

ภาคผนวก (ข)

ทฤษฎีรังสีเอกซ์เพิ่มเติม

1. การปลดปล่อยรังสีเอกซ์ต่อเนื่อง

รังสีเอกซ์ต่อเนื่องเป็นผลที่เกิดจากอิเล็กตรอน หรืออนุภาคที่มีพลังงานสูง เช่น โปรตอน หรือ อนุภาคอัลฟา มีการสูญเสียพลังงานเนื่องจากวิ่งผ่านนิวเคลียสภายใต้แรงของคูโลมบ์ ในการเกิดอันตรกิริยาอิเล็กตรอนเมื่อเคลื่อนเข้าใกล้นิวเคลียสจะเคลื่อนที่เป็นเส้นโค้งทำให้สูญเสียพลังงาน และปลดปล่อยรังสีเอกซ์ต่อเนื่องลักษณะนี้ เรียกว่า “รังสีเบรมสตราลุง” การปลดปล่อยรังสีเอกซ์ต่อเนื่องสามารถอธิบายได้ด้วยทฤษฎีแม่เหล็กไฟฟ้า จากทฤษฎีที่กล่าวว่า เมื่อประจุที่เคลื่อนที่ด้วยความเร่งมันจะปลดปล่อยคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าออกมา ในกรณีอิเล็กตรอนที่มีพลังงานสูงเข้าชนเป้า จะทำให้อิเล็กตรอนเกิดความหน่วงอย่างฉับพลัน ขณะที่เคลื่อนที่ผ่านเข้าไปยังเนื้อสารของเป้า ความเร่งของอิเล็กตรอนมีค่าคิดลบมาก ทำให้เกิดการแผ่รังสีเอกซ์แบบพัลส์

สเปกตรัมรังสีเอกซ์ต่อเนื่องที่เกิดจากอิเล็กตรอนภายในหลอดรังสีเอกซ์มี ความยาวคลื่นต่ำสุด λ_{\min} ซึ่งสอดคล้องกับค่าพลังงานสูงสุดของอิเล็กตรอน (eV_0) ที่ใช้กระตุ้น เรียกว่า กฎของ Duane-Hunt

$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{eV_0} \quad (1)$$

โดยความเป็นไปได้ของการสูญเสียพลังงานของอิเล็กตรอน แล้วทำให้เกิดการแผ่รังสีเอกซ์เป็นจะแปรผันตรงกับค่า $q^2 Z^2 T / M_0^2$ เมื่อ q คือ ประจุไฟฟ้าในหน่วยของประจุนิวเคลียส Z คือ เลขอะตอมของเป้า T คือ พลังงานจลน์ของอนุภาค M_0 คือ มวลนิ่งของอนุภาค จะเห็นได้ว่าโปรตอนและอนุภาคหนักมีมวลมากเมื่อเปรียบเทียบกับมวลอิเล็กตรอน ทำให้การปลดปล่อยรังสีที่ได้มีค่าน้อย ตัวอย่างเช่น ความเข้มรังสีเอกซ์ต่อเนื่องที่เกิดจากโปรตอนจะมีระดับต่ำกว่ารังสีเอกซ์ต่อเนื่องที่เกิดจากอิเล็กตรอนประมาณ 10^4 เท่า

อัตราส่วนการสูญเสียพลังงานโดยวิธีเบรมสตราลุงกับวิธีแตกตัว(ionization) ประมาณได้เป็น

$$\frac{E_{\text{Bremsstrahlung}}}{E_{\text{ionization}}} = \left(\frac{m_0}{M_0} \right)^2 \frac{ZT}{1600m_0c^2} \quad (2)$$

เมื่อ m_0 เป็นมวลนิ่งของอิเล็กตรอน

1.2 การกระจายของสเปกตรัม

สเปกตรัมต่อเนื่องของรังสีเอกซ์ที่เกิดจากอิเล็กตรอนในหลอดรังสีเอกซ์ (ใช้เป้าโลหะหนา เป็นแหล่งกำเนิดรังสี) มีคุณลักษณะดังต่อไปนี้

1. ความยาวคลื่นต่ำสุด (λ_{\min}) ความยาวคลื่นที่ต่ำกว่า λ_{\min} การแผ่รังสีเอกซ์ไม่สามารถเกิดขึ้นได้
2. ความยาวคลื่นที่ความเข้มสูงสุด λ_{\max} มีค่าประมาณ $\frac{3}{2}$ เท่าของ λ_{\min} อย่างไรก็ตาม ความสัมพันธ์ระหว่าง λ_{\max} และ λ_{\min} ยังขึ้นอยู่กับขนาดของโวลต์ที่ป้อนให้กับหลอดรังสีเอกซ์ รูปคลื่นของความต่างศักย์ และเลขอะตอม
3. ความเข้มรังสีเอกซ์เกือบจะเป็นสัดส่วนกับกำลังสองของความต่างศักย์และกำลังหนึ่งของเลขอะตอมของวัสดุที่ใช้ทำเป้า

สมการที่ใช้แสดงลักษณะของการกระจายพลังงานที่เป็นที่ยอมรับมากที่สุดสำหรับเป้าหมาย เป็นผลงานของ Kulenkampff-Wentzee สามารถแสดงเป็นสมการการกระจายพลังงานเป็นดังสมการ

$$I(v)dv = i[aZ(v_0 - v) + bZ^2]dv \quad (3)$$

เมื่อ $I(v)dv$ เป็นความเข้มรังสีเอกซ์ต่อเนื่อง ภายในช่วงความถี่ (v , $v+dv$) i คือ กระแสไฟฟ้าที่เกิดจากอิเล็กตรอนที่เข้าชนเป้า, Z คือ เลขอะตอมของเป้า, v_0 เป็นความถี่ตัด (cut off frequency = c/λ_{\min}) โดยถ้าความถี่ต่ำมาก ($v_0 \rightarrow 0$) ค่าความเข้มรังสีเอกซ์จะเป็นศูนย์ อย่างไรก็ตาม ในพจน์ที่สองของสมการ (3) มีค่าน้อยมากๆ เมื่อเปรียบเทียบกับพจน์ที่หนึ่ง ดังนั้นจึงตัดพจน์ที่สองทิ้งไป และ a และ b เป็นค่าคงที่ที่ไม่ขึ้นกับเลขอะตอม โวลต์ และความยาวคลื่นตัดออก ดังนั้นความเข้มรังสีเอกซ์รวมทุกความถี่แสดงดังสมการ

$$I = i(a'ZV_0^2 + b'Z^2V_0) \quad (4)$$

โดยที่ $a' = a(e^2/h^2)/2$ และ $b' = b(e/h)$ ดังนั้นประมาณค่า b'/a' เป็น 16.3V แล้วแทนค่าในสมการ (4) จะได้

$$I = a' i Z V_0 (V_0 + 16.3Z) \quad (5)$$

ค่าประสิทธิภาพ (Eff) ของการเปลี่ยนแปลงกำลังไฟฟ้าไปเป็นรังสีเอกซ์ทุกค่าความถี่ เป็นดังสมการ

$$\text{Eff} = \frac{I}{V_0 i} = a' Z (V_0 + 16.3Z) \quad (6)$$

ในทางปฏิบัติจะใช้ค่า $a' = (1.2 \pm 0.1) \times 10^{-9}$

Kramer เป็นผู้ที่ประสบความสำเร็จสูงสุดในการประยุกต์ใช้ทฤษฎีทางควอนตัมมาประกอบการอธิบายลักษณะของการเกิดรังสีเอกซ์ ได้แสดงสมการการกระจายพลังงานของรังสีเอกซ์ต่อเนื่องที่เกิดขึ้นที่เป้าบาง เป็นดังสมการ

$$I(v)dv = \frac{16\pi^2 AZ^2 e^2}{3\sqrt{3}m_0 V_0 c^3} dv \quad v < v_0 \quad (7a)$$

$$I(v)dv = 0 \quad v > v_0 \quad (7b)$$

A คือ เลขมวลของเป้า เมื่อในกรณีของการใช้เป้าหมายจะต้องมีการลดลงของความเร็วของอิเล็กตรอน ด้วยการประยุกต์ใช้กฎของ Thomson-Whiddingtonx เข้ามาใช้ด้วย เป็นดังสมการ

$$I(v)dv = \frac{8\pi e^2 h}{3\sqrt{3} \ell m_0 c^3} Z(v_0 - v)dv \quad (8)$$

ℓ มีค่าประมาณ 6 ประสิทธิภาพของรังสีเอกซ์คำนวณตามกฎของ Kramer เป็นดังสมการ

$$\text{Eff} = 9.2 \times 10^{-10} Z V_0 \quad (9)$$

แต่ค่าที่ได้จากการทดลองของ Kulenkampff ดังตัวอย่าง ซึ่งใกล้เคียงกับค่าทางทฤษฎี

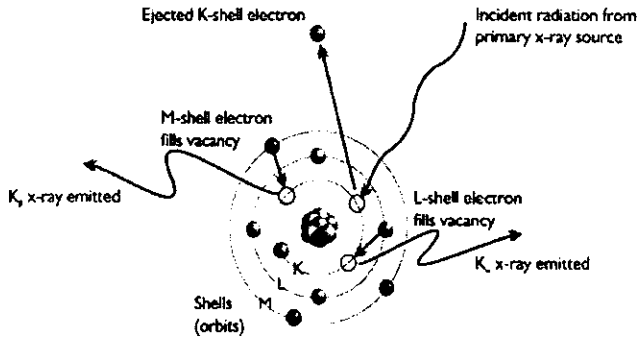
$$\text{Eff} = 15 \times 10^{-10} Z V_0 \quad (10)$$

ทั้งนี้จะต้องไม่ลืมว่าในการประมาณค่าของสมการ Kulenkampff นั้นไม่ได้คำนึงถึงผลกระทบอื่นๆ เช่น การดูดกลืนตัวเองของรังสีเอกซ์ การเกิดการกระเจิงกลับของอิเล็กตรอน (electron backscattering)

ความเที่ยงตรงของการอธิบายรังสีเอกซ์ต่อเนื่องเป็นหัวใจสำคัญยิ่งสำหรับงานทางด้านเอ็กซ์เรย์สเปกโทรสโกปี ซึ่งสามารถอธิบายได้อย่างชัดเจนในสเปกตรัมรังสีเอกซ์ทั้งหมด การกระจายความเข้มรังสีเอกซ์จากหลอดรังสีเอกซ์เป็นสิ่งที่สำคัญอย่างมากซึ่งอาศัยคณิตศาสตร์พื้นฐาน เช่น เมทริกซ์ สำหรับใช้ในการวิเคราะห์เชิงปริมาณในเครื่องเรืองรังสีเอกซ์ สมการง่ายๆ แต่สามารถอธิบายได้อย่างเที่ยงตรงในหลอดรังสีเอกซ์ ถูกต้องต้องนำเสนอโดยอ้างอิงถึงกฎของ Kramer และมีการเพิ่มเติมให้ถูกต้องยิ่งขึ้นโดยนำผลการดูดกลืนมาคำนึงด้วย

1.3 รังสีเอกซ์เฉพาะ

เมื่ออะตอมถูกกระตุ้นจากพลังงานภายนอก เช่นการชนของ โฟตอน หรือ อนุภาคพลังงานสูงกับอิเล็กตรอนของอะตอม ทำให้อิเล็กตรอนในอะตอมถูกกระตุ้น จะเป็นการถ่ายพลังงานให้กับอิเล็กตรอนที่ถูกกระตุ้น ซึ่งถ้าพลังงานที่ถ่ายให้มีความพอจะทำให้อิเล็กตรอนที่ถูกชนหลุดออกไปจากอะตอมได้ อิเล็กตรอนหลุดออกไปจากวงโคจร (orbital) ในชั้นพลังงานใดก็จะทำให้เกิดที่ว่างในชั้นนั้น ถ้าที่ว่างนี้อยู่ในชั้นพลังงานชั้นในใกล้นิวเคลียสซึ่งเป็นชั้นพลังงานต่ำ อิเล็กตรอน (ในอะตอมเดียวกัน) ที่อยู่ในชั้นพลังงานสูงกว่า(ชั้นนอก) เข้าไปแทนที่ที่ว่างนี้ได้ อิเล็กตรอนเข้าไปแทนที่เดิมมีพลังงานสูง เมื่อลงมาอยู่ในชั้นที่พลังงานต่ำก็จะต้องคายพลังงานส่วนเกินออกไป พลังงานที่คายออกมาจะอยู่ในรูปของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าและมีพลังงานตรงกับช่วงรังสีเอกซ์ซึ่งจะมีค่าเฉพาะขึ้นอยู่กับชนิดของธาตุและผลต่างของชั้นพลังงาน รังสีเอกซ์ที่ปล่อยออกมา นี้เรียกว่า รังสีเอกซ์เฉพาะ และใช้ในการบ่งชี้ได้ว่าเป็นรังสีเอกซ์ของธาตุใด ดังภาพประกอบที่ 1



ภาพประกอบที่ 1 แสดงการเกิดรังสีเอกซ์เฉพาะที่กระตุ้นด้วยพลังงานภายนอก

(ที่มา: http://www.nitonuk.com/html/information_documents/assets/images/XRF-Excitation-Model.gif)

1.4 การเกิดเป็นไอออนของอะตอมชั้นใน

การปลดปล่อยรังสีเอกซ์เฉพาะเกิดขึ้นจากสถานะที่อะตอมชั้นในอยู่สถานะไอออน สามารถเกิดขึ้นด้วยการกระตุ้นทั้งจากประจุหรืออนุภาค (เช่น อิเล็กตรอน โปรตอน หรือ อนุภาค อัลฟา) หรือเกิดจากโฟตอนที่มีพลังงานเพียงพอ ค่าภาคตัดขวางสำหรับการเกิดไอออนของอะตอมชั้นในสำหรับธาตุ i โดยอิเล็กตรอน เป็นดังสมการ

$$Q_i = \pi e^4 n_s b_s \frac{\ln U}{UE_{c,i}^2} \quad (11)$$

เมื่อ $U = E/E_{c,i}$ ที่ความต่างศักย์ส่วนเกิน คือ พลังงานของอิเล็กตรอนในแต่ละจุดที่มันตกกระทบต่อค่าพลังงานที่ทำให้เกิดไอออนของอะตอม แล้วเกิดขึ้นเป็นไอออนของอะตอมธาตุ i , $E_{c,i}$ เป็นพลังงานกระตุ้นวิกฤต, n_s และ b_s เป็นค่าเฉพาะของชั้นพลังงาน

$$s = K: \quad n_s = 2, b_s = 0.35$$

$$s = L: \quad n_s = 8, b_s = 0.25$$

ความน่าจะเป็น(หรือค่าภาคตัดขวาง) ของการเกิดเป็นไอออนในชั้นในอะตอมโดยเกิดจากอนุภาค ประจุ เป็นไปดังสมการ

$$\sigma_s = \frac{8\pi r_0^2 q^2 f_s}{Z^4 n_s} \quad (12)$$

เมื่อ r_0 คือ รัศมีของอิเล็กตรอนเท่ากับ 2.818×10^{-15} m, q คือ ค่าประจุของอนุภาค, Z คือ เลขอะตอมของเป้าเอนอด, f_ν เป็นองค์ประกอบที่ขึ้นอยู่กับฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนของแต่ละชั้นพลังงาน และ η_ν เป็นฟังก์ชันของพลังงานของอนุภาคที่ตกกระทบเป้าเอนอด

ในกรณีของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้ารูปอื่น (รังสีเอกซ์ หรือ แกมมา) การเกิดเป็นไอออนของอะตอมชั้นในเป็นผลจากการเกิดปรากฏการณ์โฟโตอิเล็กทริก ซึ่งเป็นผลที่รวมถึงการหายไปของการแผ่รังสีโฟตอนและการปล่อยโฟโตอิเล็กทริกของอิเล็กตรอนตัวใดตัวหนึ่ง จากการดูดกลืนของอะตอม พลังงานจลน์ของโฟโตอิเล็กตรอนมีค่าเท่ากับผลต่างพลังงานโฟตอน ($h\nu$) กับพลังงานยึดเหนี่ยวระหว่างอะตอมกับอิเล็กตรอน E_c (เรียกว่า พลังงานของการเกิดเป็นไอออน)

สำหรับพลังงานที่ห่างไกลจากขอบเขตการดูดกลืนและอยู่นอกเหนือทฤษฎีสัมพัทธภาพของไอน์สไตน์ ค่าภาคตัดขวาง τ_K สำหรับอิเล็กตรอนที่หลุดออกจากชั้น K เป็นดังสมการ

$$\tau_K = \frac{32\sqrt{2}}{3} \pi_0^2 \frac{Z^5}{(137)^4} \left(\frac{m_0 c^2}{h\nu} \right)^{7/2} \quad (13)$$

สมการข้างต้นยังไม่สมบูรณ์ในการอธิบายขอบเขตการดูดกลืนข้างเคียงจะต้องนำฟังก์ชัน $f(X)$ เข้าไปคูณใน (13) โดยที่

$$f(X) = 2\pi \left(\frac{D}{h\nu} \right)^{1/2} \frac{e^{-4X \operatorname{arccot} X}}{1 - e^{-2\pi X}} \quad (14)$$

$$\text{เมื่อ } X = \left(\frac{D}{h\nu - D} \right)^{1/2} \quad \text{และ} \quad D \approx \frac{1}{2} (Z - 0.3)^2 \frac{m_0 c^2}{(137)^2}$$

1.5 อนุกรมของสเปกตรัมรังสีเอกซ์

พลังงานของการปลดปล่อยในแต่ละเส้น (สเปกตรัม) สามารถคำนวณได้โดยใช้ผลต่างของสองพจน์ แต่ละพจน์สอดคล้องกับสถานะของอะตอม ถ้า E_1 และ E_2 เป็นค่าพลังงานที่สอดคล้องกับระดับของอิเล็กตรอน ความถี่ของรังสีเอกซ์ในแต่ละเส้น เป็นดังสมการ

$$\nu = \frac{E_1 - E_2}{h} \quad (15)$$

ระดับพลังงานของอิเล็กตรอนอาจเขียนกำกับด้วยเลขควอนตัม n , ℓ , s , และ j ดังสมการ

$$\frac{E}{Rh} = \frac{(Z - S_{n,\ell})^2}{n^2} + \alpha^2 \frac{(Z - d_{n,\ell,j})^2}{n^3} \left(\frac{1}{\ell + \ell/2} - \frac{3}{4n} \right) - \alpha^2 \frac{(Z - d_{n,\ell,j})^4}{n^3} \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)}{2\ell(\ell+1)(\ell+1)}$$

(16)

เมื่อ $S_{n,\ell,j}$, $d_{n,\ell,j}$ เป็นค่าคงที่ จะต้องนำมาใช้เพื่อให้เกิดความถูกต้องจากการที่เป็นผลของอิเล็กตรอนภายใต้สนามของอะตอม, R เป็นค่าคงที่สากลของริดเบิร์ก (Rydberg) ซึ่งเป็นค่าที่เป็นไปได้ สำหรับทุกธาตุที่มีเลขอะตอมมากกว่า 5 และ α เป็นค่าคงที่ของโครงสร้าง (structure constant)

$$\alpha = \frac{2\pi e^2}{hc}$$

(17)

เส้นความเข้มรังสีเอกซ์ส่วนใหญ่เกิดจากการแผ่รังสีของไดโพลไฟฟ้า การเคลื่อนย้ายของอิเล็กตรอนเป็นไปตามกฎการเลือก (selection rule) กฎการเลือกของการเปลี่ยนเลขควอนตัม ดังตัวอย่าง

$$\Delta \ell = \pm 1 \quad \Delta j = 0 \text{ หรือ } \pm 1$$

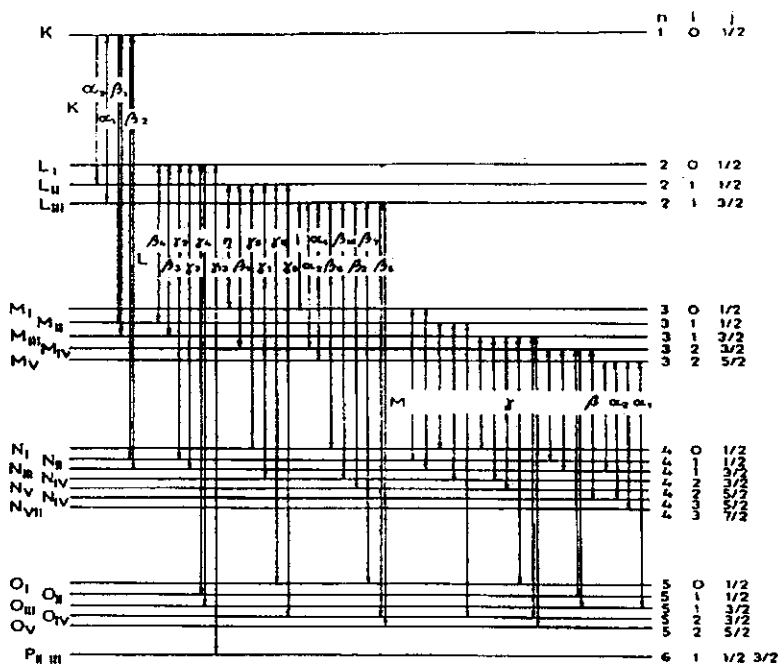
จากทฤษฎีการแผ่รังสีของดิเรก (Dirac's theory of radiation) การแผ่รังสีจะไม่เกิดขึ้นในกรณีประจุสองขั้วแต่เกิดขึ้นในรูปของประจุหลายขั้วเป็นส่วนใหญ่ ตัวอย่างเช่น ประจุไฟฟ้าสี่ขั้ว และแม่เหล็กสองขั้ว กฎการเลือกมีรูปแบบเป็น

$$\Delta \ell = \pm 1 \text{ หรือ } \pm 2 \quad \Delta j = 0 \text{ } \pm 1 \text{ หรือ } \pm 2$$

กรณี j เปลี่ยนจาก $0 \rightarrow 0$, $\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{2}$ และ $0 \leftrightarrow 1$ เกิดขึ้นไม่ได้

จากกฎการเลือกสำหรับการเคลื่อนย้ายของไดโพลแม่เหล็ก (magnetic dipole transition)

$$\Delta \ell = 0 \quad \Delta j = 0 \text{ หรือ } \pm 1 \text{ กรณี } j \text{ เปลี่ยนจาก } 0 \rightarrow 0 \text{ เกิดขึ้นไม่ได้}$$



ภาพประกอบที่ 2 แสดงระดับพลังงานและเส้นรังสีเอกซ์ (Grieken, 1993)

โดยทั่วไปความสัมพันธ์ของความยาวคลื่นเส้นรังสีเอกซ์เฉพาะกับเลขอะตอมของธาตุ เป็นไปตามกฎของมอสเลย์ (Moseley's law)

$$\frac{1}{\lambda} = k(Z - \sigma)^2 \tag{18}$$

เมื่อ k เป็นค่าคงที่เฉพาะของอนุกรมสเปกตรัม และ σ เป็นค่าคงที่ที่ใช้ในการแก้ไขให้เกิดความถูกต้องสำหรับการผลัดระหว่างอิเล็กตรอนในอะตอม กฎของมอสเลย์นั้นเป็นกฎที่สำคัญมากสำหรับสเปกตรัมรังสีเอกซ์ เมื่อพิจารณาหนึ่งขอดกราฟรังสีเอกซ์ของอนุกรม K_{α} ซึ่งเป็นส่วนย่อยของสเปกตรัม K ซึ่งนิยามด้วยความน่าจะเป็น ($p_{K_{\alpha}}$) ของการเคลื่อนย้ายของสเปกตรัม K_{α} เป็นดังสมการ

$$p_{K_{\alpha}} = \frac{I(K_{\alpha 1} + K_{\alpha 2})}{I(K_{\alpha 1} + K_{\alpha 2}) + I(K_{\beta 1} + K_{\beta 2})} \tag{19}$$

ในทางปฏิบัติความน่าจะเป็นการเกิดสเปกตรัม K_{α} ($p_{K_{\alpha}}$) เป็นฟังก์ชันที่ขึ้นกับเลขอะตอมของธาตุ ดังตัวอย่าง

$$p_{K_{\alpha}} = \begin{cases} 1.052 - 4.39 \times 10^{-4} Z_i^2 & \text{เมื่อ } 11 \leq Z \leq 19 \\ 0.896 - 6.575 \times 10^{-4} Z_i & \text{เมื่อ } 20 \leq Z \leq 29 \\ 1.0366 - 6.82 \times 10^{-3} Z_i + 4.815 \times 10^{-5} Z_i^2 & \text{เมื่อ } 30 \leq Z \leq 60 \end{cases}$$

สำหรับชั้น L ซึ่งมีการแยกเป็นสามชั้นพลังงานย่อย การเปลี่ยนแปลงความน่าจะเป็นของการเกิดสเปกตรัม L_{α} ($p_{L_{\alpha}}$) นิยามด้วยการเปลี่ยนแปลงย่อยใน L_{α_1} และ L_{α_2} จากการเปลี่ยนแปลงในชั้นพลังงานย่อย L_{III} ดังตัวอย่าง

$$p_{L_{\alpha}} = \begin{cases} 0.944 & \text{เมื่อ } 39 \leq Z_i \leq 44 \\ -4.461 \times 10^{-1} + 5.493 \times 10^{-2} Z_i - 7.717 \times 10^{-4} Z_i^2 + 3.525 \times 10^{-6} Z_i^3 & \text{เมื่อ } 45 \leq Z_i \leq 82 \end{cases}$$

1.6 การปลดปล่อยแถบสเปกตรัมรังสีเอกซ์แบบอ่อน (soft x-ray)

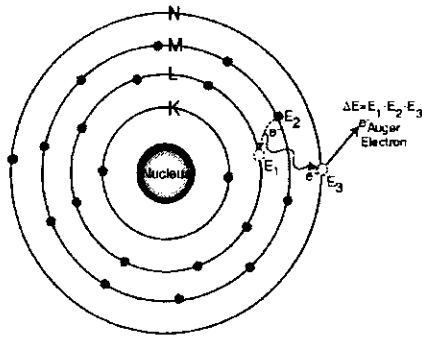
ในช่วงรังสีเอกซ์แบบอ่อน สเปกตรัมเฉพาะของธาตุของแข็งประกอบด้วยแถบต่อเนื่องที่มีความทำให้กว้างของพลังงานจาก 1 ถึง 10 อิเล็กตรอนโวลต์ ในธาตุที่เหมือนกันซึ่งอยู่สถานะกลายเป็นไอ จะเกิดเส้นสเปกตรัมที่ชัดเจน แถบที่ปรากฏขึ้นมาจากการหายไปของอิเล็กตรอนในชั้นไกลสุดหรือที่ว่างของอะตอม มีการขยายของแถบพลังงานกว้างขึ้น เมื่ออะตอมบรรจุในโครงผลึก การศึกษาการปลดปล่อยแถบสเปกตรัมมีนัยสำคัญอย่างมากต่อการเข้าใจโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ของโลหะ โลหะผสม และสารประกอบเชิงซ้อน

1.7 รังสีเอกซ์บริวาร

อย่างไรก็ตามเส้นสเปกตรัมรังสีเอกซ์จะมีจำนวนมากที่ไม่สอดคล้องกับแผนภาพของระดับพลังงานปกติ เส้นรังสีเอกซ์เหล่านี้ เรียกว่า บริวาร หรือ เส้นไม่เป็นตามแผนผัง(nondiagram) เป็นเส้นที่มีระดับความเข้มต่ำมากและค่อนข้างจะให้ผลน้อยในการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคการเรืองรังสีเอกซ์ โดยการวิเคราะห์เชิงเปรียบเทียบกับสเปกตรัมของแสง ซึ่งคาดว่าจุดเริ่มต้นของเส้นแบบไม่มีแผนผังของรังสีเอกซ์ คือ สองเท่าหรือ หลายเท่าทับกันของไอออนในอะตอมทั้งหมดที่ถูกอิเล็กตรอนกระทบ ทำให้เกิดเป็นไอออนผลของอิเล็กตรอนหลายตัวที่ปลดปล่อยโฟตอนเดี่ยวที่มีพลังงานสูงกว่าเส้นรังสีเอกซ์เฉพาะ ในทางปฏิบัติเส้นรังสีเอกซ์ไม่มีแผนผังที่สำคัญมากที่สุดที่เกิดในอนุกรม K_{α} จะแสดงถึงผลการย้ายคู่อิเล็กตรอน(double electron transition) ของ K_{α_3} , K_{α_4} จุดเริ่มต้นของอนุกรมเหล่านั้นคือการเปลี่ยนแปลงคู่อิเล็กตรอน ความน่าจะเป็นของผลการเปลี่ยนแปลงหลายอิเล็กตรอนในการปลดปล่อยเส้นรังสีเอกซ์บริวารของธาตุที่มีเลขอะตอมต่ำค่อนข้างมากกว่าธาตุที่มีเลขอะตอมหนักหรือธาตุตัวกลาง ตัวอย่างเช่น ความเข้มของเส้นบริวาร AlK_{α} จะมีค่าประมาณ 10% ของเส้นรังสีเอกซ์ AlK_{α_1} , AlK_{α_2}

1.8 ปปรากฏการณ์ Auger

เป็นที่ทราบกันดีอยู่แล้วว่า เมื่ออิเล็กตรอนได้รับพลังงานมากพอที่ทำให้หลุดออกจากระดับพลังงานชั้นในสุดของอะตอม ซึ่งเป็นวิธีการหนึ่งที่ทำให้เกิดรังสีเอกซ์เฉพาะ อย่างไรก็ตาม เมื่ออะตอมอยู่สถานะกระตุ้นอาจกลับสู่สถานะที่มีพลังงานต่ำกว่าโดยการจับอิเล็กตรอนของตัวเองออกไปจากสถานะครอบครอง เรียกว่าปรากฏการณ์ Auger อิเล็กตรอนในชั้นนอกลดระดับพลังงานมาแทนที่ แล้วเกิดเป็นรังสีเอกซ์เฉพาะ รังสีเอกซ์ที่เกิด Auger มีความน่าจะเป็นที่โฟตอนจะชนกับอิเล็กตรอนในวงโคจรของอะตอม ทำให้เกิดเป็นอิเล็กตรอนอิสระ เรียกอิเล็กตรอนนี้ว่า Auger electron โดยทั่วไปความน่าจะเป็นของปรากฏการณ์ Auger มีค่าเพิ่มขึ้น เมื่อผลต่างระดับพลังงานอิเล็กตรอนมีค่าน้อย ซึ่งจะมีค่าสูงสุดสำหรับธาตุที่มีเลขอะตอมต่ำ



ภาพประกอบที่ 2.6 แสดงการเกิดปรากฏการณ์ Auger
(ที่มา: <http://www.amptek.com/xrf.html>)

2. อันตรกิริยาของโฟตอนกับสสาร

อันตรกิริยาของโฟตอนกับสสาร ซึ่งโฟตอนถูกกำจัดออกหรือถูกเบี่ยงเบนจากลำรังสีปฐมภูมิของ รังสีเอกซ์ หรือ รังสีแกมมา อาจจำแนกเป็นประเภทได้ดังนี้

ก. ชนิดของเป้า หรือสิ่งที่โฟตอนสามารถเกิดอันตรกิริยา เช่น อิเล็กตรอน อะตอม นิวเคลียส

ข. ชนิดของปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้น เช่น การดูดกลืน การกระเจิง การเกิดคู่อนุภาค

อันตรกิริยาเหล่านี้ไม่ขึ้นกับต้นกำเนิดของโฟตอน(การเปลี่ยนแปลงของนิวเคลียสเกิดเป็น รังสีแกมมา หรือ การเปลี่ยนแปลงของอิเล็กตรอนของอะตอมเกิดเป็นรังสีเอกซ์)

เมื่อพิจารณา ภาคตัดขวางของการดูดกลืนโฟโตอิเล็กทริกต่ออะตอม (τ) โดยที่ $\tau = \tau_K + \tau_L + \dots$ และ σ_R และ σ_C คือ ค่าภาคตัดขวางของการชนแบบเรย์ลี และ คอมพ์ตัน ตามลำดับ

การอธิบายในรูปภาคตัดขวางของการชนต่ออะตอม หรือ ต่ออิเล็กตรอน ต่อนิวเคลียส ของตัวดูดกลืน การรวมของภาคตัดขวางทั้งหมด จะถูก normalized ต่ออะตอม ซึ่งก็คือความน่าจะเป็นรวม σ_{tot} เมื่อโฟตอนกระทบจะเกิดอันตรกิริยากับสารบางชนิด โฟตอนผ่านไปเนื้อสารได้น้อย อยู่ในระดับอะตอมต่อหนึ่งตารางเซนติเมตรของพื้นที่ตั้งฉากตามเส้นทางของโฟตอนตกกระทบ

$$\sigma_{tot} = \tau + \sigma_R + \sigma_C + \dots \quad (20)$$

ภาคตัดขวางทั้งหมดของการชนต่ออะตอมคูณด้วยจำนวนอะตอมต่อลูกบาศก์เซนติเมตรของตัวดูดกลืน เป็นสัมประสิทธิ์ลดทอนเชิงเส้นของ μ' ต่อเซนติเมตรของการเคลื่อนที่ในตัวดูดกลืน

$$\mu^* = \sigma_{\text{tot}} \cdot \rho \cdot \frac{N_0}{A} \quad (21)$$

เมื่อ ρ คือ ความหนาแน่นของตัวกลาง และ N_0 คือ เลขอาโวกาโดร (Avogadro's number) สัมประสิทธิ์มวลลดทอนเชิงเส้น $\mu(\text{cm}^2/\text{g})$ เป็นอัตราส่วนระหว่างสัมประสิทธิ์การลดทอนเชิงเส้นกับความหนาแน่นของวัสดุ

ในกรณีของอันตรกิริยาของโฟโตอิเล็กทริก พลังงานของโฟตอนตกกระทบถูกดูดกลืนโดยอะตอมของตัวกลาง ในกรณีของปรากฏการณ์คอมพ์ตัน พลังงานบางส่วนถูกดูดกลืน และเกิดขึ้นในตัวกลางซึ่งเกี่ยวข้องกับพลังงานจลน์ของคอมพ์ตันที่ได้จากอิเล็กตรอนถดถอย ความสมดุลของพลังงานตกกระทบจะไม่ถูกดูดกลืนซึ่งเกิดขึ้นในการกระเจิงของโฟตอนแบบคอมพ์ตัน การดูดกลืนจะเปลี่ยนแปลงจากพลังงานโฟตอนตกกระทบไปสู่พลังงานจลน์ของประจุ(โดยทั่วไปมักเป็นอิเล็กตรอน) และการกระเจิงจะเบี่ยงเบนพลังงานโฟตอนตกกระทบ

สำหรับแสงที่ขานและความยาวคลื่นเดียว การลดทอนของโฟตอนในเนื้อสารที่มีความหนาแน่นสม่ำเสมอ เป็นดังสมการ

$$I = I_0 e^{-\mu x} \quad (22)$$

เมื่อ I คือ ความเข้มรังสีเอกซ์ที่เคลื่อนที่ผ่านสาร I_0 คือ ความเข้มรังสีเอกซ์ตกกระทบ และ x คือ ความหนาของตัวดูดกลืน ในหน่วยเซนติเมตร

ถ้าตัวดูดกลืนเป็นสารประกอบ หรือของผสม สัมประสิทธิ์มวลลดทอนสามารถหาได้จากสัมประสิทธิ์ μ สำหรับองค์ประกอบของแต่ละธาตุซึ่งขึ้นอยู่กับน้ำหนักเฉลี่ย เป็นดังสมการ

$$\mu = \sum_{i=1}^n W_i \mu_i \quad (23)$$

เมื่อ W_i เป็นน้ำหนักย่อยของธาตุตัวที่ i และ n จำนวนธาตุทั้งหมดของตัวดูดกลืน เรียกว่าสมการข้างต้นว่า กฎการผสม (mixture rule) โดยไม่สนใจการเปลี่ยนแปลงฟังก์ชันคลื่นของอะตอม จากผลการเปลี่ยนแปลงในโมเลกุล ทางเคมี หรือ ผลึกที่ล้อมด้วยอะตอม พบว่าพลังงานสูงกว่า 10 keV เกิดความคลาดเคลื่อนต่ำกว่า 2-3 เปอร์เซ็นต์ (อาจเป็นบริเวณอยู่ที่เหนือขอบเขตการดูดกลืน) แต่ถ้าโฟตอนพลังงานต่ำ (10-100 eV) คลาดเคลื่อนอาจสูงเป็น 2 เท่า

2.1 การดูดกลืนโฟโตอิเล็กทริก

สำหรับกระบวนการดูดกลืนโฟโตอิเล็กทริก เกิดขึ้นเมื่อโฟตอนถ่ายเทพลังงานให้กับอิเล็กตรอนและอิเล็กตรอนถูกขับออกจากอะตอมในระดับชั้นพลังงาน K ซึ่งเป็นชั้นที่มีการยึดเหนี่ยวที่แน่นที่สุด และเป็นหัวใจที่สำคัญที่จะนำไปพิจารณาในการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคการเรืองรังสีเอกซ์ ถ้าพลังงานโฟตอนมีค่าต่ำกว่าพลังงานยึดเหนี่ยวของชั้นพลังงานอิเล็กตรอน อิเล็กตรอนไม่อาจหลุดออกจากชั้นพลังงานได้ ดังนั้นจะต้องมีพลังงานโฟตอนไม่น้อยกว่าพลังงานยึดเหนี่ยวของอิเล็กตรอนกับอะตอม

สัมประสิทธิ์การดูดแสงเชิงมวล $\tau N_0/A$ ที่พลังงานตกกระทบ $E(\text{keV})$ สามารถประมาณด้วยการคำนวณด้วยสมการของ Walter

$$\tau N_0/A = \begin{cases} \frac{30.3Z^{3.94}}{AE^3} & \text{เมื่อ } E > E_K & (24a) \\ \frac{0.978Z^{4.30}}{AE^3} & \text{เมื่อ } E_{LII} < E < E_K & (24b) \\ \frac{0.78Z^{3.94}}{AE^3} & \text{เมื่อ } E_{MII} < E < E_{LIII} & (24c) \end{cases}$$

2.2 การกระเจิงแบบคอมพ์ตัน

การกระเจิงแบบคอมพ์ตัน เป็นอันตรกิริยาของโฟตอนกับอิเล็กตรอนอิสระที่อยู่นิ่ง อิเล็กตรอนยึดเหนี่ยวกับอะตอมอย่างเบาบางทำให้ไม่ต้องคำนึงถึงการถ่ายเทโมเมนตัมที่มากพอกว่า โมเมนตัมของอิเล็กตรอนในสถานะยึดครอง เมื่อพิจารณาหลักอนุรักษัโมเมนตัมและพลังงานของโฟตอน เป็นดังสมการ

$$hv = \frac{hv_0}{1 + \gamma(1 - \cos\theta)} \quad (25)$$

$$T = hv_0 - hv = hv_0 \frac{\gamma(1 - \cos\theta)}{1 + \gamma(1 - \cos\theta)} \quad (26)$$

$$\tan\phi = \frac{1}{1 + \gamma} \cot \frac{\theta}{2} \quad (27)$$

โดยที่

$$\gamma = \frac{hv_0}{m_0c^2}$$

เมื่อ $h\nu_0$ และ $h\nu$ คือ พลังงานโฟตอนตกกระทบและพลังงานกระเจิงของโฟตอนตามลำดับ, θ เป็นมุมระหว่างทิศทางของโฟตอนก่อนตกกระทบกับทิศทางของโฟตอนที่เกิดการกระเจิงออกไป T เป็นพลังงานจลน์ ϕ เป็นมุมกระเจิงของคอมป์ตันที่ได้จากอิเล็กตรอนหลุดออกจากอะตอม ตามลำดับ

เมื่อ $\theta = 180^\circ$ สมการจะลดรูปลง เป็น

$$h\nu_{\max} = h\nu_0 \frac{1}{1+2\gamma} \quad (28)$$

และ
$$T_{\max} = h\nu_0 \frac{2\gamma}{1+2\gamma} \quad (29)$$

อนุพันธ์ของภาคตัดขวางการชนของ Klein-Nishina $d\sigma_{\text{KN}}/d\Omega$ คือ ส่วนของจำนวนโฟตอนที่กระเจิงในเส้นทางเฉพาะต่อจำนวนโฟตอนตกกระทบ ใช้สำหรับโฟตอนที่ไมโพลาริซที่เข้าชนอิเล็กตรอน โดยการปรับตัวแบบสุ่ม เป็นดังสมการ

$$\frac{d\sigma_{\text{KN}}}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} \left(\frac{h\nu}{h\nu_0} \right)^2 \left(\frac{h\nu_0}{h\nu} + \frac{h\nu}{h\nu_0} - \sin^2\theta \right) \frac{\text{cm}^2}{\text{electron} \cdot \text{sr}} \quad (30)$$

เมื่อ sr เป็นคำย่อของ สเตอเรเดียน (steradian)

เมื่อแทนค่าจากสมการ (26) ในสมการ (30) หาอนุพันธ์ของภาคตัดขวางเป็นฟังก์ชันกับมุมการกระเจิง θ เป็นดังสมการ

$$\frac{d\sigma_{\text{KN}}}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} \frac{1+\cos^2\theta}{[1+\gamma(1-\cos\theta)]} \times \left\{ 1 + \frac{\gamma^2(1-\cos\theta)}{[1+\cos^2\theta][1+\gamma(1-\cos\theta)]} \right\} \frac{\text{cm}^2}{\text{electron} \cdot \text{sr}} \quad (31)$$

สำหรับที่พลังงานน้อย ($h\nu_0 \ll m_0c^2$) สมการจะอยู่ในรูปภาคตัดขวางของการกระเจิงสำหรับการแผ่รังสีคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าแบบทอมสันของอิเล็กตรอน

$$\frac{d\sigma_{\text{Th}}}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} (1+\cos^2\theta) \frac{\text{cm}^2}{\text{electron} \cdot \text{sr}} \quad (32)$$

สำหรับที่พลังงานต่ำของโฟตอนกระทบ(ที่ต่ำกว่า 10 keV) การกระจายของมุมการกระเจิงแบบคอมพ์ตันของโฟตอนมีค่าสมมาตรประมาณ $\theta = 90^\circ$ ที่พลังงานสูงของโฟตอนตกกระทบ การกระเจิงแบบคอมพ์ตันกลายเป็นสมการข้างต้น

อนุพันธ์ของภาคตัดขวางการชนของ Klein-Nishina $d\sigma_{KN}^s/d\Omega$ สำหรับรังสีที่ไม่โพลาไรซ์สามารถนิยามอัตราส่วนระหว่างปริมาณพลังงานการกระเจิงในเส้นทางเฉพาะกับพลังงานโฟตอนตกกระทบ เป็นดังสมการ

$$\frac{d\sigma_{KN}^s}{d\Omega} = \frac{hv}{hv_0} \frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} \quad \frac{\text{cm}^2}{\text{electron} \cdot \text{sr}} \quad (33)$$

ค่าเฉลี่ย(หรือค่ารวม)ของภาคตัดขวางของการชน σ_{KN} สามารถแสดงในรูปความน่าจะเป็นของการเกิดอันตรกิริยาแบบคอมพ์ตัน โดยหนึ่งโฟตอนที่ผ่านเข้ามาในทิศตั้งฉากกับวัสดุของอิเล็กตรอนต่อหนึ่งตารางเซนติเมตร

$$\sigma_{KN} = \int_0^\pi \frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} 2\pi \sin\theta d\theta = 2\pi r_0^2 \left\{ \frac{1+\gamma}{\gamma^2} \left[\frac{2(\gamma+1)}{1+2\gamma} - \frac{\ln(1+2\gamma)}{\gamma} \right] + \frac{\ln(1+2\gamma)}{2\gamma} - \frac{1+3\gamma}{(1+2\gamma)^2} \right\} \quad (34)$$

ที่พลังงานต่ำ ค่าภาคตัดขวางลดรูปอธิบายด้วยฟิสิกส์แผนเก่าด้วยค่าภาคตัดขวางของทอมสัน

$$\sigma_{Th} = \frac{8}{3} \pi r_0^2 = 0.6652 \times 10^{-24} \quad \frac{\text{cm}^2}{\text{electron}}$$

สำหรับพลังงานสูง ($hV_0 \gg m_0c^2$) สมการ (2.46) ลดรูปเป็น

$$\sigma_{KN} = \pi r_0^2 \frac{1}{\gamma} \left(\ln 2\gamma + \frac{1}{2} \right) \quad \frac{\text{cm}^2}{\text{electron}} \quad (35)$$

ค่าเฉลี่ย(หรือค่ารวม)ของภาคตัดขวางของการกระเจิง นิยามได้ด้วยพลังงานรวมของการกระเจิงในพจน์พลังงานของโฟตอน $h\nu$

$$\sigma_{KN}^s = \int_0^\pi \frac{d\sigma_{KN}^s}{d\Omega} 2\pi \sin\theta d\theta = \pi r_0^2 \left[\frac{\ln(1+2\gamma)}{\gamma^3} + \frac{2(1+\gamma)(2\gamma^2-2\gamma-1)}{\gamma^2(1+2\gamma)^2} + \frac{8\gamma^2}{3(1+2\gamma)^3} \right] \quad \frac{\text{cm}^2}{\text{electron}} \quad (36)$$

ภาคตัดขวางของการชนแบบไม่อาพันธ์รวมต่ออะตอม σ_c ซึ่งขึ้นอยู่กับฟังก์ชันการกระเจิงไม่อาพันธ์ $S(x,Z)$ สามารถคำนวณ ดังสมการ

$$\sigma_c = \frac{1}{2} r_0^2 \int_{-1}^1 \left\{ [1 + \gamma(1 - \cos\theta)]^{-2} \left[1 + \cos^2\theta + \frac{\gamma^2(1 - \cos\theta)^2}{1 + \gamma(1 - \cos\theta)} \right] ZS(x, Z) \right\} 2\pi d(\cos\theta) \frac{\text{cm}^2}{\text{atom}} \quad (37)$$

เมื่อ $x = \sin(\theta/2)/\lambda$ คือค่าเคลื่อนย้ายโมเมนตัม(momentum transfer) และ λ ความยาวคลื่นของโฟตอนในหน่วยอังสตรอม

ในตอนนี้จะกล่าวถึงปรากฏคอมพ์ตันสำหรับการแผ่รังสีโพลาไรซ์ อนุพันธ์ของการภาคตัดขวางการชน ($d\sigma_{KN}/d\Omega$)_{pp} สำหรับระนาบกระเจิงของการแผ่รังสีโพลาไรซ์ โดยอิเล็กตรอนมีการจัดตัว ซึ่งไปตามทฤษฎีของ Klein-Nishina แสดงให้เห็นถึงความน่าจะเป็นของโฟตอนซึ่งเคลื่อนที่ผ่านเป้าที่ประกอบด้วยหนึ่งอิเล็กตรอนต่อตารางเซนติเมตร จะกระเจิงที่มุม θ ภายในมุมตัน $d\Omega$ ในระนาบ ทำให้เกิดมุม β กับระนาบที่ประกอบด้วยเวกเตอร์ทางไฟฟ้าของคลื่นตกกระทบ

$$\left(\frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} \right)_{pp} = \frac{r_0^2}{2} \left(\frac{h\nu}{h\nu_0} \right) \left(\frac{h\nu_0}{h\nu} + \frac{h\nu}{h\nu_0} - 2\sin^2\theta\cos^2\beta \right) \frac{\text{cm}^2}{\text{electron} \cdot \text{sr}} \quad (38)$$

ค่าภาคตัดขวางที่มากที่สุด เมื่อค่า $\beta = 90^\circ$ ซึ่งบ่งชี้ว่าโฟตอนและอิเล็กตรอนมีแนวโน้มจะกระเจิงไปทางมุมฉากกับเวกเตอร์ทางไฟฟ้าของการกระทบ

การกระเจิงของโฟตอนที่โพลาไรซ์แบบวงกลม (cp) โดยอิเล็กตรอนที่สปินในแนวเดียวกับทิศทางของโฟตอนตกกระทบ เป็นดังสมการ

$$\left(\frac{d\sigma_{KN}}{d\Omega} \right)_{cp} = r_0^2 \left(\frac{h\nu}{h\nu_0} \right) \left[\left(\frac{h\nu_0}{h\nu} + \frac{h\nu}{h\nu_0} - \sin^2\theta \right) \pm \left(\frac{h\nu_0}{h\nu} - \frac{h\nu}{h\nu_0} \right) \cos\theta \right] \frac{\text{cm}^2}{\text{electron} \cdot \text{sr}} \quad (39)$$

ในพจน์แรกเป็นสูตรของ Klein-Nishina สำหรับการแผ่รังสีที่ไม่โพลาไรซ์ เครื่องหมาย + ของพจน์ที่สองแสดงโพลาไรซ์แบบวงกลม

2.3 การกระเจิงแบบเรย์ลี

การกระเจิงแบบเรย์ลี เป็นกระบวนการที่โฟตอนเกิดการกระเจิงโดยอิเล็กตรอนในอะตอม ซึ่งถูกตรึง (bound atomic) โดยที่อะตอมไม่ได้เกิดเป็นไอออนหรือไม่ได้ถูกกระตุ้น โฟตอนตกกระทบเกิดการกระเจิงซึ่งไม่เปลี่ยนความถี่และมีเฟสที่แน่นอนสัมพันธ์กับโฟตอนระหว่างการเข้ามาและที่กระเจิงของคลื่น ความเข้มของการแผ่รังสีของโฟตอนที่กระเจิงด้วยอะตอมเกิดจากการรวมกันของแอมพลิจูดของแผ่รังสีการกระเจิงแบบอาพันธ์โดยอิเล็กตรอนแต่ละตัวที่ถูกตรึงในอะตอม ความสำคัญของการกระเจิงแบบเรย์ลีอยู่ที่การขยายออกของอิเล็กตรอนขึ้นกับค่า Z ของอิเล็กตรอนแต่ละตัว การแทรกสอดเป็นแบบเสริม การเปลี่ยนเฟสของเส้นผ่านศูนย์กลางของอะตอมน้อยกว่าหนึ่งครึ่งของความยาวคลื่น

$$\frac{4\pi}{\lambda} r_a \sin \frac{\theta}{2} < 1 \quad (40)$$

เมื่อ r_a เป็นรัศมียังผลของอะตอม

การกระเจิงแบบเรย์ลีส่วนใหญ่เกิดขึ้นกับรังสีเอกซ์พลังงานต่ำและวัสดุที่มีเลขอะตอมสูง ในบางบริเวณซึ่งอิเล็กตรอนถูกครอบงำภายใต้อิทธิพลของภาคตัดขวางของการกระเจิงแบบคอมพ์ตันอนุพันธ์ของภาคตัดขวางการกระเจิงแบบเรย์ลีสำหรับโฟตอนที่ไม่มีโพลาไรซ์ เป็นดังสมการ

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{1}{2} r_0^2 (1 + \cos^2\theta) \cdot |F(x, Z)|^2 \quad \frac{\text{cm}^2}{\text{atom} \cdot \text{sr}} \quad (41)$$

เมื่อ $F(x, Z)$ คือ ตัวประกอบรูปร่างของอะตอม (atomic form factor)

$$F(x, Z) = \int_0^\infty \rho(r) 4\pi r \frac{\sin[(2\pi/\lambda)rs]}{(2\pi/\lambda)rs} dr \quad (42)$$

เมื่อ $\rho(r)$ คือ ความหนาแน่นรวมของอิเล็กตรอน r ระยะทางจากนิวเคลียส และ $s = 2\sin(\theta/2)$ ตัวประกอบรูปร่างของอะตอมใช้คำนวณสำหรับธาตุที่มีเลขอะตอม $Z < 26$ เป็นไปตามการกระจายอิเล็กตรอนของ Hartree และถ้า $Z > 26$ เป็นไปตามการกระจายของ Fermi-Thomas

โฟตอนที่มีพลังงานสูง การกระเจิงของเรย์ลีจะเป็นมุมเล็กๆ ที่พลังงานต่ำ โดยเฉพาะวัสดุมีเลขอะตอมสูงการกระจายของมุมกระเจิงแบบเรย์ลีเป็นมุมจะกว้างมาก มีประโยชน์ในการกำหนดมุมการกระจายของการกระเจิงแบบเรย์ลี เป็นดังสมการ

$$\theta_R = 2\arcsin \frac{0.0133Z^{1/2}}{E(\text{MeV})} \quad (43)$$

เมื่อ θ_R คือ ครึ่งมุมเปิดทรงกรวยที่ครอบคลุมไม่น้อยกว่า 75 % ของการกระเจิงแบบเรย์ลีของโฟตอน ค่าของ $|F(x,Z)|^2 = Z^2$ ดังนั้นการกระเจิงแบบเรย์ลีเหมาะสมสำหรับการอธิบายการทดลองของรังสีเอกซ์และรังสีแกมมา

ภาคตัดขวางรวมของการกระเจิงแบบอาพันธ์ต่ออะตอม (σ_R) สามารถคำนวณได้ดังสมการ

$$\sigma_R = \frac{1}{2} r_0^2 \int_{-1}^1 (1 + \cos^2\theta) |F(x,Z)|^2 2\pi d(\cos\theta) \quad (44)$$

$$= \frac{3}{8} \sigma_{Th} \int_{-1}^1 (1 + \cos^2\theta) |F(x,Z)|^2 d(\cos\theta) \quad \frac{\text{cm}^2}{\text{atom}} \quad (44a)$$

2.4 สัมประสิทธิ์มวลลดทอนรวม (total mass attenuation coefficient)

เมื่อพิจารณาสัมประสิทธิ์ลดทอนเชิงมวลที่ใช้ในหลอดรังสีเอกซ์ปัจจุบัน ผลต่างระหว่างสัมประสิทธิ์มวลลดทอนรวมจากความไม่แน่นอนในส่วนของภาคตัดขวางสำหรับอันตรกิริยาของโฟตอนกับสสารซึ่งเป็นฟังก์ชันกับเลขอะตอมของธาตุและพลังงานของโฟตอน เช่น ความถี่เท่ากับ 5-10 % ในบริเวณพลังงานโฟตอนที่มีค่าพลังงานต่ำกว่า 10 keV ให้ค่าเพิ่มขึ้นมากถึง 30 % ซึ่งใกล้เคียงขอบเขตการดูดกลืน

สัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงมวลของหลอดรังสีเอกซ์และสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงมวล
พลังงาน สำหรับพลังงานโฟตอนจาก 1 keV ถึง 20 MeV สำหรับ 40 ธาตุในช่วงจากไฮโดรเจน ($Z =$
1) ถึงยูเรเนียม ($Z=92$) และสำหรับ 45 ของผสมและสารประกอบ

เมื่อเร็วนี้ได้มีการพัฒนาวิธีการคำนวณสัมประสิทธิ์การลดทอนเชิงมวลที่เป็นไปได้สำหรับ
พลังงานโฟตอนในช่วงจาก 1 ถึง 50 keV และ สำหรับ 73 ธาตุ ($11 \leq Z \leq 83$) ดังสมการ

$$\mu \frac{\text{cm}^2}{\text{g}} = \text{He}^{d+k \ln E} \quad (45)$$

เมื่อ H , d , และ k เป็นค่าที่ได้จาก วิธีค่ากำลังสองน้อยที่สุด

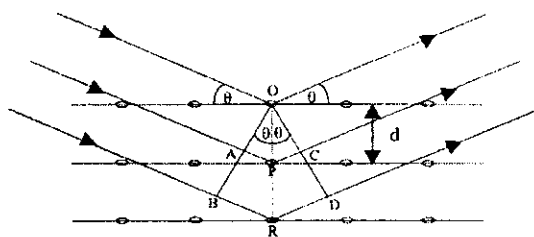
ค่าของขอบเขตพลังงาน E_K , E_{L1} , E_{L2} , E_{L3} , E_{M1} , E_{M2} , E_{M3} และ E_{M4} ดังสมการ

$$E_i = r_i + s_i Z + t_i Z^2 + n_i Z^3 \quad \text{keV} \quad (46)$$

เมื่อพารามิเตอร์ r_i , s_i , t_i และ n_i คือ ค่าขอบเขตการดูดกลืนค่าต่างๆ ตัวที่ i

2.5 การเลี้ยวเบน การสะท้อน และการกระจาย รังสีเอกซ์

เมื่อลำรังสีเอกซ์ตกกระทบผิวหน้าของผลึกโดยทำมุม θ บางส่วนของรังสีเอกซ์จะเกิดการ
เลี้ยวเบนด้วยชั้นของอะตอมที่ผิวหน้า อีกส่วนหนึ่งของรังสีเอกซ์จะผ่านไปยังชั้นที่ 2 ของอะตอม
ซึ่งบางส่วนก็จะเกิดการเลี้ยวเบน และบางส่วนที่เหลือก็จะผ่านเข้าไปยังชั้นที่ 3 ของอะตอมดังแสดง
ในภาพประกอบที่ 3



ภาพประกอบที่ 3 แสดงการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ของผลึกเดี่ยว (วีระศักดิ์, 2543)

ถ้าอะตอมในผลึกมีการจัดเรียงตัวอย่างเป็นระเบียบและมีระยะห่างระหว่างชั้นอะตอม
เท่าๆกัน รังสีเอกซ์ที่ผ่านเข้าไปในแต่ละชั้นของอะตอมจะเกิดการเลี้ยวเบนเป็นลำขนานกัน การ

เลี้ยวเบนนี้ก็มีลักษณะคล้ายกับการเลี้ยวเบนด้วยเกรตติงแบบสะท้อน สิ่งที่สำคัญในการเกิดการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ขึ้นอยู่กับภาวะ 2 ประการคือ

1. รังสีตกกระทบ รังสีเลี้ยวเบน และเส้นตั้งฉากกับผิวหน้าจะต้องอยู่ในระนาบเดียวกัน
2. ระยะห่างระหว่างชั้นของอะตอมควรมีค่าใกล้เคียงกับความยาวคลื่นของรังสีเอกซ์

เมื่อปี ค.ศ.1912 แบริก (W.L. Bragg) ได้ขึงลำรังสีเอกซ์แคบๆ กระทบผิวหน้าผลึกเป็นมุม θ เพื่อให้เกิดการเลี้ยวเบนและการกระเจิงเมื่อเกิดอันตรกิริยากับอะตอม O, P และ R ถ้า

$$AP+PC = n\lambda \quad (47)$$

เมื่อ n คือเลขจำนวนเต็มบวก

รังสีเอกซ์ที่กระเจิงจะอยู่ในเฟสที่ OCD ผลึกจะทำหน้าที่สะท้อนรังสีเอกซ์ จะเห็นได้ว่า

$$AP = PC = d\sin\theta \quad (48)$$

เมื่อ d คือ ระยะห่างระหว่างชั้นอะตอมของผลึก

จากสมการดังกล่าว อาจเขียนใหม่ได้ว่า เมื่อคลื่นแสงเกิดการแทรกสอดแบบเสริม ที่มุม θ เกิดเป็นสมการของแบรกก์

$$2 d \sin\theta = n\lambda \quad (49)$$

รังสีเอกซ์จะเกิดการกระเจิงจากผลึกได้ถ้ามุมตกกระทบไปตามสมการของแบรกก์ ส่วนมุมอื่นๆจะเกิดการแทรกสอดแบบหักล้าง

เมื่อรังสีเอกซ์ความยาวคลื่นเดียว ตกกระทบบนโครงผลึก โดยทั่วไปเราดูมีจัดเรียงตัวของอะตอม ลำรังสีเอกซ์จะเกิดการเลี้ยวเบนในทิศทางที่แน่นอน ปรากฏการณ์ของการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ที่เกิดจากการจัดเรียงตัวของอะตอม(หรือโมเลกุล) สามารถอธิบายด้วยการสะท้อนของรังสีเอกซ์ตกกระทบภายในระนาบผลึก(การสะท้อนของแบรกก์) เมื่อพิจารณาการคำนวณในส่วนย่อยของผลต่างแนวการเคลื่อนที่ของรังสีต่อเนื่อง เป็นดังสมการ

$$n\lambda = 2 d \sin \frac{\theta_n}{2} \quad (50)$$

เมื่อ d ระยะทางระหว่างระนาบผลึก และ $\theta_n/2$ คือ มุมตกกระทบ(มุมของแบรกก์) ซึ่งนิยามด้วยมุมระหว่างรังสีตกกระทบทำกับระนาบการสะท้อนของผลึก การสะท้อนอันดับแรก($n=1$) โดยทั่วไปมีค่าความเข้มรังสีสูงสุด และความเข้มรังสีลดลงเมื่อค่า n เพิ่มขึ้น

กฎของแบรกก์ในสมการ(51) เป็นเพียงการประมาณเบื้องต้น ซึ่งการหักเหในผลึกจะแทรกสอดด้วยมุมของการสะท้อน ดังนั้นดัชนีหักเหของรังสีเอกซ์น้อยกว่าหนึ่ง ซึ่งเบี่ยงเบนจากกฎการเลี้ยวเบนของแบรกก์ การหักเหจะใช้การอธิบายของผลต่างค่า d_n น้อยๆ สำหรับค่าคงที่ผลึกแต่ละอันดับการสะท้อน

$$n\lambda = 2d \left(1 - \frac{4d^2}{n^2} \frac{\delta}{\lambda^2} \right) \sin \frac{\theta_n}{2} \quad (52)$$

เมื่อ $\delta = 1 - n'$ สำหรับการดูดกลืนน้อยๆ ($\lambda < 1$) และ n' คือ ดัชนีหักเหสำหรับรังสีเอกซ์ δ มีค่าเป็นบวกน้อยๆอยู่ในระดับ 10^{-5} สำหรับธาตุหนัก และ 10^{-6} สำหรับธาตุเบา ที่ $\lambda = 1 \text{ \AA}$ และเป็นสัดส่วนผกผันกับ λ^2

ค่าของ δ ที่เป็นบวก การสะท้อนกลับหมด เกิดการสะท้อนกลับในอากาศเมื่อรังสีเอกซ์ทำมุมตกกระทบที่โตพอ ทำให้ไม่เกิดการดูดกลืนรังสี มุมวิกฤต เป็นดังสมการ

$$\sin \theta_c = \sqrt{2\delta} \quad (53)$$

สำหรับ $\lambda = 1 \text{ \AA}$ ค่า θ_c อยู่ในระดับ 10^{-3} สำหรับธาตุเบา และ 5×10^{-3} สำหรับธาตุหนัก มีค่าเพิ่มขึ้นโดยตรงกับ λ

ดัชนีหักเห n' ของตัวกลางที่มีอะตอมชนิดเดียว สามารถคำนวณดังสมการ

$$n' = 1 - \frac{N\lambda^2}{2\pi} \frac{e^2}{m_0c^2} F(0) \quad (54)$$

เมื่อ N คือ จำนวนอะตอมต่อหนึ่งหน่วยปริมาตร และ $F(0)$ คือ ตัวประกอบการกระเจิงของอะตอมที่มุมศูนย์องศา สมการ (54) แสดงให้เห็นว่าดัชนีการหักเหขึ้นอยู่กับความยาวคลื่นปรากฏการณ์นี้เรียกว่า สมบัติการกระจายตัวของคลื่น

กรณีการกระจายของคลื่นที่ผิดปกติ ทำให้ปริมาณ δ/λ^2 จากสมการ (54) มีค่าแปรตามกับความยาวคลื่นเล็กน้อย การแปรค่ากลายเป็นสิ่งที่สำคัญในส่วนบริเวณที่ใกล้เคียงกับขอบเขตการ

ดูคลื่นซึ่งเป็นส่วนประกอบของผลึก การแบ่งปริมาณของ δ/λ^2 ไปยังส่วนปกติ $(\delta/\lambda^2)_n$ และส่วนที่ผิดปกติ $(\delta/\lambda^2)_a$ ทฤษฎีของการกระจายอย่างผิดปกตินำไปสู่การอธิบายด้วยกฎของแบรกก์ ดังสมการ

$$n\lambda = 2d \left[1 - \frac{4d^2}{n^2} \left(\frac{\delta}{\lambda^2} \right)_n - \frac{4d^2}{n^2} \left(\frac{\delta}{\lambda^2} \right)_a \right] \sin \frac{\theta_n}{2} \quad (55)$$

เมื่อรวมกับกฎของแบรกก์ที่มีรูปไม่ถูกต้อง ในสมการ (2.62) สามารถอธิบาย ดังสมการ

$$\lambda = 2d \left[1 - \frac{4d^2}{n^2} \left(\frac{\delta}{\lambda^2} \right)_n \right] \frac{\sin \theta_n / 2}{n} - \frac{4d^2}{n^2} \left(\frac{\delta}{\lambda^2} \right)_a \lambda \quad (56)$$

ค่าของ $(\delta/\lambda^2)_a$ เป็นค่าที่ถูกต้องสำหรับการกระจายที่ผิดปกติที่เกิดขึ้นจากการทดลอง

ทฤษฎีของการกระจายที่ผิดปกตินำมาใช้ในการอธิบายการกระเจิงของมูมิสระเบนแบบไม่ยืดหยุ่นจากธาตุที่มีพลังงานขอบเขตการดูดกลืนที่สูงกว่าพลังงานตกกระทบของรังสีเอกซ์ ความเข้มของการกระเจิงแบบไม่ยืดหยุ่นขึ้นอยู่กับ การใกล้กับพลังงานขอบเขตการดูดกลืนกับพลังงานของรังสีเอกซ์ตกกระทบ ยอดกราฟของพลังงานแบบไม่ยืดหยุ่น มีการเลื่อนจากพลังงานรังสีเอกซ์ตกกระทบ โดยพลังงานยืดหยุ่นของชั้นพลังงานที่ถูกตรง ซึ่งเกิดจากอิเล็กตรอนที่ได้รับพลังงานจากโฟตอนที่ตกกระทบ

2.6 การกระเจิงแบบรามันของรังสีเอกซ์

หลังจากการค้นพบการกระเจิงแบบรามันของความยาวคลื่นแสง ซึ่งปรากฏการณ์ที่ เหมือนกับการกระเจิงแบบรามัน ในรังสีเอกซ์ การกระเจิงแบบรามันของรังสีเอกซ์เกิดขึ้นในแถบสเปกตรัมที่มีค่าความยาวคลื่นสั้น ซึ่งสอดคล้องกับพลังงานที่สูญเสียไปของอิเล็กตรอนในชั้น K ที่มีพลังงาน E_K ของธาตุ ผลของความไม่ยืดหยุ่นที่สังเกตได้ ตัวอย่างเช่น เมื่อการแผ่รังสีของ CrK_α และ CuK_α กระเจิงโดยของแข็งสำหรับธาตุเบา เช่น ลิเทียม เบริลเลียม บอรอน และแกรไฟต์ รูปร่างแถบรามันเหมือนกับสเปกตรัมการดูดกลืนรังสีเอกซ์พลังงานต่ำที่ชั้น K ของของแข็ง เนื้อหาของการกระเจิงแบบรามันมีสองเงื่อนไขที่สำคัญ ดังนี้

$$\frac{4\pi\bar{a}}{\lambda} < 1 \quad (57)$$

และ

$$h\nu \gg E_K \quad (57a)$$

เมื่อ \bar{a} คือ รัศมีเฉลี่ยของการกระจายตัวของประจุอิเล็กตรอนในชั้น K และ λ_0 เป็นความยาวคลื่นรังสีตกกระทบ ความเข้มรังสีเอกซ์กระเจิงแบบรามัน $I(\theta, \lambda)$

$$I(\theta, \lambda) \approx (1 + \cos^2\theta) \left[T_1(\lambda) \left(\frac{4\pi\bar{a}}{\lambda_0} \sin \frac{\theta}{2} \right)^2 + T_2(\lambda) \left(\frac{4\pi\bar{a}}{\lambda_0} \sin \frac{\theta}{2} \right)^2 \right] \quad (58)$$

เมื่อ $T_1(\lambda)$ และ $T_2(\lambda)$ เป็นตัวประกอบที่สัมพันธ์กับการเคลื่อนย้ายไดโพลหรือมัลติโพล ถึงแม้ว่าสมการจะมีการขจัดของยอดกราฟเพียงเล็กน้อยของแถบรามันซึ่งแสดงด้วยมุมการกระเจิงตำแหน่งของยอดกราฟไม่มีการเลื่อนในการทดลองส่วนใหญ่

โดยทั่วไป การกระเจิงของรังสีเอกซ์แบบรามันจะให้รายละเอียดของอิเล็กตรอนที่อยู่เหนือสถานะของระดับพลังงานเฟอร์มิในของแข็ง อนึ่ง การกระเจิงแบบไม่ยืดหยุ่นโดยอิเล็กตรอนในของแข็งบางครั้ง เป็นสเปกตรัมรังสีเอกซ์ได้