังสีเอ็กซ์ กล่าวคือ ถ้าวางฟิลเตอร์ระหว่างหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ กับสารตัวอย่าง ฟิลเตอร์จะดูดซับความเข้มของรังสีเอ็กซ์หลักที่ออกมาจากหลอดกำเนิดทำให้ความเข้มของรังสีเอ็กซ์ลดต่ำลง ซึ่งเป็นสาเหตุให้เกิดการ X-rays fluorescent ลดลงด้วย และเมื่อวางฟิลเตอร์ ระหว่างสารตัวอย่างกับหัววัดรังสี ฟิลเตอร์จะดูดซับรังสี Fluorescent บางส่วนจากสารตัวอย่างซึ่งเป็นการลดความเข้มของรังสี Fluorescent เช่นกัน การวางฟิลเตอร์ที่ตำแหน่งใดนั้นก็มีปัจจัยที่ต้องพิจารณาหลายประการ อาทิเช่น ชนิดของธาตุที่ใช้เป็นเป้า หรือชนิดของธาตุองค์ประกอบในสารตัวอย่างดังแสดงในรูปที่ 2.25a และ 2.25b

ในการทดลองควรเลือกหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ชนิดที่ ฟิลเตอร์มีความสามารถในการดูดซับรังสีได้มากซึ่งจะทำให้สามารถดูดซับรังสี Fluorescent ที่เกิดจากสารตัวอย่างได้ เช่นใช้หลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ชนิดเป้า Cu และสารตัวอย่างเป็น Cu ในกรณีนี้จะทำให้เกิดรังสี Fluorescent ของ CuK ซึ่งสามารถทะลุผ่านนิกเกิลฟิลเตอร์ได้ แต่ถ้าเป็นหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ชนิดเป้า Co รังสี Fluorescent ของ CuK จะถูกดูดซับโดย Fe ซึ่งเป็นฟิลเตอร์ของหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ชนิดนี้

นอกจากนี้การใช้ ฟิลเตอร์ตัวที่สองยังสามารถลดความเข้มของรังสี Fluorescent background ได้ ตัวอย่างเช่น ใช้สารตัวอย่างเป็น Ge รังสีต่อเนื่องจากหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ชนิดเป้า Cu จะทำให้เกิดรังสี Fluorescent ของ GeK ซึ่งมีความเข้มสูงและสามารถทะลุผ่าน Ni filter ได้ จึงจำเป็นต้องใช้ Zn filter เพิ่มเข้าไปในระบบ ซึ่งการเพิ่มฟิลเตอร์ดังกล่าวทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงอัตราส่วนของ Peak/background ใน CuK_{α} โดยจะทำให้ความเข้มของ K_{α} ลดลงเล็กน้อย แต่สามารถดูดซับรังสี Fluorescent ของ GeK ออกไปได้ (GeK มี $\lambda = 1.25\text{\AA}$ และ Zn มี K-absorption edge = 1.28\AA)



- รูปที่ 2.25(a) แสดงผลการ XRD ของผงทังสเตนที่เส้น 200 โดย Ni filter วางอยู่เหนือตำแหน่ง Divergence slit (DS หมายถึงการวางฟิลเตอร์ระหว่างหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์กับสารตัวอย่าง) ซึ่งจะให้ค่าความเข้มของ Background มากกว่าการวาง ฟิลเตอร์ที่เหนือตำแหน่ง Receiving slit (RS หมายถึงการวาง ฟิลเตอร์ระหว่างสารตัวอย่างกับหัววัดรังสี) ถึง 5 เท่า เนื่องจาก Ni ฟิลเตอร์ สามารถดูดซับความเข้มของ WL fluorescent ซึ่งเกิดจากรังสี Continuum
- (b) แสดงผลการ XRD ของผง นิกเกิลที่เส้น 111 โดย Ni filter วางที่ตำแหน่ง DS จะให้ความเข้มของ Background น้อยกว่าในกรณีที่วางตำแหน่ง Ni filter ที่ RS อยู่ประมาณ 50% เนื่องจาก Ni filter ได้ดูดซับรังสีในช่วง CuK_{β} ออกซึ่งรังสีดังกล่าวเป็นสาเหตุของการเกิด NiK fluorescent ซึ่งมีความเข้มสูง

5. X-rays scattering background ของรังสีเอกซ์ซึ่งมีสาเหตุมาจากการกระเจิงของ Primary spectrum โดยจะมีประสิทธิภาพในการกระเจิงแตกต่างกันไป ขึ้นอยู่กับสารตัวอย่าง และฟิลเตอร์สามารถลดความเข้มของ Background ได้มากหรือน้อยเพียงใดขึ้นอยู่กับสมบัติการดูดซับของ ฟิลเตอร์นั้นๆ

2.8.1.3 การเตรียมฟิลเตอร์

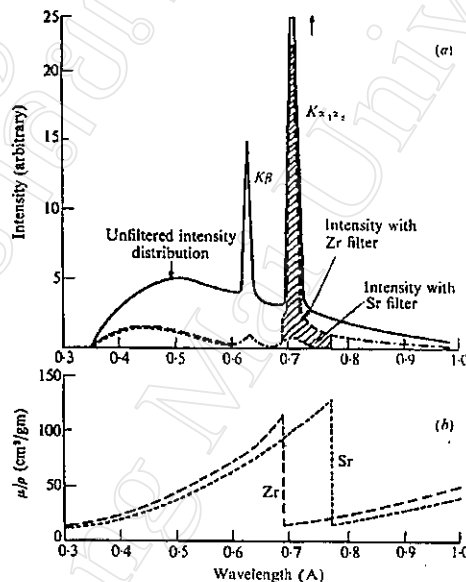
ในบางกรณีฟิลเตอร์ที่ใช้งานเฉพาะอย่าง จำเป็นจะต้องมีวิธีการในการเตรียมที่แตกต่างกันออกไป และฟิลเตอร์ต้องได้รับการตรวจสอบอยู่เสมอโดยจะต้องมีความมั่นใจวาวและปราศจากรอยร้าวหรือรอยแตก ซึ่งรอยร้าวหรือรอยแตกดังกล่าวนั้นสามารถทำให้ลดลงได้ โดยการใช้ฟิลเตอร์ 2 แผ่นบางๆประกบกัน แต่วิธีการนี้จะทำให้ความเข้มของรังสีเอ็กซ์ลดลงมาก อีกทั้งจำเป็นต้องมีแผ่นคั่นระหว่าง ฟิลเตอร์ทั้งสอง ซึ่งต้องทราบถึงพฤติกรรมการดูดซับรังสีของแผ่นรองนั้นด้วย ทำให้มีความซับซ้อนมากยิ่งขึ้น ดังที่กล่าวข้างต้นแล้วว่ามีวิธีการเตรียม ฟิลเตอร์หลายวิธีที่แตกต่างกัน ซึ่งมีรายละเอียดดังนี้

1. K_{β} filter ที่ดีนั้นควรประกอบด้วยธาตุบริสุทธิ์ ซึ่งทำให้มีลักษณะเป็นแผ่นบาง
2. แผ่นฟิลเตอร์ที่มีลักษณะบางและแข็งแรง สามารถทำได้โดยการขัดด้วยเครื่องขัดโลหะและทำให้ได้รูปร่างที่ต้องการโดยใช้สารละลายกรดเจือจาง
3. สารที่จะนำมาใช้เป็นฟิลเตอร์ อาจจะถูกชุบด้วยไฟฟ้าหรือทำให้ตกตะกอนลงบนกระดาษฟรอยด์จนมีความหนาที่ต้องการ ซึ่งกระดาษฟรอยด์นั้นสามารถดึงหรือละลายออกไปในภายหลังได้
4. ธาตุที่เปราะแตกหักง่าย อาทิเช่น Mn หรือ V สามารถที่จะเตรียมได้โดยบดสารดังกล่าวในครกหินเพื่อทำให้เป็นผงละเอียดจากนั้นนำไปทำเป็นแผ่นฟิล์ม โดยใช้ Collidion หรือสารยึดเกาะชนิดอื่น แต่วิธีการนี้จะให้ค่าความหนาที่ต้องการได้ค่อนข้างยาก
5. หากธาตุนั้นไม่เหมาะที่จะใช้เป็นฟิลเตอร์อาจจะใช้สารประกอบของธาตุนั้นกับธาตุเบา อาทิเช่น O มาเป็นฟิลเตอร์แทนได้ โดยการกระจายสารนั้นลงบนแผ่นกระดาษ ซึ่งเคลือบด้วยเซลลูลาร์ หรือให้สารนั้นแขวนลอยอยู่ใน Paraffin Block ซึ่งตัดเป็นแผ่นยาวตามความต้องการในภายหลัง หรืออาจจะใช้สารนั้นเคลือบลงบนแผ่น Cellophane หรือบน Be Foil
6. การเตรียมทางเคมีทำได้โดยการนำกระดาษจุ่มลงในสารละลาย ของสารประกอบที่ใช้เป็นฟิลเตอร์ จากนั้นนำไปทำให้แห้ง
7. การเตรียมโดยการผสมสารประกอบที่ใช้เป็นฟิลเตอร์กับขี้ผึ้ง จากนั้นกดลงไปบนพิมพ์ ซึ่งทำด้วยหินเกลือ แล้วจึงนำไปให้ความร้อนที่ประมาณ $50\text{ }^{\circ}\text{C}$ เพื่อละลายหินเกลือออกไป

8. การเตรียมโดยให้สารประกอบที่ใช้เป็นฟิลเตอร์คลุกเคล้ากับสารซึ่งมีจุดหลอมเหลวสูงเช่น Paraffin หรือ Wax แล้วนำไปกั้นระหว่างแผ่นแก้วสองแผ่น

2.8.2 Balance filter

เป็นการใช้ฟิลเตอร์ 2 ชนิดร่วมกันโดยที่ ฟิลเตอร์ ทั้งสองต้องมีความหนาและ Absorption edge ที่เหมาะสมกล่าวคือฟิลเตอร์ชนิดแรกต้องมี Absorption edge ต่ำกว่าความยาวคลื่นของ $K_{\alpha_1\alpha_2}$ อีกชนิดหนึ่งต้องมี Absorption edge สูงกว่าความยาวคลื่นของ $K_{\alpha_1\alpha_2}$ ดังแสดงในรูปที่ 2.26 a และ รูปที่ 2.26 b



รูปที่ 2.26 (a) แสดงความเข้ม Spectrum ของรังสีเอ็กซ์จากหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ชนิดเป้า Mo ก่อน และหลังการใส่ Zr และ Sr Filter
 (b) แสดงสัมประสิทธิ์การดูดกลืนรังสีของ Zr และ Sr Filter

การกระจายความเข้มของความยาวคลื่นในหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ชนิดเป้า Mo จะถูกดูดซับโดย Zr Filter ซึ่งจะลดความเข้มของ $K_{\alpha_1\alpha_2}$ ลงไปประมาณ 20-30% ของรังสีทั้งหมดและทำให้ความเข้มของ K ลดลงเป็นอย่างมากส่วนฟิลเตอร์ ตัวที่สองคือ Sr Filter จะดูดซับความเข้มของ K เช่นเดียวกับ Zr Filter ทั้งสองชนิดจะดูดซับความยาวคลื่นที่กระจายอยู่ ยกเว้นบริเวณที่อยู่ระหว่าง Absorption edge ทั้งสอง ซึ่งเป็นตำแหน่งของความยาวคลื่น $K_{\alpha_1\alpha_2}$ ตารางที่

2.5 แสดงค่าความหนาของ ฟิลเตอร์ 2 ชนิดที่ใช้ในการกรองรังสี จากหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ทั่วไป โดยฟิลเตอร์ ที่ให้อยู่ในรูปของแผ่น Foil บางๆ โดยความหนาของฟิลเตอร์ ที่ระบุในตารางจะ ลดความเข้มของ K_{α_1} ลง 67% เพื่อการตรวจวัดที่ถูกต้องฟิลเตอร์ จะได้รับการปรับความ เหมาะสมโดยการทดลอง (Trial and Error)

ตารางที่ 2.5 แสดงค่าความหนาและชนิดของ Balance filter ที่ใช้กับหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ ชนิดต่างๆ⁽²⁾

Target Material	filter pair		(A) Thickness			(B) Thickness		
	(A)	(B)	mm	mils*	g/cm ²	mm	mils*	g/cm ²
Ag	Pd	Mo	0.0275	1.08	0.033	0.039	1.53	0.040
Mo	Zr	Sr	0.0392	1.54	0.026	0.104	4.09	0.027
Mo	Zr	Y	0.0392	1.54	0.026	0.063	2.49	0.028
Cu	Ni	Co	0.0100	0.38	0.0089	0.0108	0.42	0.0095
Ni	Co	Fe	0.0094	0.37	0.0083	0.0113	0.45	0.0089
Co	Fe	Mn	0.0098	0.38	0.0077	0.0111	0.44	0.0083
Fe	Mn	Cr	0.0095	0.37	0.0071	0.0107	0.42	0.0077
Cr	V	Ti	0.0097	0.38	0.0059	0.0146	0.58	0.0066

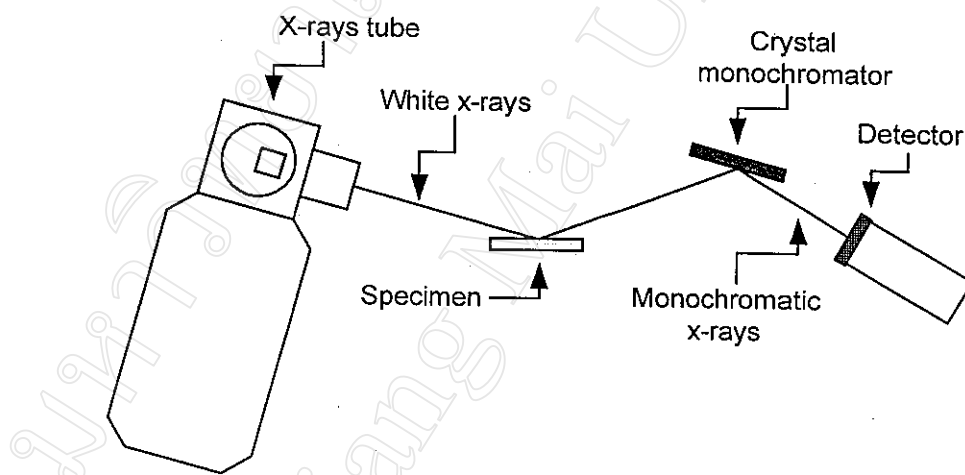
*mils=0.001 inch

2.8.3 Crystal monochromator

จะเห็นได้ว่าการใช้ฟิลเตอร์ชนิดต่างๆเพื่อกรองรังสีเอกซ์นั้นเป็นเพียงการลด ความเข้มของรังสีที่ความยาวคลื่นของ K ซึ่งเป็นรังสีที่ไม่ต้องการลงดังแสดงในภาพที่ 2.23 ดังนั้นรังสีที่ได้รับการกรองโดยวิธีนี้จึงไม่เป็นรังสีที่มีความยาวคลื่นเดียวที่แท้จริง อีกทั้งฟิลเตอร์แต่ละชนิดนั้นสามารถใช้กรองรังสี K จากหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ได้เพียงชนิดเป้าเดียวเท่านั้นเมื่อ เปลี่ยนชนิดเป้าของหลอดกำเนิดรังสีเอกซ์ ก็จำเป็นต้องเปลี่ยนชนิดของ ฟิลเตอร์ ที่ใช้กรองรังสีด้วย

Crystal monochromator เป็นเทคนิคหนึ่งที่ใช้ในการกรองรังสีเอ็กซ์ที่สามารถทำให้รังสีซึ่งผ่านการกรองโดยวิธีนี้เป็นรังสีที่มีความยาวคลื่นเดียวอย่างแท้จริง โดยอาศัยหลักการที่ว่าเมื่อฉายรังสีเอ็กซ์เข้าสู่สารตัวอย่าง จะเกิดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ขึ้นในมุมต่างๆ ซึ่งสามารถอธิบายได้โดยสมการของแบรกก์ ($2d \sin \theta = n\lambda$) จะเห็นได้ว่าความสัมพันธ์ระหว่าง θ และ λ ในสมการของแบรกก์มีลักษณะเป็นฟังก์ชันแบบ 1-1 นั่นคือที่มุม θ หนึ่งจะให้ค่า λ เพียงค่าเดียวเท่านั้น ดังนั้นรังสีเอ็กซ์ที่ได้จากมุมนั้นๆ จึงเป็นรังสีเอ็กซ์ที่มีความยาวคลื่นเดียว (Monochromatic X-rays)

โดยการประยุกต์หลักการดังกล่าวข้างต้นสามารถสร้างชุดอุปกรณ์การกรองรังสีโดยอาศัยการเลี้ยวเบนผ่านผลึกเชิงเดี่ยว ซึ่งได้คำนวณหาความมุมของการเลี้ยวเบนที่ความยาวคลื่น K_α จากสมการของแบรกก์ แล้วนำรังสีที่ได้นั้นเข้าสู่ระบบการตรวจวัดปกติ ดังแสดงในรูปที่ 2.27



รูปที่ 2.27 แสดงแผนภาพจำลองการวัด XRD โดยอาศัยผลึกเชิงเดี่ยวเป็นตัวกรองรังสี

ตารางที่ 2.6 แสดงผลการทรงรังสีของผลึกแต่ละชนิด

Crystal	Reflection	Spacing in Å	Properties of reflection			Properties of crystal		
			Peak intensity	Breadth	Crystal imperfection	Stability	Mechanical properties	
β alumina	0002	11.24	Weak	Moderate	Great	Perfect	Hard, brittle	
	0004	5.62	Weak-medium					
Mica	001	10.1	Weak	Small	Negligible for selected specimens	Fair	Flexible, easily cleaved	
	004	2.53						
Gypsum	020	7.60	Medium-strong	Very small	Good specimen hard to find	Poor	Soft, Flexible	
Pentaerythritol	002	4.40	Very strong	Moderate	Great	Poor	Soft, easily deform	
Quartz	1011	3.35	Weak-medium	Very small	Negligible	Perfect	Can be easily bent	
	200	3.29	Medium-strong	Moderate	Negligible	Slightly deliquescent		
Fluorite	111	3.16	Medium-strong	Moderate	Small	Perfect	Moderately hard	
	220	1.94	Very strong					
Urea nitrate	002	3.14	Strong	Very large	Very great	Very poor	Very easily deform	
Calcite	200	2.82	Medium	Small	Negligible	Perfect	Moderate soft	
Rock salt	200	2.82	Medium-strong	Large	Great	Slightly deliquescent	Can be plastically bent in warm supersaturated saline	
Aluminium	111	2.33	Very strong	Moderate	-	Good	Soft, can be seeded and grown to shape room temp.	
Diamond	111	2.05	Weak	Very small	Negligible	Perfect	Very hard	
	200	2.01	Very strong	Small	Negligible	Perfect		
Lithium fluoride	200	2.01	Very strong	Small	Negligible	Perfect	Hard, can be plastically bent at high temp.	

ปัญหาหนึ่งของการกรองรังสีด้วยวิธีนี้คือ ความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่ผ่านการกรองด้วยวิธีนี้มีค่าค่อนข้างต่ำ ซึ่งวิธีแก้ปัญหานี้ทำได้โดยการเลือกใช้ห้วงรังสีเอ็กซ์ที่มีการตอบสนองต่อความยาวคลื่นของ K_{α} ที่สูงหรือการเพิ่มระยะเวลาในการวัดให้มากขึ้น รวมถึงการเลือกใช้ผลึกที่จะนำมาเป็นตัวกรองรังสีซึ่งผลึกแต่ละชนิดมีความเหมาะสมในการใช้เป็น Crystals Monochromator แตกต่างกันไป ดังแสดงในตารางที่ 2.6

ผลึกที่ใช้ในการสร้าง Crystal monochromator ควรจะมีขนาดระหว่าง 2-10 มิลลิเมตร และมีความหนาไม่ต่ำกว่า 1 มิลลิเมตร ระบายที่ให้ความเข้มของกาวเคลือบสูงที่สุด ควรเป็นระบายที่ขนาดใกล้เคียงกับธรรมชาติของผลึกหรือระบายที่ตัวเตรียมไว้ และผลึกดังกล่าวนั้นควรจะมี ความแข็งแรงทนทานต่อการสัมผัสกับรังสีเอ็กซ์เป็นเวลานานโดยไม่มีการสึกกร่อนหรือเปลี่ยนรูปไป ซึ่งทั้งนี้รวมถึงการไม่สึกกร่อนในบรรยากาศด้วย

ในการสร้างระบบการกรองรังสีด้วยเทคนิค Crystal monochromator นี้ ถึงแม้ว่าผลึกที่ใช้จะเป็นผลึกชนิดเดียวกันก็ตาม ผลที่ได้จากการกรองนั้นอาจมีความแตกต่างกันทั้งนี้เนื่องจากสมบัติของผลึกแต่ละชั้นมีความแตกต่างกันออกไป ซึ่งขึ้นอยู่กับขั้นตอนการเตรียมผลึกดังกล่าว โดยความแตกต่างกันของผลึกส่วนใหญ่นั้นจะอยู่ที่ผิวหน้าของตัวผลึกเอง ซึ่งหมายความว่า การเตรียมผิวหน้าของผลึกมีความสำคัญอย่างยิ่งเพราะจะส่งผลถึงความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่ผ่านระบบการกรองนี้