การศึกษาโครงสร้างของผลึกสารกึ่งตัวนำแบบชาลโคไพไรท์ของ $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$ โดยการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

นายสุ่น จ่างประยูร

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
ภาควิชาฟิสิกส์
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
พ.ศ. 2531

ISBN 974-568-819-3

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

013934
1163000923

CRYSTAL STRUCTURE STUDY OF CHALCOPYRITE-TYPE SEMICONDUCTORS OF $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ AND $CuInTe_2$ BY X-RAY DIFFRACTION

Mr. Soon Changprayoon

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Sciences
Department of Physics
Graduate School
Chulalongkorn university
1988

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การศึกษาโครงสร้างของผลึกสารกึ่งตัวนำแบบชาลโคไพไรท์ ของ $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$ โดยการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์
โดย	นายสุ่น จ่างประยูร
ภาควิชา	ฟิสิกส์
อาจารย์ที่ปรึกษา	รองศาสตราจารย์สุพนิจ พราหมทัต

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้นับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญามหาบัณฑิต

..... คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย
(ศาสตราจารย์ ดร.ถาวร วัชราภัย)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ
(รองศาสตราจารย์ ดร.พัฒนะ ภาวะนันท์)

..... อาจารย์ที่ปรึกษา
(รองศาสตราจารย์สุพนิจ พราหมทัต)

..... กรรมการ
(ศาสตราจารย์ ดร.วิรุฬห์ สายคณิต)

..... กรรมการ
(รองศาสตราจารย์ ดร.ศรีนวล ถนอมกุล)

..... กรรมการ
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ศจี วงศ์ไชยบูรณ์)

ศูนย์วิทยทรัพยากร จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สุ่น จ่างประยูร : การศึกษาโครงสร้างของผลึกสารกึ่งตัวนำแบบชาลโคไพไรท์ของ $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$ โดยการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ (CRYSTAL STRUCTURE STUDY OF CHALCOPYRITE-TYPE SEMICONDUCTORS OF $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ AND $CuInTe_2$ BY X-RAY DIFFRACTION) อ.ที่ปรึกษา : รศ.สุพจน พราหมทัต, 189 หน้า.

สารกึ่งตัวนำที่ได้จากการนำเอาธาตุ 3 ธาตุในหมู่ I, III และ VI ในตารางธาตุมาผสมกัน จะได้สารกึ่งตัวนำในกลุ่ม $A^{I}B^{III}C_2^{VI}$ ในงานวิจัยนี้ได้ศึกษาโครงสร้างผลึกของ $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$ มีโครงสร้างแบบชาลโคไพไรท์ (chalcopyrite structure) จัดอยู่ในระบบเตตระโกนัลหมู่สมมาตรสามมิติ $I\bar{4}2d$ (No. 122) มีสี่หน่วยสูตรต่อหน่วยเซลล์ ความหนาแน่นจากการคำนวณ 6.007, 5.785, 6.015 และ 6.027 กรัม/(ซม.)^3 ตามลำดับ

การปรับค่าคงที่แลตทิซของสารทั้งสี่โดยวิธีกำลังสองน้อยที่สุด ใช้ข้อมูลการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกผงจากภาพถ่ายด้วยกล้องกีเนียร์-เฮกก์ โครงสร้างผลึกของสารทั้งหมดปรับโดยวิธีกำลังสองน้อยที่สุดแบบเมตริกเต็มใช้ข้อมูล 3 ชุด จากกล้องกีเนียร์-เฮกก์ จากดิฟแฟรกโตมิเตอร์ผลึกผงและจากกล้องไวซ์เซนเบอร์ก ข้อมูลความเข้มผลึกผงไม่ได้ทำการแก้การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ ส่วนข้อมูลผลึกเดี่ยวจากกล้องไวซ์เซนเบอร์ก ได้ทำการแก้การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์โดยวิธีกรีดเกาซ์เซียนเมื่อปรับโครงสร้างผลึกแล้วได้ผลดังนี้

ชื่อสาร	ค่าคงที่แลตทิซ (Å)	พารามิเตอร์ X ของอะตอม C ที่ตำแหน่ง 8d: $X, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$					
		ข้อมูลกีเนียร์-เฮกก์		ข้อมูลดิฟแฟรกโตมิเตอร์		ข้อมูลไวซ์เซนเบอร์ก	
		X_C	จำนวนจุดสะท้อน	X_C	จำนวนจุดสะท้อน	X_C	จำนวนจุดสะท้อน
$AgGaTe_2$	a= 6.3184(2)	0.273(2)	24	0.261(9)	31	0.2771(5)	130
	c=11.9841(7)	R=0.077		R=0.119		R=0.106	
$AgInSe_2$	a= 6.1087(3)	0.294(5)	17	0.23(2)	20	0.284(1)	106
	c=11.7063(6)	R=0.083		R=0.140		R=0.104	
$AgInTe_2$	a= 6.4571(6)	0.284(5)	16	0.312(7)	20	-	-
	c=12.652(3)	R=0.072		R=0.146			
$CuInTe_2$	a= 6.2078(6)	0.221(9)	14	0.226(4)	19	-	-
	c=12.395(1)	R=0.202		R=0.133			

(ผลึกเดี่ยวของ $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$ เลือกหาไม่พบเลย)

พารามิเตอร์ตำแหน่ง X_C ที่ได้จากข้อมูลผลึกเดี่ยวและผลึกผงของสาร $AgGaTe_2$ ให้ค่าใกล้เคียงกัน แต่สำหรับสาร $AgInSe_2$ ให้ผลแตกต่างกัน เมื่อเปรียบเทียบค่าพารามิเตอร์ X_C ที่ได้จากการทดลองกับที่ได้จากการคำนวณทางทฤษฎี CTB บวกเงื่อนไข $\eta=\eta_{expt}$ พบว่าสาร $CuInTe_2$ จะให้ค่า X_C ใกล้เคียงกันมาก ส่วนสาร $AgGaTe_2$ จะให้ค่า X_C น้อยกว่าทางทฤษฎี สำหรับสาร $AgInSe_2$ และ $AgInTe_2$ จะให้ค่า X_C มากกว่าทางทฤษฎี

ภาควิชา ฟิสิกส์ ลายมือชื่อนิสิต นายสุน จางประยูร

สาขาวิชา ฟิสิกส์

ปีการศึกษา 2530 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา สุพจน พราหมทัต

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

SOON CHANGPRAYOON : CRYSTAL STRUCTURE STUDY OF CHALCOPYRITE-TYPE SEMICONDUCTORS OF $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ and $CuInTe_2$ by X-RAY DIFFRACTION. TESIS ADVISOR : ASSO. PROF. SUPANICH PRAMATUS, Ed.D. 189 PP.

Semiconductor compounds composed of three elements in groups I, III and VI of the periodic table are called $A^{I}B^{III}C_2^{VI}$ semiconductors. In this investigation the crystal structures of $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ and $CuInTe_2$ are studied. They have chalcopyrite structure which belongs to the tetragonal system. The space group is $I\bar{4}2d$ (No. 122). There are four formula units per unit cell. The calculated densities are 6.007, 5.785, 6.015 and 6.027 $gm/(cm)^3$ respectively.

The lattice constants of these four compounds were refined by least-squares method using X-ray powder diffraction data obtained from Guinier-Hägg photographs. The crystal structures have been refined by the full-matrix least-squares method using three sets of data from a Guinier-Hägg camera, a powder diffractometer and a Weissenberg camera. No absorption correction were made for powder intensity data. For the single crystal Weissenberg data, absorption correction using the Gaussian grid method was applied. The results of structure refinements are shown below:

compounds	lattice constants (Å)	X parameter of the C-atoms at position 8d: $X,\frac{1}{4},\frac{1}{8}$					
		Guinier-Hägg data		Diffractometer data		Weissenberg data	
		X_C	No. of refl.	X_C	No. of refl.	X_C	No. of refl.
$AgGaTe_2$	a= 6.3184(2)	0.273(2)	24	0.261(9)	31	0.2771(5)	130
	c=11.9841(7)	R=0.077		R=0.119		R=0.106	
$AgInSe_2$	a= 6.1087(3)	0.294(5)	17	0.23(2)	20	0.284(1)	106
	c=11.7063(6)	R=0.083		R=0.140		R=0.104	
$AgInTe_2$	a= 6.4571(6)	0.284(5)	16	0.312(7)	20	-	-
	c=12.652(3)	R=0.072		R=0.146			
$CuInTe_2$	a= 6.2078(6)	0.221(9)	14	0.226(4)	19	-	-
	c=12.395(1)	R=0.202		R=0.133			

(No single crystals of $AgInTe_2$ and $CuInTe_2$ were found.)

The X_C position parameters of $AgGaTe_2$ obtained from single crystal data and powder data are in good agreement, but those of $AgInSe_2$ are significantly different. By comparison of the X_C parameters from the experiments with ones predicted from the CTB plus $\eta=\eta_{expt}$ theory, it was found that X_C parameters of $CuInTe_2$ give good agreement. For $AgGaTe_2$ the experimental X_C parameter is smaller than the theoretical value. For $AgInSe_2$ and $AgInTe_2$ the X_C parameters from the experiment are greater than those from the theory.

ภาควิชา ฟิสิกส์ ลายมือชื่อนิสิต .....

สาขาวิชา ฟิสิกส์

ปีการศึกษา 2530 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลงได้ด้วยความกรุณาและความช่วยเหลือตลอดจนการให้คำแนะนำต่าง ๆ จากอาจารย์และผู้เกี่ยวข้องดังต่อไปนี้

รองศาสตราจารย์สุพนิจ พราหมทัศ ซึ่งเป็นอาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ผู้ให้ความรู้ ให้คำแนะนำและควบคุมการศึกษาวิจัยอย่างใกล้ชิดมาโดยตลอด

รองศาสตราจารย์ ดร.พัฒนะ ภาะนันท์ ซึ่งเป็นผู้ให้ความรู้ทางด้านการศึกษาผลึกโดยวิธีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ศจี วงศ์ไชยบูรณ์ ซึ่งเป็นผู้ให้ความรู้ทางด้านการศึกษาผลึกโดยวิธีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

ศาสตราจารย์ ดร.วิรุฬห์ สายคณิต และ ผู้ช่วยศาสตราจารย์สมพงศ์ ฉัตราภรณ์ ซึ่งเป็นผู้ควบคุมห้องปฏิบัติการสารกึ่งตัวนำ ที่ได้ให้สารกึ่งตัวนำมาใช้ในการศึกษาวิจัยครั้งนี้

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.วสันต์ พงศาพิชน์ หัวหน้าภาควิชาธรณีวิทยา ได้กรุณาให้ความสะดวกในการใช้เครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์

รองศาสตราจารย์สมชาย ทยานยง ผู้อำนวยการสถาบันคอมพิวเตอร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย รวมทั้งเจ้าหน้าที่ของสถาบันที่ได้ให้ความสะดวกในการใช้เครื่องคอมพิวเตอร์

คุณประเสริฐ เชียวพิมพา เจ้าหน้าที่ประจำเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์ ผู้ให้คำแนะนำในการใช้เครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์เป็นอย่างดี

จึงขอขอบพระคุณมา ณ ที่นี้

สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อภาษาไทย ..... ฆ

บทคัดย่อภาษาอังกฤษ ..... ง

กิตติกรรมประกาศ ..... จ

รายการตารางประกอบ ..... ญ

รายการรูปประกอบ ..... ฒ

บทที่

1 บทนำ 1

2 ระบบผลึกและโครงสร้างของผลึกแบบซาลโคไพไรท์ 9

2.1 ระบบผลึกและแลตทิซของบราเวส์ 9

2.2 พันธะ, ความยาวพันธะและมุมพันธะ 11

2.3 รัศมีของอะตอมหรือไอออนและรัศมีโคเวเลนต์ 17

2.4 โครงสร้างของผลึกแบบซาลโคไพไรท์ 19

2.5 การเลื่อนแบบเตตระโกนัลของโครงสร้างแบบซาลโคไพไรท์ 22

3 การหาค่าคงที่แลตทิซโดยวิธีเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ 32

3.1 ทฤษฎีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ 32

3.1.1 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึก 33

3.1.2 เงื่อนไขของลาวเอ 35

3.1.3 กฎของแบรกก์ 38

3.1.4 แลตทิซส่วนกลับ 39

3.1.5 การหาค่าคงที่แลตทิซในระบบเตตระโกนัล. 42

3.1.6 ความสัมพันธ์ระหว่างแลตทิซส่วนกลับ กฎของแบรกก์และเงื่อนไขของลาวเอ ... 43

หน้า

3.2 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผงในกล้องกีเนียร์ - เฮกก์ 46
3.2.1 ลักษณะและหลักการทำงานของกล้องกีเนียร์ - เฮกก์ 46
3.2.2 การหาค่าคงที่แลตทิซจากภาพถ่ายผลึกผงโดยกล้องกีเนียร์ - เฮกก์ 49
3.2.2.1 การวัดฟิล์มกีเนียร์ - เฮกก์โดยใช้เครื่องวัดที่มีเวอร์เนียร์ 50
3.2.2.2 การวัดฟิล์มกีเนียร์ - เฮกก์โดยใช้ระบบฟิล์มสแกนเนอร์ . 52
3.3 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผงในเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์ 56
3.3.1 ลักษณะและหลักการทำงานของเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์ 56
3.3.2 การหาค่าคงที่แลตทิซจากข้อมูลรูปกราฟที่ได้จากเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์ 59
3.4 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกเดี่ยวในกล้องไวซ์เซนเบอร์ก 59
3.4.1 ลักษณะและหลักการทำงานของกล้องไวซ์เซนเบอร์ก 59
3.4.2 การถ่ายภาพแบบโรเทชันและการคำนวณหาค่าคงที่แลตทิซ 61
3.4.3 การถ่ายภาพแบบไวซ์เซนเบอร์กและการคำนวณหาค่าคงที่แลตทิซ 63
4 วิธีการทดลองและผลการทดลอง 66
4.1 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผงในกล้องกีเนียร์ - เฮกก์ 66

หน้า

4.1.2 การถ่ายภาพและรูปแบบการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของภาพถ่าย 67
4.1.3 ผลการคำนวณหาค่าคงที่แลตทิซจากกล้องกีเนียร์ - เฮกก์ 67
4.2 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผงในเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์ 79
4.2.1 การเตรียมสารเพื่อถ่ายภาพในเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์ 79
4.2.2 การถ่ายบันทึกข้อมูลการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ในเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์แบบผลึกผง .. 80
4.3 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกเดี่ยว 81
4.3.1 การเลือกผลึกเดี่ยวและติดผลึกบนหัวโกนิโอมิเตอร์ 81
4.3.2 การปรับแกนผลึกให้เป็นแกนหมุน 91
4.3.3 การถ่ายภาพออสซิลเลชัน, โรเทชันและไวซ์เซนเบอร์ก 95
4.3.4 ผลการคำนวณหาค่าคงที่แลตทิซจากกล้องไวซ์เซนเบอร์ก 106
4.4 การหาโครงสร้างของผลึก 109
4.4.1 การหาค่าความหนาแน่น, จำนวนหน่วยสูตรในหนึ่งหน่วยเซลล์และสัมประสิทธิ์การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์เชิงเส้นของสาร 109
4.4.2 การหาหมู่สมมาตรสามมิติ 112
4.4.3 การรวบรวมข้อมูลความเข้ม 115
4.4.4 การคำนวณแอมพลิจูดแฟกเตอร์โครงสร้าง. 118
4.4.5 การคำนวณหาตำแหน่งอะตอม 126
4.4.6 การปรับโครงสร้าง 143

หน้า

5 สรุปและวิจารณ์ผลการทดลอง 166
เอกสารอ้างอิง 177
ภาคผนวก ก. 182
ภาคผนวก ข. 187
ภาคผนวก ค. 188
ประวัติผู้เขียน 189

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

รายการตารางประกอบ

ตารางที่		หน้า
1.1	แสดงตารางธาตุของธาตุต่าง ๆ	3
2.1	ระบบผลึก 7 ระบบและ 14 แลตทิซของบราเวส	10
2.2	เปรียบเทียบค่ารัศมีของแซนนอน - พรีวิทท์สำหรับพิกัดแบบสี่ทบกับรัศมีโคเวเลนต์ของโครงสร้างแบบเชิงสี่ ที่คำนวณโดยวิธีของพอลิงและที่คำนวณโดย แวน เวคซ์เทนและฟิลลิปส์ ...	19
2.3	ข้อมูลเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกผงซาลโคไพไรท์ ..	21
3.1	แสดงค่า θ, $(S-S_o)_{calc}$ และ hkl ของสารซิลิกอน ($a = 5.431065$ Å) ที่ได้จากการคำนวณโดยใช้ความยาวคลื่นรังสีเอ็กซ์ CuKα1 ($\lambda = 1.54060$ Å)	50
4.1	ก. แสดงข้อมูลขาออกจากระบบฟิล์มสแกนเนอร์ของสาร $AgGaTe_2$	69
	ข. แสดงข้อมูลขาออกจากระบบฟิล์มสแกนเนอร์ของสาร $AgInSe_2$	71
	ค. แสดงข้อมูลขาออกจากระบบฟิล์มสแกนเนอร์ของสาร $AgInTe_2$	73
	ง. แสดงข้อมูลขาออกจากระบบฟิล์มสแกนเนอร์ของสาร $CuInTe_2$	74
4.2	ก. แสดงผลการคำนวณการปรับค่าดงที่แลตทิซของสาร $AgGaTe_2$ โดยโปรแกรม CELNE	75
	ข. แสดงผลการคำนวณการปรับค่าดงที่แลตทิซของสาร $AgInSe_2$ โดยโปรแกรม CELNE	76
	ค. แสดงผลการคำนวณการปรับค่าดงที่แลตทิซของสาร $AgInTe_2$ โดยโปรแกรม CELNE	77

ตารางที่ หน้า

ง. แสดงผลการคำนวณการปรับค่าคงที่แลตทิซของสาร $CuInTe_2$ โดยโปรแกรม CELNE 78

4.3 แสดงการตั้งส่วนควบคุมเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์ ในการบันทึกข้อมูลหาจำนวนพีค 80

4.4 แสดงการตั้งส่วนควบคุมการบันทึกข้อมูลในการหาพื้นที่ใต้กราฟ. 81

4.5 ก. แสดงค่า hkl , มุมของแบรกก์ (θ) , ความเข้ม(I) แฟกเตอร์ลอเรนซ์และโพลาไรเซชัน(Lp), แฟกเตอร์พหุคูณ(m), แอมพลิจูดแฟกเตอร์โครงสร้างสังเกต $|\vec{F}_o|_{hkl}$ และความเบี่ยงเบนมาตรฐาน (σ_F)ของสาร $AgGaTe_2$ ที่ได้จากเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์ 84

ข. แสดงค่า hkl , มุมของแบรกก์ (θ) , ความเข้ม(I) แฟกเตอร์ลอเรนซ์และโพลาไรเซชัน(Lp), แฟกเตอร์พหุคูณ(m), แอมพลิจูดแฟกเตอร์โครงสร้างสังเกต $|\vec{F}_o|_{hkl}$ และความเบี่ยงเบนมาตรฐาน (σ_F)ของสาร $AgInSe_2$ ที่ได้จากเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์ 86

ค. แสดงค่า hkl , มุมของแบรกก์ (θ) , ความเข้ม(I) แฟกเตอร์ลอเรนซ์และโพลาไรเซชัน(Lp), แฟกเตอร์พหุคูณ(m), แอมพลิจูดแฟกเตอร์โครงสร้างสังเกต $|\vec{F}_o|_{hkl}$ และความเบี่ยงเบนมาตรฐาน (σ_F)ของสาร $AgInTe_2$ ที่ได้จากเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์ 87

ง. แสดงค่า hkl , มุมของแบรกก์ (θ) , ความเข้ม(I) แฟกเตอร์ลอเรนซ์และโพลาไรเซชัน(Lp), แฟกเตอร์พหุคูณ(m), แอมพลิจูดแฟกเตอร์โครงสร้างสังเกต $|\vec{F}_o|_{hkl}$ และความเบี่ยงเบนมาตรฐาน (σ_F)ของสาร $CuInTe_2$ ที่ได้จากเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์ 88

4.6 แสดงผลการคำนวณค่าคงที่แลตทิซตามแกน b ของผลึก $AgGaTe_2$ และ $AgInSe_2$ จากภาพถ่ายโรเทชันและออสซิลเล

ตารางที่ หน้า

ชันตามลำดับ 106

4.7 ก. แสดงผลการคำนวณค่าคงที่แลตทิซตามแกน a และ c ของผลึก จากภาพถ่ายไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ 0 ของสาร $AgGaTe_2$ 107

ข. แสดงผลการคำนวณค่าคงที่แลตทิซตามแกน a และ c ของผลึก จากภาพถ่ายไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ 0 ของสาร $AgInSe_2$ 108

4.8 แสดงผลการทดลองและคำนวณหาค่าความหนาแน่น จำนวนหน่วยสูตรในหนึ่งหน่วยเซลล์และค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์เชิงเส้นของสาร $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$ 111

4.9 แสดงเงื่อนไขการเกิดจุดสะท้อนจากภาพถ่ายไวซ์เซนเบอร์กของสาร $AgGaTe_2$ และ $AgInSe_2$ 115

4.10 แสดงระยะห่างและดัชนีมิลเลอร์ของระนาบปิดล้อมผลึก $AgGaTe_2$ 124

4.11 แสดงระยะห่างและดัชนีมิลเลอร์ของระนาบปิดล้อมผลึก $AgInSe_2$ 124

4.12 แสดงเวกเตอร์ฮาร์ดเกอร์ที่ตำแหน่งพิเศษ 4a,4b และ 8d ของหมู่สมมาตรสามมิติ $I\bar{4}2d$ 130

4.13 ก. แสดงผลลัพธ์ของการปรับโครงสร้างของสาร $AgGaTe_2$ $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$ โดยอาศัยข้อมูลจากภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผงจากกล้องกีเนียร์ - เฮกก์ 146

ข. แสดงผลลัพธ์ของการปรับโครงสร้างของสาร $AgGaTe_2$ $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$ โดยอาศัยข้อมูลการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผง จากเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์ 147

ตารางที่ หน้า

4.14 ก. แสดงผลลัพธ์ของการปรับโครงสร้างของสาร $AgGaTe_2$ โดยอาศัยข้อมูลจากภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกเดี่ยวจากกล้องไวซ์เซนเบอร์ก 148

ข. แสดงผลลัพธ์ของการปรับโครงสร้างของสาร $AgInSe_2$ โดยอาศัยข้อมูลจากภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกเดี่ยวจากกล้องไวซ์เซนเบอร์ก 149

4.15 ค่า $|\vec{F}_o|$ และ $|\vec{F}_c|$ ของจุดสะท้อน hkl หลังจากการคำนวณปรับโครงสร้างของผลึกผงสิ้นสุดลง โดยอาศัยข้อมูลจากกล้องกีเนียร์ – เฮกก์ 150

4.16 ค่า $|\vec{F}_o|$ และ $|\vec{F}_c|$ ของจุดสะท้อน hkl หลังจากการคำนวณปรับโครงสร้างของผลึกผงสิ้นสุดลง โดยอาศัยข้อมูลจากเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์ 152

4.17 ค่า $|\vec{F}_o|$ และ $|\vec{F}_c|$ ของจุดสะท้อน hkl หลังจากการคำนวณปรับโครงสร้างของผลึกเดี่ยว $AgGaTe_2$ สิ้นสุดลง 154

4.18 ค่า $|\vec{F}_o|$ และ $|\vec{F}_c|$ ของจุดสะท้อน hkl หลังจากการคำนวณปรับโครงสร้างของผลึกเดี่ยว $AgInSe_2$ สิ้นสุดลง 157

5.1 แสดงค่าคงที่แลตทิซ a และ c ของสาร $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$ $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$ ที่ได้จากการทดลองในครั้งนี้ เปรียบเทียบกับค่าที่ได้จากการทดลองของนักวิทยาศาสตร์และบุคคลอื่น ๆ 166

5.2 แสดงผลการคำนวณ η, a และ x ตามทฤษฎี CTB บวกเงื่อนไข $\eta=\eta_{expt}$ ของสาร $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$ โดยใช้ค่ารัศมีตามแบบของแซนนอน –พรีวิทท์ พอลิงและฟิลลิปส์ 168

5.3 แสดงผลการปรับโครงสร้างของผลึก $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$ 169

ตารางที่		หน้า
5.4	แสดงค่า u ที่คำนวณตามสมการ (5.3) ของสาร $AgGaTe_2$ $AgInSe_2$, $AgInTe_2$และ $CuInTe_2$	172
5.5	เปรียบเทียบค่า x (หรือ u)ที่ได้จากการทดลองนี้กับค่าที่คำนวณจากทางทฤษฎีและการทดลองของนักวิทยาศาสตร์อื่น ๆ .	173

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

รายการรูปประกอบ

รูปที่		หน้า
1.1	แสดงลักษณะพันธะเชิงสี่ของสารกึ่งตัวนำ	1
1.2	แสดงความสัมพันธ์ระหว่างสารกึ่งตัวนำประเภทต่าง ๆ	5
2.1	แสดงตัวแปร a,b,c และ α,β,γ ของหนึ่งหน่วยเซลล์ ...	9
2.2	ความยาวพันธะและมุมพันธะในการยึดกันแบบเชิงสี่ปกติ	11
2.3	แบบจำลองทะเลอิเลคตรอน	14
2.4	การเคลื่อนที่ของระนาบในผลึก	14
2.5	การเคลื่อนที่ของระนาบในผลึกไอออนิค	15
2.6	แสดงลักษณะการจัดเรียงตัวของไดโพลคู่หนึ่งในแบบต่าง ๆ ..	15
2.7	ก. แสดงการจัดเรียงตัวของอะตอมในโครงสร้างแบบซาลโคไพไรท์กลุ่ม I-III-VI_2 ในหนึ่งหน่วยเซลล์	20
	ข. แสดงตำแหน่งที่อยู่ของอะตอมหมู่ I คือ Cu หรือ Ag.	20
	ค. แสดงตำแหน่งที่อยู่ของอะตอมหมู่ III คือ In หรือ Ga.	20
	ง. แสดงตำแหน่งที่อยู่ของอะตอมหมู่ VI คือ Te หรือ Se.	20
2.8	ก. โครงสร้างของสารประกอบคู่แบบซิงค์เบลนด์ ซึ่งเป็นระบบผลึกแบบคิวบิก แสดงในรูปจำนวน 2 หน่วยเซลล์	22
	ข. โครงสร้างของสารประกอบสามแบบซาลโคไพไรท์ แสดงในรูปจำนวน 1 หน่วยเซลล์	22
2.9	แสดงค่า u_{expt} ที่ได้จากการทดลองและค่า u_{calc} ตามสมการ(2.4)	24
2.10	แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า a_{expt} และ a_{calc} ของสาร ABC_2 โดยใช้ CTB บวกเงื่อนไข $\eta=\eta_{expt}$	28
2.11	แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า u_{expt} และ u_{calc} ของสาร ABC_2 โดยใช้ CTB บวกเงื่อนไข $\eta=\eta_{expt}$	28

รูปที่		หน้า
2.12	เปรียบเทียบความสัมพันธ์ระหว่าง a_{calc} และ a_{expt} ของสาร ABC_2 โดยใช้ CTB บวกเงื่อนไข $\eta=\eta_{tet}$	30
3.1	สเปกตรัมแม่เหล็กไฟฟ้า	32
3.2	แสดงลักษณะการกระเจิงของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบอิเลคตรอน 1 ตัว	33
3.3	แสดงการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยอะตอมที่เรียงกันอย่างเป็นระเบียบ	34
3.4	แสดงเงื่อนไขของลาวเอใน 1 มิติ	35
3.5	แสดงกรวยการเลี้ยวเบนของลาวเอใน 1 มิติ	36
3.6	แสดงกรวยการเลี้ยวเบนของลาวเอใน 2 มิติ	37
3.7	แสดงกรวยการเลี้ยวเบนของลาวเอใน 3 มิติ	38
3.8	แสดงการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ตามกฎของแบรกก์	38
3.9	แสดงจุดส่วนกลับที่ใช้แทนระนาบ hkl ใด ๆ	40
3.10	แสดงแลตทิซส่วนกลับที่ใช้แทนระนาบ hkl ใด ๆ ในแลตทิซ - ปริภูมิ ในระนาบ ab ของผลึก	41
3.11	แสดงความสัมพันธ์ระหว่างแลตทิซส่วนกลับและกฎของแบรกก์ ..	44
3.12	แสดงความสัมพันธ์เงื่อนไขของลาวเอกับแลตทิซส่วนกลับ	45
3.13	กล้องกีเนียร์ - เฮกก์ชนิดปรับโฟกัสแบบ Philips XDC-700 แสดงภายในห้องตัวกล้อง	47
3.14	แสดงหลักการทำงานของกล้องกีเนียร์ - เฮกก์	48
3.15	แสดงภาพถ่ายของสาร $AgInSe_2$ ที่ถ่ายด้วยกล้องกีเนียร์ - เฮกก์	49
3.16	แสดงกราฟที่เขียนระหว่าง ΔS กับ $(S-S_o)_{obs}$ ของเส้นซิลิกอนที่ผสมกับผลึกผงควอทซ์	51
3.17	แสดงชุดภาพรูปเหลี่ยมของระบบฟิล์มสแกนเนอร์	52
3.18	แสดงลักษณะภายนอกของเครื่องวัดฟิล์มไลน์สแกนเนอร์ แอลเอส 18	53

รูปที่		หน้า
3.19	ก. แสดงเฉพาะส่วนวัดความเข้มแสง	54
	ข. แสดงส่วนประกอบที่สำคัญภายในของเครื่องวัดฟิล์มไลน์ สแกนเนอร์ แอลเอส 18	54
3.20	ก. แสดงที่จับฟิล์มและการวางระยะของฟิล์มเมื่อดูตามยาว .	55
	ข. แสดงที่จับฟิล์มเมื่อดูทางด้านข้าง	55
3.21	แสดงหลักการทำงานของเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์	56
3.22	แสดงชุดภาพรูปเหลี่ยมการทำงานของเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์	57
3.23	แสดงรายละเอียดของอุปกรณ์ที่สำคัญในเครื่องดิฟแฟรกโตมิ - เตอร์	58
3.24	แสดงรายละเอียดของอุปกรณ์ที่สำคัญในเครื่องดิฟแฟรกโตมิ - เตอร์	58
3.25	ก. แสดงส่วนประกอบต่าง ๆ ของตัวกล้องไวซ์เซนเบอร์ก .	60
	ข. แสดงตัวกันเส้นเลย์เออร์	60
3.26	แสดงการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ในการถ่ายภาพแบบโรเทชัน ...	61
3.27	แสดงค่ามุม μ ที่ต้องเอียงกล้องและระยะที่ต้องเลื่อนตัวกั้นเส้นเลย์เออร์ ในการถ่ายภาพไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ n ..	63
3.28	ก. จุดสะท้อน P และ Q ห่างจากจุดกึ่งกลางเท่ากัน	65
	ข. การเกิดจุดสะท้อนบนฟิล์ม	65
4.1	แผ่นวงแหวนที่บรรจุสารเพื่อถ่ายภาพในกล้องกีเนียร์ - เฮกก์	66
4.2	แสดงภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของสาร $AgGaTe_2$ $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$ จากกล้องกีเนียร์ - เฮกก์โดยถ่ายด้วยฟิล์มเก็บความเข้ม CEA-REFLEX 15....	68
4.3	ก. ที่บรรจุสารตัวอย่างในเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์	79
	ข. แผ่นสไลด์ที่ใช้เตรียมสารตัวอย่างในการทดลอง	79
4.4	แสดงการบันทึกจำนวนพีคที่มุม $2\theta^{\circ}$ ของแบรกก์ ที่ถ่ายจากเครื่องดิฟแฟรกโตมิเตอร์ ใช้รังสีเอ็กซ์ชนิด $CuK\alpha$ ที่ 40 KV, 30 mA มี Ni เป็นตัวกรอง ใช้เวลาในการ	

รูปที่		หน้า
	ถ่ายประมาณ $3\frac{1}{2}$ ชั่วโมงต่อสาร	82
4.5	ผลึกเดี่ยวติดอยู่กับแท่งใยแก้วบนหัวโกนิโอมิเตอร์	90
4.6	แสดงมุมและทิศทางที่ต้องปรับอาร์ก	91
4.7	แสดงวิธีการปรับแกนแบบดับเบิลออสซิลเลชัน โดยให้อาร์กทำมุม 45° กับรังสีเอ็กซ์	93
4.8	แสดงลักษณะของเส้นเลย์เออร์ที่ปรากฏบนฟิล์ม โดยการถ่ายภาพแบบดับเบิลออสซิลเลชันเพื่อปรับแกนหมุนของผลึก	95
4.9	ก. แสดงภาพถ่ายโรเทชันของสาร $AgGaTe_2$ โดยใช้แกน b เป็นแกนหมุน ใช้รังสี CuKα ที่ 40 KV, 30 mA มี Ni เป็นตัวกรอง ถ่ายนาน 24 ชั่วโมง .	96
	ข. แสดงภาพถ่ายออสซิลเลชันของสาร $AgInSe_2$ โดยใช้แกน b เป็นแกนหมุน ในช่วง ± 45° ใช้รังสี CuKαที่ 40KV, 30 mA มี Ni เป็นตัวกรอง ถ่ายนาน 15 ชั่วโมง	97
4.10	ก. ภาพถ่ายไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ 0 หรือ (h0l) ของสาร $AgGaTe_2$ มี b เป็นแกนหมุน ถ่ายนาน 100 ชั่วโมง ใช้รังสี CuKα ที่ 40KV , 30 mA มี Ni เป็นตัวกรอง	98
	ข. ภาพถ่ายไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ 1 หรือ (h1l) ของสาร $AgGaTe_2$ มี b เป็นแกนหมุน ถ่ายนาน 100 ชั่วโมง ใช้รังสี CuKα ที่ 40KV , 30 mA มี Ni เป็นตัวกรอง	99
	ค. ภาพถ่ายไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ 2 หรือ (h2l) ของสาร $AgGaTe_2$ มี b เป็นแกนหมุน ถ่ายนาน 100 ชั่วโมง ใช้รังสี CuKα ที่ 40KV , 30 mA มี Ni เป็นตัวกรอง	100
	ง. ภาพถ่ายไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ 3 หรือ (h3l)	

รูปที่ หน้า

ของสาร $AgGaTe_2$ มี b เป็นแกนหมุน ถ่ายนาน 100 ชั่วโมง ใช้รังสี CuKα ที่ 40 KV, 30 mA มี Ni เป็นตัวกรอง 101

จ. ภาพถ่ายไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ 0 หรือ (h0l) ของสาร $AgInSe_2$ มี b เป็นแกนหมุน ถ่ายนาน 125 ชั่วโมง ใช้รังสี CuKα ที่ 40 KV, 30 mA มี Ni เป็นตัวกรอง 102

ฉ. ภาพถ่ายไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ 1 หรือ (h1l) ของสาร $AgInSe_2$ มี b เป็นแกนหมุน ถ่ายนาน 125 ชั่วโมง ใช้รังสี CuKα ที่ 40 KV, 30 mA มี Ni เป็นตัวกรอง 103

ช. ภาพถ่ายไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ 2 หรือ (h2l) ของสาร $AgInSe_2$ มี b เป็นแกนหมุน ถ่ายนาน 125 ชั่วโมง ใช้รังสี CuKα ที่ 40 KV, 30 mA มี Ni เป็นตัวกรอง 104

ซ. ภาพถ่ายไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ 3 หรือ (h3l) ของสาร $AgInSe_2$ มี b เป็นแกนหมุน ถ่ายนาน 125 ชั่วโมง ใช้รังสี CuKα ที่ 40 KV, 30 mA มี Ni เป็นตัวกรอง 105

4.11 ระนาบแลตทิซส่วนกลับ (hnl) n = 0 ถึง 3 แสดงการเกิดจุดสะท้อนตามภาพไวซ์เซนเบอร์กของสาร $AgGaTe_2$.... 113

4.12 ระนาบแลตทิซส่วนกลับ (hnl) n = 0 ถึง 3 แสดงการเกิดจุดสะท้อนตามภาพไวซ์เซนเบอร์กของสาร $AgInSe_2$.... 114

4.13 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่า ξ และสเกลแก้ความเข้มของสาร $AgGaTe_2$ 117

4.14 แบบจำลองรูปร่างผลึกและตำแหน่งพิกัดของจุดต่าง ๆ บนผลึก $AgGaTe_2$ โดยใช้มาตราส่วน 1 ซม. : 0.02 มม. ... 120

รูปที่		หน้า
4.15	แบบจำลองรูปร่างผลึกและตำแหน่งพิกัดของจุดต่าง ๆ บนผลึก $AgInSe_2$ โดยใช้มาตราส่วน 1 ซม. : 0.1 มม.	121
4.16	แสดงการหาสมการของระนาบที่ผ่านจุด 3 จุดใด ๆ ใน 3 มิติ..	122
4.17	ก. แสดงแผนภาพแพทเทอร์สัน $P(u,o,w)$ ของสาร $AgGaTe_2$ เมื่อ u และ w มีค่าตั้งแต่ 0 ถึง 0.5	131
	ข. แสดงแผนภาพแพทเทอร์สัน $P(u,\frac{1}{4},w)$ ของสาร $AgGaTe_2$ เมื่อ u และ w มีค่าตั้งแต่ 0 ถึง 0.5	132
	ค. แสดงแผนภาพแพทเทอร์สัน $P(u,\frac{1}{2},w)$ ของสาร $AgGaTe_2$ เมื่อ u และ w มีค่าตั้งแต่ 0 ถึง 0.5	133
4.18	ก. แสดงแผนภาพแพทเทอร์สัน $P(u,o,w)$ ของสาร $AgInSe_2$ เมื่อ u และ w มีค่าตั้งแต่ 0 ถึง 0.5	134
	ข. แสดงแผนภาพแพทเทอร์สัน $P(u,\frac{1}{4},w)$ ของสาร $AgInSe_2$ เมื่อ u และ w มีค่าตั้งแต่ 0 ถึง 0.5	135
	ค. แสดงแผนภาพแพทเทอร์สัน $P(u,\frac{1}{2},w)$ ของสาร $AgInSe_2$ เมื่อ u และ w มีค่าตั้งแต่ 0 ถึง 0.5	136
4.19	ก. แสดงแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนสังเกต $\rho_o(x,o,z)$ ของสาร $AgGaTe_2$	137
	ข. แสดงแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนสังเกต $\rho_o(x,\frac{1}{4},z)$ ของสาร $AgGaTe_2$	138
	ค. แสดงแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนสังเกต $\rho_o(x,\frac{1}{2},z)$ ของสาร $AgGaTe_2$	139
4.20	ก. แสดงแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนสังเกต $\rho_o(x,o,z)$ ของสาร $AgInSe_2$	140
	ข. แสดงแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนสังเกต $\rho_o(x,\frac{1}{4},z)$ ของสาร $AgInSe_2$	141
	ค. แสดงแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนสังเกต $\rho_o(x,\frac{1}{2},z)$ ของสาร $AgInSe_2$	142

รูปที่		หน้า
4.21	แสดงค่าความยาวพันธะและมุมพันธะระหว่างอะตอมในผลึก โดยอาศัยข้อมูลการปรับโครงสร้างจากกล้องกีเนียร์ – เฮกก์ .	160
4.22	แสดงค่าความยาวพันธะและมุมพันธะระหว่างอะตอมในผลึก ของสาร $AgGaTe_2$ ข้อมูลจากการปรับโครงสร้างของ ผลึกเดี่ยว	164
4.23	แสดงค่าความยาวพันธะและมุมพันธะระหว่างอะตอมในผลึก ของสาร $AgInSe_2$ ข้อมูลจากการปรับโครงสร้างของ ผลึกเดี่ยว	165

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย