บทที่ 6

สรุปและอภิปรายผลการทดลอง

โลหะผสม $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ ในอัตราส่วน 1-x-y : x=3:1 , 1:1 , 1:3 และ 1-x-y = 0 เมื่อ แอนนีลในอุณหภูมิที่เหมาะสม จะสมดุลและมีเฟสเดียวทุกส่วนผสม

โลหะผสมทางด้าน 1-x-y = 0 จากการหลอมที่อุณหภูมิ 1200°C และแอนนีลที่อุณหภูมิ 480°C เป็นเวลา 2 สัปดาห์ แล้วปล่อยให้เย็นลงภายในเตาเผาขนาดใหญ่ ส่วนผสมซึ่งมีปริมาณ Ge Te 40% โมล, 60% โมล และ 80% โมล ให้เส้นการสะท้อนที่ยัดเฉนยองระบบรอมโบฮีดรัลบนฟิล์มภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ ส่วนผสมซึ่งมีปริมาณ GeTe 0% โมล , 20% โมล,30%โมลให้เส้นการสะท้อนไม่ยัดเฉนมากนัก และเมื่อ แอนนีลโลหะผสมในส่วนนี้ที่อุณหภูมิ 580°C และ 600°C ดังรายละเอียดในตารางที่ 3.2 ส่วนผสมซึ่งมีปริมาณ GeTe 30% โมล ให้เส้นการสะท้อนที่ยัดเฉนยองระบบรอมโบฮีดรัล ส่วนผสมซึ่งมีปริมาณ GeTe 0% โมล และ 20% โมลให้เส้นการสะท้อนที่ยัดเฉนยองระบบคิวบิค

โลหะผสมในอัตราส่วนผสมยอง 1-x-y : x = 1:3 เตรียมขึ้นจากการหลอมที่อุณหภูมิ 1200°C และ ให้เย็นลง ภายในเตาขนาดใหญ่ ส่วนผสมซึ่งมีปริมาณ GeTe 60% โมล และ 80% โมล ให้เส้นการสะท้อนที่ยัดเฉนยองระบบรอมโบฮีดรัล ส่วนอื่น ๆ ให้เส้นการสะท้อนที่ไม่ยัดเฉนนัก. เมื่อทำการ แอนนีลโลหะผสมส่วนที่เหลือนี้ด้วยอุณหภูมิ ดังที่ได้แสดงในตารางที่ 3.2 แล้วปล่อยให้เย็นลง ภายในเตาขนาดใหญ่ ส่วนผสมซึ่งมีปริมาณ GeTe 30% โมล และ 40% โมล ให้เส้นการสะท้อนที่ยัดเฉนยองระบบรอมโบฮีดรัล และส่วนผสมซึ่งมีปริมาณ GeTe 0% โมล และ 20% โมล ให้เส้นการสะท้อนที่ยัดเฉนยองระบบคิวบิค

โลหะผสมในอัตราส่วน 1-x-y : x = 1:1 และ 3:1 เตรียมจากการหลอมที่อุณหภูมิ 1200°C และปล่อยให้เย็นลงภายในเตาเผาขนาดใหญ่ โลหะผสมไม่สามารถเข้าสู่สมดุลได้โดยง่าย เมื่อแอนนีลโลหะผสมนี้ที่อุณหภูมิต่าง ๆ ดังที่ได้แสดงในตารางที่ 3.2 โดยส่วนผสมซึ่งมีปริมาณ GeTe 40% โมล 60% โมล และ 80% โมล แอนนีลในเตาเผาขนาดเล็กและทำให้เย็นโดยทันทีในอากาศ พบว่าให้เส้นการสะท้อนที่ยัดเฉนยองระบบรอมโบฮีดรัล ส่วนผสมซึ่งมีปริมาณ GeTe 0% โมล 20% โมล และ 30% โมล แอนนีลในเตาเผาขนาดใหญ่แล้ว

ปล่อยให้เย็นลง ภายในเตา ส่วนผสมซึ่งมีปริมาณ GeTe 30% โมล ให้เส้นการส่งท้อนที่ยัดเฉนของระบบรอมโบฮีดรัล และส่วนผสมซึ่งมีปริมาณ GeTe 0% โมล 20% โมล ให้เส้นการส่งท้อนที่ยัดเฉนของระบบคิวบิค

โลหะผสมทางด้านส่วนผสม x=0 เตรียมโดยการหลอมที่อุณหภูมิ 1200°C และแอนนีลที่อุณหภูมิ 580°C เป็นเวลา 2 สัปดาห์ โดยใช้เตายนาดใหญ่ และให้เย็นลงภายในเตาหลอม ส่วนผสมซึ่งมีปริมาณ GeTe 40% โมล 60% โมล และ 80% โมล ให้เส้นการส่งท้อนประกอบด้วย 2 เฟส คือ คิวบิคและรอมโบฮีดรัล ส่วนผสมซึ่งมีปริมาณ GeTe 0% โมล ให้เส้นการส่งท้อนที่ยัดเฉนพอสมควรของระบบคิวบิค ส่วนผสมซึ่งมีปริมาณ GeTe 20% โมล และ 30% โมลให้เส้นการส่งท้อนที่ไม่ยัดเฉน อย่างไรก็ตามจากฟิล์มภาพถ่ายของโลหะผสมในส่วนนี้ประกอบกับการศึกษาเฟสตามแนวส่วนผสมอื่น ชี้ให้เห็นว่าโลหะผสมที่ส่วนผสมของ GeTe 20% โมล และ 30% โมล นี้ มีแนวโน้มที่จะเป็นเฟสคิวบิค และรอมโบฮีดรัลตามลำดับ ผลจากการเตรียมโลหะผสมตามแนว x=0 นี้มีเฟสต่างจากผลของวูลเลย์ และนิโคลิค ซึ่งพบว่ามีเฟสเดียวทุกส่วนผสมเมื่อเตรียมโดยการหลอมที่อุณหภูมิ 1200°C และแอนนีลที่อุณหภูมิ 600°C แล้วทำให้เย็นลงทันทีในอากาศ ซึ่งความแตกต่างนี้ สันนิษฐานว่าเกิดขึ้นจากวิธีการลดลงของอุณหภูมิและอุณหภูมิในการแอนนีลโลหะผสม

ผลจากการคำนวณแลททิสพารามิเตอร์จากภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่อุณหภูมิห้องด้วยกล้องฆนิดกิเนียร์เอกก์ แลททิสพารามิเตอร์ a คำนวณจากผลึกสมดุล และมี เฟสเดียวมีแนวโน้มที่จะ แปรผันตรงกับ x และ y สอดคล้องกับสมการ

$$a = A + Bx + Cy$$ ดังแสดงในตารางที่ 6.1

สมการนี้สามารถใช้อธิบายการแปรผันของแลททิสพารามิเตอร์ a กับปริมาณโลหะ Pb, Sn, Ge และ Te ในโลหะผสม $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$

สมการซึ่งคำนวณโดยแลททิสพารามิเตอร์ a ที่ส่วนผสม 1-x-y : x = 3:1 , 1:1 , 1:3 และ 1-x-y = 0 คือ

$$a = 6.4731 - 0.1488x - 0.4796y \qquad (6.1)$$

สมการ คำนวณโดยแลททิสพารามิเตอร์ a ที่ส่วนผสม 1-x-y : x = 3:1 , 1:1 , 1:3, 1-x-y = 0 และนำเอาผลของ วูลเลย์ และ นิโคลิค ที่ส่วนผสม x=0 มาร่วมคำนวณด้วย คือ

$$a = 6.4708 - 0.1473x - 0.4751y \qquad (6.2)$$

สมการคำนวณโดยแลททิสพารามิเตอร์ a ที่ส่วนผสม 1-x-y : x = 3:1 , 1:1 , 1:3 และใช้ผลของ มาเฮลล์กี้กับผู้ร่วมงาน ทางด้าน 1-x-y = 0 ร่วมกับผลของวูลเลย์ และนิโคลิคทางด้าน x=0

$$a = 6.4724 - 0,1518x - 0.4775y \qquad (6.3)$$

สมการที่ 6.1, 6.2 และ 6.3 นี้ให้ผลที่ใกล้เคียงกัน แลททิสพารามิเตอร์ a ซึ่งแปรผันกับปริมาณ x และ y คำนวณโดยสมการ (6.2) ได้นำมาเปรียบเทียบกับแลททิสพารามิเตอร์จากการทดลอง ซึ่งแสดงในกราฟรูปที่ 4.6 จากรูปที่ 4.6 นี้จะเห็นได้ว่า ทางด้าน 1-x-y = 0 หรือ PbTe 0 แลททิสพารามิเตอร์ a จากการทดลองจะสอดคล้องกับผลการคำนวณเป็นอย่างดี และจะเกิดการเบี่ยงเบนของแลททิสพารามิเตอร์ a จากการทดลองออกจากแนวของแลททิสพารามิเตอร์จากการคำนวณมากขึ้น เมื่อ 1-x-y:x หรือ PbTe:SnTe มีค่ามากขึ้น

ผลการคำนวณแลททิสพารามิเตอร์ α จากภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่อุณหภูมิห้องด้วยกล้องชนิดกินีย์เอกก์ แลททิสพารามิเตอร์ α คำนวณจาก ซึ่งสมดุลและมีเฟสเดียว จะแปรผันกับปริมาณ GeTe ในส่วนผสมตามสมการ

$$\alpha = A + By + Cy^2$$ ดังแสดงในตารางที่ 6.2

สมการซึ่งคำนวณจากแลททิสพารามิเตอร์ α และปริมาณ Ge Te ตามแนวอัตราส่วน 1-x-y : x = 3:1 คือ

$$\alpha = 90.7437 - 3.6911y + 1.1957y^2 \qquad (6.4)$$

โดยผสมส่วนนี้จะเกิดการเปลี่ยนเฟสที่ปริมาณ Ge Te = y_t = 0.217

สมการซึ่งคำนวณจากแลททิสพารามิเตอร์ α และปริมาณ Ge Te ตามแนวอัตราส่วน 1-x-y : x = 1:1 คือ

$$\alpha = 90.9960 - 4.3018y + 1.5556y^2 \qquad (6.5)$$

$$y_t = 0.255$$

สมการซึ่งคำนวณจากแลททิสพารามิเตอร์ α และปริมาณ Ge Te ตามแนวอัตราส่วน 1-x-y : x = 1:3 คือ

$$\alpha = 91.1736 - 4.7687y + 1.8542y^2 \qquad (6.6)$$

$$y_t = 0.275$$

สมการซึ่งคำนวณจากแลททิสพารามิเตอร์ α และปริมาณ GeTe ตามแนวของส่วนผสมทางด้าน 1-x-y = 0 คือ

$$\alpha = 91.0030 - 3.9800y + 1.2462y^2 \qquad (6.7)$$

$$y_t = 0.276$$

สมการซึ่งคำนวณจากแลททิสพารามิเตอร์ α และปริมาณ GeTe ตามแนวของส่วนผสมทางด้าน x=0 ซึ่งเป็นข้อมูลจากผลของ วูลเลย์และนิโคลิค

$$\alpha = 92.0677 - 6.7651y + 2.9071y^2 \qquad (6.8)$$

$$y_t = 0.362$$

สมการซึ่งคำนวนโดยใช้ข้อมูลของแลททิสพารามิเตอร์ α และปริมาณ GeTe จากส่วนผสมตามแนวอัตราส่วน 1-x-y : x = 3:1 , 1:1 , 1:3 และ 1-x-y = 0

$$\alpha = 90.9790 - 4.1870y + 1.4639y^2 \qquad (6.9)$$

$$y_t = 0.257$$

สมการซึ่งคำนวณโดยใช้ข้อมูลของแลททิสพารามิเตอร์ α และปริมาณ GeTe จากส่วนผสมตามแนวอัตราส่วน 1-x-y : x = 3:1 , 1:1 , 1:3 และ 1-x-y = 0 รวมกับข้อมูลของ วูลเลย์ และ นิโคลิค ทางด้านส่วนผสม x = 0 คือ

$$\alpha = 91.0940 - 4.3357y + 1.4727y^2 \qquad (6.10)$$

$$y_t = 0.279$$

สมการที่ 6.4 , 6.5 , 6.6 และ 6.7 แสดงการแปรผันของแลททิสพารามิเตอร์ α กับปริมาณ GeTe ในส่วนผสมตามแนวอัตราส่วน 1-x-y : x = 3:1 , 1:1 , 1:3 และ 1-x-y = 0 ตามลำดับ y_t คือ ปริมาณ Ge Te ในส่วนผสมที่เกิดการเปลี่ยนเฟสระหว่างระบบรอมโบฮีดรัล และคิวบิคโลหะผสม ซึ่งมีปริมาณ GeTe $> y_t$ จะเป็นระบบรอมโบฮีดรัล และส่วนผสมซึ่งมีปริมาณ Ge Te $\leq y_t$ จะเป็นระบบคิวบิค

แลททิสพารามิเตอร์ a ของโลหะผสมตามแนว GeTe = 0.2 เปรียบเทียบกับผลของ อำพล เครือวัฒนไพศาล (37) พบว่าให้ผลที่สอดคล้องกันเช่นเดียวกับแลททิสพารามิเตอร์ a ตามแนวของส่วนผสม 1-x-y = 0 จะสอดคล้องกับผลของมาเซลสกี้และผู้ร่วมงานเป็นอย่างดี แลททิสพารามิเตอร์ α ตามแนว 1-x-y = 0 จะแตกต่างกับผลของมาเซลสกี้ และผู้ร่วมงาน

ซึ่งพบว่าแปรผันตรงกับปริมาณ GeTe ในส่วนผสม และมีการเปลี่ยนเฟสที่ปริมาณ GeTe = 17% โมล

ปริมาณ $\frac{\Delta V}{V_c}$ ซึ่งสัมพันธ์กับแลททิสพารามิเตอร์ α โดยสมการ 4.20 ได้ลงจุดบนกราฟเทียบกับปริมาณ GeTe ในส่วนผสม ดังในรูปที่ 4.11 การแปรผันของ $\frac{\Delta V}{V_c}$ กับปริมาณ GeTe นี้อาจเป็นประโยชน์ในการประมาณคำนวนช่องว่างของ Ge ในแลททิส ซึ่งสันนิษฐานว่า สัมพันธ์กับปริมาณความหนาแน่นของอนุภาคโอลในโลหะผสม ดังที่ได้กล่าวในหัวข้อ 1.2

ผลจากการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่อุณหภูมิสูงของโลหะผสมในอัตราส่วนผสม 1-x-y : x = 1:3 โลหะผสมซึ่งมีโครงสร้างของระบบรอมโบฮีดรัลที่อุณหภูมิห้องจะเกิดการเปลี่ยนเฟสไปเป็นระบบคิวบิคที่อุณหภูมิสูงขึ้น อุณหภูมิในการเปลี่ยนเฟสนี้พบว่าแปรผันตรงกับปริมาณของ GeTe ในส่วนผสมดังในกราฟรูปที่ 5.9 จากกราฟนี้สันนิษฐานว่า โลหะผสมซึ่งมีเฟสคิวบิคที่อุณหภูมิห้อง จะมีการเปลี่ยนเฟสไปเป็นรอมโบฮีดรัลเมื่ออุณหภูมิต่ำลง โดยที่โลหะผสมซึ่งมีปริมาณ GeTe = 0 จะมีการเปลี่ยนเฟสที่อุณหภูมิประมาณ 150 K

ผลจากการคำนวณแลททิสพารามิเตอร์ของโลหะผสมที่อุณหภูมิสูง แลททิสพารามิเตอร์ a ของผลึกโลหะผสมซึ่งเป็นระบบคิวบิคที่อุณหภูมิห้อง จะมีการขยายตัวอย่างสม่ำเสมอ และส่วนผสมซึ่งเป็นรอมโบฮีดรัลที่อุณหภูมิห้อง จะหยุดการขยายตัวขณะเกิดการเปลี่ยนเฟส จากระบบรอมโบฮีดรัลไปเป็นระบบคิวบิค

การศึกษาเฟสนี้เป็นเพียงการศึกษาคุณสมบัติส่วนหนึ่งของโลหะผสม $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ ข้อมูลนี้อาจเป็นประโยชน์ทางด้านการพัฒนาวัสดุเพื่อให้มีคุณสมบัติในการใช้งานมากขึ้น โดยเฉพาะทางด้านสารกึ่งตัวนำ อย่างไรก็ตามโลหะผสมนี้จะมีคุณประโยชน์เพิ่มขึ้นหากได้มีการศึกษาคุณสมบัติทางด้านอื่น ๆ เช่น คุณสมบัติที่มีต่อแสง คุณสมบัติทางด้านไฟฟ้า ฯลฯ

ตารางที่ 6.1

การแปรผันของแลททิส์พารามิเตอร์ a จากการทดลองจัดกลุ่มข้อมูลแบบต่างๆ กัน

กลุ่มข้อมูล	ตามแนวส่วนผสม	แลททิส์พารามิเตอร์ a	σ	R
1	1-x-y : x = 3:1, 1:1, 1:3, 1-x-y = 0	6.4731 - 0.1488 x - 0.4796 y	0.5610	0.9990
2	กลุ่มข้อมูล 1 รวมกับทางด้าน x = 0 ซึ่งเป็นผลของวูลเลย์ และนิโคลิค	6.4708 - 0.1473 x - 0.4751 y	0.7754	0.9980
3	1-x-y : x = 3:1, 1:1, 1:3, ทางด้าน x = 0 ซึ่งเป็นผลของ วูลเลย์และนิโคลิค 1-x-y = 0 ซึ่งเป็นผลของ มาเซลส์กี้ และผู้ร่วมงาน	6.4724 - 0.1518 x - 0.4775 y	0.8168	0.9970

ตารางที่ 6.2

การแปรผันของแลททิส์พารามิเตอร์ α จากการทดลองจัดกลุ่มข้อมูลแบบต่างๆกัน

กลุ่มข้อมูล	ตามแนวอัตราส่วนผสม	แลททิส์พารามิเตอร์ α	σ	R	y_t
1	1-x-y : x = 3:1	$90.7437 - 3.6911\ y + 1.1957\ y^2$	0.0513	0.9982	0.217
2	1-x-y : x = 1:1	$90.9960 - 4.3018\ y + 1.5556\ y^2$	0.0664	0.9975	0.255
3	1-x-y : x = 1:3	$91.1736 - 4.7687\ y + 1.8542\ y^2$	0.0311	0.9995	0.275
4	1-x-y = 0	$91.0030 - 3.9800\ y + 1.2462\ y^2$	0.0047	1.0000	0.276
5	x = 0 (ผลของวูลเลย์และนิโคลิค)	$92.0677 - 6.7651\ y + 2.9071\ y^2$	0.1257	0.9980	0.362
6	กลุ่มข้อมูล 1+2+3+4	$90.9790 - 4.1870\ y + 1.4639\ y^2$	0.0585	0.9958	0.257
7	กลุ่มข้อมูล 1+2+3+4+5	$91.0940 - 4.3357\ y + 1.4727\ y^2$	0.1166	0.9836	0.279