บทที่ 5

สรุปและวิจารณ์ผลการทดลอง

จากผลการทดลองที่ผ่านมาพบว่า เมื่อเตรียมผลึกของสารประกอบ $Cu_2In_4Se_7$ โดยใช้สัดส่วนเริ่มต้น Cu:In:Se เป็น 2:4:7 เมื่อทำการปลูกผลึกตามแนวนอนภายใต้เกรเดียนของอุณหภูมิ พบว่าเนื้อสารที่ได้ไม่สม่ำเสมอตามแนวเกรเดียนของอุณหภูมิ นั่นก็คือเกิดเกรเดียนของสัดส่วนของธาตุที่เป็นองค์ประกอบขึ้น โดยอะตอมของทองแดงชอบที่จะอยู่ในด้านที่อุณหภูมิต่ำกว่าหรือด้านที่ถูกทำให้เย็นก่อนเสมอ บริเวณนี้เนื้อสารจะมีลักษณะเป็นก้อนแข็งสีเงินมันซึ่งเป็นเฟสของสาร $Cu_2In_4Se_7$ อีกด้านหนึ่งซึ่งเป็นด้านที่อุณหภูมิสูงกว่าหรือด้านที่ถูกทำให้เย็นตัวทีหลัง ซึ่งมีปริมาณอะตอมทองแดงอยู่น้อยเนื้อสารจะเป็นชั้นๆ สีเงิน ซึ่งเป็นอีกเฟสของสารที่มีโครงสร้างแบบเฮกซะโกนอล เมื่อเตรียมสารประกอบ $CuInSe_2$ โดยใช้ส่วนประกอบเริ่มต้น Cu:In:Se เป็น 6:6:13 (มีอะตอม Se มากกว่าปกติเล็กน้อย) พบว่าการปลูกผลึกแบบนี้ไม่มีผลต่อสัดส่วนตลอดแนวยาวของสารตัวอย่างในหลอดแก้ว

เมื่อนำสารตัวอย่างที่ได้ไปวัดสมบัติทางไฟฟ้าโดยการทดลองปรากฏการณ์ฮอลล์ พบว่ามีความปรวนแปรของศักย์ไฟฟ้าระหว่างขอบของแผ่นสารตัวอย่าง เป็นได้ทั้งบวกและลบ จึงไม่สามารถสรุปชนิดของพาหะข้างมากได้ ทั้งนี้อาจเป็นผลเนื่องมาจากมีพาหะชนิดพีและเอ็นมากพอๆ กัน ซึ่งอาจเป็นผลจากความบกพร่องบางอย่างในเนื้อสาร เช่น ช่องว่าง และการที่อะตอมอยู่ผิดที่เป็นต้น

เมื่อนำสารตัวอย่างไปวัดหาค่าช่องว่างแถบพลังงานโดยการทดลองการดูดกลืนแสง พบว่าค่าขอบการดูดกลืนแสงที่วิเคราะห์ได้ไม่ใช่ค่าช่องว่างแถบพลังงาน ทั้งนี้อาจเนื่องมากองค์ประกอบของเนื้อสารมีความปรวนแปรตามตำแหน่ง และน่าจะมีความบกพร่องอันเกิดจากความปรวนแปรขององค์ประกอบนี้ด้วย ส่งผลให้เกิดความปรวนแปรของแถบพลังงานขึ้น การย้ายระดับพลังงานระหว่างสถานะของแถบพลังงานที่ปรวนแปรตามตำแหน่งในเนื้อสาร ทำให้ค่าพลังงานที่ขอบการดูดกลืนแสงของสารประกอบ $Cu_2In_4Se_7$ นี้เป็นเพียงค่าเฉลี่ยของสถานะที่ปรวนแปรในช่องว่างแถบพลังงาน ซึ่งน้อยกว่าค่าช่องว่างแถบพลังงานที่แท้จริง

เมื่อพิจารณาผลจากการทดลองการเลี้ยงเบนของรังสีเอกซ์พบว่า รูปแบบการเลี้ยวเบนของตัวอย่างของสารประกอบ $Cu_2In_4Se_7$ และ $CuIn_3Se_5$ [13] เหมือนกัน นอกจากนี้เมื่อพิจารณาจากผลการวัดสัดส่วนของธาตุองค์ประกอบด้วยวิธีอีดีเอสพบว่าสารตัวอย่างอื่นๆ พบว่าสารประกอบที่มีสัดส่วนแต่งต่างจาก $Cu_2In_4Se_7$ เช่น 2:2.64:5.49 และ 2:3.72:7.32 ก็มีรูปแบบการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ในลักษณะเดียวกันนี้ จึงสรุปได้ว่าสารเหล่าเป็นสารประกอบในเฟสของ

$Cu_2In_4Se_7$ เช่นเดียวกัน แสดงว่าเฟสของสารประกอบ $Cu_2In_4Se_7$ สามารถแปรเปลี่ยนสัดส่วนของธาตุองค์ประกอบได้กว้างมาก

เมื่อนำผลการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ของสารตัวอย่างไปวิเคราะห์โดยใช้วิธีปรับแต่งพารามิเตอร์แบบเรียทเวลด์โดยใช้โปรแกรมเรียทิกา แล้วพิจารณาว่าค่า χ^2 ต่ำสุดที่โครงสร้างแบบใดอย่างชัดเจนก็จะถือว่า โครงสร้างนั้นน่าจะเป็นโครงสร้างที่ดีที่สุด

เริ่มแรกทดสอบอัตราส่วนความเข้มรังสีเอกซ์ที่น่าเชื่อถือ โดยใช้รูปแบบการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ของซิลิกอนในการวิเคราะห์ พบว่าสัดส่วนความเข้มรังสีเอกซ์ความยาวคลื่น λ_2 ต่อความเข้มรังสีเอกซ์ความยาวคลื่น λ_1 ที่ดีที่สุดคือ 0.45

เมื่อนำรูปแบบการเลี้ยวเบนของสารประกอบ $CuInSe_2$ ซึ่งมีโครงสร้างแบบชาลโคไพไรท์ (chalcopyrite) ซึ่งมีสเปซกรุ๊ปเป็น $I\bar{4}2d$ มาวิเคราะห์พบว่า อะตอมของ Cu, In และ Se มีการประจำตำแหน่งที่ค่อนข้างเต็ม มีช่องว่างในผลึกเกิดขึ้นได้เล็กน้อย ส่วนค่าคงที่ผลึกของสารที่ได้ คือ a, c และ c/a สอดคล้องกับงานวิจัยของคำเผย คำวงส์ [14]

เมื่อนำรูปแบบการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ของสารประกอบ $Cu_2In_4Se_7$ มีวิเคราะห์เพื่อหาโครงที่เหมาะสมที่สุดพบว่า โครงสร้างที่เหมาะสมที่สุดคือพีชาลโคไพไรท์ (P-chalcopyrite) ซึ่งมีสเปซกรุ๊ปเป็น $P\bar{4}2c$ และยังพบว่าช่องมักจะแทนที่อะตอม In ที่ไซท์ $2b$ และ $2f$ เป็นส่วนใหญ่ โดยอะตอม Cu ที่ไซท์ $2e$ อะตอม In ที่ไซท์ $2d$ และอะตอม Se ที่ไซท์ $8n$ มีการประจำตำแหน่งที่ค่อนข้างเต็ม จากการที่โครงสร้างของสารไม่เปลี่ยนโดยที่สัดส่วนอะตอมของธาตุองค์ประกอบเปลี่ยน ก็เนื่องจากอะตอม In ที่เกินมาจะบรรจุลงในไซท์ $2b$ และ $2f$ [7] แต่ถ้าหากอะตอม In น้อย ตำแหน่งของอะตอม In ที่ไซท์ $2b$ และ $2f$ จะถูกแทนที่ด้วยช่องว่าง แต่ถ้าอะตอม In มีมากเกินกว่าจำนวนตำแหน่งที่จะอยู่ได้ โครงสร้างของสารประกอบก็เปลี่ยนเป็นโครงสร้างแบบชั้น (layer structure) ซึ่งมีสมมาตรของผลึกมากกว่าสเปซกรุ๊ป P3 [4]

เมื่อพิจารณาค่าระยะทางและมุมระหว่างอะตอมจากผลการปรับแต่งพารามิเตอร์ พบว่าระยะทางระหว่างอะตอม Si ที่อยู่ใกล้กันจะเท่ากันหมด และมุมที่เกิดจากของอะตอม Si ที่อยู่ใกล้กันจะมีมุมค่า 109.47 องศาเหมือนกันหมด ซึ่งแสดงให้เห็นถึงรูปร่างพันธะระหว่างอะตอม Si ซึ่งมีโครงผลึกแบบเพชรเป็นทรงสี่หน้า (tetrahedral) ส่วนระยะทางและมุมระหว่างอะตอมที่อยู่ใกล้กันของสารประกอบ $CuInSe_2$ และ $Cu_2In_4Se_7$ พบว่าระยะทางระหว่างอะตอมต่างชนิดกันจะยาวไม่เท่ากัน และค่ามุมระหว่างอะตอมจะมีค่าแตกต่างไปจาก 109.47 องศาไม่มากกว่าก็น้อยกว่า แสดงในเห็นถึงความยาวพันธะอันเนื่องมาจากแรงระหว่างพันธะที่ไม่เท่ากันระหว่างอะตอมต่างชนิดในสารประกอบเชิงสาม

ข้อเสนอแนะ

1. เนื่องจากการทดลองการดูดกลืนแสงจะได้เพียงค่าพลังงานดูดกลืนแสงเท่านั้น ซึ่งถ้าในช่องว่างแถบพลังงานมีสถานะหางของแถบพลังงานขึ้นมา ก็จะไม่สามารถหาช่องว่างแถบพลังงานที่แท้จริงได้ เพื่อให้ได้ข้อมูลของช่องว่างแถบพลังงานที่ชัดเจนยิ่งขึ้น ควรจะทำการทดลองโฟโตลูมิเนสเซนต์ ซึ่งจะให้ข้อมูลของสถานะต่างๆ ในช่องว่างแถบพลังงาน

2. ถ้าปลูกผลึกโดยวางหลอดบรรจุสารเริ่มต้นในบริเวณที่ปราศจากเกรเดียนของอุณหภูมิ สัดส่วนของสารประกอบ $Cu_2In_4Se_7$ ที่ได้ก็น่าจะสม่ำเสมอและใกล้เคียงกับค่าอัตราส่วนเริ่มต้น Cu:In:Se เป็น 2:4:7

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย