

บทที่ 5

วิธีการทดลองและผลการทดลอง

ความรู้เกี่ยวกับฟิลิกส์สารกึ่งตัวนำที่ได้รับการศึกษามาแล้วจากบทที่ 2, 3 และ 4 ทำให้ทราบว่าโลหะผสมกึ่งตัวนำ $\text{AgGaTe}_{2(1-z)}\text{Se}_{2z}$ ที่จะวิจัยนี้เป็นสารที่มีโครงสร้างพันธะแบบพันธะเชิงสี่, โครงสร้างผลึกแบบซาลโคไพไรท์และโครงสร้างแถบพลังงานแบบตรง ในการทดลอง เริ่มด้วยการใช้วิธีเทคนิคการหลอมโดยตรงและแอนนัลจากหัวข้อ 2.4 มาเตรียมสารกลุ่มนี้ซึ่งก่อนการทดลองได้คาดคิดล่วงหน้าว่าเป็นวิธีที่เหมาะสมที่สุด เมื่อเตรียมได้แล้วก็นำสารที่เตรียมได้มาศึกษาค่าคงที่ของโครงสร้างผลึกโดยอาศัยความรู้เกี่ยวกับการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์จากบทที่ 3 หลังจากผ่านการศึกษาค่าคงที่ของโครงสร้างผลึกแล้วก็ได้นำสารดังกล่าวมาศึกษาช่องว่างแถบพลังงานต่อไปโดยอาศัยความรู้เกี่ยวกับการดูดกลืนแสงซึ่งเป็นขั้นตอนสุดท้ายของการวิจัยนี้ ในที่นี้จะนำความรู้ดังกล่าวทั้งหมดมาใช้เป็นแนวทางในการทดลอง ส่วนรายละเอียดต่าง ๆ เกี่ยวกับการทดลองได้แสดงไว้ในหัวข้อ 5.1, 5.2 และ 5.3 ถัดไปโดยเริ่มทดลองเตรียมโลหะผสมกึ่งตัวนำ, หาค่าคงที่ของโครงสร้างผลึกและช่องว่างแถบพลังงานตามลำดับ และในท้ายของแต่ละหัวข้อถัดไปจะแสดงผลการทดลองไว้ด้วย

5.1 การเตรียมโลหะผสมกึ่งตัวนำ

ในการเตรียมสารเริ่มด้วยการคำนวณน้ำหนักของธาตุต่าง ๆ ที่ใช้เตรียมแล้วชั่งให้ได้น้ำหนักตามต้องการบรรจุในหลอดแก้วควอทซ์ นำหลอดที่บรรจุธาตุแล้วมาดูดอากาศออกแล้วจึงหลอมปิดหลอด แล้วนำหลอดที่บรรจุธาตุและได้ดูดอากาศออกแล้วมาหลอมในเตาหลอมขั้นสุดท้ายได้นำสารที่หลอมได้ไปแอนนัลในเตาแอนนัล (annealing furnace) ส่วนรายละเอียดต่าง ๆ เกี่ยวกับการเตรียมจะแสดงต่อไป

5.1.1 การคำนวณน้ำหนักของธาตุต่าง ๆ

ก่อนที่จะชั่งธาตุต่าง ๆ ต้องคำนวณน้ำหนักก่อน ในการทดลองนี้สารที่เตรียมคือ $\text{AgGaTe}_{2(1-z)}\text{Se}_{2z}$ ถ้าให้สัดส่วนอะตอม (atomic fraction, z) เป็น 0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 0.9 และ 1.0 ก็จะได้สารที่เตรียม 7 สารด้วยกัน คือ AgGaTe_2 , $\text{AgGaTe}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$, $\text{AgGaTe}_{1.2}\text{Se}_{0.8}$, $\text{AgGaTe}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$, $\text{AgGaTe}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$, $\text{AgGaTe}_{0.2}\text{Se}_{1.8}$ และ AgGaSe_2 ตามลำดับ ในที่นี้จะยกตัวอย่างการคำนวณน้ำหนักของสาร $\text{AgGaTe}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$ หนัก 2 g โดยการใช้น้ำหนักอะตอม (atomic weight) มาเทียบบัญญัติโดยตรงก็จะได้น้ำหนักของธาตุต่าง ๆ ที่ใช้เตรียมออกมาพร้อมทั้งได้รวบรวมพารามิเตอร์ต่าง ๆ ที่เกี่ยวข้องกับการหลอม ดังแสดงในตารางที่ 5-1

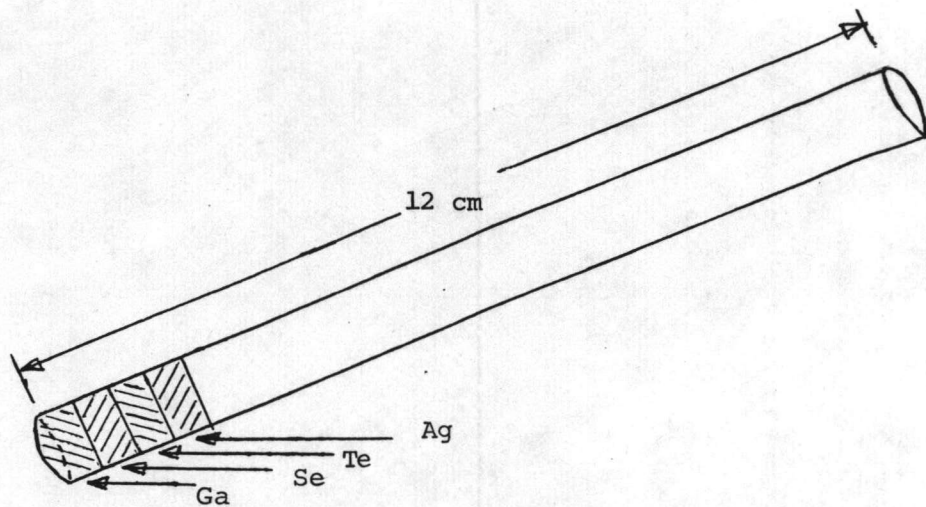
ธาตุ	ความบริสุทธิ์ (%)	น้ำหนักอะตอม	น้ำหนักธาตุ (g)	จุดหลอมเหลว ($^{\circ}\text{C}$)	ลักษณะของธาตุ	จุดเดือด ($^{\circ}\text{C}$)
Ag	99.99	107.87	0.6078	961	โลหะแข็ง, เหนียว	2177
Ga	99.99	69.72	0.3928	29.8	แข็งและ เหนียว	223.7
Te	99.99	127.60	0.2876	450	แข็งแต่เปราะ	1087
Se	99.99	78.96	0.7118	217	สีดำ	688

ตารางที่ 5-1 แสดงน้ำหนักของธาตุต่าง ๆ ที่คำนวณได้และพารามิเตอร์ที่เกี่ยวข้องกับการหลอมสาร $\text{AgGaTe}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$ ซึ่งหนัก 2 กรัม

5.1.2 การชั่งและการบรรจุธาตุต่าง ๆ ลงในหลอดแก้วควอทซ์

เมื่อคำนวณน้ำหนักของธาตุต่าง ๆ ที่ใช้เตรียมจากหัวข้อที่ 5.1.1 แล้วก็ทำการชั่งสารได้ ก่อนที่จะชั่งน้ำหนักของธาตุต่าง ๆ ต้องจัดหาหลอดแก้วควอทซ์ซึ่งทำจาก SiO_2 ที่ทนความร้อนได้มากกว่า 1300°C และยาวประมาณ 12 cm ปิดปลายข้างหนึ่งโดย

การลนด้วยไฟจากเครื่อง เชื่อมแกสออกซิเจน-อะเซทิลีน แล้วแช่หลอดในน้ำยาโครมิก (chromic solution) เป็นเวลาหนึ่งคืนและล้างออกด้วยน้ำกลั่นให้สะอาด ใช้เครื่องเป่าผมหรืออบในเตาให้แห้ง หลังจากนั้นก็นำธาตุต่าง ๆ มาชั่งให้ได้น้ำหนักตามที่ได้คำนวณไว้จากหัวข้อที่ 5.1.1 ด้วยเครื่องชั่งที่อ่านละเอียดได้ทศนิยม 4 ตำแหน่ง บรรจุลงในหลอดแก้วที่ได้เตรียมไว้ ดังแสดงในรูปที่ 5.1 ในการชั่งต้องชั่งในท้องที่มีอุณหภูมิต่ำกว่า 29.8°C เพราะจุดหลอมเหลวของ Ga เพียง 29.8°C เท่านั้น จากนั้นก็นำ

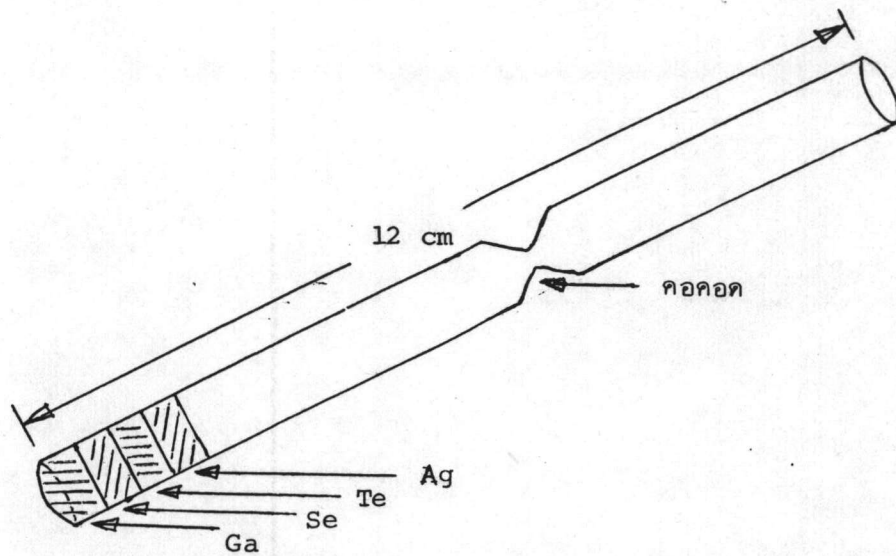


รูปที่ 5.1 แสดงหลอดแก้วควอทซ์ที่บรรจุธาตุที่ชั่งแล้ว

หลอดดังกล่าวไปดูดอากาศภายในหลอดออกด้วย เครื่องโรตารี-ดิฟฟิวชันปั๊ม (rotary-diffusion pump) ต่อไป

5.1.3 การดูดอากาศภายในหลอดออกและการหลอมปิดหลอด

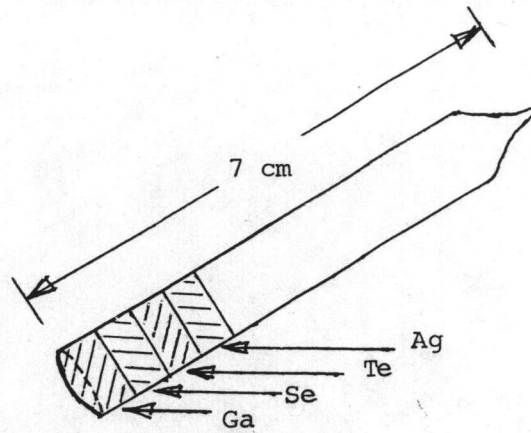
การที่ต้องดูดอากาศภายในหลอดออกก็เพื่อป้องกันธาตุแต่ละตัวหรือสารที่เตรียมทำปฏิกิริยากับอากาศภายในหลอดในขณะที่หลอม การดูดอากาศภายในหลอดออกเริ่มด้วยการนำหลอดแก้วที่บรรจุธาตุที่ชั่ง แล้วมาลนไฟด้วยเครื่อง เชื่อมแกสออกซิเจน-อะเซทิลีน ให้เป็นคอคอดตรงบริเวณเหนือธาตุต่าง ๆ พอสมควร เพื่อจะได้ง่ายต่อการหลอมปิดหลอด ดังแสดงในรูปที่ 5.2 ในการทดลองนี้เราให้คอคอดอยู่ห่างจากตำแหน่งของธาตุประมาณ 5 cm



รูปที่ 5.2 แสดงหลอดแก้วควอทซ์ที่ได้บรรจุธาตุและทำคอขวดแล้ว

แล้วนำหลอดดังกล่าวมาเสียบที่ท่อข้างของ เครื่องโรตารี-ดิฟิวชันปั๊ม เครื่องปั๊มนี้จะดูดอากาศภายในหลอดภายในระยะเวลาหนึ่งจนกระทั่งภายในหลอดเป็นสุญญากาศมากที่สุด ปกติเครื่องปั๊มนี้สามารถดูดอากาศจนความดันภายในหลอดลดลงต่ำกว่า 10^{-6} ทอร์ได้ แต่ในการทดลองนี้ความดันภายในหลอดสามารถทำได้เพียง 10^{-4} ทอร์เท่านั้น ความดันภายในหลอดนี้สามารถอ่านได้จากไอออนไนเซชันเกจ (ionization gauge) ในการทดลองถ้าหลอดไม่เป็นสุญญากาศพอสมควรที่ลอมได้จะมีลักษณะแยกเป็นส่วน ๆ เพราะมีสารอื่นมาเจือปนและภายในหลอดจะมีสีน้ำตาลคล้ำ การดูดอากาศออกยังช่วยป้องกันหลอดระเบิดเนื่องจากความดันไอที่มากเกินไปในขณะที่หลอมด้วย หลังจากนั้นก็หลอมปิดหลอดที่บรรจุธาตุและทำเป็นคอขวดแล้ว การหลอมปิดหลอดทำได้โดยใช้ไฟจากเครื่อง เชื่อมแกสออกซิเจน-อะเซติลีนลมนบริ เวณคอขวดให้ละลายอย่างช้า ๆ จนติดเป็นเนื้อเดียวกัน ดังแสดงในรูปที่ 5.3

ในขณะที่หลอมปิดหลอดต้องให้คอขวดละลายช้า ๆ อย่างระมัดระวังเพื่อไม่ให้หลอดร้าว ถ้ามีอากาศร้าวเข้าไปก็จะสังเกตเห็นรูรั่วได้ และต้องนำไปบรรจุในหลอดใหม่ที่สะอาดและโตกว่าแล้วดำเนินการตามขั้นตอนเดิมซ้ำ หลังจากนั้นก็วัดความยาว, จดเบอร์และความยาวของหลอดที่ได้ดูดอากาศออกและหลอมปิดแล้ว แล้วนำหลอดดังกล่าวไปติดตั้งในเตาหลอมโซนเดี่ยว (single zone furnace) เพื่อดำเนินการหลอมต่อไป



รูปที่ 5.3 แสดงหลอดแก้วควอทซ์ที่บรรจุธาตุและดูดอากาศออกพร้อมทั้ง
หลอมปิดแล้ว (2)

5.1.4 การหลอมสาร

การหลอมสาร เริ่มด้วยการนำหลอดที่ได้บรรจุธาตุและดูดอากาศออกแล้วจากรูปที่ 5.3 มาใส่ในภาชนะรองรับที่สานด้วยลวดทนความร้อนซึ่งผูกติดกับเส้นลวดแล้วนำไปแขวนไปภายในห้องของเตาซึ่งอยู่ในแนวตั้ง เตาที่ใช้เป็นเตาหลอมโซนเดี่ยว (single zone furnace) ซึ่งได้แสดงรายละเอียดเกี่ยวกับการสร้างไว้แล้วในภาคผนวก ก. ต่อจากนั้นเครื่องควบคุมอุณหภูมิจะป้อนกระแสไฟฟ้าเข้าไปในขดลวดของเตาที่ละน้อยทำให้อุณหภูมิของเตาค่อย ๆ เพิ่มขึ้นจากอุณหภูมิห้องไปยังอุณหภูมิหนึ่งที่เหมาะสม (ประมาณ 1000°C) ซึ่งสูงกว่าจุดหลอมเหลวสูงสุดของธาตุที่ใช้ เตรียมประมาณ 100°C โดยใช้ระยะเวลาการเร่งอุณหภูมิที่เหมาะสม (ประมาณ 3 ถึง 5 ชั่วโมง) เพื่อป้องกันความดันไอของธาตุต่าง ๆ และความร้อนภายในหลอดที่เกิดขึ้นมีผลทำให้หลอดแตกหรือระเบิดได้ แล้วปล่อยให้ธาตุต่าง ๆ อยู่ในสภาพหลอมเหลวที่อุณหภูมิดังกล่าวในระยะเวลาที่เหมาะสมพร้อมกันนั้น สีเขม่าเตาหรือหลอดเป็นพัก ๆ ตลอดระยะเวลาดังกล่าวเพื่อให้สารที่ได้จากการเตรียมรวมตัวเข้าเป็นเนื้อเดียวกันมากขึ้น เมื่อธาตุต่าง ๆ หรือสารอยู่ในสภาพหลอมเหลวเป็นระยะเวลาประมาณ 24 ชั่วโมงแล้วก็ให้ปิดเตาเพื่อให้อุณหภูมิของเตาหรือหลอดลดลงอย่างช้า ๆ จนถึงอุณหภูมิห้อง นำหลอดออกมาพร้อมกับสังเกตรูปร่างลักษณะของหลอดและสารที่

เตรียมได้ ปกติในขณะที่กำลังลดอุณหภูมิอยู่นั้นสารจะขยายตัวออกแต่หลอดจะหดตัว เป็นผลทำให้เกิดแรงดันจนกระทั่งหลอดแตกได้ ถ้าเป็นเช่นนี้แสดงว่าอากาศเข้าทำปฏิกิริยากับสาร ลักษณะของสารที่ได้จะมีสีน้ำตาลคล้ำซึ่งจะใช้ไม่ได้อีกต่อไป แต่ถ้าลักษณะของสารไม่มีสีน้ำตาลคล้ำถึงแม้ว่าหลอดจะแตกแล้วก็ตาม สารนี้ก็ยังใช้ได้โดยนำไปบรรจุในหลอดใหม่ที่สะอาดและโตกว่าเดิมแล้วดูดอากาศและหลอมปิดหลอดตามลำดับ นำหลอดดังกล่าวไปแอนนิลต่อไปได้ ส่วนในกรณีที่ลักษณะของหลอดไม่แตกและสารอยู่ในสภาพปกติก็ให้นำหลอดดังกล่าวไปวางในเตาแอนนิลเพื่อแอนนิลต่อไปได้เลย

5.1.5 การแอนนิลสาร

การแอนนิลเริ่มด้วยการนำหลอดซึ่งบรรจุสารที่ได้จากการหลอมมาวางในเตาแอนนิลซึ่งถูกวางในแนวระดับ แล้วค่อย ๆ เพิ่มอุณหภูมิของเตาอย่างช้า ๆ ในระยะเวลาที่เหมาะสม (ประมาณ 3 ชั่วโมง) เพื่อป้องกันหลอดแตกจนกระทั่งเตาหรือหลอดมีอุณหภูมิค่าหนึ่ง (ประมาณ 650°C) ซึ่งเรียกอุณหภูมิที่ใช้แอนนิล (annealing temperature) อุณหภูมินี้เคยมีผู้ทดลองแล้วพบว่าควรต่ำกว่าจุดหลอมเหลวของสารประมาณ 50°C แต่เนื่องจากการทดลองนี้เตาหลอมมีจำกัดจึงต้องแอนนิลพร้อม ๆ กัน 6 หลอด ดังนั้นจึงเลือกอุณหภูมิที่ใช้แอนนิลประมาณ 650°C ให้หลอดอยู่ในเตาแอนนิลที่มีอุณหภูมิดังกล่าวเป็นระยะเวลาหนึ่งที่เหมาะสมเพื่อให้ตำแหน่งอะตอมต่าง ๆ เกิดการจัดเรียงจนกระทั่งอยู่ในภาวะสมดุล (equilibrium condition) เคยมีผู้ทดลองพบว่า ระยะเวลาดังกล่าวนี้จะขึ้นอยู่กับอัตราการแพร่ของอะตอมและอุณหภูมิที่ใช้แอนนิลของสารชนิดนั้น ๆ ในการทดลองนี้พบว่าระยะเวลาดังกล่าวอยู่ในช่วง $1\frac{1}{2}$ ถึง $4\frac{1}{2}$ เดือน เมื่อแอนนิลครบตามระยะเวลาดังกล่าวแล้วให้นำสารออกจากเตาโดยเลื่อนออกมาอย่างช้า ๆ หรือปิดเตาให้เย็นก่อนแล้วเลื่อนหลอดออกมาก็ได้ หลังจากนั้นก็นำสารดังกล่าวไปถ่ายภาพรังสีเอกซ์ด้วยเครื่องเอ็กซ์เรย์ดิฟแฟรคโตมิเตอร์ (x-ray diffractometer) โดยวิธีผลึกผง (powder method) เพื่อศึกษาค่าคงที่ของโครงผลึก ดังแสดงในหัวข้อที่ 5.2 ต่อไป ส่วนผลการทดลองการเตรียมและพารามิเตอร์ต่าง ๆ ที่เกี่ยวข้องกับการเตรียมได้แสดงไว้ในตารางที่ 5-2

สัดส่วน อะตอม (z)	สาร $\text{AgGaTe}_{2(1-z)}\text{Se}_{2z}$	อุณหภูมิ ที่ใช้ในการ หลอม ($^{\circ}\text{C}$)	เวลาที่ ใช้ในการ หลอม	อุณหภูมิที่ใช้ ในการ หลอม ($^{\circ}\text{C}$)	เวลาที่ใช้ ในการ แอนนัล (เดือน)	เป็นผลึกที่มี ตำแหน่งอะตอม อยู่ในภาวะสมดุล หรือไม่	จุดหลอม เหลว ($^{\circ}\text{C}$) (3)
0.0	AgGaTe_2	1000	24	650, 580	$4\frac{1}{2}$, $1\frac{1}{2}$	เป็น	720
0.2	$\text{AgGaTe}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$	1000	24	650	$4\frac{1}{2}$	เป็น	-
0.4	$\text{AgGaTe}_{1.2}\text{Se}_{0.8}$	1000	24	650	$4\frac{1}{2}$	เกือบเป็น	-
0.6	$\text{AgGaTe}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$	1000	24	580	$1\frac{1}{2}$	เป็น	-
0.8	$\text{AgGaTe}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$	1000	24	650	$4\frac{1}{2}$	เป็น	-
0.9	$\text{AgGaTe}_{0.2}\text{Se}_{1.8}$	1000	24	650	$4\frac{1}{2}$	เป็น	-
1.0	AgGaSe_2	1000	24	650, 580	$4\frac{1}{2}$, $1\frac{1}{2}$	เป็น	850

ตารางที่ 5-2 แสดงผลการเตรียมและพารามิเตอร์ต่าง ๆ ที่เกี่ยวข้องกับการ
เตรียมโลหะผสมกึ่งตัวนำ $\text{AgGaTe}_{2(1-z)}\text{Se}_{2z}$

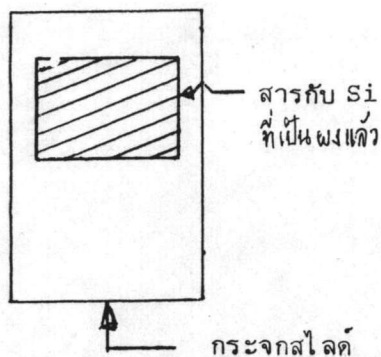
5.2 การหาค่าคงที่ของโครงผลึก

เมื่อเตรียมได้โลหะผสมกึ่งตัวนำตามหัวข้อที่ 5.1 แล้วก็นำไปหาค่าคงที่ของ
โครงผลึกโดยวิธีการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ซึ่งเป็นวิธีที่เคยกล่าวในบทที่ 3 แล้ว การ
ทดลองนี้มี 5 ขั้นตอนด้วยกันโดยเริ่มจากการนำสารดังกล่าวมาเตรียมให้เป็นผลึกผง (powder
crystal) และผสมซิลิกอน (Si) ลงไปด้วยเพื่อเป็นมาตรฐานเทียบ เราทราบจาก
บทที่ 3 ว่า การศึกษาผลึกด้วยรังสีเอกซ์จะได้ข้อมูลที่ใช้หาค่าคงที่ของโครงผลึกได้ ดังนั้น

จึงได้นำผลึกผงที่ผสมซิลิกอนแล้วไปวัดการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ด้วยเครื่องเอกซ์เรย์ดิฟแฟรคโตมิเตอร์ก็ได้แพทเทิร์นการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ (x-ray diffraction pattern) ออกมา จากแพทเทิร์นนี้ จะเห็นพีค (peaks) ของระนาบต่าง ๆ ถ้าพีคของระนาบ ๆ หนึ่ง ซึ่งมีลักษณะแคบ, แหลมและเรียบถูกแยกออกมาเป็นสองพีคย่อย ๆ หลังจากที่มีมุมของแบรกก์ (θ) มากกว่า 20° ขึ้นไปแล้วแสดงว่าตำแหน่งอะตอมมีการจัดเรียงอยู่ในภาวะสมดุลซึ่งพร้อมที่จะนำไปหาตำแหน่งของระนาบต่าง ๆ ได้ การแยกของพีคเช่นนี้เกิดจากการที่รังสีเอกซ์แผ่ความยาวคลื่น 2 ค่าเป็นผลทำให้มุมเลี้ยวเบนมี 2 ค่านั้นเอง ข้อมูลเกี่ยวกับความยาวคลื่นของรังสีเอกซ์ที่ใช้รวมทั้งมุมของแบรกก์และดัชนีมิลเลอร์ของระนาบต่าง ๆ ที่ได้จากผลของการหาตำแหน่งของระนาบดังกล่าวจะเป็นแนวทางใช้หาค่าคงที่ของโครงผลึกได้

5.2.1 การเตรียมสาร

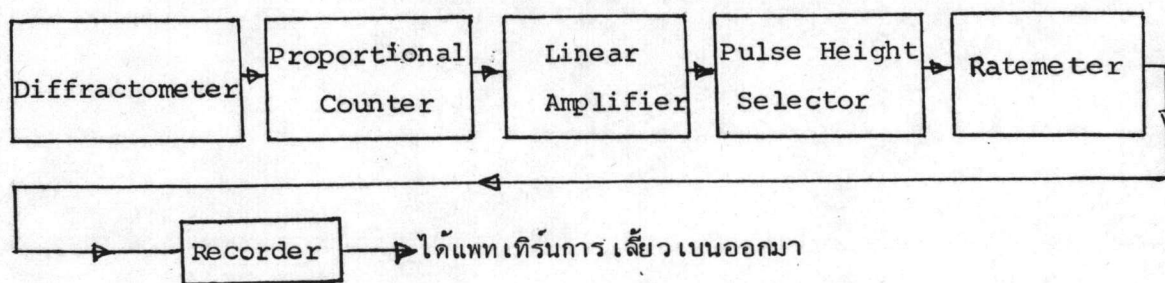
หลังจากที่ได้แอนนิลสารตามหัวข้อที่ 5.1.5 เป็นระยะเวลาประมาณ $1\frac{1}{2}$ ถึง $4\frac{1}{2}$ เดือนแล้วก็นำหลอดมาทุบให้แตกอย่างระมัดระวัง เพราะสารบางตัวเปราะมาก แล้วนำสารมาส่วนหนึ่งหนักพอสมควรผสมกับอะซิโตน (acetone) บดให้ละเอียดเป็นผง เนื่องจากการทดลองแต่ละครั้งสารที่อยู่ในรูปผลึกผงมีความหนาต่าง ๆ กัน ดังนั้นจึงต้องใส่ซิลิกอนลงไปประมาณหนึ่งในสามเพื่อใช้เป็นมาตรฐานเทียบเพื่อแก้ความคลาดเคลื่อนเกี่ยวกับมุมของแบรกก์พร้อมกันนั้นก็เติมอะซิโตนลงไปอีกแล้วบดสารทั้งหมดเข้าด้วยกันจนกระทั่งสารกับซิลิกอนผสมกันอย่างสม่ำเสมอและละเอียดพอประมาณ เนื่องจากต้องนำสารนี้ไปปรับรังสีเอกซ์ ดังนั้นจึงได้หยดน้ำลงไปผสมคลุกเคล้ากับสารและซิลิกอนจนกระทั่งเข้ากัน แล้วนำไปทาบนกระดาษลิตโดยทำให้เป็นบริเวณกว้าง 1.35 cm และยาว 1.85 cm และให้ผงนั้นกระจายออกอย่างสม่ำเสมอโดยทั่วกัน นำผงที่ผสมน้ำนี้ไปอบในเตาอบให้แห้งก็ได้สารที่ผสมซิลิกอนดังแสดงในรูปที่ 5.4 หลังจากนั้นก็นำสารที่ผสมซิลิกอนซึ่งมีลักษณะเป็นผงนี้ไปวัดการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ด้วยเครื่องเอกซ์เรย์ดิฟแฟรคโตมิเตอร์ต่อไป



รูปที่ 5.4 แสดงผลึกผงซึ่งประกอบด้วยสารที่ทดลองกับซิลิกอน

5.2.2 การวัดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของผลึกผง

การวัดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของผลึกผง เริ่มด้วยการนำสารที่ผสมซิลิกอนที่ได้บดเป็นผงละเอียดพอสมควรแล้ว มาติดตั้งในตัวเครื่องเอ็กซ์เรย์ดิฟแฟรคโตมิเตอร์ เพื่อศึกษาแพทเทิร์นของการเลี้ยวเบน แผ่นผั่งสำหรับการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์และระบบการตรวจวัดได้แสดงไว้ในรูปที่ 5.5 จากรูปพบว่า เมื่อปล่อยรังสีเอ็กซ์ออกมาตกกระทบ



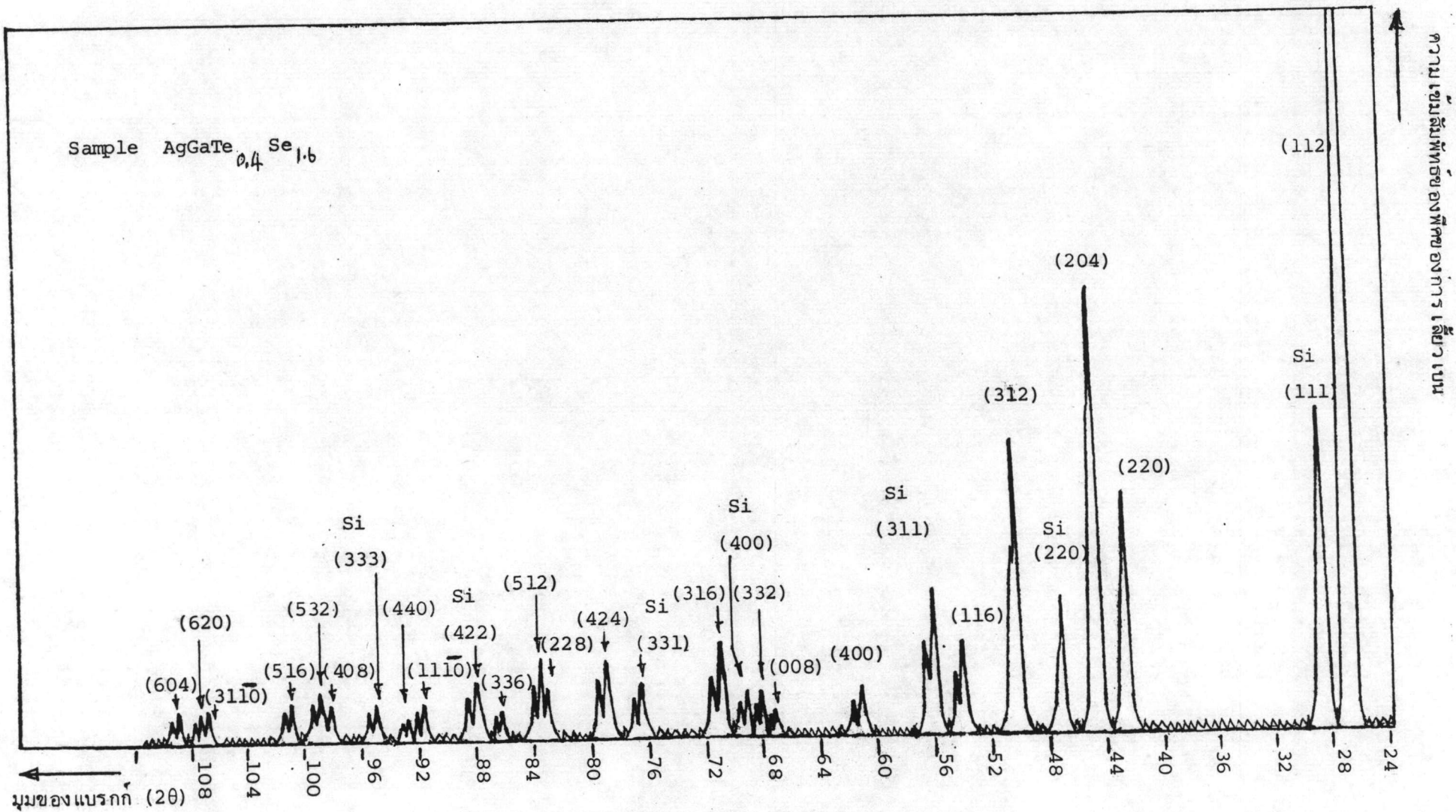
รูปที่ 5.5 แสดงแผนผังสำหรับการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์และระบบการตรวจวัด

สารที่ผสมซิลิกอนนี้ทำให้เกิดการเลี้ยวของรังสีเอ็กซ์ตามกฎของแบรกก์ที่เคยกล่าวไว้ในสมการ 3.1 รังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนนี้จะเข้าไปในเครื่องนับสัดส่วน (proportional counter) เครื่องนี้จะเปลี่ยนรังสีนี้ให้เป็นพัลส์ของกระแสไฟฟ้า (current pulses) เครื่องขยายเชิงเส้น (linear amplifier) รับพัลส์นี้แล้วขยายให้โตขึ้นแล้วส่งให้แก่เครื่องคัดเลือกระดับสูงของพัลส์ (pulse height selector) เครื่องนี้จะเปลี่ยนแอมพลิจูดและรูปร่างของพัลส์กระแสไฟฟ้าให้เป็นพัลส์ที่มีรูปร่างสี่เหลี่ยมมุมฉาก (rectangular pulses) โดยการบังคับไม่ให้พัลส์ที่มีแอมพลิจูดต่ำกว่าค่าหนึ่งและสูงกว่าอีกค่าหนึ่งผ่านไปเป็นผลทำให้สัญญาณรบกวนน้อยลง เรทมิเตอร์ (ratemeter) จะรับพัลส์นี้และเปลี่ยนให้เป็นกระแสไฟฟ้าและวัดความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนออกมา เครื่องบันทึก (recorder) จะบันทึกความเข้มนี้ที่มุมของแบรกก์ค่าต่าง ๆ สำหรับสารกลุ่มนี้จะวัดโดยเริ่มจากมุมของแบรกก์ (2 θ) ตั้งแต่ 24° ถึง 110° จากการวัดนี้จะได้แพทเทิร์นการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ ดังแสดงในรูปที่ 5.6 แพทเทิร์นนี้แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มลัพท์ของการเลี้ยวเบนกับมุมของแบรกก์และจะใช้เป็นข้อมูลในการพิจารณาลักษณะของผลึกที่ได้, การหาตำแหน่งของระนาบต่าง ๆ และค่าคงที่ของโครงผลึก (ดู 5.2.3, 5.2.4, 5.2.5)

5.2.3 การพิจารณาลักษณะของผลึกที่ได้หลังจากการวัด

จากการวัดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของผลึกผงตามหัวข้อ 5.2.2 จะได้แพทเทิร์นการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ออกมา เมื่อสังเกตเห็นแพทเทิร์นนี้แล้วจะเห็นพิคของระนาบ (hkl) ที่มุมของแบรกก์ (2 θ) ค่าต่าง ๆ ลักษณะของพิคที่พบเห็นจะเป็นแนวทางในการพิจารณาลักษณะของผลึกที่ได้ จากรูปที่ 5.6 นี้พบว่าพิคของระนาบต่าง ๆ มีลักษณะดังนี้คือ

1. รูปร่างพิคของสารมีความแคบพอ ๆ กับของซิลิกอน ยอดพิคจะแหลมและส่วนต่าง ๆ ของพิคจะเรียบมาก
2. พิคของระนาบต่าง ๆ แยกจากกันอย่างชัดเจน เช่น พิค (112) ซึ่งเป็นพิคเดี่ยว, พิค (220) และ (204) ซึ่งเป็นพิคชนิดคู่ และพิค (336), (512) และ (1110) ซึ่งเป็นพิคชนิดสาม เป็นต้น



รูปที่ 5.6 แสดงแพทเทิร์นการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์

3. พิกัดเดี่ยวของระนาบ ๆ หนึ่งจะ แยกออกเป็น 2 พิกัดย่อย ๆ เมื่อมุมของแบรกก์ (θ) มากกว่า 20° ขึ้นไป การที่เกิดการแยกของพิกัดเช่นนี้เกิดจากการที่รังสีเอ็กซ์แผ่ความยาวคลื่น 2 ค่า (CuK_{α_1} และ CuK_{α_2}) เป็นผลทำให้มุมเลี้ยวเบนมี 2 ค่านั่นเอง

ถ้าพิกัดของระนาบต่าง ๆ มีลักษณะทั้งสามประการดังที่กล่าวมาแล้วแสดงว่าตำแหน่งอะตอมมีการจัดเรียงอยู่ในภาวะสมดุลหรืออยู่ในตำแหน่งที่ถูกต้องแล้ว เป็นผลทำให้ระยะระหว่างระนาบต่าง ๆ มีค่าเท่ากันเป็นชุด ๆ ด้วย แพทเทิร์นการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของผลึกเทอร์โกนอซาลโคไฟโรที่นี้เคยมีผู้ศึกษามาก่อนหน้านี้แล้วพบว่าลักษณะของพิกัดและตำแหน่งของพิกัดของสารแต่ละชนิดจะปรากฏออกมาในลักษณะที่คล้าย ๆ กัน ถ้าหากมีพิกัดของสารอื่นปนเข้ามาจะสังเกตเห็นได้ทันที แต่ถ้าพบว่าไม่มีพิกัดของสารอื่นมาปนก็จะบอกได้ทันทีว่าสารดังกล่าวอยู่ในรูปเฟสเดียว (single phase) จากการพิจารณาแพทเทิร์นในรูปที่ 5.6 นี้พบว่าตำแหน่งอะตอมมีการจัดเรียงตัวอยู่ในภาวะสมดุลและลักษณะของสารมีเฟสเดียวซึ่งเป็นผลึกที่พร้อมที่จะนำไปศึกษาค่าคงที่ของโครงผลึกและช่องว่างแถบพลังงานได้

แต่ถ้าพบว่าพิกัดของระนาบ ๆ หนึ่งไม่แยกออกมาอย่างชัดเจน เมื่อมุมของแบรกก์ (θ) มากกว่า 20° ขึ้นไปแล้วแสดงว่าตำแหน่งอะตอมยังไม่อยู่ในภาวะสมดุล ดังนั้นจึงต้องนำสารนี้ไปแอนนัลต่อไปอีก ส่วนกรณีที่มีพิกัดของสารอื่นปนเข้ามา สารนั้นก็ใช้ไม่ได้อีกต่อไป เมื่อได้ผลึกพหุพันธ์ตามต้องการแล้วก็ดำเนินการหาตำแหน่ง (index) ของระนาบต่าง ๆ (ดู 5.2.4)

5.2.4 การหาตำแหน่งของระนาบต่าง ๆ

จากการศึกษาในบทที่ 3 ทำให้ทราบว่ามิตติของระนาบใดบ้างที่สามารถปรากฏออกมาให้เห็นในแพทเทิร์นการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของสารกลุ่มที่ทำกรวิจัยนี้ แต่ยังไม่ทราบว่าระนาบต่าง ๆ เหล่านั้นอยู่ที่ตำแหน่งใด ดังนั้นในหัวข้อนี้จะใช้สมการที่ (3.7) ซึ่งได้จากการรวมกฎของแบรกก์กับสมการของระยะ

$$\frac{4\sin^2\theta}{\lambda^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad (3.7)$$

ระหว่างระนาบมาคำนวณหาตำแหน่ง (index) ของระนาบที่มีมุมของแบรกก์ค่าต่าง ๆ มาหาตำแหน่งของระนาบต่าง ๆ เริ่มด้วยการนำค่าความยาวคลื่นของรังสีเอ็กซ์ที่ใช้ (λ), ค่าคงที่ของโครงผลึก $a = 6\text{\AA}$ และ $c = 12\text{\AA}$ ซึ่งได้สมมติขึ้น และดัชนีมิลเลอร์ (h, k, l) ของระนาบต่าง ๆ แทนค่าลงในสมการ (3.7) ก็จะได้มุมของแบรกก์ (θ) ที่ดัชนีมิลเลอร์ค่าต่าง ๆ โดยที่มุมของแบรกก์แสดงตำแหน่งของระนาบและดัชนีมิลเลอร์แสดงชนิดของระนาบ จากวิธีการนี้ก็พอจะหาตำแหน่งของระนาบต่าง ๆ ของสารที่ทดลองได้อย่างหายาบ ๆ ปรากฏว่าระนาบต่าง ๆ ที่ได้เรียงจากมุมของแบรกก์จากน้อยไปมากตามลำดับมีดังนี้คือ (112), (220), (204), (312), (116), (400), (008), (332), (316), (424), (228), (512), (336), (11 $\bar{1}$ 0), (440), (408), (532), (516), (31 $\bar{1}$ 0), (620), (604) และ (20 $\bar{1}$ 2) เป็นต้น โดยมีพิคบางคู่ซ้อนกัน ตำแหน่งของระนาบต่าง ๆ ที่หาได้จะเป็นข้อมูลในการคำนวณค่าคงที่ของโครงผลึก

5.2.5 การคำนวณค่าคงที่ของโครงผลึก

เราทราบจากหัวข้อ 2.2.4 ว่าโลหะผสมกึ่งตัวนำที่ได้รับการวิจัยนี้มีโครงสร้างผลึกแบบเทระโกนอลซาลโคไพไรท์ $a = b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ในที่นี้จะศึกษาเฉพาะ a และ c เท่านั้นโดยเริ่มด้วยการคำนวณหาความคลาดเคลื่อนเกี่ยวกับมุมของแบรกก์จากซิลิกอนแล้วจึงนำค่าคลาดเคลื่อนนี้มาแก้มุมของแบรกก์ของสารที่ทดลองก็จะได้มุมของแบรกก์ที่ถูกต้องออกมา จากการทราบมุมของแบรกก์ (θ), ความยาวคลื่นของรังสี

เอ็กซ์ที่ไซ (λ) , ดัชนีมีลเลอร์ของระนาบต่าง ๆ และความสัมพันธ์ในสมการ (3.7) ก็
สามารถคำนวณค่าคงที่ของโครงผลึกออกมาได้

5.2.5.1 การคำนวณค่าคลาดเคลื่อนเกี่ยวกับมุมของแบรกก์จากพีคของซิลิกอน

ซิลิกอนเป็นสารกึ่งตัวนำที่ได้รับการวิจัยมาช้านานแล้วพบว่าตำแหน่งของระนาบต่าง ๆ
เรียงจากมุมของแบรกก์จากน้อยไปหามากตามลำดับจะได้ดังนี้คือ (111), (220), (311),
(400), (331), (422) และ (333) เมื่อทราบตำแหน่งของระนาบต่าง ๆ แล้วให้
เขียนระนาบต่าง ๆ ลงในภาพถ่ายการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ที่ได้จากการทดลองนี้ดังรูปที่ 5.6
ถ้าพิจารณาจากภาพถ่ายนี้จะเห็นพีคของระนาบ (111) และ (220) เป็นพีคที่ไม่แยก
ออกเป็นพีคย่อย ส่วนพีคของระนาบ (311), (400), (331), (422) และ (333)
จะแยกออกเป็น 2 พีคย่อย ๆ ต่อไปอีก เริ่มอ่านมุมของแบรกก์ (θ_{obs}) ของตำแหน่งของ
พีคของระนาบต่าง ๆ ทั้งหมดแล้วคำนวณ $[\sin^2\theta/\lambda^2]_{obs}$ เมื่อ λ เป็นความยาวคลื่น
ของรังสีเอ็กซ์ที่ไซสำหรับกรณีที่มีการแยกพีคเดี่ยวออกเป็น 2 พีคย่อยต้องหาค่าเฉลี่ย
 $[\sin^2\theta/\lambda^2]_{obs}^{av}$ ออกมา ในทำนองเดียวกันได้นำมุมของแบรกก์ที่เป็นค่ามาตรฐานมา
คำนวณแล้วได้ $[\sin^2\theta/\lambda^2]_{cal}$ ในการคำนวณนี้ต้องการทราบว่า $[\sin^2\theta/\lambda^2]_{obs}^{av}$
ที่ได้จากการวัดคลาดเคลื่อนจาก $[\sin^2\theta/\lambda^2]_{cal}$ ซึ่งเป็นค่ามาตรฐานเท่าใด ซึ่งทำ
ได้โดยนำค่าทั้งสองมาหักลบกันก็จะได้ $\Delta[\sin^2\theta/\lambda^2]_{si}$ จากค่าคลาดเคลื่อนที่คำนวณได้
พบว่ามิต้าน้อยมากซึ่งจะมีผลกระทบกระเทือนที่ทัศนียมตำแหน่งที่ 4 และ 5 เท่านั้น ในขณะที่
เดียวกัน $[\sin^2\theta/\lambda^2]_{obs}^{av}$ ของสารที่ทดลองก็มีความคลาดเคลื่อน เท่ากันกับในกรณีของ
ซิลิกอน ดังนั้น $\Delta[\sin^2\theta/\lambda^2]_{si}$ จึงเป็นค่าคลาดเคลื่อนที่สามารถนำมาแก้
 $[\sin^2\theta/\lambda^2]_{obs}^{av}$ ของสารที่ทดลองได้

5.2.5.2 การคำนวณค่าคงที่ของโครงผลึกของสารที่ทดลอง

การคำนวณค่าคงที่ของโครงผลึกของสารที่ทดลอง เริ่มด้วยการนำภาพถ่ายการ เลี้ยวเบน
ของรังสีเอ็กซ์จากรูปที่ 5.6 มาอ่านมุมของแบรกก์ (θ_{obs}) ของตำแหน่งของพีคของระนาบ
ต่าง ๆ แล้วคำนวณ $[\sin^2\theta/\lambda^2]_{obs}$ ของพีคที่ไม่แยกและที่แยกให้หมดทุก ๆ ระนาบ
และหาค่าเฉลี่ย $[\sin^2\theta/\lambda^2]_{obs}^{av}$ ออกมา ค่าเฉลี่ยนี้เป็นค่าที่วัดได้จากภาพถ่ายนี้และ

เป็นค่าที่ยังไม่ถูกต้อง ดังนั้นจึงต้องนำค่าคลาดเคลื่อนที่ได้จากภาพถ่าย $\Delta \left[\sin^2 \theta / \lambda^2 \right] \zeta_i$ ซึ่งได้จากซิลิกอนมาแก้โดยการหักลบกันก็จะได้ $\left[\sin^2 \theta / \lambda^2 \right]_{\text{cal}1}$ ซึ่งเป็นค่าที่ถูกต้องออกมา จากนั้นก็เริ่มใช้สมการ (3.7) คำนวณค่าคงที่ของโครงผลึก (a', c') ซึ่งเป็นค่าอย่างหยาบ ๆ

$$\frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2} = \frac{1}{4} \left[\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \right] \quad (3.7)$$

โดยการแทนค่า $\left[\sin^2 \theta / \lambda^2 \right]_{\text{cal}1}$ และดัชนีมิลเลอร์จากระนาบ (220) ลงไปในสมการนี้ก็จะได้ค่าคงที่ของโครงผลึก (a') ออกมา ในทำนองเดียวกันถ้าแทนค่าจากระนาบ (008) ลงไปก็จะได้ c' ออกมา ค่าคงที่ของโครงผลึก (a', c') นี้จะใช้เป็นข้อมูลในการหาตำแหน่งระนาบต่าง ๆ ของสารที่ทดลอง $\left[\sin^2 \theta / \lambda^2 \right]_{\text{cal}2}$ ซึ่งมีค่าอย่างหยาบ ๆ โดยการแทน a', c' และดัชนีมิลเลอร์ (h, k, l) ของระนาบที่ต้องการลงไปในสมการ (3.7) ก็จะได้ $\left[\sin^2 \theta / \lambda^2 \right]_{\text{cal}2}$ ของระนาบต่าง ๆ ออกมา เมื่อนำตำแหน่งของระนาบเหล่านี้ $\left(\left[\sin^2 \theta / \lambda^2 \right]_{\text{cal}2} \right)$ มาเปรียบเทียบกับตำแหน่งที่เคยหาไว้อย่างหยาบ ๆ แล้วในหัวข้อที่ 5.2.4 ก็สามารถบอกได้ว่าตำแหน่งระนาบที่ถูกต้องเป็นอย่างไร ถ้าตำแหน่งของระนาบที่ได้จากการหาทั้งสองกรณีตรงกันแสดงว่าพอจะเป็นตำแหน่งที่ถูกต้องได้ ถ้าปรากฏว่าตำแหน่งของระนาบที่ได้เกิดสลับที่กันก็ให้สลับที่เสียใหม่โดยให้ถือว่าตำแหน่งของระนาบในกรณีหลังนี้เป็นค่าที่ถูกต้องมากกว่า เมื่อหาตำแหน่งของระนาบต่าง ๆ เรียบร้อยแล้วก็เริ่มคำนวณค่าคงที่ของโครงผลึกที่ถูกต้องโดยใช้สมการ (5.1) และ (5.2) ข้างล่างนี้ต่อไป รายละเอียด

$$A = \frac{1}{4a^2} = \frac{\Sigma \left[\frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2} \right]_{\text{cal}1} \Sigma \left[l^2 (h^2 + k^2) \right] - \Sigma \left[(h^2 + k^2) \frac{\sin^2 \theta_{\text{cal}1}}{\lambda^2} \right] \Sigma l^2}{\Sigma (h^2 + k^2) \Sigma \left[l^2 (h^2 + k^2) \right] - \Sigma (h^2 + k^2)^2 \Sigma l^2} \quad (5.1)$$

$$C = \frac{1}{4c^2} = \frac{\Sigma \left[\frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2} \right]_{\text{cal}1} \Sigma (h^2 + k^2)^2 - \Sigma \left[(h^2 + k^2) \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2} \text{cal}1 \right] \Sigma (h^2 + k^2)}{\Sigma l^2 \Sigma (h^2 + k^2)^2 - \Sigma \left[l^2 (h^2 + k^2) \right] \Sigma (h^2 + k^2)} \quad (5.2)$$

เกี่ยวกับการพิสูจน์สมการทั้งสองให้ดูในภาคผนวก ข. การคำนวณนี้เริ่มจากการคำนวณพารา มิเตอร์ต่าง ๆ ที่ปรากฏอยู่ในสมการ (5.1) และ (5.2) แล้วแทนค่าลงไปก็จะได้ค่าคงที่ ของโครงผลึกที่ถูกต้องออกมา ในบางครั้งพบว่าตำแหน่งของระนาบต่าง ๆ ที่เคยหาไว้โดย การแทน a' , c' ลงในสมการ (3.7) นี้อาจเกิดสลับที่กันก็ได้ เพื่อความมั่นใจจึงได้ หาตำแหน่งของระนาบที่ถูกต้องอีกครั้งหนึ่งโดยการแทน a , c ที่ถูกต้องนี้ลงในสมการ (3.7) แล้วนำตำแหน่งที่ถูกต้อง เหล่านี้ $([\sin^2\theta/\lambda^2]_{\text{cal}3})$ มาเปรียบกับตำแหน่งที่เคยหาไว้ อย่างหายาบ ๆ นี้ $([\sin^2\theta/\lambda^2]_{\text{cal}1})$ ถ้าปรากฏว่าเกิดสลับที่กันให้ตัดข้อมูลของระนาบ นั้นทิ้งไปแล้วย้อนกลับไปคำนวณ a , c ที่ถูกต้องโดยใช้สมการ (5.1) และ (5.2) อีก ครั้งหนึ่งจนกว่าจะได้ตำแหน่งของระนาบของทั้งสองกรณีตรงกันหมดจึงจะได้ค่าคงที่ของโครงผลึก ที่ถูกต้องได้ แต่ถ้าตำแหน่งของระนาบที่ได้จากการแทนค่า a , c ที่ถูกต้องลงในสมการ (5.1) และ (5.2) นี้ตรงกับตำแหน่งเดิมก็แสดงว่าตำแหน่งดังกล่าวมีความถูกต้องและค่าคงที่ของ โครงผลึกนี้จะ เป็นข้อมูลที่ใช้จึงถือ ได้ซึ่งได้แสดงรายละเอียดไว้แล้วในตารางที่ 5-3 ข้างล่าง

สัดส่วน อะตอม (z)	สาร $\text{AgGa}_2(1-z)\text{Se}_{2z}$	$a(\text{\AA})$	$c(\text{\AA})$	$\frac{c}{a}$
0.0	AgGaTe_2	6.3260	11.9937	1.896
0.2	$\text{AgGaTe}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$	6.2484	11.7609	1.882
0.4	$\text{AgGaTe}_{1.2}\text{Se}_{0.8}$	6.1908	11.5196	1.861
0.6	$\text{AgGaTe}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$	6.1182	11.2983	1.847
0.8	$\text{AgGaTe}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$	6.0376	11.0761	1.835
0.9	$\text{AgGaTe}_{0.2}\text{Se}_{1.8}$	6.0050	11.0214	1.835
1.0	AgGaSe_2	5.9884	10.8823	1.817

ตารางที่ 5-3 แสดงผลค่าคงที่ของโครงผลึกของโลหะผสมกึ่งตัวนำ

$\text{AgGaTe}_2(1-z)\text{Se}_{2z}$ ที่ทดลองได้

5.3 การหาช่องว่างแถบพลังงาน

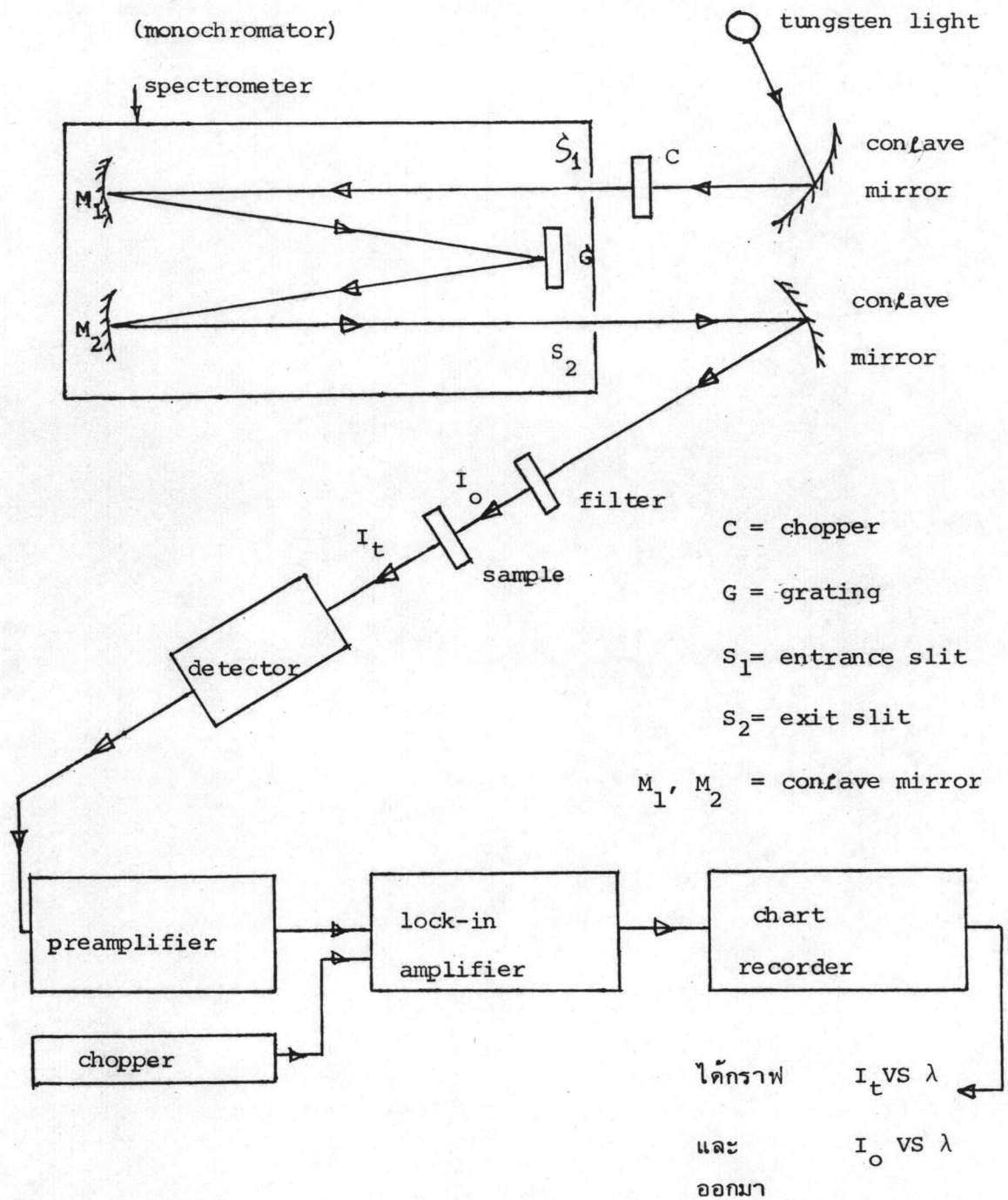
เมื่อสารที่เตรียมได้จากหัวข้อที่ 5.1 ผ่านการศึกษาด้วยรังสีเอ็กซ์ในหัวข้อที่ 5.2 แล้วก็นำไปหาช่องว่างของแถบพลังงานโดยวิธีการดูดกลืนแสงซึ่งเป็นวิธีที่เคยกล่าวไว้ในบทที่ 4 แล้ว การทดลองนี้มี 4 ขั้นตอนด้วยกันโดยเริ่มจากการนำสารดังกล่าวมาตัดให้เป็นแผ่นบาง ๆ แล้วขัดให้บางและเรียบ เราทราบจากบทที่ 4 ว่าการศึกษาผลึกโดยวิธีการดูดกลืนแสงจะได้ข้อมูลที่ใช่หาช่องว่างแถบพลังงานได้ ดังนั้น จึงได้นำสารที่มีลักษณะบาง ๆ นี้ไปศึกษาการดูดกลืนแสงด้วย เครื่องวัดการดูดกลืนแสง การศึกษานี้ทำได้โดยปล่อยแสง เอกเรงค์ ให้ตกกระทบสารบาง ๆ จะมีแสงส่วนหนึ่งสะท้อนกลับและอีกส่วนหนึ่งจะทะลุผ่านผลึกแสดงว่าผลึกได้ดูดกลืนแสงไปบางส่วน จากการแทนค่าความเข้มของแสงตกกระทบ, ความเข้มของแสงทะลุผ่านและความหนาของสารลงไปในสมการ (4.5) ก็จะได้สัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงออกมา สัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงนี้มีความสัมพันธ์กับช่องว่างของแถบพลังงานตามสมการ (4.10) ทำให้สามารถหาช่องว่างของแถบพลังงานได้

5.3.1 การเตรียมสาร

การเตรียมสารนี้เริ่มด้วย การใช้ เครื่องตัดซึ่งทำด้วยคาร์โบรอนตัดสารให้บางประมาณ 1mm นำสารที่มีลักษณะบางนี้มาขัดให้บางเหลือประมาณ 0.1 ถึง 0.3 mm ด้วยเครื่องขัด เป็นระยะเวลาประมาณ 4 ชั่วโมง ในขณะที่ขัด หยอดผงอาลูมินาขนาด 0.1 μm ที่ผสมน้ำลงไปด้วย เพื่อให้สารบางและเรียบ การขัดสารให้บางเพื่อให้สังเกตขอบการดูดกลืนพื้นฐาน (fundamental absorption edge) ได้ง่ายขึ้นและช่องว่างของแถบพลังงานที่หาได้จะมีความถูกต้องมากขึ้น สารที่ใช้มีเส้นผ่านศูนย์กลางประมาณ 2 ถึง 4mm นำสารนี้ไปศึกษาคุณสมบัติทางแสงต่อไป

5.3.2 การวัดความเข้มของแสงตกกระทบและทะลุผ่านผลึกที่ความยาวคลื่นแสงค่าต่าง ๆ ^{1,2}

การวัดความเข้มของแสงตกกระทบและทะลุผ่านผลึก เริ่มด้วยการนำสารที่มีลักษณะบาง ๆ ที่เตรียมไว้ ไปยึดติดกับที่ยึดสาร (sample holder) แล้วนำไปติดตั้งในตัวเครื่องวัดการดูดกลืนแสง เพื่อวัดความเข้มดังกล่าว แผงผังสำหรับการวัดการดูดกลืนแสงและระบบการตรวจวัดได้แสดงไว้ในรูปที่ 5.7 จากรูปพบว่า เมื่อปล่อยแสงทั้งสแตนด์ซึ่งแผ่คลื่น



รูปที่ 5.7 แสดงแผนผังสำหรับการวัดการดูดกลืนแสงและระบบการตรวจวัด

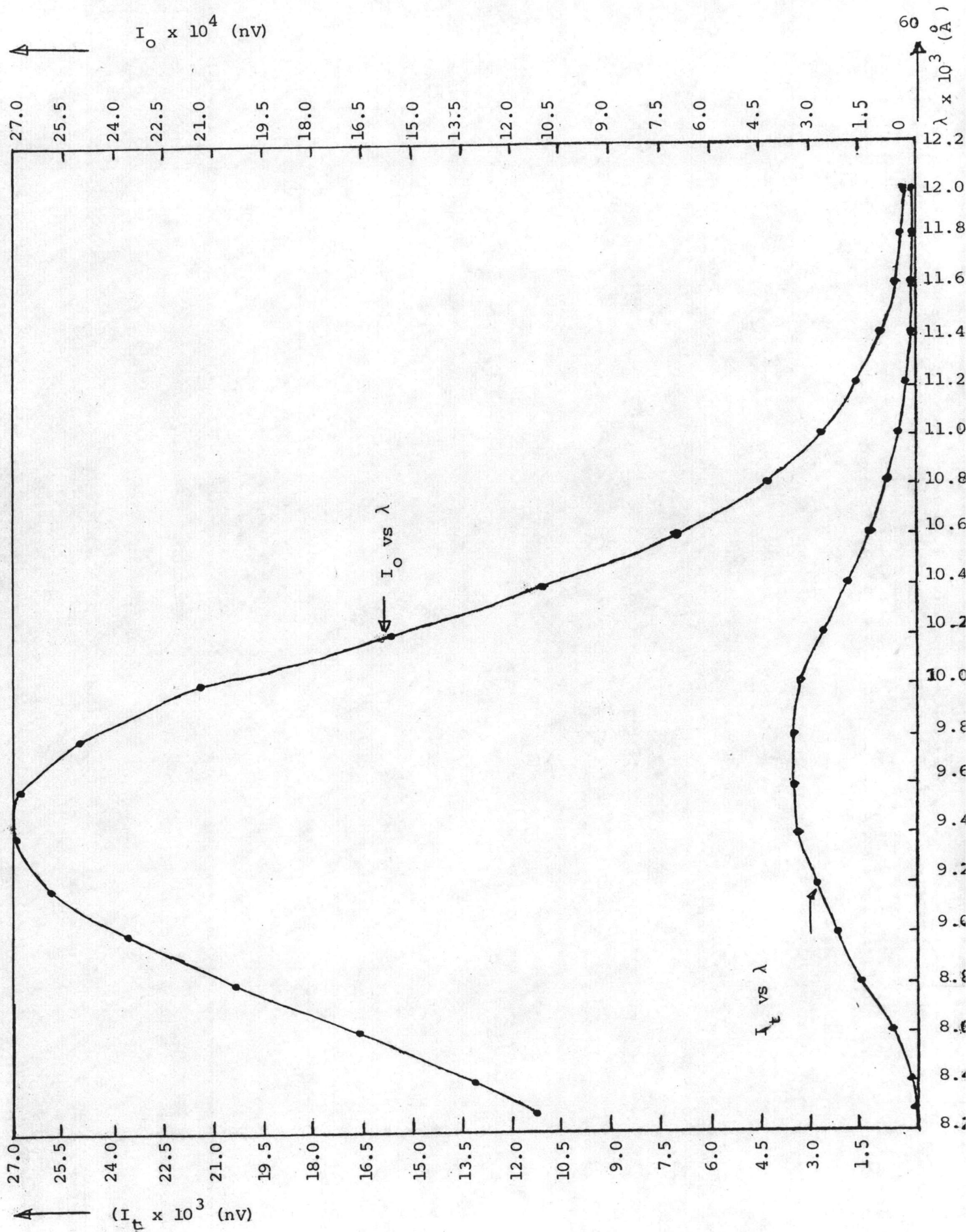
ในย่านอินฟราเรดและที่มองเห็นได้ให้ตกกระทบกระจกเว้า กระจกเว้าจะสะท้อนแสงให้ตกกระทบตัวตัดแสง (chopper) ตัวตัดแสงจะยอมให้แสงผ่านเป็นพัลส์ (pulse) แสงที่เป็นพัลส์จะผ่านสลิตทางเข้า (entrance slit) และถูกสะท้อนด้วยกระจกเว้า M_1

แล้วเข้าตกกระทบบเกรตติง (grating) เกรตติงจะสร้างสเปกตรัมในย่านความถี่ของแสงที่มองเห็นได้และอินฟราเรด เมื่อแสงที่มีความยาวคลื่นค่าใดตรงกับสลิตทางออก (exit slit) แสงนั้นก็จะถูกสะท้อนด้วยกระจกเว้า M_2 และออกจากสเปกโตรมิเตอร์ (spectrometer) ทางสลิตนี้ได้กลายเป็นแสงเอกรงค์ (monochromatic light) แสงเอกรงค์จะเข้าตัวกรองแสง (filter) เพื่อกรองแสงที่มองเห็นอันดับที่สอง (second order visible light) ออก แล้วเข้าตกกระทบบสารทคลองที่บาง ๆ นี้ด้วยความเข้มตกกระทบบ (I_0) แสงส่วนหนึ่งจะสะท้อนกลับด้วยความเข้มสะท้อนกลับ (I_r) ส่วนแสงที่เหลืออีกส่วนหนึ่งจะทะลุผ่านผลึกด้วยความเข้มทะลุผ่าน (I_t) แสงที่มีความเข้ม I_t เข้าดีเทคเตอร์ (detector) ดีเทคเตอร์จะเปลี่ยนแสงให้เป็นสัญญาณไฟฟ้า ปริแอมพลิไฟเออร์ (pre-amplifier) จะขยายสัญญาณให้โตขึ้นแล้วส่งให้ล็อกอินแอมพลิไฟเออร์ (lock-in amplifier) ล็อกอินแอมพลิไฟเออร์จะขยายสัญญาณเฉพาะที่มีความถี่เดียวกันกับความถี่ของตัวตัดแสงเท่านั้นเพื่อกำจัดสัญญาณกวนและยังวัดความเข้มของแสงด้วย สัญญาณที่ออกมาจะถูกบันทึกด้วยเครื่องบันทึกแผนภูมิ (chart recorder) จากแผนภูมิ (chart) ที่ได้ดังแสดงในรูปที่ 5.8 ทำให้ทราบความเข้ม I_t ที่ความยาวคลื่นแสง (λ) ค่าต่าง ๆ เมื่อวัดความเข้ม I_t แล้วให้ถอดสารที่บาง ๆ นี้ออกมาและนำมาวัดความหนาด้วยไมโครมิเตอร์ ในทำนองเดียวกันก็สามารถวัดความเข้ม I_0 ที่ความยาวคลื่นแสงค่าต่าง ๆ ได้ดังแสดงในรูปที่ 5.8 ความเข้มของแสงตกกระทบบและทะลุผ่านรวมทั้งความหนาของสารจะเป็นข้อมูลในการคำนวณสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงตลอดจนการหาช่องว่างของแถบพลังงานได้

5.3.3 การคำนวณสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสง

จากหัวข้อที่ 4.3 ทำให้ทราบว่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงที่วัดได้ (α) นี้มีความสัมพันธ์กับความเข้ม I_0 ความเข้ม I_t และความหนาของสาร (d) ดังสมการ

$$I_t = I_0 e^{-\alpha d} \quad (4.5)$$



รูปที่ 5.8 แสดงความเข้มของแสงตกกระทบบและทะลุผ่านที่ความยาวคลื่นแสงค่าต่าง ๆ ของ

ดังนั้นถ้าแทนค่า I_t , I_0 และ d ที่ได้จากการทดลองการดูดกลืนแสงในหัวข้อที่ 5.3.2 ลงไปในสมการ (4.๕) ก็จะได้สัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงที่วัดได้ (α) ที่พลังงานแสง ($h\nu$) ค่าต่าง ๆ เมื่อเขียนกราฟก็จะได้ความสัมพันธ์ระหว่าง α กับ $h\nu$ ออกมาดังแสดงในรูปที่ 5.9 และ 5.14 จากรูปจะเห็นว่าในกรณีที่สารหนาเท่ากันสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงที่วัดได้ของสารแต่ละชนิดมีค่าไม่เท่ากัน เป็นผลทำให้ความเข้มของแสงทะลุผ่านต่างกันด้วย สาเหตุที่เป็นเช่นนี้ก็เพราะปริมาณของพาหะอิสระ (free carriers) ภายในสารแต่ละชนิดต่างกันนั่นเอง ในกรณีที่แสงทะลุผ่านสารน้อย สัญญาณรบกวนที่เกิดขึ้นจะมีความเข้มของแสงทะลุผ่านเกิดการออสซิลเลท (oscillation) ซึ่งจะเป็นผลทำให้สังเกตขอบการดูดกลืนพื้นฐานยากขึ้น จากทฤษฎีในหัวข้อที่ 4.4 พบว่าภายในผลึกมีความบกพร่อง (crystal defects) ทำให้มีสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงพื้นหลังเกิดขึ้น สัมประสิทธิ์นี้มีค่าเกือบคงที่ในช่วงพลังงานค่าต่ำช่วงหนึ่งซึ่งต่ำกว่าช่องว่างของแถบพลังงาน พลังงานแสงที่ต่ำกว่าช่องว่างของแถบพลังงานนี้ไม่สามารถทำให้อิเล็กตรอนย้ายสถานะพลังงานจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบการนำได้ ดังนั้นสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงพื้นหลังนี้จึงเป็นปริมาณทางฟิสิกส์ที่ไม่มีความเกี่ยวข้องกับช่องว่างแถบพลังงานและจะต้องนำไปหัก ลบกับสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงที่วัดได้ จึงจะได้สัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสง ($\alpha - \alpha_0$) ซึ่งเป็นปริมาณที่มีความสัมพันธ์กับช่องว่างแถบพลังงานโดยตรงและ α_0 นี้สามารถหาได้จากกราฟรูปที่ 5.9 และ 5.14 โดยการลากเส้นตรงต่อจากส่วนของเส้นโค้งตรงบริเวณที่มีค่าเกือบคงที่ นอกจากนั้นความหนาของสารก็มีผลต่อการทะลุผ่านของแสงมากน้อยได้ด้วย เมื่อพิจารณารูป 5.9 และ 5.14 พบว่าในกรณีที่พลังงานแสงมีค่าต่ำกว่าช่องว่างของแถบพลังงานสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงของ $\text{AgGaTe}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$ จะมีค่าเพียงเบนมากกว่าของ $\text{AgGaTe}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$ การที่สัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงมีค่าเพียงเบนมากกว่านั้นทำให้การลากเส้นตรงเพื่อหา α_0 นั้นมีความคลาดเคลื่อนมากเป็นผลทำให้ช่องว่างของแถบพลังงานที่ได้คลาดเคลื่อนไปด้วย ปริมาณ ($\alpha - \alpha_0$) และ $h\nu$ ที่ได้จะเป็นข้อมูลสำหรับหาช่องว่างของแถบพลังงานต่อไป

5.3.4 การหาช่องว่างของแถบพลังงาน

จากทฤษฎีในหัวข้อที่ 4.4 พบว่าช่องว่างของแถบพลังงาน (E_g) มีความสัมพันธ์กับสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงที่วัดได้ (α), สัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงพื้นหลัง (α_0) และพลังงานแสง ($h\nu$)

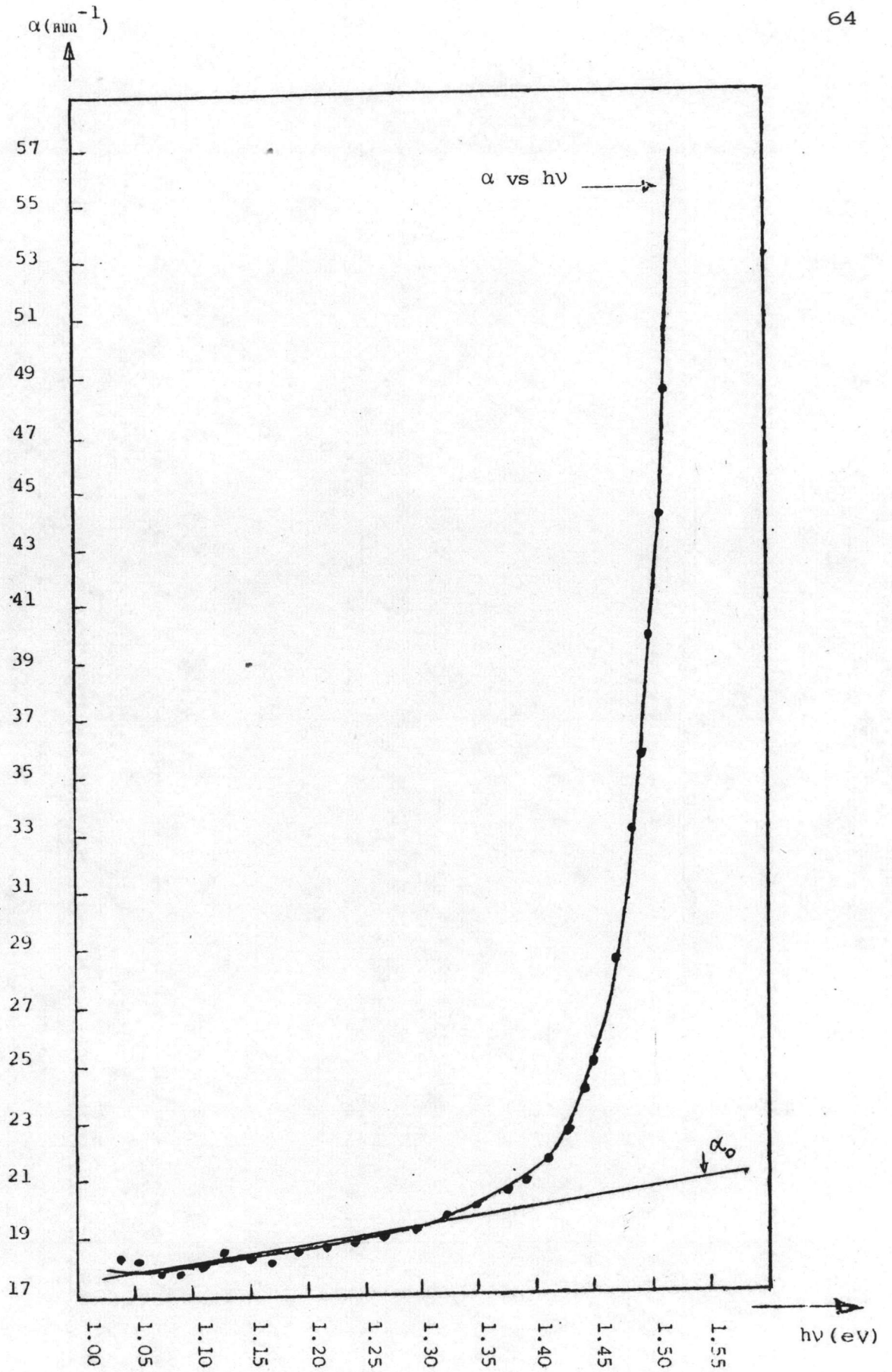
ได้ 2 แบบ ซึ่งได้แก่กรณีการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบการนำแบบตรงและแบบเฉียงดังแสดงในสมการที่ (4.10) และ (4.11) ตามลำดับ

$$h\nu - E_g \propto \alpha \left[h\nu(\alpha - \alpha_0) \right]^2 \quad (4.10)$$

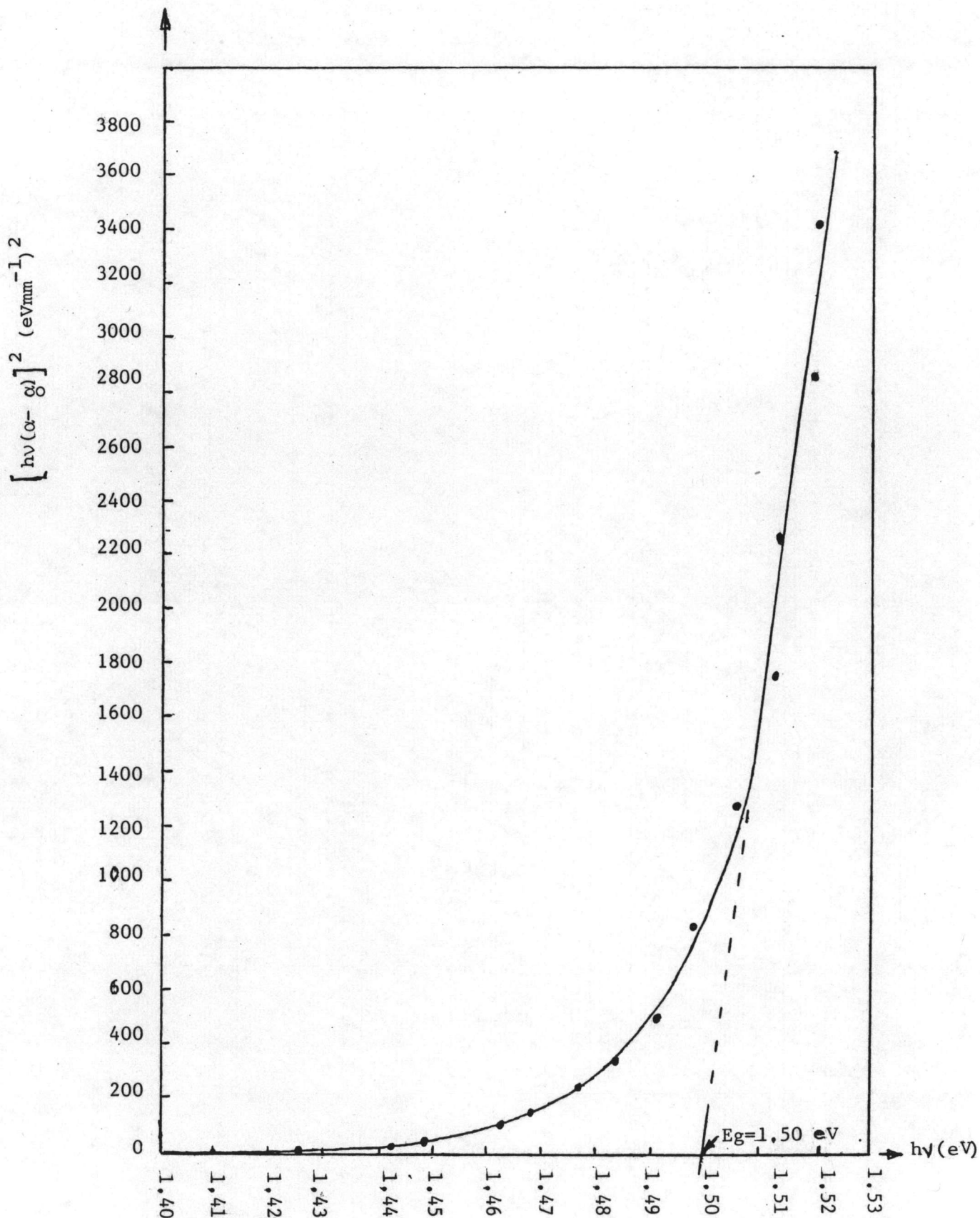
$$h\nu - E_g \propto \alpha \left[h\nu(\alpha - \alpha_0) \right]^{1/2} \quad (4.11)$$

จากการทดลองถ้าแทนค่า $(\alpha - \alpha_0)$ และ $h\nu$ ลงในสมการ (4.10) แล้วเขียนกราฟที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $\left[h\nu(\alpha - \alpha_0) \right]^2$ กับ $h\nu$ จะได้ดังรูปที่ 5.10 และ 5.15 จากรูปทั้งสองพบว่าถ้าลากเส้นตรงต่อจากส่วนของกราฟบริเวณที่มีการเรียงตัวของจุดในลักษณะที่เกือบเป็นเส้นตรงให้ตัดแกนพลังงานแสงจะได้ช่องว่างแถบพลังงานของ $\text{AgGaTe}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$ และ $\text{AgGaTe}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$ ซึ่งมีค่า 1.50 และ 1.41 eV ตามลำดับ นอกจากนั้นยังได้เขียนกราฟของความสัมพันธ์ระหว่าง α กับ $h\nu$ จากรูป 5.9 และระหว่าง $\left[h\nu(\alpha - \alpha_0) \right]^2$ กับ $h\nu$ จากรูป 5.10 ไว้ในรูปเดียวกันดังแสดงในรูป 5.11 หรือ จากรูป 5.14 รวมกับ รูป 5.15 ได้รูป 5.16 เพื่อที่จะพิจารณาว่าข้อมูลดังกล่าวปรับเข้ากับสมการ (4.10) สำหรับกรณีการย้ายสถานะพลังงานแบบตรงหรือไม่ ในทำนองเดียวกับได้แทน $(\alpha - \alpha_0)$ และ $h\nu$ ลงในสมการ (4.11) แล้วเขียนกราฟที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $\left[h\nu(\alpha - \alpha_0) \right]^2$ กับ $h\nu$ ดังรูป 5.12 และเขียนกราฟรูป 5.9 ลงในรูปเดียวกันดังแสดงในรูป 5.13 เพื่อที่จะพิจารณาว่าข้อมูลดังกล่าวปรับเข้ากับสมการ (4.11) สำหรับกรณีการย้ายสถานะพลังงานแบบเฉียงหรือไม่ และได้แทน $(\alpha - \alpha_0)$ และ $h\nu$ ลงในสมการ (4.11) ได้รูป 5.17 แล้วเขียนกราฟรูป 5.17 และ 5.14 ลงในรูปเดียวกันจะได้ดังรูป 5.18 แล้วก็พิจารณาว่าข้อมูลดังกล่าวปรับเข้ากับสมการ (4.11) จะได้หรือไม่ จากการเขียนกราฟทั้งสองกรณีพบว่าข้อมูลสามารถปรับเข้ากับสมการ (4.10) ได้เหมาะสมกว่าสมการ (4.11) เป็นการแสดงว่าโลหะผสมกึ่งตัวนำที่ศึกษามีการย้ายสถานะพลังงานแบบตรงและโครงสร้างแถบพลังงานแบบตรง เมื่อพิจารณารูป 5.11 และ 5.16 พบว่าเมื่อพลังงานแสงที่ผ่านเข้าไปในสารมีค่าเท่ากับหรือมากกว่าช่องว่างของแถบพลังงานทำให้สัมประสิทธิ์การดูดกลืนเริ่มมีค่าเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็ว การที่สัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงมีค่าเพิ่มขึ้นนั้นแสดงว่าสารได้ดูดกลืนแสงที่มีพลังงานเท่ากับ หรือมากกว่าช่องว่างของแถบพลังงานดังนั้นช่องว่างแถบพลังงานที่ได้จากรูป 5.11 และ 5.16 จะมีค่าถูกต้อง สำหรับรูป 5.13 และ 5.18 เมื่อพิจารณาช่องว่างของแถบพลังงานที่ได้พบว่าเมื่อพลังงานแสงมีค่าเท่ากับ หรือมากกว่าช่องว่างของแถบพลังงานทำให้สัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงมีค่าไม่เพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็วแสดงว่าพลังงานแสงดังกล่าวมีค่าไม่เพียงพอที่จะทำให้

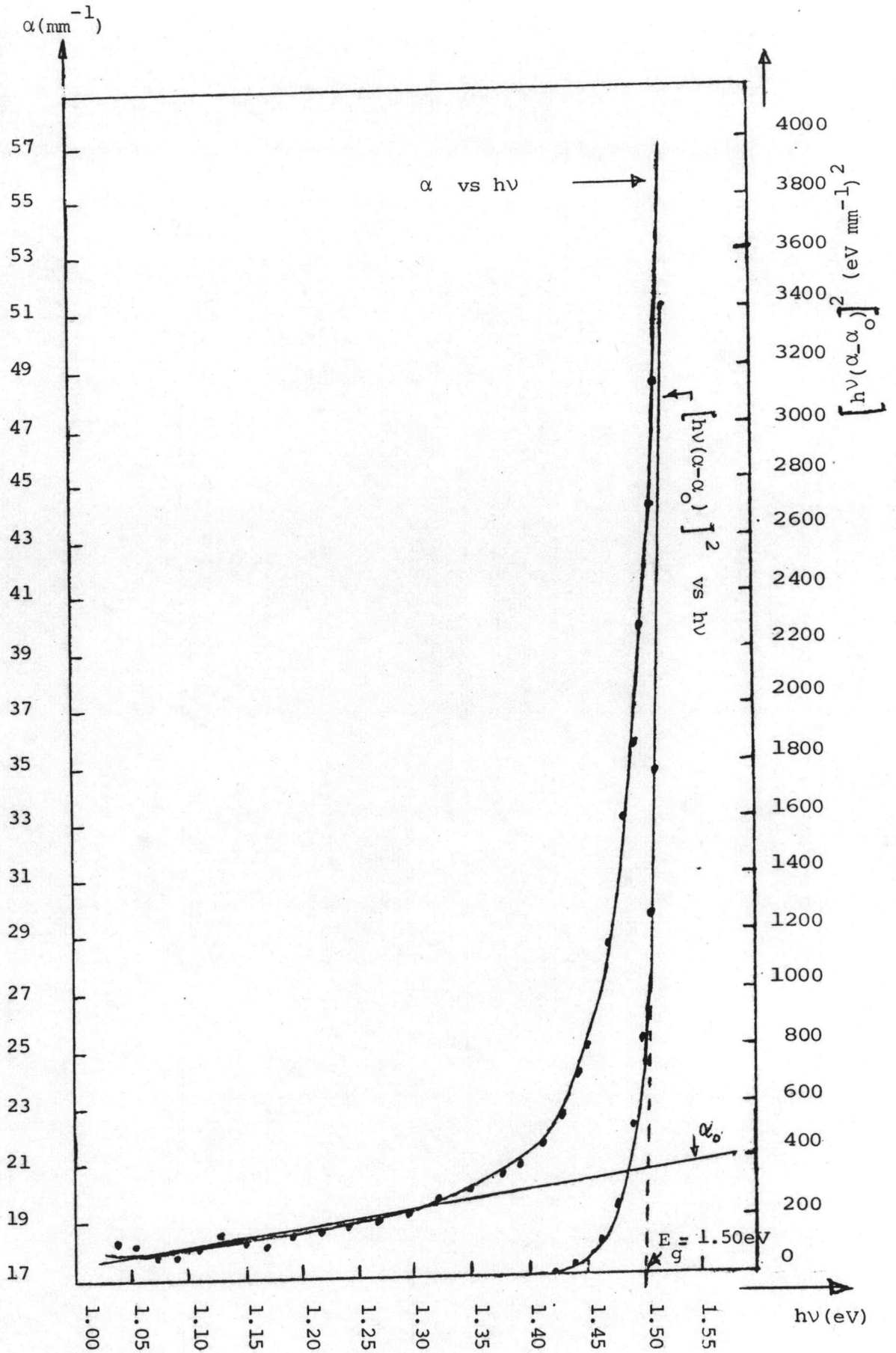
เกิดการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนหรือกล่าวอีกนัยหนึ่งช่องว่างของแถบพลังงานที่ได้มีค่าต่ำกว่าความเป็นจริงดังรูปทั้งสอง จากเหตุผลนี้แสดงว่าข้อมูลที่ได้อาจไม่สามารถปรับอย่างเหมาะสมเข้ากับสมการ (4.11) เป็นการแสดงว่าโลหะผสมกึ่งตัวนำกลุ่มนี้ไม่มีการย้ายสถานะพลังงานแบบเฉียง และโครงสร้างแถบพลังงานไม่เป็นแบบเฉียง จากการศึกษาคุณสมบัติการดูดกลืนแสงนี้จะเห็นว่าสามารถนำข้อมูลต่าง ๆ มาวิเคราะห์ลักษณะการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนและ โครงสร้างแถบพลังงานว่าเป็นแบบตรงหรือแบบเฉียงได้ ข้อมูลต่าง ๆ เกี่ยวกับช่องว่างของแถบพลังงานของโลหะผสมกึ่งตัวนำที่ความหนาต่าง ๆ ได้แสดงไว้ในตารางที่ 5-4



รูปที่ 5.9 แสดงสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงของ $\text{AgGaTe}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$

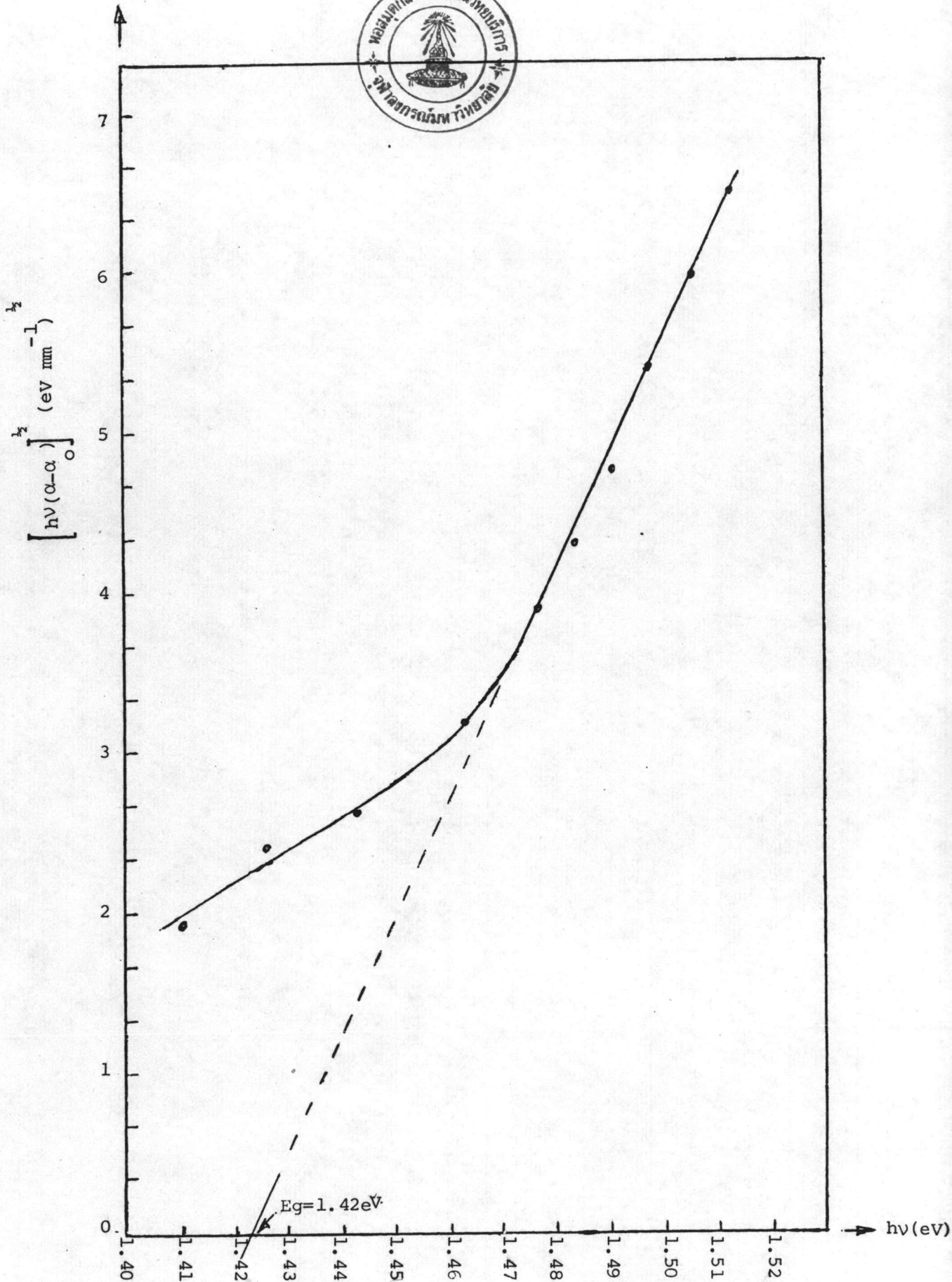


รูปที่ 5.10 แสดงช่องว่างแถบพลังงาน AgGaTe_{0.4}Se_{1.6} เมื่อคิดว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนแบบตรง

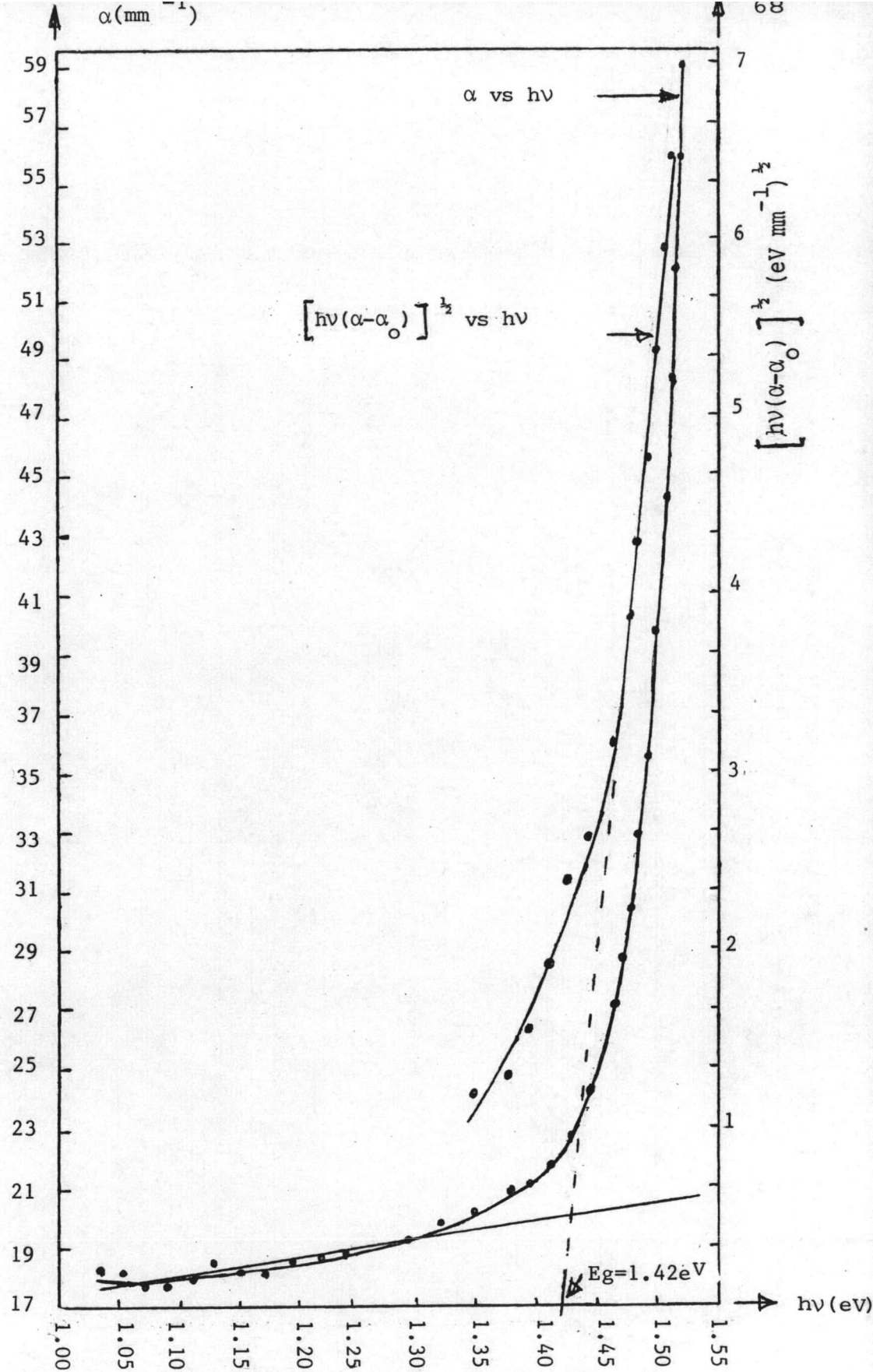


รูปที่ 5.11 แสดงสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงและช่องว่างของแถบพลังงานของ

$\text{AgGaTe}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$ เมื่อคิดว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนแบบตรง

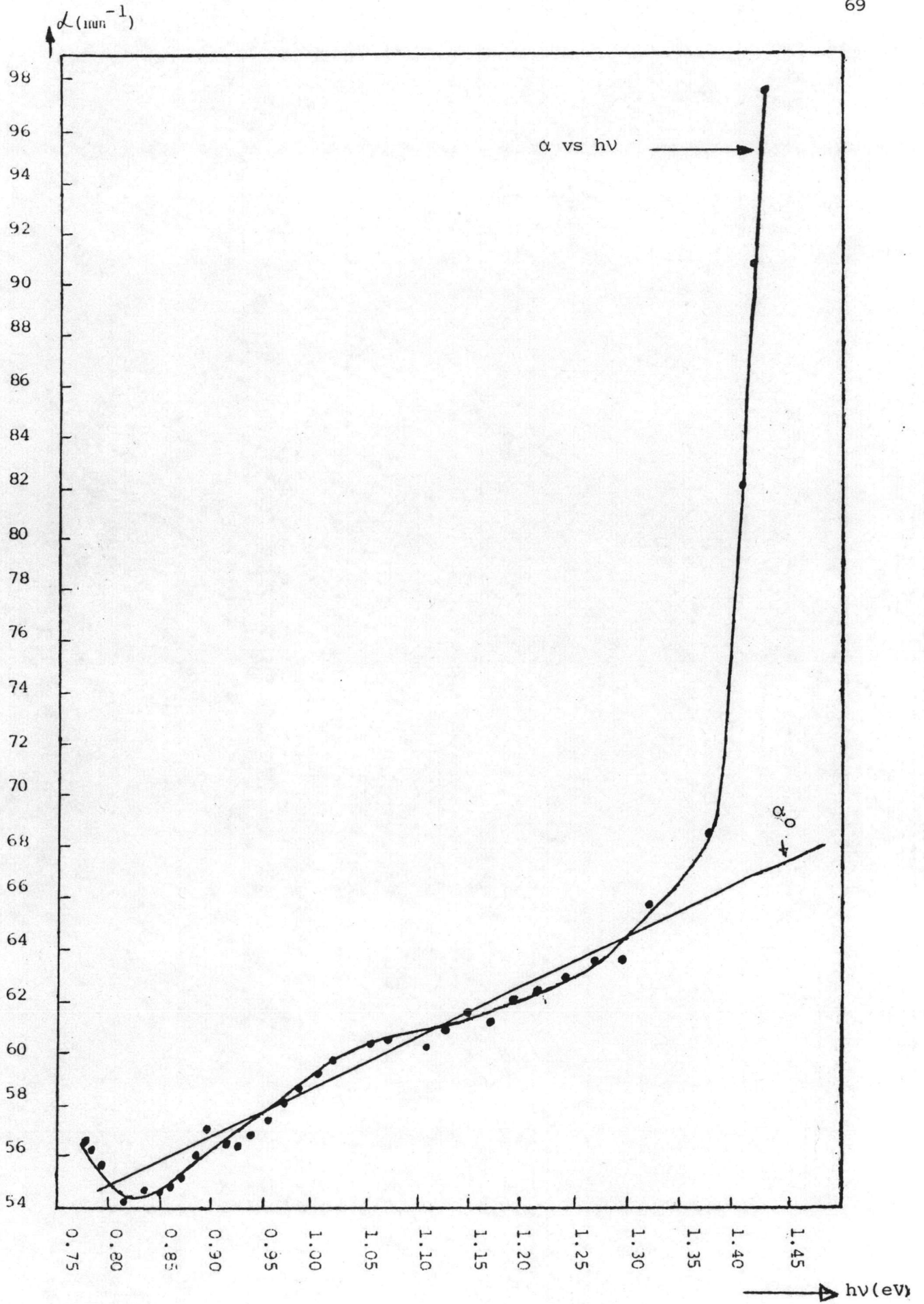


รูปที่ 5.12 แสดงช่องว่างของแถบพลังงานของ $\text{AgGaTe}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$ เมื่อคิดว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนแบบเฉียง



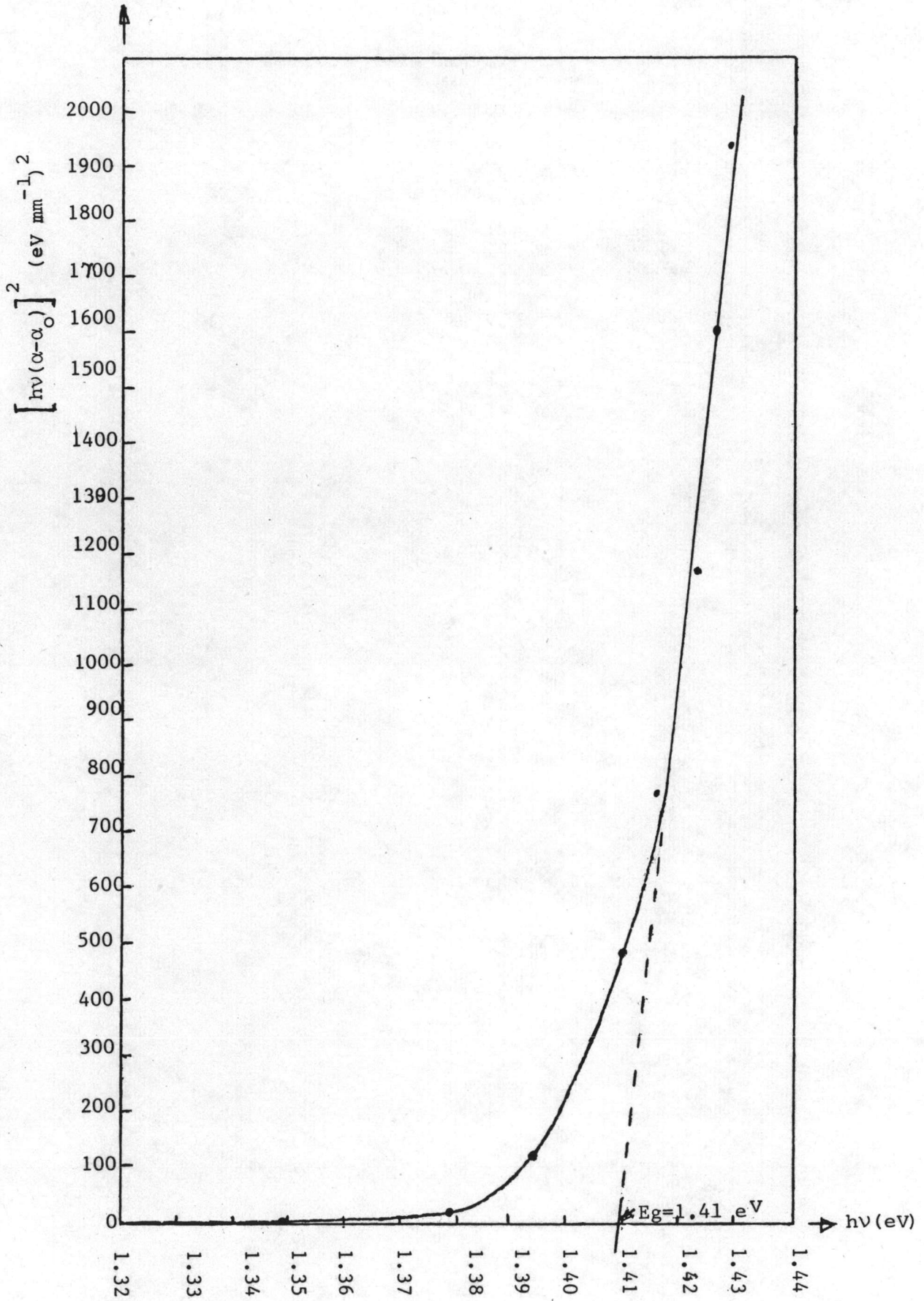
รูปที่ 5.13

แสดงสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงและช่องว่างแถบพลังงานของ $\text{AgGaTe}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$ เมื่อคิดว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานของ อิเล็กตรอนแบบเฉียง



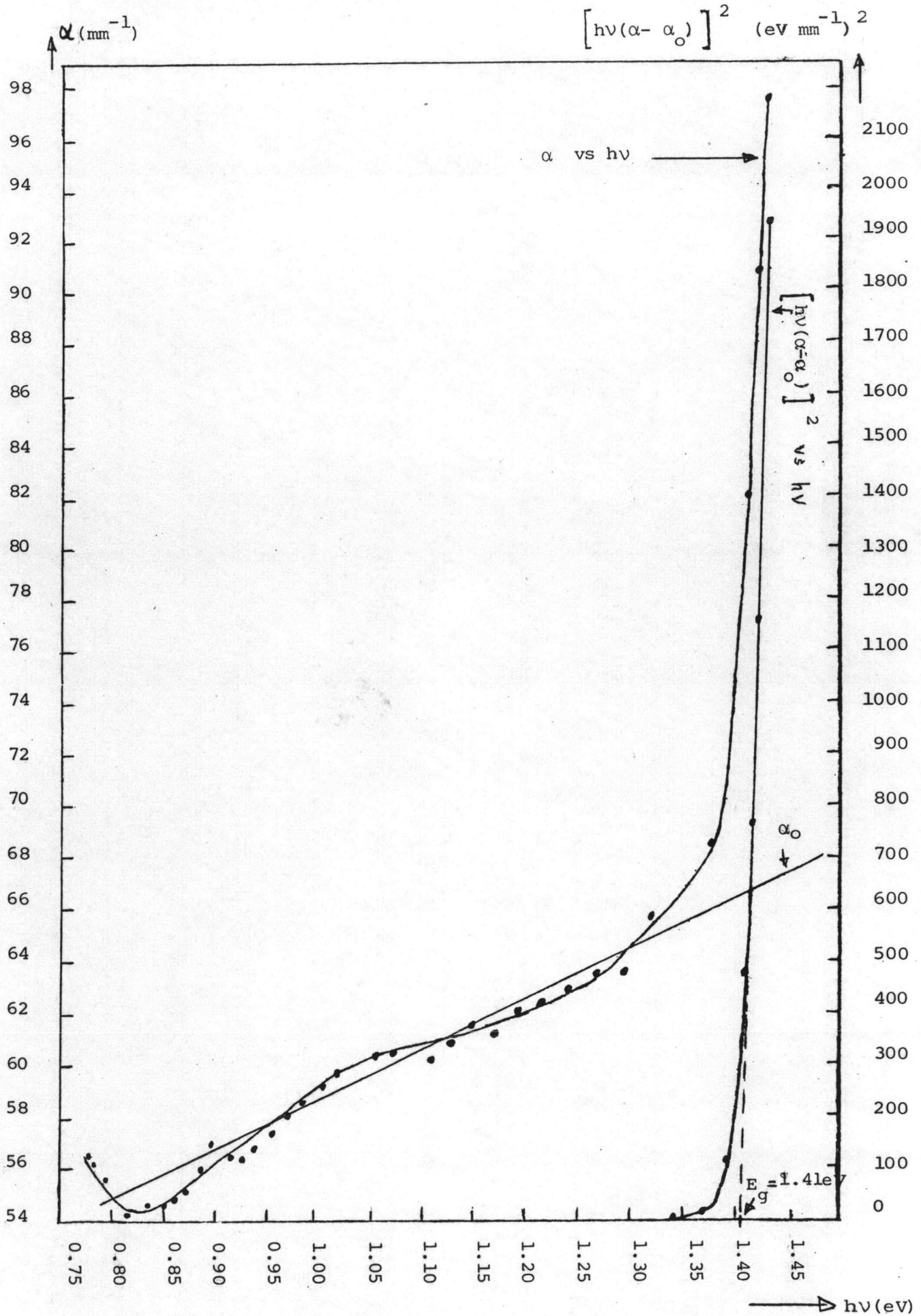
รูปที่ 5.14

แสดงสัมประสิทธิ์ของการดูดกลืนแสง ของ $\text{AgGaTe}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$



รูปที่ 5.15 แสดงช่องว่างแถบพลังงานของ $\text{AgGaTe}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$ เมื่อคิดว่าเป็นการ

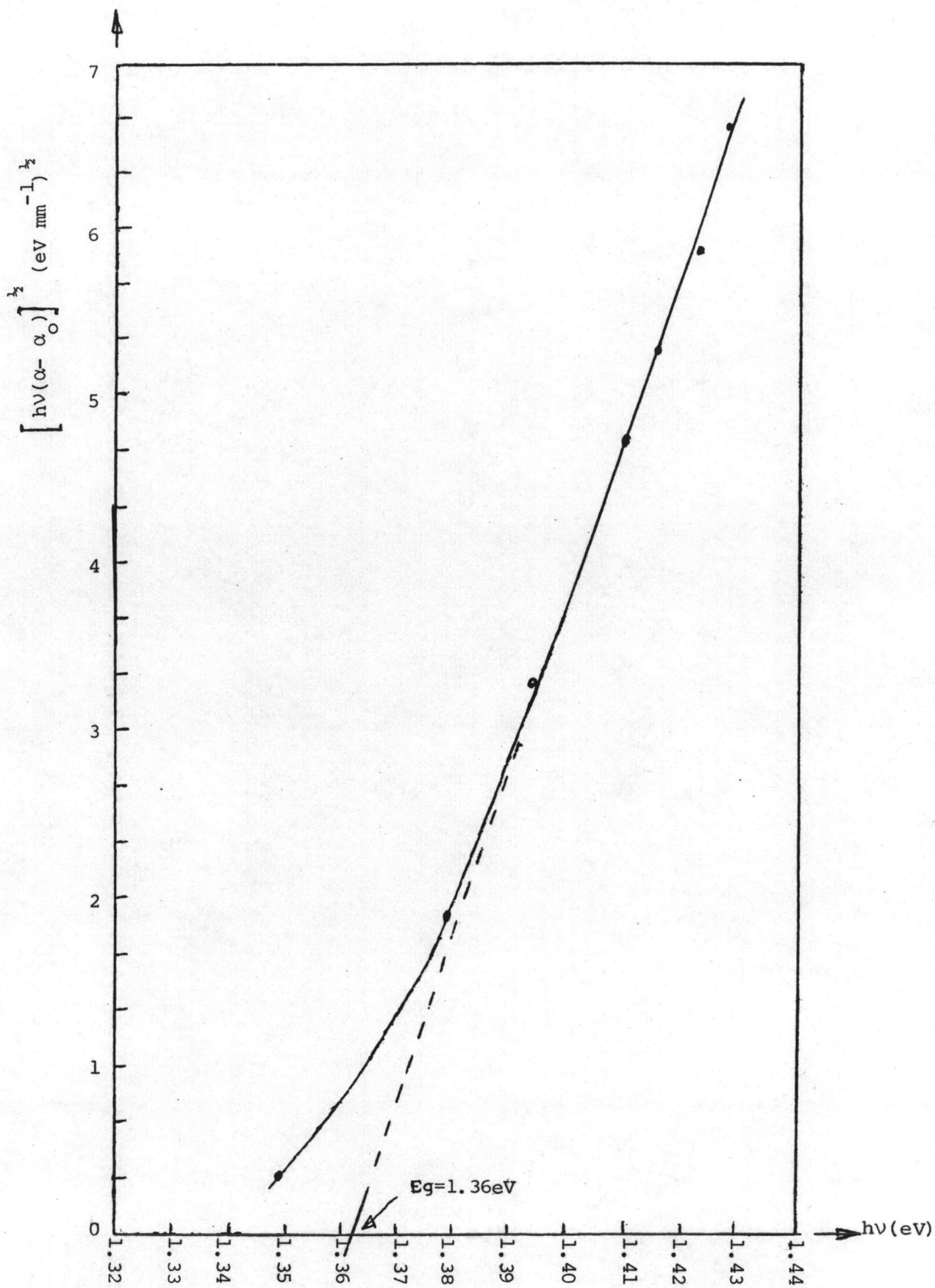
ย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนแบบตรง



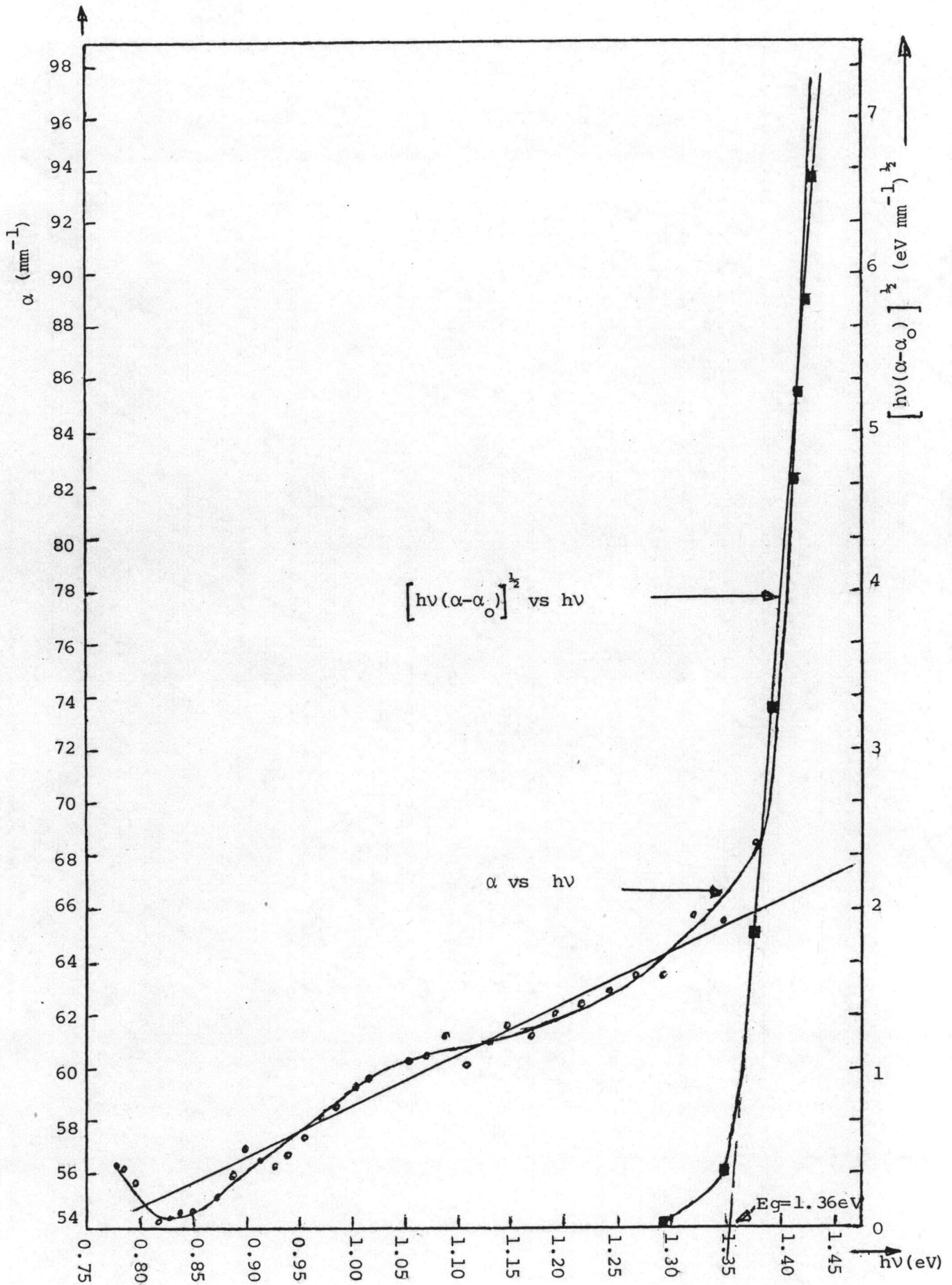
รูปที่ 5.16

แสดงสัมประสิทธิ์ของการดูดกลืนแสงและช่องว่างของแถบพลังงานของ

AgGaTe_{0.8}Se_{1.2} เมื่อคิดว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนแบบตรง



รูปที่ 5.17 แสดงช่องว่างของแถบพลังงานของ $\text{AgGaTe}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$ เมื่อคิดว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนแบบเฉียง



รูปที่ 5.18 แสดงสัมประสิทธิ์การดูดกลืนแสงและช่องว่างของแถบพลังงานของ $\text{AgGaTe}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$ เมื่อคิดว่าเป็นการย้ายสถานะพลังงานของอิเล็กตรอนแบบเฉียด

สัดส่วน อะตอม (z)	สาร $\text{AgGaTe}_{2(1-z)}\text{Se}_{2z}$	วัดครั้งที่ 1		วัดครั้งที่ 2		เฉลี่ยทั้ง 2 ครั้ง $E_g(\text{eV})$	ชนิดของการ ย้ายสถานะพลังงาน
		E_{g1} (eV)	ความหนา (mm)	E_{g2} (eV)	ความหนา (mm)		
0.0	AgGaTe_2	1.130	0.140	1.131	0.225	1.13	แบบตรง
0.2	$\text{AgGaTe}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$	1.239	0.113	1.238	0.203	1.24	"
0.6	$\text{AgGaTe}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$	1.405	0.060	1.401	0.090	1.40	"
0.8	$\text{AgGaTe}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$	1.493	0.232	1.500	0.128	1.50	"
0.9	$\text{AgGaTe}_{0.2}\text{Se}_{1.8}$	1.605	0.181	1.590	0.132	1.60	"
1.0	AgGaSe_2	1.748	0.373	1.750	0.334	1.75	

ตารางที่ 5-4 แสดงผลช่องว่างของแถบพลังงานของโลหะผสมกึ่งตัวนำ

$\text{AgGaTe}_{2(1-z)}\text{Se}_{2z}$ ที่ทดลองได้