บทสรุปผู้บริหาร

โครงการวิจัยนี้ได้คำนวณโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ของเลดเทลลูไลด์โดยใช้คลัสเตอร์โมเดล อะตอม $Pb_{13}Te_{14}$ ออกแบบด้วยโปรแกรม DV-Xα ประกอบด้วยอะตอม Te และ อะตอม Pb มีโครงสร้างผลึกจัดเรียงตัวแบบ Face Centered Cubic ซึ่งหน่วยเซลล์ประกอบด้วยอะตอมอยู่ตรงมุมในลักษณะที่ใช้ร่วมกับหน่วยเซลล์อื่น และอีก 6 อะตอม จะอยู่กึ่งกลางของผิวทั้งหกด้าน มีการจัดเรียงระดับพลังงานเป็น Pb5d, Pb6s, Pb6p, Te4d, Te5s และ Te5p มีช่องว่างพลังงานจะมีค่าเท่ากับ 2.28 eV เนื่องจากมีพลังงานสูงสุดของแถบเวเลนจ์เป็น –0.16 eV และพลังงานต่ำสุดของแถบนำเป็น 2.11 eV และพลังงานเฟอร์มิมีค่าเป็น 0.97 eV มีความหนาแน่นสถานะสูงสุดในระดับพลังงานที่ต่ำกว่า 0 นั้นคือมีความหนาแน่นสถานะของอิเล็กตรอนมากกว่าโฮล ลักษณะนี้จึงแสดงสมบัติเป็นวัสดุผันไฟฟ้าจากความร้อนชนิด n คอนทัวร์แม็พของคลัสเตอร์โมเดลอะตอม Pb_4Te_4 แสดงฟังก์ชันคลื่นในออร์บิทัลต่าง ๆ และมีลักษณะแตกต่างกันตามการจัดเรียงอิเล็กตรอนในออร์บิทัล และแสดงเป็นรูปวงกลมเนื่องจากอิเล็กตรอนเคลื่อนที่รอบนิวเคลียส เส้นนอกสุดจะเป็นอิเล็กตรอนอิสระ ฟังก์ชันคลื่นของคลัสเตอร์โมเดลอะตอม Pb_4Te_4 เป็นความสัมพันธ์ระหว่างอะตอม Pb และ Te เพื่อบอกลักษณะการยึดเหนี่ยวระหว่างอะตอม ความสมดุลของการออกแบบโครงสร้างอะตอมที่ได้ และระดับพลังงานของอิเล็กตรอน

การคำนวณสมบัติเชิงความร้อนของเลดซัลไฟด์ เลดเซลิไนด์ เลดเทลลูไลด์ และแคดเมียมเทลลูไลด์มีค่าแลตทิซพารามิเตอร์และ Bulk modulus สอดคล้องกับผลการทดลองของ J. E. Ni et al. (exp.) และ F. Ren et al อย่างดีเยี่ยม ที่ปริมาตรและความดันคงตัวมีค่า Bulk modulus ลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น ส่วน Shear modulus และ Young's modulus มีค่าลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นสอดคล้องอย่างดีเยี่ยมกับข้อมูลการทดลอง โครงสร้างเรขาคณิตคลัสเตอร์อะตอมของเลดซัลไฟด์ เลดเซลิไนด์ เลดเทลลูไลด์ และแคดเมียมเทลลูไลด์ออกแบบโดยใช้วิธีพลศาสตร์โมเลกุล ประกอบด้วย anions-256 และ cations-256 หรือเรียกว่า Supper lattice มีขนาด 4 × 4 × 4 เท่าของหน่วยเซลล์ ซึ่งมีไอออนของ Pb^{2+}, Cd^{2+}, S^{2-} Se^{2-} และ Te^{2-} ที่อุณหภูมิสูง หน่วยเซลล์ของสารเหล่านี้แสดง Bredig transition เนื่องจากเป็นพันธะแบบโคเวเลนจ์และมีการสั้นน้อยมาก ในช่วงอุณหภูมิ 300-600 K สภาพอัดได้ของเลดซัลไฟด์ เลดเซลิไนด์ เลดเทลลูไลด์ และแคดเมียมเทลลูไลด์มีค่าคงตัว และในช่วงอุณหภูมิ 600-700 K มีค่าเพิ่มขึ้นเล็กน้อย ทำให้การขยายตัวเชิงเส้นเนื่องจากความร้อนมีแนวโน้มเพิ่มขึ้นและสอดคล้องกับการทดลองอย่างดีเยี่ยม อย่างไรก็ตามการขยายตัวเชิงเส้นเนื่องจากความร้อนสารประกอบเลดเทลลูไลด์ขึ้นอยู่กับรูปร่างของศักย์ระหว่างอะตอม ในช่วงอุณหภูมิ 300-500 K ความจุความร้อนของเลดซัลไฟด์ เลดเซลิไนด์ เลดเทลลูไลด์ และแคดเมียมเทลลูไลด์ที่ความดันดันคงตัวมีค่าสอดคล้องกับรายงานของ Y. Bencherif et al. (2011) ซึ่งการวัดความจุความร้อนอาศัยพาหะที่มีอุณหภูมิสูงกว่าอุณหภูมิเดเบรย อย่างไรก็ตามความจุความร้อนเป็นสมบัติทางกายภาพที่แสดงพฤติกรรมผิดปกติในบริเวณการเปลี่ยนเฟส มีค่าสภาพนำความร้อนเนื่องจากแลตทิซหรือโฟนอน $\kappa_L(T)$ ลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น เป็นการทำปฏิกิริยาระหว่างโฟนอนกับโฟนอน (Umklapp process) ที่อุณหภูมิสูง ในทางทฤษฎีเรา

สามารถคำนวณหาสภาพนำความร้อนเนื่องจากโฟนอนได้จากความสัมพันธ์ของ $\kappa_L = \frac{1}{3} C_l v_s l_l$ และสภาพนำความร้อนของก้อนผลึกคำนวณได้จากความสัมพันธ์ $e^{\Theta_D / bT}$ สภาพนำไฟฟ้าของเลดซัลไฟด์ เลดเซลิไนด์ เลดเทลลูไลด์ และแคดเมียมเทลลูไลด์มีค่าลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น แสดงให้เห็นว่าสารประกอบเหล่านี้มีพฤติกรรมเป็นสารกึ่งตัวนำ

เลดเทลลูไลด์มีโครงสร้างผลึกแบบลูกบาศก์สอดคล้องกับ PDF#781905

เลดเทลลูไลด์มีความหนาแน่นเฉลี่ยเป็น 8.12 g/cm^3 และความแข็งแบบวิกเกอร์เฉลี่ยเป็น 35.36 HV

เลดเทลลูไลด์มีสภาพต้านทานไฟฟ้าเท่ากับ 3.1 mΩ-cm ที่อุณหภูมิห้อง และมีแนวแนวโน้มเพิ่มขึ้นเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นสอดคล้องกับรายงานของ Y.L. Pei *et al*. (2012) เพราะว่าเลดเทลลูไลด์แสดงพฤติกรรมเป็นฉนวนที่อุณหภูมิสูง มีสัมประสิทธิ์ซีเบคเท่ากับ –194.85 μV K^{-1} ที่อุณหภูมิห้อง และมีแนวแนวโน้มลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นสอดคล้องกับรายงานของ Y.L. Pei *et al*. (2012) และค่าสัมประสิทธิ์ซีเบคเป็นลบแสดงให้เห็นว่าเลดเทลลูไลด์เป็นสารกึ่งตัวนำชนิด n มีสภาพนำความร้อนของเท่ากับ 0.49 W m^{-1} K^{-1} ที่อุณหภูมิห้อง และมีแนวแนวโน้มเพิ่มขึ้นเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นสอดคล้องกับสัมประสิทธิ์ซีเบค และมีค่ามากกว่ารายงานของ Y.L. Pei *et al*. (2012) มีไดเมนชันเลสฟิเกอร์ออฟเมริทของเลดเทลลูไลด์เท่ากับ 2.50×10^{-4} ที่อุณหภูมิห้อง มีแนวแนวโน้มลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น และมีค่าน้อยกว่ารายงานของ Y.L. Pei *et al*. (2012) เพราะสภาพนำความร้อนมีค่าสูงขึ้น