

ภาคผนวก ก

การคำนวณ

- การเตรียมของผสม $\text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Cr}_2\text{O}_3$ เพื่อใช้เป็นสารตั้งต้นในการสังเคราะห์ทับทิม ยกตัวอย่าง ต้องการเตรียม $\text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Cr}_2\text{O}_3$ ปริมาณ 20 กรัม โดยให้มี Cr_2O_3 0.2%

กำหนดให้ X คือ Cr_2O_3
 X + 20 คือ $\text{Cr}_2\text{O}_3 + 20$

$$\frac{X}{X + 20} = \frac{0.2}{100}$$

$$100X = 4 + 0.2X$$

$$99.8X = 4$$

$$X = 0.0401$$

ดังนั้น จะต้องชั่ง Cr_2O_3 0.0401 กรัมและชั่ง Al_2O_3 20 กรัม จึงจะได้ของผสมที่มีความเข้มข้นของ Cr_2O_3 0.2%

หากต้องการเตรียมสารที่ค่าความเข้มข้นอื่นก็สามารถคำนวณได้ในทำนองเดียวกันนี้

กันนี้

- การหาค่า Correction Factor

ยกตัวอย่าง ทับทิมสังเคราะห์ (R9), Cr_2O_3 0.5007% (เติมลงไปในการตั้งต้น)

วิธีการหาค่า Correction Factor จะต้องทำการเทียบจากสารตั้งต้น (ผง) ที่มีความเข้มข้นของโครเมียมออกไซด์เท่ากับในทับทิมสังเคราะห์ โดยนำค่าสัญญาณนับสุทธิของพีคโครเมียม (เครื่องจะแสดงผลออกมาให้) ของทั้งสองมาคำนวณตามสูตรด้านล่าง ดังนี้

$$\frac{\text{สัญญาณนับสุทธิของพีคโครเมียมในสารตั้งต้น, } \text{Cr}_2\text{O}_3 \text{ 0.5007\%}}{\text{สัญญาณนับสุทธิของพีคโครเมียมในทับทิมสังเคราะห์, } \text{Cr}_2\text{O}_3 \text{ 0.5007\%}} = \frac{22,544}{7,725}$$

$$= 2.92$$

ดังนั้น ค่า Correction Factor ของทับทิมสังเคราะห์ (R9) เท่ากับ 2.98

เช่นเดียวกัน ถ้าต้องการหาในทับทิมสังเคราะห์เม็ดอื่นก็ต้องทำการเทียบจากสารตั้งต้นที่มีปริมาณโครเมียมออกไซด์เท่ากัน

- การหาขีดจำกัดการตรวจหา (Detection limit)

$$C_{DL} = \frac{3\sqrt{I_b}}{M\sqrt{t}}$$

โดย $M = \text{Net} / (t \times \text{Conc.})$

$I_b = \text{Background} / t$

ยกตัวอย่าง ผลการตรวจวัดเม็ดทับทิมสังเคราะห์

Background = 2646 , 3178 , 2744 → 2856 count

Net = 7974 , 7614 , 7579 → 7722.33 count

Conc. = 0.5007 %

ค่าสัญญาณคิดในรูปของค่าเฉลี่ย (จากการวัดซ้ำ 3 ครั้ง) คำนวณได้ค่าต่างๆดังนี้

$M = 77.12 \text{ cps} / \%$, $I_b = 14.28 \text{ cps}$, $t = 200 \text{ s}$

เมื่อแทนค่าต่างๆ ลงในสูตรจะได้

$$C_{DL} = \frac{3\sqrt{14.8}}{77.12 \sqrt{200}}$$

$$= 0.0104$$

นั่นคือ ทับทิมสังเคราะห์เม็ดนี้มีขีดจำกัดการตรวจหา เท่ากับ 0.0104 %

ภาคผนวก ข

ความถ่วงจำเพาะ (Specific gravity, S.G)

ความถ่วงจำเพาะ หมายถึง อัตราส่วนของน้ำหนักของสารต่อน้ำหนักของน้ำใน ปริมาตรที่เท่ากันที่ 4 องศาเซลเซียส

(ที่อุณหภูมิ 4 องศาเซลเซียส น้ำ 1 มิลลิลิตร มีความหนาแน่นเท่ากับ 1 กรัม)

ยกตัวอย่าง ทับทิม มีความถ่วงจำเพาะ 4.00 หมายความว่า ทับทิมหนักมากกว่าน้ำที่มีปริมาตรเท่ากัน 4.00 เท่า นั่นเอง

การหาความถ่วงจำเพาะเป็นวิธีที่สำคัญในการตรวจสอบเพชรพลอย กรรมวิธีในการหาแบ่งออกเป็น 2 วิธีหลักๆ คือ

1.วิธีไฮโดรสแตติก (Hydrostatic weighing)

เป็นวิธีหาค่าความถ่วงจำเพาะอย่างละเอียด แต่มีข้อจำกัดว่าตัวอย่างควรมีน้ำหนักอย่างน้อย 1 กะรัต ถ้ามีน้ำหนักน้อยกว่านี้การหาค่าความถ่วงจำเพาะต้องมีความระมัดระวังมาก วัดโดยใช้การชั่งพลอยในอากาศและในน้ำด้วยเครื่องชั่งแล้วนำมาคำนวณตามสูตร ดังนี้

$$\text{ความถ่วงจำเพาะ} = \frac{\text{น้ำหนักพลอยในอากาศ}}{\text{น้ำหนักพลอยในอากาศ} - \text{น้ำหนักพลอยในน้ำ}}$$

2. วิธีการใช้น้ำยา (Heavy liquids)

เป็นวิธีหาค่าความถ่วงจำเพาะโดยประมาณ แต่มีข้อดี คือ ทำได้ง่ายและรวดเร็ว วัดโดยใช้น้ำยาซึ่งเป็นของเหลวที่ทราบค่าความถ่วงจำเพาะชั่งพลอย แล้วดูอัตราการจมหรือลอยของพลอยในน้ำยาที่ใช้ทดลอง น้ำยาที่นิยมใช้ตรวจสอบเพชรพลอย ได้แก่ เมทิลีนไอโอไดด์และเบนซิลเบนโซเอท การใช้วิธีนี้ต้องมีความระมัดระวังเพราะน้ำยาพวกนี้เป็นน้ำยาอันตราย

ภาคผนวก ค

น้ำหนัก (Weight)

หน่วยน้ำหนักมาตรฐานของอัญมณี เรียกว่า กะรัต (ซึ่งน้ำหนัก 1 กะรัต เท่ากับ 0.2 กรัม หรือ 200 มิลลิกรัม)

นอกจากนี้ยังมี "สูตรการประมาณค่าน้ำหนัก" ซึ่งใช้กับตัวอย่างเพชรพลอยที่ไม่สามารถชั่งได้ด้วยวิธีการปกติ ดังนี้

Sample	Formulas
1.Round faceted stones	Diameter x Diameter x Depth x S.G x 0.0018
2.Oval faceted stones (average out length and width to get diameter)	Diameter x Diameter x Depth x S.G x 0.0020
3.Emerald-cut faceted stones	Length x Width x Depth x S.G x 0.0025
4.Rectangular-cut faceted stoned	Length x Width x Depth x S.G x 0.0026
5.Square faceted stones	Length x Width x Depth x S.G x 0.0023
6.Navette or Marquise-shaped stones	Length x Width x Depth x S.G x 0.0016
7.Pear-shaped or Teardrop- shaped stones	Length x Width x Depth x S.G x 0.00175

(Gemmology : Weight Estimation Formulars, GeoGem International Ltd.)

ภาคผนวก ง

Ultraviolet and Visible Spectroscopy (UV-Vis)

การดูดกลืนแสงหรือรังสีอัลตราไวโอเล็ตและวิสิเบิลที่ช่วงความยาวคลื่นประมาณ 190-800 นาโนเมตรในสารอนินทรีย์ อย่างเช่น ไอออนและสารประกอบเชิงซ้อนของโลหะทรานซิชันแถวที่ 1 เกี่ยวข้องกับการเกิดแทรนซิชันของอิเล็กตรอนในออร์บิทัล d ซึ่งมีอิเล็กตรอนเข้าไปบรรจุเพียงบางส่วนและอิเล็กตรอนเหล่านี้โดยทั่วไปไม่ได้มีส่วนทำให้เกิดพันธะเลย สเปกตรัมที่ปรากฏเกิดจากการเปลี่ยนแปลงของระดับพลังงานของอิเล็กตรอนในออร์บิทัล d เท่านั้น

มีทฤษฎีอยู่ 2 ทฤษฎี ที่ให้เหตุผลเกี่ยวกับสีของไอออนของโลหะทรานซิชันตลอดจนอิทธิพลของสภาพแวดล้อมทางเคมีต่อการเกิดสี คือ Crystal-Field Theory ซึ่งเข้าใจได้ง่ายและให้ภาพรวมๆ ส่วนอีกทฤษฎีหนึ่ง คือ ใช้ทฤษฎีทาง Molecular orbitals ซึ่งค่อนข้างยุ่งยากกว่าแต่อธิบายได้ดีกว่า

ทั้งสองทฤษฎีได้อ้างหลักฐานว่า พลังงานของออร์บิทัล d ของไอออนโลหะทรานซิชันที่อยู่ในสารละลายนั้นไม่เท่ากัน การดูดกลืนแสงจึงเกี่ยวข้องกับการแทรนซิชันของอิเล็กตรอนจากออร์บิทัล d ที่มีพลังงานต่ำกว่าไปยังออร์บิทัล d ที่มีพลังงานสูงกว่า เมื่อไม่ได้อยู่ในสนามไฟฟ้าหรือสนามแม่เหล็ก (เช่น ในสถานะที่เป็นแก๊สและเจือจาง) ออร์บิทัล d ทั้งหมดถือว่ามีความเท่ากัน แต่เมื่ออยู่ในสถานะสารละลายหรือของแข็งออร์บิทัล d ทั้งหมดมีการแยกของระดับพลังงานเป็นผลจากการเกิดแรงผลักทางอิเล็กโตรสแตติกของสนามลิแกนด์ที่เป็นส่วนสำคัญ รวมถึง valence state ของไอออนและตำแหน่งที่อยู่ในตารางธาตุ

สีของสารประกอบเชิงซ้อนแทรนซิชัน

เมื่อให้แสงสีขาวผ่านไปยังสารตัวอย่าง สารนั้นอาจจะดูดกลืนแสงสีขาวไว้ทั้งหมดในกรณีที่เป็นสารประกอบเชิงซ้อนที่มีสีดำ แต่สำหรับสารประกอบเชิงซ้อนที่มีสีแล้ว การดูดกลืนแสงจะเกิดในช่วงแสงที่เรามองเห็น (ช่วงวิสิเบิล) โดยจะดูดกลืนแสงสีขาวไว้เพียงบางส่วนและปล่อยให้แสงส่วนที่เหลือผ่านออกมา สีที่สะท้อนออกมาให้เรา มองเห็นนั้น เรียกว่า สีองค์ประกอบ (complementary color) ของแสงที่ถูกดูดกลืนและนั่นก็คือ สีของสารประกอบเชิงซ้อน นั้นเอง ความสัมพันธ์ระหว่างสีของแสงที่ถูกดูดกลืนและที่ปล่อยออกมาแสดงในตารางข้างล่าง

ตารางที่ 35 แสดงสีที่ถูกดูดกลืนและสีที่มองเห็น

Absorption of Visible Light and Color		
Wavelength (nm)	Color (absorbed)	Color Observed (transmitted) or complementary Hue
<380	Ultraviolet	
380-435	Violet	Yellowish green
435-480	Blue	Yellow
480-490	Greenish blue	Orange
490-500	Bluish green	Red
500-560	Green	Purple
560-580	Yellowish green	Violet
580-595	Yellow	Blue
595-650	Orange	Greenish blue
650-780	Red	Bluish green
>780	Near-infrared	

ภาคผนวก จ

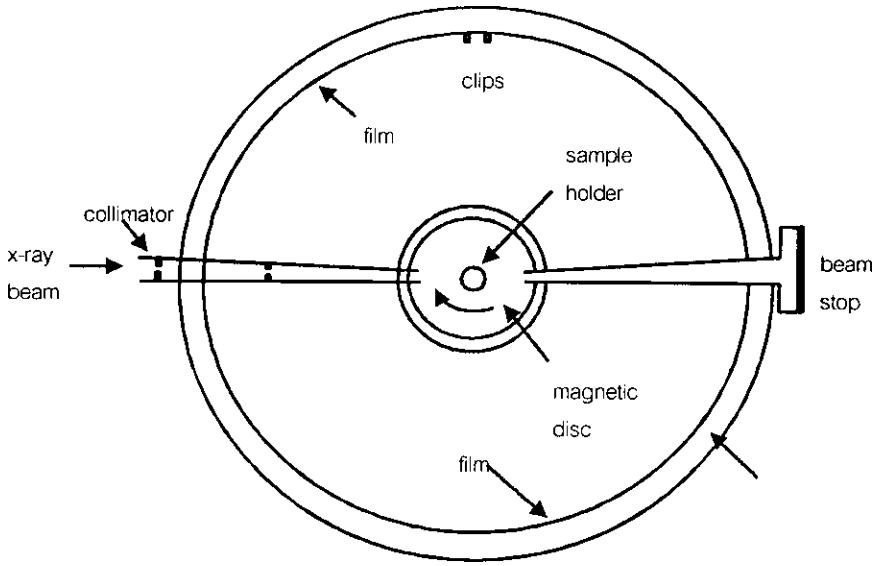
X-ray diffraction (XRD) สำหรับผลึกผง

เทคนิคนี้มีประโยชน์มากเมื่อไม่สามารถเลี้ยงผลึกให้เป็นผลึกเดี่ยวที่มีขนาดเหมาะสมกับการเก็บข้อมูลสำหรับผลึกเดี่ยวได้ หรือแม้แต่ในบางครั้งที่สามารถตกผลึกเดี่ยวได้ก็ยังคงถูกนำมาใช้ เพราะมีความง่าย ความสะดวกและรวดเร็ว ให้ข้อมูลเบื้องต้น เช่น ขนาดและรูปร่างของหน่วยเซลล์และสมมาตร เป็นต้น เพื่อใช้เป็นข้อมูลเสริมร่วมกับวิธีการอื่นๆ ซึ่งนำไปสู่ข้อมูลที่สมบูรณ์มากยิ่งขึ้น แบ่งได้เป็น 2 แบบ ดังนี้

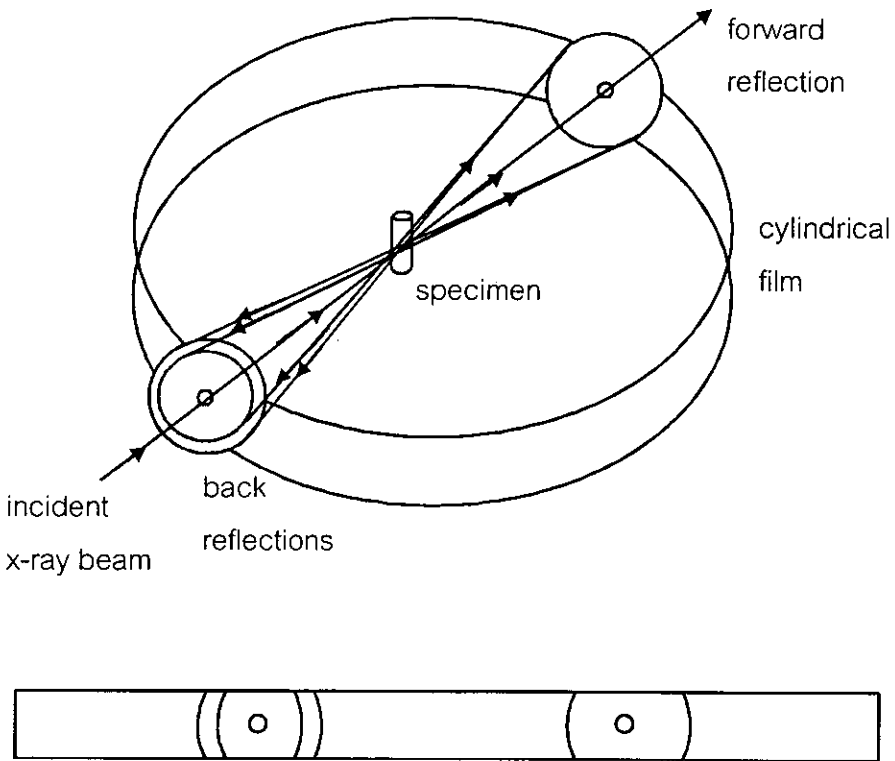
1. วิธีการถ่ายภาพสำหรับผง (Powder photographic method)

วิธีนี้ตัวอย่างอยู่ในรูปผงละเอียดซึ่งบรรจุอยู่ในหลอดแก้วคาปิลารีผนังบางหรืออาจทำให้ผงติดกับเส้นใยแก้วก็ได้ ถ้าหากผงเป็นเม็ดละเอียดและมีจำนวนมากพออาจประมาณได้ว่าผลึกผงเล็กๆเหล่านี้จะเรียงตัวในทุกทิศทางที่เป็นไปได้

ในการทดลองใช้รังสีเอกซ์ความยาวคลื่นเดี่ยวตกกระทบตัวอย่าง เนื่องจากลำรังสีเอกซ์เป็นแกนสมมาตร ดังนั้นกลุ่มของระนาบที่ทำให้เกิดการเลี้ยวเบนจะทำให้เกิดการวยรังสีเอกซ์พุ่งออกไปโดยที่ทุกทิศทางจะสอดคล้องกับกฎของแบรกก์ เก็บข้อมูลด้วยกล้อง Debye-Scherrer ดังแสดงในภาพประกอบที่ 67 และใช้ฟิล์มยาว 1 แผ่นขดเป็นรูปทรงกระบอกกลมแนบกับผนังของกล้องและใช้วิธีใส่ฟิล์มแบบของ Straumanis การตรวจจับรังสีเอกซ์จะใช้แผ่นฟิล์มบันทึกล้อมรอบและเมื่อคลี่แผ่นฟิล์มออกได้ผลดังแสดงในภาพประกอบที่ 68 วิธีนี้อาจเรียกอีกชื่อหนึ่งว่า “วิธีวัดมุมของเดอบาย-เชอร์เรอร์” (Debye-Scherrer powder method)



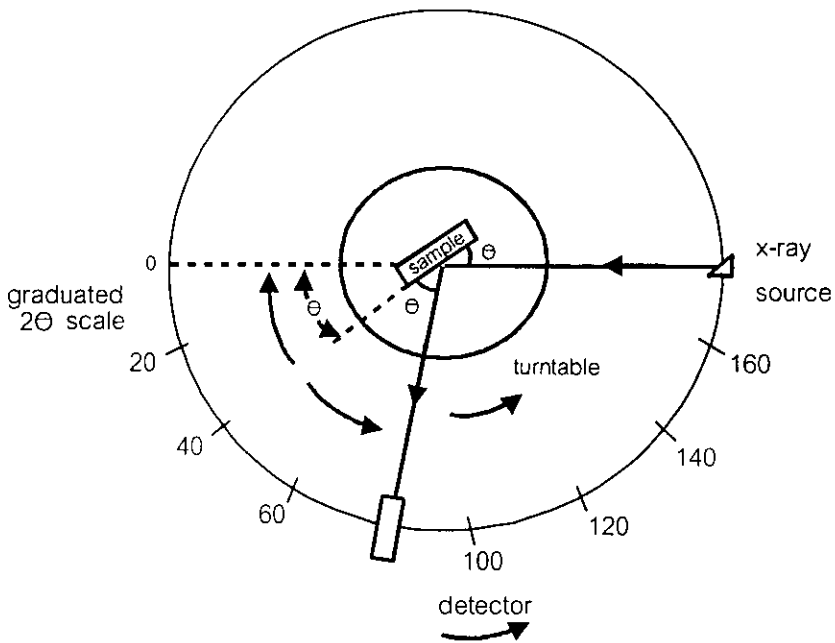
ภาพประกอบที่ 67 แสดงกล้อง Debye-Scherrer ในมุมมองแบบ Plan view
(Whiston, 1991: 49)



ภาพประกอบที่ 68 แสดงกล้อง Debye-Scherrer ในมุมมองแบบ Perspective view
และวิธีใส่ฟิล์มแบบของ Straumanis (Whiston, 1991: 51)

2. วิธีการดิฟแฟรกโทเมตรีสำหรับผง (Powder diffractometry method)

วิธีนี้บันทึกข้อมูลโดยเครื่องวัดรังสีแทนแผ่นฟิล์ม โดยใช้รังสีเอกซ์ความยาวคลื่นเดี่ยวตกกระทบตัวอย่าง ซึ่งอาจเป็นผงผลึกเดี่ยวหรือพหุผลึกก็ได้ กลไกการเลี้ยวเบนจะคล้ายกับกรณีแรก โดยตัวอย่างจะถูกหมุนไปเป็นมุม θ ในขณะที่อุปกรณ์ตรวจจับสัญญาณรังสีเอกซ์จะเคลื่อนไปเป็นมุม 2θ เพื่อให้เกิดการเลี้ยวเบนสอดคล้องกับกฎของแบรกก์ดังภาพประกอบที่ 69 แล้วรับรังสีที่สะท้อนออกมาและบันทึกความเข้ม ณ ค่ามุมต่างๆซึ่งถูกเก็บไว้ด้วยหน่วยความจำของคอมพิวเตอร์ ข้อมูลที่บันทึกได้สามารถแสดงออกมาในรูปของกราฟ เรียกว่า รูปแบบดิฟแฟรกชันของผง (Powder diffraction pattern) ซึ่ง พล็อตระหว่างความเข้มของรังสีเอกซ์กับมุม 2θ



ภาพประกอบที่ 69 แสดงเครื่องดิฟแฟรกโทมิเตอร์สำหรับผง (Whiston, 1991: 66)

Powder Diffraction File (PDF)

Powder Diffraction File เป็นฐานข้อมูลที่เกี่ยวข้องกับรูปแบบการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ของวัสดุที่ได้จากการรวบรวมรายงานการศึกษาและวิเคราะห์วัสดุด้วยเทคนิคเอกซเรย์ดิฟแฟรคชัน (X-ray diffraction) ข้อมูลส่วนใหญ่มาจากเอกสารทางวิชาการต่างๆ ก่อนจะตีพิมพ์ในหนังสือหรือ CD-ROM เป็นประจำทุกปี เพื่อใช้เป็นข้อมูลมาตรฐานสำหรับใช้ในการอ้างอิง

หากต้องการทราบข้อมูลว่าตัวอย่างที่วิเคราะห์เป็นสารแบบใดและมีโครงสร้างผลึกอย่างไร สามารถดูรายละเอียดๆได้ในบัตรข้อมูล PDF

5-628		①			②			③			④		
d	2.82	1.99	1.63	3.26	NaCl						★		
I/I ₁	100	55	15	13	Sodium Chloride						(Halite)		
Rad. CuKα	λ 1.5405	Fiter Ni	Dia.										
Cutt off	I/I, Diffractometer	I/I cor.											
⑤	Ref. Swanson and Fayat, NBS Circular 539, Vol. 2, 41 (1953)												
Sys. Cubic	S.G. Fm3m (225)			d A	I/I ₁	hkl	d A	I/I ₁	hkl				
a ₀ 5.6402	b ₀	c ₀	A	C	3.258	13	111						
α	β	γ	Z4	Dx 2.164	2.821	100	200						
⑥	Ref. I bid												
σα	nαβ 1.542	σγ	Si gn	1.994	55	220							
2v	D	mp	Color Colorless	1.701	2	311							
⑦	Ref. I bid												
An ACS reagent grade sample recrystallized twice from hydrochloric acid				1.628	15	222							
X-Ray pattern at 26°C				1.410	6	400							
Merek Index, 8 th Ed., p. 956				1.294	1	531							
Halite-galena-pericelase group.				1.261	11	420							
				1.1515	7	422							
				1.0855	1	511							
				0.9909	2	440							
				0.9533	1	531							
				0.9401	3	600							
				0.8917	4	620							
				0.8601	1	533							
				0.8503	3	622							
				0.8141	2	444							
				⑧									

ภาพประกอบที่ 70 แสดงตัวอย่างบัตรข้อมูล PDF ของ NaCl (บัญชี, 2544 : 152)

บัตรข้อมูล PDF ประกอบด้วยส่วนที่สำคัญดังนี้คือ

1. เซ็ตและหมายเลขไฟล์ (set and file number)
2. พีคที่มีความเข้มมากที่สุด 3 ลำดับแรก (three strongest lines)
3. พีคที่มีตำแหน่งมุมต่ำที่สุด (lowest-angle line)
4. สูตรเคมีและชื่อสาร (chemical formula and name of substance)

5. ข้อมูลวิธีการเลี้ยวเบนที่ใช้ (data on diffraction method used) เช่น แหล่งกำเนิดเอกซเรย์ เป็นต้น
6. ข้อมูลทางผลึกวิทยา (crystallography data) เช่น รูปร่างผลึกและขนาดหน่วยเซลล์ เป็นต้น
7. ข้อมูลทางแสงและอื่นๆ (optical and other data)
8. ข้อมูลของตัวอย่างที่ทำการวิเคราะห์ (data on specimen)
9. รูปแบบการกระเจิงรังสีเอกซเรย์ของวัสดุ (diffraction pattern) จะบอกค่าความเข้มสัมพัทธ์ (I/I_1) ซึ่งแสดงเป็นเปอร์เซ็นต์ของพีกที่มีความเข้มสูงสุดและระนาบผลึก (hkl)

ที่มุมขวามันจะมีสัญลักษณ์ที่แสดงระดับความน่าเชื่อถือของข้อมูล ดังนี้ คือ

- | | |
|----------------|---|
| ★ | คุณภาพสูง (high quality) |
| i | ความเชื่อถือได้พอใช้ (lines indexed, intensities fairly reliable) |
| c | รูปแบบที่ได้จากการคำนวณ (calculated pattern) |
| o | ความเชื่อถือได้ต่ำ (low reliability) |
| ไม่มีสัญลักษณ์ | ไม่ได้รับการกำหนด (undetermined quality) |

ฐานข้อมูลจะจัดเป็นกลุ่มและมีรูปแบบใหม่ๆ เพิ่มขึ้นเรื่อยๆ ประมาณ 2,000 รูปแบบต่อปี ในปัจจุบันมีข้อมูลอย่างน้อย 60,000 รูปแบบ นอกจากนี้ยังมีวิธีการปรับปรุงวิธีการสืบค้นข้อมูลด้วยคอมพิวเตอร์เพื่อให้ได้ความถูกต้องมากที่สุด วิธีการเหล่านี้มีความแตกต่างกันแล้วแต่ผู้ศึกษาจะเน้นด้านใด เช่น วิธีของ Hanawalt เน้นความถูกต้องในความเข้มของพีก (intensity) วิธีของ Fink เน้นความถูกต้องของตำแหน่งซึ่งเทียบเท่ากับค่าระยะห่างระหว่างระนาบผลึก d_{hkl} หรือ วิธีที่เน้นชนิดของธาตุที่มีอยู่ในสารที่กำลังศึกษานั้น (บัญชา, 2544 : 151-152)

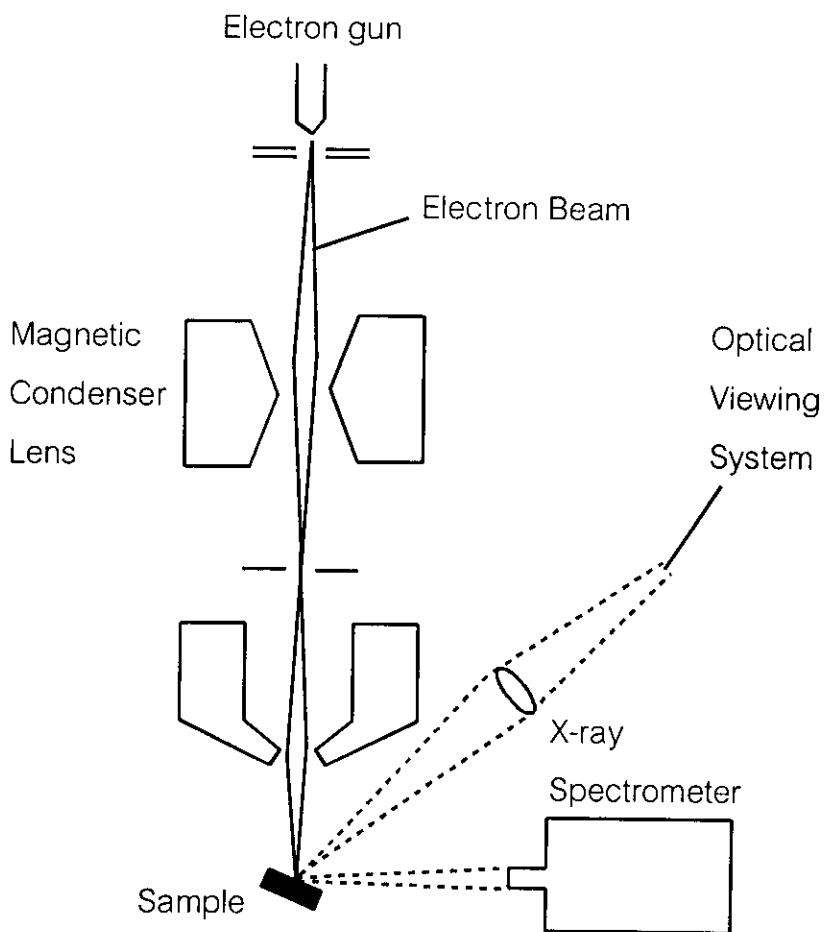
ภาคผนวก จ

Electron Probe Microanalysis (EPMA)

Electron probe microanalysis เป็นอีกเทคนิคหนึ่งที่ใช้ในการตรวจหาองค์ประกอบของสารตัวอย่างทั้งเชิงคุณภาพและปริมาณ และยังเป็นเทคนิคที่นิยมใช้วิเคราะห์ในทางอัญมณี มีข้อได้เปรียบเรื่องการไม่ทำลายตัวอย่าง อีกทั้งยังวิเคราะห์พวกตำหนักที่มีความกว้างขนาดไมโครเมตรได้อย่างสมบูรณ์ รวมถึงยังเลือกบริเวณหรือจุดที่ต้องการได้ เช่น บริเวณตำหนักภายใน หรือ บริเวณแถบสี และใช้เวลาในการวิเคราะห์สั้นเมื่อเทียบกับวิธีทางเคมีที่เป็น wet chemical method (Dunn, 1977)

หลักการทำงาน คือ ต้องมีการกระตุ้นตัวอย่างด้วยลำอิเล็กตรอนที่มีพลังงานสูงซึ่งอยู่ในช่วง 10-50 keV เมื่ออะตอมของธาตุต่างๆในสารตัวอย่างถูกกระตุ้นก็จะปล่อยพลังงานออกมาในรูปรังสีเอกซ์เฉพาะซึ่งปริมาณรังสีที่คายนี้จะเป็นสัดส่วนกับปริมาณธาตุที่มีในตัวอย่าง

ไมโครโพรบ ประกอบด้วย 4 ส่วนพื้นฐาน คือ Electron gun , Electromagnetic focusing lenses , Spectrometer and Associated electronic system และ microscope ดังภาพประกอบที่ 71 โดย electron gun ตั้งอยู่ในส่วนที่เป็นรูปกรวยที่อยู่บนสุดของ microprobe และภายในบรรจุด้วยลวดทังสเตน เมื่อให้ความต่างศักย์ 15-20 keV เข้าไป อิเล็กตรอนก็จะเกิดการหลุดออกจากผิวหน้าของลวดและผ่านไปยังช่องที่มี electromagnetic focusing lenses ซึ่งทำหน้าที่รวมลำแสงอิเล็กตรอน (ตัวเลนส์นี้สามารถทำให้ลำแสงมีขนาดเล็กได้ถึง 1 ไมโครเมตร) แล้วผ่านออกไปที่สารตัวอย่าง อะตอมของธาตุในสารตัวอย่างจะปล่อยพลังงานออกมาในรูปรังสีเอกซ์เฉพาะออกมาทำให้ทราบถึงองค์ประกอบของธาตุในสารตัวอย่างได้



ภาพประกอบที่ 71 แสดงเครื่องอิเล็กตรอนโพรบไมโครแอนาไลต์เซอร์
(Christian and Reilly, 1986: 444)

ภาคผนวก ช

Energy dispersive x-ray fluorescence (EDXRF) spectrometry

Energy dispersive x-ray fluorescence (EDXRF) หรือ การเรืองแสงแบบกระจายพลังงาน เป็นการศึกษาทางสเปกโทรสโกปีที่เกี่ยวข้องกับการปล่อยพลังงาน เทคนิคนี้ได้รับความนิยมและถูกนำไปใช้หลายแนวทางด้วยกันเพื่อตรวจวัดธาตุที่เป็นองค์ประกอบในสารตัวอย่างทั้งเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณ เนื่องจากมีข้อได้เปรียบในการใช้งานเมื่อเทียบกับเครื่องมืออื่นอยู่หลายประการ เช่น ตรวจวิเคราะห์เชิงคุณภาพได้ในเวลาอันรวดเร็วและตรวจได้คราวละหลายๆธาตุพร้อมกัน (multi-element capability) ไม่ทำลายสารตัวอย่างหรือทำให้สารตัวอย่างสูญเสียสภาพเดิม (non-destructive method) ใช้สารตัวอย่างในสภาพของแข็งได้ เป็นต้น

หลักการโดยย่อของเทคนิคนี้ คือ ต้องมีการกระตุ้นสารตัวอย่างก่อนด้วยรังสีเอกซ์จากหลอดรังสีเอกซ์หรือไอโซโทปของธาตุกัมมันตรังสี เมื่ออะตอมของธาตุต่างๆในสารตัวอย่างถูกกระตุ้นก็จะปล่อยพลังงานออกมาในรูปรังสีเอกซ์เฉพาะ (characteristic x-ray) ออกมา ซึ่งบอกได้ว่าสารตัวอย่างมีองค์ประกอบของธาตุใดเนื่องจากแต่ละธาตุมีรังสีเอกซ์เฉพาะไม่เหมือนกัน

ในการศึกษาควรพิจารณาถึงความสัมพันธ์ระหว่างธาตุกับการแผ่รังสีเอกซ์ประกอบด้วย นั่นคือ เมื่อรังสีเอกซ์เกิดอันตรกิริยากับอิเล็กตรอนในอะตอมของธาตุ ผลอันตรกิริยาอาจทำให้เกิดการดูดกลืนหรือการกระเจิงของรังสีเอกซ์ขึ้น

1. การดูดกลืนเชิงมวล

เมื่อรังสีเอกซ์เดินทางผ่านวัตถุ โฟตอนของรังสีเอกซ์มีอันตรกิริยากับอิเล็กตรอนในอะตอมของวัตถุนั้นซึ่งมีผลให้ความเข้มลดลง อันตรกิริยาที่เกิดขึ้นอาจทำให้เกิดการปลดปล่อยอิเล็กตรอนแบบโฟโตอิเล็กทริกหรือทำให้เกิดการกระเจิงของรังสีซึ่งผลรวมที่เกิดขึ้นนี้ก็ทำให้ความเข้มชั้นลดลงตามสมการ

$$I_\lambda = I_0 \cdot e^{-\mu_1 \cdot x}$$

$$= I_0 \cdot e^{-\mu \rho x}$$

โดย $\mu = \frac{\mu_1}{\rho}$

ในที่นี้ I_λ เป็นความเข้มของรังสีเอกซ์ (ที่มีความยาวคลื่น λ) หลังจากเดินทางผ่านวัตถุ

I_0 เป็นความเข้มของรังสีเอกซ์ก่อนผ่านวัตถุ

x เป็นความหนาของวัตถุ (หรือระยะทางที่รังสีเอกซ์เดินทางผ่าน) มีหน่วยเป็น cm

μ_1 เป็นสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงเส้น (linear absorption coefficient) ของวัตถุที่มีหน่วยเป็น cm^{-1}

μ เป็นสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงมวล (mass absorption coefficient) ของวัตถุที่มีหน่วยเป็น cm^2/g

ρ เป็นความหนาแน่นของวัตถุมีหน่วยเป็น g/cm^3

ค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงมวลเป็นค่าเฉพาะของสารนั้นในการดูดกลืนรังสีเอกซ์ค่าพลังงานหนึ่ง ถ้าใช้รังสีเอกซ์พลังงานเท่ากันสารต่างชนิดจะมีค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงมวลต่างกันและสำหรับสารชนิดเดียวกันถ้าใช้รังสีเอกซ์พลังงานต่างๆค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนก็ต่างกันด้วย สารที่ประกอบด้วยธาตุอะตอมขนาดใหญ่หรือธาตุที่มีเลขอะตอมสูงจะมีสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงมวลมากตามด้วย

2.ปรากฏการณ์โฟโตอิเล็กทริก

ในการดูดกลืนรังสีเอกซ์โดยวัตถุนั้นอาจเกิดขึ้นจากหลายกระบวนการ แต่ที่สำคัญและมีผลมากที่สุด คือ ปรากฏการณ์โฟโตอิเล็กทริก (photoelectric effect) ซึ่งเป็นกระบวนการดูดกลืนรังสีเอกซ์เอาไว้โดยอะตอม ก่อนการดูดกลืนรังสีอะตอมจะอยู่ในสถานะพื้น ในระหว่างการดูดกลืนรังสีเอกซ์จะเกิดปรากฏการณ์โฟโตอิเล็กทริก คือ อิเล็กตรอนในชั้นใดชั้นหนึ่งของอะตอมถูกกระตุ้นทำให้หลุดออกไปจากอะตอมเป็นอิเล็กตรอนอิสระ อะตอมที่เสียอิเล็กตรอนไปแล้วนี้ก็เป็นอะตอมในสถานะกระตุ้นโดยมีที่ว่างเกิดขึ้นในชั้นพลังงานที่มีการสูญเสียอิเล็กตรอนไป อิเล็กตรอนที่อยู่ในชั้นสูงกว่าก็จะปรับตัวลงมาอยู่ในช่องว่างนี้แทน การตกของอิเล็กตรอนชั้นบนมาสู่ช่องว่างนี้เกิดขึ้นเร็วมากภายในประมาณ 10^{-12} - 10^{-14} วินาที หลังจากเกิดที่ว่างนั้น ในการปรับตัวลงมาสู่ชั้นที่มีพลังงานต่ำกว่านี้ อิเล็กตรอนจะต้องลดพลังงานที่มีมากเกินไปอยู่ในรูปของคลื่นหรือรังสีแม่เหล็กไฟฟ้าซึ่งมีพลังงานสูงอยู่ในช่วงรังสีเอกซ์ รังสีที่คายหรือปล่อยออกมาจะมีค่าเฉพาะสำหรับแต่ละชั้นพลังงานและแต่ละธาตุด้วย ธาตุแต่ละธาตุปล่อยรังสีเอกซ์ออกมามีค่าพลังงานไม่เท่ากัน รังสีนี้ก็คือ รังสีเอกซ์เฉพาะ

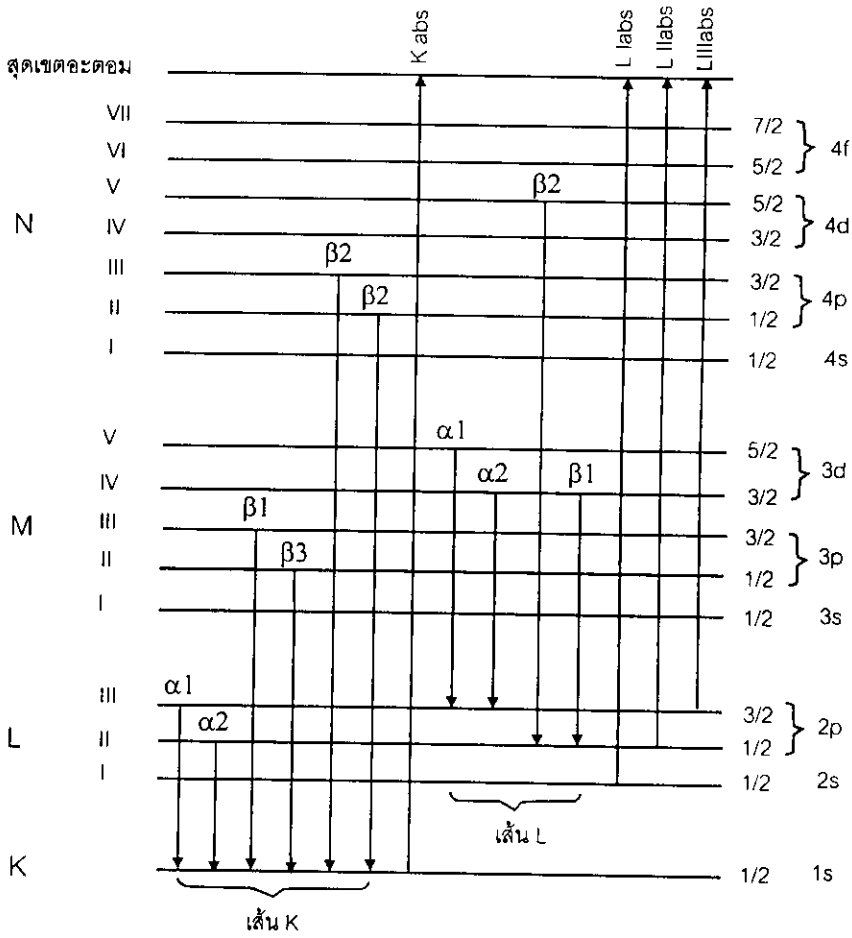
การตกลงมาของอิเล็กตรอนสู่ชั้น K มีเฉพาะบางอิเล็กตรอนเท่านั้นที่ตกลงมาได้ ทั้งนี้ถูกกำหนดโดย "กฎการเลือก" (Selection rules) ซึ่งเป็นข้อกำหนดทางทฤษฎี

$$\Delta n > 0$$

$$\Delta \ell = \pm 1$$

$$\Delta j = \pm 1, 0$$

โดย n คือ เลขควันตัมหลัก (principle quantum number) , ℓ คือ เลขควันตัมของโมเมนตัมเชิงมุม (angular momentum quantum number) , j คือ ผลรวมในทางเวกเตอร์ของ ℓ กับ s ซึ่งกำหนดไว้ดังนี้ $j = |\ell + s|$ โดย s คือ เลขควันตัมสปินของอิเล็กตรอน (spin quantum number)



ภาพประกอบที่ 72 แสดงการเปลี่ยนระดับของอิเล็กตรอนที่ทำให้เกิดเส้น K และ L (สัมพันธ์, 2541 : 49)

การเปลี่ยนระดับของอิเล็กตรอนหรือการตกลงมานั้น ถ้าเปลี่ยนแบบยินยอมผลที่ตามมา คือ ทำให้สังเกตเห็นเป็นเส้นสเปกตรัม เส้น K เกิดการเปลี่ยนระดับของอิเล็กตรอนลงมาสู่ที่ว่างในชั้น K (โดยแนวทางเดียวกัน ถ้าที่ว่างอยู่ในชั้นอื่น เช่น ชั้น L ก็จะทำให้เกิดเส้น L) ดังแสดงในภาพประกอบที่ 72 เส้น K มีได้หลายเส้นแบ่งเป็น $K\alpha_1$, $K\alpha_2$, $K\beta_1$, $K\beta_2$ เป็นต้น แต่เส้นที่เข้มสุด คือ $K\alpha_1$

3. การกระเจิง

เมื่อรังสีเอกซ์พุ่งเข้ามากกระทบที่วัตถุซึ่งประกอบด้วยอะตอมต่างๆรวมกลุ่มอยู่ด้วยกันเป็นจำนวนมาก รังสีเอกซ์จะชนกับอิเล็กตรอนที่อยู่ชั้นนอกของอะตอมเหล่านี้ทำให้เกิดการกระเจิง (scattering) ของลำรังสีเอกซ์ได้ การกระเจิงมีส่วนเกี่ยวข้องของสัญญาณพื้นหลังที่ปรากฏในสเปกตรัมมาก แบ่งเป็น 2 แบบ คือ

-การกระเจิงแบบเรย์ลี (Rayleigh scattering) หรือ coherent scattering เกิดการชนแบบยืดหยุ่น (elastic collision) ไม่มีการสูญเสียพลังงานของรังสีเอกซ์แต่ทิศทางของรังสีเอกซ์เปลี่ยนไป การกระเจิงแบบนี้เกิดได้มากในธาตุที่มีเลขอะตอมสูง เพราะว่าอิเล็กตรอนดึงดูดกับนิวเคลียสไว้มั่นทำให้สูญเสียอิเล็กตรอนได้ยาก สัมประสิทธิ์การกระเจิงแบบเรย์ลีแทนด้วย σ_{coh}

-การกระเจิงแบบคอมป์ตัน (Compton scattering) หรือ incoherent scattering เกิดการชนแบบไม่ยืดหยุ่น (inelastic collision) มีการสูญเสียพลังงานของรังสีเอกซ์ไปบางส่วน (ซึ่งก็คือการดูดกลืน) ในการชนให้อิเล็กตรอนหลุดออกไปรังสีเอกซ์ที่เหลือมีพลังงานลดลงและทิศทางเปลี่ยนไปด้วย การกระเจิงแบบนี้เกิดได้มากในธาตุที่มีเลขอะตอมต่ำ เพราะว่าอิเล็กตรอนดึงดูดกับนิวเคลียสไว้มั่นอิเล็กตรอนหลุดได้ง่าย สัมประสิทธิ์การกระเจิงแบบคอมป์ตันแทนด้วย σ_{inc}

4. การเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์

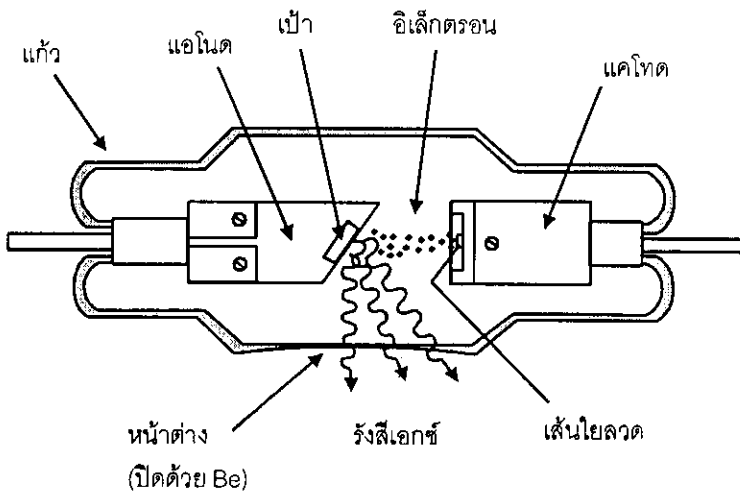
ในกรณีที่สารตัวอย่างเป็นของแข็งที่มีความเป็นผลึกสูง เช่น ผลึกที่ได้จากการเลี้ยง (crystal growing) หรือตกผลึกมาอย่างดีจะมีปรากฏการณ์อีกอย่างหนึ่งเกิดขึ้นด้วย คือ การเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ (x-ray diffraction)

- ส่วนประกอบหลักของเครื่อง

1. หลอดรังสีเอกซ์ (X-ray Tube)

การใช้รังสีเอกซ์ที่สามารถปรับเลือกค่าพลังงานได้ตามต้องการจะเป็นแหล่งพลังงานที่ใช้กระตุ้นสารตัวอย่างที่มีประสิทธิภาพมากและแหล่งกำเนิดรังสีเอกซ์ที่สะดวกคือ หลอดรังสีเอกซ์ นั่นเอง

หลอดกำเนิดรังสีเอกซ์เป็นหลอดที่ภายในเป็นสุญญากาศ ภายในหลอดมีแคโทดและแอโนดต่อกับศักย์ไฟฟ้าชุดหนึ่งซึ่งเป็นศักย์สูง แคโทดมีศักย์ไฟฟ้าเป็นลบและมีเส้นใยลวดซึ่งต่อกับศักย์อีกชุดหนึ่งเป็นศักย์ไฟฟ้าต่ำ แอโนดมีศักย์ไฟฟ้าเป็นบวกและเคลือบด้วยธาตุที่เป็นเป้า ซึ่งเป็นแหล่งกำเนิดรังสีตามพลังงานที่ต้องการ เช่น ทองแดง (Cu) โครเมียม (Cr) โรเดียม (Rh) ทังสแตน (W) เป็นต้น



ภาพประกอบที่ 73 แสดงส่วนประกอบของหลอดรังสีเอกซ์แบบ Coolidge

(สัมพันธ์, 2541 : 80)

เมื่อเส้นใยลวดที่มีศักย์ไฟฟ้าต่ำถูกทำให้ร้อนจะปล่อยอิเล็กตรอนออกมาซึ่งจะถูกเร่งโดยศักย์ไฟฟ้าสูงเข้าหาแอโนด อิเล็กตรอนที่ถูกเร่งนี้มีพลังงานจลน์สูงและในการเคลื่อนที่เข้าหาเป้าหรือแอโนดนั้นก็จะมีผลกระทบความเร็วลงไปบ้างเนื่องจากเกิดการผลักรันกับอิเล็กตรอนในอะตอมของธาตุที่เป็นเป้า และหลังจากนั้นก็เข้าไปชนเป้าทำให้เกิดปรากฏการณ์โฟโตอิเล็กทริก ทั้งการชะลอความเร็วและการชนจนเกิดโฟโตอิเล็กตรอนทำให้เกิดรังสีเอกซ์แบบต่อเนื่องและรังสีเอกซ์เฉพาะของธาตุที่เป็นเป้า รังสีเหล่านี้ก็คือ รังสีเอกซ์ที่จะนำไปใช้ในการกระตุ้นสารตัวอย่างต่อไป จุดที่เป็นทางออกของรังสีเอกซ์จะปิดด้วยแผ่นโลหะบางที่ทำจากธาตุเบอริลเลียม (Be) เพื่อรักษาความเป็นสุญญากาศ สาเหตุที่ใช้ธาตุนี้เนื่องจากเป็นธาตุที่มีเลขอะตอมต่ำทำให้ดูดกลืนรังสีน้อยและรีดเป็นแผ่นบางได้ง่าย

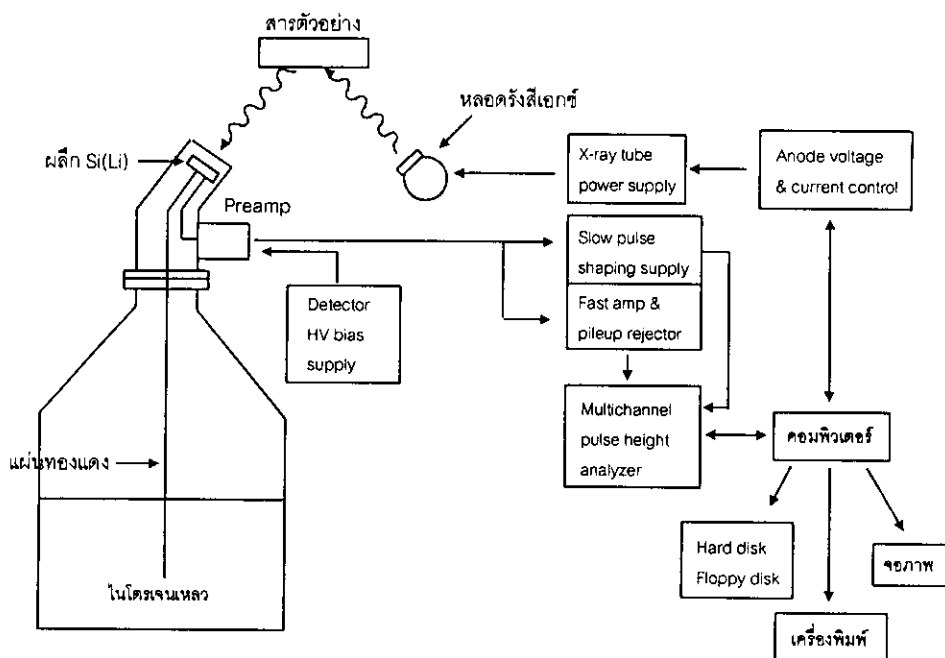
ตารางที่ 36 แสดงธาตุและรังสีเอกซ์เฉพาะที่นิยมใช้ทำแอโนดในหลอดรังสีเอกซ์

ธาตุ	พลังงานของรังสีเอกซ์เฉพาะ (keV)
Ag	22.1 K α
	2.98 L α
Au	8.49 L α
Cr	5.41 K α
Cu	8.04 K α
Rh	20.2 K α
	2.70 L α
W	8.40 L α

(สั้มพันธ์, 2541 : 86)

2. หัววัด (Detector)

ในเครื่อง EDXRF ที่ศึกษาเป็นหัววัดกึ่งตัวนำ (Semiconductor detector) แบบ Si(Li) : (Lithium-drifted Silicon detector) โดยใช้ผลึกซิลิคอนที่ทำเป็นแบบพีแล้วเคลือบด้านหนึ่งด้วยลิเทียม (Li) ซึ่งเป็นธาตุประเภทตัวให้ (donor) จึงทำให้ด้านนี้เป็นแบบเอ็น หลังจากนั้นนำไปอบให้ความร้อนอะตอม Li จะแพร่ซึมเข้าไปในผลึกซิลิคอนและจะแพร่อยู่ตลอดเวลา ถ้าไม่ชะลอการแพร่นี้จะทำให้เสียประสิทธิภาพได้ ดังนั้นจึงใช้ความเย็นยวดยิ่งของไนโตรเจนเหลว (Liquid nitrogen) หัววัดส่วนหนึ่งแช่อยู่ในไนโตรเจนเหลวตลอดเวลาจะไหลมาเฉพาะส่วนที่เป็นตัววัดรังสีเท่านั้นและภายในบริเวณหัววัดต้องเป็นสุญญากาศเพื่อลดการสูญเสียความเย็นแก่บรรยากาศ (มีฉะนั้นจะสิ้นเปลืองไนโตรเจนเหลว) หัววัดด้านที่รับรังสีปกคลุมเปิดโล่งเพื่อรับรังสีเข้ามาเต็มที่ แต่เนื่องจากต้องเป็นสุญญากาศจึงต้องปิดด้วยวัสดุที่บาง เช่น แผ่นเบอริลเลียม (Be)



ภาพประกอบที่ 74 แสดงแผนภาพองค์ประกอบเครื่อง EDXRF (สัมพันธ์, 2541 : 111)

3. ส่วนการประมวลผล

กระบวนการประมวลผลการแจกแจงค่าพลังงานต่างๆของรังสีเอกซ์เฉพาะที่เข้าสู่หัววัดเกิดขึ้นเมื่อแต่ละหน่วยโฟตอนของรังสีเอกซ์เกิดไอโอไนเซชันและเกิดประจุเพื่อให้เกิดเป็นสัญญาณไฟฟ้าที่มีขนาดเป็นสัดส่วนกับพลังงานของโฟตอนต่อนั้น บ่อนเข้าสู่ preamplifier ที่ทำหน้าที่ปรับสัญญาณจากหัววัดให้เป็นสัดส่วนกับพลังงานรังสีแล้วส่งต่อไปยังส่วนที่เรียกว่าหน่วยประมวลผลพัลส์ (pulse processor) เพื่อขยาย (amplifier) และปรับรูปร่าง (shaping) สัญญาณให้พอเหมาะเพื่อเปลี่ยนสัญญาณนี้เป็นสัญญาณเชิงตัวเลขโดยวงจรที่เรียกว่า Analog-to-Digital Converter หรือมักเรียกย่อๆว่า ADC เมื่อผ่านวงจรนี้แล้วจะเปลี่ยนเป็นสัญญาณดิจิทัลและแสดงผลเป็นสเปกตรัมออกมา

• ขีดจำกัดในการตรวจหา (Detection limit)

ขีดจำกัดในการตรวจหา หมายถึง ปริมาณหรือความเข้มข้นต่ำสุดของธาตุใดๆที่จะสามารถตรวจวัดได้โดยเครื่องมือและวิธีการที่เลือกมาใช้ในการวิเคราะห์ พารามิเตอร์ตัวนี้จะสะท้อนถึงความสามารถของเครื่องมือและวิธีการที่ใช้ในการตรวจวิเคราะห์ธาตุแต่ละชนิด ค่าขีดจำกัดในการตรวจหาของแต่ละธาตุไม่เท่ากัน แม้แต่ธาตุเดียวกัน แต่ถ้าอยู่ในสารตัวอย่างที่เนื้อสารต่างกันก็มีค่าต่างกันด้วย

สำหรับวิธีการนั้นจะให้ใช้ปริมาณหรือความเข้มข้นต่ำสุดที่สามารถให้สัญญาณเท่ากับสามเท่าของค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของสัญญาณพื้นหลังในบริเวณเดียวกัน สาเหตุที่ใช้สามเท่า (ซึ่งทำให้เลข 3 ปรากฏในสมการนั้น) เป็นเพราะใช้ระดับความเชื่อมั่น 99% ซึ่งคลุมช่วงกว้าง ± 3 (ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน) นั้นเอง

$$C_{DL} = \frac{3\sqrt{I_b}}{M\sqrt{t}}$$

- C_{DL} เป็นความเข้มข้นต่ำสุดที่สามารถจะตรวจวัดได้
- I_b เป็นความเข้มของสัญญาณพื้นหลัง มีหน่วยเป็น cps
- M เป็นความเข้มข้นของรังสีเอกซ์เฉพาะของธาตุต่อความเข้มข้น มีหน่วยเป็น cps / % หรือ cps / ppm (ถ้าใช้เป็น % หรือ ppm ตามลำดับ)
- t เป็นเวลาที่ใช้ในการตรวจวัด

ถ้านำค่าขีดจำกัดในการตรวจหาจากเครื่อง XRF หลายเครื่องมาเปรียบเทียบกับต้องแน่ใจว่าในการได้มาซึ่งค่าขีดจำกัดในการตรวจหาเหล่านั้นใช้วิธีการเดียวกันเหมือนกันทุกประการ บางคนใช้เกณฑ์ว่าสำหรับการวิเคราะห์เชิงปริมาณนั้นความเข้มข้นของธาตุควรมากกว่าสามเท่าของขีดจำกัดในการตรวจหา (C_{DL}) ขึ้นไป

• วิธีพารามิเตอร์หลักมูล (Fundamental Parameters)

วิธีนี้เป็นการหาปริมาณโดยใช้การคำนวณและอาศัยพารามิเตอร์หลักมูล ความเข้มของธาตุ A อาจคำนวณตามสูตรข้างล่าง โดยมีสมมุติฐานว่ารังสีที่มากระตุ้นเป็นรังสีพลังงานเดียว (monochromatic radiation)

$$I_L = I_0 \cdot \omega_A \cdot g_L \cdot \frac{r_A - 1}{r_A} \cdot \frac{dQ}{4\pi} \left(\frac{C_A \cdot \mu_A(\lambda_{pri}) \cdot \text{CSC } \phi}{\mu_M(\lambda_{pri}) \cdot \text{CSC } \phi + \mu_M(\lambda_L) \cdot \text{CSC } \psi} \right)$$

โดยสัญลักษณ์ต่างๆในสูตร มีความหมายดังนี้

- I_L ความเข้มรังสีเอกซ์เฉพาะของธาตุที่ต้องการวิเคราะห์
- I_0 ความเข้มรังสีเอกซ์จากหลอด (ที่ความยาวคลื่น λ_{pri})
- λ_{pri} ความยาวคลื่นรังสีเอกซ์จากหลอด
- λ_L ความยาวคลื่นรังสีเอกซ์เฉพาะของธาตุที่ต้องการวิเคราะห์

ω_A	ผลผลิตการร้าวแสงของธาตุ A (ธาตุที่ต้องการวิเคราะห์)
g_L	เศษส่วนทางทฤษฎีของการเกิดฟลัก (ที่จะใช้ในการวิเคราะห์)
r_A	ค่าจัมป์เรโซที่ขอบการดูดกลืนของธาตุ A
C_A	ความเข้มข้นของธาตุ A
$dQ/4\pi$	เศษส่วนของรังสีเอกซ์เฉพาะที่ไปสู่หัววัด
$\mu_A(\lambda_{pri})$	สัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงมวลของธาตุ A ที่ λ_{pri}
$\mu_M(\lambda_{pri})$	สัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงมวลของเมทริกซ์ ที่ λ_{pri}
$\mu_M(\lambda_L)$	สัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงมวลของเมทริกซ์ ที่ λ_L
ϕ	มุมตกกระทบของรังสีเอกซ์จากหลอดที่ผิวหน้าของสารตัวอย่าง
ψ	มุมที่รังสีเอกซ์เฉพาะตัวพุ่งออกที่ผิวหน้าของสารตัวอย่าง

โดย λ_{pri} เป็นค่าใดค่าหนึ่งเท่านั้น นั่นคือ รังสีเอกซ์ที่มากระตุนั้นเป็นรังสีพลังงานเดียวและมุม ϕ และ ψ ก็เป็นค่าเฉพาะของเครื่องมือแต่ละเครื่อง ส่วนค่าคงที่อื่นๆ ก็ต้องเปิดจากหนังสือคู่มือ จะเห็นว่าสมการนี้ในแง่ของการคำนวณก็ยากพอสมควรทีเดียว ยิ่งใช้กับรังสีหลายค่าพลังงานและรวมทั้งสารตัวอย่างที่มีธาตุอยู่หลายธาตุด้วยแล้วสมการนี้จะยุ่งยากซับซ้อนกว่านี้อีก โดยปกติแนวทางการคำนวณจะใช้ไมโครคอมพิวเตอร์เข้ามาช่วย ถ้าต้องการทราบความเข้มข้น C_A แล้วต้องทราบค่า I_L ก่อน ซึ่งทำได้โดยใช้เครื่อง EDXRF ตรวจวัดสเปกตรัมออกมา แล้วอ่านค่าความเข้มของฟลักเป็นค่า I_L ป้อนกลับเข้าไปในสมการ

ดังนั้นจะเห็นว่า วิธีพารามิเตอร์หลักมูลนี้สามารถคำนวณค่าความเข้มข้นของแอนาไลต์ได้จากการวัดความเข้มของฟลักและค่าพารามิเตอร์ที่สำคัญพื้นฐานหรือพารามิเตอร์หลักมูล คือ ค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืน และ ผลผลิตการร้าวแสง (ถ้าเป็นรังสีหลายพลังงาน ก็ต้องมีข้อมูลการจำแนกพลังงานของรังสีที่ใช้ด้วย) ดังนั้นขีดจำกัดของวิธีนี้ส่วนหนึ่งจึงขึ้นกับความแม่นยำของค่าเหล่านี้ด้วย

ค่าที่ต้องทำการวัดจากการทดลองมีเพียงค่าเดียว คือ ความเข้มข้น ในการคำนวณนั้นจะเป็นการคำนวณซ้ำ (iteration) หลายรอบ โดยตั้งต้นจากค่าประมาณในครั้งแรก แนวทางในการคำนวณอธิบายดังนี้

$$C_i' = \frac{I_{\text{measd}}}{I_i} \cdot C_i$$

- C_i เป็นค่าความเข้มข้นประมาณที่ใช้เริ่มต้นในการคำนวณรอบแรก
- C_i' เป็นความเข้มข้นที่คำนวณได้ใหม่
- I_{measd} เป็นค่าความเข้มข้นที่วัดได้จากการทดลองจริง
- I_i เป็นค่าความเข้มข้นที่คำนวณจาก C_i

ในการคำนวณมีขั้นตอนการทำงาน คือ

- (1) ประมาณค่าความเข้มข้น C_i ของทุกแอนาไลต์ โดยเทียบเคียงกับค่า I_{measd} ของทุกแอนาไลต์
 - (2) ปรับผลรวมของ I_{measd} ของทุกแอนาไลต์เป็น 1 (normalization)
 - (3) คำนวณค่า I_i ของแต่ละแอนาไลต์
 - (4) ใช้สมการข้างต้นคำนวณค่า C_i' ของทุกแอนาไลต์
 - (5) ปรับค่า C_i' ของทุกแอนาไลต์เป็น 1
 - (6) นำค่า C_i' มาคำนวณหาค่า I_i'
 - (7) นำค่า C_i' และ I_i' แทนในสมการข้างต้นแล้วคำนวณ C_i'' ต่อไป
- การคำนวณจะซ้ำเช่นนี้ไปเรื่อยๆ ไปจนกว่าค่า C_i' ที่ได้ในขั้นสุดท้ายอยู่ในระดับที่น่าพอใจ

ภาคผนวก ซ

การถ่ายรูป (Photography)

กล้องจุลทรรศน์สเตอริโอ

กล้องจุลทรรศน์สเตอริโอ เป็นเลนส์ประกอบที่มีกำลังขยายสูงใช้สำหรับศึกษาวัตถุที่ไม่สามารถแยกรายละเอียดด้วยตาเปล่าๆได้ สามารถให้ภาพได้ทั้งแบบพื้นขาวและพื้นดำ ทั้งนี้เพราะว่ากล้องแบบนี้มีระบบการส่องสว่างที่ส่องได้ทั้งจากด้านบนและจากแสงเฉียงส่องทะลุ ซึ่งขึ้นอยู่กับชนิดและรุ่น ปัจจุบันกล้องรุ่นใหม่ใช้ระบบแสงที่ติดมากับตัวกล้องถาวรสามารถใช้งานได้สะดวก ความแตกต่างของกล้องชนิดนี้กับกล้องกำลังขยายสูงๆทั่วไปที่มองเห็นได้ชัดเจน ได้แก่

- เลนส์ใกล้วัตถุมีกำลังขยายน้อย
- เลนส์ใกล้วัตถุมีระยะยาว จึงมีที่ปรับโฟกัสเพียงอย่างเดียว
- ภาพที่มองเห็นเป็นภาพสามมิติที่มีความชัดลึกมากกว่ากล้องชนิดอื่น
- สามารถใช้ระบบส่องสว่างได้ทั้งแบบส่องตกกระทบ ส่องผ่านและส่องแบบเฉียง
- ขอบเขตการใช้งานกว้างสามารถใช้ศึกษาวัตถุทั้งที่บดแสงและโปร่งแสง
- กล้องแบบนี้ไม่มีเลนส์รวมแสง

อย่างเช่น กล้องจุลทรรศน์สเตอริโอแบบของวัตสัน มีกำลังขยาย 5:1 กล้องแบบนี้ในชุดของเลนส์ใกล้ตาและเลนส์ใกล้วัตถุประกอบไปด้วยเลนส์หลายชิ้นตั้งอยู่บนแกนเดียวกันซึ่งแยกเป็นมุม 15 องศา ต่างจากกล้องทั่วไปที่ ระบบเลนส์อยู่ระหว่างเลนส์ใกล้วัตถุกับปริซึม (อนันต์, 2535)