

บทที่ 4

การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผง $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ และผลจากการวิเคราะห์ภาพถ่าย

4.1 การถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่อุณหภูมิห้องด้วยกล้องกิเบิร์ตเอ็กซ์

4.1.1 อุปกรณ์ในการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกผง $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$

1. กล้องถ่ายภาพเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ชนิดกิเบิร์ตเอ็กซ์
2. ฟิล์มรังสีเอ็กซ์
3. ชุดอุปกรณ์ในการล้างฟิล์ม
4. ภาชนะสำหรับบดผลึก
5. ผลึกผงซิลิคอน
6. แผ่นเทปโปร่งแสง
7. วงแหวนหมุนผลึก

4.1.2 วิธีการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ด้วยกล้องกิเบิร์ตเอ็กซ์

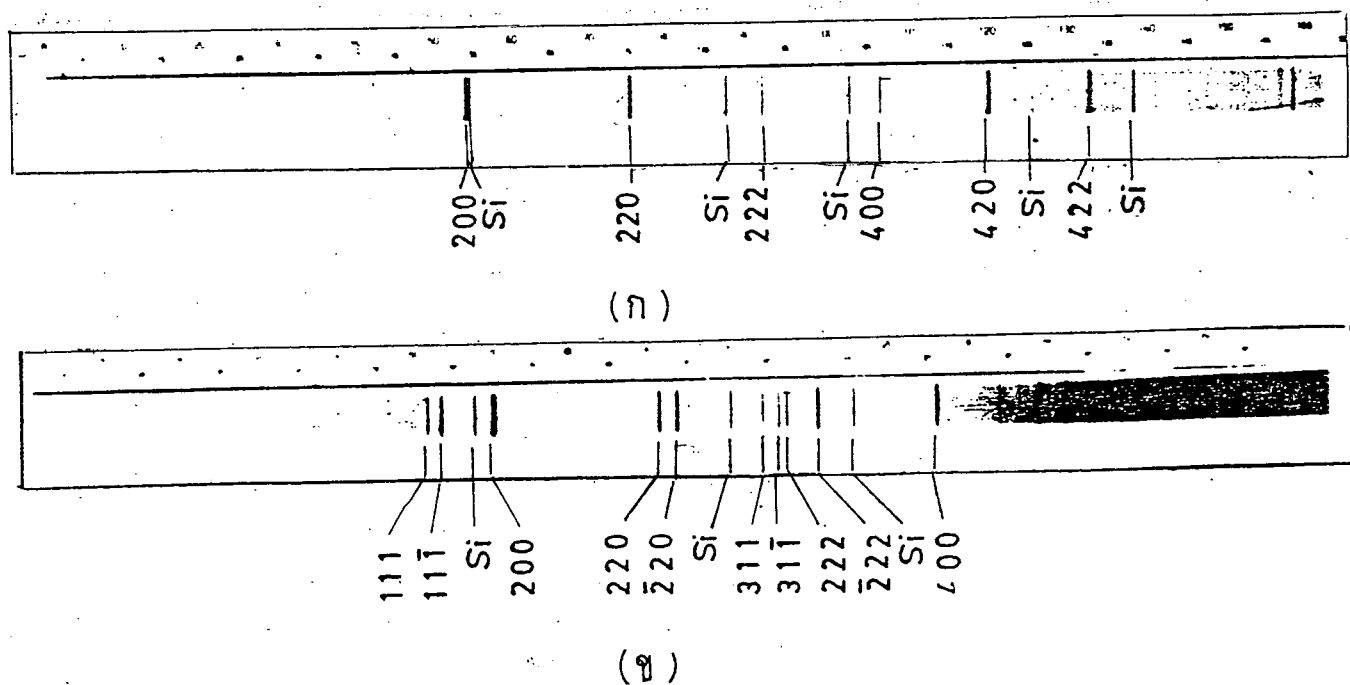
1. แบ่งผลึกของโลหะผสมมาทำการบดให้เป็นผง
2. ผสมผลึกผงของโลหะผสมเข้ากับผลึกผงของซิลิคอน โดยใช้ผลึกผงของซิลิคอน 1 ใน 3 ของโลหะผสม
3. ตัดแผ่นเทปโปร่งแสงปิดลงบนวงแหวนสำหรับใส่ลำแสงตัวอย่างของกล้อง
4. เทลำแสงตัวอย่างลงในวงแหวนใส่ลำแสงพร้อมทั้งเกาะเบา ๆ ให้ผลึกกระจายไปทั่วแผ่นเทปอย่างบาง ๆ
5. บรรจุฟิล์มลงในตลับใส่ฟิล์มภายในห้องมืด
6. นำตลับฟิล์มและวงแหวนใส่ลงในกล้อง เลื่อนตำแหน่งของยึดเตอร์บนตลับฟิล์มไปยังตำแหน่งที่เปิดช่องสำหรับทำเครื่องหมายเส้นปฐมภูมิบนฟิล์ม
7. เปิดเครื่องกำเนิดรังสีเอ็กซ์ รอจนกระทั่งกระแสไฟฟ้าของเครื่องขึ้นไปเป็น 3 มิลลิแอมป์
8. เปิดหน้าต่างปิดกั้นรังสีเอ็กซ์ จากหลอดกำเนิดรังสีเอ็กซ์ โดยกดสวิตช์ที่เครื่องกำเนิดรังสีเอ็กซ์เป็นเวลา 2 วินาที แล้วจึงปิด เพื่อทำเครื่องหมายตำแหน่งเส้นปฐมภูมิ (Primary beam) ซึ่งเป็นตำแหน่งมุม $\theta = 0$

9. เปลี่ยนชุดเตอร์บนตลับฟิล์ม กลับไปยังตำแหน่งเดิม และปิดฝากล้อง
10. ลูบอากาศออกจากตัวกล้องด้วยบีมสูญญากาศ และ เปิดมอเตอร์หมุนวงแหวนกึ่งกัน
ข้างของตัวกล้อง
11. ปรับค่าของกระแสไฟฟ้าที่เครื่องกำเนิดรังสีเอ็กซ์ให้เพิ่มขึ้นเป็น 20 มิลลิแอมป์
และปรับศักย์ไฟฟ้าให้เพิ่มขึ้นเป็น 35 กิโลโวลต์ เปิดหน้าต่างปิดกั้นรังสีเอ็กซ์ เพื่อให้รังสีผ่านเข้า
ไปยังผลึกในตัวกล้องเป็นเวลา 3 ชั่วโมง ปิดหน้าต่างปิดกั้นรังสีเอ็กซ์และปิดมอเตอร์หมุนวงแหวน
แล้วจึง นำฟิล์มไปล้างในห้องมืด

4.2 การคำนวณแลททิส์พารามิเตอร์ของโลหะผสมที่อุณหภูมิห้อง

4.2.1 ลักษณะของเส้นการสะท้อนบนฟิล์มภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์จากกล้องกิเบิร์ตเอกซ์

ฟิล์มภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกผสม $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ จะแบ่งออก
ได้เป็น 2 แบบคือ แบบแรก เป็นแบบที่มีลักษณะการเรียงของเส้นการสะท้อนเหมือนระบบเฟสเซน
เตอร์คิวบิก SnTe หรือ PbTe แบบที่สอง คือ แบบที่มีลักษณะการเรียงของเส้นการสะท้อนเหมือน
กับระบบบรอมโบइटรัล GeTe ดังรูปที่ 4.1



รูปที่ 4.1 (ก) ฟิล์มภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึก SnTe

(ข) ฟิล์มภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึก GeTe

4.2.2 การคำนวณแลททิซพารามิเตอร์ของผลึกในระบบคิวบิก

ผลึกของ $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ ซึ่งอยู่ในระบบคิวบิก ได้ทำการคำนวณตามขั้นตอนต่าง ๆ ดังนี้ คือ

1. วัดตำแหน่งของเส้นการสะท้อนบนฟิล์ม โดยให้ S_0 เป็นตำแหน่งของเส้นปฐมภูมิ และเส้นอื่น ๆ เป็น S

2. คำนวณระยะจาก S_0 ถึง S ของเส้นการสะท้อนแต่ละเส้นโดยให้เป็น $(S-S_0)_{obs}$ พร้อมกับระบุค่าดัชนีผลเลี้ยวของเส้นการสะท้อน ซึ่งเกิดจากผลึก $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ และบันทึกค่าของ $(S-S_0)$ ซึ่งคำนวณจากแลททิซพารามิเตอร์ของซิลิคอนลงในช่อง $(S-S_0)_{cal}$

3. จากตำแหน่งของเส้นซิลิคอน สร้างกราฟเพื่อแก้ความคลาดเคลื่อนของ $(S-S_0)_{obs}$ โดยคำนวณ $\Delta (S-S_0)$ จาก

$$\Delta (S-S_0) = (S-S_0)_{cal} - (S-S_0)_{obs} \quad (4.1)$$

เขียนกราฟระหว่าง ค่าของ $\Delta (S-S_0)$ กับ $(S-S_0)_{obs}$ ดังรูปที่ 4.2

4. ให้ $(S-S_0)_{corr}$ เป็นค่าของระยะจาก S_0 ถึง S ที่ได้ทำการแก้ความคลาดเคลื่อนแล้ว

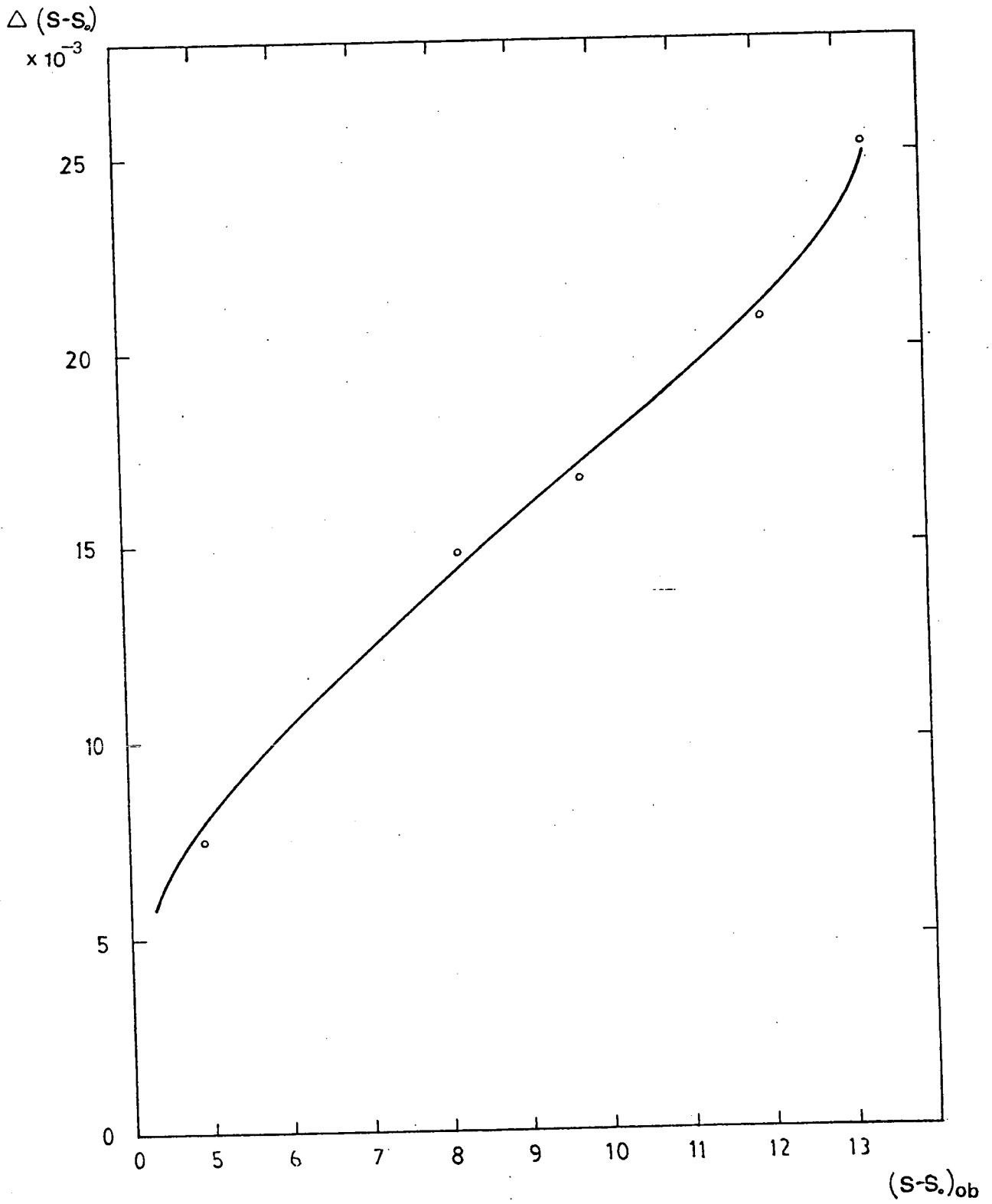
$$(S-S_0)_{corr} = (S-S_0)_{obs} + \Delta (S-S_0) \quad (4.2)$$

โดยที่ $\Delta (S-S_0)$ สามารถอ่านจากกราฟ รูปที่ 4.2

$$\begin{aligned} 5. \text{ คำนวณ } \sin^2 \theta \text{ จาก } (S-S_0)_{corr} \text{ โดย} \\ \theta = 0.286 \times (S-S_0)_{corr} \end{aligned}$$

ปริมาณ 0.286 เป็นค่าคงที่ของกลองมีหน่วยเป็น องศาต่อมิลลิเมตร และ $(S-S_0)_{corr}$ ในที่นี้มีหน่วยเป็นมิลลิเมตร ขั้นตอนในการคำนวณ $\sin^2 \theta$ นี้ได้แสดงในตารางที่ 4.1 ซึ่งเป็นข้อมูลจากการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของ $SnTe$

$$6. \text{ จากสมการ } \sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a^2} (h^2 + k^2 + l^2) \quad (4.3)$$



รูปที่ 4.2 กราฟซึ่งใช้ในการแก้ความคลาดเคลื่อนของระยะ $(S-S)_{obs}$

ตารางที่ 4.1

ขั้นตอนในการคำนวณ $\sin^2\theta$ จากตำแหน่งเส้นการสะท้อนบนฟิล์ม ซึ่งเกิดจากการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของ Sn Te ด้วยกล้องกัมมาเรย์เอกซ์

ตำแหน่งของเส้นปฐมภูมิ $S_o = 12.965$ cm

S_{obs} (cm)	hkl	$(S-S_o)_{obs}$ (cm)	$(S-S_o)_{cal}$ (cm)	$\Delta(S-S_o)$ (cm)	$(S-S_o)_{corr}$ (cm)	θ (°)	$\sin^2\theta$
17.885	200	4.920		0.0073	4.927	14.0912	0.05928
17.930	111(S1)	4.965	4.9725	0.0075			
19.995	220	7.030		0.0127	7.043	20.1430	0.11865
21.220	220(S1)	8.255	8.2698	0.0148			
21.675	222	8.710		0.0154	8.725	24.9535	0.17791
22.760	311(S1)	9.795	9.8117	0.0167			
23.135	400	10.170		0.0172	10.187	29.1348	0.23709
24.480	420	11.515		0.0194	11.534	32.9872	0.29647
25.030	400(S1)	12.065	12.0858	0.0208			
25.735	422	12.770		0.0231	12.793	36.5880	0.35541
26.295	331(S1)	13.330	13.3527	0.0227			



จะสามารถคำนวณแฉกคลื่นพารา มิเตอร์ โดยวิธีที่กล่าวข้างน้อย สุด โดยการแก้สมการตั้ง จาก (4.4)

$$(\sum_i \alpha_i^2) A_o = \sum_i \alpha_i \sin^2 \theta_i \tag{4.4}$$

$$A_o = \frac{\lambda^2}{4a^2}$$

$$\alpha_i = (h^2 + k^2 + l^2)$$

หรือใช้โปรแกรม คอมพิวเตอร์ CSPHCENE ซึ่งเป็นโปรแกรมใช้ปรับค่าแฉกคลื่นพารา มิเตอร์ เพื่อให้ได้ $\sin^2 \theta$ สอดคล้องกับ $\sin^2 \theta$ จากการทดลองมากที่สุด

4.2.3 การคำนวณแฉกคลื่นพารา มิเตอร์ของผลึกในระบบรวมโบฮิตรัล

ในการคำนวณแฉกคลื่นพารา มิเตอร์ ระบบรวมโบฮิตรัลนี้จะทำการกำหนดค่าของ ดัชนีผล เลอร์ของ เส้นการสะท้อนบนฟิล์มและคำนวณแฉกคลื่นพารา มิเตอร์ในระบบ เอกแซกโกนัล แล้วจึงทำการแปลงแฉกคลื่นพารา มิเตอร์กลับไปสู่ระบบรวมโบฮิตรัล ภายหลังสมการซึ่งใช้ในการ แปลงแฉกคลื่นพารา มิเตอร์ และดัชนีผล เลอร์ระหว่างระบบ เอกแซกโกนัล และรวมโบฮิตรัล (31) คือ

$$a_r = \frac{1}{3} \sqrt{3a_H^2 + c^2} \tag{4.5}$$

$$\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) = \frac{3}{2 \sqrt{3 + \left(\frac{c}{a_H}\right)^2}} \tag{4.6}$$

$$\left. \begin{aligned} H &= h - k \\ K &= k - l \\ L &= h + k + l \end{aligned} \right\} \tag{4.7}$$

$$\left. \begin{aligned} h &= \frac{1}{3} (2H + K + L) \\ k &= \frac{1}{3} (-H + K + L) \\ l &= \frac{1}{3} (-H - 2K + L) \end{aligned} \right\} \tag{4.8}$$

โดยที่ a_r คือ ความยาวแกนของหน่วยเซลล์ในระบบรวมโบฮิตรัล
 α คือ มุมระหว่างแกน a_r

a_H และ C คือ ความยาวแกนของหน่วย เซลล์ในระบบเอกแซกโกนัล

h, k, l คือ ดัชนีผลเลอรัในระบบบรอมโบอิตรัล

H, K, L คือ ดัชนีผลเลอรัในระบบเอกแซกโกนัล

หน่วยเซลล์ในระบบบรอมโบอิตรัล และเอกแซกโกนัล สำหรับแลททิส์ แบบบรอมโบอิตรัลได้แสดงใน

รูปที่ 4.3 (32) สำหรับการคำนวณแลททิส์พารามิเตอร์ในระบบบรอมโบอิตรัลมีขั้นตอนดังนี้ คือ

1. ดำเนินการตามขั้นตอนเช่นเดียวกับกรณีของการคำนวณแลททิส์พารามิเตอร์ระบบคิวบิก ตั้งแต่ขั้นตอนที่ 1 ถึง 5 โดยกำหนดดัชนีผลเลอรัของเส้นการสะท้อนให้อยู่ในระบบเอกแซกโกนัล ด้วยสมการที่ 4.7 ตัวอย่างของผลจากการคำนวณในขั้นตอนนี้ได้แสดงไว้ในตารางที่ 4.2 ซึ่งเป็นการคำนวณ $\sin^2 \theta$ ของเส้นการสะท้อนจากผลึก

2. ค่าของค่าของแลททิส์พารามิเตอร์ ด้วยวิธีการแบบกำลังสองน้อยสุดจากสมการ

$$\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{3a^2} (h^2 + hk + k^2) - \frac{\lambda^2}{4c^2} (l^2) \quad (4.9)$$

$$\Sigma \sin^2 \theta = A \Sigma \alpha^2 + B \Sigma \alpha \gamma^2 \quad (4.10)$$

$$\Sigma \gamma \sin^2 \theta = A \Sigma \alpha \gamma + B \Sigma \gamma^2$$

$$A = \frac{\lambda^2}{3a^2}$$

$$\alpha = (h^2 + hk + k^2)$$

$$B = \frac{\lambda^2}{4c^2}$$

$$\gamma = l^2$$

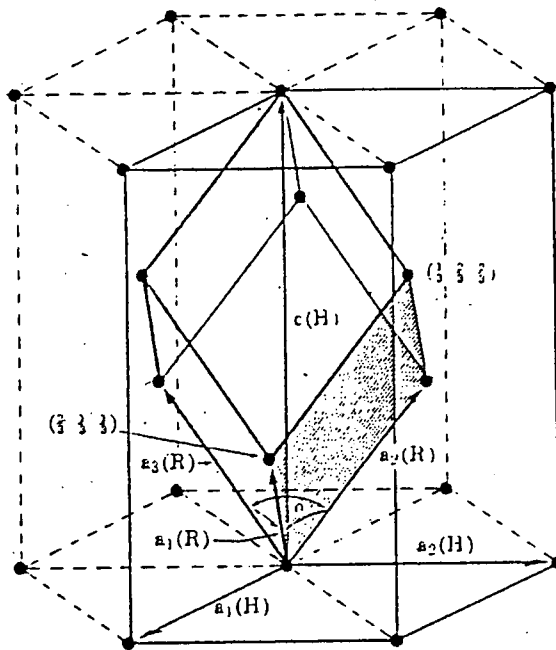
หรือคำนวณโดยใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ CSPHCENE ผลจากการคำนวณค่าของ a_H และ C จะสามารถแปลงไปเป็นแลททิส์พารามิเตอร์ a_T และ c ในระบบบรอมโบอิตรัลได้โดยใช้สมการที่ 4.5 และ 4.6 สำหรับดัชนีผลเลอรัสามารถแปลงกลับไปสู่ระบบบรอมโบอิตรัลด้วยสมการ 4.8

ตารางที่ 4.2

ขั้นตอนในการคำนวณ $\sin^2\theta$ จากตำแหน่งเส้นการสะท้อนบนฟิล์ม ซึ่งเกิดจากการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของ GeTe ด้วยกล้องชนิดกึ่งเดบรีเออก์

ตำแหน่งของเส้นปฐมภูมิ $S_o = 9.72.0$ cm

S_{obs}	hkl	HKL	$(S-S_o)_{obs}$ (cm)	$(S-S_o)_{cal}$ (cm)	$\Delta(S-S_o)$ (cm)	$(S-S_o)_{corr}$ (cm)	θ (°)	$\sin^2\theta$
14.695	111(S1)		4.975	4.9725	0.0025			
14.945	200	202	5.225		0.0002	5.2219	14.9348	0.66642
17.080	220	024	7.360		0.0016	7.3552	21.0358	0.12885
17.310	220	$\bar{4}20, 220$	7,590		0.0019	7.5850	21.6932	0.13663
17.995	220(S1)		8.275	8.2698	0.0052			
18.695	222	006	8.975		0.0032	8.9720	25.6599	0.18751
19.095	222	$\bar{4}02, 402$	9.375		0.0033	9.3669	26.7895	0.20314
19.535	311(S1)		9.815	9.8117	0.0033			
20.575	400	404	10.855		0.0026	10.8496	31.0299	0.26572
21.810	400(S1)		12.090	12.0858	0.0042			
21.865	420	226	12.145		0.0017	12.1375	31.7134	0.32430
22.195	420	$\bar{6}2\bar{2}, 422$	12.475		0.0016	12.4677	35.6576	0.33982
23.075	331(S1)		13.355	13.3527	0.0023			
23.485	$\bar{4}22$	$\bar{6}00, 600$	13,765		0.0030	13.7634	39.3633	0.40226
25.105	422(S1)		15.385	15.3901	-0.0051			



รูปที่ 4.3 แสดงหน่วยเซลล์ในระบบบรูอิตร์ และเอกซกโกนัล สำหรับแลททิซแบบบรูอิตร์

4.3 แลททิซพารามิเตอร์ของ $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ ที่อุณหภูมิห้อง

จากการเตรียมโลหะผสม โดยใช้อุณหภูมิสุดท้ายตามที่ได้แสดงไว้ในตารางที่ 3.2 บทที่ 3 พบว่า โลหะผสมในส่วนผสม $1-x-y : x = 3:1, 1:1, 1:3$, และ $1-x-y = 0$ พอจะประมาณได้ว่าเข้าสู่สมดุล แล้ว ภาพถ่ายภายใต้แสงในรูปที่ 4.4 สำหรับที่ส่วนผสม $x = 0$ พบว่า มี 2 เฟส ซึ่งคาดว่าเกิดจากอุณหภูมิที่ใช้ในการ แอนนัลยังคงสูงเกินไป ภาพถ่ายของโลหะผสมในส่วนนี้ได้แสดงไว้ในรูปที่ 4.5 จากการคำนวณค่าของแลททิซพารามิเตอร์ ด้วยวิธีการใช้ซิลิคอนเป็นสารมาตรฐานและรังสีเอ็กซ์ที่ใช่คือ รังสี $Cu K\alpha_1$ ซึ่งมีความยาวคลื่น 1.5406 \AA คำนวณตามขั้นตอนในหัวข้อ 4.2 ได้รวบรวมผลแสดงไว้ในตารางที่ 4.3 สำหรับข้อมูล ในการคำนวณได้รวบรวมไว้ในภาคผนวก ก.

4.4 การแปรผันของแลททิซพารามิเตอร์ a กับส่วนผสม

จากผลการคำนวณในตารางที่ 4.3 ได้นำค่าของแลททิซพารามิเตอร์ a มาเขียนกราฟเทียบกับปริมาณของ $PbTe$ และ $SnTe$ ในส่วนผสมโดยมีปริมาณของ $GeTe$ เป็น $0.0, 0.2, 0.3, 0.4, 0.6$ และ 0.8 ดังในกราฟรูปที่ 4.6 และได้ขนาดของวงล้อ

ตารางที่ 4.3 (ก)

แลททิลพัรามีเตอร์ของโลหะผสม $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ ตามแนวส่วนผสม $1-x-y = 0$

ส่วนผสม		แลททิลพัรามีเตอร์ในระบบ เอกแซกโกนัล		แลททิลพัรามีเตอร์ในระบบ รวมโบฮีตรัล		ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานจากการปรับ ค่าแลททิลพัรามีเตอร์โดยโปรแกรม CSPHCENE		
x	y	$a_H (A^\circ)$	$(C_H (A^\circ))$	$a_r (A^\circ)$	$\alpha (^\circ)$	$\sigma(a_H)$	$\sigma(C_H)$	$\sigma(a_r)$
0.0	1.0	8.3332	10.6722	5.9835	88.269 *	0.0006	0.0013	
0.2	0.8	8.4613	10.7407	6.0566	88.616 *	0.0015	0.0021	
0.4	0.6	8.5918	10.7817	6.1256	89.064 *	0.0013	0.0018	
0.6	0.4	8.7274	10.7982	6.1923	89.610 *	0.0009	0.0021	
0.7	0.3	8.7926	10.7907	6.2215	89.922 *	0.0007	0.0021	
0.8	0.2			6.2607	90.000			0.0003
1.0	0.0			6.3282	90.000			0.0007

* แลททิลพัรามีเตอร์ a_r และ α คำนวณจาก a_H และ C_H โดยสมการ 4.5 และ 4.6

ตารางที่ 4.3 (ข)

แลทกิลพัรามีเตอร์ของโลหะผสม $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ ที่อัตราส่วน $1-x-y : x = 3:1$

ส่วนผสม		แลทกิลพัรามีเตอร์ในระบบ เอกแซกโกนัล		แลทกิลพัรามีเตอร์ในระบบ รวมโบฮีตรัล		ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานจากการปรับค่า แลทกิลพัรามีเตอร์โดยโปรแกรม CSPHCENE		
x	y	$a_H (A^\circ)$	$C_H (A^\circ)$	$a_r (A^\circ)$	$\alpha (^\circ)$	σa_H	σC_H	$\sigma(a_r)$
0.0	1.0	8.3331	10.6722	5.9835	88.268*	0.0006	0.0013	
0.05	0.8	8.4919	10.8108	6.0847	88.502*	0.0007	0.0017	
0.1	0.6	8.6689	10.8980	6.1844	88.994*	0.0006	0.0012	
0.15	0.4	8.8246	10.9560	6.2685	89.477*	0.0018	0.0022	
0.175	0.3	8.8973	10.9761	6.3066	89.723*	0.0016	0.0028	
0.2	0.2			6.3450	90.000			0.0004
0.25	0.0			6.4274	90.000			0.0008

ตารางที่ 4.3 (ค)

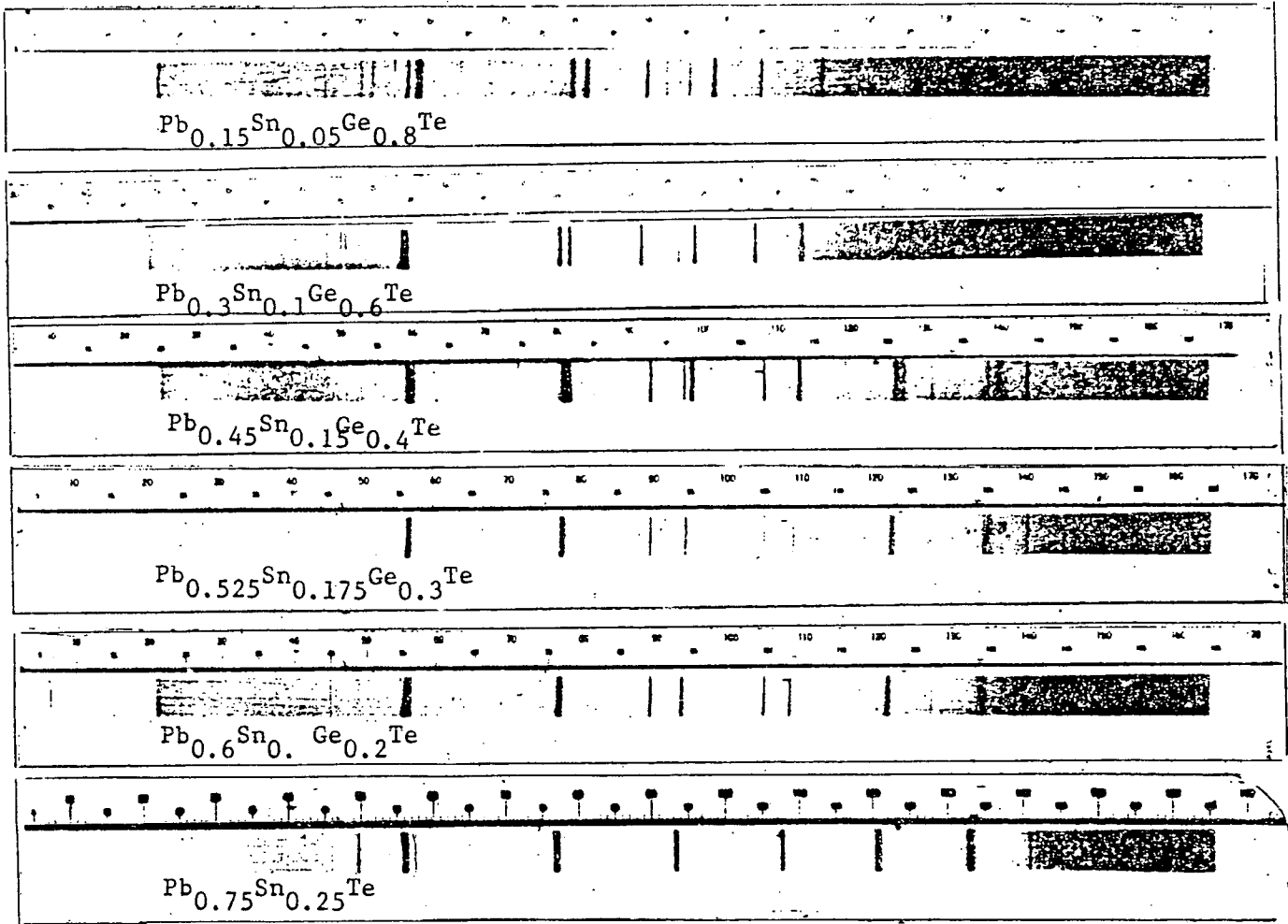
แลททิสมาร์มิเตอร์ของโลหะผสม $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ ที่อัตราส่วน $1-x-y : x = 1:1$

ส่วนผสม		แลททิสมาร์มิเตอร์ในระบบ เอกแซกโกนัล		แลททิสมาร์มิเตอร์ในระบบ รวมโพฮีตรัล		ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานจากการปรับค่า แลททิสมาร์มิเตอร์โดยโปรแกรม CSPHCENE		
x	y	$a_H (A^\circ)$	$c_H (A^\circ)$	$a_T (A^\circ)$	$\alpha (^\circ)$	σ_{a_H}	σ_{c_H}	$\sigma(a_T)$
0.0	1.0	8.3332	10.6722	5.9835	88.269*	0.0006	0.0013	
0.1	0.8	8.4776	10.7904	6.0740	88.511*	0.0010	0.0026	
0.2	0.6	8.6181	10.8400	6.1492	88.973*	0.0004	0.0008	
0.3	0.4	8.7858	10.8752	6.2347	89.593*	0.0016	0.0038	
0.35	0.3	8.8700	10.9208	6.2831	89.799*	0.0009	0.0022	
0.4	0.2			6.3154	90.000			0.0004
0.5	0.0			6.3939	90.000			0.0010

ตารางที่ 4.3 (ง)

แลททิลพัรามีเตอร์ของโลหะผสม $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ ที่อัตราส่วน $1-x-y : x = 1:3$

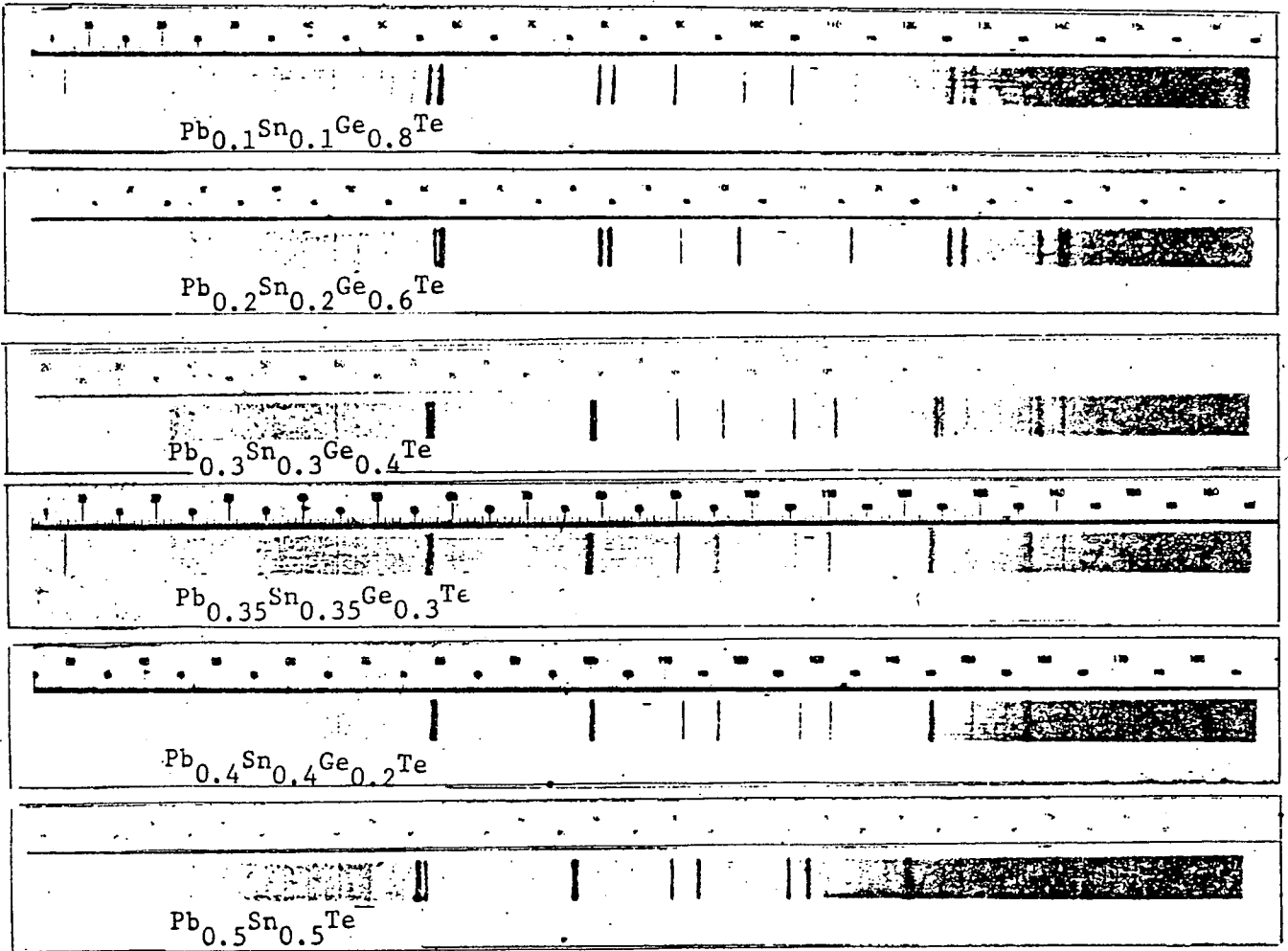
ส่วนผสม		แลททิลพัรามีเตอร์ในระบบ เฮกแซกโกนัล		แลททิลพัรามีเตอร์ในระบบ รวมโบฮีตรัล		ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานจากการปรับค่า แลททิลพัรามีเตอร์โดยโปรแกรม CSPHCENE		
x	y	$a_H (A^\circ)$	$C_H (A^\circ)$	$a_r (A^\circ)$	$\alpha (^\circ)$	σ_{a_H}	σ_{C_H}	$\sigma(a_r)$
0.0	1.0	8.3332	10.5722	5.9835	88.269*	0.0006	0.0013	
0.15	0.8	8.4620	10.7669	6.0621	88.524*	0.0012	0.0031	
0.3	0.6	8.6094	10.8257	6.1426	88.982*	0.0010	0.0024	
0.45	0.4	8.7587	10.8413	6.1254	89.594*	0.0006	0.0014	
0.525	0.3	8.8356	10.8543	6.2540	89.884*	0.0006	0.0009	
0.6	0.2			6.2876	90.000			0.0011
0.75	0.0			6.3571	90.000			0.0007



111 200 Si 220 220 Si 222 222 Si 400 420 420 Si 422 422 Si

รูปที่ 4.4 (ก) ภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของโลหะผสม ตามแนวอัตราส่วน

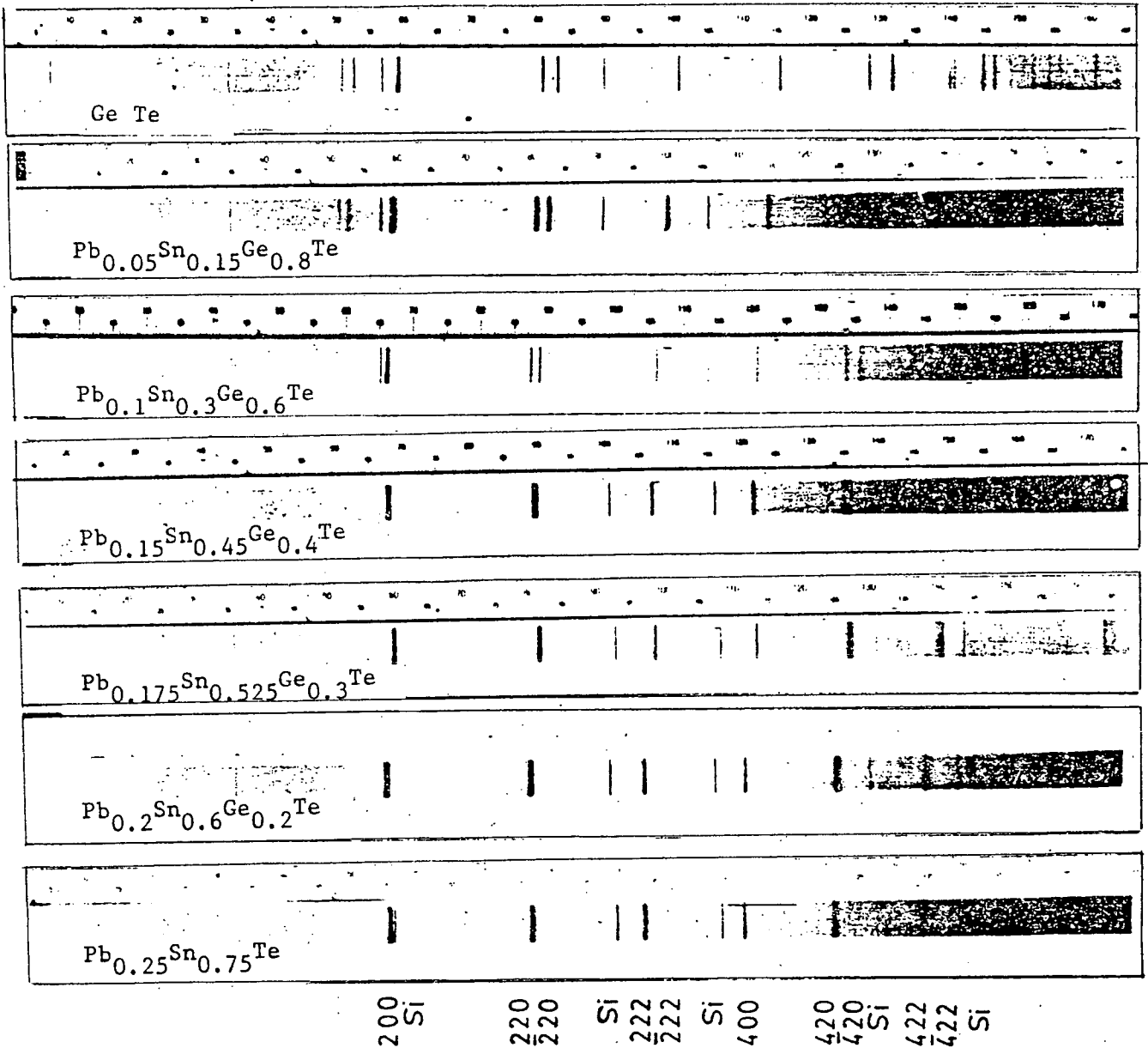
1-x-y : x = 3:1 ซึ่งสัมพันธ์และมีเฟสเดียว



200 Si 220 Si 420 Si
 220 Si 222 Si 420 Si
 400 Si 422 Si 422 Si

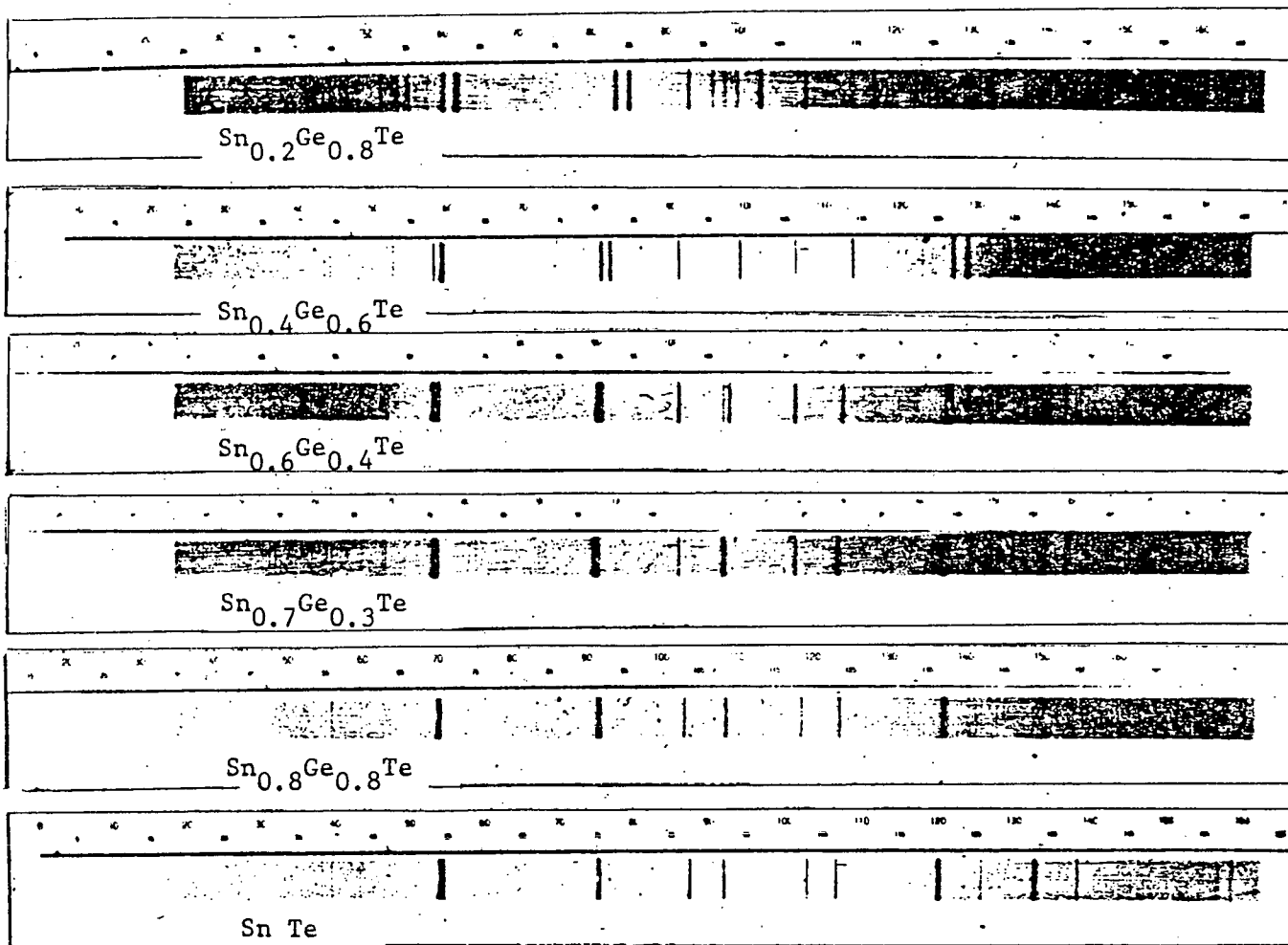
รูปที่ 4.4 (บ) ศิลิมภาพถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของโลหะผสม ตามแนวอัตราส่วน

1-x-y: x = 1:1 ซึ่งสัมพันธ์และมีเฟสเดียว



รูปที่ 4.4 (ค) ภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของโลหะผสม ตามแนวอัตราส่วน

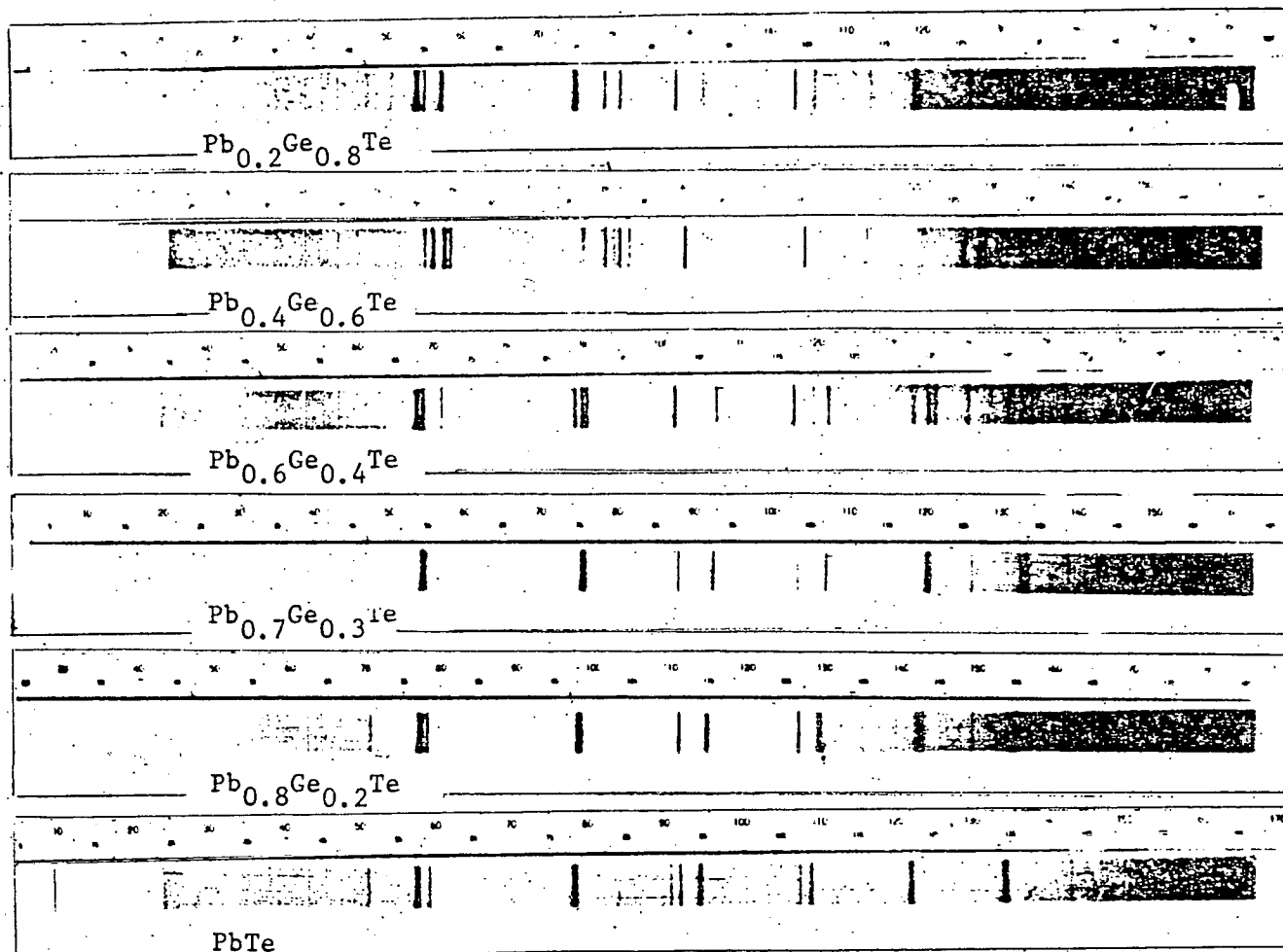
1-x-y: x = 1:3 ซึ่งสัมพันธ์และมีเฟสเดียว



200 Si 220 Si 222 Si 400 Si 420 Si 422 Si Si

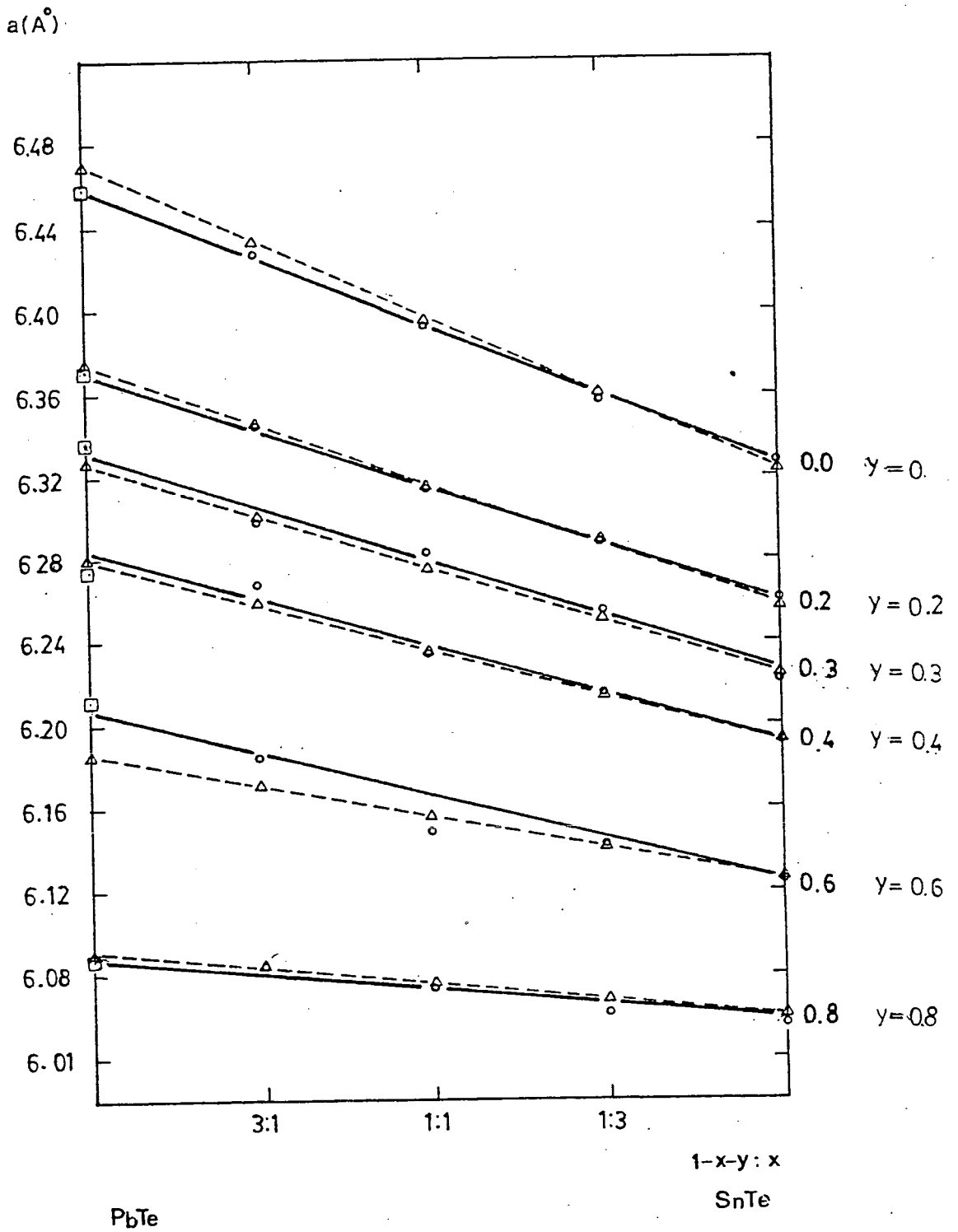
รูปที่ 4.4 (ง) ผลภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของโลหะผสม ตามแนวส่วานผสม

$1-x-y = 0$ ซึ่งสัมพันธ์และมีเฟสเดียว



111 200 Si 220 220 Si 222 222 Si 400 420 420 422 422 Si Si

รูปที่ 4.5 ผลึกภาพถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของโลหะผลึ่ม ตามแนวส่วนผลึ่ม $x = 0$
 ซึ่งพบว่า มี 2 เฟสที่ประมาณเศษส่วนของ GeTe หรือ $y = 0.4, 0.6$ และ 0.8



รูปที่ 4.6 การแปรผันของแลตทิซพารามิเตอร์ a กับปริมาณ SnTe และ PbTe

- , — , จากการทดลอง
- △ , - - - , จากสมการ $a = 6.4708 - 0.14708x - 0.47511y$
- เป็นผลของมวลเฉลี่ยและนิโคลิค

และ นิโคลิค (4) ในส่วนผลสัมทางด้าน $X=0$ มาร่วมพิจารณาด้วย จากกราฟ พบว่าแลททิสพารามิเตอร์ a จะลดลงเมื่อปริมาณของ Sn Te ในส่วนผลสัมเพิ่มขึ้น หรือ a จะลดลงเมื่อ Pb Te ในส่วนผลสัมลดลง โดยที่ลักษณะการแปรผันของ a กับ x ก่อนขั้วจึงจะเป็นเส้นตรง

$$a \propto x \quad (4.11)$$

$$a = A + Bx \quad (4.12)$$

A คือ ค่าคงที่

B คือ สัมประสิทธิ์ของตัวแปร

พิจารณาในกรณีให้ $1-x-y : x$ คงที่ หรืออัตราส่วนของ Pb Te ต่อ Sn Te คงที่ เมื่อทำการเขียนกราฟ ของแลททิสพารามิเตอร์ a เทียบกับ y หรือปริมาณ Ge Te ในส่วนผลสัมดังในกราฟรูปที่ 4.7 แลททิสพารามิเตอร์ a มีแนวโน้มที่จะแปรผันตรงกับปริมาณของ Ge Te ในส่วนผลสัม

$$a \propto y \quad (4.13)$$

$$a = A + Cy \quad (4.14)$$

A คือ ค่าคงที่

C คือ สัมประสิทธิ์ของตัวแปร

จากการแปรผันในสมการ (4.11) และ (4.13) จะได้ว่า

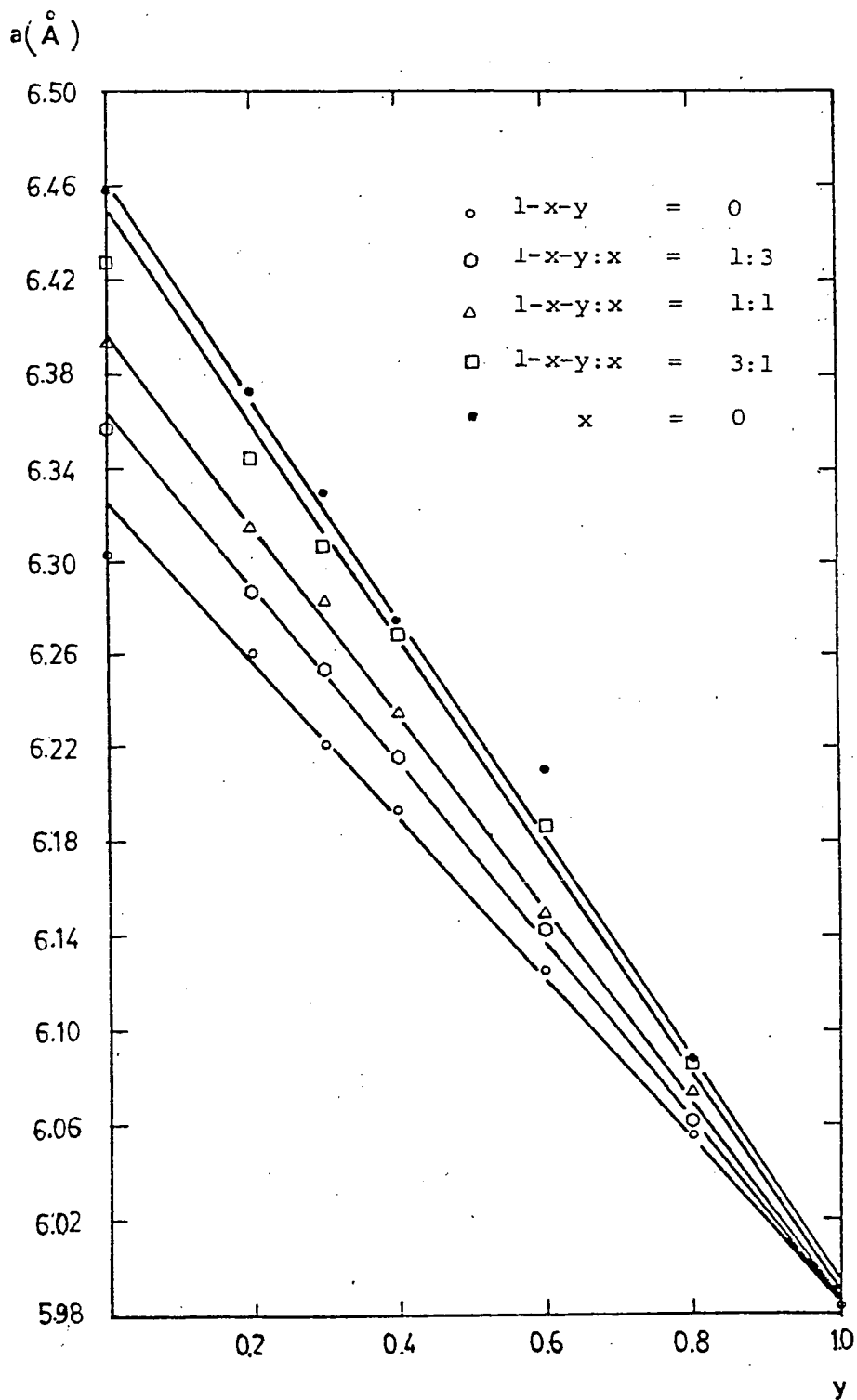
$$a = A + Bx + Cy \quad (4.15)$$

โดยที่ A คือ ค่าคงที่

B คือ สัมประสิทธิ์ของตัวแปร x

C คือ สัมประสิทธิ์ของตัวแปร y

ค่าของ A, B และ C นี้ ได้คำนวณโดยใช้โปรแกรม มัลติเพิลลิเนียร์เรกเรชัน (Multiple linear regression) ซึ่งเป็นโปรแกรมใช้กับเครื่อง ไมโครคอมพิวเตอร์แอปเปิล II โปรแกรมนี้ใช้สำหรับ ปรับหาเส้นตรงที่เหมาะสมที่สุด สำหรับกลุ่มข้อมูลใด ๆ ด้วยวิธีการแบบกำลังสองน้อยสุด (33) ข้อความภายในโปรแกรมได้แสดงไว้ในภาคผนวก ข. การคำนวณนี้ได้จากข้อมูลเป็น 4 กลุ่ม คือ



รูปที่ 4.7 การแปรผันของแลตทิซพารามิเตอร์ a กับปริมาณ GeTe ที่อัตราส่วน $1-x-y$: $x = 3:1, 1:1, 1:3$ และ $1-x-y = 0$ (ที่ $x=0$ เป็นผลของวูลเลย์และนิโคลิต)

1. ใช้ข้อมูลจากโลหะผสม $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ ที่เตรียมขึ้นในส่วนผสม $1-x-y:x = 3:1, 1:1, 1:3$ และ $1-x-y = 0$ ซึ่งได้ข้อมูลรวม 25 จุด จากข้อมูลกลุ่มนี้สามารถคำนวณค่าของ A, B และ C ได้ดังนี้ คือ

$$A = 6.4731$$

$$B = -0.1488$$

$$C = -0.4796$$

$$\sigma = 0.5610$$

$$R = 0.9990$$

โดยที่ σ คือ ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ของแลททิสพารามิเตอร์ a

R คือ สัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (correlation coefficient)

สัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์นี้แสดงถึงความสอดคล้องของข้อมูลกับรูปแบบของสมการเมื่อข้อมูลสอดคล้องกับสมการได้ดี สัมประสิทธิ์นี้จะมีค่าเข้าใกล้ 1 (34)

2. ใช้ข้อมูลจากข้อ 1 และข้อมูลจากผลของ วัสดุเลบ์ และ นิโคสิค

ที่ส่วนผสม $x = 0$ ซึ่งแสดงในตารางที่ 4.4 จะได้ค่าของ A, B และ C ดังนี้ คือ

$$A = 6.4708$$

$$B = -0.1473$$

$$C = -0.4751$$

$$\sigma = 0.7754$$

$$R = 0.9980$$

3. ใช้ข้อมูลจากส่วนผสม $1-x-y : x = 3:1, 1:1$ และ $1:3$ ร่วมกับผลของ

วัสดุเลบ์และนิโคสิค ที่ส่วนผสม $x=0$ และผลของมาเซลล์ก็กับผู้ร่วมงานที่ส่วนผสม $1-x-y$

$= 0$ ซึ่งแสดงในตารางที่ 4.5 สามารถคำนวณค่าของ A, B และ C ได้ดังนี้ คือ

$$A = 6.4724$$

$$B = -0.1518$$

$$C = -0.4775$$

$$\sigma = 0.8168$$

$$R = 0.9970$$

จากสมการ $a = A + Bx + Cy$ ซึ่งคำนวณจากข้อมูลกลุ่มที่ 2 ได้นำมาเขียนลงในกราฟ แสดงการแปรผันของ a กับส่วนผสม ซึ่งแสดงด้วยเส้นประในรูปที่ 4.6

ตารางที่ 4.4

แลททิส์พารามิเตอร์ของโลหะผสม $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ ตามแนวส่วนผสม $x = 0$ ซึ่งเป็นผลของ วูลเลย์ และ นิโคลิค

ส่วนผสม		แลททิส์พารามิเตอร์ ในระบบบรอมโบฮีดรัล		ส่วนผสม		แลททิส์พารามิเตอร์ใน ระบบบรอมโบฮีดรัล	
x	y	$a_r (A^\circ)$	$\alpha (^\circ)$	x	y	$a_r (A^\circ)$	$\alpha (^\circ)$
0.0	0.0	6.4590	90.000	0.0	0.5	6.2528	89.633
0.0	0.1	6.4160	90.000	0.0	0.6	6.2116	89.016
0.0	0.2	6.3727	90.000	0.0	0.7	6.1420	88.733
0.0	0.3	6.3375	90.000	0.0	0.8	6.0870	88.400
0.0	0.35	6.2951	89.950	0.0	0.9	6.0300	88.333
0.0	0.4	6.2750	89.833	0.0	1.0	5.9715	88.266

ตารางที่ 4.5

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

$1-x-y = 0$ ซึ่งเป็นผลของมาเซลส์กี และผู้ร่วมงาน (35)

ส่วนผสม		แลททิส์พารามิเตอร์	
x	y	$a_r (\text{Å}^\circ)$	$\alpha (^\circ)$
0.0	1.0	5.976	88.18
0.2	0.8	6.050	88.61
0.4	0.6	6.116	89.05
0.6	0.4	6.190	89.50
0.7	0.3	6.225	89.71
0.8	0.2	6.260	89.94
1.0	0.0	6.317	90.00

4.5 การแปรผันของ แลททิลพาราเมเตอร์ α กับปริมาณ GeTe ในโลหะผสม

ค่าของมุม α ได้เขียนกราฟเทียบกับ y หรือปริมาณของ GeTe พบว่า ที่อัตราส่วนผสม 1-x-y : x = 3:1 , 1:1 , 1:3 และที่ 1-x-y = 0 การกระจายของจุดมีลักษณะดังในรูปที่ 4.8 จากข้อมูลของมุม α นี้ได้ทำการทดลองหาสมการที่สอดคล้องกับกลุ่มของข้อมูลเพื่ออธิบายการแปรผันของ α กับ y พบว่าสมการในรูปแบบ

$$\alpha = A + By + Cy^2 \quad (4.16)$$

สามารถเข้ากับกลุ่มของข้อมูลได้เป็นอย่างดี ในการคำนวณค่าของ A, B และ C ซึ่งสอดคล้องกับกลุ่มของข้อมูลนี้ได้ทำการคำนวณโดยใช้โปรแกรม เอ็นออเดอร์รีเกรสชัน (N-Order regression) ค่าพารามิเตอร์ของสมการในรูปแบบสมการ (4.16) ด้วยวิธีการกำลังสองน้อยสุด (36) ในการคำนวณค่าคงที่ A และสัมประสิทธิ์ B, C นี้ได้จัดข้อมูลออกเป็นกลุ่มดังนี้ คือ

1. ใช้ข้อมูลจากอัตราส่วนผสม 1-x-y : x = 3:1 จะได้ค่าของ A, B และ

C คือ

$$A = 90.7437$$

$$B = -3.6911$$

$$C = 1.1957$$

$$\sigma = 0.0513$$

$$R = 0.9982$$

เมื่อนำค่าของ A, B และ C แทนลงในสมการ 4.16 และให้ $\alpha = 90^\circ$ จะสามารถคำนวณค่า y ได้เท่ากับ 0.217 ดังนั้นที่จุดนี้ จึงเป็นจุดที่เกิดการเปลี่ยนเฟสระหว่างระบบอโรบิ-ฮีดรัลและระบบคิวบิก สำหรับค่าของ y ที่เกิดการเปลี่ยนเฟสนี้จะแทนด้วย y_t

2. ใช้ข้อมูลจากอัตราส่วนผสม 1-x-y : x = 1:1

$$A = 90.9960$$

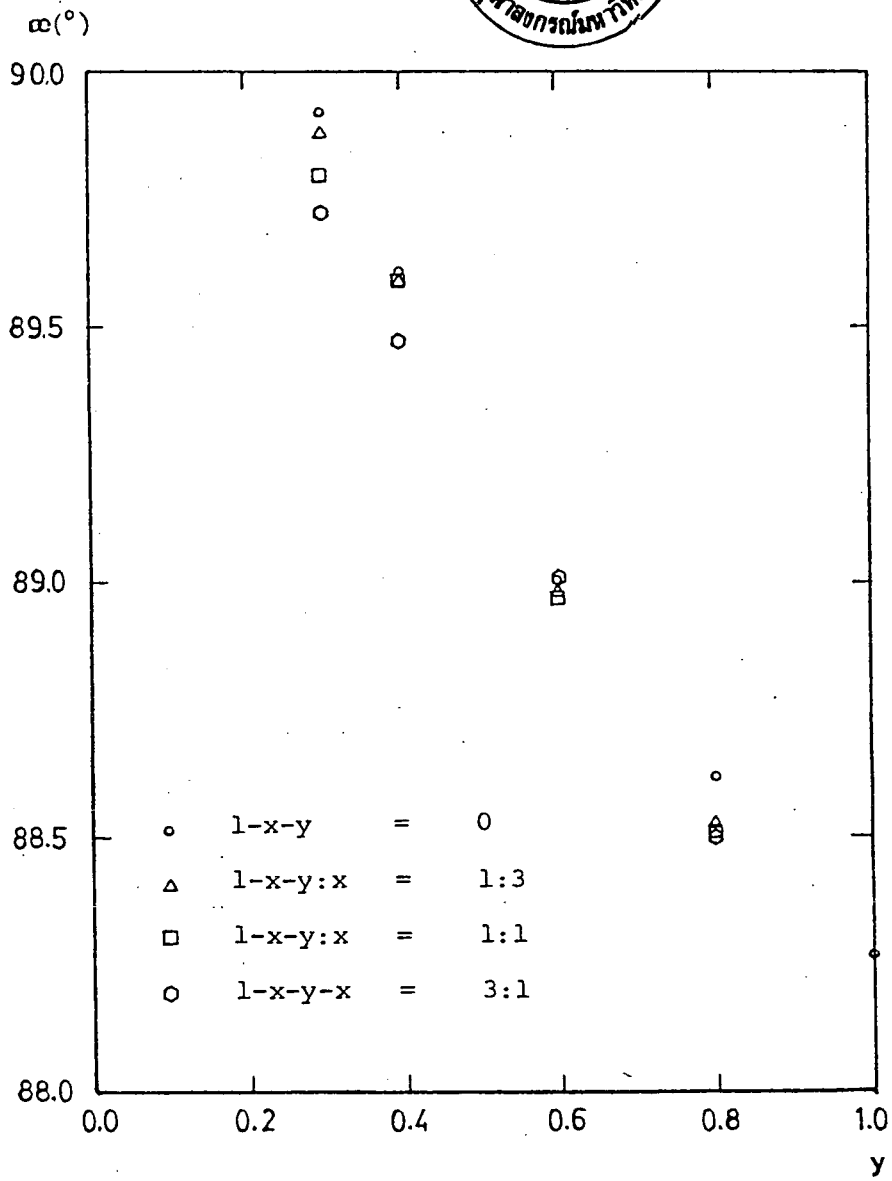
$$B = -4.3018$$

$$C = 1.5556$$

$$\sigma = 0.0664$$

$$R = 0.9975$$

จุดซึ่งเกิดการเปลี่ยนเฟส คือ $y_t = 0.255$



รูปที่ 4.8 จุดซึ่งเกิดจากการลดลงค่าของแลททิส์พารามิเตอร์ θ เทียบกับปริมาณ GeTe

3. ใช้ข้อมูลจากอัตราส่วนผลสัม $1-x-y : x = 1:3$

$$A = 91.1736$$

$$B = -4.7687$$

$$C = 1.8542$$

$$\sigma = 0.0311$$

$$R = 0.9995$$

$$\text{จุดซึ่งเกิดการเปลี่ยนแปลงเฟส คือ } y_t = 0.275$$

4. ใช้ข้อมูลจากส่วนผลสัม $1-x-y = 0$

$$A = 91.0030$$

$$B = -3.9800$$

$$C = 1.2462$$

$$\sigma = 0.0047$$

$$R = 1.0000$$

$$\text{จุดซึ่งเกิดการเปลี่ยนแปลงเฟส คือ } y_t = 0.276$$

5. ใช้ข้อมูล ซึ่งเป็นผลของ วัสดุและชนิดโคลิด

$$A = 92.0677$$

$$B = -6.7651$$

$$C = 2.9071$$

$$\sigma = 0.1257$$

$$R = 0.9980$$

$$\text{จุดซึ่งเกิดการเปลี่ยนแปลงเฟส คือ } y_t = 0.362$$

6. ใช้ข้อมูลจากอัตราส่วนผลสัม $1-x-y : x = 1:3, 1:1, 3:1$ และ

$$1-x-y = 0$$

$$A = 90.9790$$

$$B = -4.1870$$

$$C = 1.4639$$

$$\sigma = 0.0585$$

$$R = 0.958$$

$$\text{จุดซึ่งเกิดการเปลี่ยนเฟส คือ } y_t = 0.257$$

7. ไข้อยู่ของ วูลเลบ์ และ นโคลค ที่ $x = 0$ และข้อมูลจาก

อัตราส่วนผลลัม $1-x-y : x = 1:3, 1:1, 3:1, 1-x-y = 0$

$$A = 91.0940$$

$$B = -4.3357$$

$$C = 1.4727$$

$$\sigma = 0.1166$$

$$R = 0.9836$$

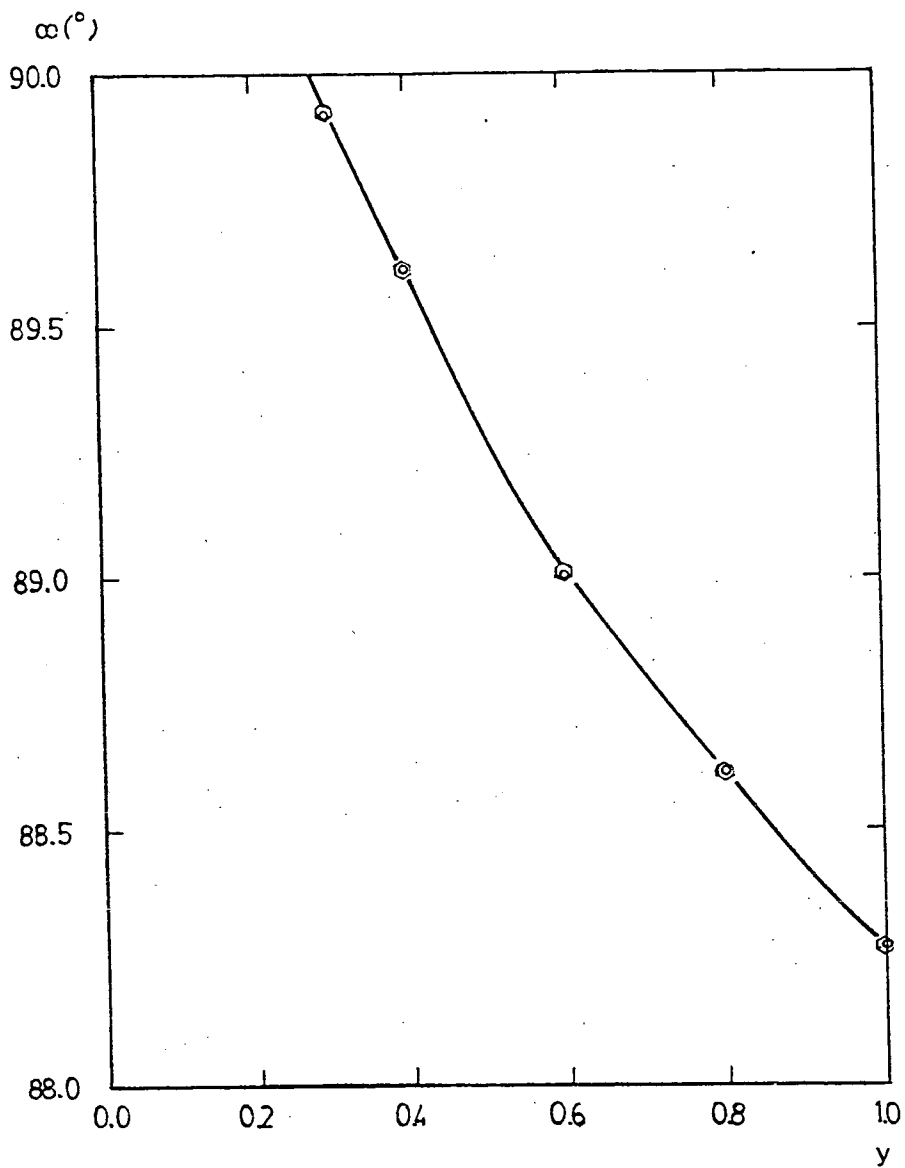
$$\text{จุดซึ่งเกิดการเปลี่ยนเฟส คือ } y_t = 0.279$$

ผลจากการคำนวณนี้ จะสามารถสร้างสมการขึ้นเพื่ออธิบายการแปรผันของมุม α กับ ปริมาณ GeTe ในส่วนผลลัมได้ดังที่แสดงในตารางที่ 4.6

ตารางที่ 4.6

สมการแสดงการแปรผันของแลททิสพารามิเตอร์ α กับปริมาณเศษส่วน GeTe ในโลหะผลลัม $\text{Pb}_{1-x-y}\text{Sn}_x\text{Ge}_y\text{Te}$

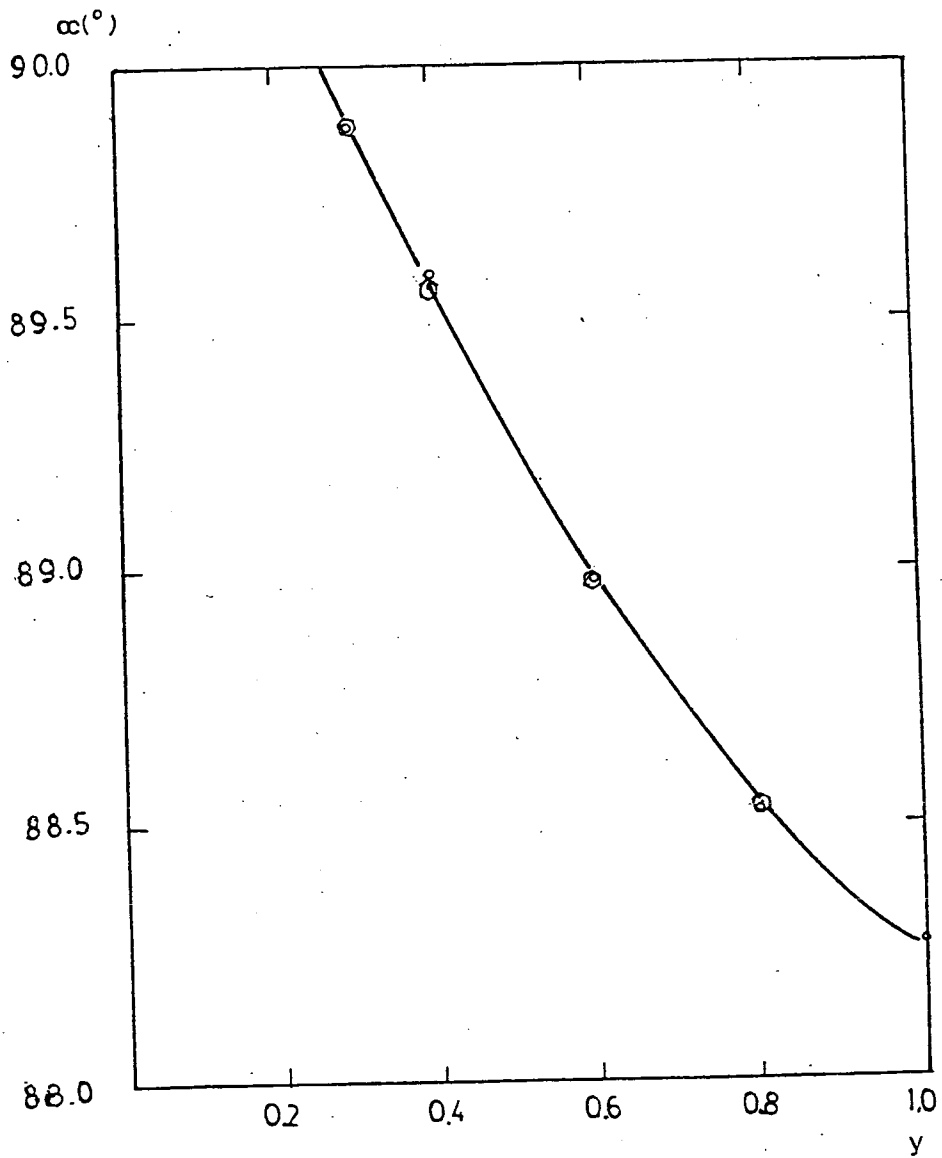
กลุ่มข้อมูล	แลททิสพารามิเตอร์ α	σ	R	y_t
1	$90.7437 - 3.6911y + 1.1957y^2$	0.0513	0.9982	0.217
2	$90.9960 - 4.3018y + 1.5556y^2$	0.0664	0.9975	0.255
3	$91.1736 - 4.7687y + 1.8542y^2$	0.0311	0.9995	0.275
4	$91.0030 - 3.9800y + 1.2462y^2$	0.0047	1.0000	0.276
5	$92.0677 - 6.7651y + 2.9071y^2$	0.1257	0.9980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



รูปที่ 4.9 (ก) การแปรผันของแลททิซพารามิเตอร์ α กับปริมาณ GeTe ที่ $1-x-y = 0$

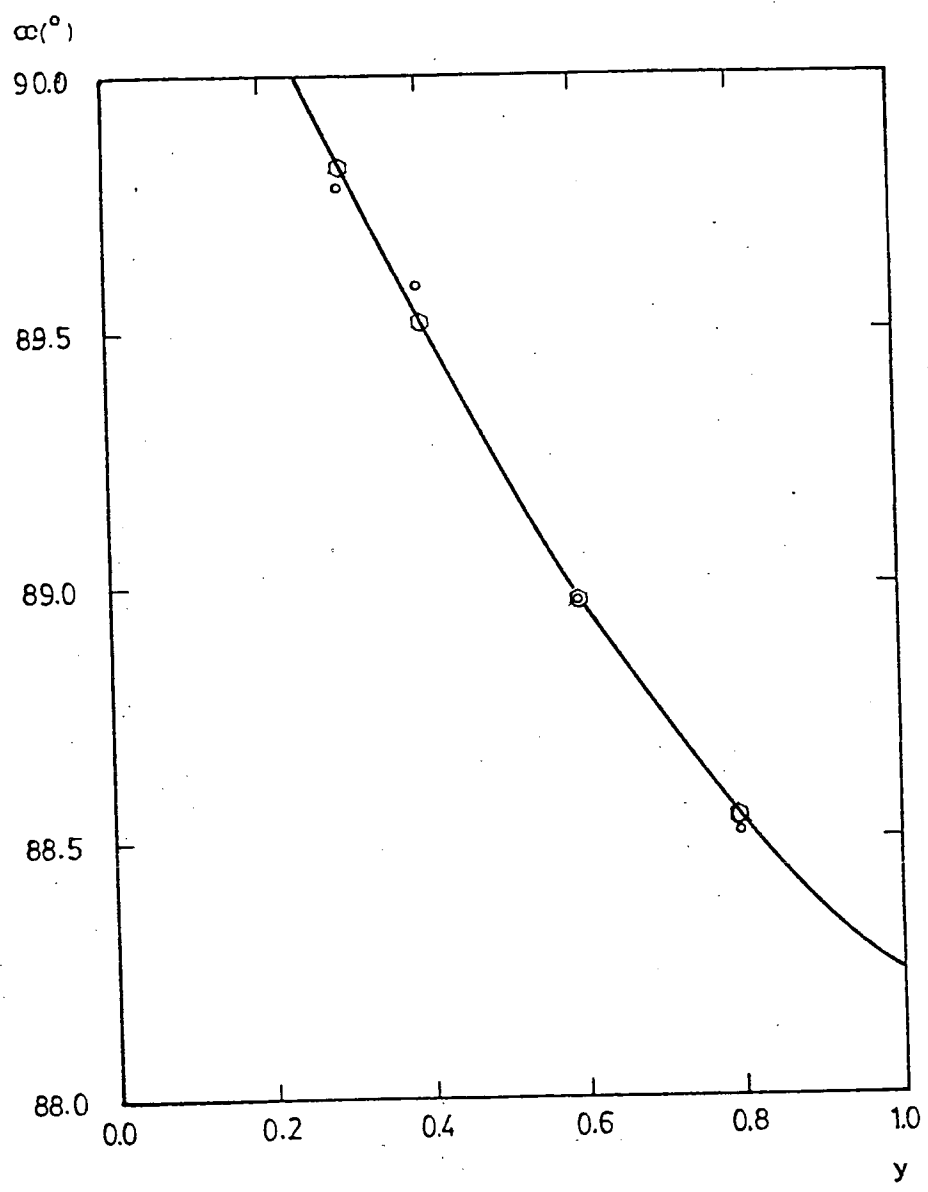
○ จุดซึ่งได้จากการคำนวณ

○ จุดซึ่งได้จากการทดลอง



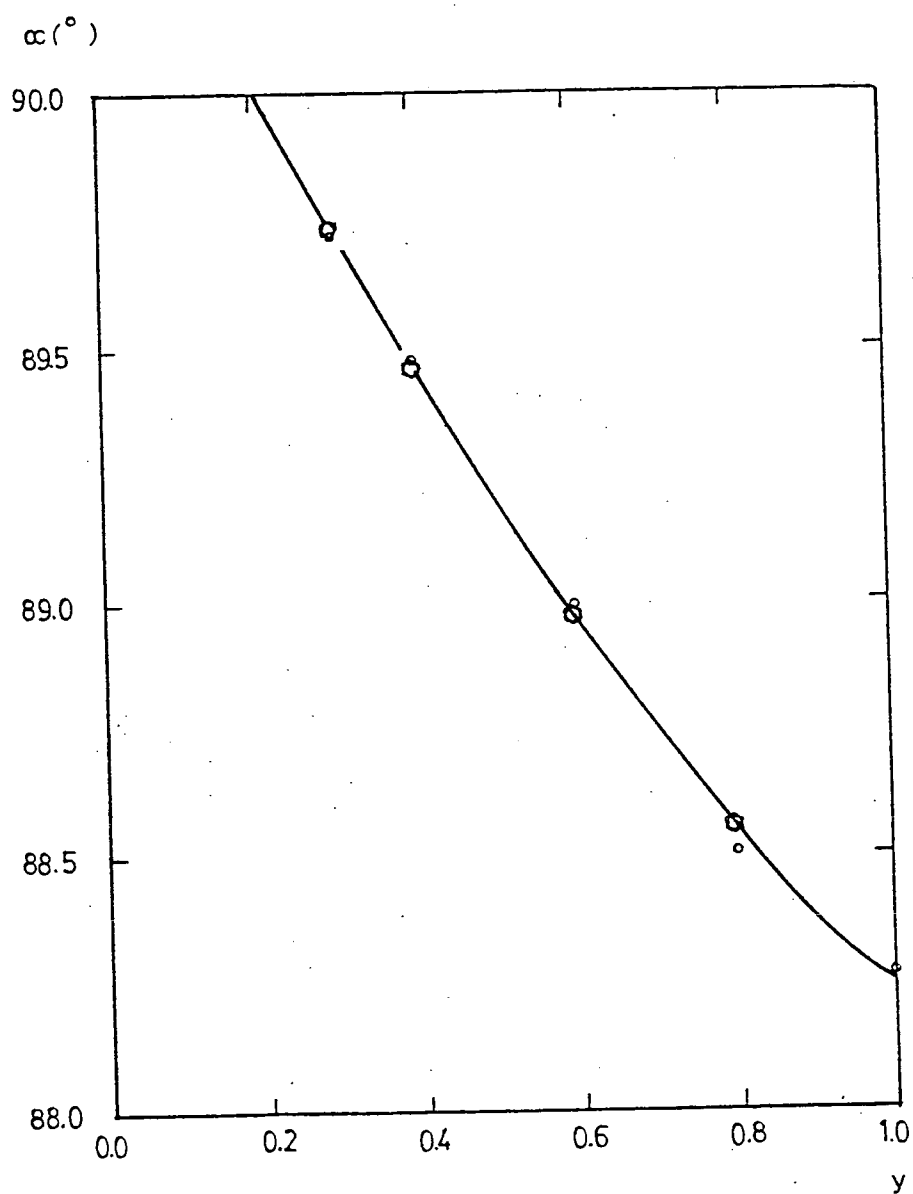
รูปที่ 4.9 (ข) การแปรผันของแลททิส์พารามิเตอร์ α กับปริมาณ GeTe ที่ $1-x-y:x = 1:3$

- จุดซึ่งได้จากการคำนวณ
- จุดซึ่งได้จากการทดลอง



รูปที่ 4.9 (ค) การแปรผันของแลททิซพารามิเตอร์ α กับปริมาณ GeTe ที่ $1-x-y:x = 1:1$

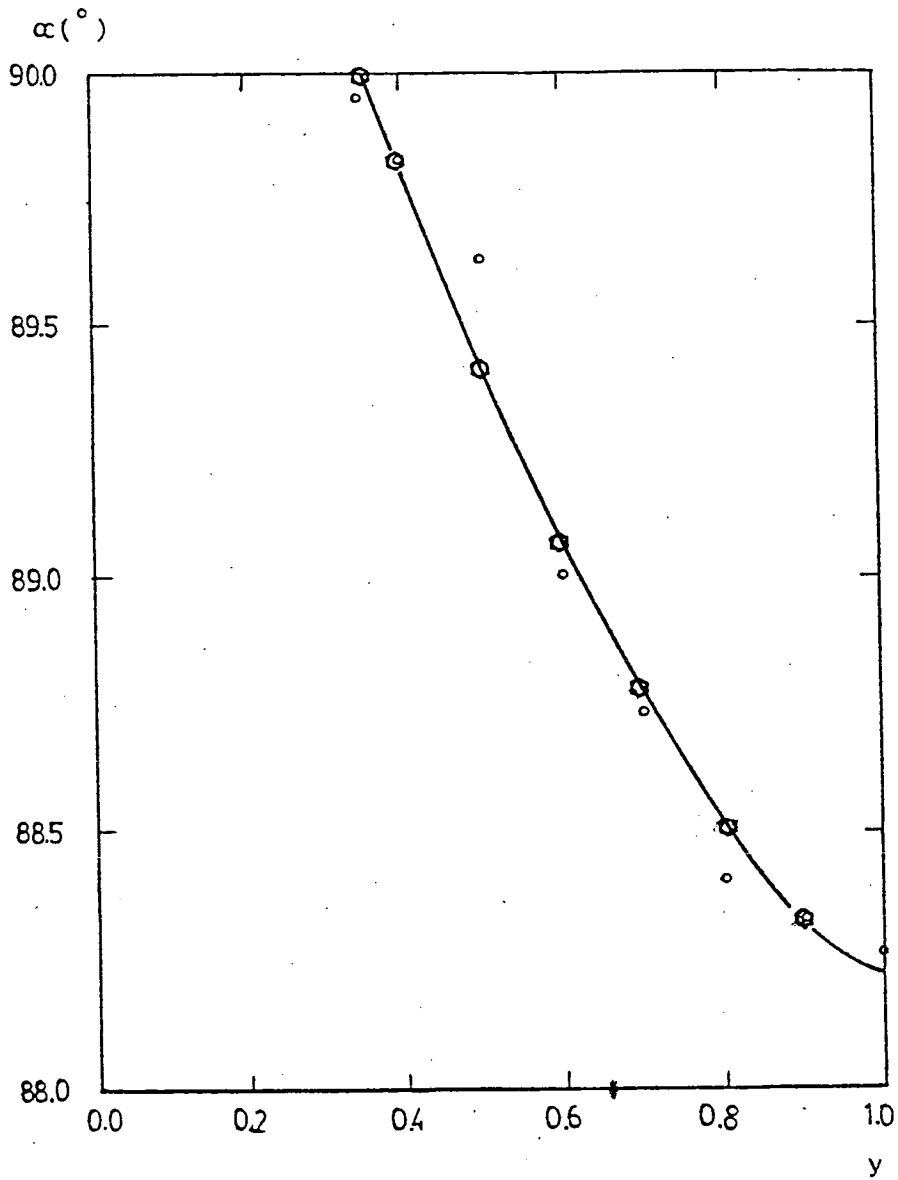
- จุดซึ่งได้จากการคำนวณ
- จุดซึ่งได้จากการทดลอง



รูปที่ 4.9 (จ) การแปรผันของแอสทิลพาราไดเตอร์ α กับปริมาณ GeTe ที่ $1-x-y:x=3:1$

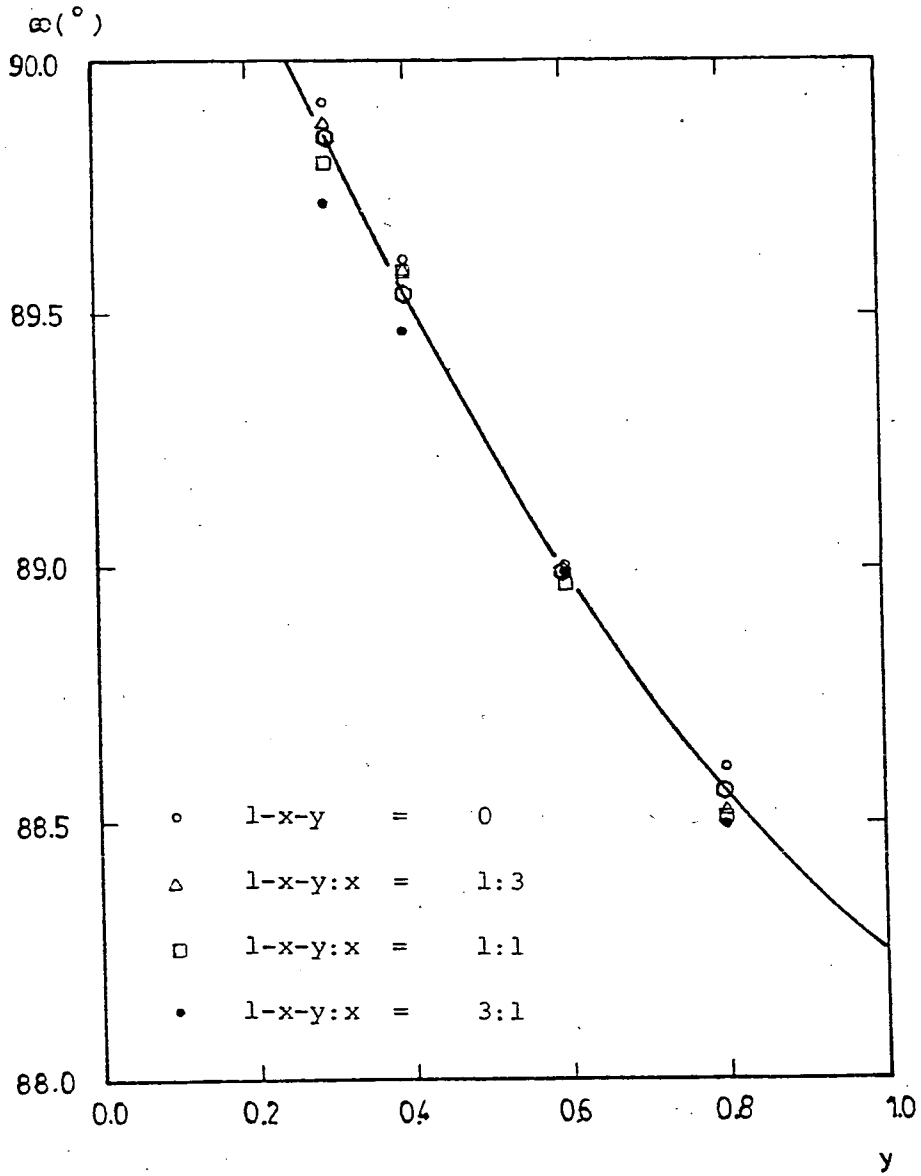
○ จุดซึ่งได้จากการคำนวณ

● จุดซึ่งได้จากการทดลอง



รูปที่ 4.9 (จ) การแปรผันของแลตทิซพารามิเตอร์ α กับปริมาณ GeTe ที่ $x = 0$ ซึ่งคำนวณจากข้อมูลของ วูลเล่ย์และนิโคลิค

- จุดซึ่งได้จากการคำนวณ
- จุดซึ่งได้จากการทดลอง

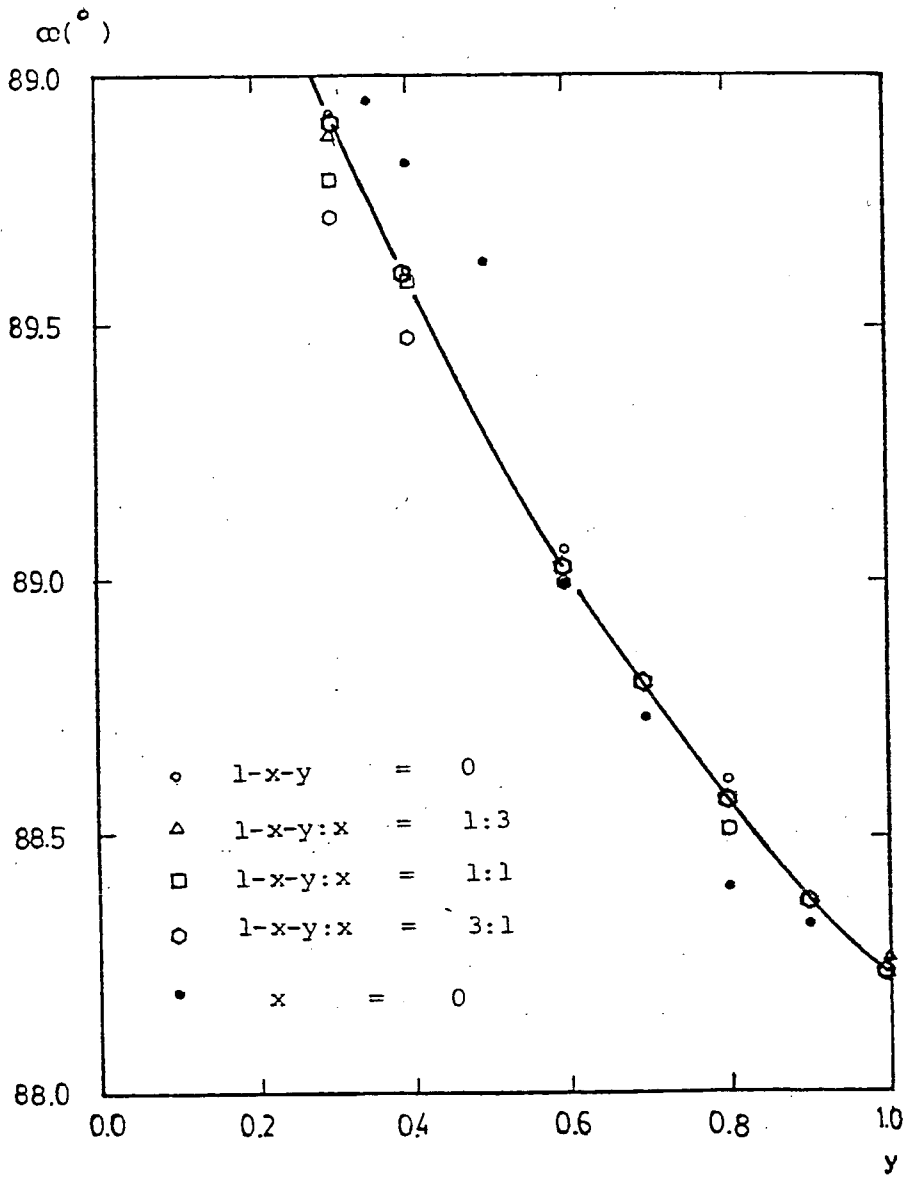


รูปที่ 4.9 (จ) การแปรผันของแลททิส์พารามิเตอร์ α กับปริมาณ GeTe ซึ่งคำนวณจาก

ข้อมูลที่ $1-x-y:x = 3:1, 1:1, 1:3$ และ $1-x-y = 0$

○ จุดซึ่งได้จากการคำนวณ

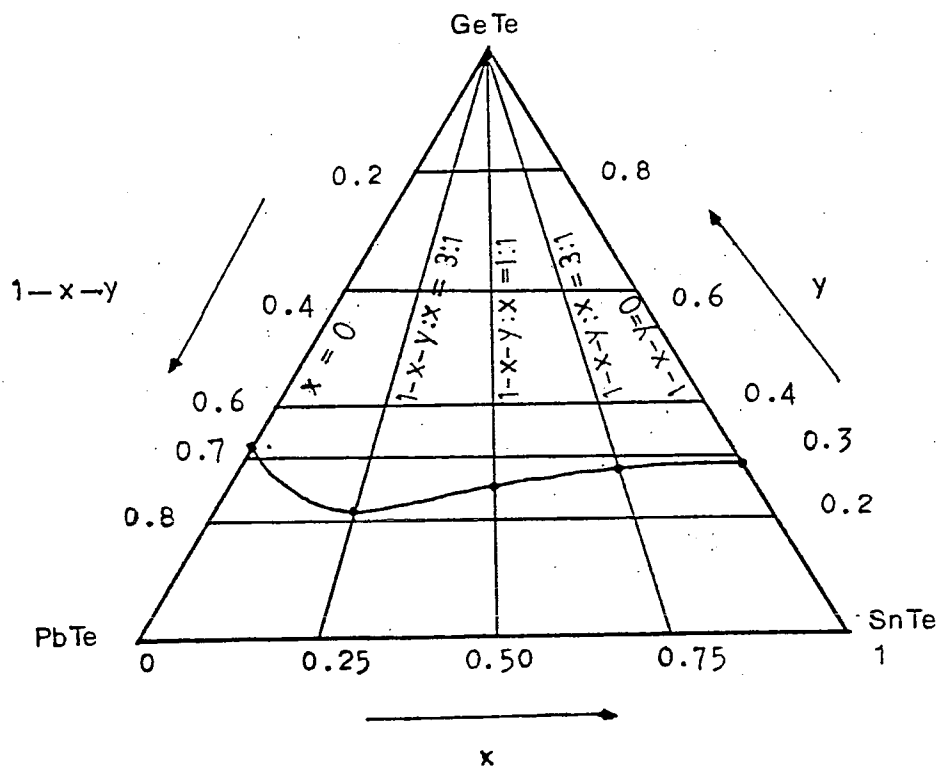
• □ △ • จุดซึ่งได้จากการทดลอง



รูปที่ 4.9 (ข) การแปรผันของแลททิซพารามิเตอร์ α กับปริมาณ GeTe ซึ่งคำนวณจากข้อมูล ที่ $1-x-y:x = 3:1, 1:1, 1:3, 1-x-y = 0$ และจากข้อมูลของ วูลเล่ย์ และ นิโคลิค ทางด้าน $x=0$

- จุดซึ่งได้จากการคำนวณ
- □ △ จุดซึ่งได้จากการทดลอง
- จุดซึ่งได้จากผลของวูลเล่ย์และนิโคลิค

เส้นกราฟ ซึ่งคำนวณจากสมการในตารางที่ 4.6 และกลุ่มของจุดจากการทดลองได้แสดงไว้ในรูปที่ 4.9 และ ถ้านำเอาจุดซึ่งเกิดการเปลี่ยนเฟลล์มาเขียนลงบนแผนภาพแสดงส่วนผสมแล้ว เชื่อมโยงจุดเหล่านี้เข้าด้วยกันจะได้แนว เส้นแสดงส่วนผสมซึ่งเกิดการเปลี่ยนเฟลระหว่างระบบคิวบิตและรอมโบอีตรัล ดังในแผนภาพรูปที่ 4.10



รูปที่ 4.10 แผนภาพแสดงแนวเส้นแบ่งเฟลล์ของโลหะผสม $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$ ที่จุดเหนือห้อง

4.6 การแปรผันของ $\Delta V/V_C$ กับปริมาณ Ge Te ในส่วนผสม

จากค่าของแลททิส์พารามิเตอร์ในตารางที่ 4.3 จะสามารถคำนวณค่า $\Delta V/V_C$ ได้

ดังนี้ ถ้าให้ V_R = ปริมาตรหน่วยเซลล์ของผลึกในระบบรอมโบอีตรัล

V_C = ปริมาตรหน่วยเซลล์ ของผลึกในระบบคิวบิต

$$\frac{\Delta V}{V_C} = \frac{V_C - V_R}{V_C} \tag{4.17}$$

ปริมาณของหน่วย เซลล์ในระบบบรมโอบีตรัล

$$V_R = a^3 (1 - 3\cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)^{1/2} \quad (4.18)$$

ปริมาณของหน่วยเซลล์ในระบบคิวบิก

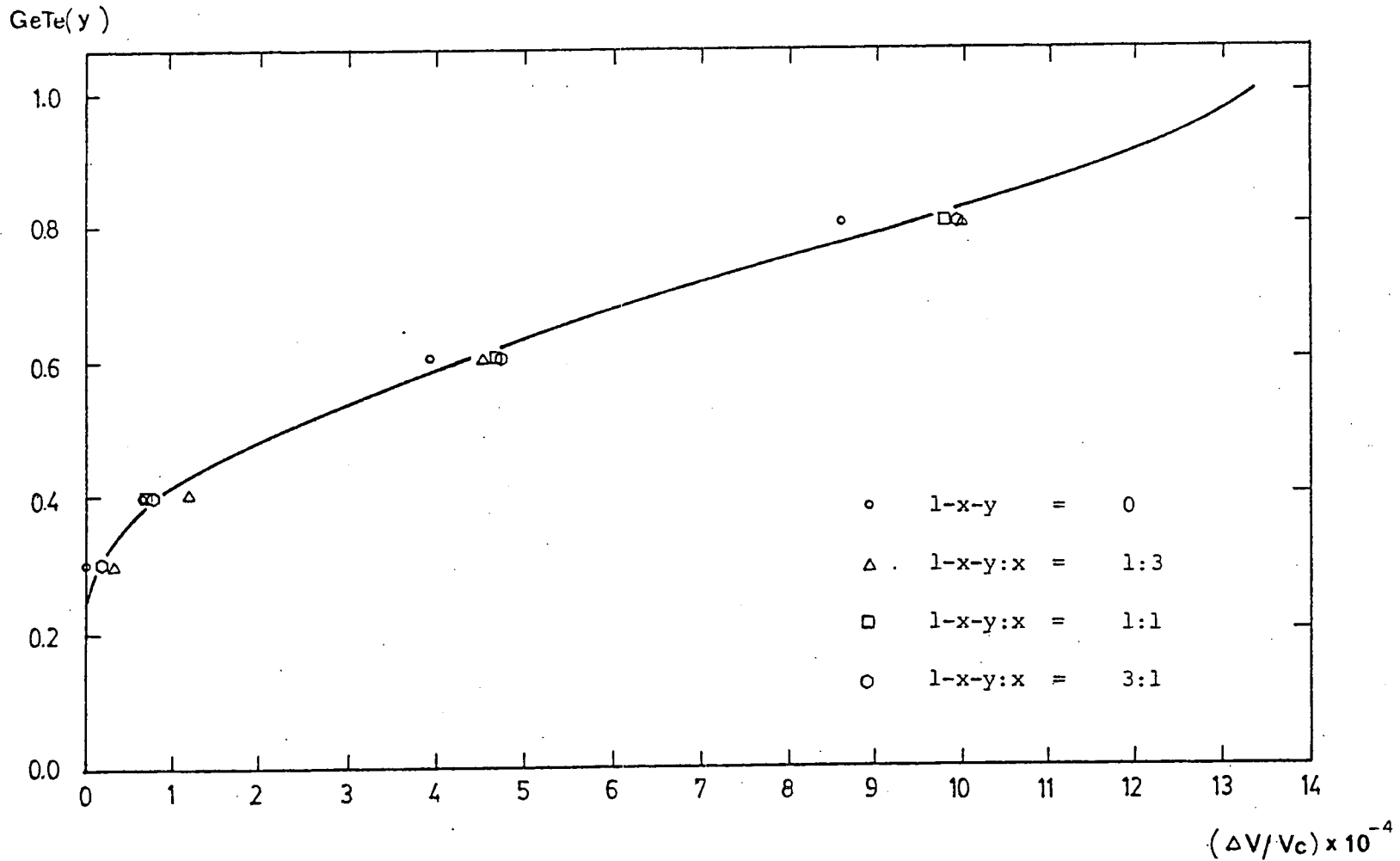
$$V_C = a^3 \quad (4.19)$$

ดังนั้น

$$\frac{\Delta V}{V_C} = \frac{a^3 - a^3 (1 - 3\cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)^{1/2}}{a^3}$$

$$\frac{\Delta V}{V_C} = 1 - (1 - 3\cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)^{1/2} \quad (4.20)$$

ปริมาณ $\frac{\Delta V}{V_C}$ ได้คำนวณโดย ลมการ (4.20) และแสดงไว้ในตารางที่ 4.7 เมื่อเขียนกราฟค่าของ $\frac{\Delta V}{V_C}$ เทียบกับปริมาณ GeTe ในส่วนผสม จะได้กราฟดังรูปที่ 4.11



รูปที่ 4.11 การแปรผันของ $\frac{\Delta V}{V_c}$ กับปริมาณ GeTe ในโลหะผสม $Pb_{1-x-y}Sn_xGe_yTe$

ตารางที่ 4.7

ค่าของ $\frac{\Delta V}{V_c}$ สำหรับโหนดผล้มตามแนว $1-x-y = 0$ และ $1-x-y : x = 1:3$,
 $3:1, 1:1$

ส่วนผล้ม		แลทกีสพารามิเตอร์		$\frac{\Delta V}{V_c}$
x	y	a_r	α	
0.2	0.8	6.0566	88.6163	8.61×10^{-4}
0.4	0.6	6.1256	89.0642	3.96×10^{-4}
0.6	0.4	6.1923	89.6100	6.92×10^{-5}
0.7	0.3	6.2215	89.9220	2.78×10^{-6}
0.8	0.2	6.2607	90.0000	0.00
1.0	0.0	6.3282	90.0000	0.00
0.15	0.8	6.0621	88.5243	9.78×10^{-4}
0.3	0.6	6.1425	88.9818	4.68×10^{-4}
0.45	0.4	6.2154	89.5942	7.48×10^{-5}
0.525	0.3	6.2540	89.8835	6.19×10^{-6}
0.6	0.2	6.2876	90.0000	0.00
0.75	0.0	6.3571	90.0000	0.00
0.05	0.8	6.0847	88.5029	1.00×10^{-3}
0.1	0.6	6.1844	88.9945	4.57×10^{-4}
0.15	0.4	6.2685	89.4778	1.23×10^{-4}
0.175	0.3	6.3006	89.7230	3.49×10^{-5}
0.2	0.2	6.3450	90.0000	0.00
0.25	0.0	6.4274	90.0000	0.00
0.0	1.0	5.9835	88.2689	1.34×10^{-3}
0.1	0.8	6.0740	88.5113	9.95×10^{-4}
0.2	0.6	6.1492	88.9732	4.76×10^{-4}
0.3	0.4	6.2346	89.5933	7.52×10^{-5}
0.35	0.4	6.2831	89.7988	1.84×10^{-5}
0.4	0.2	6.3154	90.0000	0.00
0.5	0.0	6.3939	90.0000	0.00