

บทที่ 2

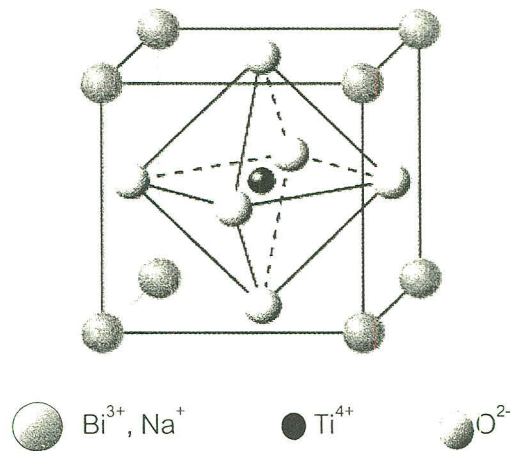
ทฤษฎีและวรรณกรรมปริทัศน์

2.1 เซรามิกบิสมาทโซเดียมไทเทเนต

บิสมาทโซเดียมไทเทเนต ($\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3$ หรือ BNT) จัดว่าเป็นสารเฟอร์โรอิเล็กทริกที่มีสมบัติเพียโซอิเล็กทริกที่ดีที่สุดตัวหนึ่งในหมู่สารประกอบที่ไม่มีตะกั่ว มีโครงสร้างเป็นแบบเพอโรฟสไกต์ (perovskite) และมีอุณหภูมิคูรี 320°C [18] มีสูตรโครงสร้างทั่วไปเป็นแบบ ABO_3 ค่า Remanent Polarization (P_r) เท่ากับ $38 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ และ coercive field (E_c) ที่อุณหภูมิห้องมีค่าเท่ากับ $73 \text{ kV}/\text{cm}$ และพบว่ามีการเปลี่ยนแปลงระบบผลึกตามอุณหภูมิที่เปลี่ยนไป ณ อุณหภูมิห้อง ระบบผลึกของ BNT เป็น Rhombohedral ซึ่งมีสมบัติทางไฟฟ้าเป็นเฟอร์โรอิเล็กทริก เมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นระบบผลึกจะเปลี่ยนไปเป็น Tetragonal และ Cubic ตามลำดับ ซึ่งจะมีผลกระทบต่อสมบัติทางไฟฟ้าเช่นกัน โดยจะเปลี่ยนไปเป็นแอนติเฟอร์โรอิเล็กทริก (antiferroelectric) และพาราอิเล็กทริก (paraelectric) ตามลำดับ ระบบผลึกของ BNT ที่เปลี่ยนแปลงตามอุณหภูมิดังแสดงในตาราง 2.1

ตาราง 2.1 พารามิเตอร์ของแลตทิซของโครงสร้างผลึก 3 แบบของสาร BNT

Temperature ($^\circ\text{C}$)	Symmetry	Parameter (nm)	Volume (nm^3)
600	Cubic	$a = 0.39128$	0.05990
400	Tetragonal	$a = 0.39004$ $c = 0.39057$	0.05942
200	Rhombohedral (pseudocubic)	$a = 0.38911$ $\alpha = 90^\circ$	0.05891
20	Rhombohedral	$a = 0.38848$ $\alpha = 89^\circ 54'$	0.05863



รูป 2.1 โครงสร้างผลึกแบบ ABO_3 ของ BNT

BNT มีโครงสร้างผลึกแบบเพอร์อฟสไกต์ที่มีความซับซ้อน (complex perovskite) มีสูตรโมเลกุลเป็น ABO_3 โดยที่ตำแหน่ง A ประกอบด้วยอะตอม Bi^{3+} หรือ Na^{+} ซึ่งอยู่ที่มุมของสี่เหลี่ยมลูกบาศก์ ตำแหน่ง B ประกอบด้วยอะตอม Ti^{4+} ซึ่งอยู่ตรงกลางของยูนิตเซลล์ และมี O^{2-} อยู่ที่กึ่งกลางของแต่ละหน้าของยูนิตเซลล์ ดังรูป 2.1

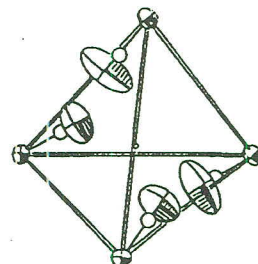
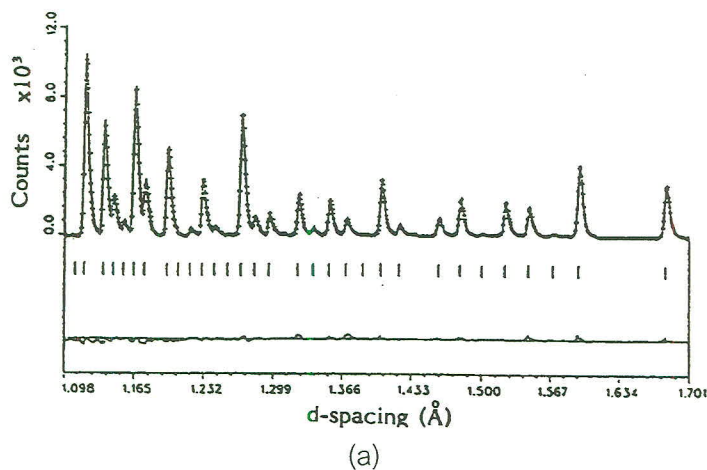
เมื่ออยู่ในสนามไฟฟ้า Ti^{4+} จะเคลื่อนที่ไปยังตำแหน่งใหม่ตามทิศทางของสนามไฟฟ้าที่ทำให้เนื่องจากผลึกมีการเรียงตัวแบบสุ่ม (randomly orientation) และไอออนถูกบังคับให้เคลื่อนที่เฉพาะทิศทางในยูนิตเซลล์ การเคลื่อนที่ของไอออนจึงมีลักษณะคล้ายคลึงกับการจัดเรียงตัวโดยสนามไฟฟ้า อย่างไรก็ตามเมื่อการเคลื่อนที่ที่เกิดขึ้นจะทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของขนาดยูนิตเซลล์ โดยในตอนแรกการจัดเรียงตัวของโมเมนต์จะเป็นแบบสุ่ม ซึ่งสามารถปรับได้โดยการเผาวัสดุที่อุณหภูมิสูงกว่าอุณหภูมิคูรี

ที่อุณหภูมิต่ำกว่าอุณหภูมิคูรี BNT จะมีเฟสเป็นสารเฟอร์โรอิเล็กทริกเนื่องจากมีโพลาริเซชันทางไฟฟ้าในตัวเองและสามารถเปลี่ยนแปลงไปตามอุณหภูมิ โดยพบว่าไอออนบวกและไอออนลบในสารจะมีการเคลื่อนที่ไปเล็กน้อยเมื่อเทียบกับตำแหน่งของออกซิเจนไอออน ทำให้เกิดโพลาริเซชันขึ้นในตัวเอง ดังนั้นไอออนบวกและไอออนลบในสารจะมีการเคลื่อนที่ไปในทิศทางตรงข้ามจึงทำให้เกิดไดโพลโมเมนต์อย่างถาวร แต่ถ้าอุณหภูมิมากกว่าอุณหภูมิคูรี บิสมาทไซด์เดียมไทเทเนตจะมีเฟสเป็นควบิกและมีสมบัติพาราอิเล็กทริก ซึ่งอุณหภูมิคูรีของ BNT มีค่าประมาณ 320°C

การปรับปรุงคุณสมบัติเซรามิก BNT ให้ดีขึ้นโดยการเติมสารชนิดอื่นที่เรียกว่า สารเจือ (dopant) ลงไปในแลตทิซ (lattice) ของวัสดุ โดยสารเจือจะเข้าไปรวมเป็นเนื้อเดียวกับสารแม่ (matrix) สารเจือมีทั้งชนิดเป็นสารละลายของแข็ง (solid solutions) เช่น BaTiO_3 , PbTiO_3 , PbZrO_3 , Ba(Ti,Zr)O_3 และ KNbO_3 เป็นต้น ทำให้ค่าคงที่ไดอิเล็กทริกเพิ่มขึ้น สมบัติทางไฟฟ้าดีขึ้น แต่เนื่องจากความซับซ้อนในการกระบวนการเตรียมเซรามิก การปรับปรุงเซรามิก BNT อีกวิธีการคือสารเจือที่เป็นหมู่โลหะของไอออนบวก เช่น K^+ , La^{3+} , Ba^{2+} , Fe^{3+} , Mn^{4+} , Dy^{3+} และ Zr^{4+} เข้าไปแทนที่ในตำแหน่งของไทเทเนียม Ti^{4+} ในสาร BNT การแทนที่ของไอออนบวกในตำแหน่งของไทเทเนียมจะส่งผลต่อเซรามิก BNT ต่างกันขึ้นอยู่กับประจุของไอออนบวกที่เจือเข้าไป กล่าวคือเมื่อไอออนบวกที่เจือลงไปมีประจุต่ำกว่าประจุของไทเทเนียม(Ti^{4+}) พบว่าไอออนที่เจือลงไปจะทำหน้าที่เป็นตัวรับอิเล็กตรอน (acceptors) ซึ่งจะทำให้ค่าสภาพต้านทานไฟฟ้าสูง และสามารถเผาซินเทอร์เซรามิกในบรรยากาศที่มีออกซิเจนต่ำได้ และเมื่อเจือสารที่มีไอออนบวกสูงกว่าประจุของไทเทเนียม (Ti^{4+}) จะช่วยระงับการเกิดช่องว่างของออกซิเจน และลดข้อบกพร่องที่เกิดจากอะตอมของบิสมาท

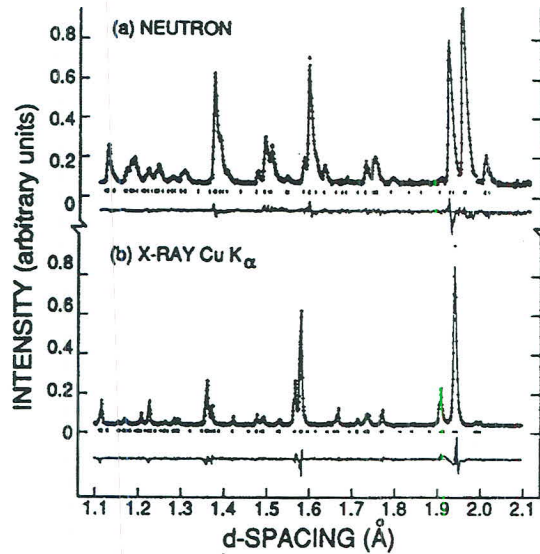
2.2 วิธีเรียทเวลด์

การวิเคราะห์โครงสร้างผลึกแบบเรียทเวลด์หรือที่เรียกว่า Rietveld Analysis นั้นเป็นวิธีการวิเคราะห์โครงสร้างผลึกโดยอาศัยโปรแกรมคอมพิวเตอร์ในการเทียบ(fitting) ข้อมูลที่ได้จากการคำนวณและข้อมูลที่ได้จากการทดลอง ซึ่งโปรแกรมหดดังกล่าวนี้ได้ถูกสร้างขึ้นโดย Hugo M. Rietveld [1,2] ในการวิเคราะห์แผนภาพเลี้ยวเบนของนิวตรอน (neutron diffraction) ที่ได้จากผง ทั้งนี้เนื่องจากผลึกของวัสดุที่ Rietveld สนใจไม่สามารถปลูกเป็นผลึกขนาดใหญ่ ตัวอย่างของแผนภาพการเลี้ยวเบนของนิวตรอน (neutron diffraction pattern) ถูกแสดงไว้ในรูป 2.2(a) จากรูปเป็นการเก็บข้อมูลของ $\text{Ca}_3\text{Al}_2(\text{O}_4\text{D}_4)_3$ สำหรับ TOF (time-of-flight) neutron [3] ซึ่งข้อมูลดิบที่นำมาเขียนกราฟถูกระบุไว้ด้วยเครื่องหมาย + และเส้นที่ลากผ่านจุดเหล่านี้ ได้มาจากการคำนวณจากโปรแกรม Rietveld สำหรับเส้นในแนวตั้งระบุถึงตำแหน่งที่สามารถเกิดการเลี้ยวเบนได้ (diffraction peaks) และเส้นแนวนอนที่อยู่ข้างล่างสุดของกราฟเป็นการระบุถึงความแตกต่างระหว่างเส้นที่คำนวณกับข้อมูลจริงที่วัดได้ เห็นได้ชัดว่า ในกรณีนี้ เส้นที่ได้จากการคำนวณสามารถเทียบได้กับข้อมูลจริงได้เกือบร้อยเปอร์เซ็นต์ หลังจากที่ทำกรวิเคราะห์แล้ว สิ่งหนึ่งที่ได้มา คือ โครงสร้างผลึกและตำแหน่งของอะตอม ดังในรูป 2.2(b) ซึ่งแสดงให้เห็นการสั่นของอะตอมในทิศทางที่ทำให้เกิดรูปของวงรีขึ้น ทั้งนี้ขึ้นอยู่กับขนาดของช่องว่างและรูปร่างของช่องว่างที่จะสามารถทำให้อะตอมเกิดการเคลื่อนที่ได้



รูป 2.2 (a) การวิเคราะห์แผนภาพเลี้ยวเบนของนิวตรอนด้วยวิธี Rietveld สำหรับ $\text{Ca}_3\text{Al}_2(\text{O}_4\text{D}_4)_3$ และ (b) การจัดเรียงตัวของอะตอมภายในผลึก [3]

อย่างไรก็ตาม การใช้ข้อมูลนิวตรอนในการวิเคราะห์จำเป็นต้องส่งชิ้นงานไปวิเคราะห์ในแหล่งที่มีเครื่องปฏิกรณ์ปรมาณู (nuclear reactor) ซึ่งเป็นเรื่องที่ค่อนข้างจะยุ่งยากพอสมควรเมื่อเทียบกับการวิเคราะห์สาร โดยวิธี X-ray diffraction เนื่องจากในปัจจุบัน เครื่อง X-ray diffractometer มีจำหน่ายทั่วไป และในประเทศไทยมีสถาบันแห่งรวมทั้งมหาวิทยาลัยเชียงใหม่ได้ให้บริการ วิเคราะห์สารด้วยวิธีนี้ สำหรับความแตกต่างระหว่างแผนภาพของการเลี้ยวเบนของนิวตรอนและแผนภาพการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์มีข้อแตกต่างอยู่บ้าง ทั้งนี้เนื่องมาจากค่าการกระเจิง (scattering factor) ที่ต่างกันนั่นเอง ตัวอย่างแผนภาพที่แสดงให้เห็นถึงความแตกต่างระหว่างกรณีของนิวตรอนและรังสีเอกซ์ถูกแสดงให้เห็นในรูป 2.3 สังเกตได้ว่า จำนวนของพีคและลักษณะของพีคมีความแตกต่างกันอยู่พอสมควร แต่เมื่อดูจากลักษณะการเทียบระหว่างเส้นที่ได้จากการคำนวณและข้อมูล (สัญลักษณ์ +) ที่ได้จากการทดลองถือได้ว่าสามารถนำมาใช้ได้ทั้งสองกรณี แต่เนื่องจากลักษณะพีคที่ต่างกัน สมการที่เกี่ยวข้องกับเส้นกราฟที่ได้จากการคำนวณจะต้องมีความแตกต่างกัน ในที่นี้จะพูดถึงกรณีของข้อมูลที่ได้จากการวิเคราะห์สารด้วยรังสีเอกซ์เท่านั้น เนื่องจากจะเป็นวิธีหลักที่ใช้ในการวิจัยของโครงการนี้



รูป 2.3 ความแตกต่างระหว่างแผนภาพการเลี้ยวเบนของ (a) นิวตรอน และ (b) รังสีเอกซ์ [4]

สำหรับสมการที่ใช้ในการวิเคราะห์ข้อมูลจากการวิเคราะห์ผงด้วยการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ ได้ถูกปรับปรุงจากในกรณีของการเลี้ยวเบนของนิวตรอนโดยข้อมูลที่ได้จากการคำนวณของแต่ละจุด เพื่อใช้ลากเป็นเส้นทึบในรูป 2.1 และ 2.2 ได้มาจากสมการ (2.1)

$$y_{ci} = s \sum_K L_K |F_K|^2 \phi(2\theta_i - 2\theta_K) P_K A + y_{bi} \quad (2.1)$$

โดย y_{ci} คือความเข้มที่คำนวณได้ (calculated intensity) และข้อมูลที่เกี่ยวข้องกับโครงสร้างผลึกของสารที่ต้องการวิเคราะห์ได้ถูกรวบรวมให้กลายเป็นตัวแปรที่สามารถเปลี่ยนค่าได้จนกระทั่งเส้นที่ได้จากการคำนวณสามารถเลียนแบบข้อมูลจริงได้ใกล้เคียงที่สุด สำหรับตัวแปรที่เกี่ยวข้องมีรายละเอียดดังนี้ s คือ scale factor ที่เป็นตัวแปรและถูกใช้ในกรณีสารที่วิเคราะห์มีสารอื่นเจือปนทำให้สามารถคำนวณหาปริมาณสัมพัทธ์ของแต่ละเฟสได้ L_K รวม Lorentz, polarization และ multiplicity factors ซึ่งในโครงสร้างผลึกแต่ละแบบจะมีค่าไม่เท่ากัน $|F_K|$ คือ structure factor สำหรับ K^{th} Bragg reflection นั่นคือเป็นตัวแปรที่เกิดจากชนิดของอะตอมและตำแหน่งการจัดวางของอะตอมภายในผลึก ซึ่งจะส่งผลอย่างมากต่อความเข้มของฟิวด $\phi(2\theta_i - 2\theta_K)$ คือ reflection profile function ที่จะมีผลต่อรูปร่างของฟิวดแต่ละฟิวดว่าจะมีความสมมาตรเพียงใดโดยปกติจะเป็นฟังก์ชันที่ใช้ในการ

วาดกราฟอยู่แล้วเช่น pseudo-Voigt หรือ Pearson VII functions เป็นต้น P_K คือ preferred orientation factor สำหรับตัวแปรนี้จะไม่ถูกใช้ในกรณีที่ฟังก์ชันให้ละเอียดจนสามารถประมาณได้ว่ามีลักษณะเป็นทรงกลมแต่ถ้าสารที่วิเคราะห์มีลักษณะเป็นแผ่นจำเป็นจะต้องปรับตัวแปรนี้ในโปรแกรมด้วย A คือ absorption factor ทั้งนี้เนื่องจากเฟสแต่ละเฟสในสารที่ใช้วิเคราะห์มีความสามารถดูดซับรังสีเอกซ์ไม่เท่ากัน จึงอาจจะต้องมีการปรับค่าตัวแปรนี้ในการคำนวณด้วย และสุดท้ายคือ y_{bi} คือ background function ที่ตามปกติอาจจะใช้ฟังก์ชัน polynomial หลายๆ เทอมหรือฟังก์ชันทางตรีโกณมิติหลายเทอมเพื่อใช้ในการเทียบกับข้อมูลตรงบริเวณฐานของพีคและตรงตำแหน่งที่ไม่มีพีคอยู่ [5]

เมื่อคำนวณความเข้มของแต่ละจุดได้แล้ว การคำนวณจะดำเนินไปและตัวแปรในสมการ (2.1) จะเปลี่ยนไปเรื่อยๆ จนกว่า ค่า residual (R) ในสมการ (2.2) จะมีค่าน้อยที่สุด จากการทำ least-square fit

$$R = \sum_i w_i (y_i - y_{ci})^2 \quad (2.2)$$

โดย $w_i = 1/y_i$ เป็นค่า weight ของการคำนวณแต่ละจุด y_i คือ ความเข้มของจุด i ในข้อมูลจากการ ทดลองและ y_{ci} คือ ความเข้มของจุด i จากการคำนวณ เมื่อค่า R มีค่าน้อยที่สุดแล้วจะมีตัวบ่งชี้ข้อมูลสองถึงสามแบบที่สามารถนำมาใช้บอกว่าเส้นกราฟที่ได้จากการคำนวณสามารถเทียบได้ใกล้เคียงกับ ข้อมูลจริงมากแค่ไหน ตัวบ่งชี้แบบหนึ่งที่ยิมนำมาใช้เรียกว่า R-weighted pattern หรือ R_{wp} ดังแสดง ในสมการ (2.3)

$$R_{wp} = \left[\frac{\sum_i w_i (y_i - y_{ci})^2}{\sum_i w_i (y_i)^2} \right]^{1/2} \quad (2.3)$$

ตามปกติถ้า Rietveld analysis ให้ค่า R_{wp} ประมาณ 10% หรือต่ำกว่าถือว่าการวิเคราะห์มีความแม่นยำสูงและโครงสร้างผลึกที่ได้จะมีความน่าเชื่อถือแต่ในบางกรณีโดยเฉพาะกรณีของแร่ตัวอย่าง จากในดินจะมีจำนวนพีคและพีคที่ซ้อนกัน (overlapped peaks) อยู่มาก ทำให้การคำนวณยุ่งยากพอสมควรและอาจจะให้ค่า R_{wp} สูงถึง 20% แต่ก็ยังพบว่าข้อมูลที่ได้มี

ความถูกต้องและแม่นยำสูงเช่นกันและยังให้รายละเอียดมากกว่าการวิเคราะห์สารด้วยรังสีเอกซ์ในงานวิจัยทั่วไปด้วย

สำหรับข้อมูลที่จะได้จากโปรแกรม Rietveld ในการวิเคราะห์แผนภาพการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์จะรวมไปถึงค่าคงที่แลตทิซที่แม่นยำ (precise lattice constants) ตำแหน่งของอะตอม (atomic position) ในหน่วยเซลล์ (unit cell) ซึ่งนำไปสู่การหาความยาวพันธะระหว่างอะตอมได้ ปริมาณของอะตอมในแต่ละตำแหน่ง (site occupancy) ซึ่งสามารถใช้ดูว่าสารที่ได้มีองค์ประกอบทางเคมี (chemical composition) หรือ ปริมาณสัมพัทธ์ (stoichiometry) ตามที่ต้องการหรือไม่ นอกจากนี้ยังสามารถใช้เช็คขนาดของผลึก (crystallite size) ปริมาณของความเครียด (strain) และลักษณะของการสั่นทางความร้อนของอะตอม (thermal parameter) ได้ ซึ่งในกรณีหลังสุดนี้จะส่งผลต่อสภาพการนำความร้อนของสารได้

อย่างไรก็ตาม วิธี Rietveld มีข้อจำกัดอยู่บ้างคือเมื่อเริ่มที่จะใช้โปรแกรม อย่างน้อยต้องรู้ว่าโครงสร้างผลึกคร่าวๆ ของวัสดุเป็นอย่างไร ในกรณีนี้สามารถหาข้อมูลได้จากการวิเคราะห์โครงสร้างของสารที่มีองค์ประกอบทางเคมีใกล้เคียงกันแล้วลองเทียบดู ถ้าหากว่าโปรแกรมไม่สามารถให้ค่า R ที่น้อยที่สุดได้หรือที่เรียกว่าไม่ converge ก็จะต้องเปลี่ยนโครงสร้างแล้วทำใหม่ ดังนั้น ในการวิเคราะห์ด้วยวิธีนี้ ค่าเริ่มต้นที่ให้แก่โปรแกรมจึงเป็นสิ่งสำคัญ สำหรับโปรแกรมที่จะนำมาใช้ในโครงการวิจัยนี้ เรียกว่า General Structure Analysis System ซึ่งออกแบบโดย Allen C. Larson และ Robert B. Von Dreele [6] ผู้ทำงานใน Los Alamos National Laboratory, USA สำหรับโปรแกรมได้ถูกปรับให้ใช้งานกับระบบ Windows โดย Brian H. Toby [7] โดยผู้วิจัยได้เคยติดต่อและได้รับความอนุเคราะห์จากนักวิจัยทั้งสามท่านในการให้คำปรึกษามาแล้ว นอกจากนี้ ยังมีโปรแกรมอื่นที่สามารถนำมาใช้วิเคราะห์แบบ Rietveld ได้เช่นกัน แต่จะไม่ขอกล่าวถึงในที่นี้

ตั้งแต่ในปี 1969 เป็นต้นมา เมื่อ Rietveld ได้เผยแพร่โปรแกรมที่ใช้ในการวิเคราะห์โครงสร้างผลึก พบว่ามีผลงานตีพิมพ์จำนวนมากที่ใช้วิธีการเดียวกันนี้กับแผนภาพเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ โดยข้อมูลที่ได้ทำให้สามารถรู้ในเบื้องต้นเกี่ยวกับสารเคมีชนิดใหม่ที่ถูกสังเคราะห์ขึ้น การเปลี่ยนโครงสร้างของผลึกในสารละลายของแข็ง (solid solutions) การเกิดจุดบกพร่อง (defects) ในผลึกและลักษณะของผลึกที่เตรียมได้ เป็นต้น หลังจากที่มีข้อมูลเบื้องต้นเกี่ยวกับโครงสร้างผลึกแล้ว เมื่อนำไปใช้ร่วมกับการวัดสมบัติอื่น เช่น สมบัติทางแสงหรือไฟฟ้า จะทำให้การอธิบายสมบัตินั้นๆ มีความแน่นอนและมีความเชื่อถือเพิ่มขึ้น [8-20] จากตัวอย่างงานวิจัยเหล่านี้ จะเห็นว่าวิธี Rietveld สามารถนำไปใช้งานใน

การวิเคราะห์ของโครงสร้างผลึกหลายชนิด ไม่ว่าจะเป็นโลหะซีเมนต์ วัสดุทางชีวภาพและสารประกอบ ออกไซด์ในรูปของผงหรือเซรามิก

ในส่วนของสารที่มีสมบัติทางเฟอร์โรอิเล็กทริกและเฟอร์โรอิเล็กทริกนั้น ได้มีการศึกษาโครงสร้างผลึกโดยการวิเคราะห์ด้วยวิธี Rietveld แล้ว ซึ่งงานวิจัยส่วนใหญ่จะเน้นถึงสารประกอบที่มีตะกั่วเป็นองค์ประกอบเนื่องจากมีสมบัติทางเพียโซอิเล็กทริกที่ดี [21-28] ตัวอย่างเช่น Bertram et al ได้ศึกษาการเปลี่ยนของเฟสในระบบ $(1-x)\text{Pb}(\text{Zn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3-x\text{PbTiO}_3$ โดยที่ $0.06 < x < 0.13$ โดยพบว่าในช่วงขององค์ประกอบทางเคมีนี้ มีสามเฟสปนอยู่ด้วยกัน คือ โมโนคลินิก รอมโบอีดรอล และเตตระโกนอล โดยมีปริมาณสัมพัทธ์ต่างกันไปขึ้นอยู่กับค่า x [25] ในกรณีนี้ นับว่าการใช้ Rietveld สามารถนำมาใช้ประโยชน์ได้อย่างจริงจัง เนื่องจากการหาปริมาณเฟสจากแผนภาพเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์โดยใช้เฉพาะพีคของแบรกก์ (Bragg's peaks) จะไม่สามารถหาค่าได้ใกล้เคียงกับความเป็นจริง ในอีกกรณีหนึ่ง คือ การศึกษาการเปลี่ยนโครงสร้างผลึกของ PbTiO_3 โดยอาศัยความดันสูงที่อุณหภูมิต่างๆ Sani et al พบว่า การเพิ่มความดันที่อุณหภูมิห้องทำให้โครงสร้างผลึกของสารตัวนี้เปลี่ยนจากเตตระโกนอลไปเป็นคิวบิก ซึ่งสอดคล้องกับสมบัติทางไฟฟ้าที่เปลี่ยนจากเฟอร์โรอิเล็กทริกเป็นพาราอิเล็กทริก พร้อมทั้งพบลักษณะของการเลื่อนตำแหน่งของอะตอมต่างๆ ภายในโครงสร้าง [29] ซึ่งปราศจากการวิเคราะห์ด้วย Rietveld จะไม่สามารถทำได้เลย

ส่วนวัสดุไร้สารตะกั่ว นั้น การวิจัยจะเน้นวัสดุไดอิเล็กทริกที่มีแบบเรียบไททานเตเป็นฐาน [30-34] แต่ในการวิจัยหาวัสดุไร้สารตะกั่วที่มีสมบัติทางเพียโซอิเล็กทริกที่ดีพอที่จะนำมาใช้แทนวัสดุที่มีตะกั่ว นั้น ในโครงการวิจัยนี้ จะเริ่มต้นจากการวิเคราะห์โครงสร้างผลึกของบิสมาทไซด์เดียมไททานเต ($\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3$) ซึ่งเป็นสารที่ได้มีการวิจัยในด้านสมบัติทางไดอิเล็กทริกและเพียโซอิเล็กทริกมากพอสมควร โดยนักวิจัยหลายคนได้ระบุว่าสารนี้อาจจะมีสมบัติที่ดีพอที่จะมาแทนสารที่มีตะกั่วเป็นองค์ประกอบได้แต่อาจจะต้องอาศัยการเจือด้วยสารอื่น [36-39] อย่างไรก็ตาม ในงานวิจัยเหล่านี้ยังขาดการวิเคราะห์โครงสร้างผลึกโดยละเอียดอยู่อีกมาก

ดังนั้น ผู้วิจัยจึงเห็นว่าในปัจจุบัน การวิเคราะห์โครงสร้างผลึกของสารที่มี $\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3$ เป็นฐานจากข้อมูลที่ได้จากการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ยังมีอยู่น้อย และแม้แต่ข้อมูลของสาร $\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3$ บริสุทธิ์ที่เคยเป็นไฟล์มาตรฐานของ JCPDS ซึ่งระบุว่าสารนี้มีโครงสร้างผลึกเป็นรอมโบอีดรอลได้ถูกลบทิ้งไปและถูกแทนที่ด้วยข้อมูลใหม่ซึ่งระบุว่าสารนี้มีโครงสร้างเป็นโมโนคลินิก (monoclinic) ซึ่งแตกต่างจากงานวิจัยส่วนใหญ่ที่ยังระบุว่าสารนี้มี X-ray diffraction pattern ที่มีโครงสร้างผลึกเป็นรอมโบ

อีตรอล อย่างไรก็ตาม งานวิจัยโดย Jones et al [40] ในปี 2002 ซึ่งวิเคราะห์โครงสร้างผลึกของ $\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3$ โดยวิธี neutron diffraction พบว่ามีโครงสร้างผลึกเป็นรอมโบอีตรอล ดังนั้น การที่ผู้วิจัยจะได้ทำการวิเคราะห์โครงสร้างผลึกของสารนี้จากข้อมูลที่ได้จาก X-ray diffraction น่าจะมี ประโยชน์ต่องานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับสารชนิดนี้ หลังจากนั้นจะได้มีการวิเคราะห์ต่อเนื่องไปยังสาร ประกอบที่เป็นสารละลายของแข็งของ $\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{Ti}_{1-x}\text{Zr}_x\text{O}_3$ ซึ่งมีองค์ประกอบคล้ายคลึงกับ $\text{PbTi}_{1-x}\text{Zr}_x\text{O}_3$ (PZT) โดยจากการวิจัยเบื้องต้น [41] พบว่าปริมาณของ x สามารถถูกปรับเปลี่ยนในช่วงกว้าง ซึ่งทำให้สามารถศึกษาโครงสร้างผลึกไปพร้อมๆ กับสมบัติทางไฟฟ้าเช่นเดียวกับในกรณีของ PZT นอกจากนี้ ผู้วิจัยยังได้ศึกษาผลของการเติมสารเจือที่มีประจุต่ำกว่าอื่นๆ เช่น Fe_2O_3 , NiO , MgO และ CoO เป็นต้น เพื่อศึกษาผลกระทบของสารเจือ acceptor เหล่านี้ที่มีต่อลักษณะโครงสร้างผลึก และสมบัติทางไฟฟ้าของบิสมาทไซด์เดียมไททาเนต