

บทที่ 5

การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ โดยผลึกผง $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ ที่อุณหภูมิ $28^{\circ}C$ ถึง $515^{\circ}C$

5.1 การถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ด้วยกล้องเดอบายเชอเรอร์ชนิดอุณหภูมิสูง

5.1.1 อุปกรณ์ในการถ่ายภาพ

1. กล้องถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์อุณหภูมิสูงแบบเดอบายเชอเรอร์ S.70 ของยูนิแคม (UNICAM)
2. ฟิล์มรังสีเอ็กซ์
3. ชุดอุปกรณ์ล้างฟิล์ม
4. ภาชนะบดผลึก
5. ผลึกผงซิลิคอน
6. เส้นใยแก้วควอทซ์
7. ฉนวนวาณิช (VANISH)

5.1.2 วิธีการถ่ายภาพ การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่อุณหภูมิสูง

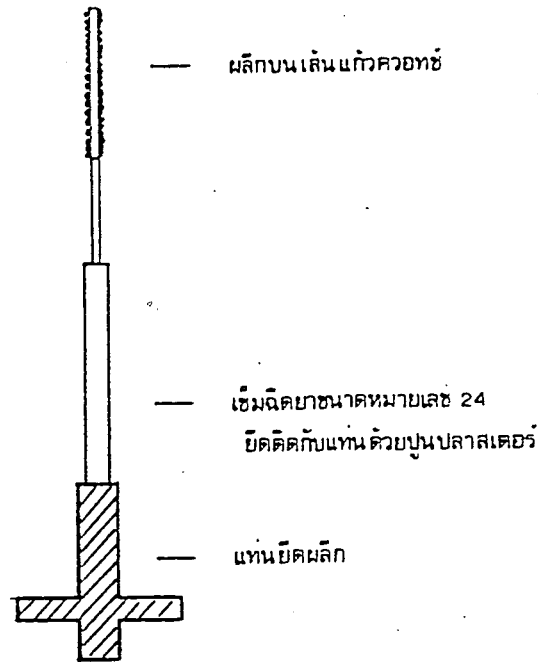
1. นำโลหะผสมซึ่งต้องการถ่ายภาพมาทำการบดให้เป็นผงละเอียด
2. ผสมผลึกผงของโลหะผสมเข้ากับผลึกผงของซิลิคอนโดยใช้ผลึกผงซิลิคอน 1

ใน 3 ของโลหะผสม

3. นำเส้นใยแก้วควอทซ์ อนุส่วนปลายของเส้นใยแก้วด้วยฉนวนวาณิชแล้วแตะกับผลึกผงให้ผลึกผงติดโดยรอบเส้นใยแก้ว รอให้แห้ง นำเส้นใยแก้วนี้มาชุบฉนวนวาณิชอีกครั้งแล้วแตะกับผลึกผง เพื่อให้ผลึกผงติดโดยรอบมากขึ้น และรอให้แห้ง หลังจากทำการติดผลึกบนเส้นใยแก้วนี้ประมาณ 3 ครั้ง จะได้แท่งผลึก ผงอัดขนาดเส้นผ่าศูนย์กลางประมาณ 0.5 มิลลิเมตร

4. นำผลึกที่เตรียมขึ้นติดลงบนแท่นยึดผลึก บนฐานกล้อง ทำการปรับให้ผลึกอยู่ที่ศูนย์กลาง โดยปรับให้ผลึกนี้ขณะทำการหมุนแท่นยึดผลึก รูปที่ 5.1 แสดงให้เห็นลักษณะของการยึดผลึกบนแท่นยึดผลึก

5. บรรจุฟิล์มลงในตลับใส่ฟิล์มของกล้องภายในห้องมืด
6. นำตลับใส่ฟิล์มวางบนฐานกล้องตามตำแหน่ง ทำการสูบลมออกจาก



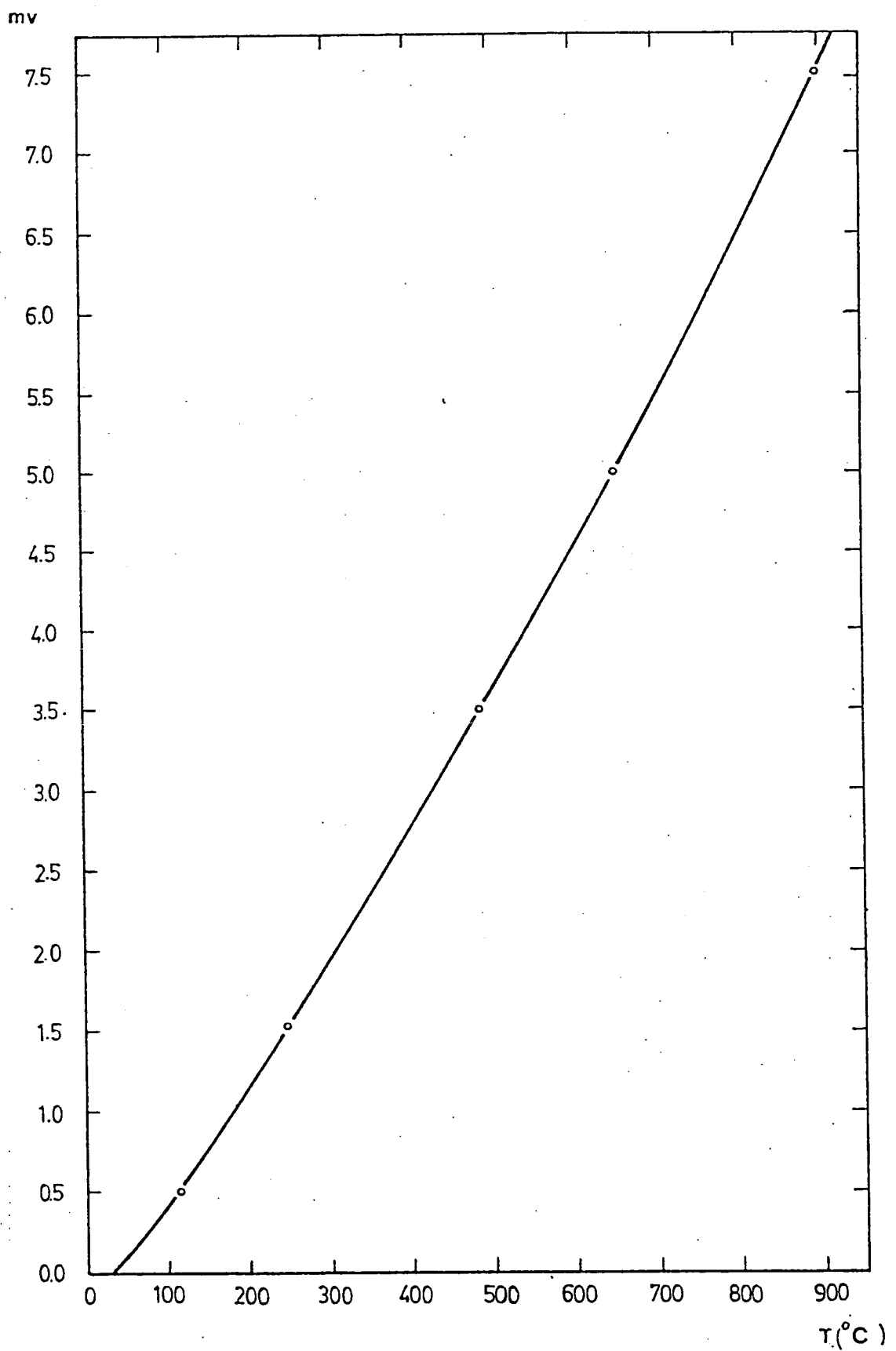
รูปที่ 5.1 การยึดผลึกบนแท่นยึดผลึกของกล้องถ่ายภาพ การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ชนิดอุณหภูมิสูง

กล้องด้วยปั๊มสุญญากาศ

7. เปิดสวิตช์ระบบไฟฟ้าควบคุมการทำงานของกล้อง เปิดสวิตช์มอเตอร์หมุนผลึกปรับค่าของกระแสไฟฟ้าผ่านขดลวด ทำความร้อนเพื่อให้ได้อุณหภูมิตามต้องการ โดยใช้อัตราการเพิ่มของกระแสไฟฟ้าไม่เกิน 0.5 แอมป์ต่อนาที
8. อ่านค่าของอุณหภูมิภายในเตา โดยใช้มิลลิโวลท์มิเตอร์วัดความต่างศักย์ไฟฟ้าจากสายวัดอุณหภูมิซึ่งต่อกับตัวกล้องจากค่า ความต่างศักย์ไฟฟ้านี้ จะสามารถทราบอุณหภูมิภายในเตาได้ โดยอ่านค่าจากกราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิและความต่างศักย์ไฟฟ้าซึ่งได้แสดง ในรูปที่ 5.2
9. เมื่ออุณหภูมิภายในเตาขึ้นถึงที่ต้องการแล้วให้รอประมาณ 30 นาที เพื่อให้อุณหภูมิคงที่ ทำการเปิดหน้าต่างซึ่งปิดกันรังสีเอ็กซ์ เพื่อให้รังสีผ่านเข้าไปยังผลึกภายในตัวกล้อง รังสีเอ็กซ์ที่ใช้นี้เป็นรังสีที่ไม่ได้ผ่านการกรอง
10. หลังจากใช้เวลาถ่ายภาพ การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ ของผลึกผงประมาณ 8 ถึง 12 ชั่วโมง แล้วจึงล้างฟิล์ม

5.2 การขยายตัวของผลึกซิลิคอนจากอุณหภูมิ 28 ถึง 620°C

แลททิสพารามิเตอร์ของผลึกซิลิคอนคำนวณจากภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่อุณหภูมิ 28°C ถึง 620°C เพื่อใช้เป็นสำมะตราบฐานในการคำนวณแลททิสพารามิเตอร์ของ



รูปที่ 5.2 จุดอุณหภูมิซึ่งสอดคล้องกับความต่างศักย์ไฟฟ้าจากเส้นลวดวัดอุณหภูมิ

$Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ สามารถคำนวณตามขั้นตอนดังนี้ คือ

1. คำนวณ มุม θ ตามขั้นตอนในตารางที่ 5.1 ซึ่งตัวอย่างข้อมูลนี้ ได้จากการถ่ายภาพ ซิลิคอนที่อุณหภูมิห้อง โดยทางด้านมุม α สูงได้ใช้ตำแหน่งเส้นการสะท้อนซึ่งเกิดจากรังสี $CuK\alpha_1$ ลักษณะของฟิล์มภาพถ่ายการเลี้ยวเบน รังสีเอ็กซ์ ได้แสดงไว้ในรูปที่ 5.3
2. จากมุม θ ในตารางที่ 5.1 คำนวณค่าของ a ซึ่งสอดคล้องกันโดยใช้สมการ

$$a = \frac{\lambda}{2\sin\theta} \sqrt{h^2+k^2+l^2} \quad (5.1)$$

คำนวณค่าของเนลสัน-ไรเลย์ ฟังก์ชัน $\frac{1}{2}(\frac{\cos^2\theta}{\sin\theta} + \frac{\cos^2\theta}{\theta})$ บันทึกลงในตารางที่ 5.2

3. เขียนกราฟระหว่าง เนลสัน-ไรเลย์ฟังก์ชันกับแลททิส์พารามิเตอร์ a ซึ่งคำนวณจากมุม θ เดียวกัน ดังรูปที่ 5.4
4. ลากเส้นตรงผ่านจุดไปตัดแกนแลททิส์พารามิเตอร์ a อ่านค่าของ a ที่ตำแหน่งจุดตัด จะได้อ่านค่าของแลททิส์พารามิเตอร์ ซึ่งมีความคลาดเคลื่อนน้อยที่สุด
5. ทำการอภิบาล์เส้นโค้ง เพื่อหาค่าของแลททิส์พารามิเตอร์ของซิลิคอนที่อุณหภูมิ $95^\circ C$, $200^\circ C$, $300^\circ C$, $410^\circ C$, $520^\circ C$ และ $620^\circ C$ ด้วยวิธีเดียวกันกับที่ได้กล่าวมาข้างต้น สำหรับข้อมูลในการคำนวณได้แสดง ในภาคผนวก ค.
6. นำแลททิส์พารามิเตอร์ a นี้มาเขียนกราฟเทียบกับอุณหภูมิ จะได้กราฟแสดงการขยายตัวของ ซิลิคอนกับอุณหภูมิ ดังรูปที่ 5.5

5.3 การคำนวณแลททิส์พารามิเตอร์ของ $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ จากภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่อุณหภูมิสูง

ทำการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของโลหะผสม $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ ซึ่งมีอัตราส่วนผสม $1-x-y : x = 1:3$ ที่อุณหภูมิสูง โดยอุณหภูมิที่ใช้ในการถ่ายภาพอยู่ระหว่าง $28^\circ C$ ถึง $515^\circ C$ การคำนวณแลททิส์พารามิเตอร์ ได้ทำโดยวิธีการใช้ซิลิคอนเป็นสารมาตรฐาน ตามขั้นตอนของตัวอย่างต่อไป นี้ ซึ่งเป็นการคำนวณแลททิส์พารามิเตอร์ของ $GeTe$ ที่อุณหภูมิ $100^\circ C$

1. วัดตำแหน่งของเส้นการสะท้อนบนฟิล์มทำการคำนวณค่าของมุม θ ตามขั้นตอนในตารางที่ 5.3

ตารางที่ 5.1

ขั้นตอนในการคำนวณมุม θ จากเส้นการสะท้อนบนฟิล์มภาพถ่ายภาพเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกผงซิลิคอน ด้วยกล้องชนิดเดอบายเชอเรอร์
ซึ่งบรรจุฟิล์มแบบ แบริคเลย์ และ แบริกกี

ค่าคงที่ของกล้อง $\phi_1 = \phi_2 = 20$

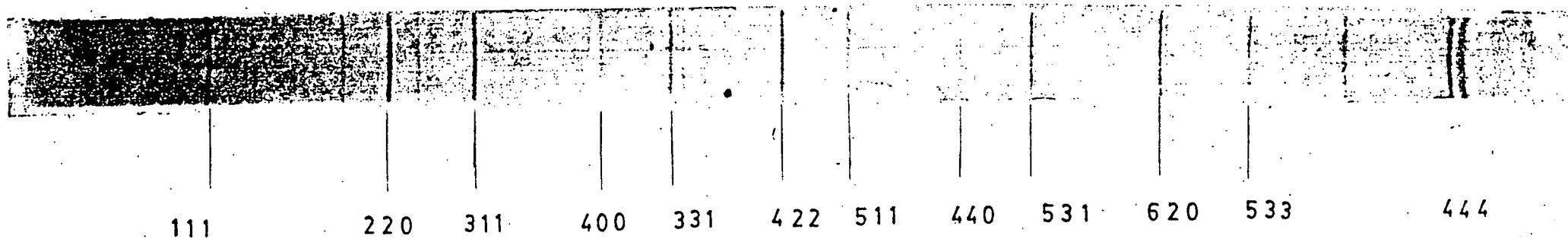
ค่าคงที่ฟิล์ม $K = \frac{(360 - \phi_1 - \phi_2)}{(\overline{AB} + \overline{CD})}$

$N=(h^2+k^2+l^2)$	ฟิล์ม X (cm)	ฟิล์ม Y (cm)	X + Y	$X+Y - 21.765^\circ$ = Z	Z.K = $\omega_1 + \omega_2$	(Z.K) + ϕ_1 = 4θ	$\theta(^{\circ})$
เงาขอบใบมีด ด้านมุมต่ำ							
	10.825	10.940	21.765	0	0	20.	5.
3	13.880	14.104	27.984	6.219	37.4568	57.4568	14.3642
8	17.020	17.245	34.265	12.500	75.2870	95.2870	23.8218
11	18.495	18.705	37.200	15.435	92.9644	112.9644	28.2411
16	20.665	20.860	41.525	19.760	119.0137	139.0137	34.7534
19	21.870	22.600	44.470	22.705	136.7513	156.7513	39.1878
24	23.805	23.985	47.790	26.025	156.7475	176.7475	44.1869
27	24.960	25.130	50.090	28.325	170.6003	190.6003	47.6501
32	26.910	27.075	53.985	32.220	194.0598	214.0598	53.5150
35	28.135	28.295	56.430	34.665	208.7859	228.7859	57.1965
40	30.365	30.510	60.875	39.110	235.5580	255.5580	63.8895
43	31.919	32.055	63.974	42.209	254.2231	274.2231	68.5558
48	35.515	35.635	71.150	49.385	297.4439	317.4439	79.3610
เงาขอบใบมีด ด้านมุมสูง							
	37.390	37.505	74.895	53.130	320.	340.	85.

ตารางที่ 5.2

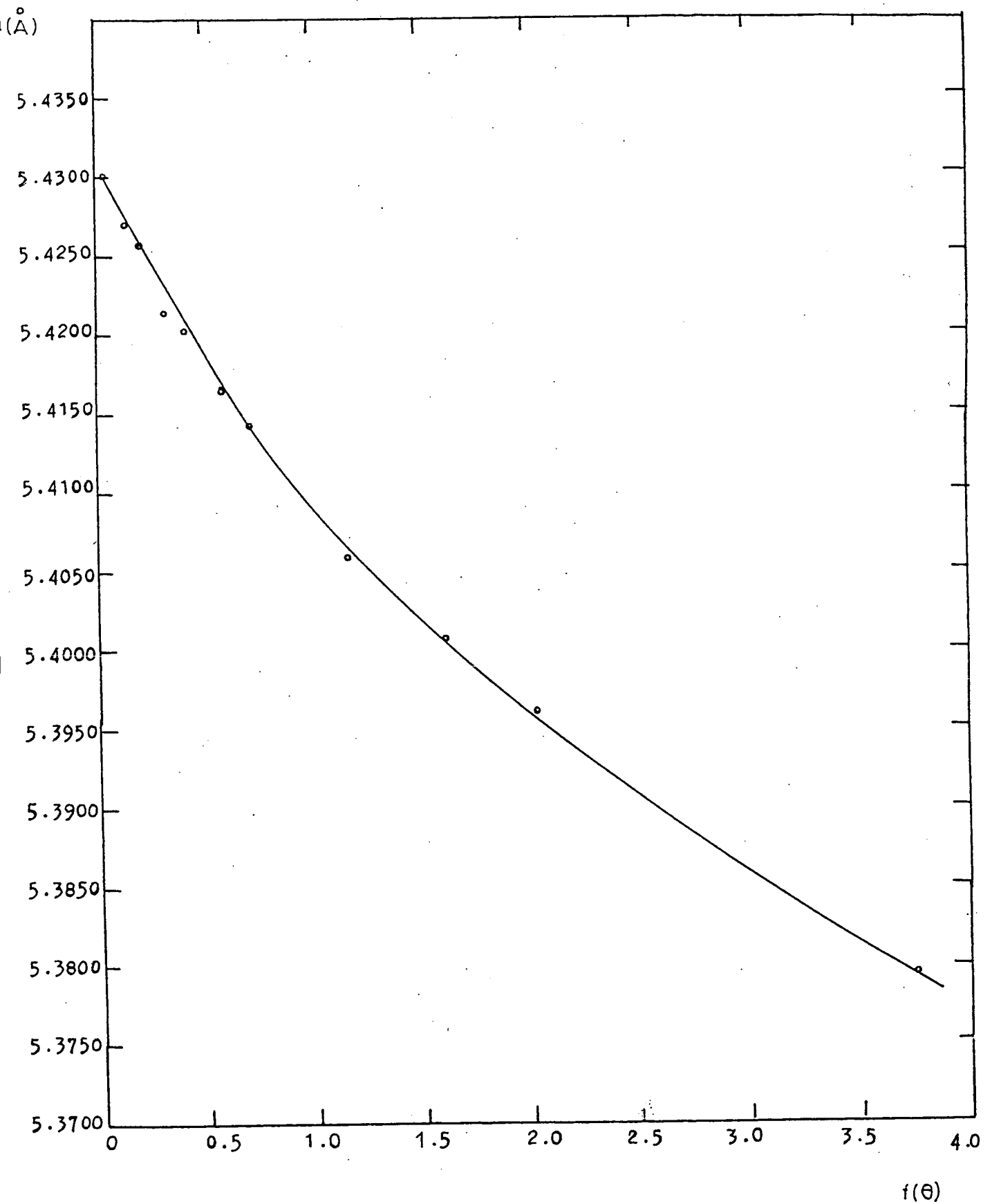
ค่าของแลททิส์พารามิเตอร์ a คำนวณจากเส้นการสะท้อนที่มีมุม θ ต่าง ๆ กัน และค่าของ เนลสัน-โรเลย์ฟังก์ชัน ซึ่งใช้ในการรอกัลป์เส้นโค้งเพื่อหาแลททิส์พารามิเตอร์ของซิลิคอน ที่อุณหภูมิห้อง

h	k	l	$\theta(^{\circ})$	a (A°)	$\frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$
1	1	1	14.3642	5.3795	3.753
2	2	0	23.8218	5.3961	2.045
3	1	1	28.2411	5.4006	1.611
4	0	0	34.7534	5.4058	1.152
3	3	1	39.1878	5.3144	0.914
4	2	2	44.1869	5.4143	0.702
5	1	1	47.6501	5.4163	0.582
4	4	0	53.5150	5.4200	0.410
5	3	1	57.1965	5.4216	0.322
6	2	0	63.8895	5.4257	0.195
5	3	3	68.5558	5.4271	0.128
4	4	4	79.3610	5.4300	0.029

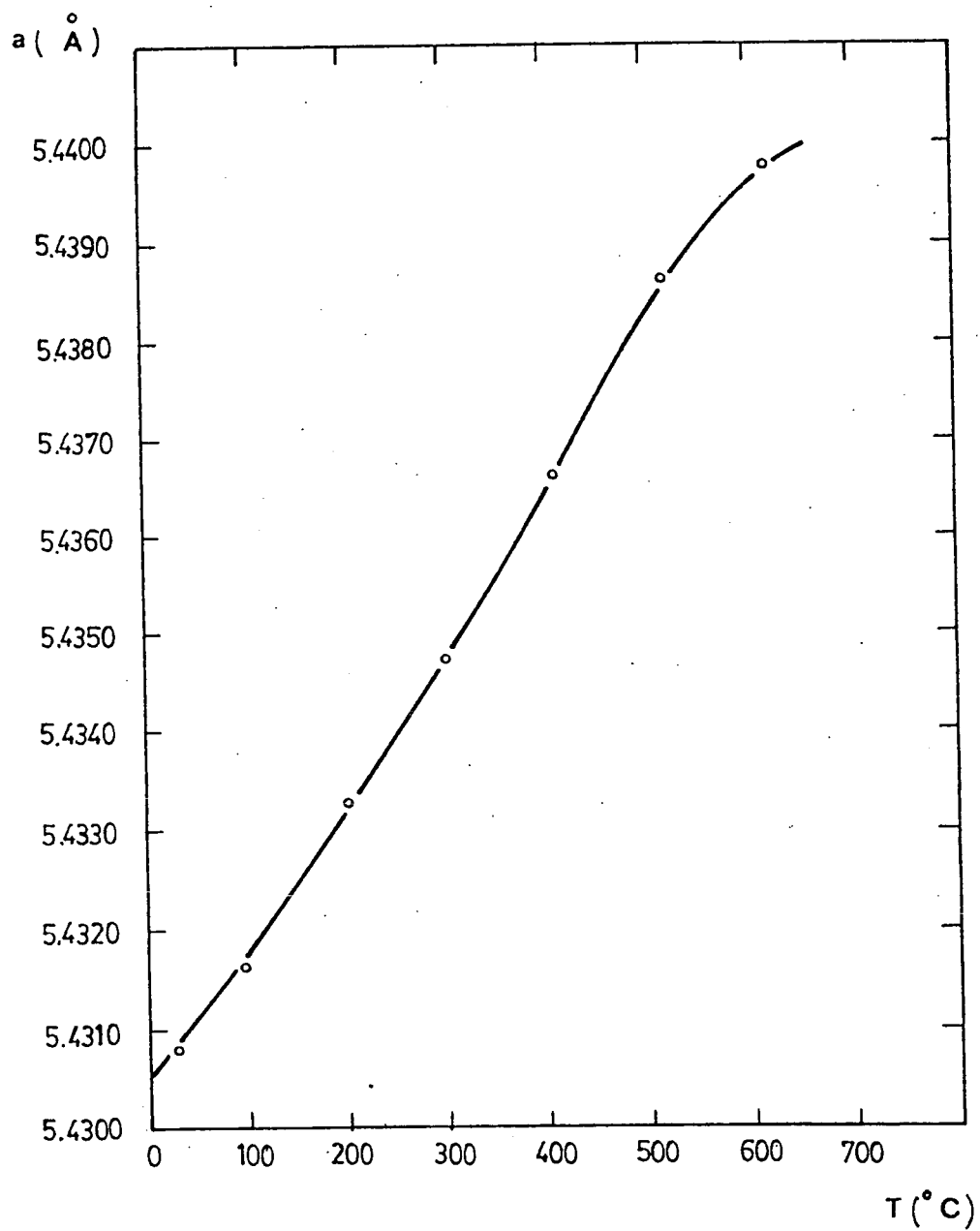


รูปที่ 5.3 ภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกผงซิลิคอนจากกล้องถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ $\text{Cu K}\alpha_1$ (1.5406 \AA) ที่อุณหภูมิ 95°C





รูปที่ 5.4 การรอกกลับเส้นโค้งเพื่อหาค่าแลททิส์พารามิเตอร์ a ของผลึกซิลิคอนที่อุณหภูมิห้อง



รูปที่ 5.5 การขยายตัวของซิลิคอนเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้น

2. อ่านแลททิสพารามิเตอร์ของซิลิคอนที่อุณหภูมิ 100°C จากกราฟรูปที่ 5.5 ทำการคำนวณ $\sin^2\theta$ ของเส้นการสะท้อนโดยซิลิคอน และให้เป็น $\sin^2\theta_{\text{cal}}$ ซึ่งสามารถคำนวณได้จากสมการ (4.3)

3. จากตาราง 5.3 ค่าของ $\sin^2\theta_{\text{obs}}$ และเนลสัน-ไรเลย์ ฟังก์ชัน ในมุม θ ระดับดัชนีแลตทิซสำหรับเส้นการสะท้อนซึ่งเกิดจาก Ge Te บันทึกลงในช่องซึ่งขีดไว้ในตารางที่ 5.4 พร้อมทั้งบันทึกค่าของ $\sin^2\theta_{\text{cal}}$ ซึ่งสอดคล้องกับตำแหน่งเส้นการสะท้อนของซิลิคอน

4. ค่าของ $\Delta \sin^2\theta$ โดยให้

$$\Delta \sin^2\theta = \sin^2\theta_{\text{cal}} - \sin^2\theta_{\text{obs}}$$

เขียนกราฟระหว่าง ค่า $\Delta \sin^2\theta$ กับเนลสัน-ไรเลย์ฟังก์ชันในมุม θ เดียวกัน ลากเส้นเชื่อมโยงระหว่างจุด จะได้กราฟสำหรับแก้ความคลาดเคลื่อนของ $\sin^2\theta_{\text{obs}}$ ดังในรูปที่ 5.6

5. บันทึกค่าของ $\Delta \sin^2\theta$ ลงในช่อง $\Delta \sin^2\theta$ ตารางที่ 5.4 โดยอ่านค่าจากกราฟรูปที่ 5.6

6. ค่าของ $\sin^2\theta$ ที่ถูกต้องบันทึกลงในช่อง $\sin^2\theta_{\text{corr}}$ โดย

$$\sin^2\theta_{\text{corr}} = \sin^2\theta_{\text{obs}} + \Delta \sin^2\theta$$

7. จากการที่ทราบค่าของ $\sin^2\theta$ อย่างถูกต้อง และทราบค่าดัชนีแลตทิซของเส้นการสะท้อน ดังนั้นจึงสามารถคำนวณแลททิสพารามิเตอร์ได้ด้วยวิธีการดังที่ได้กล่าวในหัวข้อ 4.2.2 และ 4.2.3 ซึ่งขึ้นกับว่า ผลึกอยู่ในระบบคิวบิก หรือออร์โธโรอมบิออล

5.4 แลททิสพารามิเตอร์ของ $\text{Pb}_{1-x-y}\text{Sn}_x\text{Ge}_y\text{Te}$ ระหว่างอุณหภูมิ 28 ถึง 515°C

การคำนวณแลททิสพารามิเตอร์ของ $\text{Pb}_{1-x-y}\text{Sn}_x\text{Ge}_y\text{Te}$ ที่อัตราส่วนผสม $1-x-y : x = 1:3$ ได้ทำการคำนวณโดยใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ CSPHCENE ผลจากการคำนวณได้แสดงในตารางที่ 5.5 สำหรับข้อมูลในการคำนวณได้แสดงในภาคผนวก ค.

ตารางที่ 5.3

ขั้นตอนในการคำนวณมุม θ โดยใช้ข้อมูลจากภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่อุณหภูมิ 100°C ของ GeTe

ค่าคงที่ของกล้อง $\phi_1 = \phi_2 = 20$ องศา

ค่าคงที่ฟิล์ม $K = \frac{(360 - \phi_1 - \phi_2)}{(AB + CD)} = 6.02410$

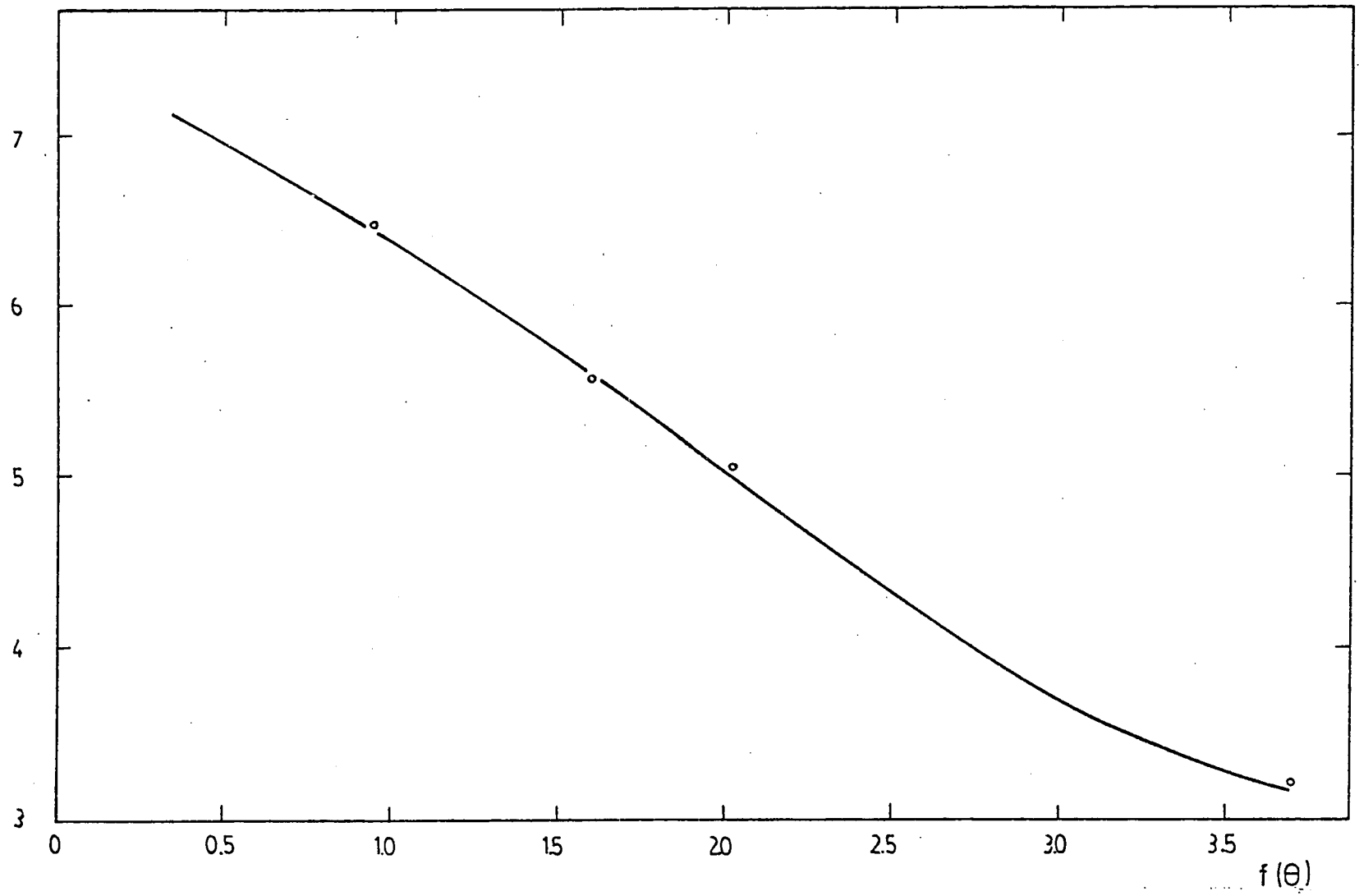
hkl	HKL	ฟิล์ม X (cm)	ฟิล์ม Y (cm)	X+Y-21.480	Z	(Z.K)+ $\phi_1=4\theta$ ($^{\circ}$)	θ ($^{\circ}$)
เงาขอบใบมีด ตามมุมต่ำ		10.725	10.755	0.0		20.	5.
111 (Si)		13.970	13.885	6.375		58.4036	14.6009
200	202	14.205	14.120	6.840		61.2350	15.3088
220	204	16.235	16.155	10.910		85.7229	21.4307
$\bar{2}20$	220	16.440	16.360	11.320		88.1928	22.0482
220 (Si)		17.100	17.025	12.645		96.1747	24.0437
$\bar{2}22$	402	18.130	18.060	14.710		108.6145	27.1536
311 (Si)		18.565	18.485	15.570		113.7952	28.4488
400	404	19.535	19.465	17.520		125.5422	31.3856
420	226	20.765	20.700	19.985		140.3916	35.0979
$\bar{4}20$	422	21.065	21.005	20.590		144.0362	36.0091
331 (Si)		21.910	21.860	22.290		154.2772	38.5693
เงาขอบใบมีด ตามมุมสูง		37.295	37.305	53.120		340	85

ตารางที่ 5.4

ขั้นตอนการคำนวณ $\sin^2\theta_{\text{corr}}$ จากข้อมูลการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของ GeTe ที่อุณหภูมิ 100°C .

$\theta(^{\circ})$	$\frac{1}{2}\left(\frac{\cos^2\theta}{\sin\theta} + \frac{\cos^2\theta}{\theta}\right)$	$\sin^2\theta_{\text{obs}}$	$\sin^2\theta_{\text{cal}}$	$\Delta\sin^2\theta$	$\sin^2\theta_{\text{corr}}$
14.6009	3.695	0.06355	0.060335	0.00320	
15.3088	3.505	0.06971		0.00327	0.06636
21.4307	2.348	0.13350		0.00352	0.13002
22.0482	2.267	0.14092		0.00464	0.13622
24.0437	2.022	0.16600	0.160893	0.00505	
27.1536	1.708	0.20828		0.00544	0.20278
28.4488	1.594	0.22693	0.221228	0.00557	
31.3856	1.364	0.27123		0.00590	0.26525
35.0979	1.128	0.33060		0.00621	0.32424
36.0091	1.078	0.34564		0.00627	0.33928
38.5693	0.943	0.38870	0.382122	0.00649	

$\Delta \sin \theta$
 $\times 10^{-3}$



รูปที่ 5.6 กราฟสำหรับแก้ความคลาดเคลื่อนของ $\sin^2 \theta_{obs}$

ตารางที่ 5.5 (ก)

แลททิสพารามิเตอร์ของ $\text{Pb}_{0.25}\text{Sn}_{0.75}\text{Te}$ ที่อุณหภูมิ 28°C ถึง 515°C

อุณหภูมิ ($^{\circ}\text{C}$)	แลททิสพารามิเตอร์ ในระบบเอกแซกโกนัล		แลททิสพารามิเตอร์ ในระบบบรอมโบฮีดรัล		ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานจากการปรับค่า แลททิสพารามิเตอร์โดยโปรแกรม CSPHCENE		
	a_{H}	c_{H}	a_{r}	$\alpha (^{\circ})$	$\sigma(a_{\text{H}})$	$\sigma(c_{\text{H}})$	$\sigma(a_{\text{r}})$
28			6.3561	90.00			0.0009
110			6.3631	90.00			0.0008
210			6.3767	90.00			0.0007
300			6.3853	90.00			0.0014
400			6.3955	90.00			0.0003
515			6.4040	90.00			0.0012
600			หลอมละลายและมีเฟสอื่นปรากฏ				

ตารางที่ 5.5 (ข)

แลททิสพารามิเตอร์ของ $\text{Pb}_{0.2}\text{Sn}_{0.6}\text{Ge}_{0.2}\text{Te}$ ที่อุณหภูมิ 28°C ถึง 420°C

อุณหภูมิ ($^\circ\text{C}$)	แลททิสพารามิเตอร์ ในระบบเฮกแซกโกนัล		แลททิสพารามิเตอร์ ในระบบบรอมโบฮีดรัล		ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานจากการปรับค่า แลททิสพารามิเตอร์โดยโปรแกรม		
	a_H	c_H	a_r	α ($^\circ$)	$\sigma(a_H)$	$\sigma(c_H)$	$\sigma(a_r)$
28			6.2836	90.00			0.0009
95			6.2940	90.00			0.0019
285			6.3094	90.00			0.0004
420			6.3265	90.00			0.0008
525			เริ่มหลอมละลาย				

ตารางที่ 5.5 (ค)

แลททิลพัรามีเตอร์ของ $Pb_{0.175}Sn_{0.525}Ge_{0.3}Te$ ที่อุณหภูมิ $28^{\circ}C$ ถึง $400^{\circ}C$

อุณหภูมิ ($^{\circ}C$)	แลททิลพัรามีเตอร์ใน ระบบเฮกแซกโกนัล		แลททิลพัรามีเตอร์ใน ระบบรวมโบฮีครัล		ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานจากการปรับค่า แลททิลพัรามีเตอร์โดยโปรแกรม CSPHCENE		
	$a_H (A^{\circ})$	$C_H (A^{\circ})$	$a_T (A^{\circ})$	$\alpha (^{\circ})$	$\sigma(a_H)$	$\sigma(C_H)$	$\sigma(a_T)$
28	8.8355	10.8543	6.2540	89.883*	0.0006	0.0009	
50			6.2506	90.000			0.0024
95			6.2553	90.000			0.0015
275			6.2738	90.000			0.0009
400			6.2843	90.000			0.0005
520			เริ่มหลอมละลาย				

* แลททิลพัรามีเตอร์ a_T และ α คำนวณจากแลททิลพัรามีเตอร์ a_H และ C_H โดยสมการ

4.5 และ 4.6

ตารางที่ 5.5 (ง)

แลททิลพารามิเตอร์ของ $\text{Pb}_{0.15}\text{Sn}_{0.45}\text{Ge}_{0.4}\text{Te}$ ที่อุณหภูมิ 28°C ถึง 380°C

อุณหภูมิ ($^{\circ}\text{C}$)	แลททิลพารามิเตอร์ใน ระบบเอกแซกโกนัล		แลททิลพารามิเตอร์ใน ระบบรวมโบฮีตรัล		ส่วนเชิง เบนมาตรฐานจากการปรับค่า แลททิลพารามิเตอร์โดยโปรแกรม CSPHCENE			
	a_{H}	C_{H}	a_{r}	$\alpha(^{\circ})$	$\sigma(a_{\text{H}})$	$\sigma(C_{\text{H}})$	$\sigma(a_{\text{r}})$	
28	8.7554	10.8507	6.2156*	89.546	0.0024	0.0056		
60	8.7683	10.8248	6.2168*	89.695	0.0012	0.0029		
100			6.2126	90.000			0.0022	
200			6.2271	90.000			0.0008	
285			6.2341	90.000			0.0007	
380			6.2450	90.000			0.0038	
500	เริ่มหลอมละลายและมีเฟสอื่นปรากฏ							

ตารางที่ 5.5 (จ)

แลททิลพารามิเตอร์ของ $Pb_{0.1}Sn_{0.3}Ge_{0.6}Te$ ที่อุณหภูมิ $28^{\circ}C$ ถึง $350^{\circ}C$

อุณหภูมิ ($^{\circ}C$)	แลททิลพารามิเตอร์ใน ระบบเฮกแซกโกนัล		แลททิลพารามิเตอร์ใน ระบบรวมโบฮีตรัล		ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานจากการปรับค่า แลททิลพารามิเตอร์โดยโปรแกรม CSPHCENE		
	a_H	C_H	a_T	$\alpha(^{\circ})$	$\sigma(a_H)$	$\sigma(C_H)$	$\sigma(a_T)$
28	8.6031	10.8184	6.1380	88.983 *	0.0031	0.0093	
150	8.6365	10.7671	6.1436	89.317 *	0.0022	0.0019	
175	8.6529	10.7509	6.1482	89.448 *	0.0020	0.0031	
265			6.1508	90.000			0.0030
350			6.1585	90.000			0.0010
390			เริ่มหลอมละลายและมีเฟสอื่นปรากฏ				

ตารางที่ 5.5 (ฉ)

แลททิลพัรามีเตอร์ของ $Pb_{0.05}Sn_{0.15}Ge_{0.8}Te$ ที่อุณหภูมิ $28^{\circ}C$ ถึง $475^{\circ}C$

อุณหภูมิ ($^{\circ}C$)	แลททิลพัรามีเตอร์ใน ระบบเอกแซกโกนัล		แลททิลพัรามีเตอร์ใน ระบบรวมโบฮีตรัล		ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานจากการปรับค่า แลททิลพัรามีเตอร์โดยโปรแกรม CSPHCENE			
	a_H	C_H	a_r	α ($^{\circ}$)	$\sigma(a_H)$	$\sigma(C_H)$	$\sigma(a_r)$	
28	8.4620	10.7669	6.0621	88.524 *	0.0012	0.0031		
95	8.4820	10.7492	6.0680	88.681 *	0.0037	0.0094		
210	8.5084	10.7119	6.0729	88.937 *	0.0026	0.0065		
300	8.5363	10.6580	6.0755	89.260 *	0.0033	0.0081		
400			6.0752	90.000			0.0007	
475			6.0712	90.000			0.0016	
500	เริ่มหลอมละลายและมีเฟสอื่นปรากฏ							

ตารางที่ 5.5 (ข)

แลททิสพารามิเตอร์ของ GeTe ที่อุณหภูมิ 28°C ถึง 500°C

อุณหภูมิ (°C)	แลททิสพารามิเตอร์ใน ระบบเฮกแซกโกนัล		แลททิสพารามิเตอร์ใน ระบบรวมโบฮีดรัล		ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานจากการปรับค่า แลททิสพารามิเตอร์โดยโปรแกรม CSPHCENE			
	a_H	c_H	a_r	$\alpha(^{\circ})$	$\sigma(a_H)$	$\sigma(c_H)$	$\sigma(a_r)$	
28	8.3335	10.6653	5.9823	88.296 *	0.0008	0.0035		
100	8.3448	10.6622	5.9869	88.360 *	0.0017	0.0022		
190	8.3617	10.6510	5.9926	88.481 *	0.0024	0.0062		
285	8.3757	10.6195	5.9929	89.132 *	0.0047	0.0119		
445			5.9882	90.000			0.0008	
500			5.9906	90.000			0.0012	
595	เริ่มหลอมละลายและมีเฟสอื่นปรากฏ							

5.5 การเปลี่ยนเฟส จากระบบรวมโบฮีตรัล ไปเป็นระบบคิวบิกเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้น

จากฟิล์มภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ โดยผลึกผงของโลหะผสม

$Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ พบว่าส่วนผสมซึ่งเป็นระบบรวมโบฮีตรัล ที่อุณหภูมิห้อง จะเกิดการเปลี่ยนเฟสไปเป็นระบบคิวบิก เมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นโดยสามารถสังเกตได้จาก การเลื่อนของเส้นการสะท้อน 220 $\bar{2}20$, 222 $\bar{2}22$, 420 $\bar{4}20$ เส้นแต่ละคู่จะเลื่อนเข้าหากันเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้น จนในที่สุดจะซ้อนกันเป็นเส้นเดี่ยว เมื่อเป็นระบบคิวบิก ดังในตัวอย่างฟิล์มรูปที่ 5.7 ซึ่งแสดงการเปลี่ยนเฟสจากระบบรวมโบฮีตรัลไปเป็นคิวบิกของ $Pb_{0.05}Sn_{0.15}Ge_{0.8}Te$ อุณหภูมิในการเปลี่ยนเฟสที่สามารถประมาณได้โดยวิธีการ ซึ่งแสดงด้วยกราฟ รูปที่ 5.8 ถ้า ΔD คือ ระยะห่างระหว่างเส้น 220 และ $\bar{2}20$ ตำแหน่งที่เส้นกราฟตัดแกนอุณหภูมิค่าของ ΔD จะเป็น 0 ดังนั้นอุณหภูมิที่ตำแหน่งนี้ผลึกจะเป็นระบบคิวบิก ตารางที่ 5.6 เป็นตารางแสดงค่า ΔD ของ $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ ที่อุณหภูมิ 28°C ถึงอุณหภูมิ ซึ่งเกิดการเปลี่ยนเฟสและ ตารางที่ 5.7 แสดงอุณหภูมิในการเปลี่ยนเฟส T_c จากตารางที่ 5.7 เมื่อนำค่าของอุณหภูมินี้ มาเขียนกราฟ เทียบกับ y หรือปริมาณ $GeTe$ ในส่วนผสม จะได้กราฟดังรูปที่ 5.9

และการแปรผันของ T_c กับปริมาณ $GeTe$ หรือ y มีแนวโน้ม จะเป็นเส้นตรง

สมการเส้นตรงซึ่งสอดคล้องกับการแปรผันของอุณหภูมิ T_c กับ y คำนวณจากข้อมูล ในตารางที่ 5.7 โดยใช้โปรแกรม มัลติเบซิลเนียร์รีเกรสชั่น คือ

$$T_c = 150 + 580 y \quad K \quad (5.3)$$

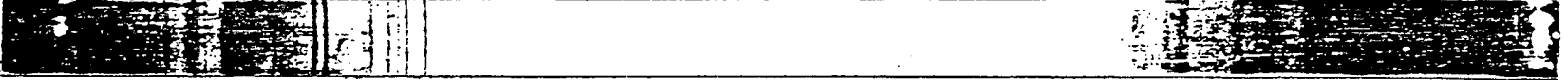
โดยที่ $R = 0.9976$

$\sigma = 13$


R คือ สัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์

σ คือ ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน

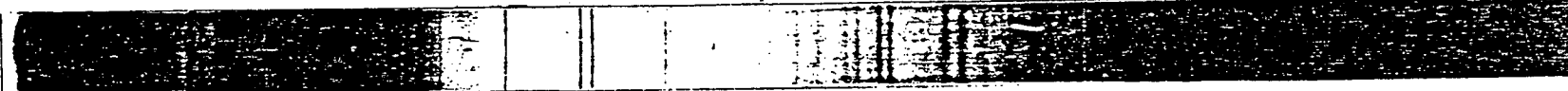
จากสมการที่ 5.3 สามารถสันนิษฐานได้ว่า โลหะผสม $Pb_{0.25}Sn_{0.75}Te$ และ $Pb_{0.2}Ge_{0.2}Te$ ซึ่งเป็นเฟสคิวบิกที่อุณหภูมิห้อง จะเกิดการเปลี่ยนเฟสไปเป็นระบบ รวมโบฮีตรัลที่อุณหภูมิ 150 K และ 266 K ตามลำดับ




เฟลอรอมโบอิตรัลที่ อุณหภูมิ 28°C




เฟลอรอมโบอิตรัลที่ อุณหภูมิ 95°C




เฟลอรอมโบอิตรัลที่อุณหภูมิ 210°C



เฟลอรอมโบอิตรัลที่อุณหภูมิ 290°C



เฟลควิวคที่อุณหภูมิ 405°C

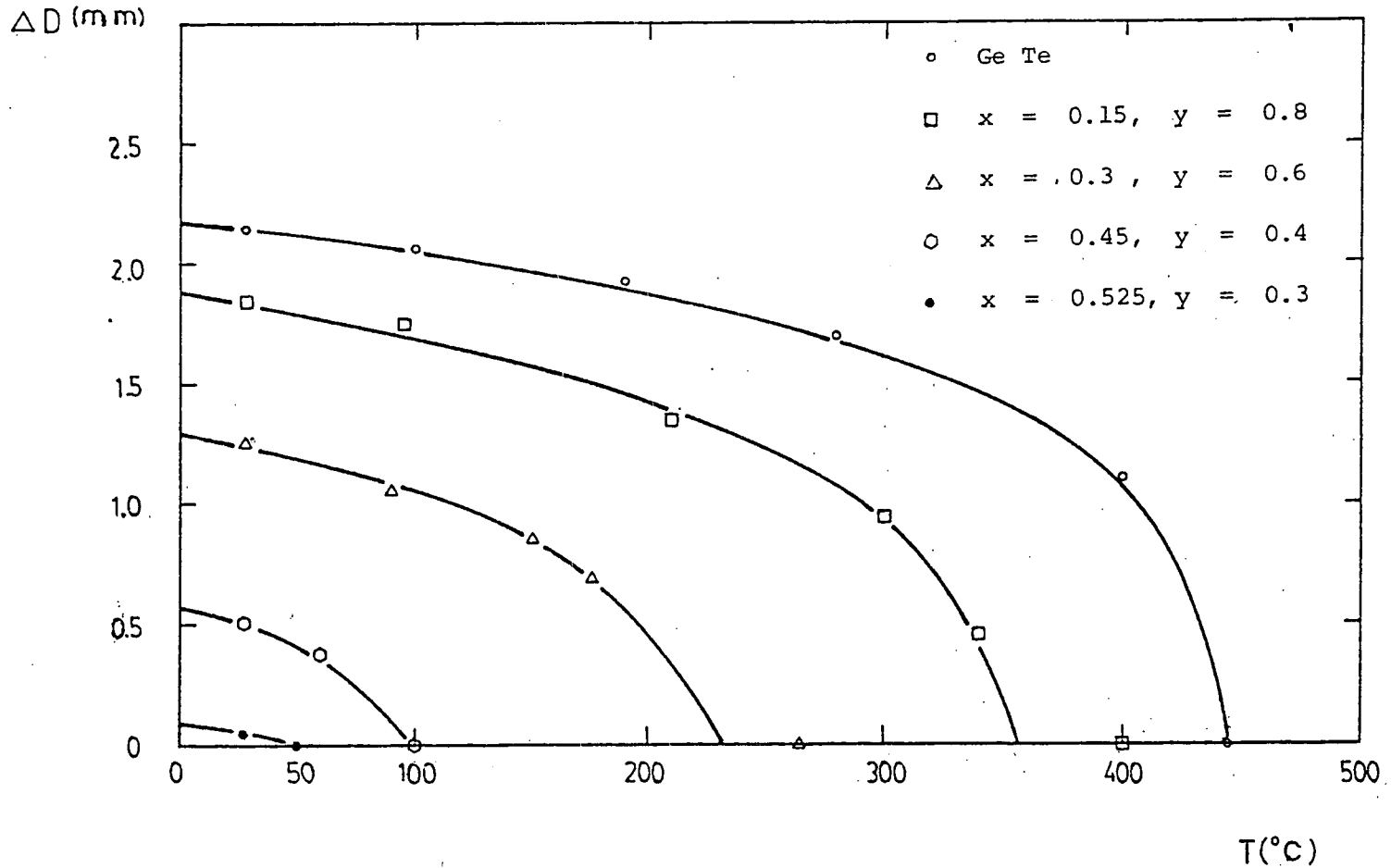


เฟลควิวคที่อุณหภูมิ 545°C

200	220	222	400	420	422
	$\bar{2}20$	$\bar{2}22$		$\bar{4}20$	$\bar{4}22$

รูปที่ 5.7 การเลื่อน ของเส้นการสะท้อนจากผลึกในระบบรอมบออิตรัลไปเป็น

ผลึกในระบบคิวบิกเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นของโลหะผสม $\text{Pb}_{0.05}\text{Sn}_{0.15}\text{Ge}_{0.8}\text{Te}$



รูปที่ 5.8 การหาจุดหลอมในการเปลี่ยนเฟสด้วยวิธีการอภิปเส้นโค้งซึ่งได้จากการ ลงจุดค่า
ของ ΔD เทียบกับจุดหลอม

ΔD คือ ระยะห่างระหว่างเส้นการสะท้อน 220 และ $\bar{2}20$ บนฟิล์มภาพถ่ายภาพเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

จากการถ่ายภาพด้วยกล้องเดอบายเออร์เรอร์ ชนิดจุดหลอมสูง UNICAM S. 70 ขนาดเส้นผ่าศูนย์กลาง 19 cm

ตารางที่ 5.6

ระยะห่างระหว่างเส้นการสะท้อน 220 และ $\bar{2}20$ ของโลหะผสม $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ ที่อุณหภูมิ $28^\circ C$ ถึงอุณหภูมิซึ่งเกิดการเปลี่ยนเฟส

ΔD คือ ระยะห่างระหว่างเส้นการสะท้อน 220 และ $\bar{2}20$ ในหน่วยมิลลิเมตร

T คือ อุณหภูมิหน่วยเป็นองศาเซลเซียส

x = 0.0, y = 1.0		x = 0.15, y = 0.8		x = 0.3, y = 0.6		x = 0.45, y = 0.4		x = 0.525, y = 0.3	
T	ΔD	T	ΔD	T	ΔD	T	ΔD	T	ΔD
28	2.14	28	1.83	28	1.25	28	0.05	28	0.01
100	2.06	95	1.64	90	1.05	60	0.03	50	0.00
190	1.91	210	1.33	150	0.84	100	0.00		
285	1.69	300	0.93	175	0.68				
410	1.10	340	0.45	265	0.06				
445	0.00	400	0.00	350	0.00				

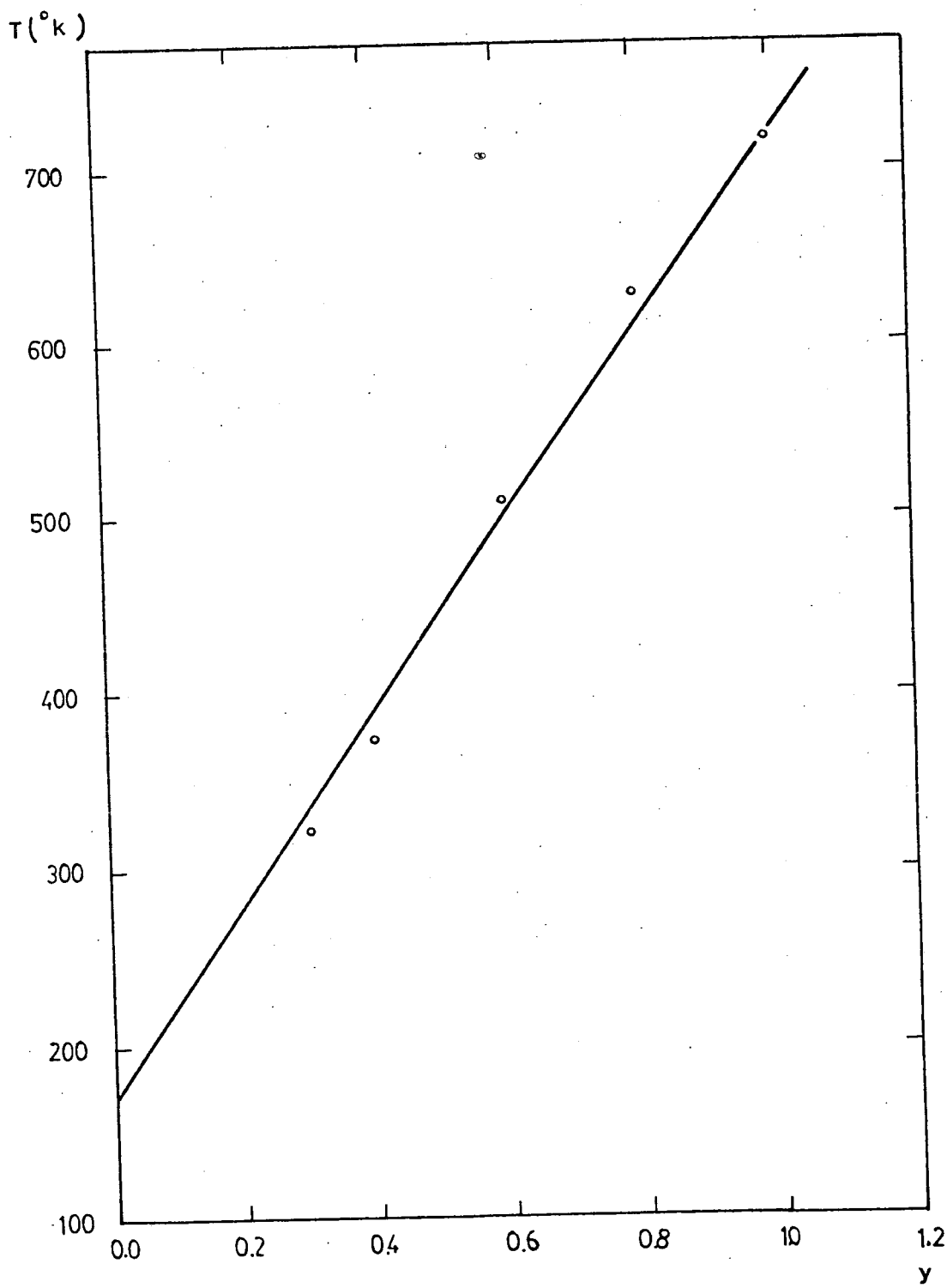
ตารางที่ 5.7

อุณหภูมิซึ่งเกิดการเปลี่ยนเฟสของโลหะผสม $\text{Pb}_{1-x-y}\text{Sn}_x\text{Ge}_y\text{Te}$ ที่อัตรา

ส่วน $1-x-y : x = 1:3$

T_t คือ อุณหภูมิซึ่งเกิดการเปลี่ยนเฟสระหว่างคิวบิกและรอมโบอิดรัล

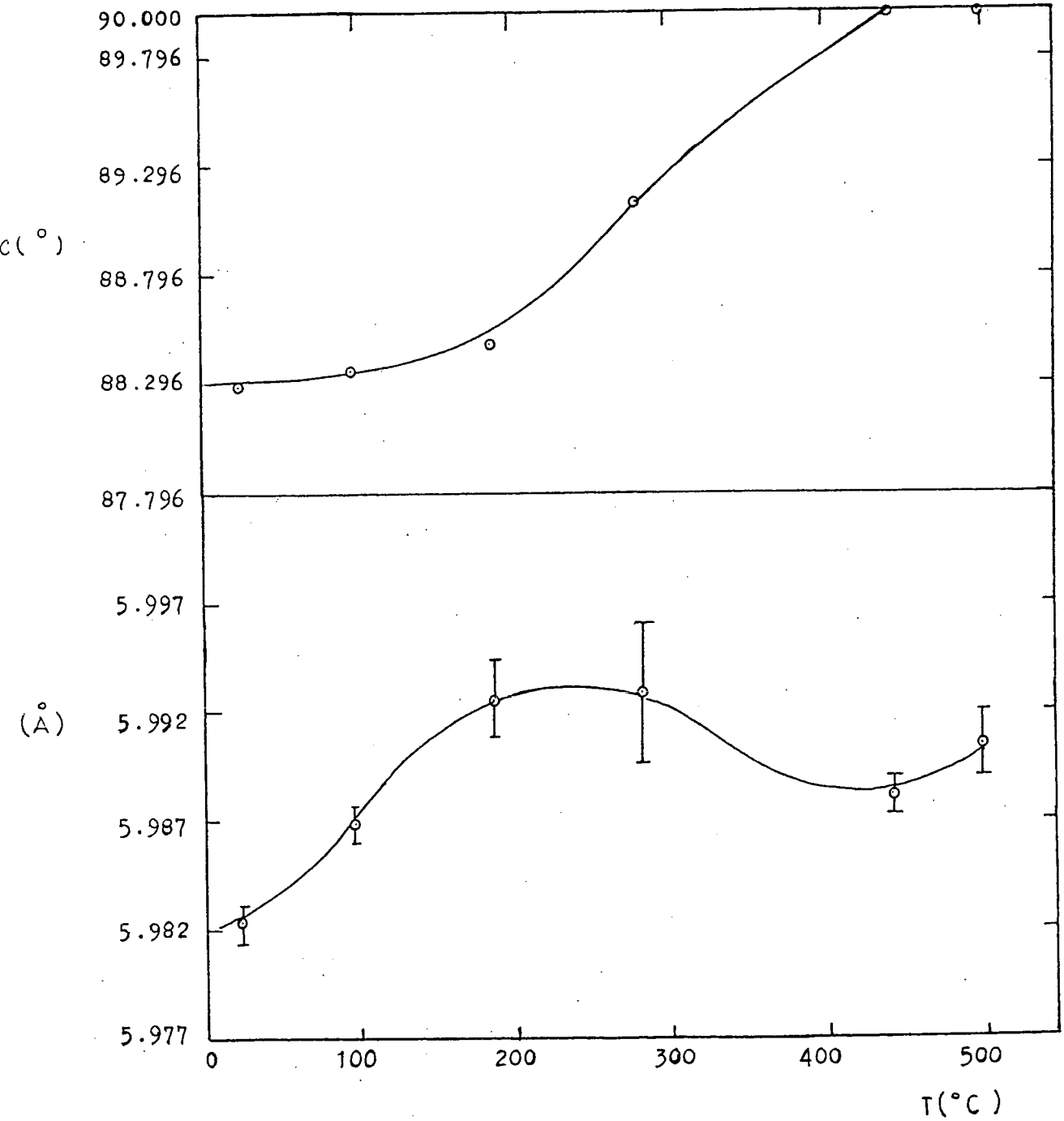
ส่วนผสม		T_t ($^{\circ}\text{C}$)	T_t (K)
x	y		
0.0	1.0	445	718
0.15	0.8	355	628
0.3	0.6	235	508
0.45	0.4	100	373
0.525	0.3	50	323



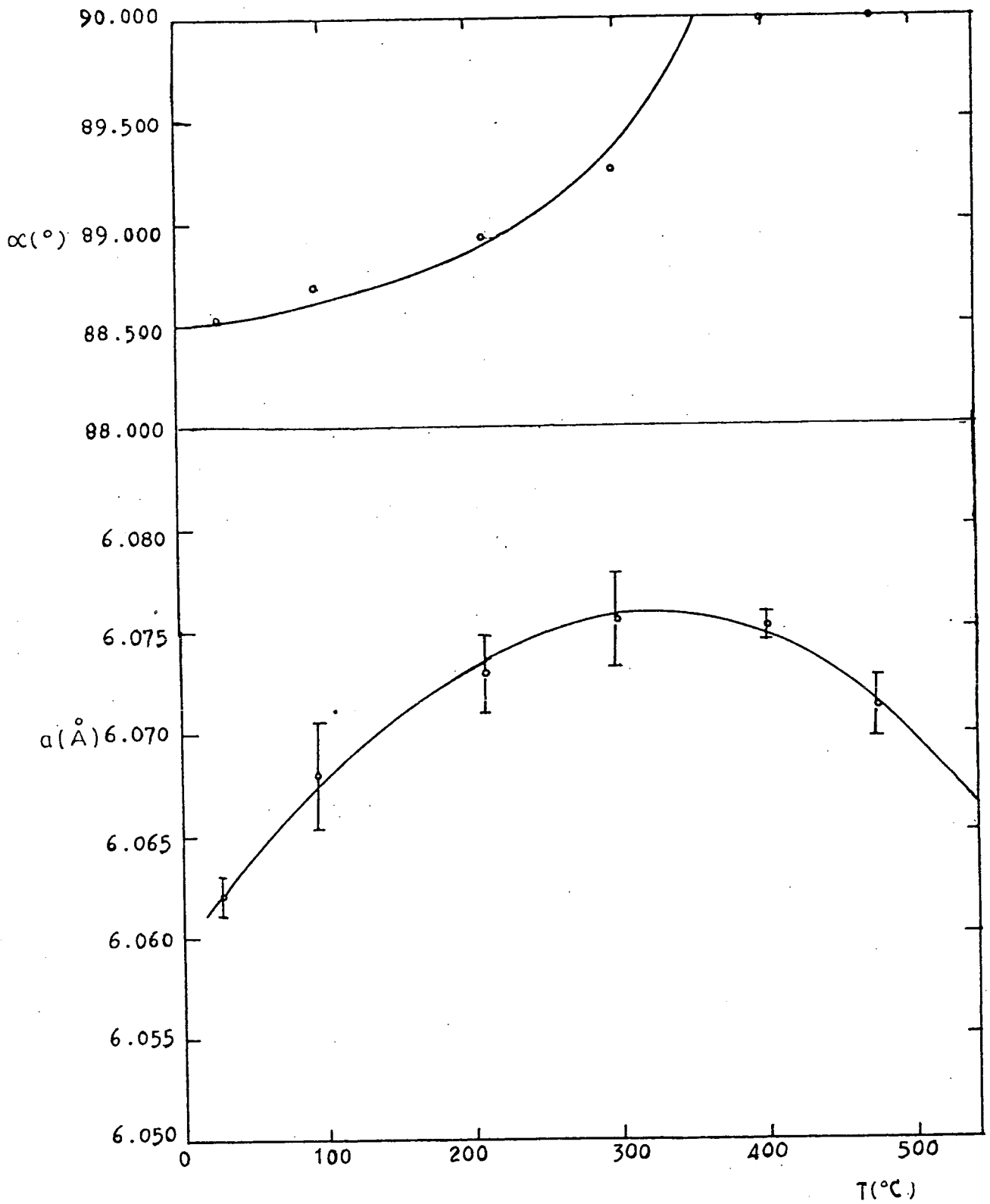
รูปที่ 5.9 การแปรผันของอุณหภูมิขณะเกิดการเปลี่ยนเฟสกับปริมาณ GeTe ในส่วนผสม

5.6 การขยายตัวของโลหะผสมจากอุณหภูมิ 28°C จนกระทั่งเริ่มจะหลอมเหลว

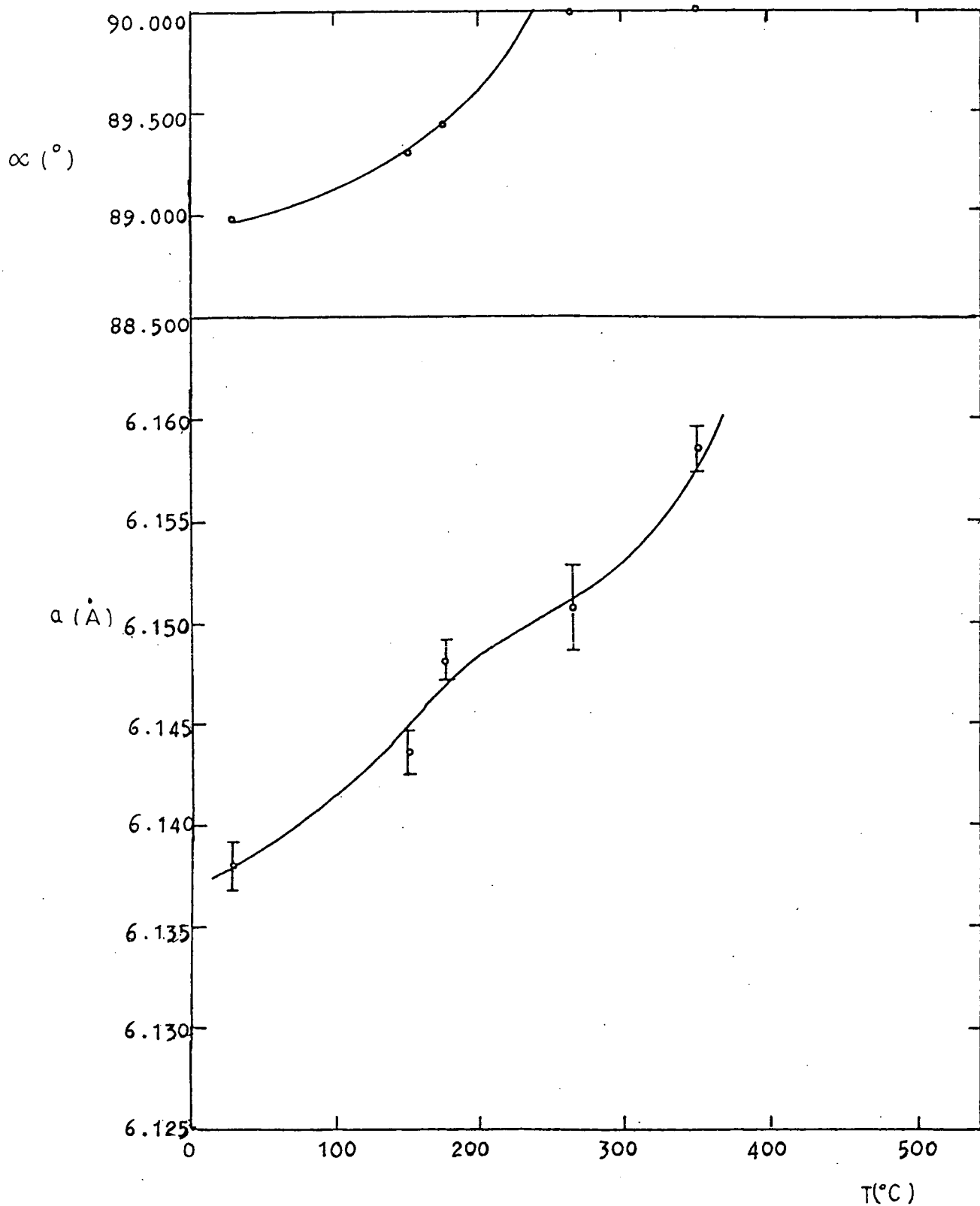
ผลจากการคำนวณแลททิสพารามิเตอร์ ในตารางที่ 5.5 สามารถเขียนกราฟ แสดงการขยายตัวของโลหะผสมได้ดังในรูปที่ 5.10. จากกราฟจะเห็นได้ว่า ผลึกในระบบคิวบิก มีการขยายตัวค่อนข้างจะสม่ำเสมอ และสำหรับผลึกในระบบบรอมโบฮีดรัล มีแนวโน้มที่จะเป็นได้ว่าแลททิสพารามิเตอร์ a จะหยุดขยายตัวที่อุณหภูมิ T_c



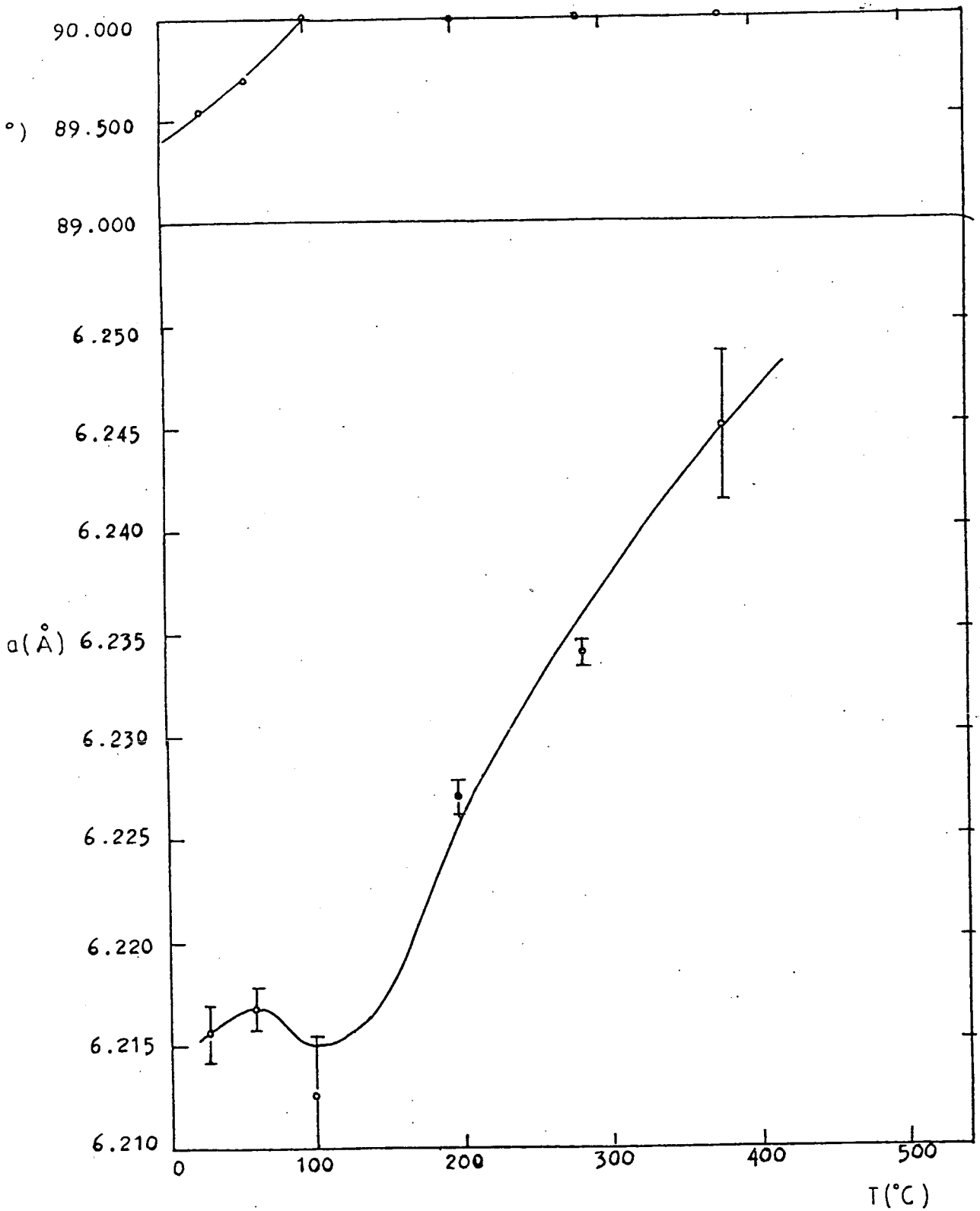
รูปที่ 5.10 (ก) การขยายตัวของ GeTe และการเปลี่ยนแปลงของแลตทิซพารามิเตอร์ c จากอุณหภูมิ 28 ถึง 500°C



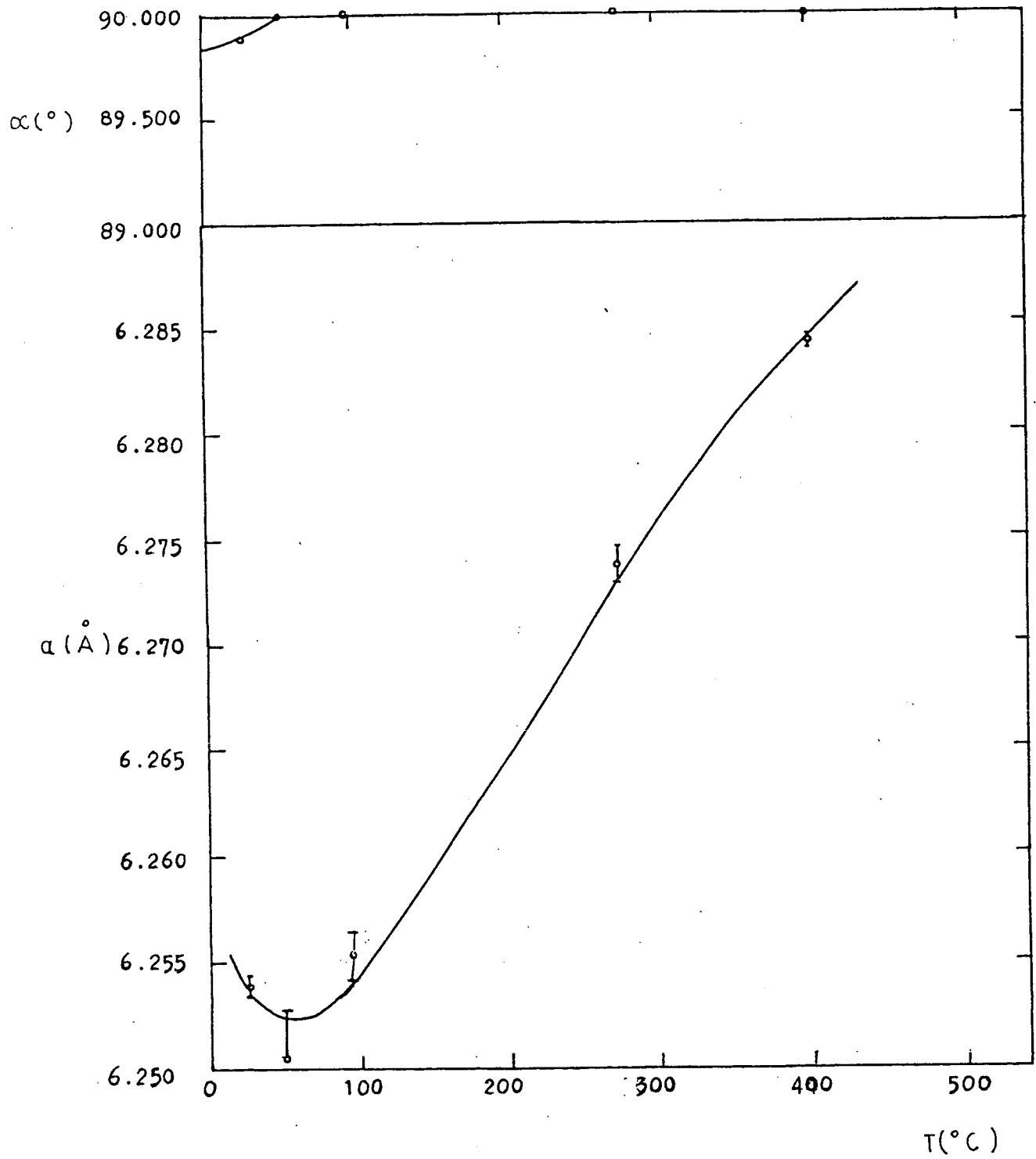
รูปที่ 5.10 (ข) การขยายตัวของ $\text{Pb}_{0.05}\text{Sn}_{0.15}\text{Ge}_{0.8}\text{Te}$ และการเปลี่ยนแปลงของแลตทิสพารามิเตอร์ a จากอุณหภูมิ 28 ถึง 475°C



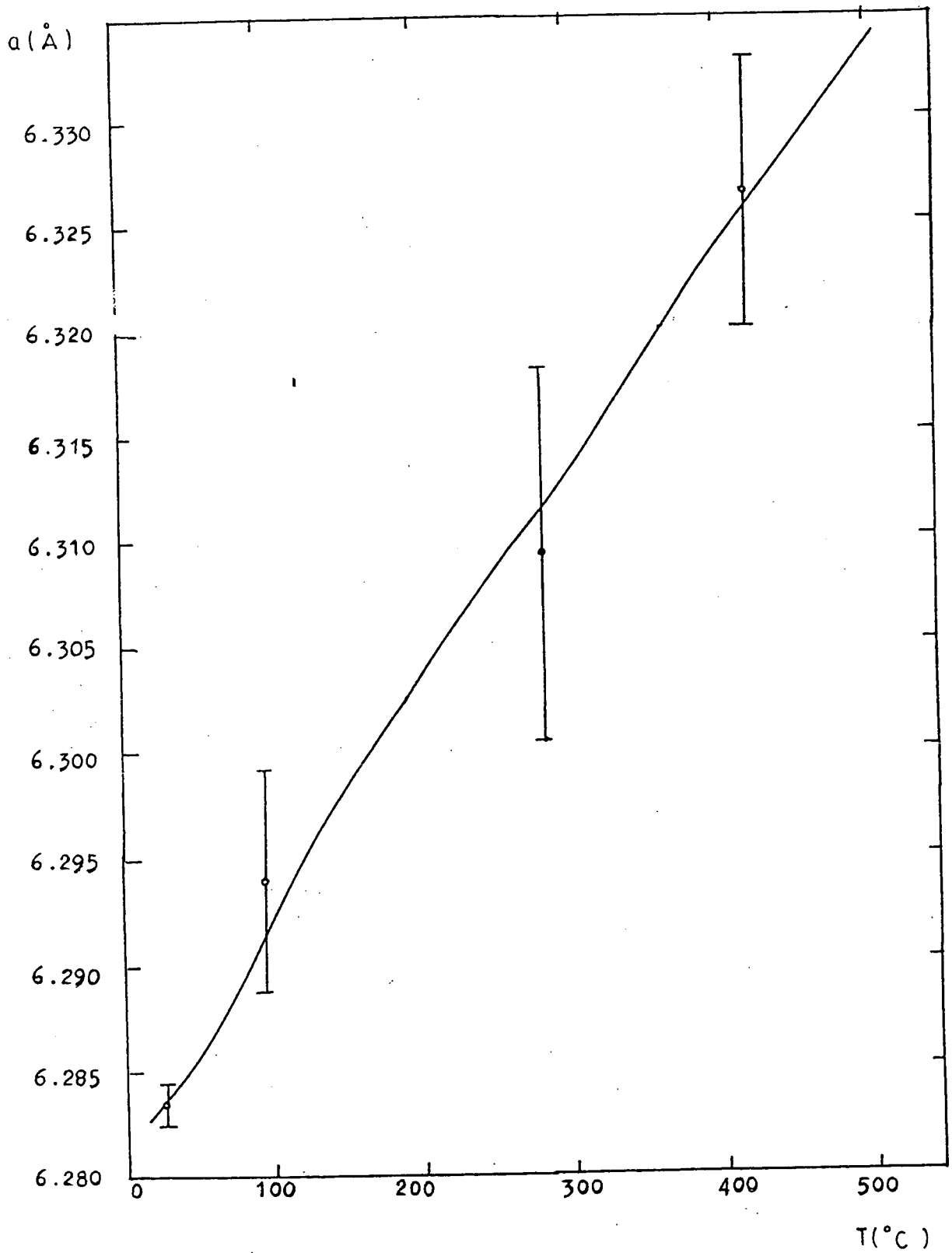
รูปที่ 5.10 (ค) การขยายตัวของ $\text{Pb}_{0.1}\text{Sn}_{0.3}\text{Ge}_{0.6}\text{Te}$ และการเปลี่ยนแปลงของแลตทิสพารามิเตอร์ α จากอุณหภูมิ 28 ถึง 350 $^{\circ}\text{C}$



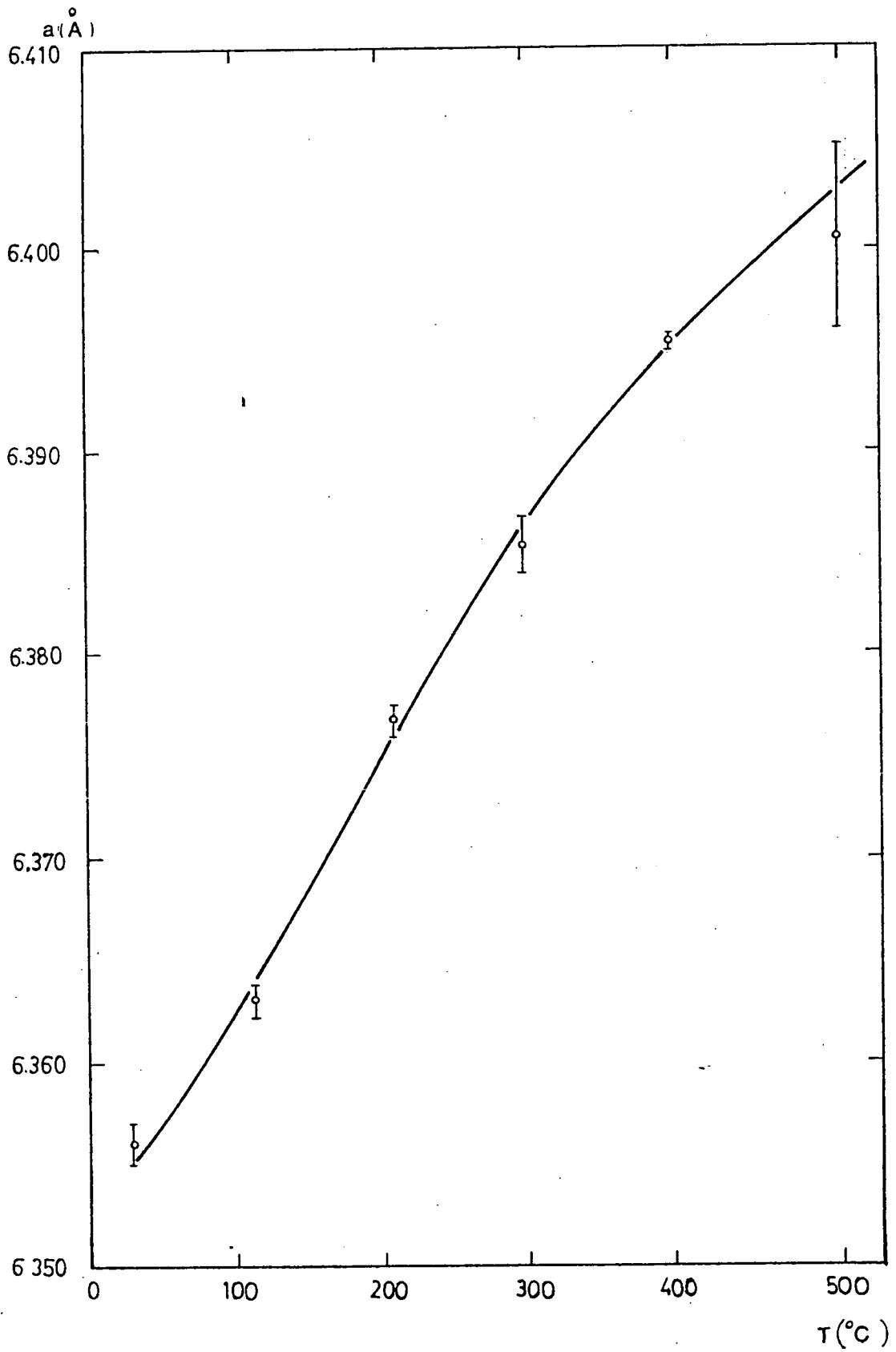
รูปที่ 5.10 (ง) การขยายตัวของ $\text{Pb}_{0.15}\text{Sn}_{0.45}\text{Ge}_{0.4}\text{Te}$ และการเปลี่ยนแปลงของแลตทิสพารามิเตอร์ a จากจุดหนึ่ง 28 ถึง 380 $^{\circ}\text{C}$



รูปที่ 5.10 (จ) การขยายตัวของ $\text{Pb}_{0.175}\text{Sn}_{0.525}\text{Ge}_{0.3}\text{Te}$ และการเปลี่ยนแปลงของ
แลททิส์พารามิเตอร์ a จากอุณหภูมิ 28 ถึง 420°C



รูปที่ 5.10 (ค) การขยายตัวของ $\text{Pb}_{0.2}\text{Sn}_{0.6}\text{Ge}_{0.2}\text{Te}$ จากจุดอุณหภูมิ 28°C ถึง 420°C



รูปที่ 5.10 (ข) การขยายตัวของ $\text{Pb}_{0.25}\text{Sn}_{0.75}\text{Te}$ จากอุณหภูมิ 28°C ถึง 515°C