

วิธีการทดลองและผลการทดลอง

วิธีการศึกษา โลหะผสมกึ่งตัวนำห้าองค์ผสม  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{2(1-z)}Se_{2z}$  ซึ่งมีการคาดคิดว่าเป็นสารที่ควรมีโครงสร้างพันธะแบบพันธะเชิงสี่ มีโครงสร้างแบบ ซาลโคไฟไรท์ และมีการเปลี่ยนแปลงค่าคงที่โครงสร้างผลึกตามปริมาณ Te และ Se หรือตาม อุณหภูมิในรูปแบบหนึ่ง ดังนั้นในการทดลองก็ต้องเริ่มด้วยการเตรียมสารกลุ่มนี้ขึ้นมาแล้ว ทำการศึกษาค่าคงที่โครงสร้างผลึกตามปริมาณ Te และ Se หรือตามอุณหภูมิต่าง ๆ พร้อมกับทำ การศึกษาโครงสร้างเฉพาะบางตัวที่มีรูปแบบเป็นผลึกเดี่ยวโดยอาศัยความรู้เกี่ยวกับการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ ส่วนรายละเอียดต่าง ๆ ที่เกี่ยวกับการทดลองได้กล่าวไว้ในหัวข้อต่าง ๆ ของบทนี้ ประกอบกับในตอนท้ายของแต่ละหัวข้อได้แสดงผลการทดลองไว้ด้วย

5.1 การเตรียมโลหะผสมกึ่งตัวนำ  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{2(1-z)}Se_{2z}$

ขั้นตอนคร่าว ๆ ของการเตรียมมีดังนี้ เริ่มด้วยการคำนวณน้ำหนักของธาตุต่าง ๆ ที่ต้องใช้ ทำการชั่งให้ได้น้ำหนักตามที่ต้องการ นำธาตุเหล่านั้นบรรจุลงในหลอดแก้วควอทซ์ที่สะอาดนำหลอดที่บรรจุธาตุต่าง ๆ เรียบร้อยแล้วมาทำให้ภายในหลอดเป็นสุญญากาศ ต่อมาจึงทำการหลอมปิดปากหลอด นำหลอดพวกนี้มาบรรจุลงในเตาเพื่อทำการหลอมธาตุต่าง ๆ ที่อยู่ภายในหลอดให้ผสมผสานกัน แล้วลดอุณหภูมิในเตาลงก็ได้สารที่แข็งตัวภายในหลอดแก้วควอทซ์ซึ่งจะถูกนำไปใส่ลงในเตาเพื่อทำการแอนนัล ส่วนรายละเอียดต่าง ๆ นั้น จะกล่าวเป็นข้อ ๆ ไปดังนี้

5.1.1 การคำนวณน้ำหนักของธาตุต่าง ๆ

การเตรียมโลหะผสมกึ่งตัวนำห้าองค์ผสม  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{2(1-z)}Se_{2z}$  ให้สัดส่วนอะตอม z เป็นค่าต่าง ๆ ดังนี้ 0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 และ 1.0 จะได้สารที่เตรียมทั้งหมด 6 สาร คือ  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_2$ ,  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Se_{0.4}Te_{1.6}$ ,  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Se_{0.8}Te_{1.2}$ ,  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Se_{1.2}Te_{0.8}$ ,  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Se_{1.6}Te_{0.4}$  และ  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Se_2$

$\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$ ,  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.2}\text{Se}_{0.8}$ ,  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$ ,  
 $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$  และ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Se}_2$  ตามลำดับ การเตรียม  
 ล้ำารแต่ละล้ำารนั้นเตรียมเพียง 1 กรัม โดยการใช้น้ำหนักอะตอม (atomic weight)  
 มาเทียบบัญญัติไตรยางค์ ได้น้ำหนักของล้ำารต่าง ๆ ในล้ำารแต่ละล้ำารดังต่อไปนี้

ตารางที่ 5.1 ข้อมูลเบื้องต้นของล้ำารต่าง ๆ ที่ต้องใช้

ล้ำาร	น้ำหนักอะตอม	ความบริสุทธิ์ (%)	จุดหลอมเหลว (°C)	จุดเดือด (°C)	ลักษณะของล้ำาร
Ag	107.88	99.99	960.8	2180	โลหะแข็ง, เหนียว, เป็นเม็ดเล็ก ๆ
In	114.82	99.99	156.4	2050	อ่อน, เหนียว, เป็นก้อน
Ga	69.72	99.99	29.8	1980	แข็ง, เหนียว, เป็นก้อน
Te	127.61	99.99	450.0	990	แข็ง, เปราะ, เป็นก้อน
Se	78.96	99.99	220.0	685	เปราะ, สีดำ, เป็นเม็ดเล็ก ๆ

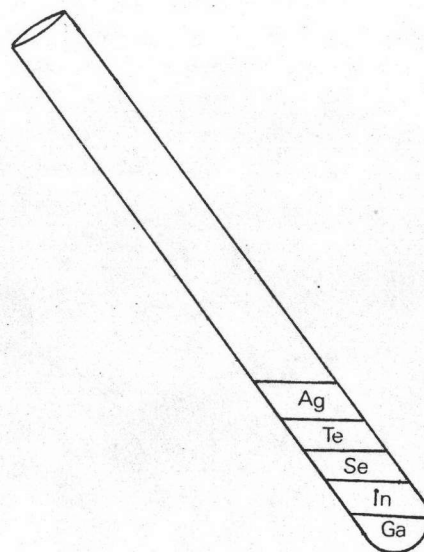
ตาราง 5.2 น้ำหนักของธาตุต่าง ๆ ที่คำนวณได้ ของสารทั้ง 6 ที่ต้องเตรียม  
ซึ่งมีน้ำหนักรวม 1 กรัม

$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_2$		$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$		$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.2}\text{Se}_{0.8}$	
ธาตุ	น้ำหนักธาตุ (กรัม)	ธาตุ	น้ำหนักธาตุ (กรัม)	ธาตุ	น้ำหนักธาตุ (กรัม)
Ag	0.2301	Ag	0.2400	Ag	0.2509
In	0.1959	In	0.2044	In	0.2136
Ga	0.0297	Ga	0.0310	Ga	0.0324
Te	0.5443	Te	0.4543	Te	0.3561
Se	-	Se	0.0703	Se	0.1469

$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$		$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$		$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Se}_2$	
ธาตุ	น้ำหนักธาตุ (กรัม)	ธาตุ	น้ำหนักธาตุ (กรัม)	ธาตุ	น้ำหนักธาตุ (กรัม)
Ag	0.2628	Ag	0.2759	Ag	0.2903
In	0.2238	In	0.2349	In	0.2472
Ga	0.0340	Ga	0.0356	Ga	0.0375
Te	0.2487	Te	0.1305	Te	-
Se	0.2308	Se	0.3231	Se	0.4250

### 5.1.2 การขังและบรรจุธาตุต่าง ๆ

หลังจากทำการคำนวณน้ำหนักของธาตุต่าง ๆ เรียบร้อยแล้ว ก็ทำการขังธาตุตามปริมาณที่ต้องการ ต่อมาจึงนำมาบรรจุลงในหลอดแก้วควอทซ์ที่ทนความร้อนได้มากกว่า  $1300^{\circ}\text{C}$  มีขนาดเส้นผ่าศูนย์กลาง 6.0 มิลลิเมตร ยาวประมาณ 12 - 15 เซนติเมตร ซึ่งปิดปลายข้างหนึ่งไว้ โดยการลนไฟจากเครื่องเชื่อมแก๊สออกซิเจน - อะเซติลีน ซึ่งหลอดนี้ผ่านการทำความสะอาดจากการนำไปแช่ลงในน้ำยาโครมิก (chromic solution) ประมาณ 1 คืน แล้วล้างน้ำยาออกด้วยน้ำกลั่นให้สะอาด จากนั้นก็ทำให้หลอดแห้งโดยการอบหลอด สุดท้ายจะเป็นดังรูป 5.1

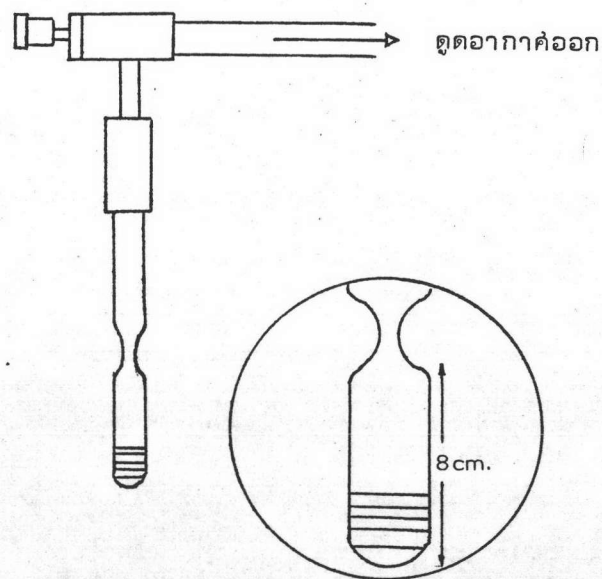


รูป 5.1 การบรรจุธาตุที่ขังแล้วลงในหลอดแก้วควอทซ์

### 5.1.3 การทำให้ภายในหลอดเป็นสุญญากาศและการหลอมปิดหลอด

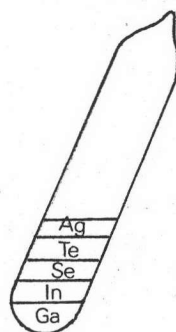
ก่อนการปิดหลอดต้องทำให้ภายในหลอดเป็นสุญญากาศ เพื่อป้องกันการทำปฏิกิริยาระหว่างสารกับอากาศภายในหลอดในขณะที่หลอม แต่สภาพของหลอดก่อนที่นำมาทำให้ภายในหลอดเป็นสุญญากาศต้องทำให้เกิดเป็นคอคอดตรงบริเวณเหนือธาตุต่าง ๆ ประมาณ

5 - 6 เซนติเมตร เพื่อให้ง่ายแก่การที่หลอมปิดหลอด จากนั้นก็นำหลอดมาดูดเอาอากาศภายในหลอดออกโดยใช้เครื่องโรตารี-ดิฟฟิวชันปั๊ม (rotary-diffusion pump) เครื่องปั๊มนี้จะดูดอากาศภายในหลอดออกจนกระทั่งความดันภายในหลอดเป็น  $10^{-4}$  ทอร์ อ่านได้จากไอออนไนเซชันเกจ (ionization gauge)



รูป 5.2 หลอดแก้วควอทซ์ที่บรรจุธาตุ ทำคอคอดแล้วถูกนำไปดูดเอาอากาศภายในหลอดออก

การหลอมปิดหลอดก็ใช้เครื่องเชื่อมแก๊สออกซิเจน-อะเซทิลีน ทำการหลอมตรงบริเวณคอคอดทำให้ละลายจนมาเชื่อมติดกันเป็นเนื้อเดียว ดังรูป 5.3 แต่ต้องระวังไม่ให้หลอดร้าวทำให้อากาศเข้าไปในหลอดได้



รูป 5.3 หลอดแก้วควอทซ์ที่บรรจุธาตุและดูดอากาศออกพร้อมทั้งปิดหลอดแล้ว

หลังจากทำการปิดหลอดของสารทั้ง 6 สสารแล้ว ทำการวัดความยาวของหลอด จดหมาย เลขไว้ทั้งหมดก่อนที่นำไปทำการหลอมต่อไป เพื่อจะได้ทราบว่าหลอดไหนเป็นสารอะไร ภายหลังจากการหลอมแล้ว

#### 5.1.4 การหลอมสาร

นำหลอดที่ทำการปิดหลอดเรียบร้อยแล้วทั้งหมดทำการหลอม ลักษณะ การหลอมแบ่งเป็น 2 พวก วิธีการหลอมครั้งแรก ทำการหลอมสาร  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_2$ ,  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$  และ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$  โดยการ สักวางหลอดทั้งสามใส่ในภาชนะที่ลั่นด้วยลวดทนความร้อน จัดให้แนวหลอดเอียงทำมุม ประมาณ  $45^\circ$  กับแนวระดับ เพื่อป้องกันการแตกของหลอดอันเนื่องมาจากการขยายตัว ของสาร แต่หลอดหดตัวเมื่ออุณหภูมิภายในเตาหลอมกำลังลด จากนั้นก็นำภาชนะนั้นไป แยกในเตา ทำการเพิ่มอุณหภูมิอย่างรวดเร็วจนถึง  $1100^\circ\text{C}$  โดย ใช้ระยะเวลาในการเพิ่มอุณหภูมิประมาณ 2 ชั่วโมง จากนั้นปล่อยให้สารอยู่ในสภาวะหลอม- เหลวเป็นระยะเวลา  $4\frac{1}{2}$  ชั่วโมง แล้วค่อย ๆ ลดอุณหภูมิลงอย่างช้า ๆ โดยลดครั้งละ  $10^\circ\text{C}$  ต่อ 10 นาที จนถึงอุณหภูมิ  $600^\circ\text{C}$  จากนั้นก็ทำการลดลงอย่างรวดเร็วจนถึง อุณหภูมิห้อง นำหลอดออกมาพร้อมกับสิ่งเกดลักษณะของหลอดและสารที่เตรียมได้ ส่วนวิธี การหลอมครั้งที่สองก็ทำในลักษณะเดียวกันกับวิธีการครั้งแรก แต่แตกต่างกันตรงที่ มีการ

เพิ่มอุณหภูมิจากอุณหภูมิห้องจนถึง  $1100^{\circ}\text{C}$  โดยใช้ระยะเวลาในการเพิ่มอุณหภูมิประมาณ 5 ชั่วโมง จากนั้นปล่อยให้ล้าอยู่ในสภาพหลอมเหลวเป็นเวลา 24 ชั่วโมง พร้อมกับมีการเขย่าเตาหรือหลอดเป็นพัก ๆ ด้วย แล้วค่อย ๆ ลดอุณหภูมิโดยลดลงครั้งละ  $10^{\circ}\text{C}$  ต่อ 10 นาที จนถึงอุณหภูมิ  $600^{\circ}\text{C}$  ทิ้งไว้อีก 24 ชั่วโมง เพื่อให้ล้าต่าง ๆ มีการผสมกันโดยไม่มีล้าตกค้างอยู่ภายในหลอด หลังจากนั้นทำการลดอุณหภูมิจนถึงอุณหภูมิห้อง ล้าที่ใช้ในการหลอมครั้งนี้ คือ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.2}\text{Se}_{0.8}$ ,  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$  และ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Se}_2$  ให้นำล้าต่าง ๆ หลังจากการหลอมออกมาสังเกตลักษณะหลอดและล้าที่เตรียมได้ แต่ถ้าล้าใดก็ตามมีสีน้ำตาลคล้ำก็แสดงว่าล้านั้นไม่ใช่ล้าที่ต้องการเตรียม แต่ถ้าลักษณะล้าไม่มีสีน้ำตาลคล้ำถึงแม้ว่าหลอดจะแตกก็ตามล้านี้ก็ยังคงใช้ได้โดยให้นำไปบรรจุลงในหลอดแก้ววอทซ์ตามขบวนการที่กล่าวแล้วใหม่

#### 5.1.5 การแอนนัลล้า

ให้นำหลอดที่ผ่านการหลอมแล้วมาวางในเตาแล้วเพิ่มอุณหภูมิ โดยเพิ่มอุณหภูมิครั้งละ  $100^{\circ}\text{C}$  ต่อ 1 ชั่วโมง จนถึงอุณหภูมิ  $580^{\circ}\text{C}$  -  $600^{\circ}\text{C}$  ซึ่งเป็นอุณหภูมิที่ใช้แอนนัลล้า โดยใช้เวลาต่าง ๆ กันเพื่อให้ตำแหน่งอะตอมต่าง ๆ เกิดการจัดเรียงตัวจนกระทั่งอยู่ในภาวะสมดุล การที่จะทราบว่าล้ามีการจัดเรียงตัวของอะตอมต่าง ๆ ดีหรือยังนั้น ต้องเอาหลอดควอทซ์มาทุบให้แตกและแบ่งล้าที่ได้นำไปบดและถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ด้วยกล้องกีนิเยร์-เฮกก์ (Guinier-Hägg camera) โดยวิธีผง (powder method) เพื่อดูลักษณะของเส้นบนฟิล์มว่าเส้นเล็กและคมดีหรือเปล่า ถ้าเส้นเล็ก ๆ และคมดีก็แสดงว่าล้ามีการจัดเรียงตัวของอะตอมดีแล้ว จากนั้นต้องนำล้าดังกล่าวมาถ่ายภาพโดยรังสีเอ็กซ์อีกแต่ใช้เครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์ (diffractometer) โดยวิธีผงเช่นเดิม แต่คราวนี้จะได้อัฒมออกมาเป็นกราฟ ซึ่งปรากฏพิค (peaks) ของระนาบต่าง ๆ ถ้าปรากฏว่าพิคมีลักษณะแคบ, แหลม และเรียบพร้อมกับการแยกออกมาเป็นล่องพิคย่อยให้เห็นชัดเจนมากขึ้น เมื่อมุมของแบรกก์ ( $\theta$ ) มากกว่า  $20^{\circ}$  ขึ้นไป แล้วแสดงว่ามีการจัดเรียงตัวของอะตอมสมดุลดี จากการถ่ายภาพโดยรังสีเอ็กซ์ทั้งล่องแบบนี้ต้องล่อคค้องกันและมีประโยชน์ต่อการใช้หาค่าคงที่โครงสร้างซึ่งจะแสดงในหัวข้อต่อไป

ตาราง 5.3 ลักษณะหลอดและวิธีการหลอมของลสารต่าง ๆ ตลอดจนลักษณะของลสาร  
ที่ได้ภายหลังกการหลอม

ลสารที่	ชื่อลสาร	เส้นผ่าศูนย์กลาง ของหลอด (มิลลิเมตร)	ความยาว ของหลอด (เซนติเมตร)	วิธีการ หลอมลสาร	ลักษณะลสารหลอม
1	$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_2$	6.0	6.36	แบบที่ 1	ผิวมันวาว, เปราะ
2	$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$	6.0	6.07	แบบที่ 1	ผิวมันวาว สึกล้าขึ้นกว่า ลสารที่ 1, เปราะ
3	$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.2}\text{Se}_{0.8}$	6.0	6.80	แบบที่ 2	ผิวมันวาว สึกล้าขึ้นกว่า ลสารที่ 2 ไม่ค่อยเกาะ เป็นเนื้อเดียวกัน, เปราะ
4	$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$	6.0	5.79	แบบที่ 2	ผิวด้าน สนิมค้อยคล้า ไม่ค้อยเกาะเป็นเนื้อ เดียวกัน แต่เกรน ละเอียดกว่าลสารที่ 3 เปราะ
5	$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$	4.0	7.02	แบบที่ 1	ผิวมันวาว สึกล้ากว่า ลสารที่ 3 เนื้อเป็นรู พรุน, เปราะ
6	$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Se}_2$	6.0	6.72	แบบที่ 2	ผิวมันวาว สึกล้า, เปราะ



ตาราง 5.4 ลักษณะของสารต่าง ๆ ที่ได้ภายหลังจากการแอนนัล และวิธีการแอนนัล

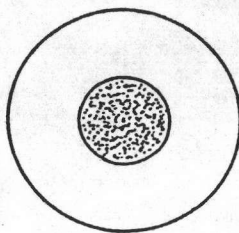
ชื่อสาร	อุณหภูมิ แอนนัล (°C)	เวลาที่ใช้ แอนนัล (สัปดาห์)	สภาวะเนื้อสาร หลังแอนนัล	ลักษณะสารหลังแอนนัล
$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_2$	580	12	ล่มตุล	ผิวมันวาวเหมือนเดิม เปราะ
$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$	580	12	ล่มตุล	ผิวมันวาวเหมือนเดิม เปราะ
$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.2}\text{Se}_{0.8}$	580	12	ล่มตุล	ผิวด้านขึ้น ไม้ค่อยเกาะ เป็นเนื้อเดียวกัน, เปราะ
$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$	580	16	ล่มตุล	ผิวด้านเหมือนเดิม เปราะ
$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$	600	18	ล่มตุล	ผิวด้านขึ้น เนื้อเป็นรู พรุนเหมือนเดิม, เปราะ
$\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Se}_2$	600	18	ล่มตุล	ผิวด้านบ้าง สีคล้ำ เปราะ

## 5.2 การหาค่าคงที่โครงสร้างผลึกโดยกล้องกีเเนียร์-เอกซ์และเครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์

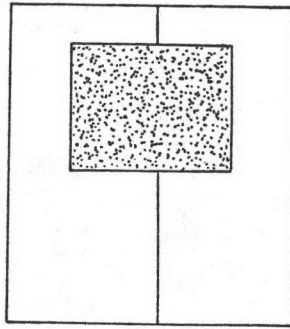
เมื่อได้โลหะผลึกถึงตัวนำตามที่ต้องการแล้วนำสารเหล่านี้มาศึกษาด้วยรังสีเอ็กซ์จากการศึกษารูปแบบของเส้นและพีคของระนาบต่าง ๆ จะให้รายละเอียดค่าคงที่โครงสร้างผลึก

### 5.2.1 การเตรียมสารเพื่อถ่ายภาพ

ให้นำสารแต่ละสารมาบดให้ขนาดของเม็ดผลึกมีค่า เส้นผ่าศูนย์กลางเฉลี่ยประมาณ  $10^{-3}$  ถึง  $5 \times 10^{-5}$  เซนติเมตร เพื่อให้ได้เส้นบนฟิล์มหรือพีคในกราฟที่แหลมคมดีเมื่อสารอยู่ในภาวะสมดุล จากนั้นให้ผสมสารซิลิกอนบริสุทธิ์ 99.99% ( $a = 5.43054 \text{ \AA}$ ) ลงไปในสารประมาณหนึ่งในสามของสารที่ต้องการนำมาศึกษาแต่ละสาร เพื่อใช้ซิลิกอนนี้เป็นสารมาตรฐานสำหรับแก้ความคลาดเคลื่อนอย่างเป็นระบบเกี่ยวกับมุมของแบรกก์ แล้วใช้ล็ก๊อตเทปหรือสิ่งอื่น ๆ ที่ไม่มีผลต่อการเดินทางของรังสีเอ็กซ์ปิดตรงบริเวณช่องว่างของภาชนะที่ใช้สำหรับเตรียมสารของแต่ละเครื่อง เทสารที่ผสมกับซิลิกอนแล้วลงตรงบริเวณช่องว่างนั้น ทำการเคาะภาชนะให้สารกระจายออกไปติดอยู่บนล็ก๊อตเทปด้านที่หนียวอย่างสม่ำเสมอ ดังรูป 5.4 ก. และ ข.



รูป 5.4 ก. วงแหวนทองแดงใช้ในการเตรียมผลึกผงเพื่อถ่ายภาพในกล้องกีเเนียร์-เอกซ์

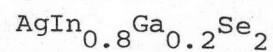
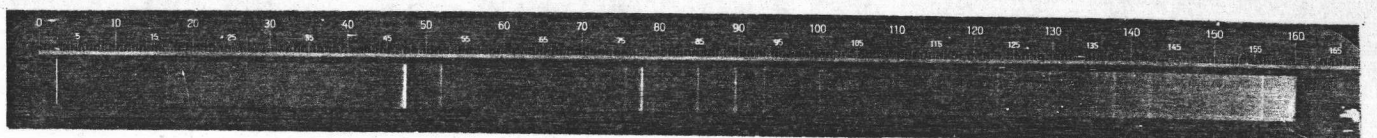
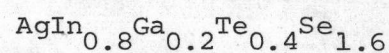
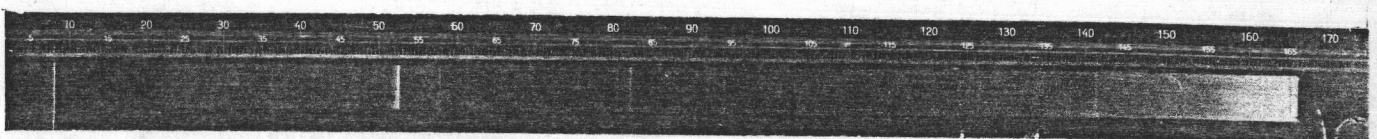
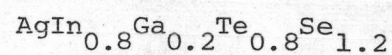
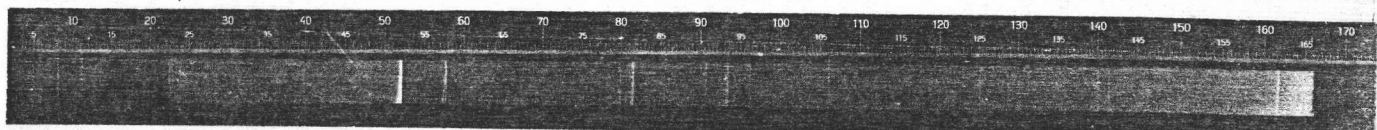
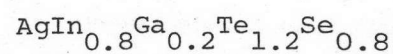
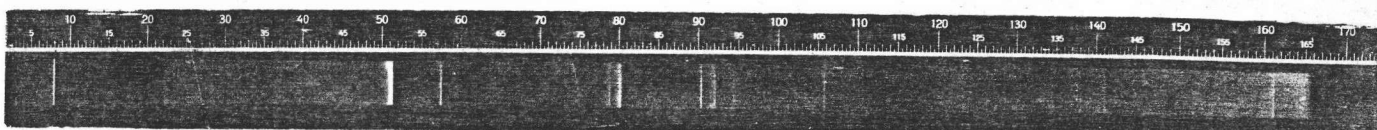
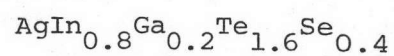
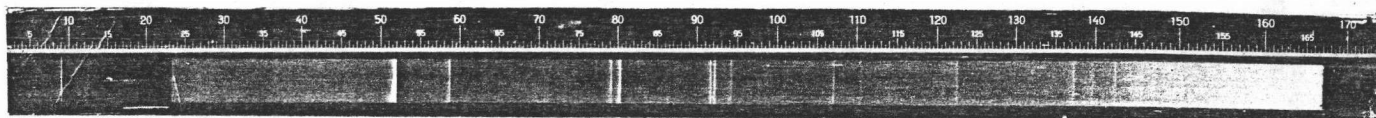
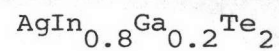
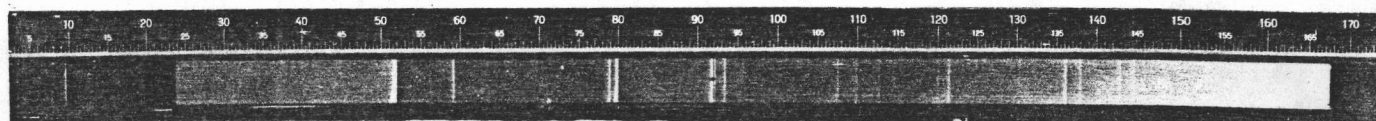


รูป 5.4 ข. แผ่นอลูมิเนียมสีเหลี่ยมผืนผ้าใช้ในการเตรียมผลึกผง เพื่อถ่ายภาพในกล้องของ เครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์

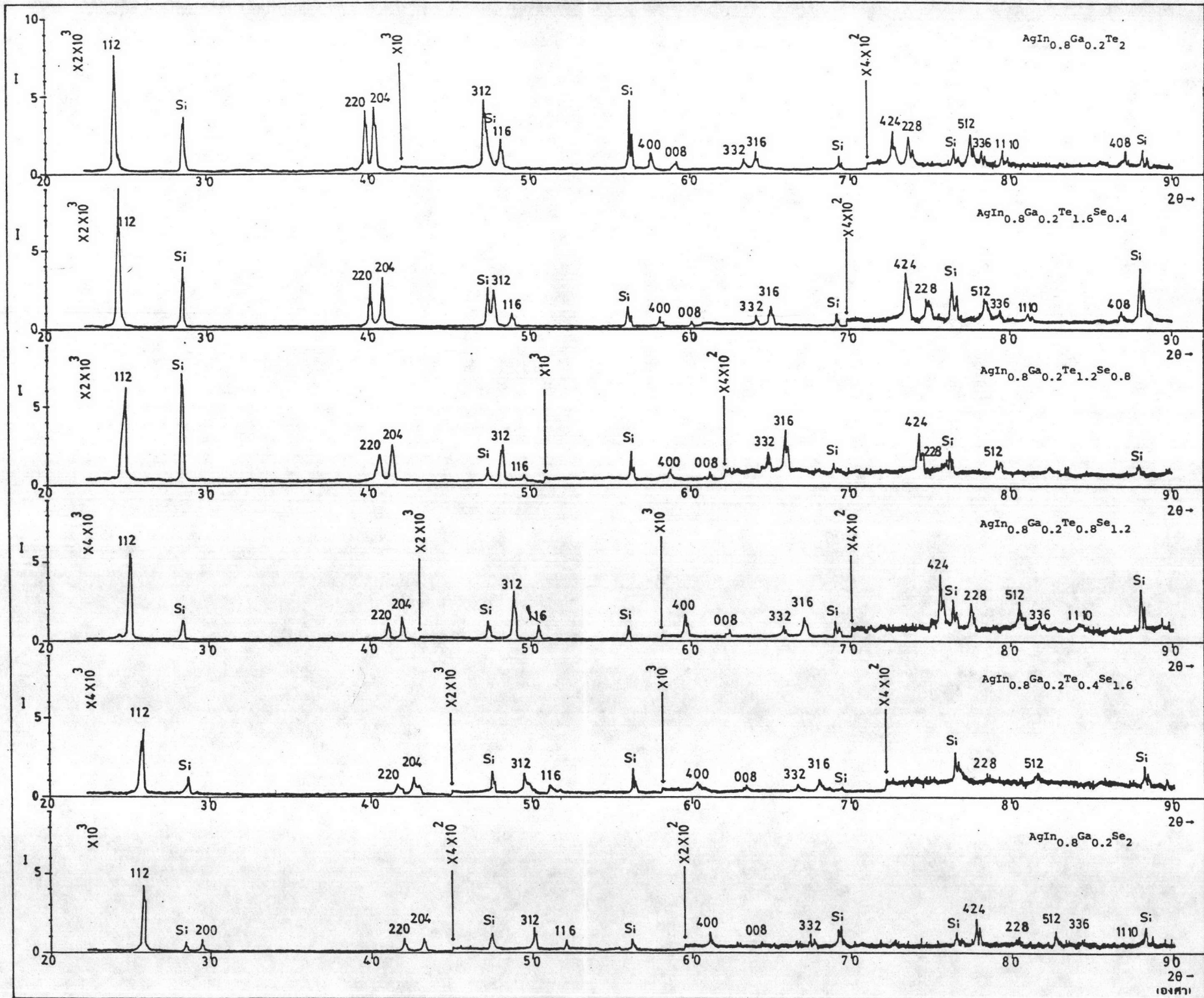
ต่อไปจึงนำสารที่ผสมซิลิกอนแล้ว เหล่านี้ไปติดตั้งบนตัวกล้องของแต่ละแบบเพื่อทำการศึกษารูปแบบของการเลี้ยวเบนของสารทั้งหกสารที่เตรียมขึ้นมา

#### 5.2.2 รูปแบบการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกผง

เนื่องจากการศึกษารูปแบบการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของผลึกผงทั้งหกสารที่เตรียมขึ้นมานั้นโดยใช้วิธีการสองแบบ คือ แบบแรก ใช้กล้องกีเฟียร์-เฮกกี ส่วนอีกแบบหนึ่งใช้เครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์ ซึ่งทั้งสองแบบนี้มีการบันทึกรูปแบบของการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ที่มุมของแบรกก์ค่าต่าง ๆ และค่าของความเข้มแตกต่างกันโดยที่กล้องกีเฟียร์-เฮกกีนั้น มีการบันทึกลงบนแผ่นฟิล์ม ซึ่งมีความสามารถในการบันทึกได้จากค่าของมุมของแบรกก์ ( $2\theta$ ) ที่  $0^\circ$  ถึง  $90^\circ$  ส่วนเครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์มีการบันทึกลงบนกระดาษกราฟ ซึ่งมีความสามารถในการบันทึกได้จากค่าของมุมของแบรกก์ ( $2\theta$ ) ที่  $0^\circ$  ถึง  $180^\circ$  ผลจากการทดลองจะได้รูปแบบการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของผลึกผงทั้งหกสาร ดังนี้



รูป 5.5 ก. รูปแบบของการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่มุมของแบรกก์ต่าง ๆ ที่บันทึกได้โดยใช้กล้องกีเนียร์-เฮกก์ ของผลึกผง  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_2$ ,  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$ ,  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.2}\text{Se}_{0.8}$ ,  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$ ,  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$ ,  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Se}_2$  ตามลำดับ ซึ่งใช้เวลาในการถ่ายภาพรูปละ  $1\frac{1}{2}$  ชั่วโมง (ใช้รังสีเอ็กซ์ชนิด  $\text{CuK}_{\alpha 1}$  ณ ที่ 35 กิโลโวลต์ 20 มิลลิแอมป์)



I คือ ค่าความเข้ม 2θ คือ มุมของแบรอก์

รูป 5.5 ข. กราฟของการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของสารประกอบ (2θ) ต่าง ๆ ที่บันทึกได้โดยใช้เครื่องเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกผง  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_2$ ,  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{1.6}Se_{0.4}$ ,  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{1.2}Se_{0.8}$ ,  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{0.8}Se_{1.2}$ ,  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{0.4}Se_{1.6}$ ,  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Se_2$  ตามลำดับ ซึ่งใช้เวลาในการบันทึกข้อมูล กราฟละ  $3\frac{1}{2}$  ชั่วโมง (ใช้รังสีเอ็กซ์ชนิด  $CuK_{\alpha}$  ณ  $40$  กิโลโวลต์  $30$  มิลลิแอมป์ มี Ni เป็นตัวกรอง).

### 5.2.3 การพิจารณาลักษณะของผลึกจากรูปแบบการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

เมื่อสังเกตรูปแบบการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของผลึกทั้งหมดสำรวจพบว่าจากภาพถ่ายให้ลักษณะเส้นของระนาบ (hkl) ที่มุมของแบรกก์ค่าต่าง ๆ มีความคมชัดดี ซึ่งสอดคล้องกับผลที่ได้จากการบันทึกโดยกราฟนั่นคือ ฐานพีคของระนาบ (hkl) ที่มุมของแบรกก์ค่าต่าง ๆ จะแคบและส่วนต่าง ๆ ของพีคเรียบดีพอสมควร แต่ถ้าพิจารณาลักษณะของพีคของระนาบ (hkl) ณ ที่มุมของแบรกก์สูงขึ้นไปจะเห็นเป็นพีคชนิดคู่ การที่เกิดการแยกของพีคเช่นนี้เพราะเกิดจากความจริงที่ว่ารังสีเอ็กซ์ที่ใช้มีความยาวคลื่น 2 ค่า (คือเป็น  $\lambda_{\text{CuK}\alpha_1}$  และ  $\lambda_{\text{CuK}\alpha_2}$ ) จากผลการทดลองที่ได้ออกมาอย่างนี้ก็สรุปได้ว่าผลึกที่เตรียมขึ้นมานั้นมีการสัดเรียงตัวของอะตอมต่าง ๆ อยู่ในภาวะสมดุลดี จึงทำให้ระยะระหว่างระนาบต่าง ๆ มีค่าเท่ากันเป็นชุด ๆ ประกอบกับถ้านำเอารูปแบบเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกทั้งหมดสำรวจไปเปรียบเทียบกับรูปแบบการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกในระบบเตตระโกนัล มีโครงสร้างพันธะแบบพันธะเชิงสี่และมีโครงสร้างแบบซาลโคไพไรท์ ( $\text{CuFeS}_2$ ) ซึ่งเคยมีผู้ศึกษามาก่อนแล้ว จะพบว่ารูปแบบการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกทั้งหมดคล้ายกับรูปแบบการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกในระบบเตตระโกนัล มีโครงสร้างพันธะแบบพันธะเชิงสี่ และมีโครงสร้างแบบซาลโคไพไรท์ ดังนั้นจากผลการทดลองนี้ก็สรุปต่อไปได้อีกว่าผลึกอยู่ในรูปเฟสเดียว (single phase) เมื่อได้ผลึกตามต้องการก็เป็นผลึกที่พร้อมจะนำไปศึกษาค่าคงที่โครงสร้างผลึกตามอุณหภูมิต่าง ๆ และศึกษาโครงสร้างเฉพาะบางตัวที่มีรูปแบบเป็นผลึกเดี่ยว

### 5.2.4 การคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึกของโลหะผสมกึ่งตัวนำ

จากการทดลองพบว่า ข้อมูลที่ได้จากการวัดตำแหน่งของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์บนฟิล์ม จากภาพถ่ายผลึกผงโดยกล้องกีเนียร์เอาก็กับข้อมูลที่ได้จากการวัดตำแหน่งของพีคต่าง ๆ บนกราฟที่ได้จากการบันทึกการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผงโดยใช้เครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์มีลักษณะเหมือนกัน ดังนั้นการคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึกของสารแต่ละสารจึงใช้ข้อมูลเพียงข้อมูลเดียวที่ได้จากการวัดตำแหน่งของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์บนฟิล์มเท่านั้น ขั้นตอนการคำนวณมีดังนี้

ขั้นที่ 1 วัดตำแหน่งของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มจากภาพถ่ายผลึกผงของสารโลหะผสมกึ่งตัวนำผสมกับสารซิลิกอนทุก ๆ เส้นโดยที่  $S_o$  เป็นตำแหน่งของเส้นปฐมภูมิ และ  $S$  เป็นตำแหน่งของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ต่าง ๆ พร้อมทั้งคำนวณค่า  $(S - S_o)_{obs}$  สำหรับตำแหน่งของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ต่าง ๆ ด้วย

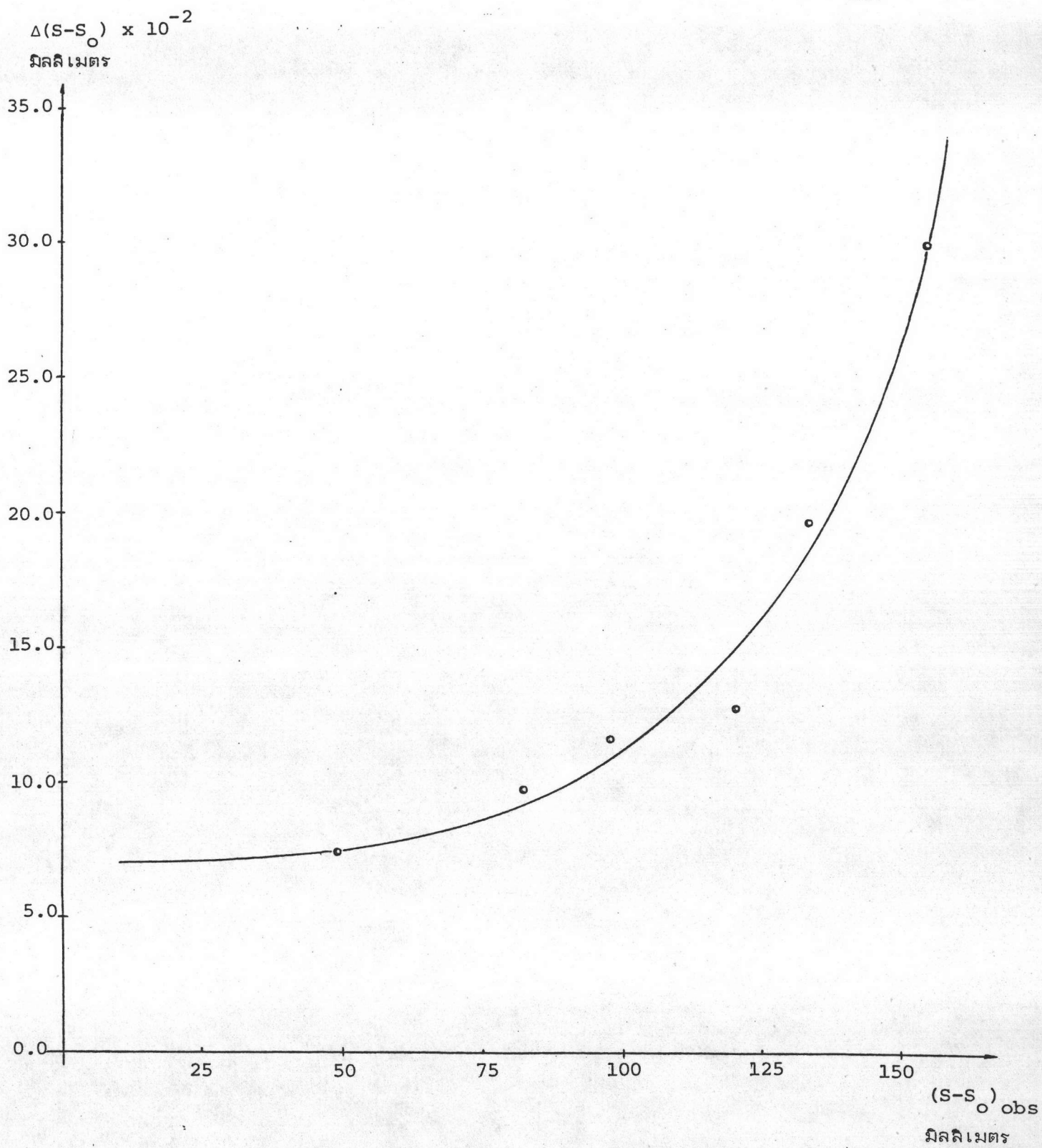
ขั้นที่ 2 สร้างกราฟไข้แก้ความผิดพลาดอันเนื่องมาจากความคลาดเคลื่อนอย่างเป็นระบบ โดยใช้ตำแหน่งของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์เนื่องจากซิลิกอน เป็นสารมาตรฐานมีค่า  $(S - S_o)_{cal}$ ,  $\theta$  และ  $(h k l)$  ดังตารางที่ 5.5

ตาราง 5.5  $(S - S_o)_{cal}$ ,  $\theta$  และ  $h k l$  ของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์เนื่องจากซิลิกอนซึ่งใช้เป็นสารมาตรฐาน

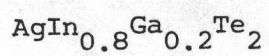
เส้นที่	$(S - S_o)_{cal}$ (มิลลิเมตร)	$\theta$ (องศา)	h	k	l
1	49.725	14.2214	1	1	1
2	82.698	23.6517	2	2	0
3	98.117	28.0616	3	1	1
4	120.858	34.5655	4	0	0
5	133.527	38.1887	3	3	1
6	153.901	44.0518	4	2	2

โดยการเขียนกราฟระหว่างค่าของ  $\Delta(S - S_o) = (S - S_o)_{cal} - (S - S_o)_{obs}$  กับ  $(S - S_o)_{obs}$  ดังรูปที่ 5.6 ซึ่งให้ค่าแก้  $\Delta(S - S_o)$  ณ ที่  $(S - S_o)_{obs}$  ต่าง ๆ เพื่อไข้แก้ความผิดพลาดแล้วจะได้

$$(S - S_o)_{cor} = (S - S_o)_{obs} + \Delta(S - S_o)$$



รูป 5.6 กราฟซึ่งใช้แก้ความคลาดเคลื่อนของระยะ  $(S-S_0)_{obs}$  ของโลหะผลึกกิ่งตัวนำ





ขั้นที่ 3 คำนวณค่าของ  $\theta_{cor}$  จากความสัมพันธ์

$$\theta_{cor} = K \times (S - S_o)_{cor}$$

เมื่อ  $K$  คือ ค่าคงที่ของกล้องมีค่าเท่ากับ 0.286 องศาต่อมิลลิเมตร  
แล้วหาค่าของ  $(\sin^2 \theta)_{cor}$ ,  $d_{cor}$

ขั้นที่ 4 จากการพิจารณารูปแบบการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของผลึกทั้งหกสสาร  
จะมีรูปแบบคล้ายกับรูปแบบการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของผลึกในระบบเตตระโกนัล มีโครงสร้าง  
สร้างพันธะแบบพันธะเชิงสี่ และมีโครงสร้างแบบซาลโคไพไรท์ ซึ่งเคยมีผู้ศึกษาโครงสร้าง  
แบบซาลโคไพไรท์นี้มาก่อนแล้ว ประกอบกับได้พบว่าชุดของระนาบที่ส่งผลทำให้เกิดการเลี้ยว-  
เบนของรังสีเอ็กซ์มีดังนี้ (112), (220), (204), (116), (400), (008), (332),  
(316), (424), (228), (512), (336), (11 10), (440), (408), (532),  
(516) และ (3 1 10) เป็นต้น ดังนั้นจึงใช้สมการสำหรับระบบเตตระโกนัลตามสมการ  
4.37 เพื่อหาค่าของค่าคงที่โครงสร้างผลึก  $a$ ,  $c$  ของผลึกทั้งหกสสารอย่างหายาบ ๆ

ขั้นที่ 5 ใช้ค่าคงที่โครงสร้างผลึก  $a$ ,  $c$ , ระบบผลึกและสมการ 4.37 คำนวณหา  
ค่า  $(\sin^2 \theta)_{cal}$  สำหรับดัชนีผลเลอรั (hkl) ต่าง ๆ

ขั้นที่ 6 เปรียบเทียบ  $(\sin^2 \theta)_{cor}$  ของแต่ละเส้นการเลี้ยวเบนในขั้นที่ 3  
กับ  $(\sin^2 \theta)_{cal}$  ของแต่ละดัชนีผลเลอรั (hkl) ต่าง ๆ ในขั้นที่ 5 ถ้าค่าของ  $(\sin^2 \theta)_{cor}$   
มีค่าใกล้เคียงกับค่าของ  $(\sin^2 \theta)_{cal}$  ของดัชนีผลเลอรั (hkl) ใด ก็พอจะอนุมานได้ว่า  
เส้นการเลี้ยวเบนนั้นมีดัชนีผลเลอรัเป็น (hkl) นั้น ขั้นตอนนี้ก็คือ การกำหนดดัชนีผล-  
เลอรั (hkl) ของเส้นการเลี้ยวเบนแต่ละเส้นนั่นเอง

ขั้นที่ 7 ใช้โปรแกรม CSPHCENE คำนวณปรับค่าคงที่โครงสร้างผลึก  
อย่างละเอียดด้วยวิธีกำลังสองน้อยที่สุดโดยใช้ข้อมูลจากขั้นที่ 3 และขั้นที่ 6

เส้นการเลี้ยวเบนบนฟิล์มที่สามารถวัดได้ของผลึกทั้งหกสสาร เมื่อผ่านการคำนวณ  
จากขั้นที่ 1 ถึงขั้นที่ 7 แล้ว ผลการทดลองที่ได้นำมาแสดงไว้ในตารางต่อไปนี้

ตาราง 5.6 ก. ค่า  $hk\ell$ ,  $(S-S_o)_{obs}$ ,  $(S-S_o)_{cor}$ ,  $d_{cor}$ ,  $d_{cal}$ ,  $(\sin^2\theta)_{cor}$ ,  $(\sin^2\theta)_{cal}$  และ  $\Delta\sin^2\theta$  จากภาพถ่ายผลึกผง  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_2$  ที่ใช้กล้องกัมมันต์-เฮกท์

$h$	$k$	$\ell$	$(S-S_o)_{obs}$ (มิลลิเมตร)	$(S-S_o)_{cor}$ (มิลลิเมตร)	$d_{cor}$ Å	$d_{cal}$ Å	$(\sin^2\theta)_{cor}$	$(\sin^2\theta)_{cal}$	$\Delta\sin^2\theta \times 10^{-5}$
1	1	2	42.30	42.37	3.6692	3.6680	0.044074	0.044102	-2.8
2	2	0	69.45	69.53	2.2646	2.2648	0.115704	0.115674	3.0
2	0	4	70.35	70.43	2.2368	2.2370	0.118596	0.118569	2.7
3	1	2	82.30	82.39	1.9268	1.9271	0.159816	0.159775	4.1
1	1	6	83.83	83.92	1.8937	1.8931	0.165460	0.165566	-10.7
4	0	0	100.40	100.51	1.6017	1.6015	0.231298	0.231347	-4.9
0	0	8	103.15	103.27	1.5627	1.5628	0.242991	0.242930	6.1
3	3	2	110.55	110.68	1.4678	1.4677	0.275406	0.275449	-4.3
3	1	6	111.85	111.98	1.4525	1.4525	0.281231	0.281240	-0.9
4	2	4	126.65	126.82	1.3021	1.3022	0.349965	0.349917	4.8
2	2	8	128.45	128.62	1.2863	1.2863	0.358588	0.358604	-1.6
5	1	2	135.15	135.34	1.2318	1.2317	0.391061	0.391122	-6.2
3	3	6	136.37	136.57	1.2225	1.2227	0.397037	0.396914	12.3
1	1	10	138.70	138.91	1.2052	1.2052	0.408494	0.408496	-0.2
4	0	8	151.90	152.18	1.1186	1.1185	0.474351	0.474277	-2.6

ผลการปรับค่าคงที่โครงผลึกของโลหะผลึกกึ่งตัวนำ  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_2$  จากภาพถ่ายผลึกผง

ได้ค่าเป็น

$$a = 6.4060 \pm 0.0003 \text{ \AA}$$

$$c = 12.5028 \pm 0.0007 \text{ \AA}$$

$$\frac{c}{a} = 1.9517$$

ตาราง 5.6 ข. ค่า  $hk\ell$ ,  $(S - S_o)_{obs}$ ,  $(S - S_o)_{cor}$ ,  $d_{cor}$ ,  $d_{cal}$ ,  
 $(\sin^2\theta)_{cor}$ ,  $(\sin^2\theta)_{cal}$  และ  $\Delta\sin^2\theta$  จากภาพถ่ายผลึกผง  
 $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{1.6}Se_{0.4}$  ที่ใช้กล้องกึ่งเฉื่อย-เฮกท์

$h$	$k$	$\ell$	$(S - S_o)_{obs}$ (มิลลิเมตร)	$(S - S_o)_{cor}$ (มิลลิเมตร)	$d_{cor}$ $\text{\AA}$	$d_{cal}$ $\text{\AA}$	$(\sin^2\theta)_{cor}$	$(\sin^2\theta)_{cal}$	$\Delta\sin^2\theta \times 10^{-5}$
1	1	2	42.82	42.92	3.6230	3.6266	0.045206	0.045112	9.4
2	2	0	70.10	70.22	2.2434	2.2439	0.117893	0.117833	6.0
2	0	4	71.25	71.37	2.2088	2.2096	0.121624	0.121747	-12.3
3	1	2	83.16	83.28	1.9074	1.9082	0.163097	0.162945	15.2
1	1	6	85.12	85.25	1.8661	1.8664	0.170397	0.170342	5.5
4	0	0	101.40	101.54	1.5868	1.5867	0.235656	0.235666	-1.1
0	0	8	104.84	104.99	1.5394	1.5392	0.250402	0.250396	0.6
3	3	2	111.72	111.88	1.4537	1.4536	0.280769	0.280778	-0.9
3	1	6	113.32	113.48	1.4354	1.4349	0.287988	0.288175	-18.7
4	2	4	128.12	128.31	1.2890	1.2888	0.357095	0.357198	-10.3
2	2	8	130.45	130.64	1.2693	1.2693	0.368307	0.368293	1.4
5	1	2	136.70	136.91	1.2199	1.2200	0.398713	0.398612	10.1
3	3	6	138.17	138.38	1.2090	1.2089	0.405929	0.406008	-7.9
1	1	10	141.20	141.42	1.1874	1.1875	0.420859	0.420801	5.8

ผลการปรับค่าคงที่โครงผลึกของโลหะผสมกึ่งตัวนำ  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{1.6}Se_{0.4}$  จากภาพถ่ายผลึกผงได้ค่าเป็น

$$a = 6.3470 \pm 0.0005 \text{ \AA}$$

$$c = 12.3134 \pm 0.0017 \text{ \AA}$$

$$\frac{c}{a} = 1.9400$$

ตาราง 5.6 ค. ค่า  $hkl$ ,  $(S-S_o)_{obs}$ ,  $(S-S_o)_{cor}$ ,  $d_{cor}$ ,  $d_{cal}$ ,  
 $(\sin^2\theta)_{cor}$ ,  $(\sin^2\theta)_{cal}$  และ  $\Delta\sin^2\theta$  จากภาพถ่าย  
 ผลึกผง  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{1.2}Se_{0.8}$  ที่ใช้กล้องกีเเนียร์-เฮกท์

$h$	$k$	$l$	$(S-S_o)_{obs}$ (มิลลิเมตร)	$(S-S_o)_{cor}$ (มิลลิเมตร)	$d_{cor}$ Å	$d_{cal}$ Å	$(\sin^2\theta)_{cor}$	$(\sin^2\theta)_{cal}$	$\Delta\sin^2\theta \times 10^{-}$
1	1	2	43.43	43.46	3.5792	3.5792	0.046317	0.046318	-0.1
2	2	0	70.97	71.00	2.2197	2.2195	0.120429	0.120454	-2.5
2	0	4	72.40	72.43	2.1777	2.1783	0.125117	0.125047	7.0
3	1	2	84.25	84.28	1.8860	1.8862	0.166805	0.166772	3.3
1	1	6	86.67	86.71	1.8366	1.8363	0.175912	0.175958	-4.6
4	0	0	102.73	102.78	1.5694	1.5694	0.240904	0.240907	-0.3
0	0	8	106.95	107.00	1.5131	1.5128	0.259162	0.259280	-11.8
3	3	2	113.25	113.31	1.4373	1.4373	0.287216	0.287226	-1.0
3	1	6	115.27	115.33	1.4149	1.4148	0.296396	0.296412	-1.6
4	2	4	130.05	130.14	1.2735	1.2733	0.365877	0.365954	-7.7
2	2	8	132.95	133.05	1.2497	1.2500	0.379910	0.379733	17.6
5	1	2	138.53	138.74	1.2064	1.2064	0.407680	0.407679	0.1

ผลการปรับค่าคงที่โครงสร้างผลึกของโลหะผสมกึ่งตัวนำ  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{1.2}Se_{0.8}$

จากภาพถ่ายผลึกผงได้ค่าเป็น

$$a = 6.2776 \pm 0.0003 \text{ \AA}$$

$$c = 12.1022 \pm 0.0011 \text{ \AA}$$

$$\frac{c}{a} = 1.9278$$

ตาราง 5.6 ง. ค่า  $hkl$ ,  $(S-S)_o$  obs',  $(S-S)_o$  cor',  $d_{cor}$ ,  $d_{cal}$ ,  
 $(\sin^2\theta)_{cor}$ ,  $(\sin^2\theta)_{cal}$  และ  $\Delta\sin^2\theta$  จากภาพถ่าย  
 ผลึกผง  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{0.8}Se_{1.2}$  ที่ใช้กล้องกีเคียร์-เฮกท์

$h$	$k$	$l$	$(S-S)_o$ obs (มิลลิเมตร)	$(S-S)_o$ cor (มิลลิเมตร)	$d_{cor}$ Å	$d_{cal}$ Å	$(\sin^2\theta)_{cor}$	$(\sin^2\theta)_{cal}$	$\Delta\sin^2\theta \times 10^{-}$
1	1	2	44.00	44.06	3.5310	3.5294	0.047591	0.047634	-4.3
2	2	0	71.80	71.90	2.1931	2.1923	0.123366	0.123453	-8.7
2	0	4	73.42	73.52	3.1468	2.1463	0.128740	0.128820	-7.0
3	1	2	85.30	85.42	1.8625	1.8623	0.171055	0.171087	-3.2
1	1	6	88.12	88.25	1.8066	1.8066	0.181804	0.181800	0.4
4	0	0	104.00	104.16	1.5504	1.5502	0.246838	0.246906	-6.8
0	0	8	108.90	109.08	1.4872	1.4870	0.268286	0.268333	-4.7
3	3	2	114.75	114.94	1.4192	1.4193	0.294615	0.294540	7.5
3	1	6	117.09	117.29	1.3940	1.3942	0.305347	0.305253	9.4
4	2	4	131.95	132.20	1.2565	1.2567	0.375810	0.375715	9.5
2	2	8	135.23	135.49	1.2306	1.2306	0.391792	0.391786	0.6
5	1	2	140.56	140.85	1.1914	1.1914	0.418031	0.417992	3.9
3	3	6	142.70	143.00	1.1766	1.1765	0.428641	0.428706	-6.5
1	1	10	147.02	147.34	1.1481	1.1481	0.450163	0.450133	3.0

ผลการปรับค่าคงที่โครงสร้างผลึกของโลหะผสมกึ่งตัวนำ  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{0.8}Se_{1.2}$   
 จากภาพถ่ายผลึกผงได้ค่าเป็น

$$a = 6.2008 \pm 0.0003 \text{ \AA}$$

$$c = 11.8962 \pm 0.0008 \text{ \AA}$$

$$\frac{c}{a} = 1.9185$$

ตาราง 5.6 จ. ค่า  $hkl$ ,  $(S-S)_o$  obs,  $(S-S)_o$  cor,  $d_{cor}$ ,  $d_{cal}$ ,  
 $(\sin^2\theta)_{cor}$ ,  $(\sin^2\theta)_{cal}$  และ  $\Delta\sin^2\theta$  จากภาพถ่าย  
 ผลึกผง  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{0.4}Se_{1.6}$  ที่ใช้กล้องกึ่งเนียร์-เฮกท์

$h$	$k$	$l$	$(S-S)_o$ obs (มิลลิเมตร)	$(S-S)_o$ cor (มิลลิเมตร)	$d_{cor}$ Å	$d_{cal}$ Å	$(\sin^2\theta)_{cor}$	$(\sin^2\theta)_{cal}$	$\Delta\sin^2\theta \times 10^{-}$
1	1	2	44.45	44.51	3.4956	3.4986	0.048558	0.048476	8.2
2	2	0	72.40	72.52	2.1751	2.1752	0.125418	0.125410	0.7
2	0	4	74.10	74.23	2.1274	2.1266	0.131110	0.131198	-8.8
3	1	2	86.03	86.19	1.8470	1.8472	0.173944	0.173886	5.8
1	1	6	89.00	89.16	1.7892	1.7887	0.185356	0.185461	-10.6
4	0	0	104.85	105.06	1.5384	1.5381	0.250722	0.250821	-9.9
0	0	8	110.15	110.38	1.4714	1.4716	0.274060	0.273971	8.9
3	3	2	115.75	116.00	1.4077	1.4080	0.299419	0.299297	12.2
3	1	6	118.25	118.50	1.3814	1.3816	0.310948	0.310872	7.6
2	2	8	136.73	137.04	1.2192	1.2189	0.399364	0.399382	-1.8
5	1	2	141.85	142.18	1.1821	1.1820	0.424627	0.424707	-8.0

ผลการปรับค่าคงที่โครงผลึกของโลหะผลึกกึ่งตัวนำ  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{0.4}Se_{1.6}$   
 จากภาพถ่ายผลึกผงได้ค่าเป็น

$$a = 6.1522 \pm 0.0005 \text{ \AA}$$

$$c = 11.7725 \pm 0.0017 \text{ \AA}$$

$$\frac{c}{a} = 1.9135$$

ตาราง 5.6 จ. ค่า  $hk\ell$ ,  $(S-S_o)_{obs}$ ,  $(S-S_o)_{cor}$ ,  $d_{cor}$ ,  $d_{cal}$ ,  
 $(\sin^2\theta)_{cor}$ ,  $(\sin^2\theta)_{cal}$  และ  $\Delta\sin^2\theta$  จากภาพถ่าย  
 ผลึกผง  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Se_2$  ที่ใช้กล้องกัมมา-เฮกซ์

$h$	$k$	$\ell$	$(S-S_o)_{obs}$ (มิลลิเมตร)	$(S-S_o)_{cor}$ (มิลลิเมตร)	$d_{cor}$ $\text{\AA}$	$d_{cal}$ $\text{\AA}$	$(\sin^2\theta)_{cor}$	$(\sin^2\theta)_{cal}$	$\Delta\sin^2\theta \times 10^{-}$
1	1	2	45.13	45.22	3.4416	3.4425	0.050095	0.050070	2.5
2	2	0	73.48	73.60	2.1448	2.1461	0.128991	0.128829	16.2
2	0	4	75.50	75.62	2.0901	2.0898	0.135832	0.135865	-3.3
3	1	2	87.35	87.48	1.8214	1.8212	0.178860	0.178899	-3.9
1	1	6	90.98	91.11	1.7535	1.7535	0.192972	0.192972	0.0
4	0	0	106.50	106.65	1.5176	1.5175	0.257633	0.257658	-2.5
0	0	8	112.80	112.96	1.4413	1.4409	0.285815	0.285804	1.1
3	3	2	117.65	117.82	1.3884	1.3886	0.307792	0.307728	6.4
4	2	4	135.65	135.85	1.2288	1.2279	0.393557	0.393523	3.4
2	2	8	139.93	140.14	1.1964	1.1963	0.414572	0.414632	-6.1
5	1	2	144.35	144.58	1.1660	1.1658	0.436441	0.436557	-11.6
3	3	6	147.20	147.43	1.1475	1.1475	0.450610	0.450629	1.9
1	1	10	152.85	153.10	1.1132	1.1132	0.478824	0.478775	4.9

ผลการปรับค่าคงที่โครงสร้างผลึกของโลหะผสมกึ่งตัวนำ  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Se_2$

จากภาพถ่ายผลึกผงได้ค่าเป็น

$$a = 6.0701 \pm 0.0004 \text{ \AA}$$

$$c = 11.5269 \pm 0.0008 \text{ \AA}$$

$$\frac{a}{c} = 1.8990$$

### 5.3 การหาค่าคงที่โคจรผลึกโดยกล้อง เตอบาย-เซอร์เรอร์แบบอหุณภูมิสูง

เมื่อต้องการศึกษาหารูปแบบการเปลี่ยนแปลงค่าคงที่โคจรผลึกตามอุณหภูมิต่าง ๆ ของโลหะผลึกกึ่งตัวนำแต่ละสำรานั้นต้องใช้อุปกรณ์ เตอบาย-เซอร์เรอร์แบบอหุณภูมิสูง UNICAM S.70

#### 5.3.1 การเตรียมสำรเพื่อถ่ายภาพและขั้นตอนการถ่ายภาพ

ให้นำสำรแต่ละสำรมาบดจนขนาดของเม็ดผลึกมีเส้นผ่าศูนย์กลางเฉลี่ยประมาณ  $10^{-3}$  ถึง  $5 \times 10^{-5}$  เซนติเมตร ผลสำรซิลิกอนบริสุทธิ์ 99.99% ( $a = 5.43054 \text{ \AA}$ ) ลงไปในสำรประมาณครึ่งหนึ่งของสำรที่ต้องการนำมาศึกษาแต่ละสำรเพื่อใช้เป็นสำรมาตรฐานสำหรับแก้ความคลาดเคลื่อนอย่างเป็นระบบเกี่ยวกับมุมแบรกก์

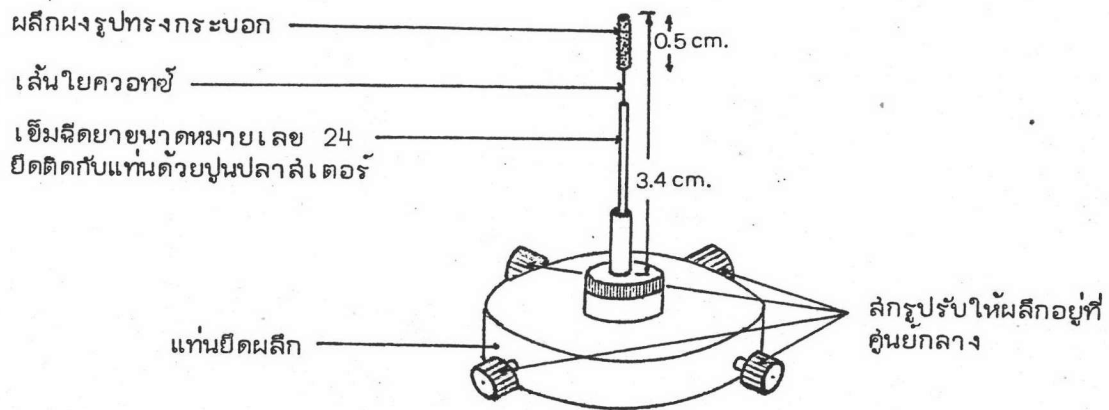
เทสำรที่ผลึกซิลิกอนแล้วลงบนแผ่นกระจก นำเส้นใยควอทซ์ที่มีขนาดพอเหมาะขูดส่วนปลายของเส้นใยควอทซ์นี้ด้วยฉนวนวานิช แล้วตัดผลึกฝังบนแผ่นกระจกให้ผลึกฝังติดรอบ ๆ เส้นใยควอทซ์ในลักษณะรูปทรงกระบอกเล็ก ๆ รอให้แห้ง

นำเส้นใยควอทซ์มาขูดฉนวนวานิชอีกครั้ง แล้วตัดกับผลึกฝังอีกเพื่อให้ผลึกฝังติดรอบ ๆ เส้นใยควอทซ์มากขึ้น และรอให้แห้ง จึงลงมือทำในลักษณะแบบเดิมอีกครั้งหนึ่งจะได้ผลึกฝังรูปทรงกระบอกซึ่งมีเส้นผ่าศูนย์กลางประมาณ 0.5 มิลลิเมตร ติดอยู่ตอนปลายของเส้นใยควอทซ์

นำเส้นใยควอทซ์ที่ปลายมีผลึกนั้นไปติดบนแท่นยึดผลึก ดังรูปที่ 5.7

มีข้อนำคำหนึ่งถึง เล่มอในการเตรียมสำรเพื่อถ่ายภาพผลึกฝังโดยใช้อุปกรณ์ เตอบาย-เซอร์เรอร์ แบบอหุณภูมิสูงนี้ อุปกรณ์ทุกอย่างที่ใช้ในการเตรียมสำรเพื่อถ่ายภาพนั้นจะต้องทนความร้อนได้สูงพอสมควร เมื่อยึดผลึกบนแท่นยึดผลึกฝังเรียบร้อยแล้ว จึงทำการปรับให้ผลึกอยู่ที่ศูนย์กลางของกล้องในขณะที่ผลึกหมุนไปรอบแกนกลางของกล้อง โดยใช้ลิกรู 4 ตัวที่แสดงให้เห็นในรูปที่ 5.7 จะสังเกตว่าผลึกอยู่ที่ศูนย์กลางของกล้องหรือไม่ ได้โดยการมองผ่านทางกล้องส่องผลึกที่สามารถนำไปติดกับตัวกล้อง เตอบาย-เซอร์เรอร์ได้ในขณะที่ทำการปรับผลึก





รูป 5.7 การยึดผลึกบนแท่นยึดผลึกของกล้องถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์  
เดอบาย-เชอร์เรอร์ แบบฉลุหภูมิสูง UNICAM S.70

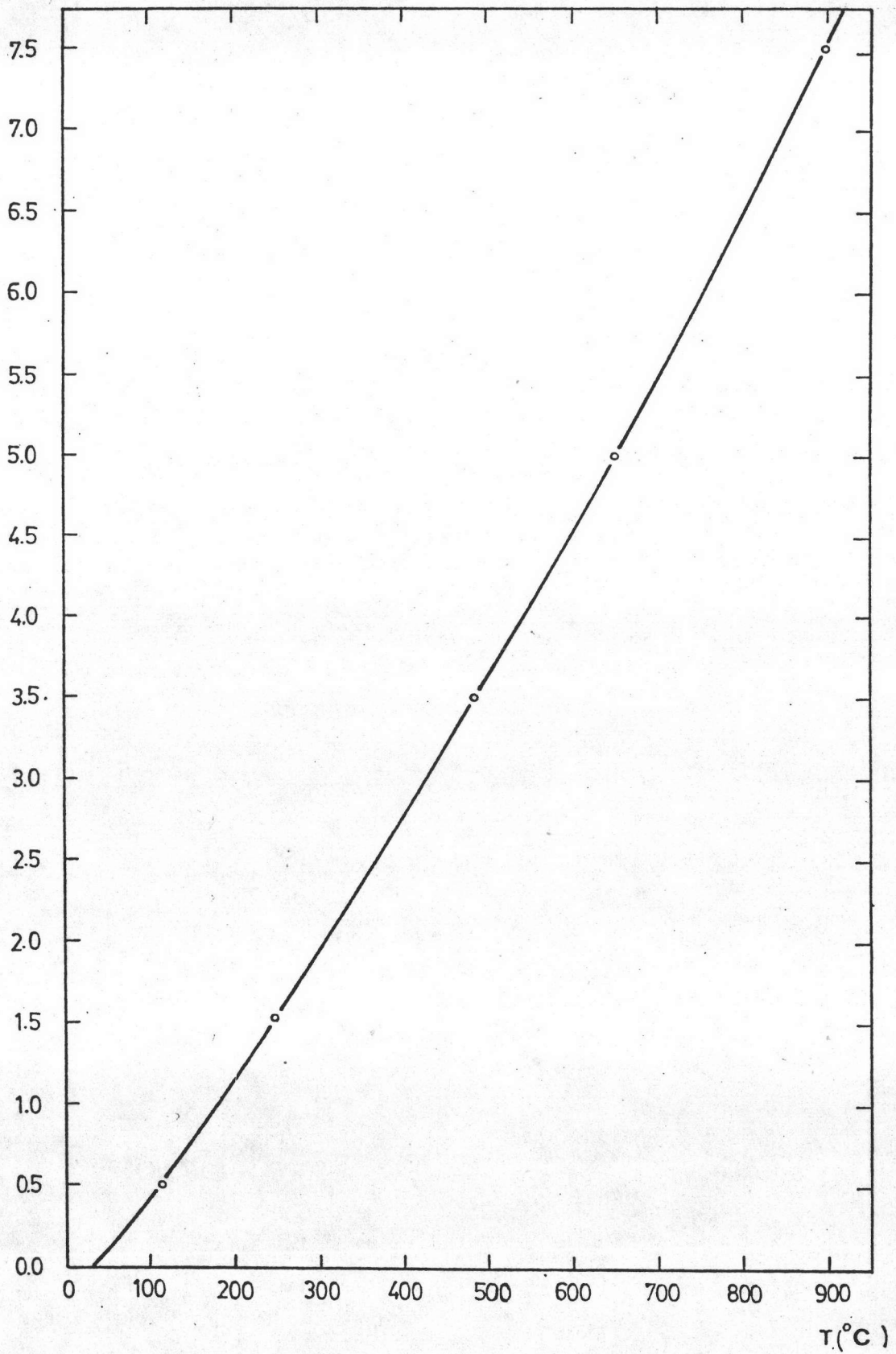
หลังจากปรับผลึกให้อยู่ที่ศูนย์กลางของกล้องได้ ก็พร้อมที่จะทำการถ่ายภาพผลึก  
ผงเมื่อประกอบส่วนเตาเผา และห้องสุญญากาศลงบนส่วนฐานกล้องเรียบร้อยแล้ว

ส่วนขั้นตอนการถ่ายภาพมีดังนี้

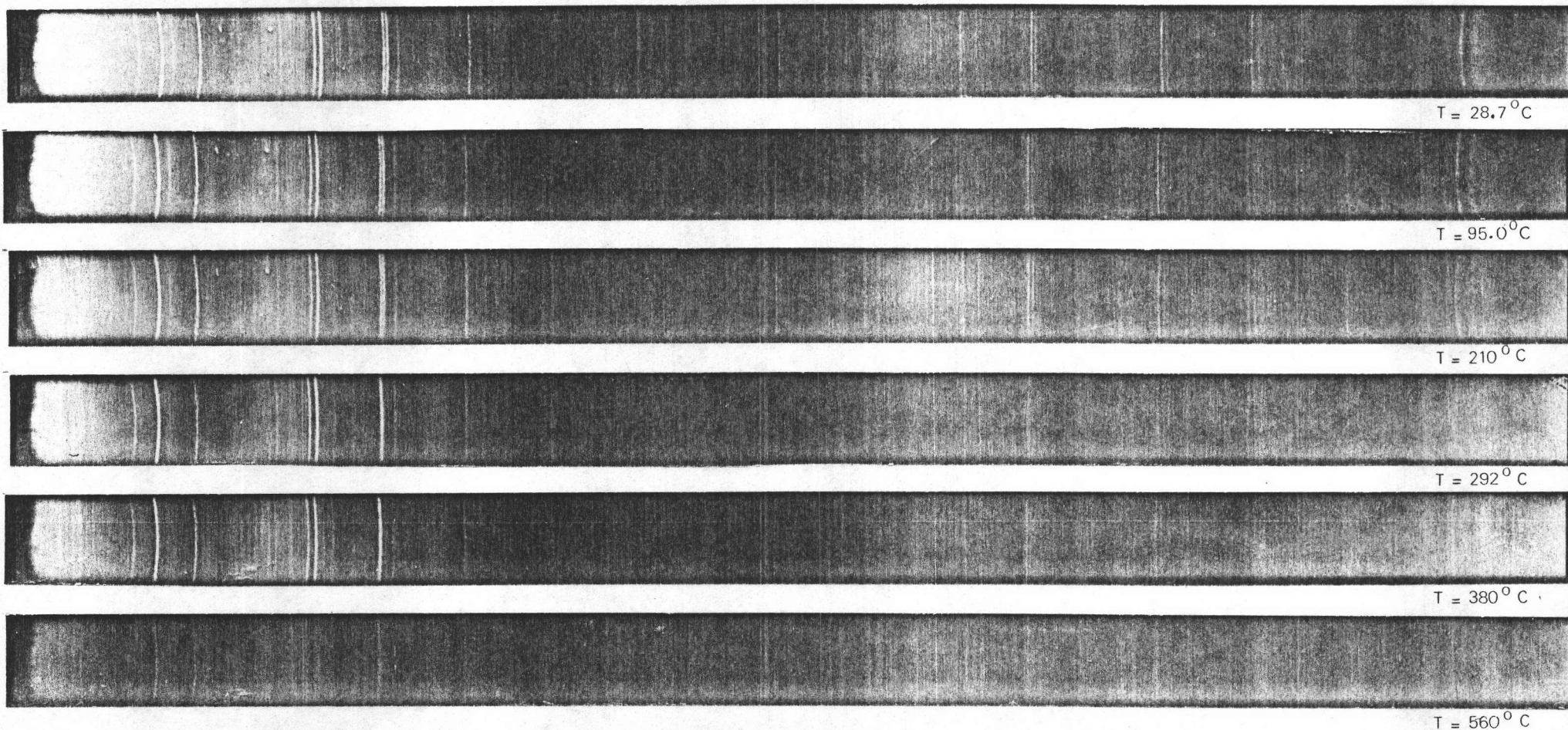
- เปิดสวิตช์ระบบไฟฟ้าควบคุมการทำงานของกล้อง เปิดสวิตช์  
มอเตอร์ให้ผลึกหมุน
- ทำการดูดอากาศภายในห้องสุญญากาศออกด้วยเครื่องปั๊ม  
สุญญากาศ
- ปรับค่ากระแสไฟฟ้าที่ผ่านขดลวดทำความร้อน โดยทำการ  
เพิ่มค่าของกระแสไฟฟ้าครั้งละ 0.5 แอมป์ต่อนาที จนถึงอุณหภูมิที่ต้องการ
- อ่านค่าของอุณหภูมิภายในเตาได้โดยใช้มิลลิโวลต์มิเตอร์  
วัดค่าแรงดันไฟฟ้าจากสายเทอร์โมคัพเพิลภายในเตาอันตามแนวตั้งซึ่งอยู่ใกล้ตัวผลึกผงมาก  
ที่สุด ซึ่งจะทราบอุณหภูมิภายในเตาได้โดยใช้กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าความต่าง  
ศักย์ไฟฟ้าจากสายเทอร์โมคัพเพิลกับค่าอุณหภูมิ ดังรูปที่ 5.8

ความต่างศักย์ไฟฟ้า

(มิลลิโวลต์)



รูป 5.8 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าความต่างศักย์ไฟฟ้าจากสายเทอร์โมคัพเพิล  
กับค่าอุณหภูมิภายในเตา



รูป 5.9 फिल्मภาพถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกผง  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$  จากกล้องถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์เดอบาย-เชอร์เรอร์ ซึ่งใช้  $\text{CuK}\alpha_1$  (1.54059 Å) ที่อุณหภูมิ (T)  $28.7^{\circ}\text{C}$ ,  $95.0^{\circ}\text{C}$ ,  $210^{\circ}\text{C}$ ,  $292^{\circ}\text{C}$ ,  $380^{\circ}\text{C}$  และ  $560^{\circ}\text{C}$  ตามลำดับ

รจจนกระทั่งอุณหภูมิภายในเตาคงที่โดยการส่ง เกิดจากค่าแรงดันไฟฟ้าบนหน้า  
ปัดมิลลิโวลท์มิเตอร์

ในขณะที่รอให้ทำการบรรจุฟิล์มแบบวิธีการของ เบรดเลย์และแบรกก์ลงในตลับ  
ใส่ฟิล์มของกล้องภายในห้องมืด เมื่อบรรจุเสร็จให้นำไปวางบนฐานกล้อง

เมื่อสำรวจเครื่องมือทุกอย่างทำเรียบร้อยดีแล้ว จึงปล่อยรังสีเอ็กซ์ไปตก  
กระทบตัวผลึก ใช้เวลาในการถ่ายภาพแต่ละภาพประมาณ 24 ชั่วโมง จึงนำฟิล์มไป  
ล้าง

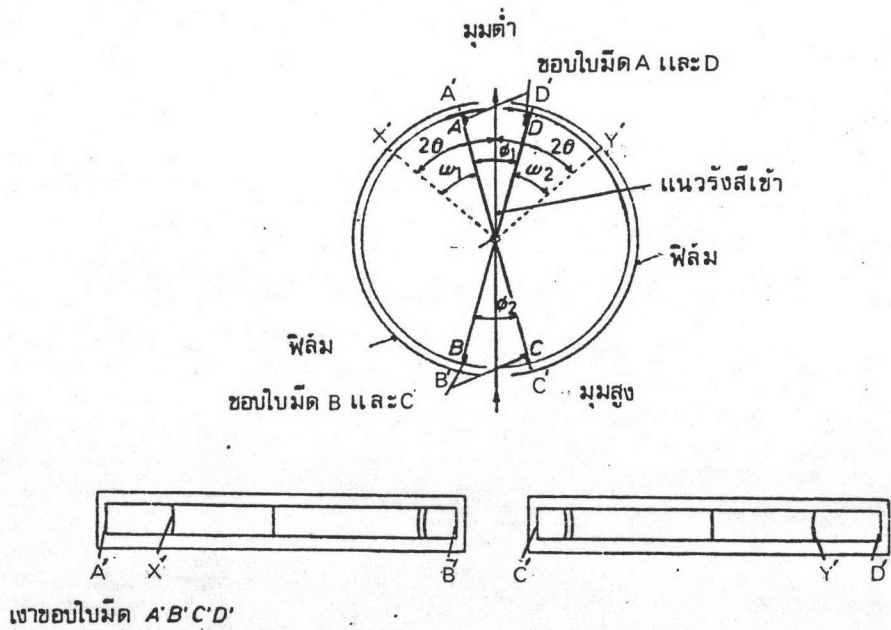
### 5.3.2 รูปแบบการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกผง

ผลจากการบันทึกภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ลงบนแผ่นฟิล์มจากมุม 2 $\theta$   
เท่ากับ 0 $^{\circ}$  ถึง 180 $^{\circ}$  ที่มีการบรรจุฟิล์มลงในกล้องแบบวิธีการของเบรดเลย์และแบรกก์  
ของการถ่ายภาพโดยกล้องเดอบาย-เชอร์เรอร์ แบบอุณหภูมิสูง UNICAM S.70 ณ  
ที่อุณหภูมิต่าง ๆ ของสารโลหะผสมกึ่งตัวนำทั้งหกสาร มีจำนวนมาก จึงแสดงผลจากการ  
บันทึกภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์เฉพาะสาร  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$  ณ ที่อุณหภูมิ  
28.7  $^{\circ}\text{C}$ , 95.0  $^{\circ}\text{C}$ , 210  $^{\circ}\text{C}$ , 292  $^{\circ}\text{C}$ , 380  $^{\circ}\text{C}$  และ 560  $^{\circ}\text{C}$  ดังรูปที่ 5.9

### 5.3.3 การสร้างกราฟแสดงการเปลี่ยนแปลงค่าคงที่โครงสร้างผลึกของซิลิกอนที่ ใช้เป็นสารมาตรฐานจากอุณหภูมิ 27.0 $^{\circ}\text{C}$ ถึง 585 $^{\circ}\text{C}$

ต้องทำการเตรียมผลึกผงซิลิกอนตามวิธีการเตรียมข้างต้นทำการถ่าย  
ภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ ณ ที่อุณหภูมิต่าง ๆ ดังนี้ 28.8  $^{\circ}\text{C}$ , 100  $^{\circ}\text{C}$ , 215  $^{\circ}\text{C}$ ,  
330  $^{\circ}\text{C}$ , 390  $^{\circ}\text{C}$ , 540  $^{\circ}\text{C}$  และ 585  $^{\circ}\text{C}$  ใช้ประกอบร่วมกับภาพถ่ายที่ได้จากการ  
ถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของสารแต่ละสารที่ปรากฏเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์  
เนื่องจากซิลิกอนผสมอยู่มาเป็นข้อมูลด้วย ในการคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึก a ของซิลิกอน  
ณ ที่อุณหภูมิต่าง ๆ มีขั้นตอนดังนี้

ขั้นที่ 1 การวัดตำแหน่งเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์เพื่อแก้ความคลาดเคลื่อน เนื่องจากการหดสั้นของฟิล์มภายหลังจากการล้างฟิล์มและตากให้แห้ง โดยที่วิธีการใส่ฟิล์มแบบแบรดเลย์และแบรกก์ ดังรูปที่ 5.10 วิธีการวัดดังนี้ (15)



รูป 5.10 ตำแหน่งของขอบใบมีดและเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์จากการบรรจุฟิล์มแบบแบรดเลย์และแบรกก์ในกล้องเดอบาย-เชอร์เรอร์

จากรูป A', B' กับ C', D' เป็นตำแหน่งของขอบใบมีด (knife edge) ที่เกิดบนขอบรูปของฟิล์มแต่ละแผ่นภายหลังจากการถ่ายภาพและล้างภาพเรียบร้อยแล้ว มุม  $\phi_1$ ,  $\phi_2$  เป็นมุมรองรับขอบใบมีดด้านมุมต่ำ AD', ด้านมุมสูง BC' ตามลำดับ ระยะบนฟิล์มจากเงาของขอบใบมีดด้านมุมต่ำถึงเงาของขอบใบมีดด้านมุมสูงของฟิล์มทั้งสองข้างรวมกันเท่ากับ  $A'B' + C'D'$  ซึ่งมีมุมรองรับเท่ากับ  $360^\circ - (\phi_1 + \phi_2)$  เพราะฉะนั้น

$$\text{จำนวนองศาต่อหนึ่งหน่วยความยาวของฟิล์ม} = \frac{360^\circ - (\phi_1 + \phi_2)}{A'B' + C'D'} \quad 5.3$$

ปริมาณนี้เป็นค่าคงที่เฉพาะฟิล์ม (individual film constant) ใช้สัญลักษณ์เป็น  $K$  มีข้อสังเกตว่าค่าคงที่เฉพาะฟิล์มจะแปรไปตามค่าความยาวของ  $AB'$  และ  $CD'$  ที่เกิดจากการหดสั้นของฟิล์ม เนื่องจากขบวนการล้างฟิล์มและตากให้แห้ง

ส่วนการคำนวณหามุมของแบรกก์ ( $\theta$ ) สำหรับแต่ละคู่ของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มข้างละเส้น สามารถคำนวณได้ดังนี้ จากรูปที่ 5.10  $AX'$ ,  $DY'$  เป็นระยะบนฟิล์มจากเงาขอบใบมีดด้านมุมต่ำถึงตำแหน่งของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์บนฟิล์มทั้งสองข้าง ผลบวกของ  $AX'$  กับ  $DY'$  ซึ่งเป็นส่วนโค้งที่รองรับมุม  $\omega_1$  กับ  $\omega_2$  ตามลำดับ ดังนั้น

$$\omega_1 + \omega_2 = K(AX' + DY') \quad 5.4$$

จากรูปพบว่า  $\omega_1 + \omega_2 + \phi_1 = 4\theta$  5.5

จากสมการ 5.4 และ 5.5 จะได้ว่า

$$K(AX' + DY') + \phi_1 = 4\theta \quad 5.6$$

เนื่องจากค่ามุม  $\phi_1$  เป็นค่าคงที่ของกล้อง ซึ่งกล้องเดอบาย-เชอร์เรอร์แบบปรับอุณหภูมิสูง UNICAM S.70 มีค่า  $\phi_1 = \phi_2 = 20$  องศา ดังนั้นจึงทำให้คำนวณค่าของมุม  $\theta$  สำหรับแต่ละคู่ของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มข้างละเส้นได้ โดยที่เส้นที่ปรากฏบนฟิล์มแต่ละข้างจะอยู่ระหว่างมุม  $\theta$  เท่ากับ  $5^\circ$  ถึง  $85^\circ$  ดังตาราง 5.7 สำหรับซิลิกอนเป็นผลึกในระบบคิวบิก มีโครงสร้างพื้นฐานแบบฟลูออไรต์ และมีชุดของระนาบที่ส่งผลทำให้เกิดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์มีดังนี้ (111), (220), (311), (400), (331), (422), (511), (440), (531), (620), (533) และ (444)

ขั้นที่ 2 จากค่ามุม  $\theta$  ต่าง ๆ สำหรับแต่ละคู่ของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มข้างละเส้น ที่ทราบดัชนีมิลเลอร์แล้ว นำมาคำนวณค่าคงที่โครงสร้าง  $a$  ได้โดยใช้ความสัมพันธ์

$$a = \frac{\lambda}{2\sin\theta} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad 5.7$$

ตาราง 5.7 ขั้นตอนการคำนวณมุม  $\theta$  จากเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มภาพถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของผลึกผงซิลิกอนที่  $28.8^{\circ}\text{C}$  ด้วยกล้องเดบาย-เซอร์เรอร์

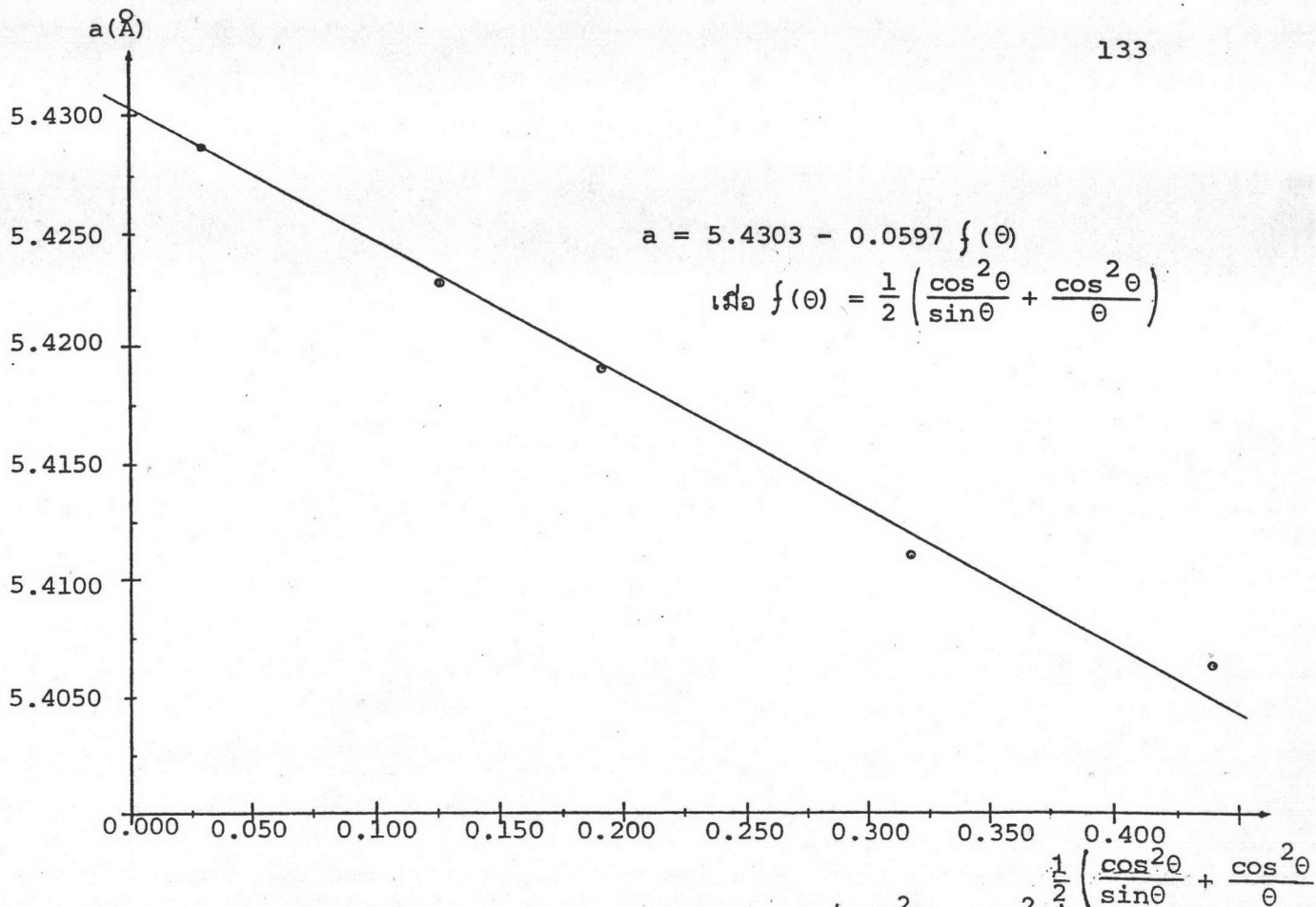
แบบทดสอบหุ้สูง UNICAM S.70 ซึ่งบรรจุฟิล์มแบบเบรตาเลย์และแบรกก์

$$\text{มีค่าคงที่ของกล้อง } \phi_1 = \phi_2 = 20 \text{ องศา}$$

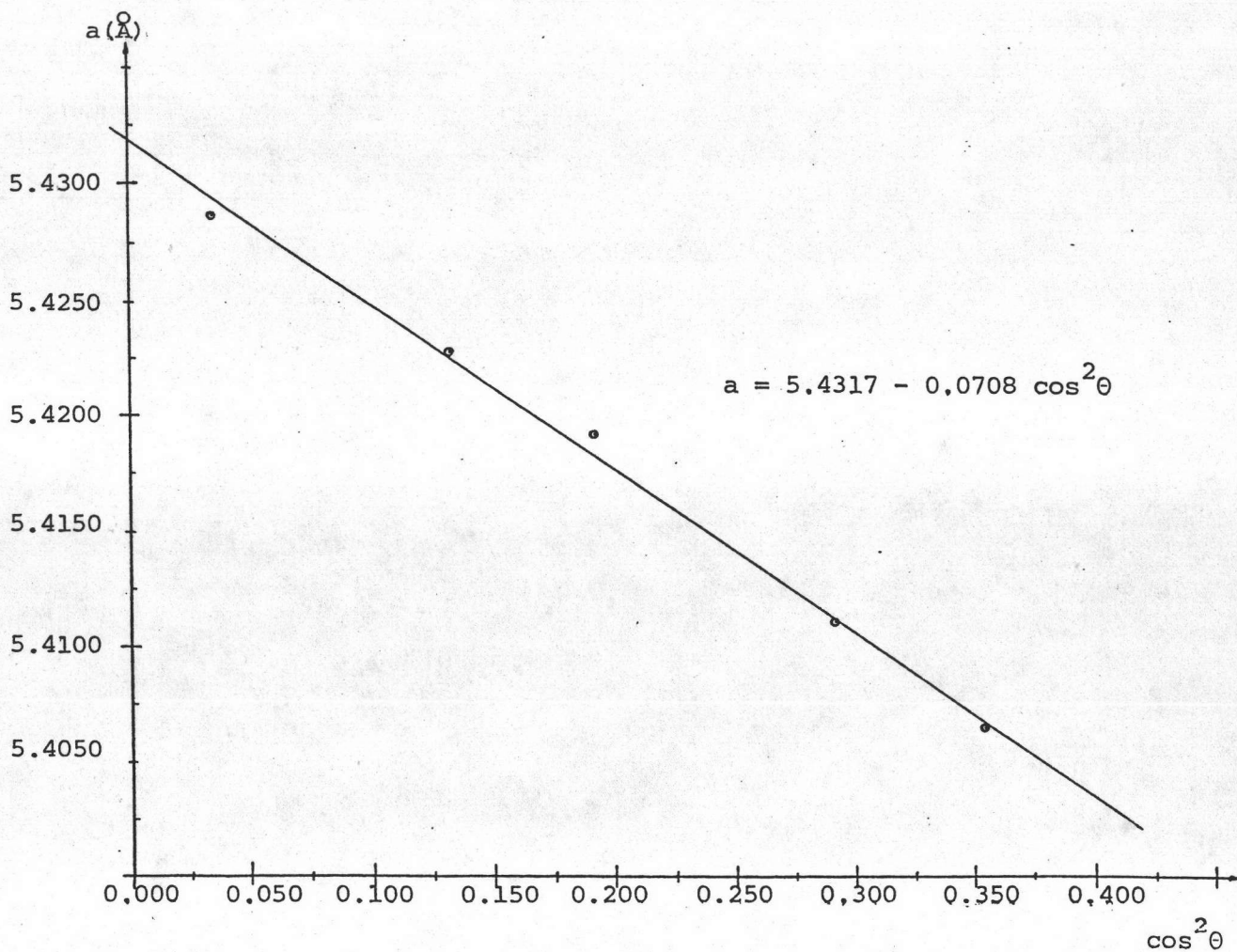
$$\text{ค่าคงที่ของฟิล์ม } K = \frac{360 - \phi_1 - \phi_2}{AB + CD} = \frac{320}{53.185} = 6.017 \text{ องศา/เซนติเมตร}$$

$$\text{เส้นผ่าศูนย์กลางของกล้อง } 19 \text{ เซนติเมตร}$$

เส้นที่	ตำแหน่ง x (cm)	ตำแหน่ง y (cm)	x + y (cm)	(x+y)-21.485 = g (cm)	g.K = $\omega_1 + \omega_2$ (องศา)	$\omega_1 + \omega_2 + \phi_1 = 4\theta$ (องศา)	$\theta$ (องศา)	$\cos^2 \theta$	$\frac{1}{2} \left( \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$	$d = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}$ (Å)	$h^2 + k^2 + l^2$	$a = d \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ (Å)
ขอบใบมีด	11.000	10.485	21.485	0.000	0.000	20.000	5.000					
1	14.162	13.730	27.892	6.408	38.552	58.552	14.638	0.9361	3.684	3.0483	3	5.2802
2	17.305	16.865	34.170	12.685	76.322	96.322	24.081	0.8335	2.013	1.8880	8	5.3404
3	18.775	18.338	37.112	15.628	94.026	114.026	28.507	0.7722	1.585	1.6139	11	5.3529
4	20.930	20.500	41.430	19.945	120.004	140.004	35.001	0.6710	1.134	1.3429	16	5.3717
5	22.130	21.710	43.840	22.355	134.504	154.504	38.626	0.6103	0.942	1.2340	19	5.5793
6	24.065	23.635	47.700	26.215	157.729	177.729	44.432	0.5099	0.693	1.1003	24	5.3903
7	25.212	24.775	49.988	28.502	171.492	191.492	47.873	0.4499	0.573	1.0386	27	5.3966
8	27.155	26.710	53.865	32.380	194.822	214.822	53.706	0.3504	0.404	0.9557	32	5.4064
9	28.380	27.925	56.305	34.820	209.503	229.503	57.376	0.2907	0.317	0.9146	35	5.4110
10	30.595	30.135	60.730	39.245	236.127	256.127	64.032	0.1917	0.192	0.8568	40	5.4191
11	32.140	31.675	63.815	42.330	254.688	274.688	68.672	0.1323	0.126	0.8269	43	5.4227
12	35.710	35.265	70.975	49.490	297.768	317.768	79.442	0.0336	0.029	0.7835	48	5.4286
ขอบใบมีด	37.550	37.120	74.670	53.185	320.000	340.000	85.000					



รูป 5.11 กราฟการแปรผันของค่าคงที่โครงสร้างผลึก  $a$  กับ  $\frac{1}{2} \left( \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$



รูป 5.12 กราฟการแปรผันของค่าคงที่โครงสร้างผลึก  $a$  กับ  $\cos^2 \theta$



พร้อมกับคำนวณค่าของ เนลสัน-โรเลย์ ฟังก์ชันคือ  $\frac{1}{2} \left( \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$  และ  
 ค่าของ  $\cos^2 \theta$

ขั้นที่ 3 เขียนกราฟระหว่างเนลสัน-โรเลย์ ฟังก์ชัน กับค่าคงที่โครงผลึก  
 a และระหว่าง  $\cos^2 \theta$  กับค่าคงที่ของโครงผลึก a ดังรูป 5.11 และ 5.12 โดย  
 ใช้เฉพาะเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏระหว่างมุม  $\theta$  เท่ากับ  $50^\circ$  ถึง  $85^\circ$   
 สำหรับซิลิกอนมีจำนวน 5 เส้น ซึ่งมากเพียงพอ พร้อมกับลากเส้นตรงผ่านจุดต่าง ๆ  
 อย่างเหมาะสมที่สุด ซึ่งสมการเส้นตรงที่เหมาะสมนี้สามารถหาได้โดยวิธีการกำลังสองน้อย  
 ที่สุด ซึ่งมีวิธีการดังนี้

ให้  $y = c_1 + c_2 x$  เป็นสมการเส้นตรงที่เหมาะสมที่สุด

เมื่อ  $y$  คือ ค่าคงที่โครงผลึก

$x$  คือ ค่าของเนลสัน-โรเลย์ฟังก์ชัน สำหรับกราฟระหว่างเนลสัน-โรเลย์  
 ฟังก์ชัน กับค่าคงที่โครงผลึก a หรือค่าของ  $\cos^2 \theta$  สำหรับกราฟ  
 ระหว่าง  $\cos^2 \theta$  กับค่าคงที่โครงผลึก a

$c_1, c_2$  คือ ค่าคงที่

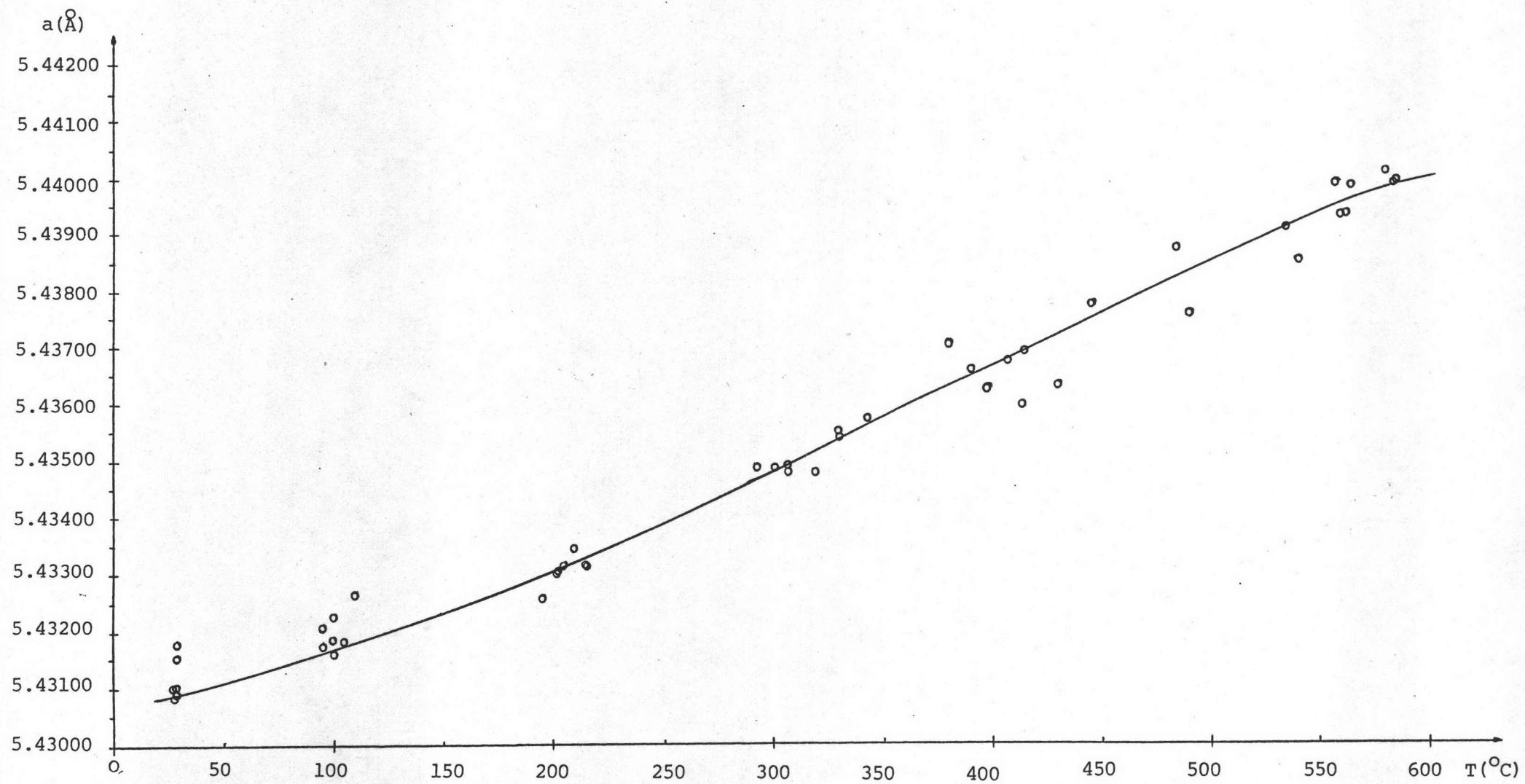
โดยวิธีการกำลังสองน้อยที่สุดเพื่อหาค่าคงที่  $c_1, c_2$  ที่เหมาะสมที่สุด ทำให้ได้สมการ  
 นอร์มอล (normal equation)

$$\sum_{i=1}^n (y)_i = n c_1 + c_2 \sum_{i=1}^n (x)_i \quad 5.8$$

$$\sum_{i=1}^n (x)_i (y)_i = c_1 \sum_{i=1}^n (x)_i + c_2 \sum_{i=1}^n (x)_i^2 \quad 5.9$$

เมื่อ  $(y)_i$  คือ ค่าคงที่โครงผลึก a สำหรับเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์เส้นที่  $i$

$(x)_i$  คือ ค่าของเนลสัน-โรเลย์ฟังก์ชัน สำหรับเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์  
 เส้นที่  $i$  สำหรับกราฟระหว่างเนลสัน-โรเลย์ฟังก์ชันกับค่าคงที่-  
 โครงผลึก a หรือ ค่าของ  $\cos^2 \theta$  สำหรับเส้นการเลี้ยวเบนรังสี-  
 เอ็กซ์เส้นที่  $i$  สำหรับกราฟระหว่าง  $\cos^2 \theta$  กับค่าคงที่โครงผลึก a



รูป 5.13 การเปลี่ยนแปลงค่าคงที่โครงผลึกของซิลิกอน (a) กับอุณหภูมิ (T)

n คือ จำนวนเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

จากสมการ 5.8, 5.9 สามารถคำนวณหาค่าของ  $c_1$ ,  $c_2$  ได้จึงหากราฟ  
สมการเส้นตรงที่เหมาะสมที่สุดได้

ขั้นที่ 4 จากสมการเส้นตรงที่เหมาะสมที่สุด สามารถใช้คำนวณได้ว่าเส้น  
ตรงเส้นนี้ตัดแกนค่าคงที่โครงสร้างผลึก  $a$  ที่ค่าเท่าไรได้ โดยที่ค่านี้ก็คือค่าของ  $c_1$  ซึ่ง  
จะเป็นค่าคงที่โครงสร้างผลึก  $a$  ของซิลิกอน ซึ่งมีความคลาดเคลื่อนน้อยที่สุดตามที่ต้องการ

ตัวอย่างการคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึก  $a$  ของซิลิกอนที่อุณหภูมิ  $28.8^\circ\text{C}$  ได้  
แสดงไว้ในตาราง 5.7 จากการคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึก  $a$  ของซิลิกอน ตามวิธีการ  
ที่กล่าวมาแล้วข้างต้น ณ ที่อุณหภูมิต่าง ๆ ได้แล้ว ให้นำมาเขียนกราฟแสดงการเปลี่ยนแปลง  
ค่าคงที่โครงสร้างผลึก  $a$  ของซิลิกอนกับอุณหภูมิ ดังรูปที่ 5.13 สำหรับข้อมูลได้แสดงใน  
ภาคผนวก ก.

#### 5.3.4 การคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึกของโลหะผสมกึ่งตัวนำที่อุณหภูมิต่าง ๆ

การคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึกของโลหะผสมกึ่งตัวนำแต่ละสารที่อุณหภูมิต่าง ๆ โดยใช้ข้อมูลจากการวัดตำแหน่งของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์บนฟิล์ม ที่ได้จาก  
ภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของแต่ละสารที่ผสมสารซิลิกอนที่อุณหภูมิต่าง ๆ โดยมีขั้นตอน  
การคำนวณดังนี้

ขั้นที่ 1 ทำการวัดฟิล์ม โดยใช้เทคนิคการวัดเพื่อลดความคลาดเคลื่อน  
เนื่องจากการหดสั้นของฟิล์ม ที่มีวิธีการใส่ฟิล์มแบบเบรตเลย์และแบรกก์ พร้อมทั้งคำนวณ  
ค่ามุมของแบรกก์ ( $\theta$ ) และ  $(\sin^2\theta)_{\text{obs}}$  ต่าง ๆ สำหรับแต่ละคู่ของเส้นการเลี้ยวเบน  
รังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มบันทึกการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยสารแต่ละสารที่ผสมซิลิกอน  
ที่อุณหภูมิ  $T^\circ\text{C}$  ข้างละเส้น

ขั้นที่ 2 จากกราฟแสดงการเปลี่ยนแปลงค่าคงที่โครงสร้างผลึกของซิลิกอนกับอุณหภูมิ  
สามารถใช้หาค่าคงที่โครงสร้างผลึกของซิลิกอน ณ ที่อุณหภูมิ  $T^\circ\text{C}$  ได้ แล้วทำการคำนวณค่าของ  
 $(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$  ต่าง ๆ สำหรับแต่ละคู่ของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์เนื่องจากสารซิลิกอน

ที่ปรากฏบนฟิล์มบันทึกการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยแต่ละลวดที่ผสมซิลิกอนที่อุณหภูมิ  $T^{\circ}\text{C}$   
ข้างละเส้น

ขั้นที่ 3 เขียนกราฟระหว่างค่าของ  $\Delta\sin^2\theta = (\sin^2\theta)_{\text{obs}} - (\sin^2\theta)_{\text{cal}}$  กับเนลสัน-โรเลย์ ฟังก์ชัน คือ  $\frac{1}{2} \left( \frac{\cos^2\theta}{\sin\theta} + \frac{\cos^2\theta}{\theta} \right)$  จะได้กราฟใช้แก้ความผิดพลาดอันเนื่องจากการคลาดเคลื่อนอย่างเป็นระบบ โดยใช้ตำแหน่งของเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ เนื่องจากซิลิกอน ดังรูปที่ 5.14 ซึ่งใช้หาค่าแก้  $\Delta\sin^2\theta$  ณ ที่เนลสัน-โรเลย์ ฟังก์ชัน ต่าง ๆ เพื่อแก้ความผิดพลาดแล้วจะได้  $(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$  โดยที่

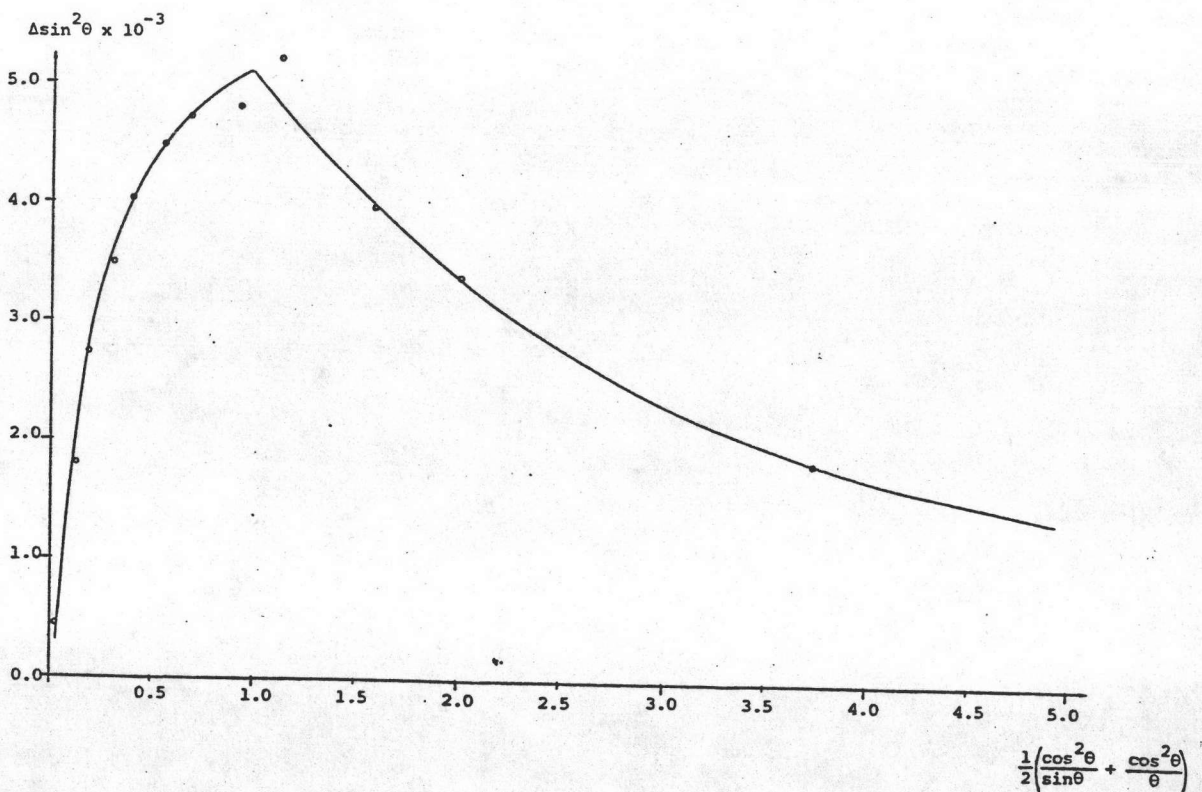
$$(\sin^2\theta)_{\text{cor}} = (\sin^2\theta)_{\text{obs}} - \Delta\sin^2\theta$$

ขั้นที่ 4 คำนวณค่าคงที่โครงสร้าง  $a, c$  ของโลหะผสมกึ่งตัวนำ ที่อุณหภูมิ  $T^{\circ}\text{C}$  อย่างหายับ ๆ ได้ จากการพิจารณาารูปแบบการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของผลึกในระบเบเตตระโกนัล กึ่งตัวนำ มีรูปแบบคล้ายกับรูปแบบการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ของผลึกในระบบเตตระโกนัล มีโครงสร้างพื้นฐานแบบพีระเชิงสี่ และมีโครงสร้างแบบซาลโคไพไรท์ ซึ่งจะมีชุดของระนาบที่ส่งผลทำให้เกิดการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ ดังนี้ (112), (220), (204), (116), (400), (008), (332), (316), (424), (228), (512), (336), (1 1 10), (440), (408), (532), (516) และ (3 1 10) เป็นต้น จึงใช้ล้มการสำหรับระบบเตตระโกนัล ตามสมการ 4.37 เพื่อหาค่าคงที่โครงสร้าง  $a, c$  ของผลึกอย่างหายับ ๆ

ขั้นที่ 5 ใช้ค่าคงที่โครงสร้าง  $a, c$  อย่างหายับ ๆ คำนวณค่า  $(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$  สำหรับแต่ละดัชนีผลเลอร (hkl) ต่าง ๆ พร้อมกับนำไปเปรียบเทียบกับ  $(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$  ของแต่ละเส้นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ในขั้นที่ 3 ถ้าค่าของ  $(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$  มีค่าใกล้เคียงกับค่าของ  $(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$  ของดัชนีผลเลอร (hkl) อันไหน ก็พอจะอนุมานได้ว่า เส้นการเลี้ยวเบนนั้นมีดัชนีผลเลอรเป็น (hkl) นั้น ขั้นตอนนี้ก็คือ การกำหนดดัชนีผลเลอร (hkl) ของเส้นการเลี้ยวเบนแต่ละเส้นนั่นเอง

ขั้นที่ 6 ใช้โปรแกรม CSPHCENE คำนวณปรับค่าคงที่โครงสร้าง  $a, c$  อย่างละเอียดด้วยวิธีการกำลังสองน้อยที่สุด โดยใช้ข้อมูลจากขั้นที่ 3 และขั้นที่ 5

ตัวอย่างการคำนวณค่าคงที่โครงสร้างของโลหะผสมกึ่งตัวนำที่อุณหภูมิสูงได้ แสดงไว้ในตารางที่ 5.8 ซึ่งเป็นการคำนวณค่าคงที่โครงสร้างของ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_2$  ที่อุณหภูมิ  $100^\circ\text{C}$  ส่วนผลของการคำนวณค่าคงที่โครงสร้าง  $a, c$  ของโลหะผสมกึ่งตัวนำ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{2(1-z)}\text{Se}_{2z}$  เมื่อมีค่าสัดส่วนของอะตอม  $z$  ต่าง ๆ เป็น  $0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$  และ  $1.0$  ณ ที่อุณหภูมิระหว่าง  $270^\circ\text{C}$  ถึง  $560^\circ\text{C}$  ได้แสดงไว้ในตาราง 5.9 ก., ข., ค., ง., จ. และ ฉ. ตามลำดับ



รูป 5.14 กราฟใช้แก้ความคลาดเคลื่อนของ  $(\sin^2 \theta)_{\text{obs}}$

ตาราง 5.8 ขั้นตอนการทำมุม  $\theta$  โดยใช้ข้อมูลจากภาพถ่ายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ที่อุณหภูมิ 100 °C ของ  $AgIn_0.8Ca_0.2Te_2$   
 $k = 30/53.132 = 6.023$  องศา/เซนติเมตร, ค่าคงที่ของโครงสร้าง  $\phi_1 = \phi_2 = 20$  องศา, ค่าคงที่โครงสร้าง  $a$  ของ  $SI = 5.4332 \text{ \AA}$  (จากกราฟ)

เส้นที่	ส่วนห่าง x (cm)	ส่วนห่าง y (cm)	x + y (cm)	(x+y)-2.345 = g (cm)	(g.k) + $\phi_1 = 4\theta$ (องศา)	$\theta$ (องศา)	$\frac{1}{2} \left( \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$	(sin <sup>2</sup> θ) <sub>obs</sub>	(sin <sup>2</sup> θ) <sub>cal</sub>	$\Delta \sin^2 \theta$	(sin <sup>2</sup> θ) <sub>cor</sub>	h k l
ชนวนที่ 1	9.680	10.665	20.345	0.000	20.000	5.000				0.00158	0.04402	1 1 2
2	12.055	13.160	25.215	4.870	49.330	12.333	4.452	0.04560	0.06033	0.00187	0.04402	1 1 1 (SI)
3	12.760	13.860	26.620	6.275	57.792	14.448	3.738	0.06220	0.06033	0.00187	0.04402	2 2 0
4	14.630	15.730	30.360	10.015	80.317	20.079	2.543	0.11790	0.00278	0.00278	0.11512	2 0 4
5	14.730	15.820	30.550	10.205	81.461	20.365	2.500	0.12110	0.00282	0.00282	0.11828	3 0 1 2
6	15.860	16.955	32.815	12.470	95.103	23.776	2.047	0.16250	0.00337	0.00337	0.15913	2 2 0 (SI)
7	15.905	17.000	32.905	12.560	95.645	23.911	2.032	0.16430	0.16089	0.00341	0.16517	1 1 6
8	16.015	17.110	33.125	12.780	96.970	24.242	1.996	0.16860	0.22123	0.00343	0.16517	3 1 1 (SI)
9	17.375	18.465	35.840	15.495	113.321	28.330	1.600	0.22520	0.00410	0.00410	0.23040	4 0 0
10	17.585	18.675	36.260	15.915	115.851	28.963	1.548	0.23450	0.00422	0.00422	0.24298	0 0 8
11	17.865	18.960	36.825	16.480	119.254	29.813	1.482	0.24720	0.00449	0.00449	0.27451	3 3 2
12	18.560	19.640	38.200	17.855	127.536	31.884	1.330	0.27900	0.00453	0.00453	0.28027	3 1 6
13	18.680	19.765	38.445	18.100	129.010	32.253	1.305	0.28480	0.00522	0.00522	0.28027	4 0 0 (SI)
14	19.560	20.630	40.190	19.845	139.201	34.880	1.141	0.32700	0.00501	0.00501	0.34879	4 2 4
15	20.100	21.168	41.268	20.922	146.010	36.502	1.050	0.35380	0.00507	0.00507	0.35733	2 2 8
16	20.265	21.340	41.605	21.260	148.042	37.010	1.024	0.36240	0.00478	0.00478	0.35733	3 3 1 (SI)
17	20.750	21.820	42.570	22.225	153.854	38.464	0.950	0.38960	0.38212	0.00478	0.38947	5 1 2
18	20.900	21.965	42.865	22.520	155.631	38.908	0.928	0.39450	0.00503	0.00503	0.38947	3 3 6
19	21.010	22.072	43.082	22.738	156.941	39.235	0.912	0.40010	0.00501	0.00501	0.39509	1 1 10
20	21.250	22.322	43.572	23.228	159.892	39.973	0.878	0.41270	0.00498	0.00498	0.40772	4 0 8
21	22.510	23.560	46.070	25.725	174.933	43.773	0.720	0.47790	0.00477	0.00477	0.47313	4 2 2 (SI)
22	22.685	23.745	46.430	26.085	177.102	44.275	0.699	0.48740	0.48268	0.00472	0.48268	5 3 2
23	23.120	24.170	47.290	26.945	182.281	45.570	0.651	0.51000	0.00465	0.00465	0.50535	5 1 6
24	23.240	24.280	47.520	27.175	183.666	45.917	0.638	0.51600	0.00462	0.00462	0.51138	5 1 1 (SI)
25	23.835	24.885	48.720	28.375	190.894	47.723	0.577	0.54750	0.54301	0.00449	0.54301	4 4 0 (SI)
26	25.785	26.828	52.612	32.267	214.337	53.584	0.408	0.64760	0.64357	0.00403	0.64357	5 3 1 (SI)
27	27.010	28.040	55.050	34.705	229.017	57.254	0.320	0.70740	0.70390	0.00350	0.70390	6 2 0 (SI)
28	29.242	30.255	59.497	39.152	255.803	63.951	0.194	0.80720	0.80446	0.00274	0.80446	5 3 3 (SI)
29	30.780	31.790	62.570	42.225	274.308	68.577	0.127	0.86660	0.86479	0.00181	0.86479	4 4 4 (SI)
30	34.360	35.365	69.725	49.380	317.400	79.350	0.029	0.96580	0.96535	0.00449	0.96535	4 4 4 (SI)
ชนวนที่ 31	36.240	37.238	73.478	53.132	340.000	85.000						

ตาราง 5.9 ก. ข้อมูลของการคำนวณค่าคงที่โครงผลึกของ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_2$   
ที่อุณหภูมิ  $28.5^\circ\text{C}$  ถึง  $480^\circ\text{C}$

อุณหภูมิ ( $^\circ\text{C}$ )	h	k	l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
						a ( $\text{\AA}$ )	c ( $\text{\AA}$ )
28.5	1	1	2	0.04356	0.04400	6.4128+0.0018	12.5188+0.0042
	2	2	0	0.11506	0.11542		
	2	0	4	0.11823	0.11829		
	3	1	2	0.15968	0.15943		
	1	1	6	0.16523	0.16516		
	4	0	0	0.23072	0.23085		
	0	0	8	0.24251	0.24231		
	3	3	2	0.27495	0.27485		
	3	1	6	0.28069	0.28058		
	4	2	4	0.34927	0.34914		
	2	2	8	0.35780	0.35774		
	5	1	2	0.39012	0.39028		
	3	3	6	0.39619	0.39601		
	1	1	10	0.40695	0.40746		
4	0	8	0.47353	0.47316			
100	1	1	2	0.04402	0.04395	6.4198+0.0011	12.5126+0.0027
	2	2	0	0.11512	0.11517		
	2	0	4	0.11828	0.11822		
	3	1	2	0.15913	0.15913		
	1	1	6	0.16517	0.16523		

ตาราง 5.9 ก. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å)
	4 0 0	0.23040	0.23035		
	0 0 8	0.24298	0.24255		
	3 3 2	0.27451	0.27430		
	3 1 6	0.28027	0.28040		
	4 2 4	0.34879	0.34857		
	2 2 8	0.35733	0.35772		
	5 1 2	0.38947	0.38948		
	3 3 6	0.39509	0.39558		
	1 1 10	0.40772	0.40778		
	4 0 8	0.47313	0.47290		
215	1 1 2	0.04399	0.04389	6.4280±0.0008	12.5095±0.0019
	2 2 0	0.11482	0.11488		
	2 0 4	0.11797	0.11811		
	3 1 2	0.15873	0.15877		
	1 1 6	0.16511	0.16522		
	4 0 0	0.22981	0.22976		
	0 0 8	0.24270	0.24267		
	3 3 2	0.27385	0.27365		
	3 1 6	0.28010	0.28010		
	4 2 4	0.34791	0.34787		
	2 2 8	0.35750	0.35755		
	5 1 2	0.38849	0.38854		



ตาราง 5.9 ก. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å)
	3 3 6	0.39462	0.39499		
	1 1 10	0.40794	0.40789		
	4 0 8	0.47274	0.47244		
307	1 1 2	0.04367	0.04371	6.4444±0.0009	12.5220±0.0022
	2 2 0	0.11411	0.11430		
	2 0 4	0.11756	0.11769		
	3 1 2	0.15787	0.15801		
	1 1 6	0.16461	0.16480		
	4 0 0	0.22847	0.22859		
	0 0 8	0.24226	0.24218		
	3 3 2	0.27265	0.27230		
	3 1 6	0.27931	0.27910		
	4 2 4	0.34623	0.34629		
	2 2 8	0.35657	0.35648		
	5 1 2	0.38681	0.38660		
	3 3 6	0.39338	0.39340		
	1 1 10	0.40711	0.40699		
	4 0 8	0.47052	0.47078		
430	1 1 2	0.04385	0.04361	6.4554±0.0017	12.5244±0.0055
	2 2 0	0.11397	0.11391		
	2 0 4	0.11741	0.11748		

ตาราง 5.9 ก. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å)
	3 1 2	0.15729	0.15752		
	1 1 6	0.16460	0.16465		
	4 0 0	0.22770	0.22782		
	3 3 2	0.27150	0.27142		
	3 1 6	0.27834	0.27856		
	4 2 4	0.34515	0.34529		
	2 2 8	0.35597	0.35600		
	3 3 6	0.39290	0.39247		

ตารางที่ 5.9 ข. ข้อมูลของการคำนวณค่าคงที่โครงผลึกของ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$  ที่อุณหภูมิ 28.7 °C ถึง 560 °C

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å)
28.7	1 1 2	0.04505	0.04519	6.3422±0.0010	12.2994±0.0023
	2 2 0	0.11803	0.11801		
	2 0 4	0.12178	0.12176		
	3 1 2	0.16341	0.16320		
	1 1 6	0.17057	0.17071		
	4 0 0	0.23607	0.23602		
	0 0 8	0.25133	0.25103		
	3 3 2	0.28141	0.28121		

ตาราง 5.9 ข. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h	k	l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
						a (Å)	c (Å)
	3	1	6	0.28877	0.28872		
	4	2	4	0.35792	0.35778		
	2	2	8	0.36885	0.36904		
	5	1	2	0.39908	0.39922		
	3	3	6	0.40640	0.40673		
	1	1	10	0.42176	0.42173		
95.0	1	1	2	0.04531	0.04517	6.3445±0.0012	12.2990±0.0027
	2	2	0	0.11800	0.11793		
	2	0	4	0.12137	0.12172		
	3	1	2	0.16342	0.16310		
	1	1	6	0.17085	0.17070		
	4	0	0	0.23600	0.23586		
	0	0	8	0.25130	0.25105		
	3	3	2	0.28110	0.28103		
	3	1	6	0.28865	0.28862		
	4	2	4	0.35746	0.35758		
	2	2	8	0.36890	0.36897		
	5	1	2	0.39883	0.39895		
	3	3	6	0.40631	0.40655		
	1	1	10	0.42166	0.42174		

ตาราง 5.9 ข. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h	k	l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
						a (Å)	c (Å)
210	1	1	2	0.04507	0.04511	6.3507±0.0013	12.2990±0.0031
	2	2	0	0.11770	0.11770		
	2	0	4	0.12165	0.12161		
	3	1	2	0.16303	0.16281		
	1	1	6	0.17100	0.17064		
	4	0	0	0.23547	0.23539		
	0	0	8	0.25147	0.25105		
	3	3	2	0.28041	0.28051		
	3	1	6	0.28837	0.28833		
	4	2	4	0.35722	0.35700		
	2	2	8	0.36877	0.36874		
	5	1	2	0.39795	0.39820		
	3	3	6	0.40592	0.40603		
1	1	10	0.42107	0.42168			
292	1	1	2	0.04430	0.04486	6.3746±0.0022	12.3147±0.0052
	2	2	0	0.11649	0.11682		
	2	0	4	0.12084	0.12101		
	3	1	2	0.16153	0.16167		
	1	1	6	0.17003	0.17006		
	4	0	0	0.23369	0.23363		
	0	0	8	0.25057	0.25041		
	3	3	2	0.27860	0.27849		

ตาราง 5.9 ข. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å)
	3 1 6	0.28705	0.28688		
	4 2 4	0.35477	0.35464		
	2 2 8	0.36740	0.36722		
	5 1 2	0.39509	0.39530		
	3 3 6	0.40442	0.40369		
	1 1 10	0.42007	0.42046		
380	1 1 2	0.04500	0.04488	6.3822±0.0016	12.2790±0.0037
	2 2 0	0.11661	0.11654		
	2 0 4	0.12115	0.12124		
	3 1 2	0.16142	0.16141		
	1 1 6	0.17063	0.17081		
	4 0 0	0.23346	0.23308		
	0 0 8	0.25145	0.25187		
	3 3 2	0.27820	0.27795		
	3 1 6	0.28716	0.28735		
	4 2 4	0.35433	0.35431		
	2 2 8	0.36828	0.36840		
	5 1 2	0.39427	0.39449		
	3 3 6	0.40343	0.40388		
	1 1 10	0.42346	0.42268		

ตาราง 5.9 ข. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å)
560	1 1 2	0.04503	0.04484	6.3947±0.0019	12.2471±0.0056
	2 2 0	0.11623	0.11608		
	2 0 4	0.12117	0.12134		
	3 1 2	0.16050	0.16093		
	1 1 6	0.17119	0.17143		
	4 0 0	0.23274	0.23216		
	0 0 8	0.25346	0.25318		
	3 3 2	0.27725	0.27701		
	3 1 6	0.28737	0.28752		
	4 2 4	0.35363	0.35350		
	2 2 8	0.36928	0.36926		
	5 1 2	0.39257	0.39309		

ตาราง 5.9 ค. ข้อมูลของการคำนวณค่าคงที่โครงผลึกของ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.2}\text{Se}_{0.8}$  ที่อุณหภูมิ 28.5 °C ถึง 490 °C

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å)
28.5	1 1 2	0.04617	0.04634	6.2757±0.0015	12.1006±0.0074
	2 2 0	0.12062	0.12052		
	2 0 4	0.12527	0.12510		
	3 1 2	0.16702	0.16687		

ตาราง 5.9 ค. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2 \theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2 \theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å)
	1 1 6	0.17613	0.17601		
	4 0 0	0.24152	0.24105		
	3 3 2	0.28740	0.28739		
	3 1 6	0.29643	0.29654		
	4 2 4	0.36586	0.36615		
	5 1 2	0.40764	0.40792		
105	1 1 2	0.04612	0.04629	6.2796±0.0010	12.1045±0.0050
	2 2 0	0.12028	0.12038		
	2 0 4	0.12484	0.12498		
	3 1 2	0.16658	0.16667		
	1 1 6	0.17599	0.17588		
	4 0 0	0.24087	0.24075		
	3 3 2	0.28726	0.28704		
	3 1 6	0.29630	0.29626		
	4 2 4	0.36577	0.36579		
	5 1 2	0.40734	0.40742		
195	1 1 2	0.04608	0.04626	6.2874±0.0014	12.0870±0.0048
	2 2 0	0.12000	0.12008		
	2 0 4	0.12503	0.12502		
	3 1 2	0.16640	0.16634		
	1 1 6	0.17671	0.17623		

ตาราง 5.9 ค. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h	k	l	$(\sin^2\theta)_{cor}$	$(\sin^2\theta)_{cal}$	ค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
						a (Å)	c (Å)
	4	0	0	0.24030	0.24015		
	0	0	8	0.25976	0.25993		
	3	3	2	0.28657	0.28642		
	3	1	6	0.29611	0.29631		
	4	2	4	0.36488	0.36517		
	5	1	2	0.40660	0.40649		
330	1	1	2	0.04621	0.04614	6.2980±0.0010	12.0950±0.0052
	2	2	0	0.11956	0.11968		
	2	0	4	0.12450	0.12473		
	3	1	2	0.16565	0.16582		
	1	1	6	0.17586	0.17594		
	4	0	0	0.23946	0.23935		
	3	3	2	0.28562	0.28549		
	3	1	6	0.29587	0.29561		
	4	2	4	0.36418	0.36408		
	5	1	2	0.40504	0.40517		
407	1	1	2	0.04603	0.04610	6.3099±0.0010	12.0703±0.0051
	2	2	0	0.11942	0.11922		
	2	0	4	0.12495	0.12477		
	3	1	2	0.16533	0.16532		
	1	1	6	0.17653	0.17642		



ตาราง 5.9 ค. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2 \theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2 \theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å)
	4 0 0	0.23853	0.23845		
	3 3 2	0.28473	0.28454		
	3 1 6	0.29547	0.29564		
	4 2 4	0.36296	0.36322		
	5 1 2	0.40365	0.40377		
490	1 1 2	0.04615	0.04612	6.3112±0.0009	12.0582±0.0045
	2 2 0	0.11939	0.11917		
	2 0 4	0.12483	0.12488		
	3 1 2	0.16528	0.16529		
	1 1 6	0.17678	0.17670		
	4 0 0	0.23828	0.23835		
	3 3 2	0.28438	0.28447		
	3 1 6	0.29591	0.29588		
	4 2 4	0.36292	0.36323		
	5 1 2	0.40382	0.40364		

ตาราง 5.9 ง. ข้อมูลของการคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึกของ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{1.2}$  ที่อุณหภูมิ 28.6 °C ถึง 446 °C

อุณหภูมิ (°C)	h	k	l	$(\sin^2 \theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2 \theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
						a (Å)	c (Å)
28.6	1	1	2	0.04757	0.04765	6.2007±0.0014	11.8906±0.0038
	2	2	0	0.12351	0.12346		
	2	0	4	0.12875	0.12888		
	3	1	2	0.17126	0.17111		
	1	1	6	0.18197	0.18194		
	4	0	0	0.24717	0.24692		
	3	3	2	0.29462	0.29457		
	3	2	5	0.30587	0.30554		
	4	2	4	0.37567	0.37579		
	2	2	8	0.39280	0.39205		
	5	1	2	0.41762	0.41803		
	3	3	6	0.42858	0.42886		
1	1	10	0.45011	0.45053			
100	1	1	2	0.04759	0.04763	6.2049±0.0016	11.8829±0.0044
	2	2	0	0.12348	0.12329		
	2	0	4	0.12881	0.12888		
	3	1	2	0.17109	0.17092		
	1	1	6	0.18189	0.18210		
	4	0	0	0.24653	0.24658		
	3	3	2	0.29415	0.29421		
	3	2	5	0.30579	0.30540		

ตาราง 5.9 ง. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å)
	4 2 4	0.37508	0.37546		
	2 2 8	0.39317	0.39223		
	5 1 2	0.41751	0.41750		
	3 3 6	0.42827	0.42868		
	1 1 10	0.45066	0.45104		
205	1 1 2	0.04756	0.04758	6.2106±0.0018	11.8793±0.0048
	2 2 0	0.12301	0.12307		
	2 0 4	0.12875	0.12881		
	3 1 2	0.17065	0.17065		
	1 1 6	0.18206	0.18213		
	4 0 0	0.24622	0.24613		
	3 3 2	0.29397	0.29372		
	3 2 5	0.30551	0.30510		
	4 2 4	0.37451	0.37494		
	2 2 8	0.39321	0.39216		
	5 1 2	0.41655	0.41678		
	3 3 6	0.42806	0.42827		
	1 1 10	0.45063	0.45123		
307	1 1 2	0.04732	0.04744	6.2292±0.0019	11.8639±0.0058
	2 2 0	0.12252	0.12233		
	2 0 4	0.12856	0.12861		

ตาราง 5.9 ง. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2 \theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2 \theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å) -
	3 1 2	0.16996	0.16978		
	1 1 6	0.18177	0.18234		
	4 0 0	0.24509	0.24466		
	0 0 8	0.26990	0.26980		
	3 3 2	0.29207	0.29210		
	3 2 5	0.30449	0.30418		
	4 2 4	0.37265	0.37328		
	2 2 8	0.39285	0.39213		
	5 1 2	0.41441	0.41444		
	3 3 6	0.42655	0.42700		
343	1 1 2	0.04751	0.04741	6.2317±0.0014	11.8662±0.0043
	2 2 0	0.12228	0.12223		
	2 0 4	0.12831	0.12854		
	3 1 2	0.16969	0.16965		
	1 1 6	0.18228	0.18226		
	4 0 0	0.24453	0.24447		
	0 0 8	0.26917	0.26969		
	3 3 2	0.29175	0.29188		
	3 2 5	0.30428	0.30398		
	4 2 4	0.37281	0.37301		
	2 2 8	0.39264	0.39192		
	5 1 2	0.41401	0.41412		
	3 3 6	0.42658	0.42673		

ตาราง 5.9 ง. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å)
415	1 1 2	0.04725	0.04741	6.2361±0.0014	11.8536±0.0044
	2 2 0	0.12189	0.12206		
	2 0 4	0.12841	0.12860		
	3 1 2	0.16950	0.16947		
	1 1 6	0.18238	0.18254		
	4 0 0	0.24420	0.24412		
	0 0 8	0.26992	0.27027		
	3 3 2	0.29137	0.29153		
	3 2 5	0.30379	0.30392		
	4 2 4	0.37237	0.37272		
	2 2 8	0.39305	0.39233		
	5 1 2	0.41386	0.41359		
	3 3 6	0.42689	0.42666		
446	1 1 2	0.04732	0.04731	6.2358±0.0026	11.8890±0.0079
	2 2 0	0.12215	0.12207		
	2 0 4	0.12868	0.12820		
	3 1 2	0.16947	0.16938		
	1 1 6	0.18225	0.18164		
	4 0 0	0.24425	0.24414		
	0 0 8	0.26776	0.26866		
	3 3 2	0.29082	0.29145		
	3 2 5	0.30382	0.30331		

ตาราง 5.9 ง. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å)
	4 2 4	0.37169	0.37234		
	2 2 8	0.39054	0.39073		
	5 1 2	0.41330	0.41352		
	3 3 6	0.42663	0.42578		

ตาราง 5.9 ฉ. ข้อมูลการคำนวณค่าคงที่โครงผลึกของ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{0.4}\text{Se}_{1.6}$   
ที่อุณหภูมิ 27.0 °C ถึง 400 °C

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å)
27.0	1 1 2	0.04846	0.04849	6.1528±0.0021	11.7655±0.0056
	2 2 0	0.12540	0.12539		
	2 0 4	0.13143	0.13128		
	3 1 2	0.17399	0.17388		
	1 1 6	0.18528	0.18566		
	4 0 0	0.25121	0.25078		
	0 0 8	0.27457	0.27433		
	3 3 2	0.29933	0.29927		
	3 1 6	0.31177	0.31104		
	2 2 8	0.39926	0.39972		
	5 1 2	0.42402	0.42466		

ตาราง 5.9 จ. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h	k	l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
						a (Å)	c (Å)
110	1	1	2	0.04845	0.04846	6.1560±0.0014	11.7664±0.0037
	2	2	0	0.12519	0.12526		
	2	0	4	0.13112	0.13120		
	3	1	2	0.17383	0.17372		
	1	1	6	0.18562	0.18560		
	4	0	0	0.25067	0.25052		
	0	0	8	0.27454	0.27429		
	3	3	2	0.29901	0.29898		
	3	1	6	0.31135	0.31086		
	2	2	8	0.39896	0.39955		
5	1	2	0.42406	0.42424			
202	1	1	2	0.04843	0.04842	6.1612±0.0018	11.7598±0.0038
	2	2	0	0.12492	0.12504		
	2	0	4	0.13106	0.13117		
	3	1	2	0.17359	0.17347		
	1	1	6	0.18569	0.18572		
	4	0	0	0.25025	0.25009		
	0	0	8	0.27491	0.27460		
	3	3	2	0.29841	0.29851		
	3	1	6	0.31115	0.31077		
	2	2	8	0.39910	0.39964		

ตาราง 5.9 จ. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å)
301	1 1 2	0.04838	0.04830	6.1748±0.0008	11.7566±0.0021
	2 2 0	0.12452	0.12450		
	2 0 4	0.13105	0.13093		
	3 1 2	0.17286	0.17279		
	1 1 6	0.18557	0.18567		
	4 0 0	0.24890	0.24899		
	0 0 8	0.27475	0.27475		
	3 3 2	0.29732	0.29728		
	3 1 6	0.31046	0.31016		
	2 2 8	0.39905	0.39924		
	5 1 2	0.42163	0.42178		
400	1 1 2	0.04810	0.04836	6.1795±0.0030	11.7173±0.0124
	2 2 0	0.12454	0.12431		
	2 0 4	0.13128	0.13130		
	3 1 2	0.17258	0.17267		
	4 0 0	0.24854	0.24862		
	3 1 6	0.31113	0.31097		



ตาราง 5.9 จ. ข้อมูลของการคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึกของ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Se}_2$  ที่อุณหภูมิ 27.0 °C ถึง 550 °C

อุณหภูมิ (°C)	h	k	l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
						a (Å)	c (Å)
27.0	1	1	2	0.04987	0.04994	6.0798±0.0014	11.5357±0.0042
	2	2	0	0.12873	0.12842		
	2	0	4	0.13588	0.13555		
	3	1	2	0.17871	0.17836		
	1	1	6	0.19290	0.19262		
	4	0	0	0.25706	0.25684		
	0	0	8	0.28552	0.28537		
	3	3	2	0.30684	0.30678		
	4	2	4	0.39217	0.39238		
	2	2	8	0.41340	0.41378		
	5	1	2	0.43490	0.43519		
3	3	6	0.44917	0.44946			
95.0	1	1	2	0.04977	0.04993	6.0815±0.0013	11.5329±0.0040
	2	2	0	0.12852	0.12835		
	2	0	4	0.13576	0.13555		
	3	1	2	0.17782	0.17828		
	1	1	6	0.19300	0.19268		
	4	0	0	0.25682	0.25669		
	0	0	8	0.28553	0.28551		
	3	3	2	0.30668	0.30662		
	4	2	4	0.39205	0.39224		

ตาราง 5.9 จ. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h	k	l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
						a (Å)	c (Å)
	2	2	8	0.41372	0.41386		
	5	1	2	0.43535	0.43497		
	3	3	6	0.44910	0.44938		
202	1	1	2	0.04984	0.04988	6.0894±0.0016	11.5208±0.0046
	2	2	0	0.12837	0.12801		
	2	0	4	0.13570	0.13553		
	3	1	2	0.17812	0.17790		
	1	1	6	0.19330	0.19294		
	4	0	0	0.25616	0.25602		
	0	0	8	0.28643	0.28611		
	3	3	2	0.30627	0.30591		
	4	2	4	0.39127	0.39155		
	2	2	8	0.41359	0.41412		
	5	1	2	0.43370	0.43392		
	3	3	6	0.44858	0.44896		
320	1	1	2	0.04980	0.04983	6.0976±0.0011	11.5117±0.0033
	2	2	0	0.12790	0.12767		
	2	0	4	0.13563	0.13548		
	3	1	2	0.17770	0.17750		
	1	1	6	0.19330	0.19311		
	4	0	0	0.25558	0.25534		
	0	0	8	0.28668	0.28656		

ตาราง 5.9 จ. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h k l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
				a (Å)	c (Å)
	3 3 2	0.30535	0.30517		
	4 2 4	0.39088	0.39082		
	2 2 8	0.41407	0.41423		
	5 1 2	0.43247	0.43284		
	3 3 6	0.44800	0.44845		
415	1 1 2	0.04988	0.04978	6.1046±0.0006	11.5022±0.0017
	2 2 0	0.12742	0.12738		
	2 0 4	0.13555	0.13545		
	3 1 2	0.17712	0.17716		
	1 1 6	0.19331	0.19330		
	4 0 0	0.25481	0.25476		
	0 0 8	0.28701	0.28703		
	3 3 2	0.30462	0.30454		
	4 2 4	0.39017	0.39020		
	2 2 8	0.41427	0.41441		
	5 1 2	0.43168	0.43192		
	3 3 6	0.44823	0.44806		
550	1 1 2	0.04963	0.04985	6.1195±0.0041	11.4312±0.0148
	2 2 0	0.12720	0.12676		
	2 0 4	0.13592	0.13603		
	3 1 2	0.17703	0.17661		

ตาราง 5.9 จ. (ต่อ)

อุณหภูมิ (°C)	h	k	l	$(\sin^2\theta)_{\text{cor}}$	$(\sin^2\theta)_{\text{cal}}$	ค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่ปรับค่าแล้ว	
						a (Å)	c (Å)
	1	1	6	0.19396	0.19516		
	4	0	0	0.25382	0.25351		
	3	3	2	0.30303	0.30337		
	4	2	4	0.38841	0.38954		
	2	2	8	0.41880	0.41737		
	5	1	2	0.43030	0.43012		

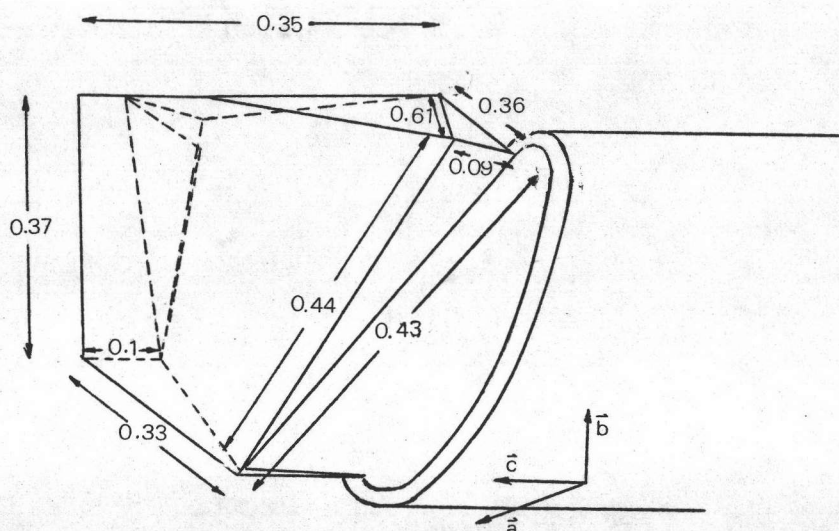
#### 5.4 การศึกษาโครงสร้างของผลึกเดี่ยวโดยวิธีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ (16, 17)

การวิจัยเพื่อหาโครงสร้างผลึกของโลหะผสมกึ่งตัวนำที่เตรียมขึ้นนั้น มีแนวทางในการทำการทดลองดังนี้ นำสารที่เตรียมได้แต่ละสารมาเลือกหาผลึกเดี่ยวทดสอบโดยวิธีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยใช้กล้องไวซ์เชินเบอร์ก (Weissenberg camera) ถ้าได้ผลึกเดี่ยวให้นำไปศึกษาโครงสร้างผลึกโดยวิธีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ ซึ่งข้อมูลของผลึกเดี่ยวหาได้จากการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยวิธีออสซิลเลชัน, โรเตชัน, ไวซ์เชินเบอร์ก และฟรีเซลล์ชัน จากภาพถ่ายโดยวิธีการเหล่านี้ทำให้ทราบค่าคงที่โครงสร้างผลึก ระบบและหมู่สมมาตรสามมิติของผลึก ต่อมาต้องทำการวัดความเข้มของจุดสะท้อนของรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มภาพถ่ายโดยวิธีไวซ์เชินเบอร์ก แล้วนำข้อมูลที่ได้นำไปศึกษาโครงสร้างคำนวณโดยใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ ส่วนรายละเอียดต่าง ๆ จะกล่าวเป็นข้อ ๆ ดังนี้

##### 5.4.1 การเลือกผลึกเดี่ยวและติดตั้งบนหัวโกนิโอมิเตอร์ (goniometer)

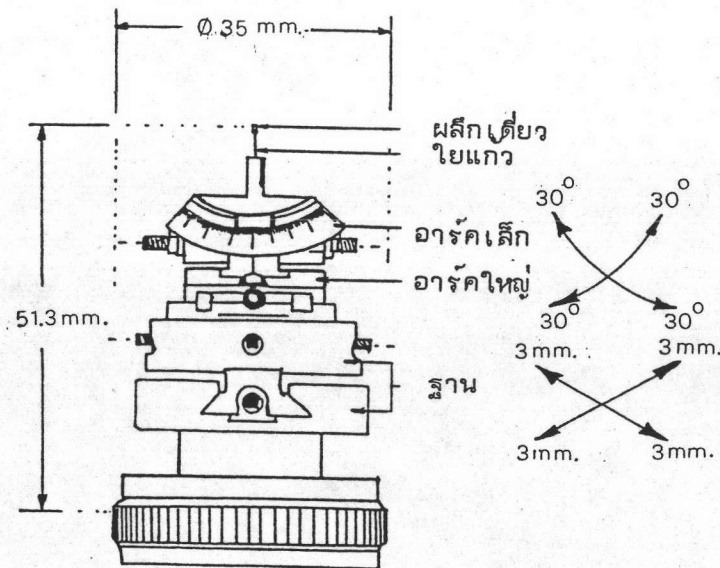
จากโลหะผสมกึ่งตัวนำทั้ง 6 สารที่เตรียมได้ ต้องนำมาเลือกหาผลึกเดี่ยวทีละสารโดยมีกรรมวิธีการเลือกดังนี้ ตอนแรกสารกึ่งตัวนำทั้ง 6 สารจะมีลักษณะ

เป็นแท่งตามลักษณะของหลอดแก้วควอทซ์ ให้นำมาทำการทุบเป็น 3 บริเวณ คือ บริเวณตอนบน, กลาง และล่าง ของแท่งสาร สิ่งต่อมาทำการเลือกผลึกจากบริเวณทั้งสามบริเวณละ 5 ผลึก มาทำการพิจารณาว่าเป็นผลึกเดี่ยวหรือไม่โดยการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยวิธีออสซิลเลชันมุมแคบซึ่งหมุนกลับไปมาในช่วง 15 องศา ใช้เวลาประมาณภาพละ 40 นาที แล้วนำฟิล์มมาพิจารณาจุดสะท้อนที่ปรากฏบนฟิล์ม จากภาพถ่ายโดยวิธีออสซิลเลชันอาจได้จุดคู่หรือปรับหาแกนผลึกไม่ได้ ซึ่งพอจะพิจารณาได้ว่ายังไม่เป็นผลึกเดี่ยวที่ดี โลหะผสมกึ่งตัวนำส่วนใหญ่ที่เตรียมได้มักมีลักษณะไม่เป็นผลึกเดี่ยวที่ดี แต่โลหะผสมกึ่งตัวนำ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$  พบว่ามีผลึกเป็นผลึกเดี่ยวเป็นส่วนมากทั้งสามบริเวณที่ทำการเลือกผลึกมา แต่ตอนล่างลักษณะจุดไม่ชัดจึงได้เลือกโลหะผสมกึ่งตัวนำชนิดนี้มาทำการศึกษาค้นคว้าโครงสร้างผลึกเฉพาะตอนส่วนบนเท่านั้น ลักษณะของผลึกเดี่ยวที่เลือกได้เป็นดังรูป 5.15 เป็นผลึกที่เลือกมาจากบริเวณตอนบนของแท่ง



รูป 5.15 แบบจำลองของผลึกที่มีรูปร่างและขนาด (มิลลิเมตร) ที่ใกล้เคียงผลึกจริง ๆ

ในการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยวิธีออสซิลเลชันเพื่อเลือกผลึก  
เดี่ยวนั้น ผลึกเดี่ยวต้องติดกับปลายของใยแก้วทางด้านหนึ่งโดยใช้กาวแคนาดาบาลซัม  
(canadabalsam) ความยาวของใยแก้วประมาณ 2 เซนติเมตร ส่วนปลายอีกข้าง  
หนึ่งเสียบไว้บนยอดของหัวโกนิโอมิเตอร์ โดยหัวโกนิโอมิเตอร์สามารถปรับอาร์ค  
(arc) ทั้งสองได้เป็นมุม  $\pm 30^\circ$  เพื่อใช้จัดแกนผลึกให้ตรงตามความต้องการ และ  
ได้อาร์คสามารถปรับฐานให้เลื่อนได้เป็นระยะ  $\pm 3$  มิลลิเมตร เพื่อใช้ปรับให้ผลึกตั้ง  
ในขณะที่เหมาะสม ดังรูป 5.16



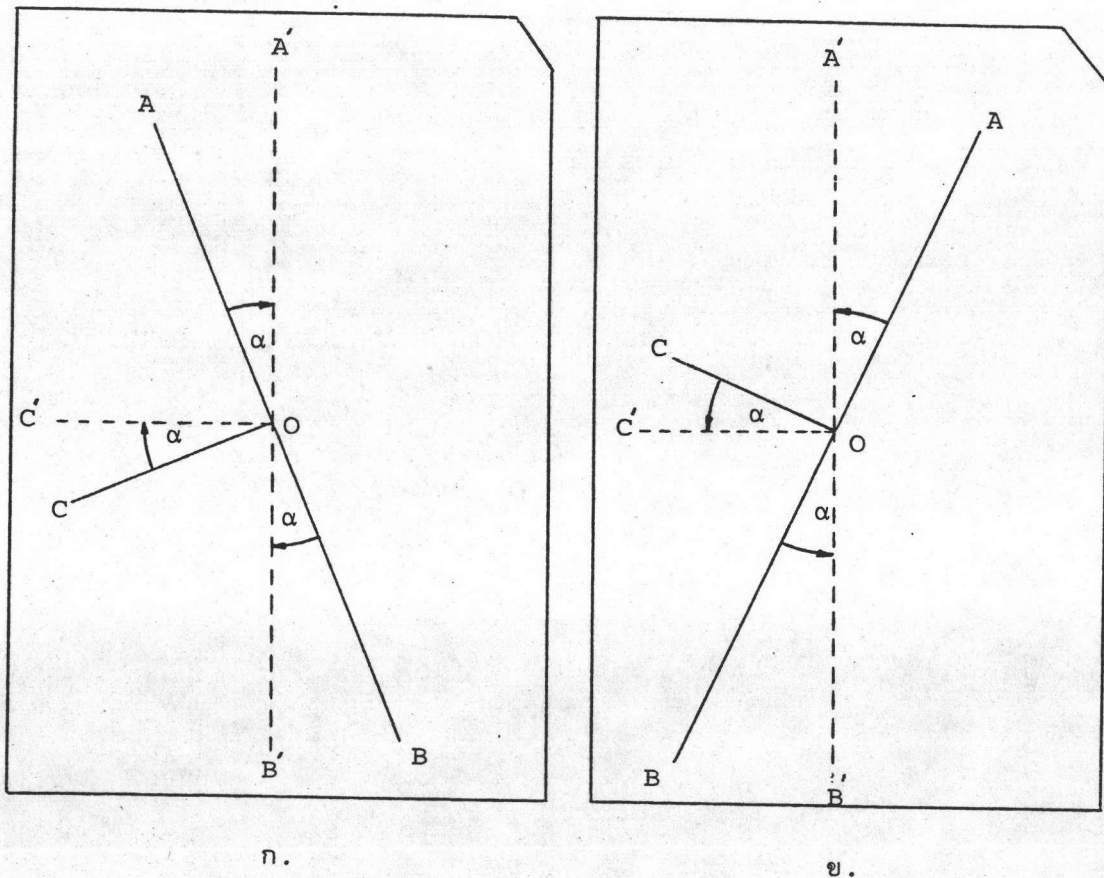
รูปท 5.16 หัวโกนิโอมิเตอร์มีผลึกเดี่ยวติดยึดอยู่กับใยแก้ว

#### 5.4.2 การปรับแกนผลึกให้เป็นแกนหมุน

ในการถ่ายภาพผลึกเดี่ยวโดยวิธีการต่าง ๆ นั้น ก่อนอื่นต้องปรับแกน  
ผลึกที่หมุนรอบนั้นให้ตั้งฉากกับสํารังสีเอ็กซ์เสียก่อน

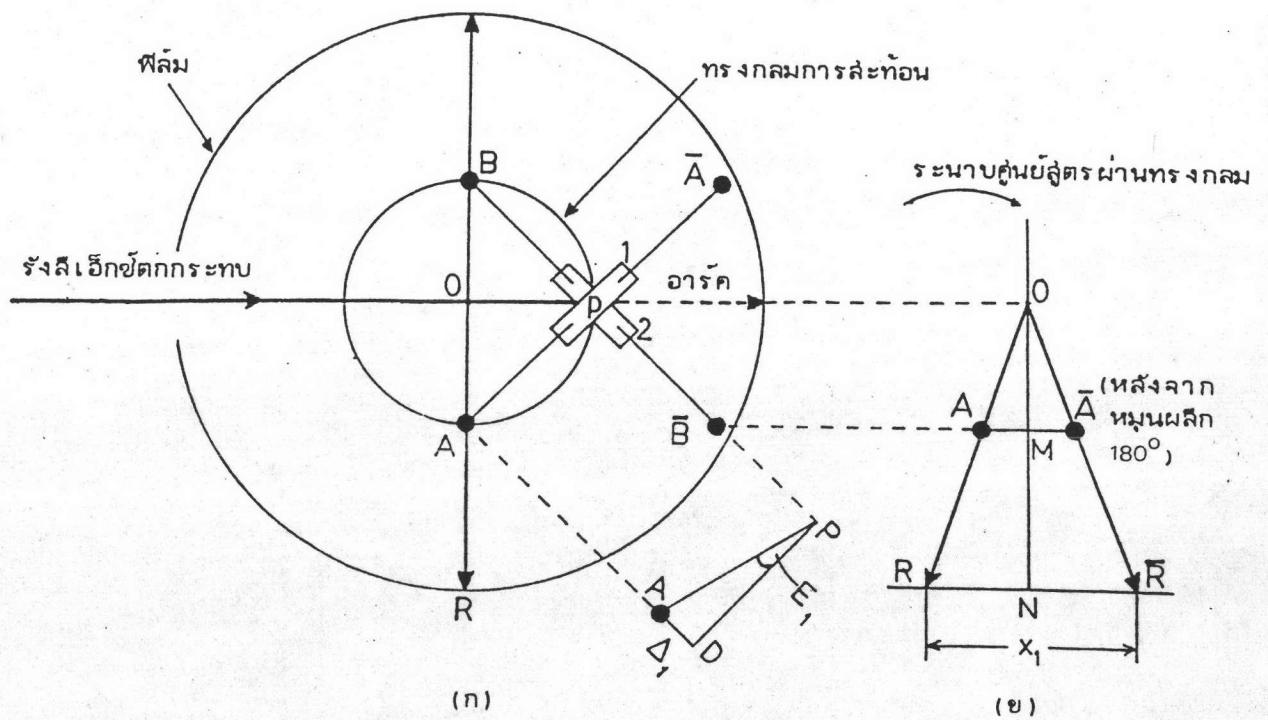
ขั้นแรกต้องปรับแกนผลึกแบบหยาบ ๆ ก่อน โดยการถ่ายภาพออสซิลเลชันมุม  
แคบโดยให้ผลึกหมุนด้วยมุม  $\pm 15$  องศา ถ่ายภาพแต่ละครั้งต้องจัดให้อาร์คอันหนึ่งหัน

ล่เก้ลออกเพื่้ออ่านค่ามุมได้ล่ดวกและตั้งฉากกับรังสีเอ็กซ์ ใช้เวลาในการถ่ายภาพ 40 นาที จากรูป 5.17 ล่มุมดีเป็นภาพถ่ายเมื่ออาร์คใหญ่ตั้งฉากกับรังสีเอ็กซ์ จุดล่สะท้อนของเส้นเลย์เออร์โลนที่คูนยั ปรากฏตามแนว AB โดยแนว OC เป็นแกนหมุนของผลึก ซึ่งยังไม่ตั้งฉากกับล่รังสีเอ็กซ์ วัตมุมที่ต้องปรับได้  $\alpha$  องศา ดังนั้นต้องปรับอาร์คใหญ่  $\alpha$  องศา ทำให้แกนหมุนของผลึกปิดไปอยู่ที่แนว OC' ซึ่งตั้งฉากกับรังสีเอ็กซ์ และแนวเลย์เออร์โลนที่คูนยัปิดไปด้วยมุม  $\alpha$  เช่นเดียวกันไปอยู่ที่แนว A'B' ในกรณีรูปที่ 5.17 ก. ต้องปรับมุมไปทางบวก และรูปที่ 5.17 ข. ต้องปรับมุมไปทางลบ เมื่อปรับอาร์คใหญ่แล้วต้องปรับอาร์คเล็กในท่ามองเดียวกัน ทำล่ล่กันจนแกนผลึกผิดที่ไปน้อยกว่า 1 - 2 องศา ล่ิงปรับละเอียดต่อไป



รูป 5.17 มุมและทิศทางที่ต้องปรับอาร์ค

ขั้นต่อมาเป็นการปรับแกนผลึกอย่างละเอียด โดยวิธีดับเปิดออสซิลเลชัน (double oscillation) โดยให้ทิศที่รังสีเอ็กซ์ตกกระทบกับอาร์คทั้งสองเป็นมุม  $45^\circ$



รูป 5.18 วิธีดับเปิดออสซิลเลชันของผลึกที่ต้องการปรับ มีอาร์คอยู่ในตำแหน่ง  $45^\circ$  กับรังสีเอ็กซ์  
 ก. ลักษณะของอาร์คที่ถ่ายภาพออสซิลเลชัน  
 ข. จุดสะท้อน R และ R-bar สอดคล้องกับ A และ A-bar



สมมุติว่าจุด A และ B เป็นจุดรีซีเพอเคิล เรียงตามอาร์คทั้งสอง โดยมีจุด P เป็นจุดกำเนิด ถ้าจุด A และ B ไม่อยู่ในระนาบศูนย์กลางของทรงกลม การสะท้อนจะทำให้เกิดค่าของมุมที่ผิดไปของจุด A และ B ให้เป็นค่าของมุม  $E_1$  และ  $E_2$  โดยมี  $\Delta_1$  และ  $\Delta_2$  เป็นค่าการขจัด (displacement) ของจุด A และ B ตามลำดับ ดังนั้นจะได้

$$\Delta_1 = PD \cdot E_1$$

โดยที่  $E_1$  มีหน่วยเป็นเรเดียน และมีรัศมีทรงกลมการสะท้อนมีค่าเท่ากับ 1 r.l.u. ดังนั้น  $PD = \sqrt{2}$

$$\Delta_1 = \sqrt{2} \cdot E_1$$

พิจารณารจุด A ตัดทรงกลมการสะท้อนทำให้เกิดการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ไปตกลงบนฟิล์มที่จุด R และเมื่อหมุนอาร์คทั้งสองไป  $180^\circ$  จุด  $\bar{A}$  ตัดทรงกลมการสะท้อนเกิดการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์เช่นเดียวกัน ไปตกลงบนฟิล์มที่จุด  $\bar{R}$  กำหนด  $X_1$  เป็นระยะจาก R ถึง  $\bar{R}$  แนว ON อยู่บนระนาบศูนย์กลาง ตามรูป 5.18 ข. จะได้

$$\frac{R\bar{R}}{A\bar{A}} = \frac{RN}{AM} = \frac{ON}{OM}$$

โดยที่ RN คือ  $X_1/2$ , OM คือ รัศมีของทรงกลมการสะท้อนที่มีค่า 1 r.l.u., ON คือรัศมีของกล้องให้มีค่าเป็น r และ AM คือ  $\Delta_1$  ซึ่งเท่ากับ  $\sqrt{2} \cdot E_1$  ดังนั้นจึงได้

$$X_1 = 2\sqrt{2} r E_1$$

โดยที่ r มีค่าเท่ากับ  $90/\pi$  มิลลิเมตร,  $X_1$  หน่วยเป็นมิลลิเมตรด้วย เมื่อแทนค่า r และเปลี่ยนค่า  $E_1$  จากหน่วยของเรเดียนเป็นองศาจะได้

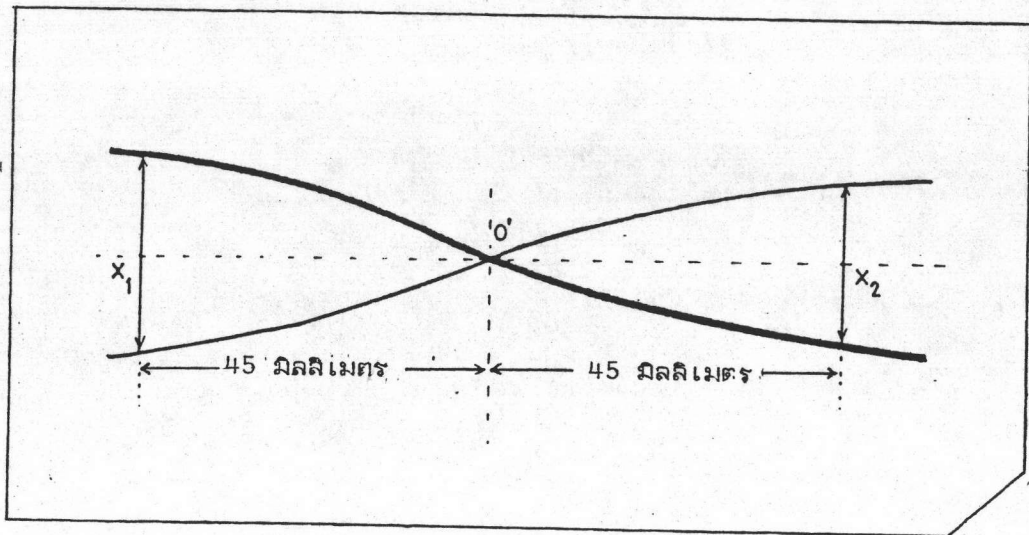
$$E_1 = \frac{\sqrt{2}}{2} X_1 \approx 0.71 X_1$$

ทำนองเดียวกัน

$$E_2 = \frac{\sqrt{2}}{2} X_2 \approx 0.71 X_2$$

ค่า  $X_1$  และ  $X_2$  สามารถวัดได้โดยตรงบนฟิล์มที่ได้จากการถ่ายภาพโดยวิธี  
ดับเบิลออสซิลเลชัน

ในทางปฏิบัตินั้นต้องจัดอาร์คทำมุม 45 องศา กับรังสีเอ็กซ์ แล้วถ่ายภาพ  
โดยวิธีออสซิลเลชัน โดยใช้ผลึกหมุนในช่วง  $\pm 15$  องศา ต่อมาหมุนอาร์คไป 180  
องศาจากตำแหน่งเดิม ทำการถ่ายภาพโดยวิธีออสซิลเลชันเช่นเดิม แต่ควรใช้เวลา  
ในการถ่ายภาพต่างจากครั้งแรกประมาณ 3 เท่า เพื่อจะได้เห็นความแตกต่างของความ  
เข้มของเส้นเลย์เออร์ (layer line) อย่างชัดเจน ดังรูปที่ 5.19



รูป 5.19 เส้นเลย์เออร์ที่ปรากฏบนฟิล์มเมื่อถ่ายโดยวิธีดับเบิลออสซิลเลชัน

จากรูป 5.19 ค่า  $X_1$  และ  $X_2$  ต้องวัดที่ระยะ 45 มิลลิเมตร ทั้งซ้ายและขวาของจุด  $O$   
ซึ่งอยู่บนแนวเส้นศูนย์กลางของฟิล์ม ซึ่ง ณ บริเวณตรงนี้จะเป็นการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์  
ที่มุมเลี้ยวเบน  $2\theta = 90^\circ$  ตัดทรงกลมการสะท้อนและตัดฟิล์มที่ระยะทาง 45 มิลลิเมตร  
จากจุด  $O$  ของตำแหน่งที่รังสีเอ็กซ์ตกกระทบฟิล์ม

### 5.4.3 การถ่ายภาพออสซิลเลชัน

หลังจากปรับให้แกนหมุนของผลึกตั้งฉากกับลำรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบ ถูกต้องแล้ว จึงเริ่มถ่ายภาพออสซิลเลชันเพื่อตรวจสอบผลึก และคำนวณหาค่าคงที่- โครงผลึก

ในการทดลองใช้รังสีเอ็กซ์เป้าโมลิบดีนัมชนิด  $K_{\alpha}$  ( $\lambda_{MoK_{\alpha}} = 0.71069 \text{ \AA}$ ) และเป้าทองแดงชนิด  $K_{\alpha}$  ( $\lambda_{CuK_{\alpha}} = 1.54059 \text{ \AA}$ ) มีเซอร์โคเนียม (zirconium) และนิกเกิล (nikel) เป็นตัวกรอง (filter) รังสีตามลำดับ โดยให้แกนหมุนผลึก เป็นแกน c หมุนกลับไปมาในช่วง  $\pm 100$  องศา ใช้เวลาในการถ่ายภาพ 39 และ 110 ชั่วโมง ภาพถ่ายที่ได้เป็นดังในรูปที่ 5.20 และ 5.21 จากภาพถ่ายจะเห็นจุดสะท้อนของรังสีเอ็กซ์เฉพาะบริเวณตรงเส้นเลย์เออร์ที่ 0, 2, 4, 6, 8, ..... เพราะว่าจุดสะท้อนของรังสีเอ็กซ์บริเวณตรงเส้นเลย์เออร์ที่ 1, 3, 5, 7, ..... มีค่าความเข้มน้อยมาก แต่สามารถจะทราบได้ว่ามีจุดสะท้อนของรังสีเอ็กซ์ตรงบริเวณเส้นเลย์เออร์ที่ 1, 3, 5, 7, ..... ซึ่งมีความเข้มน้อยมากจริง ๆ ได้จากการถ่ายภาพการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์โดยวิธีฟรีเชลสัน ซึ่งจะแสดงให้เห็นในหัวข้อต่อไป เมื่อทำการวัดระยะระหว่างเส้นเลย์เออร์ที่ 0 กับ เส้นเลย์เออร์ที่ 2, 4, 6, 8, ... ตามลำดับ ทำให้สามารถคำนวณหาค่าคงที่โครงผลึกตามแกน c ได้ โดยอาศัยความสัมพันธ์ (5.10) ผลการคำนวณแสดงในตาราง 5.10 ก. และ ข.

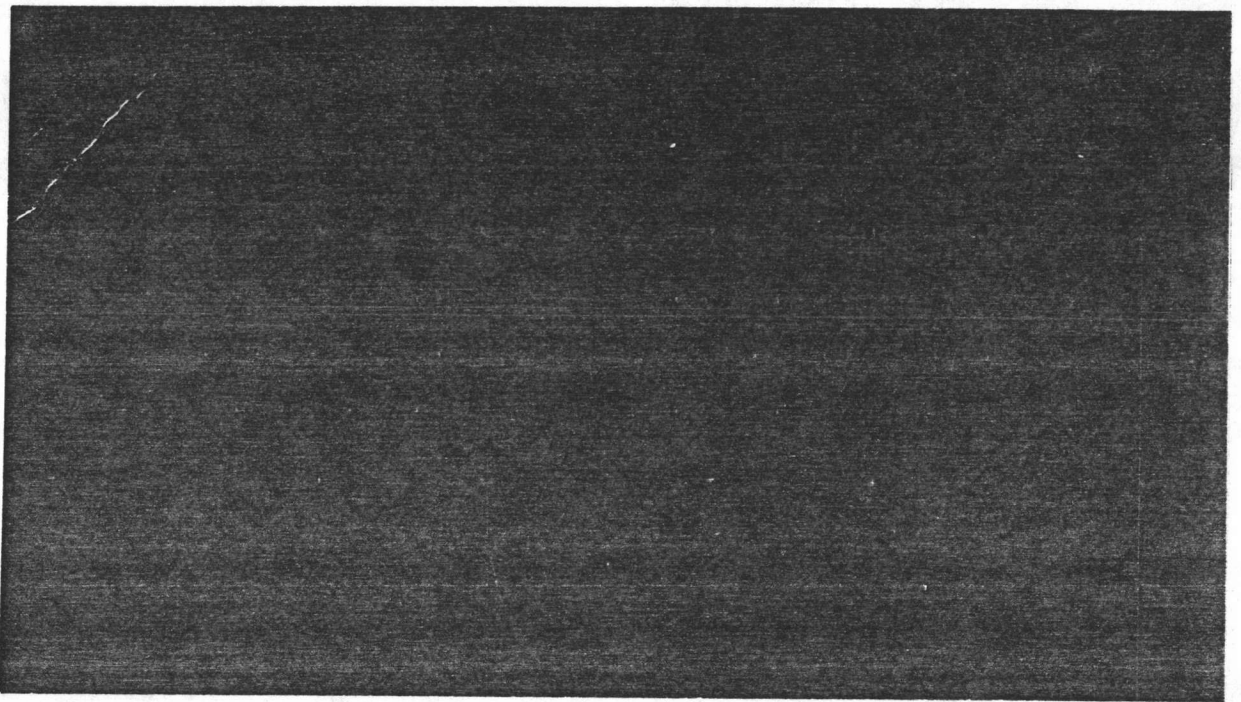
$$c = \frac{n\lambda}{\sin \left[ \tan^{-1} \left( \frac{y_n}{r} \right) \right]} \quad 5.10$$

c คือ ค่าคงที่โครงผลึกตามแกน c

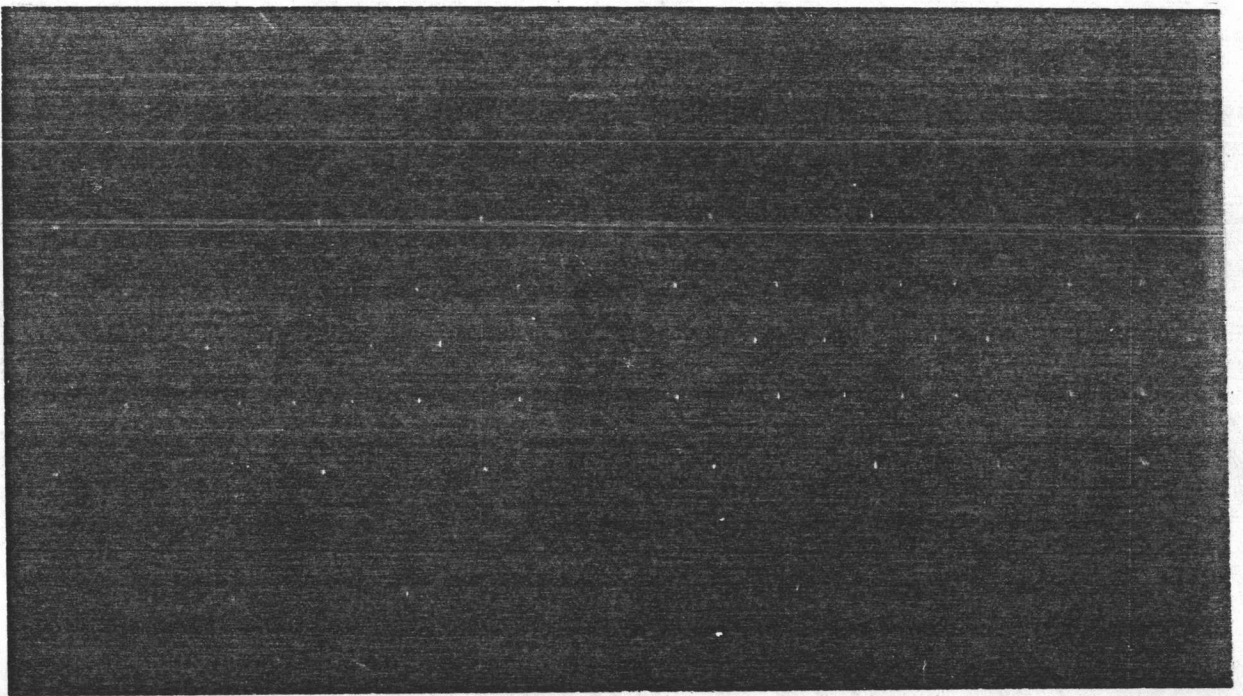
$\lambda$  คือ ความยาวคลื่นของรังสีเอ็กซ์

$y_n$  คือ ระยะทางระหว่างเลย์เออร์ที่ 0 กับเลย์เออร์ที่ n

r คือ รัศมีของกล้องที่ใช้ในการทดลองซึ่งมีค่าเท่ากับ 28.65 มิลลิเมตร



ก.

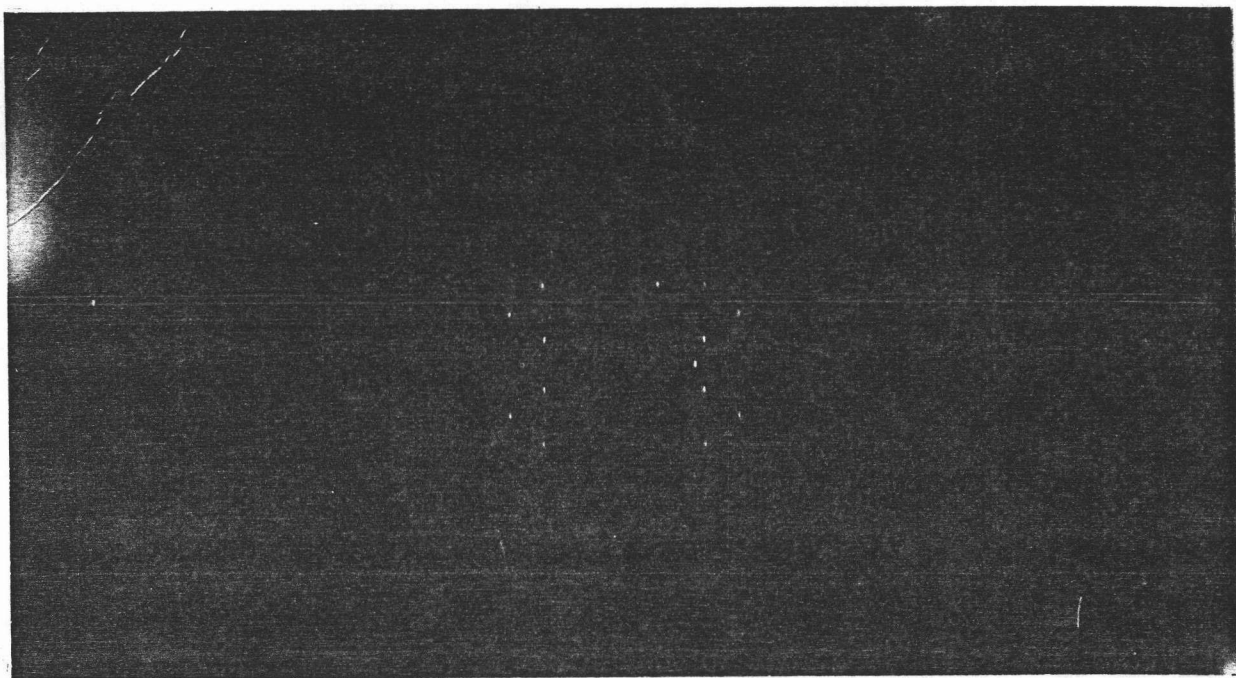


ข.

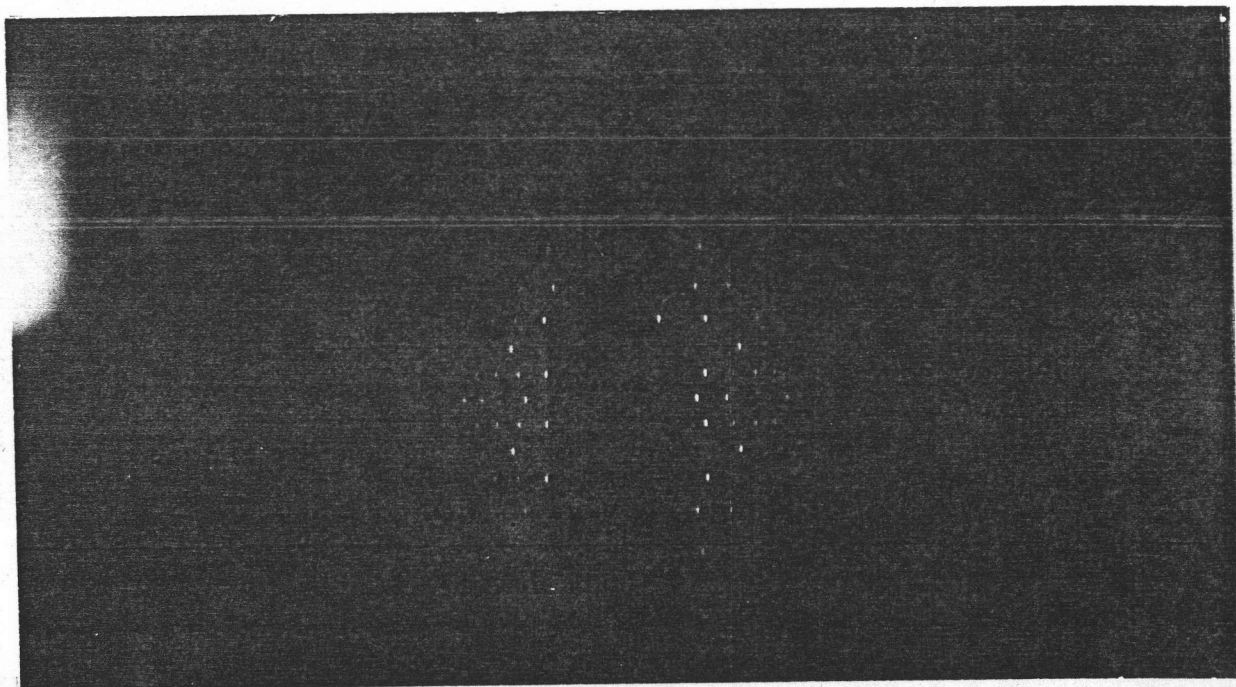
รูป 5.20 ภาพถ่ายออสซิลเลชันรอบแกน c ในช่วง  $\pm 100$  องศา ของโลหะผลึกกิ่งตัวนำ  
 $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$  ใช้รังสีเอ็กซ์ชนิด  $\text{CuK}_\alpha$  ณ ที่ 35 กิโลโวลต์  
 20 มิลลิแอมป์ มี Ni เป็นตัวกรอง

ก. ใช้เวลา 39 ชั่วโมง

ข. ใช้เวลา 110 ชั่วโมง



ก



ข

รูป 5.21 ภาพถ่ายออลซ์ซิลเลชันรอบแกน c ของโลหะผสมกึ่งตัวนำ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$  ในช่วง  $\pm 100$  องศา ใช้รังสีเอ็กซ์ชนิด  $\text{MoK}_\alpha$  ณ ที่ 50 กิโลวัตต์ 14 มิลลิแอมป์ มี Zr เป็นตัวกรอง

ก. ใช้เวลา 39 ชั่วโมง

ข. ใช้เวลา 110 ชั่วโมง

ตาราง 5.10 ก. ค่าคงที่โครงผลึกตามแกน  $c$  จากภาพถ่ายออสซิลเลชัน

เมื่อใช้  $\text{CuK}_\alpha$  ( $\lambda = 1.54059 \text{ \AA}$ )

$n$	$2y_n$ (มิลลิเมตร)	$\theta_n = \tan^{-1}\left(\frac{y_n}{r}\right)$	$\sin\theta_n$	$c(\text{\AA})$
2	14.7	14.39	0.2485	12.40
4	33.2	30.09	0.5013	12.29
6	65.0	48.60	0.7501	12.32
				$\langle c \rangle = 12.34$

ตาราง 5.10 ข. ค่าคงที่โครงผลึกตามแกน  $c$  จากภาพถ่ายออสซิลเลชัน

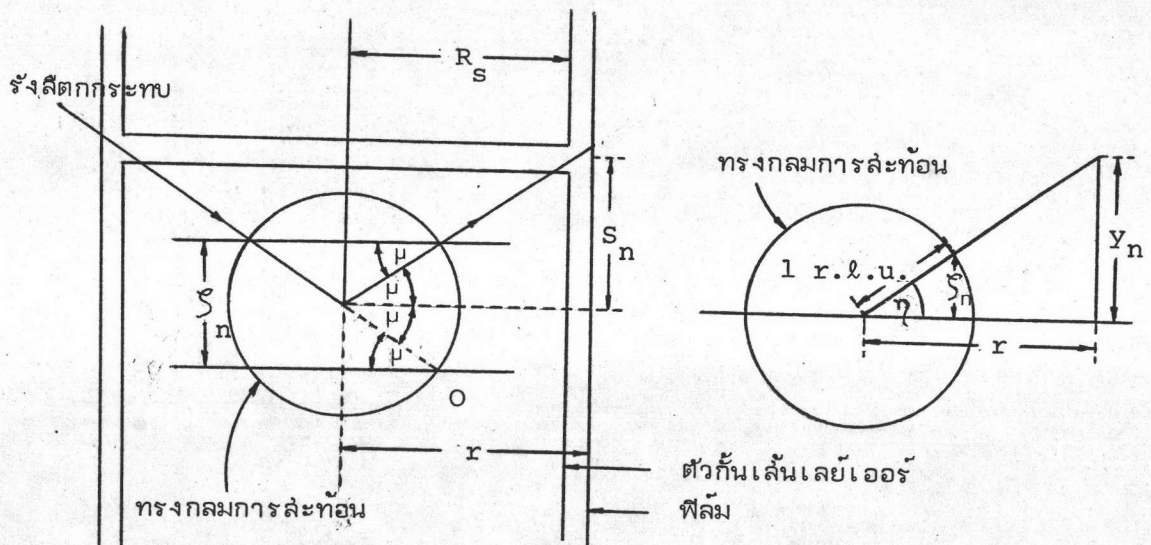
เมื่อใช้  $\text{MoK}_\alpha$  ( $\lambda = 0.71069 \text{ \AA}$ )

$n$	$2y_n$ (มิลลิเมตร)	$\theta_n = \tan^{-1}\left(\frac{y_n}{r}\right)$	$\sin\theta_n$	$c(\text{\AA})$
2	6.7	6.67	0.1161	12.24
4	13.6	13.35	0.2309	12.31
6	21.2	20.30	0.3470	12.29
8	29.8	27.48	0.4614	12.32
10	40.6	35.32	0.5781	12.29
12	55.1	43.88	0.6931	12.30
				$\langle c \rangle = 12.29$

5.4.4 การถ่ายภาพไวซ์เซ็นเบอร์

หลังจากถ่ายภาพแบบออสซิลเลชันแล้ว จึงทำการถ่ายภาพแบบไวซ์เซ็นเบอร์ ซึ่งเป็นวิธีการถ่ายภาพโดยการทำให้มีการเคลื่อนที่ของฟิล์มสอดคล้องกับการหมุนของผลึก โดยที่ฟิล์มมีการเคลื่อนที่ 1 มิลลิเมตร เมื่อผลึกมีการหมุนไปเป็นมุม 2 องศา การถ่ายภาพแต่ละครั้งจะถ่ายได้เพียงหนึ่งเลย์เออร์เท่านั้น ดังนั้นเลย์เออร์อื่นที่ไม่ต้องการจึงไขตัวกันเส้นเลย์เออร์ (layer line screen) เป็นตัวกันออกไป

เมื่อต้องการถ่ายภาพสำหรับเลย์เออร์ที่สูงขึ้นไป เช่น เลย์เออร์ 2, 4, 6, 8, ..... ขึ้นไป ตามลำดับ จะใช้วิธีมุมเอียงเท่ากัน (equi-inclination method) โดยต้องเอียงกล้องเพื่อให้จุดตัดระหว่างแกนหมุนของรีซีเพอเคิลแลททิสกับเลย์เออร์ที่ต้องการถ่ายภาพอยู่บนหรือสัมผัสตรงกลางการสะท้อน และต้องเลื่อนตัวกันเส้นเลย์เออร์ไปเพื่อให้สอดคล้องกับการเลี้ยวเบนของเลย์เออร์ที่ต้องการถ่ายภาพ ส่วนมุมที่ต้องเอียงกล้องและระยะทางที่ต้องเลื่อนตัวกันเส้นเลย์เออร์ไปเพื่อการถ่ายภาพสำหรับเลย์เออร์ที่สูงขึ้นไป คำนวณได้จากความสัมพันธ์ ตามรูปที่ 5.22 ดังนี้



รูป 5.22 มุม  $\mu$  ที่ต้องเอียงกล้อง และความสัมพันธ์ของระยะระหว่างเลย์เออร์ที่ 0 ถึงเลย์เออร์ที่  $n(S_n)$  กับระยะทางบนฟิล์มจากเลย์เออร์ที่ 0 ถึงเลย์เออร์ที่  $n(y_n)$  ในรีซีเพอเคิลแลททิส ตามวิธีการถ่ายภาพแบบไวซ์เซ็นเบอร์

$$\mu_n = \sin^{-1} \left[ \frac{\sin \left\{ \tan^{-1} \left( \frac{y_n}{r} \right) \right\}}{2} \right] \quad 5.11$$

$$S_n = R_s \tan \mu_n \quad 5.12$$

โดยที่  $\mu_n$  คือ มุมที่ต้องเอียงกล้องเพื่อการถ่ายภาพสำหรับเลย์เออร์ที่  $n$

$y_n$  คือ ระยะทางบนฟิล์มจากเลย์เออร์ที่ 0 ไปยังเลย์เออร์ที่  $n$

$r$  คือ รัศมีของกล้องมีค่า 28.65 มิลลิเมตร

$S_n$  คือ ระยะที่ต้องเลื่อนตัวกันเส้นเลย์เออร์ไปเพื่อการถ่ายภาพสำหรับเลย์เออร์ที่  $n$

$R_s$  คือ รัศมีของตัวกันเส้นเลย์เออร์มีค่า 25.5 มิลลิเมตร

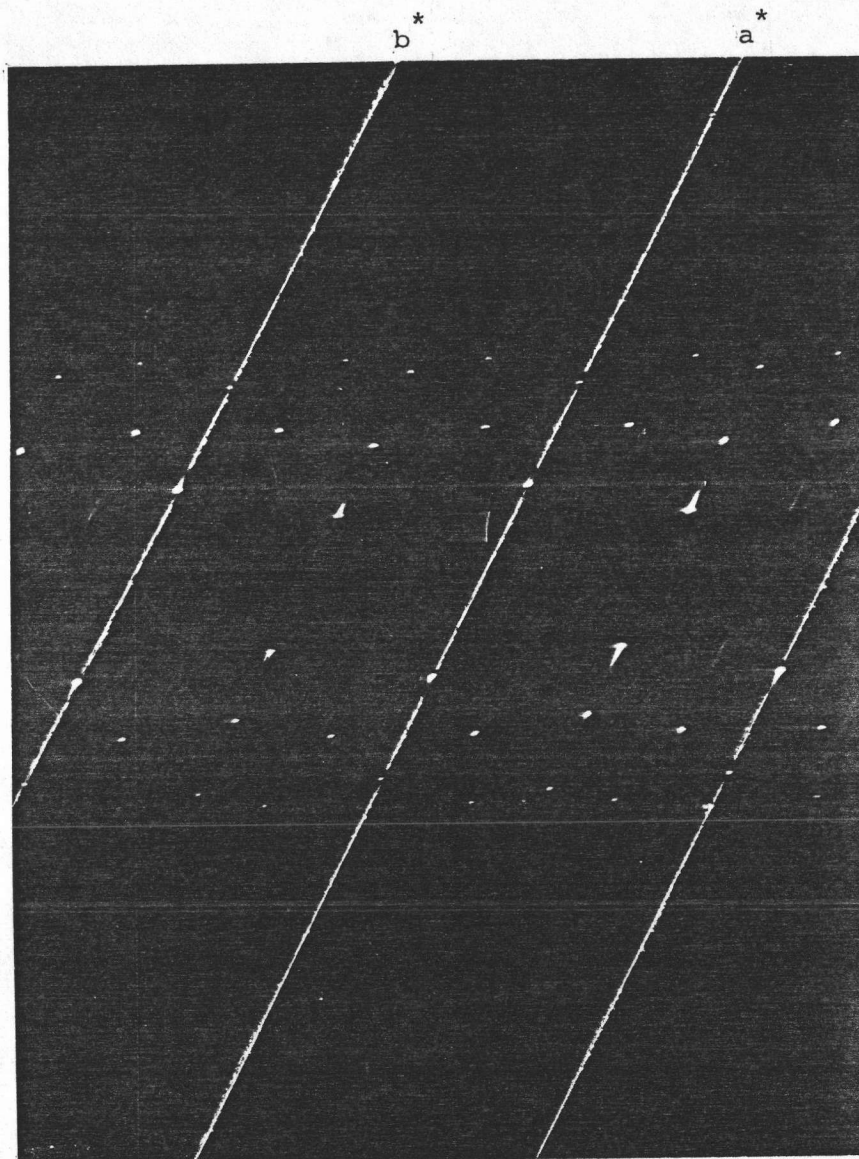
$y_n$  คือ ระยะระหว่างเลย์เออร์ที่ 0 ถึงเลย์เออร์ที่  $n$  ในหน่วย r.l.u.

ตาราง 5.11 ค่าของระยะการเลื่อนตัวกันเส้นเลย์เออร์ที่  $n(S_n)$  และมุมที่ต้องเอียงกล้องเพื่อถ่ายภาพเลย์เออร์ที่  $n(\mu_n)$

เลย์เออร์ที่	$y_n$ (มิลลิเมตร)	$\mu_n$ (องศา)	$S_n$ (มิลลิเมตร)
2	3.3	3.3	1.5
4	6.8	6.6	3.0
6	10.6	10.0	4.5
8	14.9	13.3	6.0

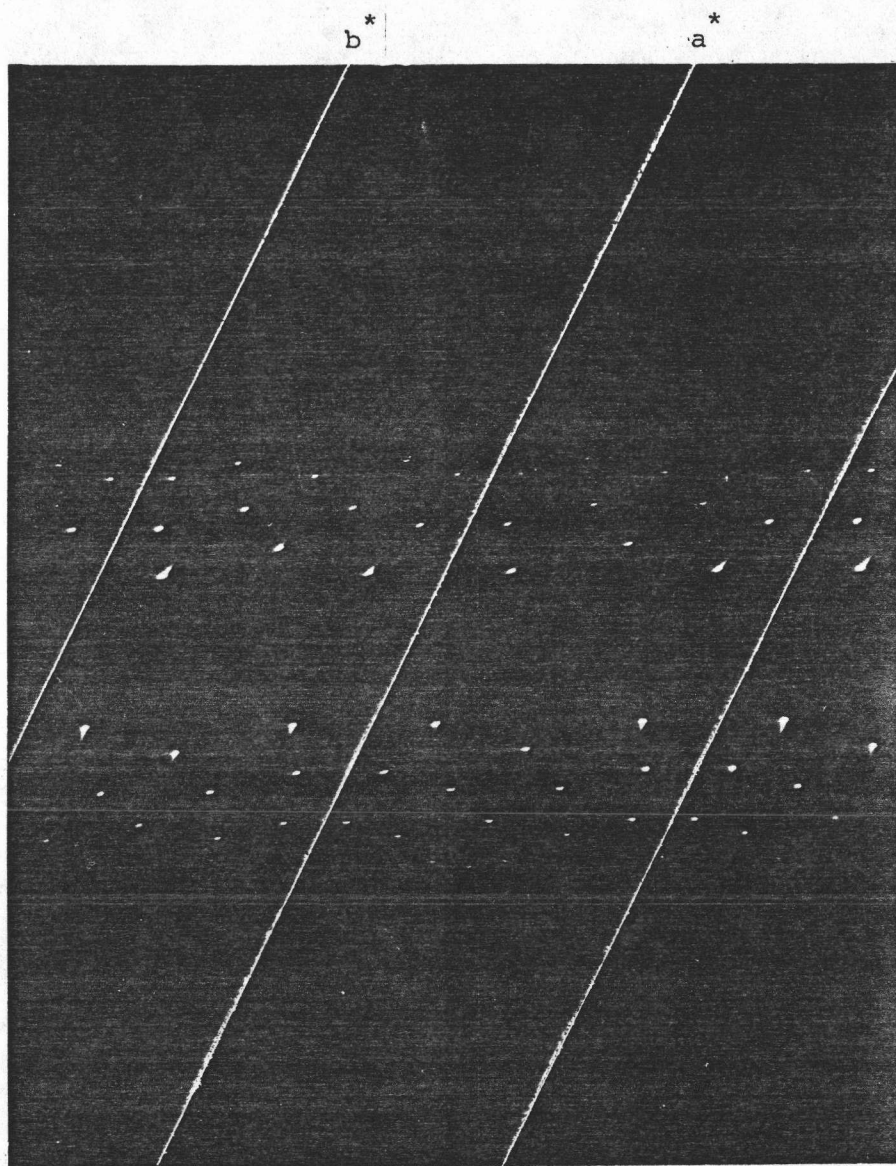
จากภาพถ่ายไวซ์เช่นเบอร์ก โดยให้หมึกหมุนรอบแกน c พบว่า รูปแบบของจุดสะท้อนของรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มของเลย์เออร์ที่ 0, 2, 4 ไม่เหมือนกัน แต่ของเลย์เออร์ที่ 6 เหมือนเลย์เออร์ที่ 2, เลย์เออร์ที่ 8 เหมือนเลย์เออร์ที่ 0 ดังนั้นจึงแสดงเฉพาะภาพถ่ายเลย์เออร์ที่ 0, 2 และ 4 ตามรูปที่ 5.23





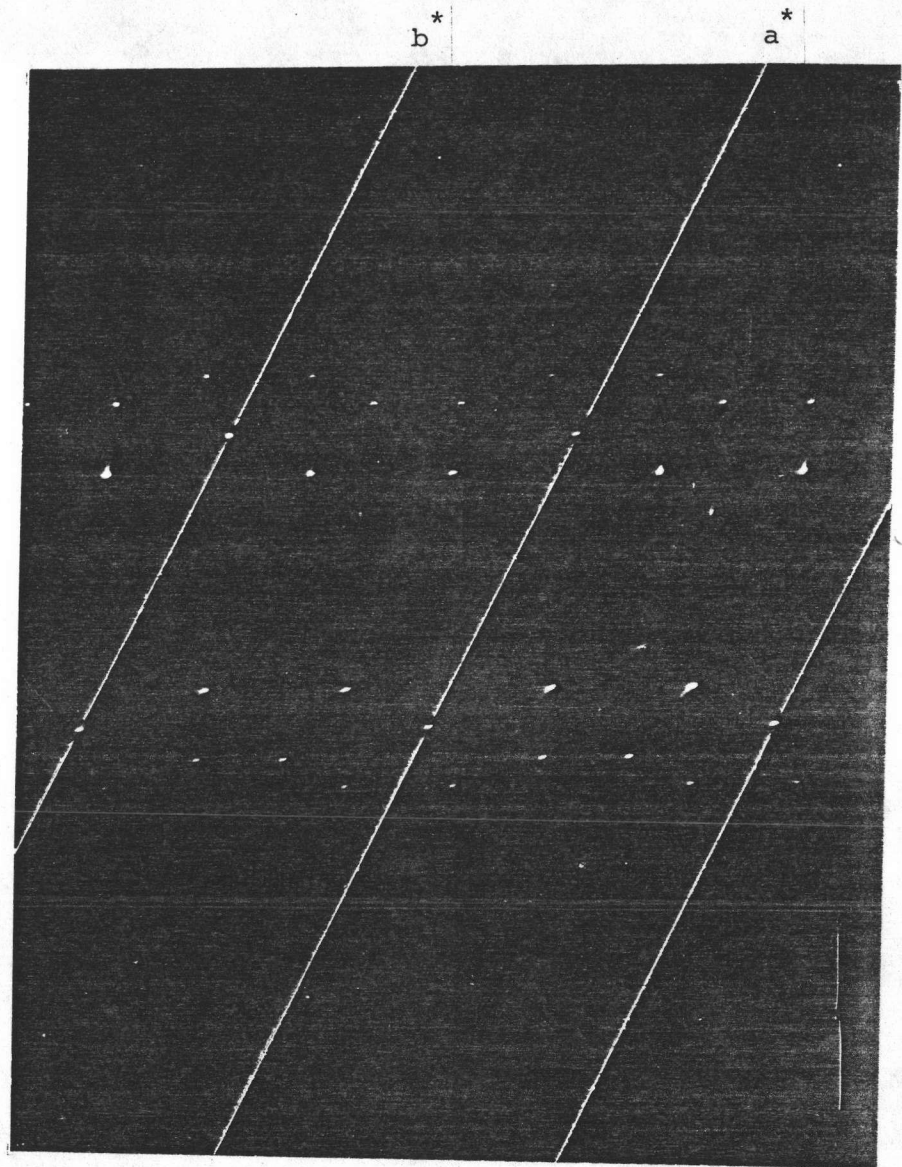
ก.

รูป 5.23 ก. ภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์ก hk0 สำหรับ  
 เลขเออร์ที่ 0 ของผลึก  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$  เมื่อให้ผลึกหมุนรอบแกน c โดยใช้รังสี-  
 เอ็กซ์ชนิด  $\text{MoK}_\alpha$  ณ ที่ 50 กิโลโวลท์  
 14 มิลลิแอมป์ มี Zr เป็นตัวกรอง ใช้เวลา  
 200 ชั่วโมง



ข

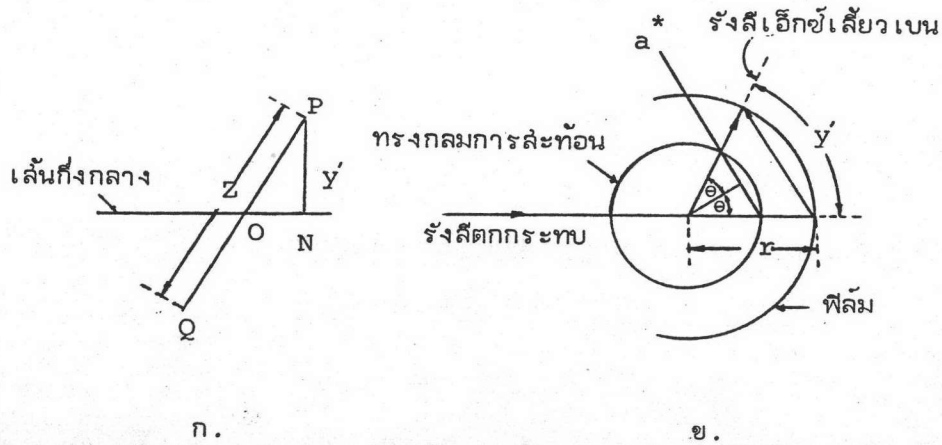
รูป 5.23 ข. ภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์ก hk2 สำหรับเลย์เออร์  
 ที่ 2 ของผลึก  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$   
 เมื่อผลึกหมุนรอบแกน c โดยใช้รังสีเอ็กซ์ชนิด  
 $\text{MoK}_\alpha$  ณ ที่ 50 กิโลโวลท์ 14 มิลลิแอมป์  
 มี Zr เป็นตัวกรอง ใช้เวลา 200 ชั่วโมง



ค

รูป 5.23 ค. ภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์ก hk4 สำหรับเลย์เออร์  
 ที่ 4 ของผลึก  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$   
 เมื่อผลึกหมุนรอบแกน c โดยใช้รังสีเอ็กซ์ชนิด  
 $\text{MoK}_\alpha$  ที่ 50 กิโลโวลต์ 14 มิลลิแอมป์  
 มี Zr เป็นตัวกรอง ใช้เวลา 200 ชั่วโมง

จากภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์กลีย์เออร์ที่ 0 สามารถนำมาคำนวณหาค่าคงที่-  
 โครงผลึกตามแกน a, b และมุม  $\gamma$  ซึ่งเป็นมุมระหว่างแกน a และ b ได้เมื่อใช้  
 c เป็นแกนหมุน โดยใช้ความสัมพันธ์ตามรูปที่ 5.24



รูป 5.24 จุดสะท้อนที่เกิดขึ้นบนภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์กลีย์

- ก. จุดสะท้อน P และ Q ห่างจากเส้นกึ่งกลางเท่ากัน
- ข. การเกิดจุดสะท้อนบนฟิล์ม

$$a = \frac{\lambda h}{2 \sin\left(\frac{\theta}{\sqrt{5}}\right)} \quad 5.13$$

โดยที่ h คือ ค่าดัชนีมิลเลอร์สำหรับแกนผลึกที่ต้องการหาค่าคงที่โครงผลึก  
 $\theta$  คือ ระยะระหว่างจุดบนแกนผลึกที่จุดสะท้อน  $h00$  ถึง  $\bar{h}00$

ซึ่งผลการคำนวณค่าคงที่โครงผลึก a, b จากภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์กลีย์เออร์ที่ 0 ได้  
 แสดงไว้ในตารางที่ 5.12 ปรากฏว่าได้ค่าคงที่โครงผลึก a และ b เท่ากัน และ  
 คำนวณมุม  $\gamma$  ซึ่งเป็นมุมระหว่างแกน a และ b ได้ 90 องศา โดยการวัดระยะทาง  
 ระหว่างแนวแกน  $a^*$  และ  $b^*$  บนฟิล์มได้ 45 มิลลิเมตร

ตาราง 5.12 ค่าคงที่โครงสร้างผลึกตามแกน a และ b ซึ่งเท่ากัน คำนวณจากภาพ

$$\text{ถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์ก เมื่อใช้ } MoK_{\alpha} (\lambda) = 0.71069 \text{ \AA}$$

ตามรูป 5.23 ก.

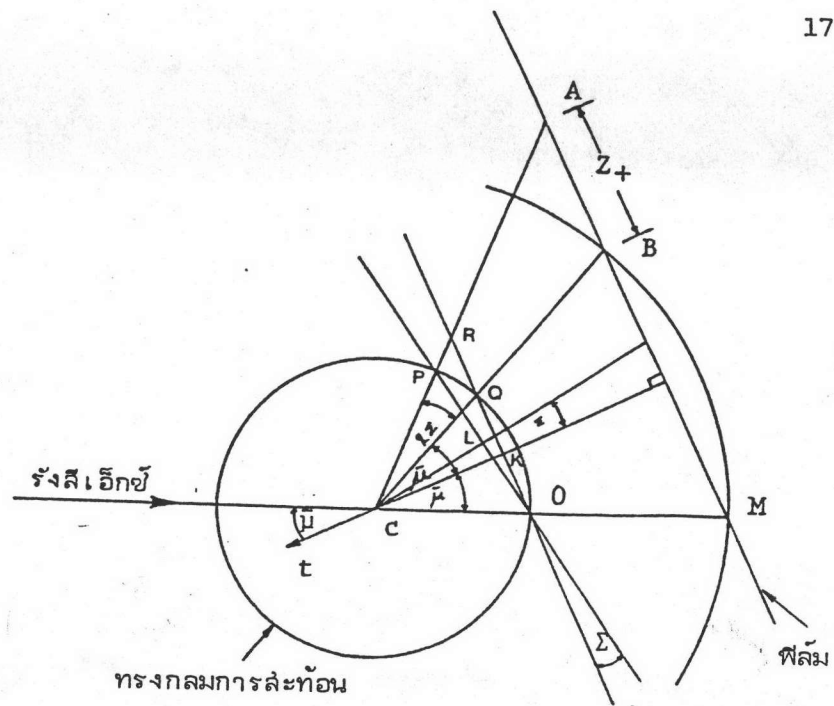
h	k	l	$\Sigma$ (มิลลิเมตร)	$\sin\left(\frac{\Sigma}{\sqrt{5}}\right)$	a (\AA)
4	0	0	28.80	0.2229	6.38
6	0	0	43.50	0.3330	6.40
8	0	0	59.40	0.4472	6.36
10	0	0	76.00	0.5590	6.36
					$\langle a \rangle = 6.37$

#### 5.4.5 การถ่ายภาพพรเซล์ชัน (18)

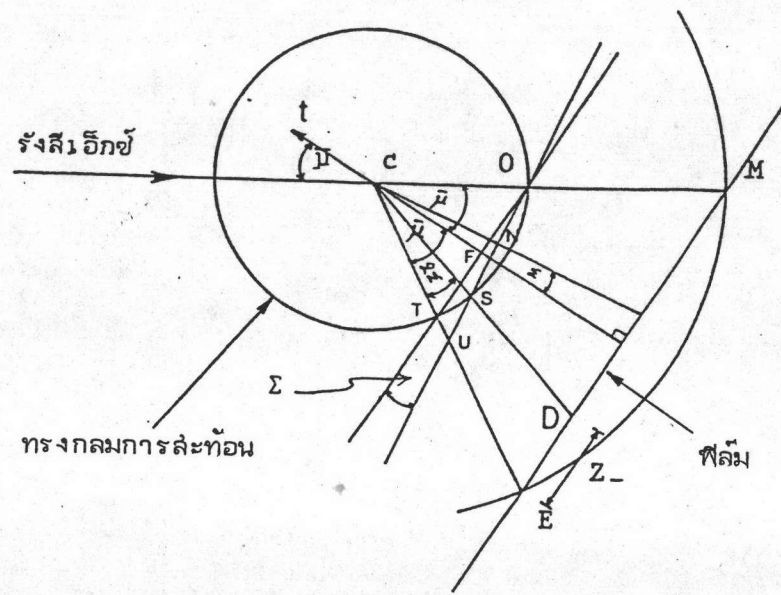
การถ่ายภาพพรเซล์ชันคล้ายกับการถ่ายภาพแบบไวซ์เซ็นเบอร์ก คือ สามารถแยกถ่ายภาพได้ที่ละเลเยอร์ของรีซีเพอเคลแลกทิลล์

ส่วนข้อแตกต่างกันมีว่าภาพถ่ายที่ได้จากรีซีไวซ์เซ็นเบอร์กจะเป็นภาพของรีซีเพอเคลแลกทิลล์ต่างจากที่เป็นอยู่จริง ประกอบกับภาพที่ได้จะมีความเข้มของพื้นภาพ (background) สูง ส่วนภาพถ่ายที่ได้จากพรเซล์ชันเป็นภาพของรีซีเพอเคลแลกทิลล์ตั้งที่เป็นอยู่จริงโดยไม่บิดเบือน ประกอบกับมีความเข้มของพื้นภาพต่ำจึงทำให้มองเห็นจุดสะท้อนที่ค่อนข้างจางได้ ซึ่งสะดวกในการพิจารณาค่าคงที่โครงสร้างผลึกกับสัมมาตราชของผลึก

ก่อนการถ่ายภาพแบบพรเซล์ชันแต่ละเลเยอร์ต้องมีการปรับแกนผลึกที่ต้องการทำเป็นแกนพรเซล์ชันให้ขนานกับลำรังสีเอ็กซ์เมื่อมุม  $\theta$  เป็นศูนย์



(ก)



(ข)

รูป 5.25 ระนาบรีซีเพอเคิลที่ยังไม่ได้ปรับแกนตัดกับทรงกลมการสะท้อน ในการถ่ายภาพแบบพริเชลชั่น

ก. ระนาบรีซีเพอเคิลด้านบนของทรงกลมการสะท้อน

ข. ระนาบรีซีเพอเคิลด้านล่างของทรงกลมการสะท้อน

พิจารณารูปที่ 5.25 ก. ให้  $t$  เป็นแกนพรีเซลล์ของผลึกซึ่งปรับยังไม่ตรงตามต้องการอยู่ในแนวเดียวกับ CK จุด Q เป็นจุดอยู่บนระนาบรีซีเพอเคิลเลย์เออร์ที่ 0 ซึ่งตัดทรงกลมการสะท้อนปรากฏบนฟิล์มเป็นจุด B ถ้าแกนผลึกปรับตรงตามต้องการแล้วแกนพรีเซลล์ต้องเป็นแนว CL ซึ่งจุด P ตัดทรงกลมการสะท้อน ปรากฏบนฟิล์มเป็นจุด A นั่นคือ ระยะทางบนฟิล์มที่ผิดไปเท่ากับ  $Z_+$

คิดจากสามเหลี่ยมคล้ายของ  $\Delta CQR$  และ  $\Delta CBA$  พบว่า  $CQ = 1 \text{ r.l.u.}$   
 $CB = F = 60$  มิลลิเมตร

$$\widehat{RCQ} = 2\Sigma \quad , \quad \widehat{CQK} = 90^\circ - \bar{\mu}$$

$$\widehat{CQR} = 90^\circ + \bar{\mu} \quad , \quad \widehat{CRQ} = 90^\circ - 2\Sigma - \bar{\mu}$$

$$\text{และ } \widehat{CAB} = 90^\circ - 2\Sigma - \bar{\mu}$$

จากกฎของ sine ของ  $\Delta CAB$

$$\frac{Z_+}{\sin 2\Sigma} = \frac{F}{\sin(90^\circ - 2\Sigma - \bar{\mu})}$$

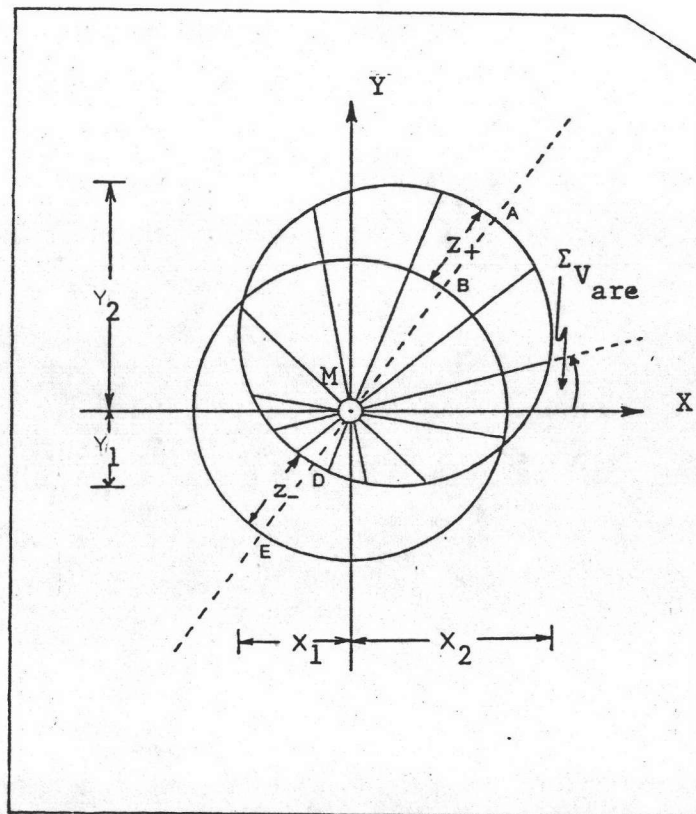
$$Z_+ = \frac{F \sin 2\Sigma}{\cos(2\Sigma + \bar{\mu})} \quad 5.14$$

เมื่อพิจารณารูป 5.25 ข.  $t$  แกนพรีเซลล์ของผลึกซึ่งปรับยังไม่ตรงตามต้องการอยู่ในแนวเดียวกับ CF จุด T เป็นจุดอยู่บนระนาบรีซีเพอเคิลเลย์เออร์ที่ 0 ซึ่งตัดทรงกลมการสะท้อน ปรากฏบนฟิล์มเป็นจุด E บนฟิล์ม เช่นเดียวกับรูปที่ 5.25 ก. ถ้าปรับแกนผลึกถูกต้องแล้วแกนพรีเซลล์ต้องอยู่ในแนว CN ซึ่งจุด S ตัดทรงกลมการสะท้อน ปรากฏบนฟิล์มเป็นจุด D นั่นคือ ระยะทางบนฟิล์มที่ผิดไปเท่ากับ  $Z_-$  จากสามเหลี่ยม  $\Delta CTF$  และ  $\Delta CED$  ซึ่ง  $CT = 1 \text{ r.l.u.}$  ,  $CE = 60$  มิลลิเมตร,  $\widehat{ECD} = 2\Sigma$ ,  $\widehat{CTF} = 90^\circ - \bar{\mu}$ ,  $\widehat{CED} = 90^\circ - \bar{\mu}$  ดังนั้น  $\widehat{CDE} = 90^\circ - 2\Sigma + \bar{\mu}$

จากกฎของ sine ของ  $\Delta CDE$  ได้ว่า

$$\frac{Z_-}{\sin 2\Sigma} = \frac{F}{\sin(90^\circ - 2\Sigma + \bar{\mu})}$$

$$Z_- = \frac{F \sin 2\Sigma}{\cos(2\Sigma - \bar{\mu})} \quad 5.15$$



รูป 5.26 ลักษณะภาพถ่ายที่ได้ในขณะปรับแกนพรเซล์ของผลึก



ระยะ MA และ MD วัดได้จากฟิล์ม ดังรูป 5.26

$$MA - MD = (MB + BA) - (ME - DE) = Z_+ + Z_- \quad 5.16$$

แทนค่า  $Z_+$  และ  $Z_-$  ในสมการ 5.16 จะได้

$$MA - MD = F \sin 2\Sigma \left[ \frac{1}{\cos(2\Sigma + \bar{\mu})} + \frac{1}{\cos(2\Sigma - \bar{\mu})} \right] \quad 5.17$$

พิจารณาในเมื่อ  $\bar{\mu}$  และ  $\Sigma$  มีค่าน้อย ๆ

$$MA - MD = 4F\Sigma$$

$$\Sigma = \frac{MA - MD}{4F} \quad \text{เรเดียน}$$

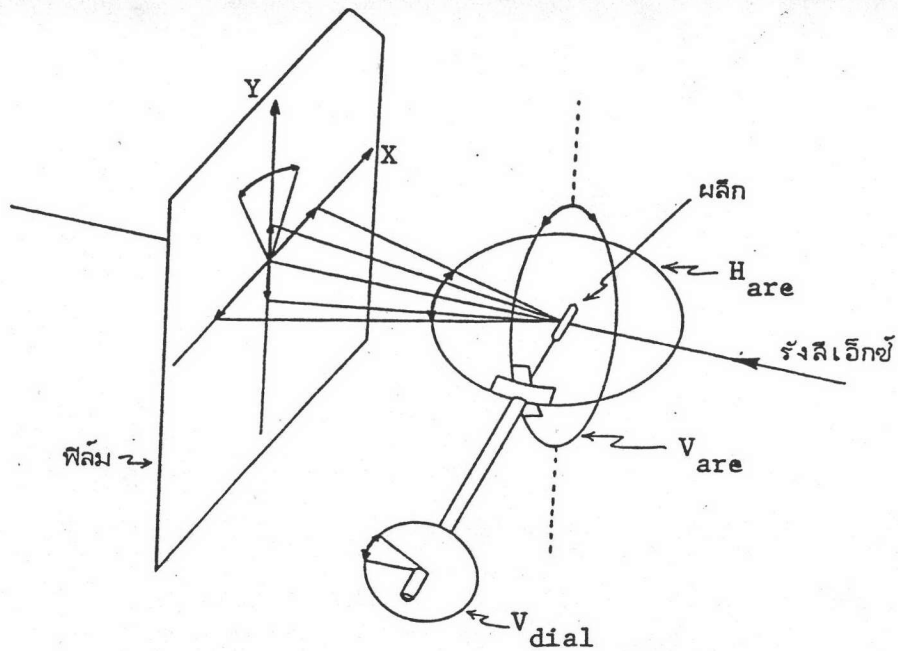
$$\text{หรือ} \quad \Sigma = \frac{MA - MD}{4F} \times \frac{360}{2\pi} \quad \text{องศา} \quad 5.18$$

แยกพิจารณา  $\Sigma$  ออกเป็น 2 แขน ดังรูป 5.26

$$\Sigma_{V_{dial}} = (Y_2 - Y_1) \times \frac{3}{4\pi} \quad \text{องศา} \quad 5.19$$

$$\Sigma_{H_{arc}} = (X_2 - X_1) \times \frac{3}{4\pi} \quad \text{องศา} \quad 5.20$$

ส่วน  $\Sigma_{V_{arc}}$  วัดได้จากภาพถ่ายโดยตรง การปรับ  $\Sigma_{V_{dial}}$ ,  $\Sigma_{H_{arc}}$  และ  $\Sigma_{V_{arc}}$  ให้ปรับ ณ ที่ต่าง ๆ ตามที่แสดงในรูปที่ 5.27



รูป 5.27 ลักษณะการปรับแกนพรีเซลล์ของผลึกของ  $H_{arc}$ ,  $V_{arc}$  และ  $V_{dial}$  โดยที่สัญลักษณ์

$H$  = ส่วนโค้งในแนวระดับ (horizontal arc)

$V$  = ส่วนโค้งในแนวตั้ง (vertical arc)

ในทางปฏิบัติการปรับแกนพรีเซลล์ของผลึกมีขั้นตอนที่ต้องทำดังนี้ ขั้นแรกให้  $\bar{m} = 0$  องศา อ่านค่าบน  $V_{dial}$  ดังรูปที่ 5.27 จากนั้นให้ตั้งมุม  $\bar{m} = 10$  องศา ไม่ต้องใส่ตัวกรองรังสีเอ็กซ์ และจากนั้น ตั้งฟิล์มไว้ที่ตำแหน่งห่างจากตำแหน่งกึ่งกลางผลึกเป็นระยะ 60 มิลลิเมตร คือ  $F = 60$  มิลลิเมตร ทำการถ่ายภาพโดยใช้เวลาประมาณ 30 นาที นำฟิล์มมาล้างและทำการวัด และแก้ค่า  $\Sigma_{V_{dial}}$ ,  $\Sigma_{H_{arc}}$  และ  $\Sigma_{V_{arc}}$  เพื่อปรับแกนพรีเซลล์ของผลึก กระทำเช่นนี้จนกระทั่งวงกลมที่ปรากฏบนภาพถ่ายมีจุดศูนย์กลางอยู่ที่กึ่งกลางของตัวหยุดรังสีเอ็กซ์ คือจุด M ดังรูปที่ 5.26 สำหรับความยาวรัศมีของวงกลม ( $r$ ) บนฟิล์มในการถ่ายภาพเพื่อปรับแกนพรีเซลล์ผลึกพบว่า

$$r = 2F \sin \bar{\mu} \tag{5.21}$$

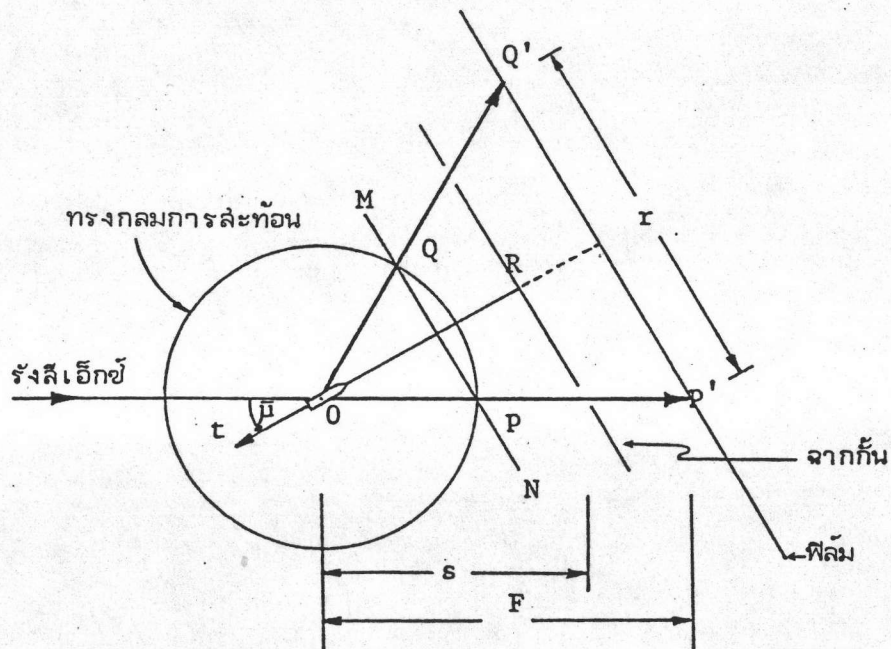
แสดงว่า ค่า  $r$  ขึ้นอยู่กับมุมของการพร่เซลล์ ( $\bar{\mu}$ ) เท่านั้น เนื่องจาก  $F$  เป็นค่าคงที่

แต่เมื่อต้องการปรับแกนพร่เซลล์ของผลึกให้ถูกต้องและรวดเร็วควรทำดังนี้  
หลังจากถ่ายภาพผลึกด้วยวิธีผลึกหมุนเล็ริจแล้ว ให้นำผลึกมาถ่ายภาพเพื่อปรับแกนพร่-  
เซลล์ของผลึกนั้นทันที ซึ่งจะพบว่าจากภาพถ่ายที่ได้ต้องแก้เฉพาะค่า  $\Sigma_{V_{dial}}$  เท่านั้น

หลังจากปรับแกนพร่เซลล์ของผลึกได้แล้ว จึงเริ่มถ่ายภาพโดยวิธีพร่เซลล์ขึ้น  
ซึ่งการถ่ายภาพมี 2 แบบ คือ การถ่ายภาพของระนาบรีซีเพอเคิลเลย์เออร์ที่ 0 และ  
การถ่ายภาพของระนาบรีซีเพอเคิลเลย์เออร์ที่  $n$

การถ่ายภาพพร่เซลล์ขึ้นของระนาบรีซีเพอเคิลเลย์เออร์ที่ 0 แสดงดังรูปที่

5.28



รูป 5.28 หลักการถ่ายภาพพร่เซลล์ขึ้นของระนาบรีซีเพอเคิลเลย์เออร์ที่ 0

MN คือระนาบรีซีเพรอกิลแลททิสเลขีเออร์ที่ 0 ซึ่งตั้งฉากกับแกนพีซีเชลล์  $t$  ซึ่งเอียงทำมุม  $\bar{\mu}$  กับลำรังสีเอ็กซ์ MN ตัดทรงกลมการสะท้อนที่จุด P และ Q ซึ่งจะไปปรากฏบนฟิล์มเป็นจุด P' และ Q' ตามลำดับ

จากสามเหลี่ยมคล้าย  $\Delta OPQ$  กับ  $\Delta OP'Q'$

$$\frac{P'Q'}{PQ} = \frac{OP'}{OP} = F \quad 5.22$$

$$P'Q' = F \cdot PQ \quad 5.23$$

เมื่อ PQ คือ ระยะทางระหว่างจุดกำเนิดของรีซีเพรอกิลแลททิสกับจุดที่ตัดทรงกลมการสะท้อน

F คือ ระยะระหว่างกึ่งกลางผลึกกับฟิล์ม = 60 มิลลิเมตร

P'Q' เป็นระยะที่วัดได้จากฟิล์ม จากสมการ 5.23 พบว่าระยะ P'Q' มีความยาวเป็น F เท่าของระยะระหว่างจุดรีซีเพรอกิลแลททิส PQ

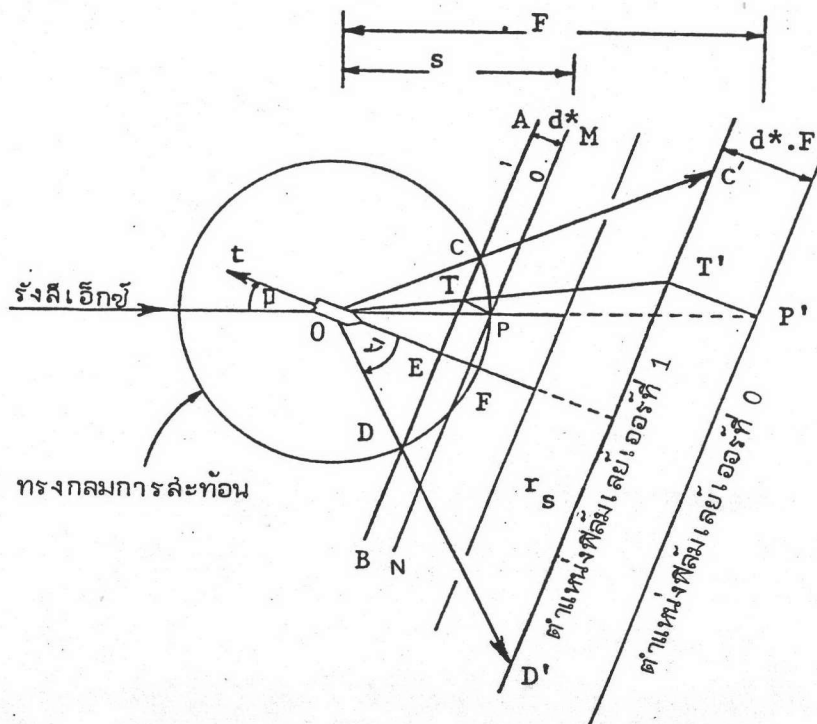
ส่วนการถ่ายภาพของระนาบรีซีเพรอกิลแลททิสเลขีเออร์ที่  $n$  ในที่นี้จะกล่าวเฉพาะระนาบรีซีเพรอกิลแลททิสเลขีเออร์ที่ 1 เท่านั้น แสดงดังรูปที่ 5.29

AB คือระนาบรีซีเพรอกิลแลททิสเลขีเออร์ที่ 1 โดยมีระยะห่างจากระนาบรีซีเพรอกิลแลททิสเลขีเออร์ที่ 0 เป็น  $d^*$  เนื่องจากต้องการให้รังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนจากระนาบรีซีเพรอกิลแลททิสเฉพาะเลขีเออร์ที่ 1 ผ่านช่องของฉากกันตกลางบนฟิล์มเท่านั้น จึงต้องเลื่อนฟิล์มเข้าหาผลึกเป็นระยะ  $F \cdot d^*$  เมื่อแกนพีซีเชลล์  $t$  เอียงทำมุมกับลำรังสีเอ็กซ์  $\bar{\mu}$  ระนาบ AB ตัดทรงกลมการสะท้อนที่จุด C และ D ซึ่งจะไปปรากฏเป็นจุด C' และ D' ตามลำดับ บนฟิล์ม จากสามเหลี่ยมคล้าย  $\Delta OPT'$  กับ  $\Delta OPT$  พบว่า

$$\frac{OT'}{OT} = \frac{OP'}{OP} = F \quad 5.24$$

จากสามเหลี่ยมคล้าย  $\Delta OT'D'$  กับ  $\Delta OTD$  พบว่า

$$\frac{T'D'}{TD} = \frac{OT'}{OT} \quad 5.25$$



รูป 5.29 หลักการถ่ายภาพเฟสเลื่อนของระบบริชชีเพรอกเคิลเลย์เออร์ที่ 1

จากสมการ 5.24 และ 5.25 ได้

$$TD' = F \cdot TD \tag{5.26}$$

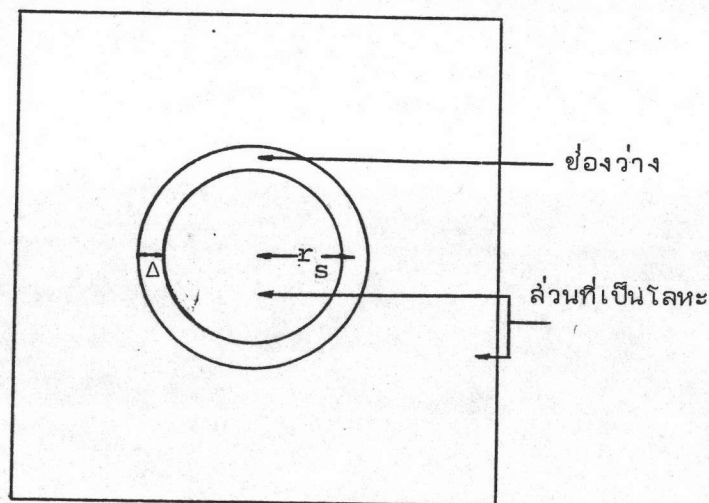
นั่นคือ ระยะระหว่างจุดสะท้อนบนฟิล์ม  $TD'$  ของระบบริชชีเพรอกเคิลแลทกลีเลย์เออร์ที่ 1 มีความยาวเป็น  $F$  เท่า ของระยะระหว่างจุดริชชีเพรอกเคิลแลทกลีเลย์เออร์ที่ 0 ส่วนการถ่ายภาพเฟสเลื่อนของเลย์เออร์ที่  $n$  ก็ทำได้ในทำนองเดียวกัน

ในการถ่ายภาพพีเอชเอ็นแต่ละเลย์เออร์ในทางปฏิบัติ ต้องพิจารณาเลือกชุดของระยะระหว่างฉากกับผลึก (S) รัศมีของฉาก (r<sub>S</sub>) และมุมการพีเอชเอ็นของแกนผลึก (μ̄) ให้เหมาะสม ซึ่งตัวแปร S, r<sub>S</sub> และ μ̄ มีความสัมพันธ์กันดังนี้

$$\text{จากรูปที่ 5.29} \quad S = r_S \cot \left[ \cos^{-1} (\cos \bar{\mu} - d^*) \right] \quad 5.27$$

เมื่อ  $d^*$  คือ ระยะระหว่างระนาบรีไซเคิลแลททิซที่ตั้งฉากกับแกนพีเอช

ซึ่งในการถ่ายภาพพีเอชเอ็นแต่ละเลย์เออร์นั้น ต้องกำหนดมุมที่ต้องการพีเอชแกนผลึกคือ  $\bar{\mu}$  ซึ่งมีค่าตั้งแต่ 0 ถึง 30 องศา ค่ารัศมีของฉากคือ r<sub>S</sub> ซึ่งมี 6 ขนาดให้เลือกใช้มีค่าต่าง ๆ ดังนี้ 5, 10, 15, 20, 25 และ 30 มิลลิเมตร และขนาดของช่องวงแหวน (Δ) ของฉากก็มี 3 ขนาดให้เลือกคือ 1, 2 และ 3 มิลลิเมตร ดังรูปที่ 5.30 ส่วนค่าของ  $d^*$  เป็นค่าคงที่ของผลึกแต่ละผลึกหาได้จากข้อมูลผลึกเบื้องต้น สุดท้ายสามารถทำการคำนวณระยะทางระหว่างผลึกกับฉาก (S) ได้จากสมการ 5.27 โดยในการถ่ายภาพพีเอชเอ็นแต่ละเลย์เออร์นั้นสำหรับการทดลองนี้ ใช้ค่าของ  $\bar{\mu}$ , r<sub>S</sub>, Δ,  $d^*$ ,  $Fd^*$  และ S ดังตาราง 5.13



รูป 5.30 ลักษณะของฉากกันรังสีเอ็กซ์ในการถ่ายภาพพีเอชเอ็น

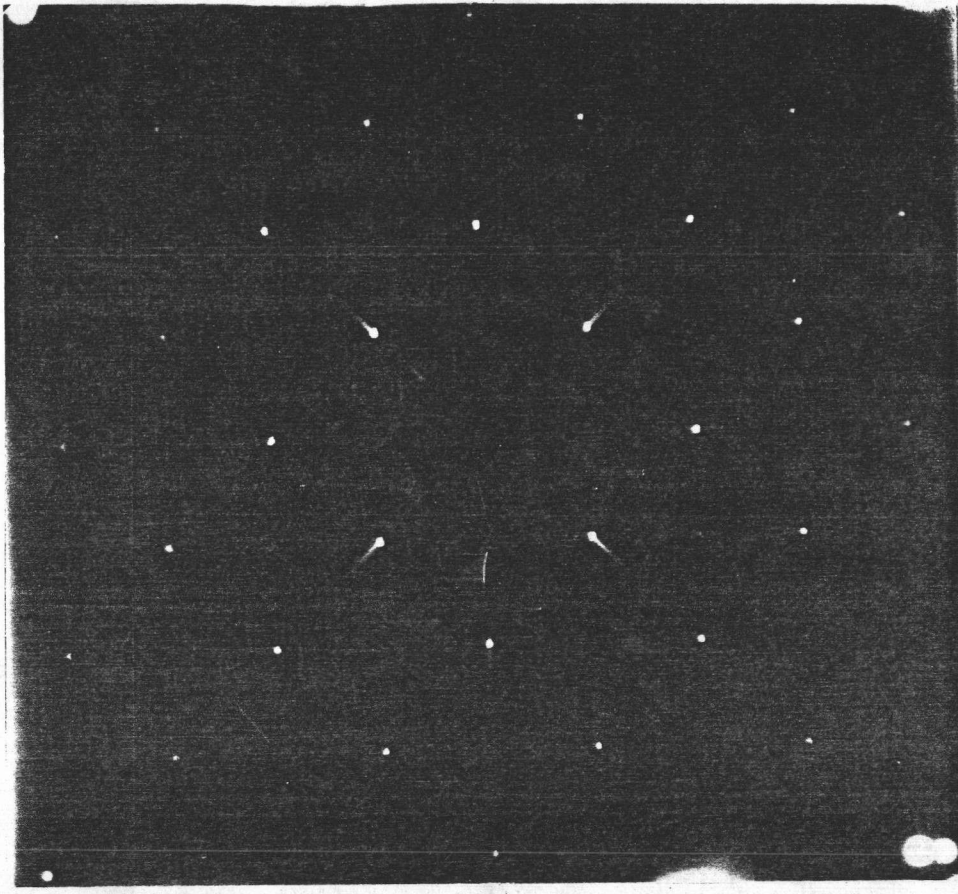
ตาราง 5.13 ก. ค่า  $\bar{\mu}$ ,  $r_s$ ,  $\Delta$ ,  $S$  และเวลาที่ใช้สำหรับการถ่ายภาพเซลล์ชั้น  
ในแต่ละเลย์เออร์ โดยมีแกน  $a$  เป็นแกนพรีเซลล์ และใช้  
รังสีเอ็กซ์  $\text{MoK}_\alpha$  ( $\lambda = 0.71069 \text{ \AA}$ )

เลย์เออร์ที่	$\bar{\mu}$	$r_s$ (มิลลิเมตร)	$\Delta$ (มิลลิเมตร)	$d^*$ ( $= \frac{n\lambda}{d}$ )	$Fd^*$	$S$ (มิลลิเมตร)	เวลาที่ใช้ ถ่ายภาพ (ชั่วโมง)
0	$30^\circ$	15	2	0.00	0.00	25.98	90.0
1	$24^\circ$	15	2	0.11	6.72	20.11	92.0
2	$24^\circ$	20	2	0.22	13.44	19.04	95.0
3	$24^\circ$	30	2	0.34	20.16	21.23	95.0
4	$10^\circ$	30	2	0.45	26.87	19.09	98.0

ตาราง 5.13 ข. ใช้ค่า  $\bar{\mu}$ ,  $r_s$ ,  $\Delta$ ,  $S$  และเวลาที่ใช้สำหรับการถ่ายภาพเซลล์ชั้น  
ในแต่ละเลย์เออร์ โดยมีแกน  $b$  เป็นแกนพรีเซลล์และใช้รังสีเอ็กซ์  
 $\text{MoK}_\alpha$  ( $\lambda = 0.71069 \text{ \AA}$ )

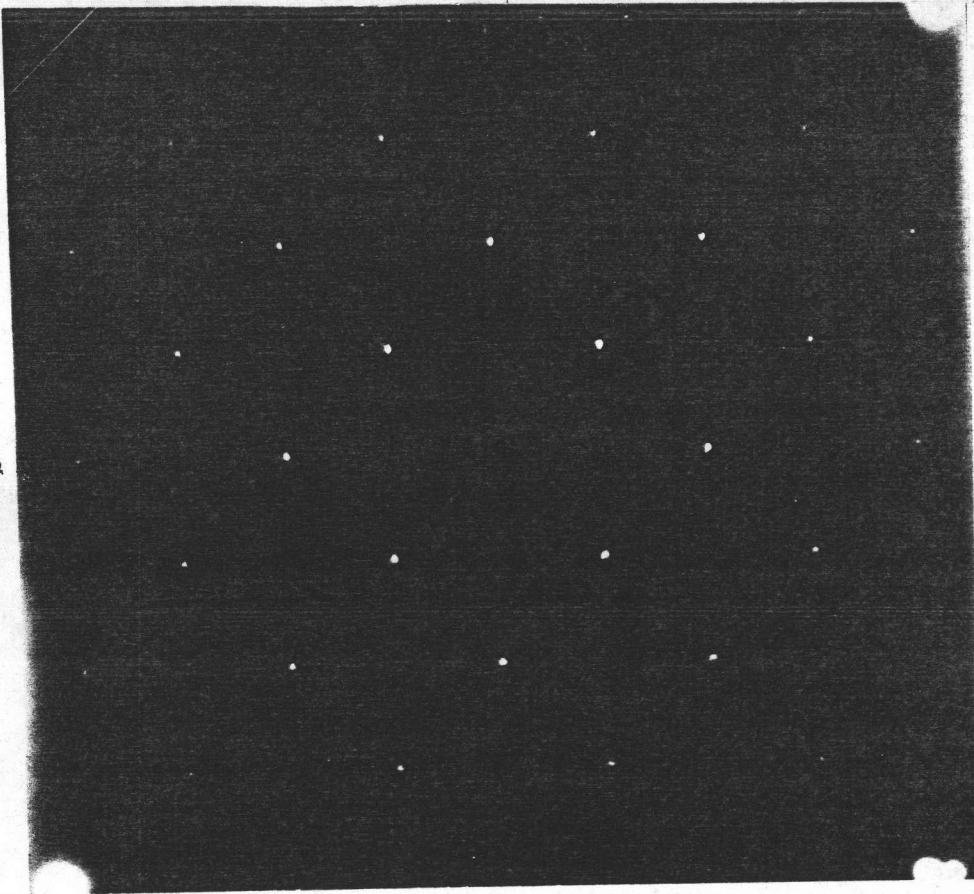
เลย์เออร์ที่	$\bar{\mu}$	$r_s$ (มิลลิเมตร)	$\Delta$ (มิลลิเมตร)	$d^*$ ( $= \frac{n\lambda}{d}$ )	$Fd^*$	$S$ (มิลลิเมตร)	เวลาที่ใช้ ถ่ายภาพ (ชั่วโมง)
0	$30^\circ$	15	2	0.00	0.00	25.98	63.0
1	$24^\circ$	15	2	0.11	6.72	20.11	74.0
2	$24^\circ$	20	2	0.22	13.44	19.04	92.0
3	$24^\circ$	30	2	0.34	20.16	21.23	72.0
4	$10^\circ$	30	2	0.45	26.87	19.09	96.0

\* a



\* c

\* b



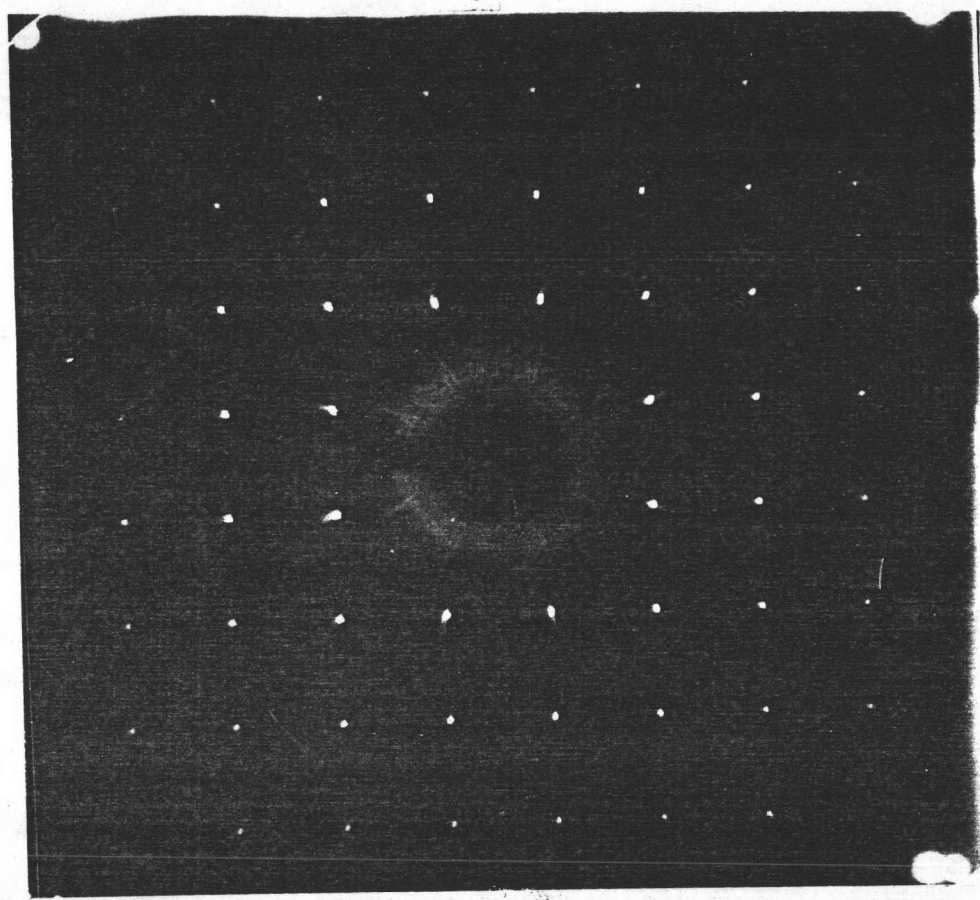
\* c

รูป 5.31 ข. ภาพถ่ายพรเซล์ชั้นเสอแกม b เป็นแกมพรเซล์  
 เลขเออร์ที่ 0 มี  $\bar{\mu} = 30^\circ$  (MoK $_{\alpha}$  50 กิโล-  
 วัตต์, 14 มิลลิแอมป์ ฝ Zr เป็นตัวกรอง  
 ใช้เวลา 63 ชั่วโมง)

รูป 5.31 ก. ภาพถ่ายพรเซล์ชั้นเสอแกม a เป็นแกมพรเซล์  
 เลขเออร์ที่ 0 มี  $\bar{\mu} = 30^\circ$  (MoK $_{\alpha}$  50 กิโล-  
 วัตต์, 14 มิลลิแอมป์ ฝ Zr เป็นตัวกรอง  
 ใช้เวลา 90 ชั่วโมง)

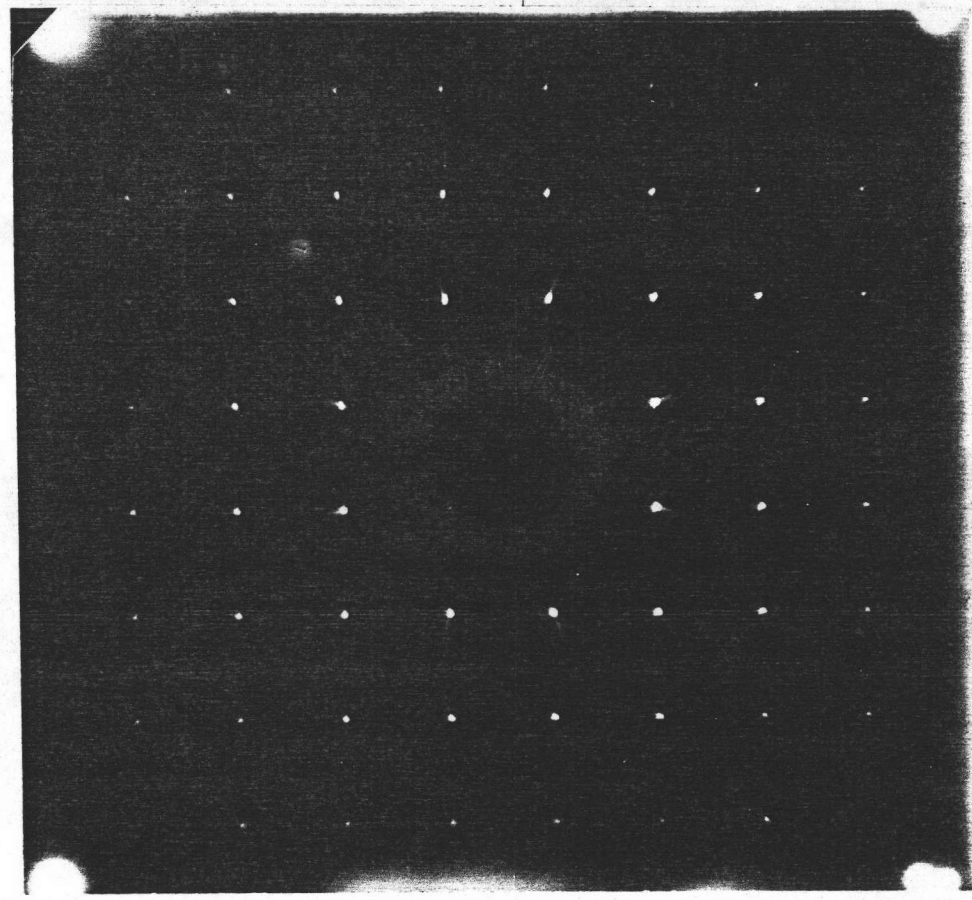


\*  
a



\*  
c

\*  
b

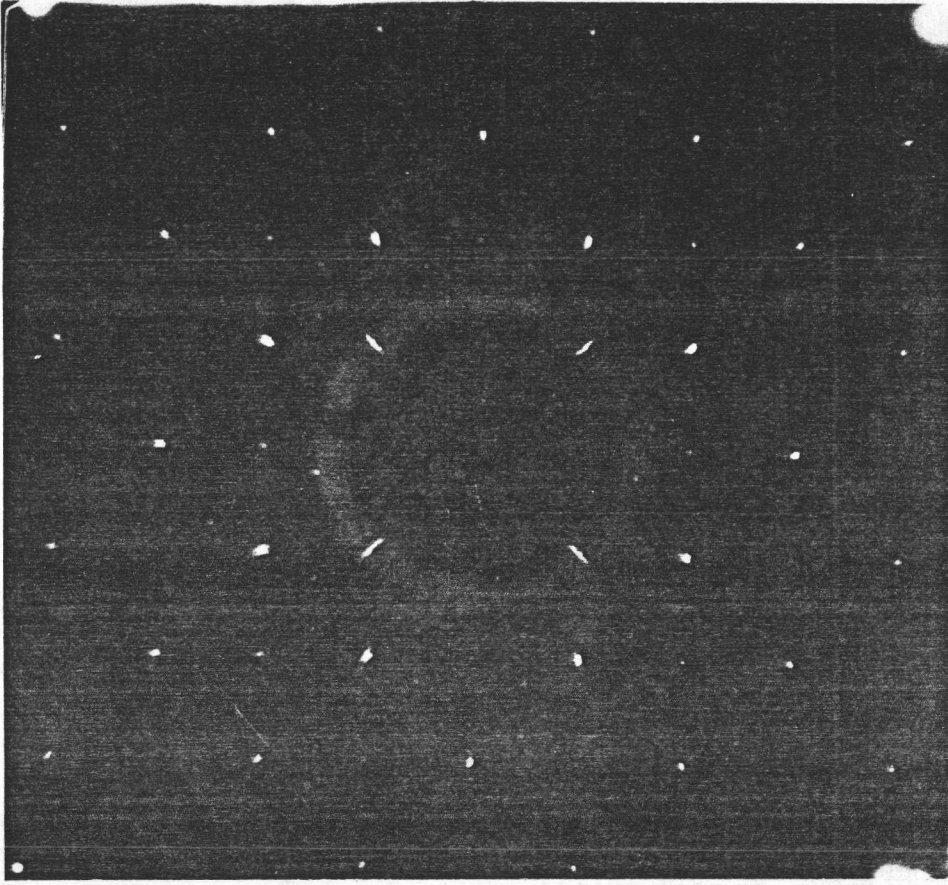


\*  
c

รูป 5.31 ง. ภาพถ่ายพรเซล์ชั้นเมื่อ b เป็นแกนพรเซล์เดี่ยว-  
เออร์ที่ 1 มี  $\bar{\mu} = 24^{\circ}$  (MoK $_{\alpha}$  50 กิโลวัตต์  
14 มิลลิแอมป์ มี Zr เป็นตัวกรอง ใช้เวลา  
74 ชั่วโมง)

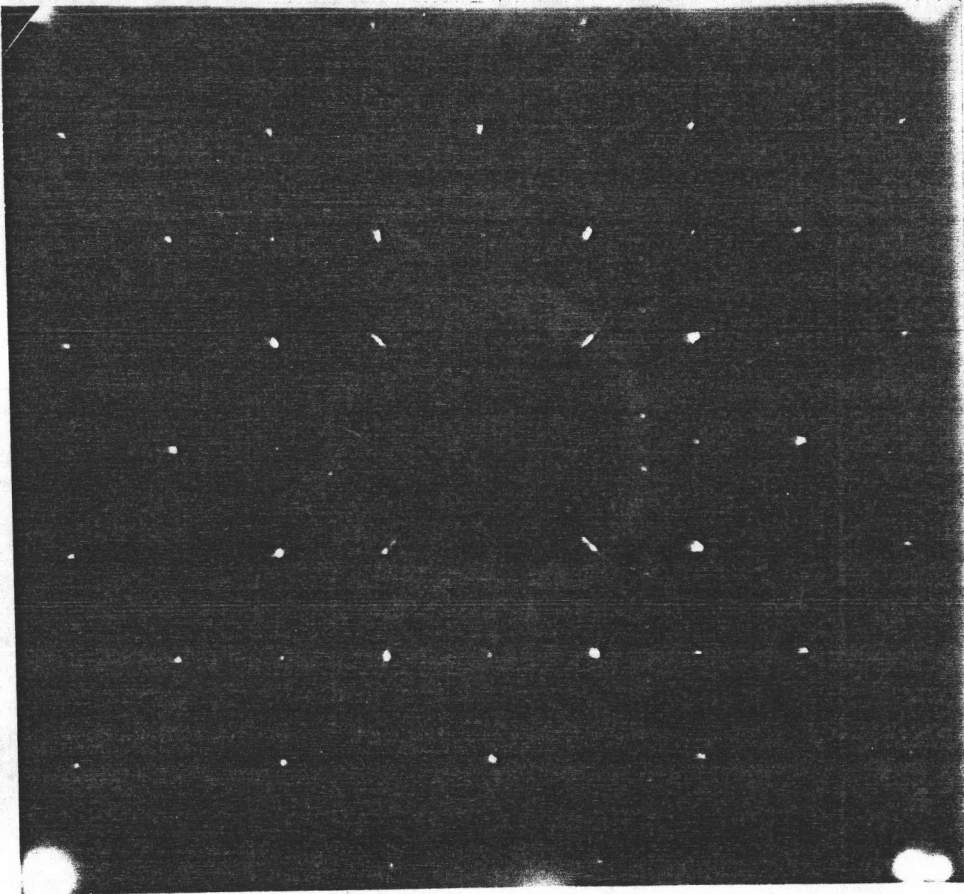
รูป 5.31 ค. ภาพถ่ายพรเซล์ชั้นเมื่อ a เป็นแกนพรเซล์  
เดี่ยวเออร์ที่ 1 มี  $\bar{\mu} = 24^{\circ}$  (MoK $_{\alpha}$  50 กิโล-  
วัตต์, 14 มิลลิแอมป์ มี Zr เป็นตัวกรอง  
ใช้เวลา 92 ชั่วโมง)

a \*



c \*

b \*



c \*

รูป 5.31 ฉ. ภาพถ่ายพรเซล์ชั้นเมื่อ b เป็นแกนพรเซล์เลขเออร์

ที่ 2 มิ  $\bar{h} = 24^\circ$  (MoK $_{\alpha}$  50 กิโลวัตต์,

14 มิลลิแอมป์ มิ Zr เป็นตัวกรอง ไข่เวลา

92 ชั่วโมง)

รูป 5.31 จ. ภาพถ่ายพรเซล์ชั้นเมื่อ a เป็นแกนพรเซล์เลขเออร์

ที่ 2 มิ  $\bar{h} = 24^\circ$  (MoK $_{\alpha}$  50 กิโลวัตต์,

14 มิลลิแอมป์ มิ Zr เป็นตัวกรอง ไข่เวลา 95

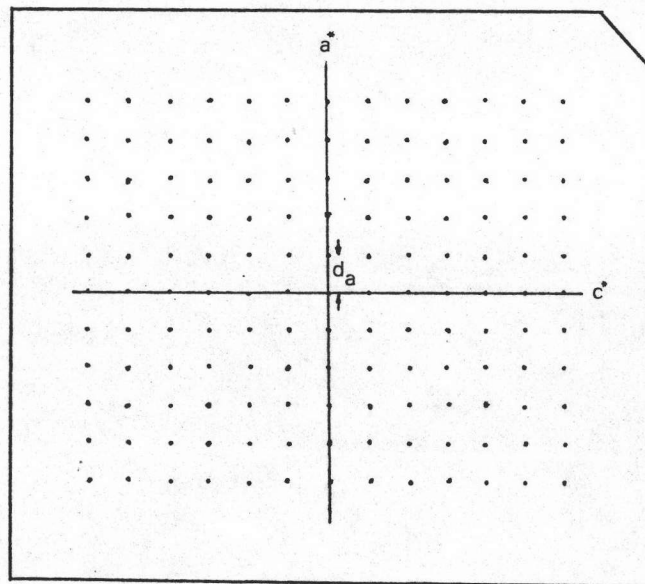
ชั่วโมง)

จากผลการถ่ายภาพฟรีเซลล์ขึ้นพบว่า รูปแบบของจุดสะท้อนของรังสีเอ็กซ์ที่ปรากฏบนฟิล์มของเลย์เออร์ที่ 0, 1, 2 ไม่เหมือนกัน แต่เลย์เออร์ที่ 3 เหมือนเลย์เออร์ 1, เลย์เออร์ที่ 4 เหมือนเลย์เออร์ที่ 0 ไม่ว่าจะใช้แกน a หรือ b เป็นแกนฟรีเซลล์ ดังแสดงตามรูปที่ 5.31

จากภาพถ่ายฟรีเซลล์ขึ้นเมื่อแกน b เป็นแกนฟรีเซลล์เลย์เออร์ที่ 0 สามารถคำนวณหาค่าคงที่โครงสร้าง a และ c ได้ ประกอบกับจากภาพถ่ายฟรีเซลล์ขึ้นเมื่อแกน a เป็นแกนฟรีเซลล์เลย์เออร์ที่ 0 สามารถคำนวณหาค่าคงที่โครงสร้าง b และ c ได้โดยใช้ความสัมพันธ์

$$a = \frac{h\lambda F}{d_a} \quad 5.28$$

- เมื่อ a คือ ค่าคงที่โครงสร้างตามแกน a  
 h คือ ค่าดัชนีมิลเลอร์สำหรับแกนผลึกที่ต้องการหาค่าคงที่โครงสร้าง  
 F คือ ค่าคงที่ของกล้อง 60 มิลลิเมตร  
 $d_a$  คือ ระยะทางระหว่างจุดสะท้อนตามแนวแกนผลึกที่ต้องการหาค่าคงที่โครงสร้าง ถึงจุดกำเนิด



รูป 5.32 ลักษณะภาพถ่ายฟรีเซลล์ขึ้นของระนาบรีซีเพอเคิลเลย์เออร์ที่ 0

ผลการคำนวณหาค่าคงที่โครงผลึกจากภาพถ่ายพรเซล์ชั้นแสดงในตารางที่ 5.14 และ 5.15

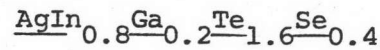
ตาราง 5.14 ค่าคงที่โครงผลึกตามแกน a และ b ซึ่งเท่ากับคำนวณจากภาพถ่ายพรเซล์ชั้น ตามรูป 5.31 ก. และ ข.

h	k	l	$d_a$ (มิลลิเมตร)	a (Å)
2	0	0	13.55	6.29
4	0	0	26.75	6.38
6	0	0	40.45	6.32
8	0	0	53.90	6.33
				$\langle a \rangle = 6.33$

ตาราง 5.15 ค่าคงที่โครงผลึกตามแกน c คำนวณจากภาพถ่ายพรเซล์ชั้นตามรูป 5.31 ก. และ ข.

h	k	l	$d_c$ (มิลลิเมตร)	c (Å)
0	0	4	14.10	12.10
0	0	8	27.75	12.29
0	0	12	41.70	12.27
0	0	16	55.25	12.35
				$\langle c \rangle = 12.25$

5.4.6 การหาค่าความหนาแน่น จำนวนหน่วยสูตร ในหนึ่งหน่วยเซลล์ และ สัมประสิทธิ์การตุดกลืนรังสีเอ็กซ์เอ็งเส้นของโลหะผสมกึ่งตัวนำ



โลหะผสมกึ่งตัวนำที่เตรียมได้มีลักษณะ เป็นก้อนซึ่งมีขนาดเพียงพอที่สามารถนำมาหาค่าความหนาแน่น โดยวิธีการแทนที่น้ำได้ ส่วนวิธีการทดลองและข้อมูลการทดลองมีดังนี้

- ให้ A คือ น้ำหนักขวดที่ใช้หาความถ่วงจำเพาะ  
 B คือ น้ำหนักขวดที่ใช้หาความถ่วงจำเพาะ + น้ำหนักของน้ำเต็มขวด  
 C คือ น้ำหนักขวดที่ใช้หาความถ่วงจำเพาะ + น้ำหนักของสารโลหะผสมกึ่งตัวนำ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$   
 E คือ น้ำหนักขวดที่ใช้หาความถ่วงจำเพาะ + น้ำหนักของสารโลหะผสมกึ่งตัวนำ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$  + น้ำหนักของน้ำที่เต็มเต็มขวด

เพราะฉะนั้นความหนาแน่นของสารโลหะผสมกึ่งตัวนำ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$

$$= \frac{C - A}{[B + (C - A)] - E}$$

และการใช้ค่า  $D_m$  ซึ่งเป็นค่าความหนาแน่นจากการทดลอง ไปใช้ในการคำนวณจำนวนหน่วยสูตรในหนึ่งหน่วยเซลล์ โดยคำนวณจาก

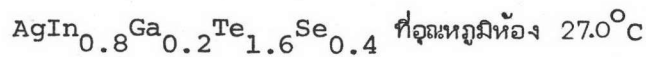
$$Z = \frac{D_m V_u}{m \times 1.66 \times 10^{-24}} \quad 5.29$$

โดยที่ m คือ น้ำหนักโมเลกุลของผลึกมีค่าเท่ากับ 449.44

$V_u$  คือ ปริมาตรของหนึ่งหน่วยเซลล์มีค่าเท่ากับ  $496.037 \times 10^{-24} \text{ (ซม)}^3$

Z คือ จำนวนหน่วยสูตรในหนึ่งหน่วยเซลล์

ตาราง 5.16 ผลการทดลองเพื่อหาความหนาแน่นของโลหะผสมกึ่งตัวนำ



การทดลองครั้งที่	A (กรัม)	B (กรัม)	C (กรัม)	E (กรัม)	ความหนาแน่นของลํากร (กรัม/ซม <sup>3</sup> )
1	24.8329	39.6822	24.8622	39.7062	5.5
2	24.8121	39.7025	24.9051	39.7811	6.0
					$\langle D_m \rangle = 5.8$

จากการคำนวณได้ค่า  $Z = 3.8$  แต่เนื่องจาก  $Z$  ต้องเป็นเลขจำนวนเต็ม ดังนั้น  $Z$  จึงมีค่าเท่ากับ 4 เมื่อแทนค่านีกลับลงไปในลํากร 5.29 เพื่อคำนวณค่าความหนาแน่นของผลึกที่ถูกต้อง ( $D_c$ ) ปรากฏว่าได้ค่า  $D_c = 6.0$  กรัมต่อ ซม.<sup>3</sup>

นำค่า  $D_c$  ที่ได้ไปคำนวณหาค่าของสัมประสิทธิ์การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์เชิงเส้น ( $\mu$ ) ได้จากความสัมพันธ์ ดังนี้

$$\mu = D \sum_i p_i (\mu_m)_i \quad 5.30$$

โดยที่  $D$  คือ ความหนาแน่นของผลึก

$p_i$  คือ สัดส่วนโดยน้ำหนักของอะตอมชนิดที่  $i$  ต่อน้ำหนักรวม

$(\mu_m)_i$  คือ สัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงมวลของอะตอมตัวที่  $i$  ซึ่งหาได้จาก International Table Vol. III  
ค่า  $\mu_m$  ของ Ag, In, Ga, Te และ Se มีค่าเท่ากับ 25.8, 29.3, 60.1, 35.0 และ 74.7 (ซม)<sup>2</sup>/กรัม ตามลำดับ

จะเห็นว่าการคำนวณค่า  $\mu$  นี้จะต้องคำนวณค่า  $p_i$  ก่อน ซึ่งการหาค่า  $p_i$  ได้แสดงไว้ในตารางที่ 5.17

ตารางที่ 5.17 ; การหาค่าสัดส่วนโดยน้ำหนักของอะตอม Ag, In, Ga, Te, Se ต่อน้ำหนักรวมของโลหะผสมกึ่งตัวนำ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$

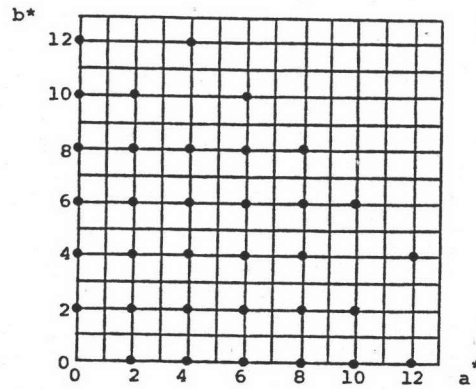
อะตอม	น้ำหนักอะตอม	น้ำหนักอะตอมแต่ละชนิดใน 1 โมเลกุล	$p_i$
Ag	107.88	$107.88 \times 1 = 107.88$	0.24
In	114.82	$114.82 \times 0.8 = 91.86$	0.20
Ga	69.72	$69.72 \times 0.2 = 13.94$	0.03
Te	127.61	$127.61 \times 1.6 = 204.18$	0.45
Se	78.96	$78.96 \times 0.4 = 31.58$	0.07
		น้ำหนักโมเลกุล = 449.44	

เมื่อแทนค่า  $D$ ,  $p_i$  และ  $\mu_m$  ลงในสมการ 5.30 จะได้ว่า

$$\mu = 211.74 \quad (\text{ชม.})^{-1}$$

#### 5.4.7 หมู่สมมาตรสามมิติ (19)

ขณะนี้ข้อมูลผลึกโลหะผสมกึ่งตัวนำ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$  ที่ทราบแล้วก็คือ ความหนาแน่น สมบัติการดูดกลืนเชิงเส้น จำนวนหน่วยสูตรในหนึ่งหน่วยเซลล์ ค่าคงที่โครงสร้างผลึก  $a$ ,  $b$ ,  $c$  และระบบผลึก แต่ที่ยังไม่ทราบอย่างลุดท้ายคือ หมู่สมมาตรสามมิติ ซึ่งสามารถพิจารณาได้จากภาพถ่ายออสซิลเลชันของผลึกที่หมุนรอบแกน  $c$  และพิจารณาจากเงื่อนไขการพบจุดสะท้อน ก่อนอื่นต้องทราบ



ก) (hk0)

ดูจากภาพถ่ายไอซ์เชิงเบอร์ริกและพรเซล์ชัน

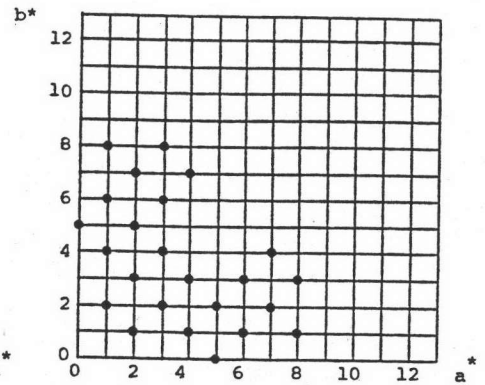
hoo ;  $h = 2n$

oko ;  $k = 2n$

พบว่า

hko ;  $h+k = 2n$

hho ;  $h = 2n$



ข) (hk1)

ดูจากภาพถ่ายพรเซล์ชัน

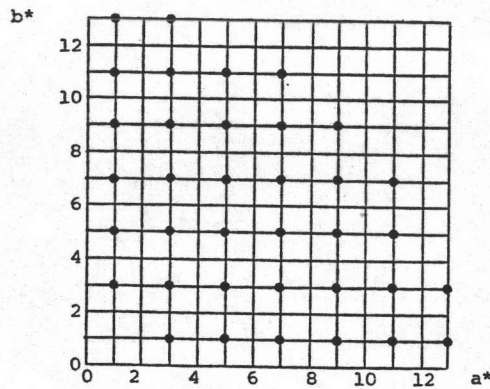
ho1 ;  $h = 2n+1$

ok1 ;  $k = 2n+1$

พบว่า

hk1 ;  $h+k = 2n+1$

hh1 ; ไม่ปรากฏ



ค) (hk2)

ดูจากภาพถ่ายไอซ์เชิงเบอร์ริกและพรเซล์ชัน

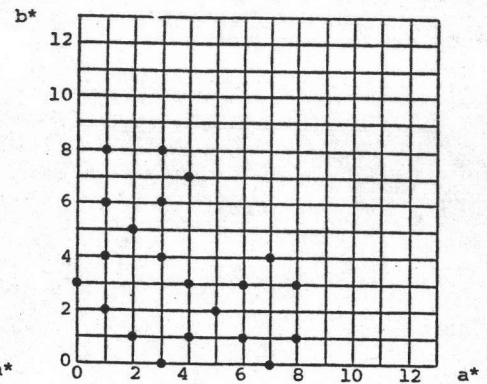
ho2 ; ไม่ปรากฏ

ok2 ; ไม่ปรากฏ

พบว่า

hk2 ;  $h+k = 2n$

hh2 ;  $h = 2n+1$



ด) (hk3)

ดูจากภาพถ่ายพรเซล์ชัน

ho3 ;  $h = 2n+1$

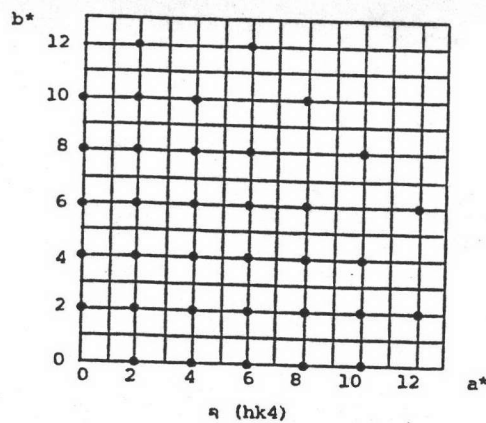
ok3 ;  $k = 2n+1$

พบว่า

hk3 ;  $h+k = 2n+1$

hh3 ; ไม่ปรากฏ





ดูจากภาพถ่ายไอซ์เชิงเบอร์กและพรเซลล์ชัน

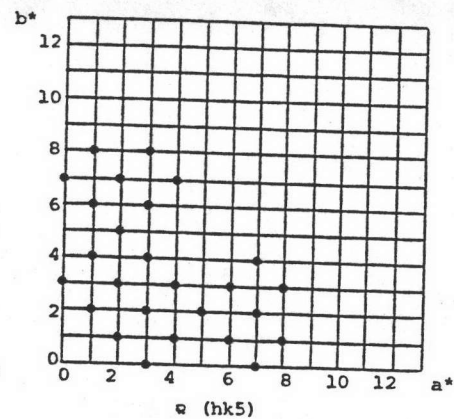
$h04 ; h = 2n$

พบว่า

$ok4 ; k = 2n$

$hk4 ; h+k = 2n$

$hh4 ; h = 2n$



ดูจากภาพถ่ายพรเซลล์ชัน

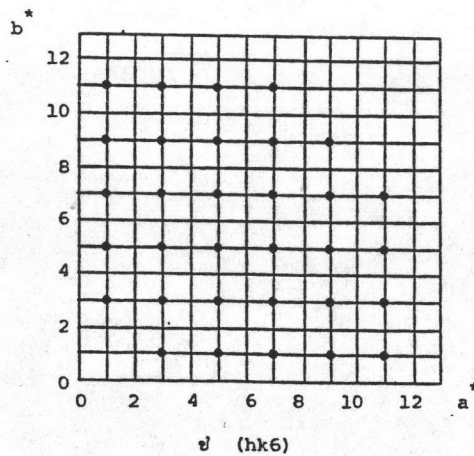
$h05 ; h = 2n+1$

พบว่า

$ok5 ; k = 2n+1$

$hk5 ; h+k = 2n+1$

$hh5 ;$  ไม่ปรากฏ



ดูจากภาพถ่ายไอซ์เชิงเบอร์กและพรเซลล์ชัน

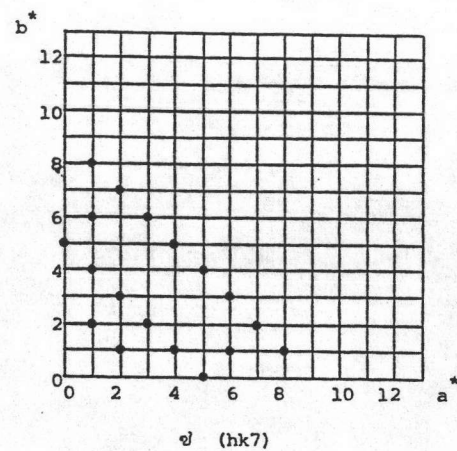
$h06 ;$  ไม่ปรากฏ

พบว่า

$ok6 ;$  ไม่ปรากฏ

$hk6 ; h+k = 2n$

$hh6 ; h = 2n+1$



ดูจากภาพถ่ายพรเซลล์ชัน

$h07 ; h = 2n+1$

พบว่า

$ok7 ; k = 2n+1$

$hk7 ; h+k = 2n+1$

$hh7 ;$  ไม่ปรากฏ

รูปที่ 5.33

ลักษณะจุดรีซีเพอเคิลแลททิสและเงื่อนไขที่พบจุดรีซีเพอเคิลแลททิสของผลึก

$AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{1.6}Se_{0.4}$  เมื่อ  $c$  เป็นแกนหมุนในแต่ละเลย์เออร์

ดัชนีผลเลอรัของจุดสะท้อนที่ปรากฏบนภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบิร์กเสียก่อน วิธีการกำหนดดัชนีผลเลอรัของจุดสะท้อนนั้นได้ใช้แผ่นแสดงแนวไวซ์เซ็นเบิร์ก (Weissenberg chart) สร้างโคออร์ดิเนต (coordinate) ของจุดสะท้อนที่ปรากฏว่า จะมีส่วนที่เป็นจุดสะท้อนบนแกนผลึกซึ่งมีการปรากฏของจุดสะท้อนเรียงกันเป็นแนวเส้นมีความชัน (slope) เป็น 2 กับมีส่วนของจุดสะท้อนที่ไม่อยู่บนแกนผลึกเรียงกันเป็นเส้นโค้ง ดังรูป 5.23 ก. จากนั้นจึงกำหนดดัชนีผลเลอรัของจุดสะท้อนที่เรียงกันเป็นแนวเส้นตรง ซึ่งแสดงถึงลักษณะที่เกิดจากแกนของผลึก การกำหนดดัชนีผลเลอรัให้ใช้การคำนวณค่าคงที่โครงสร้างผลึกตามแนวแกนของผลึกนั้นจะทำให้สอดคล้องกับค่าคงที่โครงสร้างผลึกที่คำนวณได้จากข้อมูลเบื้องต้น เมื่อกำหนดดัชนีผลเลอรัของจุดสะท้อนตามแนวแกนผลึกได้แล้ว ดัชนีผลเลอรัของจุดสะท้อนอื่น ๆ จะทราบได้โดยปริยาย

เมื่อทราบดัชนีผลเลอรัของทุกจุดสะท้อนแล้ว จึงนำมาเขียนเป็นรีซีเพอเคิลแลททิส จะได้ดังรูป 5.33

สำหรับระบบผลึกเตตระโกนัล จะมีหมู่สมมาตรลาวเอ (Laue symmetry group) อยู่ 2 หมู่ คือ  $4/m$  และ  $4/mmm$  ดังนั้นการพิจารณาหมู่สมมาตรสามมิติของผลึก  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$  จึงต้องทราบหมู่สมมาตรลาวเอเสียก่อน ประการแรกจากภาพถ่ายออสซิลเลชันตามรูป 5.20 และ 5.21 ทำให้ทราบว่า มีระนาบกระจก (mirror plane) ตั้งฉากกับแกน c ประการที่สอง เมื่อพิจารณาจุดสะท้อน  $hkl$  ต่าง ๆ ในระนาบรีซีเพอเคิลแลททิส และดูค่าความเข้มของจุดสะท้อนที่มีความสัมพันธ์ผ่านทางระนาบกระจกที่ตั้งฉากกับแกน a หรือ b จากภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบิร์ก และเพรเชลชันตามรูป 5.23 และ 5.31 ตามลำดับ แล้วพบว่า มีแกนหมุน 4 ทบขนานกับแกน c ประกอบกับมีระนาบกระจกที่ตั้งฉากกับแกน a และ b เพราะฉะนั้นผลึก  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$  จึงมีหมู่สมมาตรลาวเอเป็น  $4/mmm$

จากการพิจารณาจุดสะท้อน  $hkl$  ต่าง ๆ ที่นำมาเขียนเป็นรีซีเพอเคิลแลททิส สามารถสรุปเงื่อนไขการพบจุดสะท้อนได้ดังตาราง 5.18

ตาราง 5.18 เงื่อนไขในการพบจุดสะท้อนที่ปรากฏในระนาบรีซีเพอเคิลแลททิกัล  
เลย์เออร์ต่าง ๆ

จุดสะท้อน	เงื่อนไขในการพบจุดสะท้อน	ผลลัพธ์ของเงื่อนไขในการพบจุดสะท้อน	สัญลักษณ์
$h \ k \ l$	$h+k+l = 2n$	บอดี้ เซ็นเตอร์ (body centered)	I
$h \ h \ l$	$2h+l = 4n$	ระนาบเลื่อน (glide plane) ในแนว $[1 \bar{1} 0]$	d
$h \ k \ 0$	$(h+k = 2n)$	ผลจาก บอดี้ เซ็นเตอร์	
$h \ 0 \ l$	$(h+l = 2n)$	ผลจาก บอดี้ เซ็นเตอร์	
$0 \ k \ l$	$(k+l = 2n)$	ผลจาก บอดี้ เซ็นเตอร์	
$h \ 0 \ 0$	$(h = 2n)$	ผลจาก บอดี้ เซ็นเตอร์	
$0 \ k \ 0$	$(k = 2n)$	ผลจาก บอดี้ เซ็นเตอร์	

จากสภาพของเงื่อนไขการพบจุดสะท้อน หมายความว่า ผลึกของ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$  มีหมู่สมมาตรสามมิติที่อาจเป็นไปได้อยู่ 2 หมู่ คือ  $I4_1md$  และ  $I\bar{4}2d$  แต่จากหลักการแสวงหาลำดับที่ตัวนำชนิดใหม่ โดยการนำธาตุตั้งแต่สองธาตุขึ้นไปมาผสมกัน โดยใช้หลักของฮูม-โรเทอร์ ที่ว่า

$$\frac{\text{ผลรวมของจำนวนอิเล็กตรอนวาเลนซ์ของทุกอะตอม}}{\text{จำนวนอะตอมในลาร์ประกอบตระกูลนั้น}} = 4 \frac{\text{อิเล็กตรอน}}{\text{ตำแหน่งอะตอม}}$$

เพื่อให้ได้โลหะผลึกที่มีโครงสร้างพันธะเป็นแบบพันธะเชิงสี่เหลี่ยมกับ ซิลิกอน, ซิงค์เบลนด์ หรือซัลโคไพไรท์ ดังนั้นจึงสรุปว่าหมู่สมมาตรสามมิติที่แท้จริงควรเป็น  $I\bar{4}2d$  เพียงอย่างเดียวเพราะการมีสมมาตรแบบแกนหมุน 2 ทบผ่านอะตอมนั้นจะทำให้สอดคล้องกับการจัดเรียงตัวของอะตอมแบบเตตระฮีดรัลดังกล่าว

#### 5.4.8 การรวบรวมข้อมูลความเข้มรังสีเอ็กซ์

ข้อมูลความเข้มของผลึกเดี่ยววัดจากภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์กที่เลข-  
เออร์ 0 ตามรูปที่ 5.23 ซึ่งการถ่ายภาพไวซ์เซ็นเบอร์กทำโดยวิธีฟิล์มซ้อน (mul-  
tiple-film method) ใช้เหล็กเปลว (iron foil) กั้นระหว่างฟิล์มที่ซ้อนกัน ใช้  
เวลาในการถ่ายภาพต่าง ๆ กันเป็นชุด ๆ ดังนี้

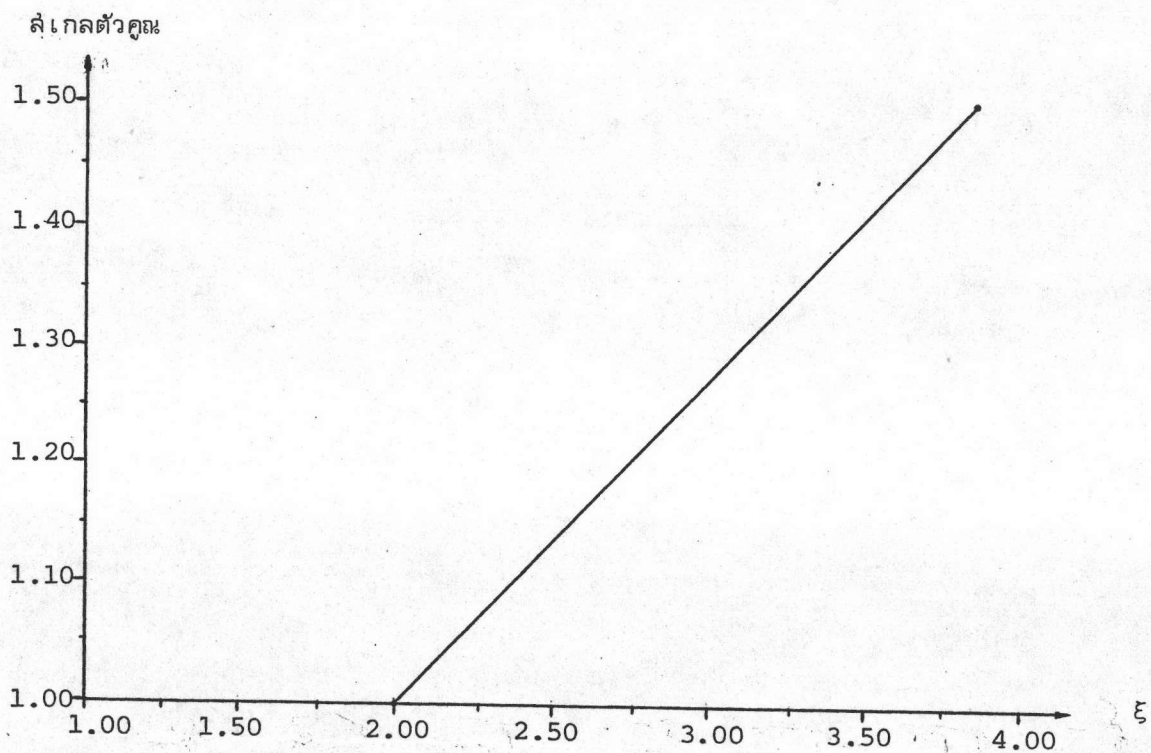
ชุดที่หนึ่งใช้เวลาอบรังสี	200 ชั่วโมง	ใช้ฟิล์มซ้อนกัน	3 แผ่น
ชุดที่สองใช้เวลาอบรังสี	40 ชั่วโมง	ใช้ฟิล์มซ้อนกัน	3 แผ่น
ชุดที่สามใช้เวลาอบรังสี	8 ชั่วโมง	ใช้ฟิล์มซ้อนกัน	3 แผ่น

ซึ่งได้ทำการถ่ายภาพไวซ์เซ็นเบอร์กในลักษณะเช่นนี้ตั้งแต่เลขเออร์ 0 ถึงเลขเออร์ 8  
รวม 9 เลขเออร์ ส่วนการวัดความเข้มของจุดสะท้อนซึ่งมีทั้งหมด 86 จุด ที่ปรากฏ  
บนฟิล์มใช้วิธีวัดด้วยตา โดยการเทียบกับสเกลความเข้มมาตรฐาน (standard  
intensity scale) ที่ทำขึ้นมาใช้ในการทดลองนี้ โดยเลือกจุดสะท้อนจุดใดจุดหนึ่ง  
บนฟิล์มภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์เลขเออร์ที่ 0 ซึ่งจุดสะท้อนที่ควรเลือกนั้นควรมีสลักษณะ  
คล้ายกับจุดสะท้อนส่วนใหญ่ที่ปรากฏบนฟิล์ม มีความเข้มสูง และพยายามหลีกเลี่ยงจุด  
สะท้อนที่อยู่บนแนวเส้นแสงขาว (white radiation streak) จุดที่เลือกมาทำสเกล  
มาตรฐานคือ 620 วิธีทำสเกลกระทำด้วยวิธีถ่ายภาพแบบไวซ์เซ็นเบอร์กเฉพาะจุดสะท้อน  
620 ให้ผลึกหมุนในช่วง 2 องศา ประกอบกับต้องมีการนับจำนวนรอบที่ผลึกหมุนไป  
เมื่อผลึกหมุนได้จำนวนรอบตามที่ต้องการก็เลื่อนฟิล์มไปเล็กน้อยประมาณ 2 มิลลิเมตร  
แล้วถ่ายภาพแบบไวซ์เซ็นเบอร์กแบบเดิมอีก แต่ใช้จำนวนรอบต่าง ๆ กันโดยการเพิ่มที่  
ละ 20 เปอร์เซ็นต์ จากค่าน้อยที่สุดจนถึงมากที่สุด โดยวิธีการนี้จะได้ความเข้มของ  
จุดสะท้อนเป็นเลขซึ่งแสดงจำนวนรอบในการถ่ายภาพเป็นสเกลความเข้มมาตรฐานดังนี้

1	2	3	4	5	6	7	8	10	12	14	17	20	24	
30	35	42	50	60	72	86	103	124	150	180	216	260	312	374

นำสเกลความเข้มมาตรฐานที่ทำไว้ไปเปรียบเทียบกับความเข้มของจุดสะท้อนที่ได้ทำการ  
ถ่ายภาพไว้ทั้งสามชุด ถ้าจุดสะท้อนมีความเข้มใกล้เคียงกับความเข้มบนสเกลมาตรฐาน

ถือว่าจุดสะท้อนนั้นมีความเข้มเท่ากับความเข้มของจุดบนสเกล เมื่อวัดความเข้มของจุดสะท้อนบนฟิล์มแต่ละแผ่นแล้วจะต้องปรับความเข้มของจุดสะท้อนต่าง ๆ ไปสู่ความเข้มของฟิล์มแผ่นแรก แล้วจึงหาค่าเฉลี่ยของความเข้มของจุดสะท้อนทุกจุด จุดสะท้อนที่ปรากฏบนฟิล์มในช่วงค่า  $\xi$  สูง ๆ จุดจะเริ่มแยกออกจากกันเพราะรังสีเอ็กซ์ที่ใช้คือ  $\text{MoK}_{\alpha}$  มีความยาวคลื่น 2 ค่าใกล้กัน คือ  $\text{MoK}_{\alpha_1}$  และ  $\text{MoK}_{\alpha_2}$  ค่าความเข้มที่ต้องการวัดเป็นความเข้มเนื่องจากรังสีเอ็กซ์  $\text{K}_{\alpha}$  เฉลี่ย ดังนั้นการแก้ความผิดพลาดของความเข้มเนื่องจากการแยกของ  $\text{K}_{\alpha_1}$  และ  $\text{K}_{\alpha_2}$  จึงกระทำได้โดยการวัดค่า  $\xi$  ของจุดสะท้อนที่จุดเริ่มแยกจากกัน และวัดค่า  $\xi$  ของจุดสะท้อนที่แยกจากกันเป็น 2 จุดพอดี แล้วนำค่า  $\xi$  ทั้งสองค่าไปเขียนกราฟโดยให้จุดสะท้อนที่เริ่มแยกจากกันมีค่าสเกลเป็น 1 และตำแหน่งที่จุดสะท้อนแยกเป็น 2 จุดพอดีมีค่าสเกลเป็น 1.5 เขียนกราฟระหว่าง  $\xi$  กับ สเกลตัวคูณ โดยอาศัยจุดทั้งสองจะได้กราฟเป็นเส้นตรงดังรูป 5.34



รูป 5.34 กราฟของสเกลตัวคูณกับ  $\xi$  ที่ใช้ในการแก้ความผิดพลาดของความเข้มเนื่องจากการแยกเป็น 2 จุด ของ  $\text{MoK}_{\alpha_1}$  กับ  $\text{MoK}_{\alpha_2}$

แล้วจึงวัดค่า  $\xi$  อื่น ๆ ของจุดสะท้อนบนฟิล์ม จากนั้นอ่านสเกลจากกราฟนำสเกลที่อ่านได้ไปคูณกับความเข้มที่วัดได้ในตอนแรกทำให้ได้ค่าความเข้มถูกต้องยิ่งขึ้น และจุดสะท้อนที่แยกจากกันเป็น 2 จุดทั้งหมดให้วัดความเข้มของจุด  $K_{\alpha_1}$  แล้วใช้สเกล 1.5 คูณกับความเข้มที่วัดได้ทำให้ได้ความเข้มถูกต้องขึ้น

#### 5.4.9 การคำนวณโครงสร้างผลึก

การคำนวณโครงสร้างผลึกมีขั้นตอนการคำนวณดังนี้

ขั้นแรก คำนวณขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้าง

เมื่อรวบรวมข้อมูลความเข้มได้เรียบร้อยแล้ว ก็นำค่าความเข้มที่ได้มาคำนวณขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้าง โดยใช้ความสัมพันธ์

$$|F_o|_{hkl} = \sqrt{\frac{I_{hkl}}{LPA}} \quad 5.31$$

เมื่อ  $|F_o|_{hkl}$  คือ ขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้างที่ได้โดยการสังเกตของระนาบ  $hkl$  ใด ๆ

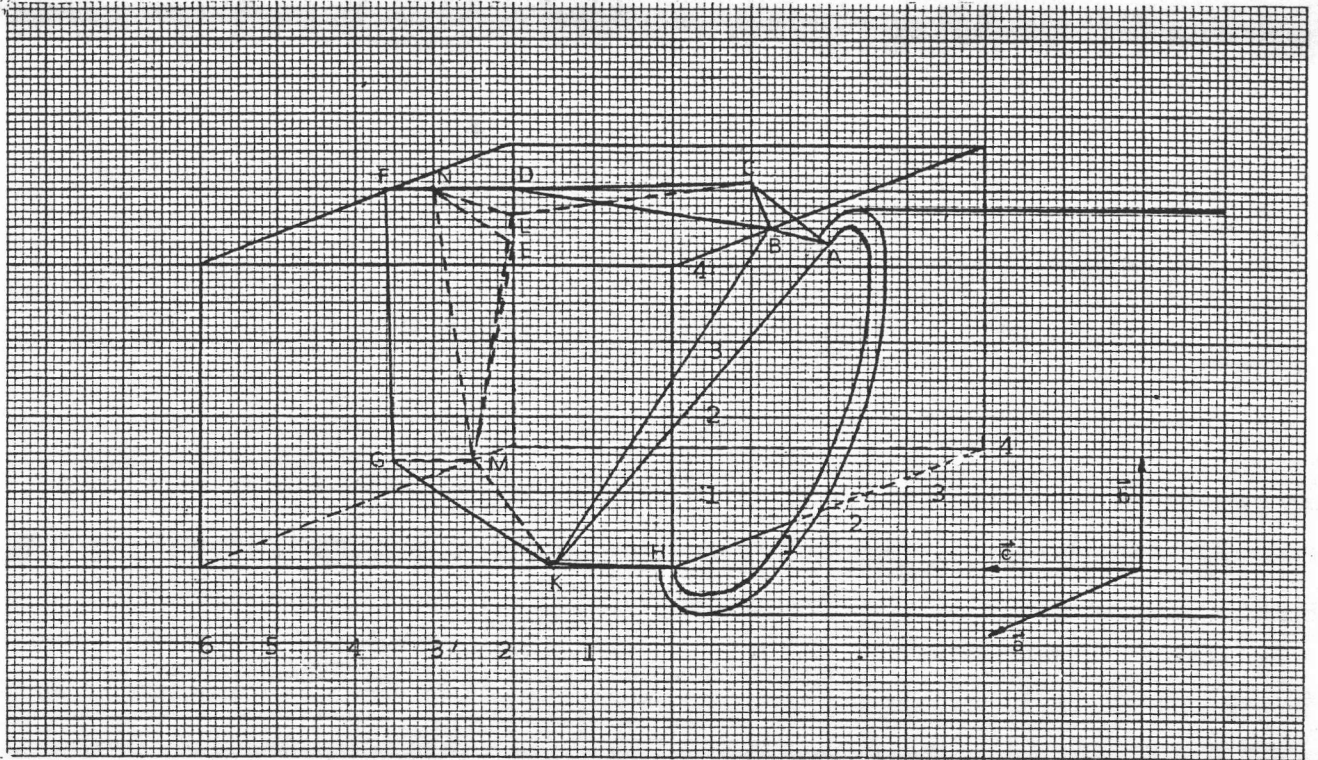
$I_{hkl}$  คือ ความเข้มของจุดสะท้อน  $hkl$  ใด ๆ

$L$  คือ แฟคเตอร์ลอเรนซ์ (Lorentz factor) ซึ่งมีค่าเท่ากับ  $\sin^2\theta / \{\sin 2\theta \sqrt{\sin^2\theta - \sin^2\mu_n}\}$

$P$  คือ แฟคเตอร์โพลาไรเซชัน (polarization factor) ซึ่งมีค่าเท่ากับ  $(1 + \cos^2 2\theta) / 2$

$A$  คือ แฟคเตอร์การดูดกลืน (absorption factor)

การคำนวณค่า  $|F_o|_{hkl}$  อาศัยโปรแกรม CSPHABSW โดยมีความเข้มของจุดสะท้อน (I) ค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงเส้น ( $\mu$ ) และแฟคเตอร์การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์เป็นข้อมูล ส่วนค่า  $L$  กับ  $P$  โปรแกรมสามารถคำนวณได้เอง



ตำแหน่งของจุดต่าง ๆ บนตัวผลึกมีดังนี้

H = จุดกำเนิด (origin)

A =  $-2.0 \hat{i} + 3.5 \hat{j}$

B =  $-1.2 \hat{i} + 4.0 \hat{j}$

C =  $-4.0 \hat{i} + 3.5 \hat{j} + 3.0 \hat{k}$

D =  $-2.5 \hat{i} + 4.0 \hat{j} + 4.5 \hat{k}$

E =  $-4.0 \hat{i} + 2.7 \hat{j} + 6.0 \hat{k}$

F =  $-2.5 \hat{i} + 4.0 \hat{j} + 6.1 \hat{k}$

G =  $-1.0 \hat{i} + 1.0 \hat{j} + 4.5 \hat{k}$

K =  $1.5 \hat{k}$

L =  $-3.5 \hat{i} + 3.3 \hat{j} + 5.5 \hat{k}$

M =  $-1.0 \hat{i} + 1.0 \hat{j} + 3.5 \hat{k}$

N =  $-2.5 \hat{i} + 4.0 \hat{j} + 5.5 \hat{k}$

เมื่อ  $\hat{i}$ ,  $\hat{j}$ ,  $\hat{k}$  เป็นเวกเตอร์ที่มีขนาด 1 หน่วย ตามแกน  $\hat{a}$ ,  $\hat{b}$ ,  $\hat{c}$  ตามลำดับ

รูป 5.35 แบบจำลองของผลึกที่มีรูปร่างและตำแหน่งโคออร์ดิเนตของจุดต่าง ๆ บนผลึก โดยใช้มาตราส่วนตามแกน  $\hat{a}$  1.05 เซนติเมตร ต่อ  $\frac{1}{100}$  มิลลิเมตร และตามแกน  $\hat{b}$  กับ  $\hat{c}$  1 เซนติเมตร ต่อ  $\frac{1}{100}$  มิลลิเมตร

การคำนวณค่าแก้การดูดกลืนของรังสีเอ็กซ์ของผลึก ตามโปรแกรม CSPHABSW แบ่งออกได้เป็น 3 แบบคือ การคำนวณที่ลุ่มมิติให้ผลึกมีรูปทรงแบบทรงกลม ทรงกระบอก และรูปทรงแบบทั่วไป เนื่องจากผลึก  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{Te}_{1.6}\text{Se}_{0.4}$  ที่ใช้ในการวิจัยมีรูปทรงแบบทั่วไป ดังนั้นในแก้การดูดกลืนของรังสีเอ็กซ์ของผลึกเดี่ยวต้องใช้วิธีจำลองรูปร่างผลึกเดี่ยวที่เลือกมาใช้ในงานวิจัยนี้ โดยใช้กล่องจุลทรรศน์วัดระยะต่าง ๆ ของด้านที่ล้อมรอบผลึก และจำลองแบบผลึกที่ใกล้เคียงผลึกจริง ๆ ดังรูป 5.35

ในการหาดัชนีระนาบที่ปิดล้อมผลึกต้องคำนวณให้ได้โดยการคำนวณจากรูปแบบผลึกจำลอง ซึ่งถือว่าเป็นค่าดัชนีระนาบที่ปิดล้อมผลึกจริง ในการหาดัชนีของระนาบก่อนอื่นต้องกำหนดแกนของหน่วยเซลล์ลงในผลึกจำลอง โดยการส่องดูผ่านกล้องจุลทรรศน์จะได้ว่าแกนหมุน  $c$  อยู่ในลักษณะดังรูปที่ 5.35 การกำหนดแกน  $a$  และ  $b$  หาได้จากภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์กลายเออร์ที่ 0 โดยพิจารณาจากมุมที่แต่ละแกนของโครงผลึกคริสตัลเพอเคลิลหมุนเข้าไปตัดทรงกลมการสะท้อน และระบบผลึกที่กำลังวิจัยอยู่เป็นระบบเตตระโกนัล ดังนั้นแกน  $a^*$  และ  $b^*$  ในโครงผลึกคริสตัลเพอเคลิล สัมพันธ์กับแกน  $a$  และ  $b$  ในผลึกจริง ๆ ตามลำดับ หลังจากกำหนดแกนผลึก  $a$ ,  $b$  และ  $c$  ได้แล้วต่อไปพิจารณาระนาบต่าง ๆ ที่ปิดล้อมผลึกทั้งหมด 11 ระนาบ จากรูป 5.35 จะได้ผลลัพธ์ดังแสดงในตารางที่ 5.19 เมื่อได้ข้อมูลต่าง ๆ สำหรับใช้คำนวณแฟคเตอร์การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์แล้ว นำไปคำนวณแก้ข้อมูลความเข้ม ผลการคำนวณได้ค่าขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้างสังเกต  $|F_o|_{hkl}$  ซึ่งจะใช้เป็นข้อมูลหลักสำหรับหาโครงสร้างผลึกต่อไป สำหรับการคำนวณแก้ข้อมูลความเข้มโดยใช้โปรแกรม CSPHABSW นั้น ในการคำนวณได้ทดสอบหาขนาดของกริด (grid size) ที่เหมาะสมเพื่อให้การคำนวณขนาดของผลึกในโปรแกรมได้ใกล้เคียงกับขนาดของผลึกจำลองที่สุด

ในการทดสอบขนาดของกริดได้ทำการวัดความเข้มทุกจุดบนภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์กลายเออร์ นำไปคำนวณโดยโปรแกรม CSPHABSW ใช้ขนาดของกริดต่าง ๆ กัน และได้พิจารณาค่า  $R$  โดย 
$$R = \frac{\sum_i |F_i^2 - F_{av}^2|}{\sum_i F_i^2}$$
 จากการทดลองพบว่าขนาดของกริดที่เหมาะสม คือ  $4 \times 6 \times 20$  โดยให้ค่า  $R$  ต่ำที่สุดและให้ขนาดของผลึกใกล้เคียงกับขนาดของผลึกจำลอง



ตารางที่ 5.19) ค่าดัชนีผลเลอรัของระนาบที่ปิดล้อมผลึก และระยะทางจากจุด  
กำเนิดถึงระนาบ

ชื่อระนาบ	h	k	l	ระยะจากจุดกำเนิดถึงระนาบ (มิลลิเมตร)	หมายเหตุ
GKMH	1	1	0	0.0000	ผ่านจุดกำเนิด
ABK	$\bar{2}$	3	20	0.0140	
ABC	54	$\bar{81}$	70	0.0377	
BCD	13	50	7	0.0418	
CKML	7	$\bar{13}$	5	0.0541	
ELM	9	1	20	0.0202	
ELN	$\bar{28}$	38	30	0.0949	
EMN	2	1	6	0.0259	
FGMN	2	1	0	0.0045	
BGKF	5	2	2	0.0280	

#### 5.4.10 การคำนวณหาตำแหน่งอะตอมโดยใช้ฟังก์ชันแพทเทอร์สัน

(Patterson function)

เป็นที่ยอมรับกันแล้วว่า ตรงตำแหน่งที่เป็นจุดศูนย์กลางของอะตอม  
จะมีค่าความหนาแน่นอิเล็กตรอนสูง ดังนั้นการคำนวณโครงสร้างผลึกจะหมายถึง การ  
คำนวณความหนาแน่นอิเล็กตรอนที่ตำแหน่งต่าง ๆ ภายในหนึ่งหน่วยเซลล์ของผลึกนั่นเอง  
โดยค่าความหนาแน่นอิเล็กตรอนนั้นสามารถคำนวณได้จากความสัมพันธ์

$$\rho(x, y, z) = \frac{1}{V} \sum_h \sum_k \sum_l |F_o|_{hkl} e^{i\alpha_{hkl}} e^{-2\pi i(hx+ky+lz)} \quad 5.32$$

เมื่อ	$\rho(x, y, z)$	คือ	ความหนาแน่นอิเล็กตรอนที่ตำแหน่ง $(x, y, z)$
	$V$	คือ	ปริมาตรหนึ่งหน่วยเซลล์ของผลึก
	$\alpha_{hkl}$	คือ	เฟสของแฟคเตอร์โครงสร้างสังเกต
	$x, y, z$	คือ	โคออร์ดิเนตเศษส่วน (fractional coordinate) มีค่าเท่ากับ $\frac{X}{a}, \frac{Y}{b}, \frac{Z}{c}$ ตามลำดับ เมื่อ $a, b$ และ $c$ เป็น พารามิเตอร์ของหน่วยเซลล์ตามแกน $a, b, c$ และ $X, Y, Z$ เป็นโคออร์ดิเนตสัมบูรณ์ (absolute coordinate)

สมการ 5.32 จะเห็นได้ว่าต้องทราบขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้าง และเฟสของแฟคเตอร์โครงสร้างด้วย แต่จากหัวข้อ 5.4.9 จะทราบขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้างจากการทดลองในทิศทางที่เลี้ยวเบนต่าง ๆ เท่านั้น ซึ่งไม่เป็นการเพียงพอที่จะนำมาคำนวณโครงสร้างผลึกหรือคำนวณความหนาแน่นของอิเล็กตรอนตามสมการ 5.32 เพราะเฟสของแฟคเตอร์โครงสร้างจากการทดลอง  $\alpha_{hkl}$  นั้นไม่อาจทราบได้จากการทดลอง

เอ. แอล. แพทเทอร์สัน (A. L. Patterson) ได้เสนอวิธีแก้ปัญหานี้ โดยการคิดคำนวณผลคูณของความหนาแน่นอิเล็กตรอน ณ สองตำแหน่ง ซึ่งยังผลให้เกิดเป็นฟังก์ชันใหม่ที่มีความหมายใหม่และไม่มีเทอม  $\alpha_{hkl}$  รวมอยู่ด้วย ฟังก์ชันนี้เรียกว่า ฟังก์ชันแพทเทอร์สัน ใช้สัญลักษณ์  $P(u, v, w)$

$$P(u, v, w) = \frac{1}{V} \sum_h \sum_k \sum_l |F_o|_{hkl}^2 e^{2\pi i(hu+kv+lw)} \quad \dots 5.33$$

เมื่อ  $u, v, w$  คือ โคออร์ดิเนตในสี่เหลี่ยมของแพทเทอร์สัน (Patterson space) มีค่าเท่ากับ  $x_1 - x_2, y_1 - y_2, z_1 - z_2$  ตามลำดับโดยที่  $(x_1, y_1, z_1)$  และ  $(x_2, y_2, z_2)$  เป็นตำแหน่ง 2 ตำแหน่งที่กำลังพิจารณาผลคูณความหนาแน่นอิเล็กตรอน

ตาราง 5.20 ฮาร์โมนิกเวกเตอร์ที่ตำแหน่งพิเศษ 4a, 4b และ 8d ของหน่วยสมมาตรลำดับ  $I \bar{4}2d$

	$0, 0, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{4}$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}$	$x, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$	$\bar{x}, \frac{3}{4}, \frac{1}{8}$	$\frac{3}{4}, x, \frac{7}{8}$	$\frac{1}{4}, x, \frac{7}{8}$	$x+\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \frac{5}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{5}{8}$	$\frac{1}{4}, x+\frac{1}{2}, \frac{3}{8}$	$\frac{3}{4}, x+\frac{1}{2}, \frac{3}{8}$
$0, 0, 0$	$0, 0, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{4}$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}$	$x, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$	$\bar{x}, \frac{3}{4}, \frac{1}{8}$	$\frac{3}{4}, x, \frac{7}{8}$	$\frac{1}{4}, x, \frac{7}{8}$	$x+\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \frac{5}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{5}{8}$	$\frac{1}{4}, x+\frac{1}{2}, \frac{3}{8}$	$\frac{3}{4}, x+\frac{1}{2}, \frac{3}{8}$
$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$	$0, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{4}$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{4}$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0$	$x, -\frac{1}{4}, -\frac{1}{8}$	$\bar{x}, \frac{1}{4}, -\frac{1}{8}$	$\frac{3}{4}, x, \frac{5}{8}$	$\frac{1}{4}, x, \frac{5}{8}$	$x+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, -\frac{1}{4}, \frac{3}{8}$	$\frac{1}{4}, x, \frac{1}{8}$	$\frac{3}{4}, x, \frac{1}{8}$
$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{4}$	$0, 0, 0$	$0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}$	$0, 0, -\frac{1}{2}$	$0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{4}$	$x, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, -\frac{3}{8}$	$\bar{x}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, -\frac{3}{8}$	$\frac{1}{4}, x, \frac{3}{8}$	$-\frac{1}{4}, x, \frac{3}{8}$	$x, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$	$\bar{x}, -\frac{1}{4}, \frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}, x, -\frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}, x, -\frac{1}{8}$
$\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{4}$	$-\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{4}$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$	$0, 0, -\frac{1}{2}$	$x, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, -\frac{5}{8}$	$\bar{x}, -\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, -\frac{5}{8}$	$\frac{1}{4}, x, \frac{1}{8}$	$-\frac{1}{4}, x, \frac{1}{8}$	$x, \frac{3}{4}, -\frac{1}{8}$	$\bar{x}, \frac{1}{4}, -\frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}, x+\frac{1}{2}, -\frac{3}{8}$	$\frac{1}{4}, x+\frac{1}{2}, -\frac{3}{8}$
$0, 0, \frac{1}{2}$	$0, 0, -\frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}$	$0, 0, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{4}$	$x, \frac{1}{4}, -\frac{3}{8}$	$\bar{x}, \frac{3}{4}, -\frac{3}{8}$	$\frac{3}{4}, x, \frac{3}{8}$	$\frac{1}{4}, x, \frac{3}{8}$	$x+\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \frac{1}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}, x+\frac{1}{2}, \frac{1}{8}$	$\frac{3}{4}, x+\frac{1}{2}, \frac{1}{8}$
$0, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$	$0, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{4}$	$0, 0, -\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0$	$0, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{4}$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, 0, -\frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$x, \frac{1}{4}, -\frac{5}{8}$	$\bar{x}, \frac{1}{4}, -\frac{5}{8}$	$\frac{3}{4}, x, \frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}, x, \frac{1}{8}$	$x+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, -\frac{1}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, -\frac{1}{4}, -\frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}, x, \frac{3}{8}$	$\frac{3}{4}, x, \frac{3}{8}$
$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$	$-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$0, -\frac{1}{2}, \frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{4}$	$0, 0, 0$	$0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{4}$	$x, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$	$\bar{x}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}, x, \frac{7}{8}$	$-\frac{1}{4}, x, \frac{7}{8}$	$x, \frac{1}{4}, \frac{5}{8}$	$\bar{x}, -\frac{1}{4}, \frac{5}{8}$	$-\frac{1}{4}, x, \frac{3}{8}$	$\frac{1}{4}, x, \frac{3}{8}$
$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{4}$	$0, 0, 0$	$x, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, -\frac{1}{8}$	$\bar{x}, -\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, -\frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}, x, \frac{5}{8}$	$-\frac{1}{4}, x, \frac{5}{8}$	$x, \frac{3}{4}, \frac{3}{8}$	$\bar{x}, \frac{1}{4}, \frac{3}{8}$	$-\frac{1}{4}, x+\frac{1}{2}, \frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}, x+\frac{1}{2}, \frac{1}{8}$
$x, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$	$\bar{x}, -\frac{1}{4}, -\frac{1}{8}$	$x, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{5}{8}$	$\bar{x}, -\frac{1}{4}, \frac{3}{8}$	$\bar{x}, \frac{1}{4}, \frac{5}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, -\frac{1}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$	$0, 0, 0$	$2x, \frac{1}{2}, 0$	$\bar{x}+\frac{3}{4}, x, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$	$\bar{x}+\frac{1}{4}, x, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2\bar{x}+\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$\bar{x}+\frac{1}{4}, x+\frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\bar{x}+\frac{3}{4}, x+\frac{1}{4}, \frac{1}{4}$
$\bar{x}, \frac{3}{4}, \frac{1}{8}$	$x, -\frac{3}{4}, -\frac{1}{8}$	$x, -\frac{1}{4}, \frac{1}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \frac{5}{8}$	$x, -\frac{3}{4}, \frac{3}{8}$	$x, -\frac{1}{4}, \frac{5}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, -\frac{1}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \frac{1}{8}$	$2x, \frac{1}{2}, 0$	$0, 0, 0$	$\bar{x}+\frac{3}{4}, x, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$	$\bar{x}+\frac{1}{4}, x, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$	$2x+\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{x}+\frac{1}{4}, x, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\bar{x}+\frac{3}{4}, x, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$
$\frac{3}{4}, x, \frac{7}{8}$	$\frac{3}{4}, \bar{x}, -\frac{7}{8}$	$-\frac{3}{4}, x+\frac{1}{2}, -\frac{5}{8}$	$-\frac{1}{4}, x+\frac{1}{2}, \frac{3}{8}$	$-\frac{1}{4}, \bar{x}, -\frac{1}{8}$	$-\frac{3}{4}, \bar{x}, -\frac{3}{8}$	$-\frac{3}{4}, x+\frac{1}{2}, -\frac{1}{8}$	$-\frac{1}{4}, x+\frac{1}{2}, -\frac{7}{8}$	$-\frac{1}{4}, \bar{x}, -\frac{5}{8}$	$x, \frac{3}{4}, -\frac{1}{4}, \frac{3}{4}$	$\bar{x}, \frac{3}{4}, -\frac{3}{4}, \frac{3}{4}$	$0, 0, 0$	$-\frac{1}{2}, 0, 0$	$x, \frac{1}{4}, -\frac{3}{4}, -\frac{1}{4}$	$\bar{x}, -\frac{1}{4}, x+\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$0, 2x+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
$\frac{1}{4}, x, \frac{7}{8}$	$\frac{1}{4}, \bar{x}, -\frac{7}{8}$	$-\frac{1}{4}, x+\frac{1}{2}, -\frac{5}{8}$	$\frac{1}{4}, x+\frac{1}{2}, -\frac{3}{8}$	$\frac{1}{4}, \bar{x}, -\frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}, \bar{x}, -\frac{3}{8}$	$-\frac{1}{4}, x+\frac{1}{2}, -\frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}, x+\frac{1}{2}, -\frac{7}{8}$	$\frac{1}{4}, \bar{x}, -\frac{5}{8}$	$x, \frac{1}{4}, -\frac{1}{4}, \frac{3}{4}$	$\bar{x}, \frac{1}{4}, -\frac{3}{4}, \frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$0, 0, 0$	$x+\frac{1}{4}, x+\frac{3}{4}, -\frac{1}{4}$	$\bar{x}+\frac{1}{4}, x+\frac{1}{4}, -\frac{1}{4}$	$0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 2x+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$
$x+\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \frac{5}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, -\frac{5}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, -\frac{3}{8}$	$\bar{x}, -\frac{1}{4}, -\frac{1}{8}$	$\bar{x}, -\frac{3}{4}, \frac{1}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, -\frac{1}{8}$	$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$	$\bar{x}, -\frac{1}{4}, -\frac{5}{8}$	$\bar{x}, -\frac{3}{4}, -\frac{3}{8}$	$-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$2x, \frac{1}{2}, 0$	$\bar{x}+\frac{1}{4}, x, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\bar{x}+\frac{1}{4}, x, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}$	$0, 0, 0$	$2\bar{x}, -\frac{1}{2}, 0$	$\bar{x}+\frac{1}{4}, x, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\bar{x}+\frac{1}{4}, x, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$
$\bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{5}{8}$	$x+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, -\frac{5}{8}$	$x+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, -\frac{3}{8}$	$x, \frac{1}{4}, -\frac{1}{8}$	$x, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$	$x+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, -\frac{1}{8}$	$x+\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{8}$	$x, \frac{1}{4}, -\frac{5}{8}$	$x, \frac{1}{4}, -\frac{3}{8}$	$2x, \frac{1}{2}, 0$	$-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$x+\frac{1}{4}, x, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$x+\frac{1}{4}, x, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$2x, \frac{1}{2}, 0$	$0, 0, 0$	$x+\frac{1}{4}, x+\frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$x+\frac{1}{4}, x+\frac{1}{4}, \frac{1}{4}$
$\frac{1}{4}, x+\frac{1}{2}, \frac{3}{8}$	$\frac{1}{4}, \bar{x}+\frac{1}{2}, -\frac{3}{8}$	$-\frac{1}{4}, \bar{x}, -\frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}, \bar{x}, \frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}, \bar{x}, -\frac{1}{2}, \frac{3}{8}$	$-\frac{1}{4}, \bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{1}{8}$	$-\frac{1}{4}, \bar{x}, \frac{3}{8}$	$\frac{1}{4}, \bar{x}, -\frac{3}{8}$	$\frac{1}{4}, \bar{x}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{8}$	$x, \frac{1}{4}, -\frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\bar{x}, \frac{1}{4}, -\frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$x+\frac{1}{4}, x+\frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\bar{x}+\frac{1}{4}, x+\frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, 2x, 0$
$\frac{3}{4}, x+\frac{1}{2}, \frac{3}{8}$	$\frac{3}{4}, \bar{x}+\frac{1}{2}, -\frac{3}{8}$	$-\frac{3}{4}, \bar{x}, -\frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}, \bar{x}, \frac{1}{8}$	$-\frac{1}{4}, \bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{3}{8}$	$-\frac{3}{4}, \bar{x}+\frac{1}{2}, \frac{1}{8}$	$-\frac{3}{4}, \bar{x}, \frac{3}{8}$	$-\frac{1}{4}, \bar{x}, -\frac{3}{8}$	$-\frac{1}{4}, \bar{x}+\frac{1}{2}, -\frac{1}{8}$	$x+\frac{3}{4}, x, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\bar{x}+\frac{3}{4}, x, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$0, 2x, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}, 2x, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$x+\frac{1}{4}, x+\frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\bar{x}+\frac{1}{4}, x+\frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$-\frac{1}{2}, 2x, 0$	$0, 0, 0$

เมื่อฟังก์ชันแพทเทอร์สันมีความเป็นมาดั่งข้างต้น มันจึงมีความหมายทางฟิสิกส์แตกต่างไปจากฟังก์ชันความหนาแน่นอิเล็กตรอน  $\rho(x, y, z)$  กล่าวคือ  $\rho(x, y, z)$  ทำหน้าที่แจกแจง (distribution) ค่าความหนาแน่นอิเล็กตรอนในลattice ของผลึก (crystal space). ซึ่งตรงตำแหน่งจุดศูนย์กลางของอะตอมจะมีค่า  $\rho(x, y, z)$  สูงมาก แต่  $P(u, v, w)$  จะทำหน้าที่แจกแจงความหนาแน่นเวกเตอร์ (vector density) ระหว่างอะตอมในลattice ของแพทเทอร์สันจะมีค่าสูงมากเมื่อ  $u, v, w$  เป็นส่วนประกอบของเวกเตอร์ระหว่างอะตอม ดังนั้นการคำนวณฟังก์ชันแพทเทอร์สันจึงเป็นหนทางหนึ่งที่สามารถค้นหาตำแหน่งอะตอมในผลึกได้โดยเฉพาะอะตอมที่มีเลขอะตอม (atomic number) สูง ๆ โดยที่ไม่ต้องคำนึงถึงเฟสของแฟคเตอร์โครงสร้างเลย แต่การคำนวณฟังก์ชันแพทเทอร์สันใน 3 มิติ ตามสมการ 5.33 นั้นยุ่งยากเกินไป การคำนวณใน 2 มิติจะสะดวกกว่าและยังให้ผลเหมือนการคำนวณใน 3 มิติ ในการคำนวณใน 2 มิตินั้นเราใช้ภาคตัดฮาร์คเกอร์ (Harker section) มาพิจารณาผลึกของ  $\text{AgIn}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}(\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{0.2})_2$  โดยดูจากโคออร์ดิเนตในหมู่สมมาตรสามมิติ  $I\bar{4}2d$  เนื่องจากมีโครงสร้างแบบเดียวกับ  $\text{CuFeS}_2$  (คือพวกซัลโคไพไรท์) การทดลองพบว่าจำนวนหน่วยสูตรในหนึ่งหน่วยเซลล์เป็น 4 หน่วยสูตร นั่นคือจะมีอะตอม Ag อยู่ 4 อะตอม, อะตอม  $(\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2})$  อยู่ 4 อะตอม และอะตอม  $(\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{0.2})$  อยู่ 8 อะตอม รวมเป็น 16 อะตอมในหนึ่งหน่วยเซลล์ พบว่าค่าโคออร์ดิเนตของตำแหน่งอะตอมควรอยู่ที่ตำแหน่งพิเศษ 4a สำหรับอะตอม Ag ซึ่งมี 4 ตำแหน่งคือ  $0\ 0\ 0, 0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}, \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\ 0\ \frac{3}{4}$  สำหรับอะตอม  $\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}$  อยู่ที่ตำแหน่งพิเศษ 4b ซึ่งมี 4 ตำแหน่งคือ  $0\ 0\ \frac{1}{2}, 0\ \frac{1}{2}\ \frac{3}{4}, \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0, \frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{4}$  และสำหรับอะตอม  $\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{0.2}$  อยู่ที่ตำแหน่งพิเศษ 8d คือ  $x\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{8}, \bar{x}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{8}, \frac{3}{4}\ x\ \frac{7}{8}, \frac{1}{4}\ \bar{x}\ \frac{7}{8}, x + \frac{1}{2}\ \frac{3}{4}\ \frac{5}{8}, \bar{x} + \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ \frac{5}{8}, \frac{1}{4}\ x + \frac{1}{2}\ \frac{3}{8}, \frac{3}{4}\ \bar{x} + \frac{1}{2}\ \frac{3}{8}$

โดยใช้ค่าโคออร์ดิเนต 16 ค่านี้ พิจารณาเวกเตอร์ฮาร์คเกอร์ (Harker vector) ซึ่งแสดงไว้ในตารางที่ 5.20 จากการคำนวณแผนภาพแพทเทอร์สัน  $P(u, 0, w), P(u, \frac{1}{4}, w)$  และ  $P(u, \frac{1}{2}, w)$  โดยกำหนดให้  $u$  และ  $w$  มีค่าตั้งแต่ 0 ถึง 0.5 การคำนวณใช้โปรแกรม CSPHOUR ซึ่งข้อมูลที่ใช้ในการคำนวณคือผลลัพธ์

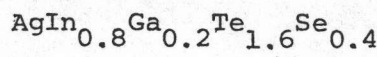


.. NUMBER 2 PATTERSON METHOD ..  
 TYPE OF SYNTHESIS = PATT  
 FOFDLF  
 RMAX = 1667.57  
 .. Y = 0.511 ..  
 .. C = 0.5983720 ..  
 .. X = 0.000 ..  
 .. Z = 0.000 ..  
 .. W = 0.000 ..  
 .. U = 0.000 ..  
 .. V = 0.000 ..  
 .. T = 0.000 ..  
 .. S = 0.000 ..  
 .. R = 0.000 ..  
 .. Q = 0.000 ..  
 .. P = 0.000 ..  
 .. O = 0.000 ..  
 .. N = 0.000 ..  
 .. M = 0.000 ..  
 .. L = 0.000 ..  
 .. K = 0.000 ..  
 .. J = 0.000 ..  
 .. I = 0.000 ..  
 .. H = 0.000 ..  
 .. G = 0.000 ..  
 .. F = 0.000 ..  
 .. E = 0.000 ..  
 .. D = 0.000 ..  
 .. C = 0.000 ..  
 .. B = 0.000 ..  
 .. A = 0.000 ..

Z= 0.0	-177-152	-73	-37	-11	-12	-23	-27	-23	-19	-17	-27	-45	-72	-131	-127	-147	-145	-161	-129	-67	31	77	57	17	99	
Z= 0.0250	-189-162	-98	-41	-12	-2	-13	-12	-7	-4	-6	-13	-23	-53	-75	-95	-112	-124	-125	-102	-57	24	17	57	57	102	
Z= 0.0500	-178-152	-93	-39	-10	1	8	15	17	14	7	1	-4	-12	-25	-36	-44	-47	-47	-42	-25	12	37	171	79	177	
Z= 0.0750	-89	-75	-43	-13	7	20	26	35	14	-1	-12	-15	-7	-6	-11	-16	-11	1	10	13	14	15	17	3	-17	-11
Z= 0.1000	10	11	13	21	33	41	37	18	-11	-37	-54	-57	-41	-36	-41	-44	-31	-4	23	47	43	34	7	-77	-67	-74
Z= 0.1250	5	6	14	28	45	52	43	16	-22	-55	-71	-67	-57	-57	-57	-71	-55	-22	16	43	52	45	24	14	4	5
Z= 0.1500	-74	-60	-27	9	34	43	40	23	-4	-32	-44	-41	-36	-41	-32	-54	-47	-12	18	37	41	32	21	13	11	10
Z= 0.1750	-15	-9	4	14	14	14	13	10	1	-12	-16	-11	-6	-2	-11	-13	-1	14	25	26	27	7	-17	-47	-75	-85
Z= 0.2000	323	280	192	81	12	-25	-42	-47	-47	-44	-37	-25	-12	-4	1	7	13	17	14	8	1	-10	-77	-77	-157	-171
Z= 0.2250	777	671	423	180	24	-57	-102	-125	-126	-113	-95	-74	-50	-29	-14	-7	-4	-7	-12	-13	-7	-12	-41	-97	-167	-197
Z= 0.2500	993	835	534	227	32	-67	-128	-161	-165	-147	-127	-107	-72	-45	-27	-17	-13	-23	-27	-23	-17	-11	-17	-97	-157	-177
Z= 0.2750	777	671	423	180	24	-57	-102	-125	-125	-112	-95	-74	-50	-27	-14	-7	-4	-7	-13	-14	-9	-12	-41	-97	-167	-190
Z= 0.3000	323	280	192	81	12	-25	-42	-47	-47	-43	-36	-25	-12	-4	1	7	13	17	14	8	1	-10	-77	-77	-157	-175
Z= 0.3250	-15	-9	4	14	14	14	13	11	1	-11	-16	-11	-6	-2	-14	-13	-1	14	25	26	27	7	-17	-44	-75	-87
Z= 0.3500	-74	-60	-27	9	34	43	40	23	-4	-31	-44	-41	-36	-41	-32	-54	-47	-12	18	37	41	32	21	13	11	10
Z= 0.3750	5	6	14	28	45	52	43	16	-22	-55	-71	-67	-57	-57	-57	-71	-55	-22	16	43	52	45	24	14	4	5
Z= 0.4000	10	11	13	21	33	41	37	18	-12	-47	-55	-52	-41	-34	-41	-44	-31	-4	23	40	46	34	7	-75	-63	-74
Z= 0.4250	-89	-75	-43	-13	7	20	26	25	14	-2	-13	-15	-7	-7	-11	-16	-11	1	10	13	14	15	14	4	-7	-15
Z= 0.4500	-178-152	-93	-39	-10	1	8	14	17	13	7	1	-4	-13	-25	-37	-44	-47	-47	-42	-24	12	31	157	281	723	
Z= 0.4750	-189-162	-98	-41	-13	-10	-14	-13	-8	-5	-7	-13	-29	-50	-74	-95	-113	-124	-125	-102	-55	25	177	471	571	797	
Z= 0.5000	-177-152	-73	-37	-11	-12	-23	-27	-23	-19	-19	-27	-45	-72	-131	-127	-147	-145	-161	-129	-67	33	77	57	17	99	

ค.

รูป 5.36 แผนภาพแพทเทอร์สัน P (u,v,w) ของโลหะผสมกึ่งตัวนำ



- ก. เมื่อ u, w มีค่าตั้งแต่ 0 ถึง 0.5 และ v มีค่าเท่ากับ 0
- ข. เมื่อ u, w มีค่าตั้งแต่ 0 ถึง 0.5 และ v มีค่าเท่ากับ 0.25
- ค. เมื่อ u, w มีค่าตั้งแต่ 0 ถึง 0.5 และ v มีค่าเท่ากับ 0.50



NO. NUMBER 2 ELECTRONIC REGISTER MAPS  
TYPE OF REGISTER - PHS  
DATE 1963

NO. NUMBER 2 ELECTRONIC REGISTER MAPS  
TYPE OF REGISTER - PHS  
DATE 1963

24 2.2	1	-1	-17	-26	-25	-20	-1	17	24	11	11	15	13	13	27	19	0	-21	-15	-11	-13	-4	
24 2.250	7	25	-23	-23	-27	-17	5	9	10	10	10	45	47	17	24	11	11	8	-15	-15	-17	-11	0
24 2.3000	16	6	27	-17	10	16	5	-7	-1	-2	-26	-4	5	5	13	23	10	1	-11	-1	1	0	0
24 2.3500	17	12	5	10	11	5	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	0
24 2.4000	11	7	7	-14	-26	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	0
24 2.4500	7	6	-1	-26	-27	-25	0	-15	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	0
24 2.5000	17	10	5	7	-15	-26	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	-10	0
24 2.5500	17	12	5	10	11	5	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	0
24 2.6000	16	6	-7	-17	-17	-17	5	9	10	10	10	45	47	17	24	11	11	8	-15	-15	-17	-11	0
24 2.6500	7	25	-23	-23	-27	-17	5	9	10	10	10	45	47	17	24	11	11	8	-15	-15	-17	-11	0
24 2.7000	1	-1	-17	-26	-25	-20	-1	17	24	11	11	15	13	13	27	19	0	-21	-15	-11	-13	-4	0
24 2.7500	6	-15	-15	-17	2	16	23	16	16	-15	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	-11	0
24 2.8000	10	6	-1	-1	5	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	7	0
24 2.8500	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 2.9000	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 2.9500	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.0000	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.0500	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.1000	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.1500	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.2000	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.2500	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.3000	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.3500	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.4000	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.4500	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.5000	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.5500	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.6000	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.6500	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.7000	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.7500	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.8000	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.8500	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.9000	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 3.9500	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0
24 4.0000	6	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	0

รูป 5.37 ข. แผนภาพความหนาแน่นอิเล็กตรอนสี่เขต  $\rho_0(x, z)$  ภาคตัดขวางที่  $y = 0.25$







ของโปรแกรม CSPHABSW จะได้แผนภาพแพทเทอรัลออกมาดังรูป 5.36 ก., ข. และ ค. ตามลำดับ

จากรูป 5.36 ก., ข. และ ค. พบว่าจะมีฟิคปรากฏขึ้นตามตำแหน่งที่คาดคะเนไว้หมดทุกฟิค ส่วนการที่จะพิจารณาว่าฟิคไหนเป็นฟิคเกิดจากอะตอมอะไรนั้นเป็นการยากต่อการพิจารณา เพราะพวกอะตอมของ  $\text{Ag}$ ,  $(\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2})$  และ  $(\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{0.2})$  ต่างก็มีตัวเลขอะตอม  $Z$  (atomic number,  $Z$ ) มีค่ามากและใกล้เคียงกัน วิธีที่พอจะอนุมานได้ว่าฟิคไหนเกิดจากอะตอมอะไรนั้นก็โดยการเทียบเคียงกับโครงสร้างของ  $\text{CuFeS}_2$  ซึ่งถ้าให้อะตอมของ  $\text{Ag}$  แทนตำแหน่งอะตอมของ  $\text{Cu}$  คือ อยู่ที่ตำแหน่งฟิคเลข 4a, อะตอมของ  $(\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2})$  แทนตำแหน่งอะตอมของ  $\text{Fe}$  คือ อยู่ที่ตำแหน่งฟิคเลข 4b และอะตอมของ  $(\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{0.2})$  แทนตำแหน่งอะตอมของ  $\text{S}$  คือ อยู่ที่ตำแหน่งฟิคเลข 8d แล้วพบว่าจากแผนภาพแพทเทอรัล  $P(u, v, w)$  ที่ตำแหน่งของ  $(0, 0, 0.5)$  มีค่าฟิคสูง ๆ ปรากฏอยู่ ซึ่งสอดคล้องกับเวกเตอร์ฮาร์คเกอร์ของหมู่สี่มุมสามมิติ  $I\bar{4}2d$  ของตำแหน่งฟิคเลข 8d ซึ่งจะปรากฏเป็นฟิคขึ้นที่  $(2\bar{x} + \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$  และจากแผนภาพแพทเทอรัล  $P(u, v, w)$  ที่ตำแหน่งของ  $(0.5, 0.5, 0)$  ก็จะมีค่าฟิคสูง ๆ ปรากฏอยู่เช่นกัน ซึ่งสอดคล้องกับเวกเตอร์ฮาร์คเกอร์ของหมู่สี่มุมสามมิติ  $I\bar{4}2d$  ของตำแหน่งฟิคเลข 8d โดยปรากฏเป็นฟิคขึ้นที่  $(2x, \frac{1}{2}, 0)$  ดังนั้นจึงสรุปว่า  $x = 0.25$  พอถึงตอนนี้ก็จะทราบตำแหน่งอะตอมของ  $\text{Ag}$ ,  $(\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2})$  และ  $(\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{0.2})$  ทุกอะตอมอย่างคร่าว ๆ ซึ่งข้อมูลเหล่านี้จะเอาไปใช้ในโปรแกรม CSPHLSQ ผลลัพธ์ของโปรแกรมนี้อาจจะถูกเก็บไว้ในเทปแม่เหล็ก (magnetic tape) ซึ่งจะ เป็นข้อมูลสำหรับโปรแกรม CSPHFOUR เพื่อคำนวณแผนภาพความหนาแน่นอิเล็กตรอน จะได้แผนภาพความหนาแน่นอิเล็กตรอนดังรูป 5.37 ก., ข., ค และ ง

#### 5.4.11 การปรับโครงสร้าง

ผลจากการคำนวณแผนภาพแพทเทอรัล และแผนภาพความหนาแน่นของอิเล็กตรอนทำให้ทราบตำแหน่งอะตอมของ  $\text{Ag}$ ,  $(\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2})$  และ  $(\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{0.2})$  ในหนึ่งหน่วยเซลล์ของผลึก  $\text{Ag}(\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2})(\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{0.2})_2$  แต่ตำแหน่งอะตอมที่ทราบค่าเหล่านี้ยังเป็นตำแหน่งที่มีความคลาดเคลื่อนอยู่ จึงต้องมีการปรับโครงสร้าง

สร้างของผลึก การปรับโครงสร้างของผลึกที่ทำการวิจัยครั้งนี้แบ่งออกเป็น 2 ตอน ตอนแรกจะปรับเฉพาะตำแหน่งอะตอมโดยใช้วิธีของบูธ (Booth's method) การปรับตำแหน่งอะตอมตอนแรกนี้จะปรับตำแหน่งอะตอมของ  $(\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{0.2})$  โดยจะปรับเฉพาะค่า  $x$  เท่านั้น ซึ่งเดิม  $x = 0.25$  หลังจากปรับแล้วได้  $x = 0.2503$  ซึ่งตำแหน่งอะตอมที่ได้จากการปรับจากวิธีของบูธก็ยังไม่เป็นค่าที่ถูกต้อง เพราะยังมีอิทธิพลอื่น ๆ เช่น อิทธิพลเนื่องจากอุณหภูมิ (temperature factor) และแฟคเตอร์สเกล (scale factor) เป็นต้น ดังนั้นจึงต้องมีการปรับโครงสร้างในตอนที่สอง ซึ่งเป็นการปรับโครงสร้างอย่างละเอียด โดยมีการปรับทั้งตำแหน่งอะตอม แฟคเตอร์อุณหภูมิ และแฟคเตอร์สเกล ด้วยวิธีกำลังสองน้อยที่สุด มีหลักการอยู่ว่า ผลรวมของผลต่างยกกำลังสองของค่าที่สังเกตกับค่าที่คำนวณได้ของฟังก์ชัน ต้องมีค่าน้อยที่สุด ในที่นี้ค่าที่สังเกตได้กับค่าที่คำนวณได้จากฟังก์ชันคือ ค่าของแฟคเตอร์โครงสร้าง เมื่อกำหนด  $D$  เป็นค่าน้อยที่สุดสามารถเขียนความสัมพันธ์ได้ดังนี้

$$D = \sum_{hkl} W_{hkl} (|F_o|_{hkl} - |kF_c|_{hkl})^2$$

$|F_o|_{hkl}$ ,  $|F_c|_{hkl}$  คือ ขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้างสังเกต และจากการคำนวณของทิศทาง การเลี้ยวเบนบน  $hkl$

$W_{hkl}$  คือ ค่าน้ำหนักทางสถิติ (statistic weight)

$k$  คือ แฟคเตอร์สเกล

สำหรับค่าน้ำหนักทางสถิติ  $W_{hkl}$  ใช้ค่าของครุคแชนก์ (Cruickshank)

$$W_{hkl} = 1 / (C_1 + |F_o|_{hkl} + C_2 |F_o|_{hkl}^2)$$

$$C_1 = 2|F_o|_{\min} \quad \text{และ} \quad C_2 = 2/|F_o|_{\max}$$

การปรับโครงสร้างด้วยวิธีกำลังสองน้อยที่สุดเป็นการปรับค่าพารามิเตอร์ต่าง ๆ ของ  $|F_c|_{hkl}$  ให้มีค่าเข้าใกล้กับ  $|F_o|_{hkl}$  มากที่สุด โดยการใส่โปรแกรม CSPHLSQ หลังจากการคำนวณปรับพารามิเตอร์ต่าง ๆ ในแต่ละรอบแล้วยังผลให้ค่าแพคเตอร์โครงสร้างคำนวณเปลี่ยนไปจากเดิมทุกครั้ง การจะดูว่าค่า  $|F_c|_{hkl}$  มีค่าเข้าใกล้  $|F_o|_{hkl}$  มากที่สุดหรือยัง นั้นต้องพิจารณาว่า โครงสร้างผลึกที่หาได้มีความน่าเชื่อถือเพียงไร ดูได้จากค่าดัชนีแห่งความน่าเชื่อถือ (reliability index), R

$$R = \frac{\sum_{hkl} |F_o|_{hkl} - |F_c|_{hkl}}{\sum_{hkl} |F_o|_{hkl}}$$

โดยปกติถ้า R มีค่าในช่วง 0.10 ถึง 0.15 แสดงว่าโครงสร้างผลึกที่หาได้ถือว่ามีความแม่นยำพอใช้ได้ถ้า R มีค่าในช่วง 0.05 ถึง 0.10 ถือว่าโครงสร้างผลึกที่หาได้มีความแม่นยำอยู่ในในเกณฑ์ดี ถ้า R มีค่าในช่วง 0.01 ถึง 0.05 ถือว่าโครงสร้างผลึกที่หาได้มีความแม่นยำดีเยี่ยม

ในการปรับโครงสร้างด้วยวิธีกำลังสองน้อยที่สุด เราใช้ขั้นตอนการปรับโครงสร้างดังนี้

ขั้นแรก ทำการปรับเฉพาะค่าของแพคเตอร์สเกลทั้งหมดของข้อมูลที่ใช้ในการคำนวณ โดยก่อนปรับให้ค่าเป็น 10 ทุกเลยเออร์

ขั้นสอง ปรับค่าแพคเตอร์สเกลและพารามิเตอร์อุณหภูมิแบบไอโซทรอปิครวม (overall isotropic temperature,  $B_{iso}^{ov}$ ) ของอะตอม โดยกำหนดให้ค่า  $B_{iso}^{ov}$  ของทุกอะตอมเท่ากันครั้งแรกเป็น  $1.302 \text{ (\AA)}^2$

ขั้นสาม ปรับค่าแพคเตอร์สเกล พารามิเตอร์อุณหภูมิแบบไอโซทรอปิครวม และพารามิเตอร์ตำแหน่งของ  $(Te_{0.8}Se_{0.2})$

ในการปรับค่าพารามิเตอร์อย่างละเอียดในแต่ละครั้ง จะต้องทำจนค่าพารามิเตอร์ที่ปรับ คอนเวิร์จ (converge) และในกรณีจะปรับพารามิเตอร์เดิมอีกในครั้งต่อไป ก็จะต้องนำค่าของพารามิเตอร์ที่ปรับแล้วมาเป็นค่าตั้งต้นในการปรับครั้งต่อไปเสมอ หลังจากการปรับโครงสร้างโดยละเอียดสิ้นสุดลง ปรากฏว่า

$$x \text{ ของอะตอม } (\text{Te}_{0.8}\text{Se}_{0.2}) = 0.2771 \pm 0.0007$$

$$B_{\text{iso}}^{\text{ov}} = 1.04 \pm 0.05 \quad (\text{\AA})^2$$

$$R = 0.081$$

ตาราง 5.21 ค่าแฟคเตอร์สเกล และดัชนีความถูกต้องของแฟคเตอร์สเกล

	เลย์เออร์				
	hko	hk2	hk4	hk6	hk8
k	4.803	4.197	4.710	5.048	4.920
R	0.068	0.076	0.089	0.100	0.086

ค่าของ  $|F_o|_{hkl}$  และ  $|F_c|_{hkl}$  หลังจากการปรับโครงสร้างผลึก สิ้นสุดลงแล้วได้แสดงในตารางที่ 5.22

ตาราง 5.22 ค่า  $|F_o|$  และ  $|F_c|$  ของจุดสะท้อน hkl หลังจากการคำนวณปรับ

โครงสร้างผลึก  $AgIn_{0.8}Ga_{0.2}Te_{1.6}Se_{0.4}$  ลึกลง

h	k	l	$ F_o $	$ F_c $
0	6	0	33.22	27.45
0	8	0	172.36	170.09
0	10	0	42.15	39.25
0	12	0	87.75	59.36
2	2	0	518.12	530.96
2	8	0	49.22	39.26
4	4	0	276.02	295.85
4	6	0	38.30	37.15
4	8	0	133.47	131.17
4	12	0	48.83	46.43
6	6	0	153.35	146.35
6	8	0	29.86	44.76
6	10	0	57.80	59.55
8	8	0	61.66	64.79
1	3	2	324.71	341.64
1	5	2	222.51	236.00
1	7	2	160.94	149.15
1	9	2	124.97	96.19
1	11	2	74.32	59.50

h	k	l	$ F_o $	$ F_c $
5	7	2	99.09	103.01
5	9	2	63.38	70.50
5	11	2	38.29	45.78
7	7	2	77.54	76.84
7	9	2	49.27	53.32
9	9	2	34.45	38.98
11	7	2	28.39	36.24
0	4	4	22.62	10.89
0	6	4	228.25	257.72
0	8	4	35.02	36.03
0	10	4	117.60	98.11
2	4	4	372.71	355.25
2	6	4	36.30	28.62
2	10	4	44.56	38.26
2	12	4	53.90	53.70
4	4	4	31.17	24.75
4	6	4	187.65	192.78
4	8	4	36.01	40.86
4	10	4	72.79	77.02

ตาราง 5.22 ต่อ

h k l	$ F_o $	$ F_c $
1 13 2	33.68	37.16
3 3 2	283.74	281.65
3 5 2	206.18	197.12
3 7 2	151.92	133.09
3 9 2	87.86	84.75
3 11 2	50.06	55.01
3 13 2	26.51	33.99
5 5 2	151.94	150.25
1 11 6	79.76	55.82
3 3 6	240.82	236.77
3 5 6	169.63	176.44
3 7 6	143.65	117.96
3 9 6	78.56	79.20
3 11 6	42.92	50.15
5 5 6	143.42	132.37
5 7 6	92.20	95.70
5 9 6	53.88	63.98
5 11 6	33.53	42.61
7 7 6	80.16	69.60
7 9 6	42.74	49.61
7 11 6	28.50	33.71
9 9 6	29.08	36.24

h k l	$ F_o $	$ F_c $
6 6 4	35.69	41.42
6 8 4	97.45	92.83
6 12 4	31.12	32.83
8 10 4	38.66	38.00
1 3 6	277.43	287.70
1 5 6	181.02	201.75
1 7 6	144.05	136.27
1 9 6	111.34	86.33
0 6 8	29.01	21.98
0 8 8	140.86	140.25
0 10 8	37.27	33.32
0 12 8	61.84	50.82
2 2 8	354.85	367.21
2 8 8	47.28	33.11
2 10 8	94.36	81.63
4 4 8	230.97	229.79
4 6 8	28.31	30.94
4 8 8	93.19	109.84
4 12 8	36.52	39.81
6 6 8	135.80	121.73
6 8 8	28.33	37.97
6 10 8	44.72	50.92