

การเปลี่ยนโครงสร้างของสารกึ่งตัวนำซิลเวอร์เทลลูไรด์ (AgGaTe₂) และซิลเวอร์อินเดียมเทลลูไรด์ (AgInTe₂) ภายใต้ความดันสูงถึง 10 GPa และ 26 GPa ตามลำดับ ด้วยเทคนิคการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ชนิดกระจายมุมโดยทำการทดลองโดย The Daresbury Synchrotron Radiation Source , สหราชอาณาจักร ด้วยความยาวคลื่น 0.46540 และ 0.44397 Å ได้ใช้ไดมอนด์ แอนวิล เซลล์แบบเมอร์ริลล์-แบสเสทท์ เป็นอุปกรณ์เพิ่มความดัน การวัดความดันด้วยเทคนิคการเกิดฟลูออเรสเซนซ์ในทับทิม และใช้อิมเมจเพลตเป็นอุปกรณ์สำหรับบันทึกแถบการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ ทั้งนี้ในการเปลี่ยนโครงสร้างครั้งที่หนึ่งในสาร AgInTe₂ ได้ทำการคำนวณด้วยทฤษฎีเชิงฟังก์ชันของความหนาแน่น เพื่อเปรียบเทียบและสนับสนุนผลการทดลอง

ผลการทดลองด้วยเทคนิคการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ พบว่าโครงสร้างที่ความดันสูงของทั้งสาร AgGaTe₂ และ AgInTe₂ เป็นโครงสร้างที่มีการจัดเรียงตัวของไอออนบวกเป็นแบบสุ่ม และความดันที่เกิดการเปลี่ยนโครงสร้างและค่าคงที่แลตทิซที่วัดได้ในกระบวนการลดความดันมีความแตกต่างจากค่าที่วัดได้ในกระบวนการเพิ่มความดัน สำหรับสาร AgGaTe₂ พบว่าการเปลี่ยนโครงสร้างครั้งที่หนึ่งเปลี่ยนจากโครงสร้างแบบซาลโคไฟไรท์ไปเป็นโครงสร้างแบบเทระโกนัลที่มีหมู่สมมาตร $P\bar{4}$ ที่ความดันประมาณ 4.02 GPa ซึ่งมีโครงสร้างร่วมที่ความดันสูงที่มียอดเกิดขึ้นค่อนข้างน้อย จึงทำให้ไม่สามารถระบุโครงสร้างร่วมดังกล่าวได้อย่างชัดเจน และสำหรับสาร AgInTe₂ พบว่าที่ความดันบรรยากาศ มีโครงสร้างแบบซิงค์เบลนด์เป็นโครงสร้างอุปเสถียร ในการเปลี่ยนโครงสร้างครั้งที่หนึ่งและครั้งที่สองเกิดขึ้นที่ความดันประมาณ 3 - 4 GPa และ 21.70 GPa ตามลำดับ โดยการเปลี่ยนโครงสร้างครั้งที่หนึ่ง ทั้งนี้พบว่าทั้งผลการทดลองและผลการคำนวณด้วย DFT โครงสร้างแบบซาลโคไฟไรท์เปลี่ยนไปเป็นโครงสร้างแบบอโรโทรมบิกที่มีหมู่สมมาตรเป็น $Cmcm$ สำหรับการเปลี่ยนโครงสร้างครั้งที่สอง พบว่าไม่มีการเปลี่ยนหมู่สมมาตร แต่มีการเลื่อนของระนาบ (002) ในทิศทาง [010]

Structural phase transformation of AgGaTe_2 and AgInTe_2 were studied under high pressure up to 10 GPa and 26 GPa, respectively. The experiments were carried out using angle dispersive X-ray diffraction with synchrotron radiation source by The Daresbury Synchrotron Radiation Source, UK with wavelengths of 0.46540 \AA and 0.44397 \AA . MB diamond anvil cell was used in this high pressure apparatus with pressure transmitting medium. Ruby fluorescence techniques were used for pressure determination. Two dimensional diffraction patterns were recorded on an image plate. In addition, the DFT calculations have been performed to investigate a first structural phase transition in AgInTe_2 in order to compare with our experimental data.

The high pressure phase of AgGaTe_2 and AgInTe_2 were confirmed to be cation disordered structures. Transition pressure and lattice constant obtained from the increasing pressure and the reverse processes are difference. For AgGaTe_2 , the first structural phase transition occurs around 4.03 GPa which exhibits a chalcopyrite to $P\bar{4}$ structural transition. The coexisting phases were identified by a few accompanying peaks. For AgInTe_2 , the metastable structure, zinc blend, appears at the ambient pressure with the chalcopyrite phase. The first phase transition occurs around 3 - 4 GPa, from ambient phases to $Cmcm$ phase. The second phase transition in AgInTe_2 occurs around 21.70 GPa in which the space group remain the same, but the (002) plane was translationally moved in [010] direction.