

### บทที่ 3 ผลการวิจัย

ในบทนี้ ผู้วิจัยจะกล่าวถึงผลการคำนวณต่างๆ ของโลหะสตรอนเทียมภายใต้ความดันสูง โดยคำนวณที่โครงสร้างผลึกที่แตกต่างกันหลายแบบ ทั้งที่พบในการทดลองและที่ไม่พบในการทดลอง เมื่อคำนวณเสร็จแล้ว เราได้ทำการเปรียบเทียบเอนทัลปีเพื่อระบุว่าโครงสร้างผลึกใดมีความเสถียรที่สุดที่ความดันที่กำหนด ปรากฏว่ามีบางโครงสร้างที่ผลการคำนวณสอดคล้องกับผลการทดลอง แต่ก็มีโครงสร้างอีกจำนวนหนึ่งที่ผลการคำนวณไม่สอดคล้องกับผลการทดลอง ผู้วิจัยได้แสดงให้เห็นว่าพลศาสตร์ของอะตอมอาจมีผลต่อความเสถียรของโครงสร้างผลึก โดยได้คำนวณสมบัติการสั่น โฟนอน และคำนวณค่าคงที่ความยืดหยุ่น ซึ่งผลการคำนวณเหล่านี้ได้แสดงให้เห็นว่าโครงสร้างผลึกที่มีเอนทัลปีต่ำสุดนั้นอาจไม่เสถียรในเชิงพลศาสตร์ก็ได้ ซึ่งผลในการวิจัยนี้เปิดทางให้เราอธิบายความไม่สอดคล้องระหว่างผลการคำนวณพลังงานและผลการทดลองได้ต่อไป

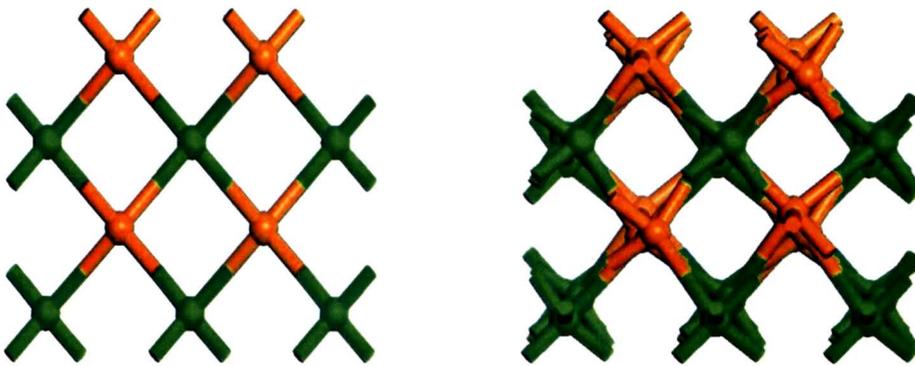
จากที่ได้กล่าวไว้แล้วในบทนำว่าสตรอนเทียมมีลำดับการเปลี่ยนโครงสร้างผลึกตามความดันที่เพิ่มขึ้น ดังนี้ fcc -> bcc -> Sr-III ( $\beta$ -tin) -> Sr-IV (monoclinic) -> Sr-V (host-guest) ซึ่งลำดับนี้ได้จากการทดลองในห้องปฏิบัติการ ดังนั้น เมื่อเราลงมือคำนวณ ผู้วิจัยจึงนำโครงสร้างที่พบจากการทดลองมาคำนวณ และเพิ่มโครงสร้างอื่น ได้แก่ hcp เข้าไปด้วย ทั้งนี้เนื่องจากมีผู้พบโครงสร้างเหล่านี้ใน โลหะอัลคาไลน์เอิร์ธ ซึ่งเป็นหมู่เดียวกับสตรอนเทียมในตารางธาตุ

ตารางที่ 1 ค่าพารามิเตอร์ทางโครงสร้างของโลหะสตรอนเทียมแบบ fcc, bcc เปรียบเทียบกับค่าที่ได้จากวิธีทางทฤษฎีอื่นๆ และผลการทดลอง (A. Phusittrakool, et al., 2008)

Phase	Pressure (GPa)	Lattice parameters (Å)			$B_0$ (Mbar)	
		A	b	c		
Fcc	0	6.010			0.117	Theo. this work
	0	6.086				Exp. (Donohue, 1974)
	0	6.076				Exp. (Pearson, 1967)
	0	6.052			0.110	Theo. (Jona and Marcus, 2006)
					0.115	Exp. (Smithells, Handbook, 1992)
					0.125	Theo. (Pollack et al., 1996)
Bcc	0.42	4.378			0.116	Theo. this work
	0.42	4.434				Exp. (McWahn and Jayaraman, 1963)
	0.42	4.378			0.112	Theo. (Jona and Marcus, 2006)
					0.088	Exp. (T = 930 K) (Mizuki and Stassis, 1985)
					0.117	Theo. (Pollack et al., 1996)

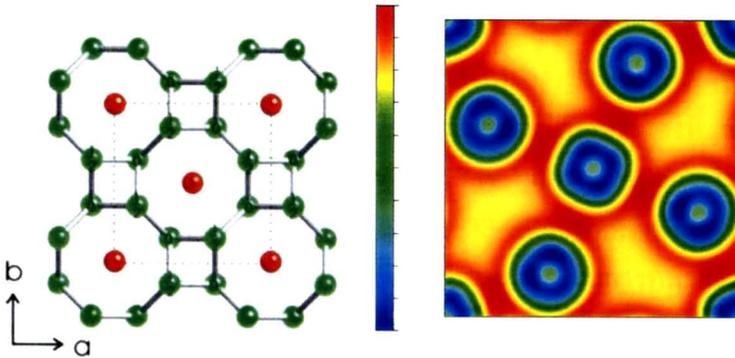
ผู้วิจัยได้พิจารณาสมบัติของสตรอนเทียมในสถานะ fcc และ bcc ก่อน เพราะว่าสองสถานะนี้มีผู้ศึกษาไว้เป็นอย่างดี ทั้งนี้ก็เพื่อเปรียบเทียบและทดสอบความน่าเชื่อถือของวิธีการทางทฤษฎี โดยการคำนวณให้ผลว่า โครงสร้างแบบ fcc เป็นโครงสร้างที่เสถียรภายใต้อุณหภูมิและความดันปรกติ และจะเปลี่ยนเป็นโครงสร้างแบบ bcc เมื่อความดันสูงขึ้นเป็น 1 GPa ซึ่งสอดคล้องกับงานทางทฤษฎีอื่นๆ และสอดคล้องกับผลการทดลอง โดยเฉพาะค่าพารามิเตอร์ของโครงสร้างที่มีการศึกษากันมาแล้วเป็นอย่างดีและใช้กันอย่างแพร่หลาย (D. B. McWhan and A. Jayaraman, 1963, J. Donohue, 1974, W. B. Pearson, 1967) ผลการคำนวณเปรียบเทียบกับผลการคำนวณที่ผ่านมาและผลการทดลองแสดงไว้ในตารางที่ 1 นอกจากนี้ยังได้คำนวณค่า bulk modulus พบว่าค่าของ fcc ใกล้กับของการทดลองมาก แต่ค่าของ bcc ค่อนข้างแตกต่าง แต่อาจเป็นเพราะการทดลองใน bcc ทำที่อุณหภูมิสูงที่ 930 เคลวิน (J. Mizuki and C. Stassis, 1985, L. Pollack, et al., 1996) การทดสอบนี้ ทำให้ผู้วิจัยมั่นใจว่า วิธีที่ใช้ในการคำนวณมีความน่าเชื่อถือสูง

จากนั้น ผู้วิจัยได้คำนวณสมบัติของ Sr-III และ Sr-IV โดยทั้งสองโครงสร้างมีลักษณะดังรูปที่ 1



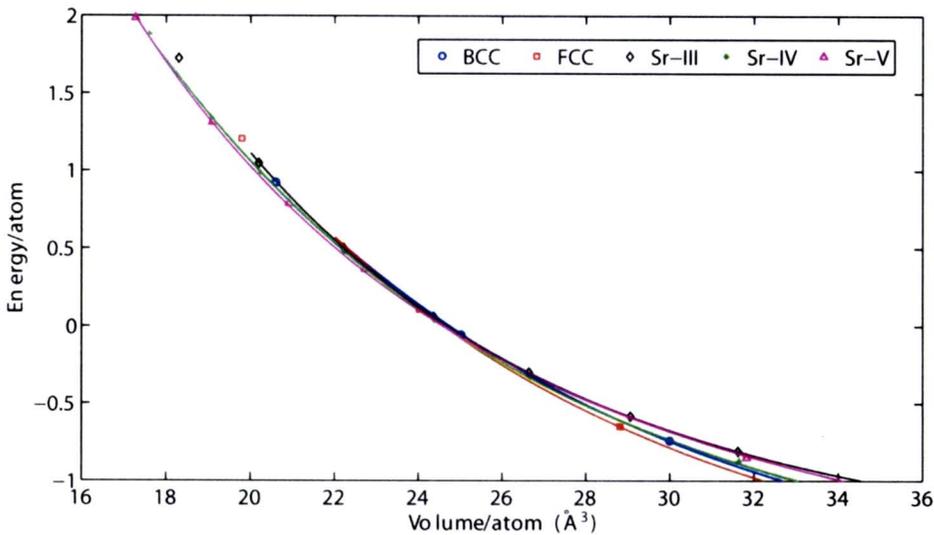
รูปที่ 1 โครงสร้างผลึกของ Sr-III และ Sr-IV ลูกกลมคือตำแหน่งของอะตอม กิ่งก้านอะตอมแสดงพันธะสมมติและระบายนีลอมเพื่อให้ดูภาพได้ง่าย แต่อาจไม่มีความหมายทางฟิสิกส์ใดๆ (A. Phusittrakool, et al., 2008)

โครงสร้างผลึกของ Sr-V แสดงดังรูปที่ 2 โครงสร้างนี้มีความพิเศษคือ อะตอมของสตรอนเทียม จะแบ่งเป็นสองพวกที่มีโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ต่างกันเล็กน้อย (อะตอมสีแดงและสีเขียว) โดยอะตอมสีเขียวจะประกอบร่างกันเป็นโครงสร้างที่มีโพรง ซึ่งสามารถบรรจุอะตอมสีแดงเข้าไปได้ เรียกโครงสร้างสีเขียวเป็นเจ้าบ้าน (host) และอะตอมสีแดงเป็นแขก (guest) และเรียกโครงสร้างทั้งหมดว่าเป็น โครงสร้าง แขก-เจ้าบ้าน (guest-host structure) นอกจากนี้ โครงสร้างนี้ยังมีความเลื่อมล้ำไม่เป็นสัดส่วนที่เป็นเลขลงตัว (incommensurate) ระหว่างเซลล์หนึ่งหน่วยของอะตอมสีเขียวกับสีแดงตามแนวแกน c (ลึกลงไปในหน้ากระดาษ) ด้วย ในรูปที่ 2 เรายังได้แสดงผลการคำนวณการกระจายตัวของอิเล็กตรอนในโครงสร้างนี้ในปริภูมิสามมิติด้วย



รูปที่ 2 แสดงโครงสร้างแบบ แยก-เจ้าบ้าน ของสตรอนเทียม (ซ้าย) และการกระจายตัวของอิเล็กตรอน (ขวา)

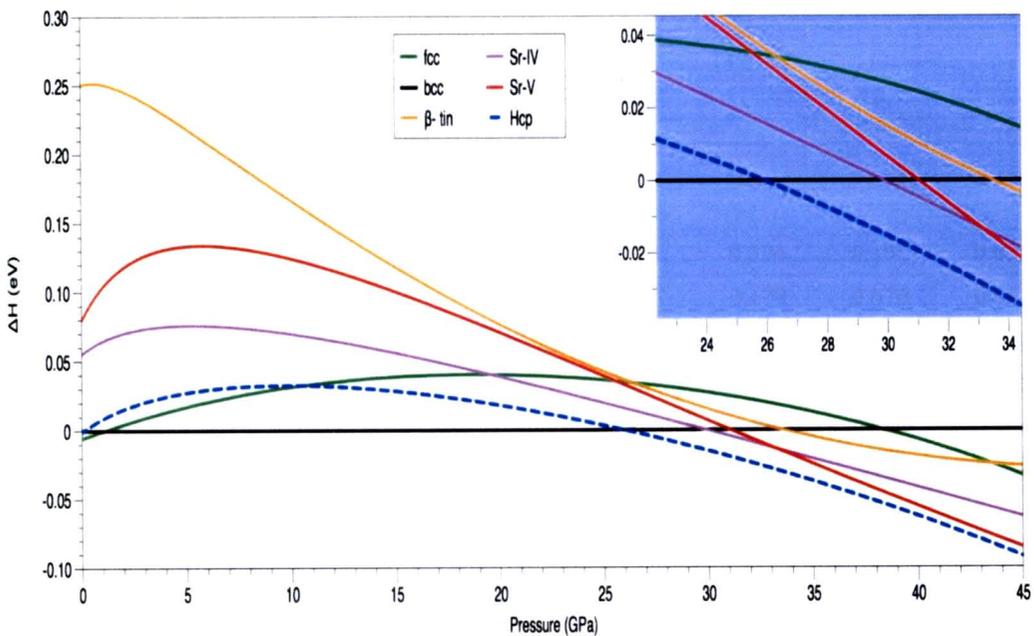
อันดับถัดมา ผู้วิจัยได้ทำการคำนวณสมการสถานะของโลหะสตรอนเทียมที่มีโครงสร้างต่างๆ ได้แก่ fcc bcc Sr-III Sr-IV และ Sr-V กราฟของสมการสถานะแสดงในรูปที่ 3 ซึ่งเป็นความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานรวมและปริมาตรของระบบ จุดที่แสดงด้วยสัญลักษณ์ต่างๆ คือค่าที่ได้จากการคำนวณและเส้นโค้งคือเส้นที่มาจากสมการสถานะของ Birch-Murnaghan รูปนี้แสดงให้เห็นพลังงานเชิงเปรียบเทียบระหว่างโครงสร้างต่างๆ โดยโครงสร้างที่มีพลังงานต่ำสุดคือ fcc ซึ่งพบในการทดลองและในธรรมชาติ



รูปที่ 3 สมการสถานะ  $E(V)$  ของโครงสร้างต่างๆ ของสตรอนเทียม ได้แก่ fcc bcc Sr-III Sr-IV และ Sr-V

จากนั้น เราได้นำสมการสถานะนี้มาคำนวณเอนทัลปี  $H = E + PV$  ดังแสดงในรูปที่ 4 โดยเลือกให้เอนทัลปีของ bcc เป็นเส้นอ้างอิง และตีความโดยดูจากสถานะที่มีเอนทัลปีต่ำสุดจะเป็นสถานะที่เสถียรที่สุด ในการคำนวณครั้งนี้ ผู้วิจัยได้รวมผลของโครงสร้างแบบ hcp เข้าไปด้วย

ผู้วิจัยพบว่า ที่สภาวะปรกติ fcc จะเสถียรที่สุด เมื่อความดันเพิ่มขึ้น โครงสร้างจะเปลี่ยนเป็นแบบ bcc ที่ 1 GPa ซึ่งต่างจากผลการทดลองที่ 3.5 GPa ผู้วิจัยเชื่อว่าเป็นเพราะการคำนวณไม่ได้พิจารณาผลของอุณหภูมิ ทำให้ผลมีความคลาดเคลื่อนไปบ้าง ประเด็นที่สำคัญที่สุดที่ได้จากรูปที่ 4 ก็คือเราพบว่า สตรอนเทียมจะมีลำดับการเปลี่ยนสถานะทางโครงสร้างดังนี้ fcc -> bcc -> hcp เพราะ hcp และ Sr-V มีเอนทัลปีต่ำกว่า Sr-III และ Sr-IV ทุกความดัน อย่างไรก็ตามผลของ hcp เราก็คพบว่า bcc -> Sr-IV (~30 GPa) -> Sr-V (~33 GPa) ผลที่มี hcp นั้นนับว่าแปลกประหลาดมากเพราะลำดับการเปลี่ยนสถานะนี้ขัดแย้งกับผลการทดลอง โดยการทดลองพบการเปลี่ยนสถานะ bcc -> Sr-III ที่ 26 GPa และ Sr-III -> Sr-IV ที่ 35 GPa ผู้วิจัยจึงได้พิจารณากรณีนี้เป็นพิเศษต่อไป



รูปที่ 4 เอนทัลปีซึ่งเป็นฟังก์ชันของความดัน  $H(P) = E + PV$

คำนวณโดยใช้โครงสร้างแบบ fcc bcc Sr-III Sr-IV Sr-V hcp

โดยเลือกค่าเอนทัลปีของ bcc เป็นเส้นอ้างอิงและรูปเล็กแสดงรายละเอียดของจุดตัด

จากความไม่สอดคล้องที่ได้จากการพิจารณาฟังก์ชันเอนทัลปี ทำให้ผู้วิจัยต้องพิจารณาลงไปถึงค่าพารามิเตอร์ของโครงผลึกของ Sr-III และ Sr-IV ซึ่งค่าเหล่านี้เป็นค่าที่สามารถวัดได้จากการทดลอง (T. Bovornratanaraks, et. al., 2006) ปรากฏว่าผลการคำนวณค่าพารามิเตอร์ของโครงผลึกใกล้เคียงกับผลที่ได้จากการทดลองเป็นอย่างมาก ดังแสดงในตารางที่ 2 นอกจากนี้ ยังมีผู้เสนอว่า โครงผลึกแบบ bcc ไม่สามารถเปลี่ยนเป็นโครงผลึกแบบ Sr-III หรือ Sr-IV หรือ Sr-V ได้โดยตรง แต่จะต้องภายในโครงผลึกอาจต้องเคลื่อนที่ผ่านตำแหน่งในโครงผลึกของ hcp ก่อน (H. Katzke and P. Toledano, 2007) นั่นหมายความว่า hcp มีโอกาสเกิดขึ้นสูง เพราะการคำนวณที่ OK เนื่องจากผลการคำนวณที่แสดงในรูปที่ 3 และ 4 นั้นยังไม่ได้รวมผลของอุณหภูมิเข้าไปด้วย จึง

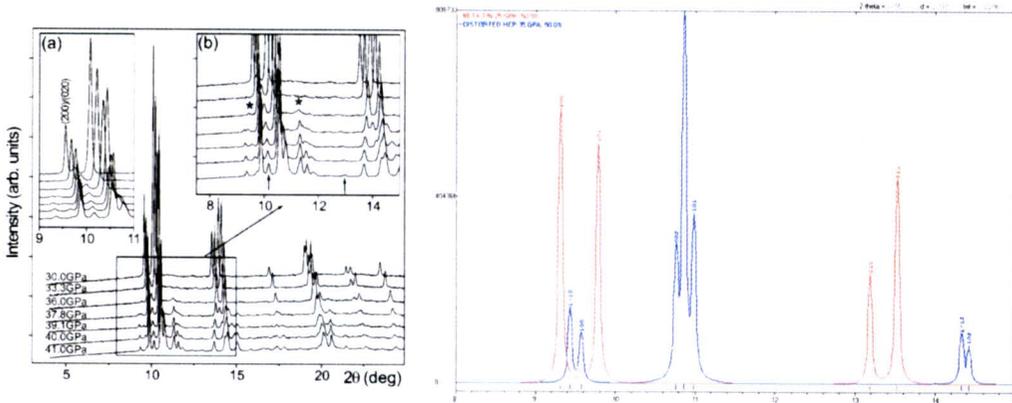
แสดงให้เห็นว่า hcp เป็นโครงสร้างที่มีพลังงานต่ำมากเทียบกับโครงสร้างอื่นๆ แต่สำหรับที่อุณหภูมิห้อง โครงสร้าง hcp อาจไม่ได้เกิดในรูปของสถานะที่เสถียร หากแต่เป็นสถานะ “กึ่งเสถียร” (metastable state) เพราะว่าเราไม่เคยเจอ hcp ในการทดลองที่อุณหภูมิห้องเลย ความรู้นี้สามารถนำไปเป็นแนวทางในการจัดการทดลองที่อุณหภูมิต่ำต่อไปได้

ตารางที่ 2 เปรียบเทียบพารามิเตอร์ทางโครงสร้างของสตรอนเทียมแบบ Sr-III และ Sr-IV (T. Bovornratanaraks, et al., 2006, A. Phusittrakool, et al., 2008)

	Pressure (GPa)	Lattice parameters (Å)			Angle $\beta$	Internal coordinate			
		A	b	c		X	Y	Z	
Sr-III									
Our	37.9	5.464	5.464	2.975					
Exp.	34.8	5.504	5.504	2.960					
Sr-IV									
Exp.	36.8	5.842	8.324	5.553	99.0				
Our	37.8	5.795	7.760	5.714	97.1				
Exp.	41.7	5.746	7.801	5.537	97.1	Sr1	0.304	0.157	0.632
						Sr2	0.479	0.578	0.465
						Sr3	0.684	0.145	0.346
Our	45.9	5.705	8.053	5.331	98.1	Sr1	0.280	0.152	0.600
						Sr2	0.489	0.565	0.481
						Sr3	0.698	0.152	0.362
Exp.	46.4	5.650	7.780	5.359	97.0				

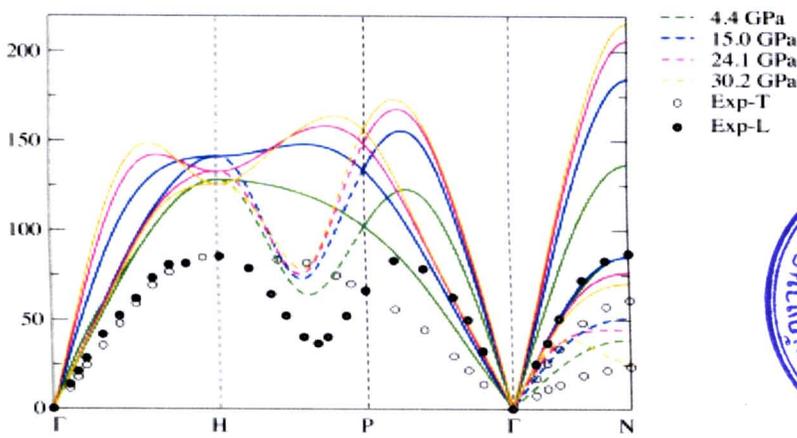
สิ่งที่ยืนยันเรื่องโครงสร้างผลึกได้อย่างชัดเจนที่สุดก็คือ ลวดลายของการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ (x-ray diffraction pattern) ของโครงสร้างนั่นเอง ผู้วิจัยจึงได้คำนวณหาลวดลายการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์จากโครงสร้างที่คำนวณได้จากวิธี DFT และเปรียบเทียบกับลวดลายการเลี้ยวเบนจากการทดลอง ซึ่งได้แสดงผลให้เห็นในรูปที่ 5 ผู้วิจัยได้คำนวณทั้งโครงสร้าง Sr-III และ hcp เพราะจากผลของเอนทัลปีชี้ว่า โครงสร้างแบบ hcp มีเอนทัลปีต่ำกว่า Sr-III มาก แต่จากการเปรียบเทียบลวดลายเลี้ยวเบนกับการทดลอง (รูปที่ 5 ซ้ายมือ) แล้วจะเห็นว่า ลวดลายมีความใกล้เคียงกับโครงสร้างของ Sr-III มากกว่า โดยลวดลายของ hcp กลับไปมีลักษณะใกล้เคียงกับโครงสร้างส่วนน้อยแทน

ในขั้นตอนต่อไป เราพยายามจะพิสูจน์ว่า โครงสร้าง hcp เป็นสถานะที่ไม่เสถียรเชิงกล หรืออย่างน้อย hcp อาจจะเป็นเพียงแค่ สถานะกึ่งเสถียร เมื่อเป็นเช่นนั้นแล้ว ผลการคำนวณของเรา ก็จะมีแนวโน้มที่ใกล้เคียงกับผลการทดลองมากขึ้น



รูปที่ 5 แสดงผลของการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์จากการทดลอง (T. Bovornratanaraks, et. al., 2006) (ซ้าย) และผลที่ได้จากการคำนวณ (ขวา) โดยเส้นสีแดงคือ Sr-III สีน้ำเงินคือ hcp

นอกจากปัญหาเรื่องลำดับของการเปลี่ยนสถานะแล้ว การทำนายเรื่องความดัน ณ จุดเปลี่ยนสถานะก็มีข้อผิดพลาดมากด้วย ทำให้ผู้วิจัยเกิดความสงสัยว่า การที่เราตัดการพิจารณาพลศาสตร์ของอะตอมออกไปตั้งแต่ที่แรกนั้น อาจเป็นการประมาณที่หยาบเกินไป และบางทีพลศาสตร์ของอะตอมอาจมีผลมากต่อการเปลี่ยนแปลงทางโครงสร้างของสตรอนเทียมภายใต้ความดันสูง

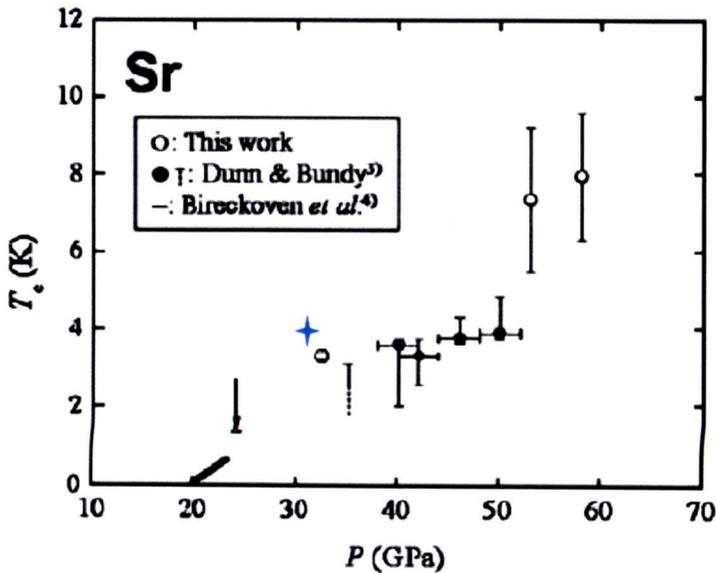


รูปที่ 6 แสดงการกระจายตัวของโฟนอนในโลหะสตรอนเทียม ที่ความดัน 4.4 GPa (เขียว) 15.0 GPa (น้ำเงิน) 24.1 GPa (ชมพู) และ 30.2 GPa (ส้ม) เทียบกับผลการทดลอง (วงกลม)



ในการจะพิสูจน์สมบัติเชิงกล เช่น ความเสถียรเชิงกล ผู้วิจัยต้องคำนวณพลศาสตร์ของสตรอนเทียม ตัวอย่างของผลการคำนวณแสดงในรูปที่ 6 ซึ่งเป็นกราฟการกระจายตัวของโฟนอนหรือควอนตัมการสั่นของอะตอมสตรอนเทียมในโครงผลึกแบบ bcc โดยกราฟจะบอกถึงความถี่

(แกนตั้ง) และทิศทางในโครงผลึกส่วนกลับ (reciprocal lattice) เปรียบเทียบกับผลการทดลองที่ความดันปรกติ (วงกลม) (J. Mizuki and C. Stassis, 1985) มีผลที่น่าสนใจสองสามประการ ได้แก่ ผู้วิจัยพบว่า ความถี่ของโฟนอน “แข็ง” ขึ้น (phonon hardening) ภายใต้ความดันสูง คำว่า “แข็ง” แปลว่ามีความถี่สูงกว่า สตรอนเทียมที่ความดันปรกติ แต่ความพิเศษเกิดขึ้นที่จุด N ในโครงผลึกส่วนกลับเพราะโฟนอนที่อื่น “แข็ง” ขึ้น แต่โฟนอนที่จุดนี้กลับ “อ่อน” ลง (phonon softening) การอ่อนลงนี้เป็นสัญญาณของความไม่เสถียรเชิงกล

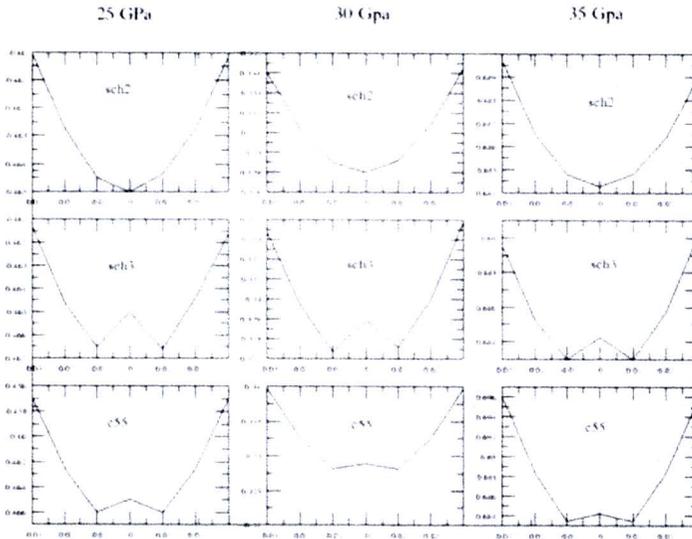


รูปที่ 7 แสดงอุณหภูมิวิกฤตของการเปลี่ยนสถานะเป็นตัวนำยิ่งยวดของโลหะสตรอนเทียมภายใต้ความดันสูง (S. Mizobata et al., 2007) เครื่องหมายสี่เหลี่ยมแสดงผลการคำนวณของคณะผู้วิจัย

นอกจากนี้ ความรู้เกี่ยวกับโฟนอนยังนำไปสู่การคำนวณสมบัติตัวนำยิ่งยวด (superconductor) ของสตรอนเทียมได้ด้วย เราสนใจปรากฏการณ์ตัวนำยิ่งยวดเพราะว่า ที่ความดันปรกติ สตรอนเทียมไม่ได้แสดงสมบัติตัวนำยิ่งยวดเมื่อลดอุณหภูมิลงจนต่ำมาก ๆ ออกมา แต่เมื่อมีการทดลองให้ความดันสูงกับสตรอนเทียม พบว่า สตรอนเทียมกลายเป็นตัวนำยิ่งยวด โดยมีอุณหภูมิวิกฤตสูงขึ้นเมื่อความดันเพิ่มขึ้น อันนี้เป็นหลักฐานที่สำคัญจากปรากฏการณ์ตัวนำยิ่งยวดว่า อิเล็กตรอนและโฟนอนในสตรอนเทียมมีอันตรกิริยากันมากขึ้นเมื่อความดันเพิ่มขึ้น (S. Mizobata et al., 2007) และโฟนอนเหล่านี้ก็เป็นผลพวงมาจากพลศาสตร์ของอะตอมนั่นเอง ผู้วิจัยได้คำนวณค่าอุณหภูมิวิกฤตจากโฟนอนและพบว่า ผลการคำนวณสอดคล้องเป็นอย่างดีกับผลที่ได้จากการทดลอง (รูปที่ 7)

อันดับถัดมา ผู้วิจัยได้คำนวณสมบัติความยืดหยุ่น เพราะนอกเหนือจากการสั่นแล้ว เสถียรภาพทางด้านความยืดหยุ่นหรือการผิดรูปเพียงเล็กน้อยก็สามารถเป็นข้อบ่งชี้ถึงความมีเสถียรภาพของ

โครงผลึกได้ ในรูปที่ 8 แสดงเสถียรภาพต่อการบังคับให้ผิดรูปเพียงเล็กน้อยด้วยความเค้นเฉือนในโครงสร้างแบบ hcp ผลปรากฏว่าโครงสร้างแบบ hcp ไม่มีเสถียรภาพต่อการผิดรูปเพียงเล็กน้อยหรืออีกนัยหนึ่งคือ ไม่มีเสถียรภาพต่อความยืดหยุ่นนั่นเอง

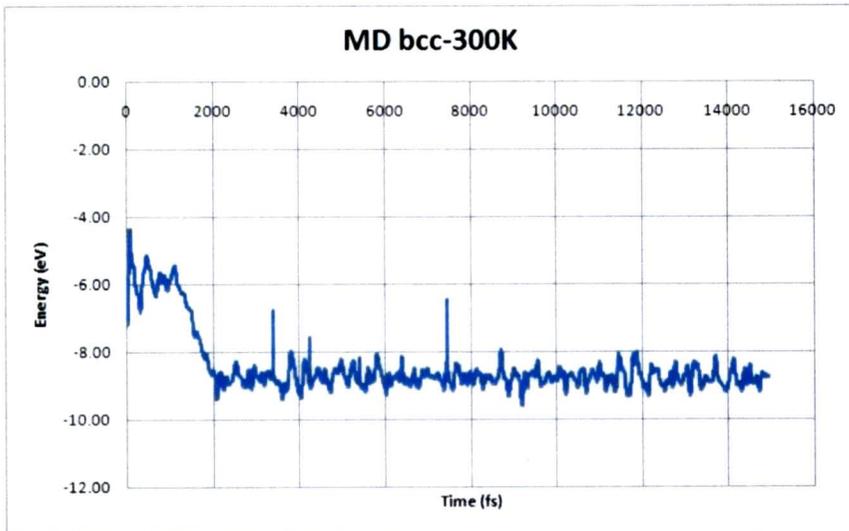


รูปที่ 8 แสดงการตอบสนองต่อความเค้นเฉือนของโครงสร้างแบบ hcp ที่ความดันต่างๆ เส้นโค้งคล้ายพาราโบลาจะแสดงว่าโครงสร้างมีความเสถียร เส้นโค้งรูป W จะตีความได้ว่าโครงสร้างแบบ hcp จะไม่เสถียร แต่จะเปลี่ยนรูปไปเป็นโครงสร้างที่ผิดรูปเล็กน้อยแทน

ผลการคำนวณในรูปที่ 8 เป็นข้อพิสูจน์ที่ชัดเจนอันหนึ่งว่า โครงสร้างแบบ hcp นั้นไม่เสถียรเชิงกลในธรรมชาติเราอาจพบ hcp ได้ที่อุณหภูมิต่างๆ แต่เมื่อสตรอนเทียมอยู่ภายใต้ความเครียดหรือความเค้นเพียงเล็กน้อย โครงสร้าง hcp จะเปลี่ยนเป็นโครงสร้างอื่นทันที การคำนวณเชิงพลศาสตร์นี้ให้คำตอบที่น่าพอใจ เพราะสามารถให้คำอธิบายได้ว่า เหตุใดเราจึงไม่พบ hcp ในการทดลอง และอธิบายความไม่สอดคล้องกันระหว่างผลการทดลองและผลจากการคำนวณเอนทัลปีได้

จากการคำนวณข้างต้นทำให้ผู้วิจัยได้ความรู้ว่า พลศาสตร์ของอะตอมมีความสำคัญต่อการทำนายสมบัติของสตรอนเทียมมาก ผู้วิจัยจึงได้คำนวณพลศาสตร์ของระบบแบบเต็มรูปแบบด้วยวิธีที่เรียกว่า พลศาสตร์โมเลกุลผสมควอนตัม (ab initio molecular dynamics) โดยการคำนวณนี้จะแก้สมการควอนตัมสำหรับสถานะของอิเล็กตรอน จากนั้นจะคำนวณแรงระหว่างอะตอม และยอมให้อะตอมเคลื่อนที่ตามกฎของนิวตัน เมื่ออะตอมเคลื่อนที่ไป สถานะของอิเล็กตรอนก็จะเปลี่ยนไป เราจึงต้องทำการแก้สมการควอนตัมสำหรับอิเล็กตรอนในวงรอบต่อไป ทำอย่างนี้ไปเรื่อยๆ เราจะได้พลศาสตร์ของทั้งอิเล็กตรอนและอะตอม ผลการจำลองพลศาสตร์โมเลกุลผสมควอนตัมนี้แสดงดังรูปที่ 9 ซึ่งแสดงการวิวัฒนาการตามเวลา (time evolution) ของระบบสตรอนเทียม 64 อะตอมที่ความดัน

ประมาณ 27 GPa อุณหภูมิ 300K โดยกราฟแสดงพลังงานของระบบกับเวลาที่ใช้ในการอินทิเกรตสมการการเคลื่อนที่ของนิวตัน

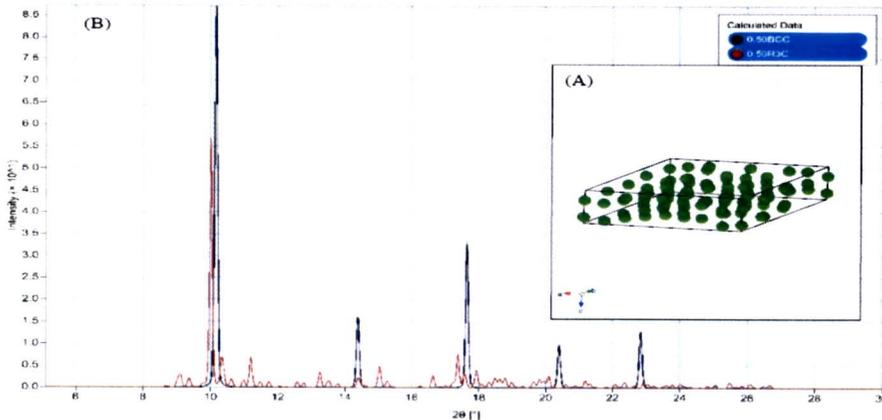


รูปที่ 9 แสดงการวิวัฒนาการ (time evolution) ของสตรอนเทียม 64 อะตอม โดยมีโครงสร้างแบบ bcc เป็นโครงสร้างเริ่มต้น และจะสังเกตเห็นการเปลี่ยนสถานะที่เวลา 2,000 fs ได้อย่างชัดเจน

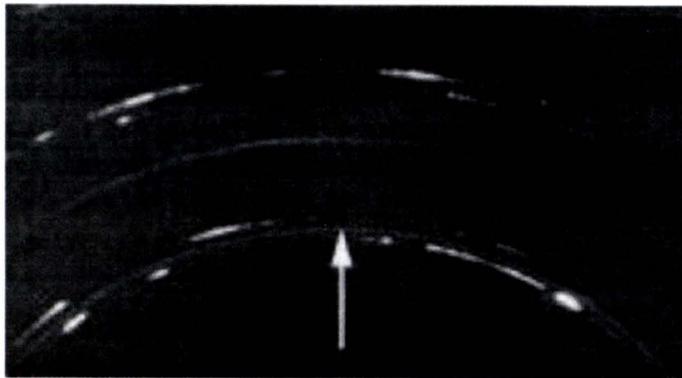
เมื่อวิเคราะห์โครงสร้างที่ได้จากพลศาสตร์โมเลกุล พบว่า ที่เวลาเริ่มต้นระบบมีโครงสร้างแบบ bcc แต่เมื่อระบบวิวัฒนาการไปเป็นระยะเวลาหนึ่ง (2,000 fs ดังรูปที่ 9) สตรอนเทียมได้เปลี่ยนสถานะทางโครงสร้าง (structural phase transition) ไปเป็นโครงสร้างอื่น สาเหตุของการเปลี่ยนสถานะน่าจะมาจากผลของโฟนอน ตามรูปที่ 6 และการวิเคราะห์เชิงลึกให้คำตอบว่า โครงสร้างสุดท้ายนี้เป็นแบบหกเหลี่ยม (hexagonal lattice) แต่ผลที่พิเศษคือว่า ฐานของโครงผลึก (basis) มีการเรียงตัวกันแบบผิดรูป (distorted arrangement ดูรูปที่ 10 A) ซึ่งส่งผลให้เกิดความไร้ระเบียบขึ้นในโครงผลึก เมื่อทำการจำลองการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ พบว่า ผลที่ได้แตกต่างจากโครงผลึก bcc เป็นอย่างมาก ดังแสดงในรูปที่ 10 B

ลักษณะของกราฟในการจำลองการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์แสดงให้เห็นว่า ความเป็นระเบียบในระยะยาวของโครงผลึกได้หายไป โดยยอดกราฟที่ชัดเจนปรากฏเพียงยอดเดียว ซึ่งแสดงถึงความเป็นระเบียบในพิสัยสั้นๆ (short range order) เท่านั้นเอง แต่ในพิสัยที่ห่างออกไป ระยะยาวของโครงผลึกมีความไร้ระเบียบเกิดขึ้น ทำให้สัญญาณจากการเลี้ยวเบนหักล้างกันไปเป็นส่วนใหญ่ ทำให้ยอดกราฟที่เหลือเป็นเพียงยอดเล็กๆ คล้ายสัญญาณรบกวน เมื่อนำกราฟการเลี้ยวเบนของโครงสร้างหกเหลี่ยมมาเปรียบเทียบกับโครงสร้าง bcc จะยิ่งเห็นความแตกต่างชัดเจนยิ่งขึ้น โดยโครงสร้าง bcc มียอดกราฟขึ้นหลายตำแหน่งตามระยะที่สามารถเกิดการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ได้ แสดงถึง

ความเป็นโครงสร้างอย่างแท้จริง อย่างไรก็ตาม ยอดกราฟแรกของ bcc จะตรงกับยอดกราฟแรกของ โครงสร้างหกเหลี่ยม แสดงให้เห็นถึงสภาพแวดล้อมในพหุสัณฐานที่คล้ายคลึงกัน



รูปที่ 10 แสดงการจำลองการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของโครงสร้างที่ได้จากพลศาสตร์โมเลกุล (เส้นสีแดง) เมื่อวิเคราะห์เชิงลึกพบว่า มีโครงสร้างแบบหกเหลี่ยม แต่มีฐานผลึกแบบไว้ระเบียบ เมื่อเปรียบเทียบกับโครงสร้าง bcc (เส้นสีดำ) จะเห็นความแตกต่างระหว่างโครงสร้างที่มีระเบียบ กับโครงสร้างที่มีฐานไว้ระเบียบ



รูปที่ 11 ภาพการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์จากการทดลอง (T. Bovornratanaraks, et. al., 2006) รอยขีดขาวๆ ที่ขาดเป็นช่วงๆ แสดงถึงโครงสร้างที่เป็นผลึกที่มีระเบียบ ในขณะที่วงกลมขาวสม่ำเสมอ (ลูกศรชี้) แสดงถึงโครงสร้างอื่นที่มีลักษณะไม่เป็นระเบียบ ซึ่งเกิดผสม (mixed phases) อยู่กับโครงสร้างที่มีระเบียบ

การค้นพบโครงสร้างที่ไว้ระเบียบนี้ น่าตื่นเต้นเป็นอย่างมาก เพราะได้มีการค้นพบโครงสร้างไว้ระเบียบแฝงอยู่กับโครงสร้างผลึกที่มีระเบียบในลักษณะที่เป็นสถานะผสม (mixed phased หรือ co-exist phase) ดังแสดงในรูปที่ 11 ซึ่งเป็นการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของสตรอนเทียมที่ความดันสูง ปรากฏเป็นร่องรอยจากโครงสร้างที่เป็นระเบียบ มีลักษณะเป็นแถบขาวขาดเป็นช่วงๆ ผสมอยู่กับวงขาวสม่ำเสมอซึ่งเกิดจากโครงสร้างที่ไว้ระเบียบ การทดลองค้นพบโครงสร้างไว้ระเบียบนี้ไว้หลายปีแล้ว แต่ยังไม่เคยมีใครให้คำอธิบายมาก่อนว่า โครงสร้างไว้ระเบียบนี้เกิดขึ้นได้อย่างไร มีที่มา

อย่างไร แต่การคำนวณของผู้วิจัยได้แสดงให้เห็นว่า ที่มาของผลึกไว้ระเบียนมาจาก การเปลี่ยนสถานะเนื่องจากความไม่เสถียรเชิงกลของโครงสร้างแบบ bcc