บทที่ 3

วัสดุ อุปกรณ์ และวิธีดำเนินการวิจัย

ในบทนี้ได้กล่าวถึงวิธีดำเนินการวิจัยซึ่งประกอบด้วยวิธีการคำนวณโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ การคำนวณสมบัติเชิงกล การคำนวณสมบัติเชิงความร้อน การวัดความหนาแน่น การวิเคราะห์โครงสร้างผลึก การวัดความแข็งระดับจุลภาคแบบวิกเกอร์ และการวัดสมบัติผันไฟฟ้าจากความร้อนของสารเลดเทลลูไลด์ มีรายละเอียดดังนี้

3.1 การคำนวณโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์

คอมพิวเตอร์ที่ใช้ในการคำนวณมีสมบัติ คือ CPU Pentium III 866 MB, Ram 1 GB มีโปรแกรม Discrete Variational Xα (DV-Xα) ประกอบด้วยคำสั่ง makeunit, makelat และ makesymorb ใช้ในการสร้างและออกแบบคลัสเตอร์ โปรแกรม Mathematica ตรวจสอบการสมมาตรของคลัสเตอร์ที่ออกแบบ dvscat ใช้ในการคำนวณโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ของคลัสเตอร์ที่ออกแบบ และ dvplot ใช้ในการตรวจสอบกราฟที่ได้ ในการทำวิจัยครั้งนี้ได้ใช้คอมพิวเตอร์คำนวณของศูนย์วิจัยเทอร์โมอิเล็กทริก คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยราชภัฏสกลนคร แสดงดังภาพที่ 3.1 และมีรายละเอียดการคำนวณโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ดังนี้

ภาพที่ 3.1 คอมพิวเตอร์ความเร็วสูงที่ใช้คำนวณ

3.1.1 เปิดโปรแกรม dvxa

(c:\>) ใส่ cd\ แล้วกด Enter

(c:\>cd\) ใส่ cd dvxa แล้วกด Enter

(c:\>cd\cd dvxa) ใส่ setdvxa แล้วกด Enter

เปิด mycomputer to Local Disk (C:), double click displat, double click makeunit เพื่อสร้าง unit

Space Group Symbol or Number: 225 แล้วกด Enter, Lattice parameter a : 6.454 Å แล้วกด Enter

Site 1 Atomic symbol or Number: ใส่ Pb Enter

Position (x, y, z) : ใส่ตำแหน่งของ x, y, z ของ Pb คือ 0, 0, 0 กด Enter

Site 2 Atomic symbol or Number : ของ Te ใส่ตำแหน่งของ x, y, z ของ Te คือ 0.5, 0.5, 0.5 กด Enter ใส่ end แล้วกด Enter

Output File Title : ใส่ PbTe แล้วกด Enter

Output File name : PbTe ทั้งหมด .ut แล้วกด Enter

3.1.2 เปิดไฟล์ makelat

Input file name : กด Enter

เปิดไฟล์ PbTe ที่ .ut

1: Auto 2 : Manual : เลือก 1 แล้วกด Enter

Output File Tilte : ใส่ PbTe .xyz แล้วกด Enter

Output File name : PbTe .xyz แล้วกด Enter

3.1.3 เปิดไฟล์ displat

Martor file name : กด Enter

เปิดไฟล์ PbTe ที่ .xyz

Input Mode (0: Number 1) : เลือก 0 แล้วกด Enter

Number of Atom (0 all DATA): ใส่เลขอะตอม 0 แล้วกด Enter และคอมพิวเตอร์จะแสดงคลัสเตอร์โมเดลของ PbTe ให้เลือก F1, F, F3 เพื่อดูการสมมาตร

กด ESC แล้วเลือก delete atom on screen-1 : แล้วกด Enter เพื่อตัดอะตอมให้ได้สมมาตรให้ได้มากที่สุด ในการตัดทีละอะตอมให้เลือก 1 เพื่อเลื่อนอะตอมเดินหน้า U เลื่อนอะตอมถอยหลัง D คือตัดอะตอม เมื่อตัดแล้วได้ $Pb_{13}Te_{14}$ สมมาตรมากที่สุด

เลือกลูกศรดูการหมุนแกน

กด Shift and + เพื่อขยายขนาด

กด Shift and - เพื่อลดขนาด

กด ESC เลือก save screen coordinate แล้วกด Enter

ใส่ PbTe.cb แล้วบันทึก

>Title : ใส่ PbTe แล้วกด Enter

กด ESC เลือก makesymorb input file แล้วกด Enter

Select symmetry type : ใส่ s แล้วกด Enter

Select symmetry type : เลือกค่าที่สูงที่สุด PbTe(27)

Show : x 1 z : Symmetry parameter

เลือก g และ s : ใส่ PbTe.sym แล้วบันทึก

กด ESC 2 ครั้ง เลือก Save screen coordinate ที่ .cb แล้วกด Enter

กด ESC 2 ครั้ง : เลือก Make F01 formakef 05 เลือก f01 แล้วกด Enter

Select NEG order (1-3:ใส่ 3) แล้วกด Enter

deviation of coordination Number (%) : 15 แล้วกด Enter

deviation of Length from Conter (%) : 15 แล้วกด Enter

Reset the condition (r key0) or continue (Other keys) : y กด Enter

Use madelung potential (f03) (y key) แล้วกด Enter

>Input charge> ใส่ประจุ Pb : 2 และ Te: -2 ตามลำดับ แล้วกด Enter

กด ESC เลือก Make Madelung Automatically เลือก f05 แล้วกด Enter

>Title: ใส่ประจุ Pb : 2 และ Te: -2 ตามลำดับ แล้วกด Enter

3.1.4 คัดลอกไฟล์ PbTe. ut, PbTe. xyz, PbTe.cb, PbTe.sym, f01, f03 ไปไว้ที่โฟลเดอร์ที่สร้างใหม่ แล้วเปลี่ยนชื่อไฟล์เป็น $Pb_{13}Te_{14}$

3.1.5 เปิดโปรแกรม Symorb ใน Local Disk (C:) และดับเบิลคลิกที่ไฟล์ sym Input จะแสดงไฟล์ของ sym Input .N b

3.1.6 เปิดไฟล์ PbTe.sym ใน NOTEPAD แล้วคัดลอกข้อมูลจาก “.....}} ไปไว้ในไฟล์ Sym Input. N b ที่ answer=symorb คลิกลากตั้งแต่ “.....}} แล้ววางเปลี่ยน {0,(1) 3} และ c:\DVXa\Symorb\เปลี่ยนจาก NH3 เป็น PbTe .sym

3.1.7 วางเมาส์ตรง<<”C:\Sym orb\Symorb\”....}},....] แล้วกด Shift และ Enter พร้อมกันอีกครั้งรอให้โปรแกรมคำนวณจนแสดงคำว่า normal end. แล้วปิด (ให้เลือก don’t save)

3.1.8 เปลี่ยนชื่อไฟล์จาก PbTe.sym เป็น F25 โดยคลิกที่ Tools เลือก Folder Option คลิก View Choose Hide extensions for known types คลิก OK. เปลี่ยนชื่อไฟล์เป็น F25 แล้วทำซ้ำอีกครั้ง

3.1.9 คัดลอกไฟล์ F25 ไปไว้ที่ไฟล์ $Pb_{13}Te_{14}$

3.1.10 เปิดโปรแกรม DVXa

(c:\>)ใส่ c d\ แล้วกด Enter

(c:\>c d\) ใส่ cd dvxa แล้วกด Enter

(c:\>c d\cd dvxa) ใส่ setdvxa แล้วกด Enter

(c:\>cd\cd dvxa / setdvxa) ใส่ cd calc แล้วกด Enter

(c:\>cd\cd dvxa / setdvxa/cd calc) ใส่ cd และชื่อโฟลเดอร์เราแล้วกด Enter

(c:\>cd dvxa/setdvxa/cd calc) ใส่ cd $Pb_{13}Te_{14}$ แล้วกด Enter

(c:\>cd\cd dvxa/setdvxa/cd calc/cd $Pb_{13}Te_{14}$) ใส่ Make F05 แล้วกด Enter

(c:\>cd\cd dvxa/setdvxa/cd calc/cd $Pb_{13}Te_{14}$ /Make F05) ใส่ dvtomcm แล้วกด Enter เพื่อดูคลัสเตอร์โมเดลของ $Pb_{13}Te_{14}$

(c:\>cd\cd dvxa/setdvxa/cd calc/cd $Pb_{13}Te_{14}$/Make F05) ใส่ dimchk g แล้วกด Enter เพื่อตรวจสอบค่า n/w/g ในตาราง เมื่อตรวจสอบแล้วได้ $Pb_{13}Te_{14}$ (w)

3.1.11 การคำนวณ

Run dvscat w (enter) ให้โปรแกรมคำนวณจน Convergen

ตรวจสอบ Convergen ที่ F06Z

ใช้คำสั่ง popanl w

netc w
bnododr w
make l04 ดู l04 เปลี่ยน 0 เป็น 1
lvlshm w
dvplot ดู l07 แล้ว open เพื่อดูกราฟ Energy
make d04 ดู D04 เปลี่ยน 0 เป็น 1
dos w
dvplot ดู D07 แล้ว open เพื่อดูกราฟ DOS
3.1.12 หาค่า Energy level
นำข้อมูลใน L07KG ไปเขียนกราฟในโปรแกรม Excel
เปลี่ยนสเกลและตามความเหมาะสม
ตรวจสอบระดับพลังงานที่ D04 นำมาเขียนลงในตาราง
ดูระดับพลังงานระหว่างแถบวาเลนซ์กับแถบนำ
นำผลที่ได้มาเปรียบเทียบค่าจริง
3.1.13 หาค่า Density of state
นำข้อมูลใน D07 ไปเขียนกราฟในโปรแกรม Excel
เปลี่ยนสเกลและตามความเหมาะสม
ตรวจสอบระดับพลังงานที่ D04 นำมาเขียนลงในตาราง
ดูระดับพลังงานรวมว่ามีค่าเท่าใด
นำผลที่ได้มาเปรียบเทียบค่าจริง
3.1.14 วิเคราะห์ช่องว่างพลังงานของ $Pb_{13}Te_{14}$
อ่านค่าช่องว่างพลังงานของ $Pb_{13}Te_{14}$
นำค่าที่อ่านได้จากการคำนวณมาเปรียบเทียบกับค่าจริง
3.1.15 คำนวณหาคอนทัวร์แม็พ
เปิดโปรแกรม DV-Xa
ใส่ cd\ แล้วกด enter
ใส่ cd dvxa แล้วกด enter
ใส่ setdvxa แล้วกด enter
ใส่ cd calc แล้วกด enter
ใส่ cd ตามด้วยชื่อโฟลเดอร์แล้วกด enter
ใส่ makeC04 แล้วกด enter
เลือก 0 แล้วกด enter
ไปเลือกอะตอมที่ displat เลือกไฟล์ F25 เพื่อเลือกเอาอะตอมมา 3 อะตอม แล้วกด enter
ใส่ตำแหน่งของอะตอมที่เลือกตามลำดับแล้วกด enter
ใส่ค่าของ x จากการประมาณค่าแล้วกด enter
ใส่ค่าของ y จากการประมาณค่าแล้วกด enter
ใส่ค่าของ (x, y) เอาค่าครึ่งหนึ่งหรือต่ำกว่าค่าครึ่งหนึ่งของ x และ y แล้วกด enter

ใส่ค่าของ Mash คือ 80 แล้วกด enter
กด 0 แล้วกด enter
ใส่ contr w แล้วกด enter
ใส่ cmap แล้วกด enter
ใส่ cmtxt แล้วกด enter
กด 0 แล้วกด enter
ใส่ dvplot แล้วกด enter
เลือก CHG เพื่อดูลายของ $Pb_{13}Te_{14}$
เปิด C04 เพื่อใส่ค่า 3 ค่าที่ได้จากการสุ่มจากไฟล์ CHG.Txt เปลี่ยนค่าไปเรื่อย ๆ จนกว่าจะได้ค่าที่เหมาะสม
ใส่ contr w แล้วกด enter
ใส่ cmap แล้วกด enter
ใส่ cmtxt แล้วกด enter
กด 0 แล้วกด enter
ใส่ dvplot แล้วกด enter
กดดูค่า Contour map ของ $Pb_{13}Te_{14}$ ไฟล์ของ w

3.2 การคำนวณสมบัติเชิงกล

สมบัติเชิงกลของเลดเทลลูไลด์สามารถคำนวณได้จากสมการ

$$a(T) = \frac{a(0)}{a(T)} \tag{3.1}$$

$$\beta = \frac{3}{a(P_0)}\left(\frac{\partial a(P)}{\partial P}\right)_T \tag{3.2}$$

$$\beta = -\frac{1}{V}\frac{\partial V}{\partial p}\bigg|_T \tag{3.3}$$

$$K_T = \frac{1}{\beta} \tag{3.4}$$

$$\tau = \frac{F}{A_0} \tag{3.5}$$

$$\varepsilon = \frac{\Delta l}{l} \tag{3.6}$$

$$E = \frac{\tau}{\varepsilon} \tag{3.7}$$

$$G = \frac{2(K - \lambda)}{2} \tag{3.8}$$

เมื่อ

$a(T)$ คือ แลตทิซพารามิเตอร์ที่อุณหภูมิ $T(\mathrm{K})$

T_0 คือ อุณหภูมิห้อง

$a(P)$ คือ แลตทิซพารามิเตอร์ที่ความดัน $P(\mathrm{Pa})$

P_0 คือ ความดันบรรยากาศ

β คือ สภาพอัดได้ทางความร้อน

V คือ ปริมาตร

K_T คือ บัลโมดูลัส

τ คือ ความเค้น

F คือ แรงกระทำ

A_0 คือ พื้นที่

l คือ ความยาวของคลัสเตอร์

Δl คือ ผลต่างของความยาว

ε คือ ความเครียด

E คือ Young's modulus

G คือ Shear modulus

λ คือ Lame's parameter

3.3 การคำนวณสมบัติเชิงความร้อน

การคำนวณสมบัติเชิงความร้อนของสารตัวอย่างประกอบด้วยแลตทิซพารามิเตอร์ การขยายตัวเชิงเส้นเนื่องจากความร้อน ความจุความร้อน และสภาพนำความร้อน โดยใช้เครื่องคอมพิวเตอร์ความเร็วสูงเครื่องเดียวกันกับการคำนวณโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ โดยใช้โปรแกรม MAXDROTO มีรายละเอียดการคำนวณดังนี้

3.3.1 การเปรียบเทียบแลตทิซพารามิเตอร์กับอุณหภูมิ โดยการเพิ่มความดันในช่วง 0-2.00 GPa ซึ่งมีวิธีการคำนวณดังนี้

1) เข้าไปที่ compressibility แล้วเข้าไปที่โฟล์เดอร์อุณหภูมิ 298 K ประกอบไปด้วยความดัน 0.00 GPa, 1.00 GPa และ 2.00 GPa ซึ่งความดันนั้นเรากำหนดเอง แต่ในที่นี้เราใช้ความดัน 0.00 GPa เพียงความดันเดียวในการเปรียบเทียบระหว่างค่าแลตทิซพารามิเตอร์กับอุณหภูมิ

2) เข้าไปที่โฟล์เดอร์ความดัน 0.00 GPa ภายในโฟล์เดอร์จะประกอบด้วย FILE 05, FILE 07, FILE 10 และ Mxdorto.exe

3) เปิด FILE 05 โดยการคลิกขวาที่ FILE 05 ไปที่ open with แล้วไปที่ notepad

4) แก้ไขอุณหภูมิใน FILE 05 โดยเริ่มตั้งแต่อุณหภูมิที่ 298 K แล้วบันทึก

5) ดับเบิ้ลคลิกที่ Mxdorto.exe

6) เมื่อคำนวณเสร็จแล้ว โฟล์เดอร์ความดันนั้นจะประกอบไปด้วย FILE 05, FILE 07, FILE 10, Mxdorto.exe, file 06, file 08, file 09p และ file 09v

7) ดูผลการคำนวณที่ file 06

8) ทำตามขั้นตอนที่ 3.3.2 – ขั้นตอนที่ 3.3.6 จนครบทุกอุณหภูมิ

9) นำค่าแลตทิซพารามิเตอร์มาเปรียบเทียบกับอุณหภูมิใน Microsoft Excel

3.3.2 การเปรียบเทียบแลตทิซพารามิเตอร์กับความดัน โดยการเพิ่มความดันขึ้นไปเรื่อย ๆ จนกว่าจะคำนวณไม่ได้ ซึ่งมีวิธีการคำนวณดังนี้

1) เข้าไปที่ compressibility เข้าโฟล์เดอร์อุณหภูมิ 298 K แล้วสร้างโฟลเดอร์ความดัน โดยเริ่มตั้งแต่ 0.00 GPa ถึง 2.00 GPa ซึ่งภายในโฟล์เดอร์แต่ละความดันนั้นจะประกอบไปด้วย FILE 05, FILE 07, FILE 10 และ Mxdorto.exe

2) เปิด FILE 05 โดยการคลิกขวาที่ FILE 05 ไปที่ open with แล้วไปที่ notepad

3) แก้ไขความดันใน FILE 05 โดยเริ่มความดันตั้งแต่ 0.00 GPa แล้วบันทึก

4) ดับเบิ้ลคลิกที่ Mxdorto.exe

5) เมื่อคำนวณเสร็จแล้ว โฟล์เดอร์อุณหภูมิ 298 K ในแต่ละความดันนั้นจะประกอบไปด้วย FILE 05, FILE 07, FILE 10, Mxdorto.exe, file 06, file 08, file 09p และ file 09v

6) ดูผลการคำนวณที่ file 06

7) ทำตามขั้นตอนที่ 2) – ขั้นตอนที่ 6) จนครบทุกความดัน

8) นำค่าแลตทิซพารามิเตอร์ในแต่ละความดันมาเขียนกราฟเทียบกับความดันใน Microsoft Excel

3.3.3 การเปรียบเทียบปริมาตรต่อโมลกับอุณหภูมิ

1) เข้าไปที่ compressibility แล้วเข้าไปที่ โฟล์เดอร์อุณหภูมิ ซึ่งภายในโฟล์เดอร์ประกอบไปด้วยความดัน 0.00 GPa, 1.00 GPa และ 2.00 GPa

2) เข้าไปที่โฟล์เดอร์ความดัน 0.00 GPa, 1.00 GPa และ 2.00 GPa ซึ่งภายในโฟล์เดอร์จะประกอบด้วย FILE 05, FILE 07, FILE 10, Mxdorto.exe, file 06, file 08, file 09p และ file 09v

3) เปิด file 06 เพื่อดูค่า Molar volume

4) นำค่าปริมาตรต่อโมลเฉลี่ยมาเขียนกราฟเทียบกับอุณหภูมิที่คำนวณได้ บันทึกข้อมูลไว้ใน Microsoft Excel

3.3.4 สัมประสิทธิ์การขยายตัวความร้อนเชิงเส้น (α_{lin})

1) การคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์การขยายตัวความร้อนเชิงเส้นโดยใช้สูตร

$$\alpha_{lin} = \frac{1}{a(T_0)}\left(\frac{a(T) - a(T_0)}{T - T_0}\right)_P$$

2) เพื่อความสะดวกในการคำนวณเราจึงใช้โปรแกรม Microsoft Excel ในการคำนวณค่าสัมประสิทธิ์การขยายตัวความร้อนเชิงเส้นโดยใช้สูตรข้างต้น

3) นำค่าค่าสัมประสิทธิ์การขยายตัวความร้อนเชิงเส้นมาเขียนกราฟเทียบกับอุณหภูมิที่ได้จากการคำนวณ

3.3.5 การคำนวณหาค่าสภาพการอัดตัวได้และการขยายตัวได้ (β)

1) การคำนวณหาค่าสภาพการอัดตัวได้และการขยายตัวได้ โดยใช้สูตร

$$\beta = \frac{3}{a(P_0)}\left(\frac{\partial a(P)}{\partial P}\right)_T$$

2) เพื่อความสะดวกในการคำนวณเราจึงใช้โปรแกรม Microsoft Excel ในการคำนวณค่าสภาพการอัดตัวได้และการขยายตัวได้ โดยใช้สูตรข้างต้น

3) นำค่าสภาพการอัดตัวได้และการขยายตัวได้มาเขียนกราฟเทียบกับอุณหภูมิเฉลี่ย

3.3.6 การคำนวณหาค่าความจุความร้อนที่ปริมาตรคงตัว (C_V) ความจุความร้อนในรูปของการยืดของแลตทิซ (C_d) และความจุความร้อนที่ความดันคงตัว (C_p)

1) เข้าไปโฟล์เดอร์ heat capacity

2) สร้างโฟล์เดอร์อุณหภูมิภายในโฟล์เดอร์ก่อนคำนวณจะประกอบด้วย FILE 05, FILE 07, FILE 10 และ Mxdorto.exe

3) เปิด FILE 05 โดยการคลิกขวาที่ FILE 05 ไปที่ open with แล้วไปที่ notepad แก้ไขอุณหภูมิ โดยอุณหภูมิของช่วงล่างต้องมากกว่าช่วงบน 60 K แล้วกดบันทึก

4) ดับเบิ้ลคลิกที่ Mxdorto.exe

5) เมื่อคำนวณเสร็จแล้ว ภายในโฟล์เดอร์อุณหภูมินั้นจะประกอบไปด้วย FILE 05, FILE 07, FILE 10, Mxdorto.exe, file 06, file 08, file 09p และ file 09v

6) ดูผลการคำนวณที่ file 06

7) ทำตามขั้นตอนที่ 2 – ขั้นตอนที่ 6 จนครบทุกอุณหภูมิ

8) นำผลการคำนวณไปคำนวณหาค่าความจุความร้อน โดยใช้สูตรดังต่อไปนี้

- ความจุความร้อนที่ปริมาตรคงตัว $C_V = \left(\frac{\partial E(T)}{\partial T}\right)_V$
- ความจุความร้อนในรูปของการยืดของแลตทิซ $C_d = \frac{(3\alpha_{lin})^2 VT}{\beta}$
- ความจุความร้อนที่ความดันคงตัว $C_P = C_V + C_d$

9) เพื่อความสะดวกในการคำนวณเราจึงใช้โปรแกรม Microsoft Excel ในการคำนวณความจุความร้อนที่ปริมาตรคงตัว (C_V) ความจุความร้อนในรูปของการยืดของแลตทิซ (C_d) และความจุความร้อนที่ความดันคงตัว (C_P) โดยใช้สูตรข้างต้น

10) นำความจุความร้อนที่ปริมาตรคงตัว ความจุความร้อนในรูปของการยืดของแลตทิซ และความจุความร้อนที่ความดันคงตัวมาเขียนกราฟเทียบกับอุณหภูมิที่คำนวณได้

3.3.7 การคำนวณหาค่าสภาพนำความร้อน (κ)

1) เปิดโฟล์เดอร์ thermal conductivity ภายในโฟล์เดอร์จะประกอบไปด้วยโฟล์เดอร์อุณหภูมิตั้งแต่ 300–700 K

2) เปิดโฟล์เดอร์อุณหภูมิ 300 K โฟล์เดอร์ 01, 02, 03, 04, 05, 06, 07, 08, 09, 10, heatflux, warmup และไฟล์ Excel

3) ภายในโฟล์เดอร์ 01 ถึง 10 ก่อนคำนวณจะประกอบไปด้วย FILE 05, FILE 07, FILE 10 และ AMXD.exe

4) เปิด heatflux ก่อนคำนวณภายในโฟล์เดอร์จะประกอบด้วย heatcopy, TCanalysis

5) คลิกขวาที่ heatcopy คลิก Edit คลิกเก็บลง แล้วเข้าไป copy URL ของโฟล์เดอร์ thermal conductivity

6) แล้วนำมาวางใน heatcopy แล้วบันทึก แล้วกดดับเบิ้ลคลิกที่ heatcopy จะได้ไฟล์ heatflux1–heatflux10

7) ดับเบิ้ลคลิกที่ TCanalysis แล้วกรอกข้อมูลดังนี้

- เติม 10 แล้วกด Enter
- เติม 100000 แล้วกด Enter
- เติม 20000 แล้วกด Enter
- เติม 10 แล้วกด Enter
- เติม 2 แล้วกด Enter
- เติมข้อมูล a b c แต่ละตัววรรค 2 วรรค เปิดดูข้อมูลที่ warmup ดูที่ file 06 แล้วนำข้อมูลเติมลงไป แล้วกด Enter
- เติมเลข 4 จำนวน 3 ตัว โดยแต่ละตัวนั้นวรรค 2 วรรค แล้วกด Enter
- เติมอุณหภูมิลงไป โดยเปิดดูที่ warmup ดูที่ file 06 ดูอุณหภูมิเฉลี่ย AVE แล้วกด Enter

8) นำข้อมูลไปไว้ที่โปรแกรม Microsoft Excel

3.4 การเตรียมสารตัวอย่าง

นำผงของ Lead (II) Telluride (PbTe) มีความบริสุทธิ์ 99.998 % จากบริษัท Sigma-Aaldrich ประเทศสหรัฐอเมริกา ปริมาณ 10 g ไปบดให้ละเอียดด้วยครกบดสารแล้วผสมสาร Polyvinyl Alcohol (PVA) ปริมาณ 2 mL คุกเค้าให้เป็นเนื้อเดียว นำผงสารที่ได้ไปใส่ในเบ้าอัดแบบทรงกระบอกเส้นผ่านศูนย์กลาง 2 cm แล้วอัดขึ้นรูปด้วยเครื่องอัดไฮดรอริกแกนเดี่ยวที่ความดัน 250 MPa เพื่อให้ได้เม็ดสาร นำเม็ดสารที่ได้ไปเผาผนึกในเตาท่อเป่าแก๊สอาร์กอนปริมาณ 0.5 mL/min ที่อุณหภูมิ 900 $^{\circ}$C เป็นเวลา 2 ชั่วโมง แล้วนำก้อนสารที่ได้ไปตัดด้วยเครื่องตัดความเร็วต่ำให้มีขนาด 3×3×15 mm^3

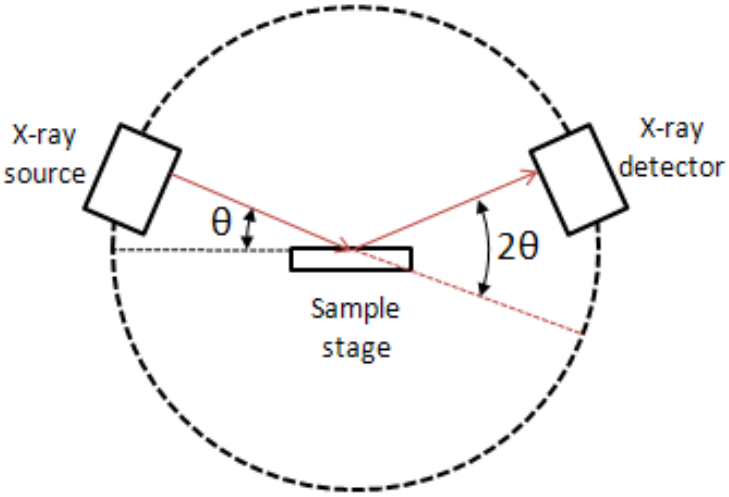
3.5 การวิเคราะห์โครงสร้างผลึก

ใช้เครื่อง X-RAY DIFFERACTOMETER (XRD) รุ่น XRD6100 บริษัท Shimadzu ของศูนย์วิจัยเทอร์โมอิเล็กทริก เพื่อวิเคราะห์โครงสร้างผลึกของเลดเทลลูไลด์ด้วยเทคนิคการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์แสดงดังภาพที่ 3.2

ภาพที่ 3.2 เครื่อง X-RAY DIFFERACTOMETER (XRD) รุ่น XRD6100 บริษัท Shimadzu ของศูนย์วิจัยเทอร์โมอิเล็กทริก

เทคนิคการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ เป็นเทคนิคที่ใช้เพื่อการศึกษาโครงสร้างผลึก ดูการจัดเรียงของอะตอมหรือโมเลกุลของสารประกอบต่าง ๆ และสามารถหาองค์ประกอบของธาตุได้ทั้งเชิงปริมาณและเชิงคุณภาพโดยอาศัยปรากฏการณ์การเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ แสดงดังภาพที่ 3.3 ซึ่งประกอบไปด้วยเครื่องกำเนิดรังสีเอกซ์ ซึ่งทำงานโดยการปล่อยกระแสไฟฟ้าเข้าขั้วแคโทดเพื่อให้ปล่อยอิเล็กตรอนออกมาโดยมีความต่างศักย์ระหว่างขั้วแคโทดและขั้วแอโนดเป็นตัวเร่งอิเล็กตรอนเพื่อวิ่งเข้าชนเป้าที่ขั้วแอโนด (Cu) ส่งผลให้เกิดการปลดปล่อยรังสีเอกซ์ออกมาชนผ่านไปยังสารตัวอย่างและรังสีเอกซ์ที่เลี้ยวเบนออกจากสารตัวอย่างจะถูกตรวจจับด้วยอุปกรณ์ตรวจจับรังสีเอกซ์ (detector) และอาศัยกฎของแบรกก์ที่กล่าวว่า “รังสีเอกซ์ที่สะท้อนออกจากระนาบชุดหนึ่ง ๆ จะแทรกสอดแบบเสริมกัน เมื่อลำรังสีที่ตกกระทบบนระนาบที่ต่างกันมีระยะทางที่แตกต่างกันเป็นจำนวนเต็มเท่าของความยาวคลื่นของรังสีเอกซ์” โดยเมื่อมองผลึกว่าประกอบด้วยระนาบของอะตอมซึ่งสามารถสะท้อนคลื่นที่ตกกระทบโดยมีมุมตกกระทบเท่ากับมุมสะท้อนคลื่นที่สะท้อนจากระนาบจะแทรกสอดกัน ในเทคนิคนี้ตัวอย่างจะเคลื่อนไปเป็นมุม θ ในขณะที่อุปกรณ์ตรวจวัดรังสีเอกซ์จะเคลื่อนที่ไป 2θ เพื่อให้การเลี้ยวเบนสอดคล้องกับกฎของแบรกก์ (Bragg’s law)

$$2d\sin\theta = n\lambda \tag{3.9}$$



ภาพที่ 3.3 หลักการทำงานของเครื่อง X-Ray diffractrometer (http://chemwiki.ucdavis.edu/Analytical_Chemistry/Instrumental_Analysis/Diffraction/Powder_X-ray_Diffraction, 19 ธ.ค. 2555)

3.6 การวัดความหนาแน่น

ก่อนทำการวัดความหนาแน่นของสารเลดเทลลูไลด์ต้องตัดและขัดสารตัวอย่างเครื่อง Low speed saw และเครื่อง variable speed grinder-polisher แสดงดังภาพที่ 3.4 และ 3.5 แล้วทำการวัดความหนาแน่นด้วยเครื่อง Density Kit โดยการชั่งในอากาศและชั่งในน้ำเพื่อคำนวณค่าความหนาแน่นเราทำการวัด 10 ครั้ง แล้วหาค่าเฉลี่ย แสดงดังภาพที่ 3.6

ความหนาแน่นของของแข็งในบรรยากาศหาค่าได้จากสมการ (3.10)

$$\rho = \frac{A}{A-B}(\rho_0 - \rho_L) + \rho_L, \quad V = \alpha \frac{A-B}{\rho_0 - \rho_L} \tag{3.10}$$

เมื่อ ρ คือ ความหนาแน่นสารตัวอย่าง

A คือ น้ำหนักของสารตัวอย่างในอากาศ

B คือ น้ำหนักของสารตัวอย่างในของเหลว (น้ำหรือแอลกอฮอล์)

V คือ ปริมาตรของสารตัวอย่าง

ρ_0 คือ ความหนาแน่นของของเหลว

ρ_L คือ ความหนาแน่นของอากาศ ($0.0012\,\mathrm{g/cm^3}$)

α คือ ค่าคงตัวตัวน้ำหนัก (0.99985)

ดังนั้นการหาค่าความหนาแน่นของสารตัวอย่างจึงหาได้จากสมการ (3.11)

$$\rho = \alpha \frac{P}{V} + \rho_L \tag{3.11}$$

เมื่อ P คือ น้ำหนักของของเหลว

V คือ ปริมาตรส่วนที่จม

ภาพที่ 3.4 เครื่องตัดสาร

ภาพที่ 3.5 เครื่องขัดสาร

ภาพที่ 3.6 เครื่องวัดความหนาแน่น

3.7 การวัดความแข็งระดับจุลภาคแบบวิกเกอร์

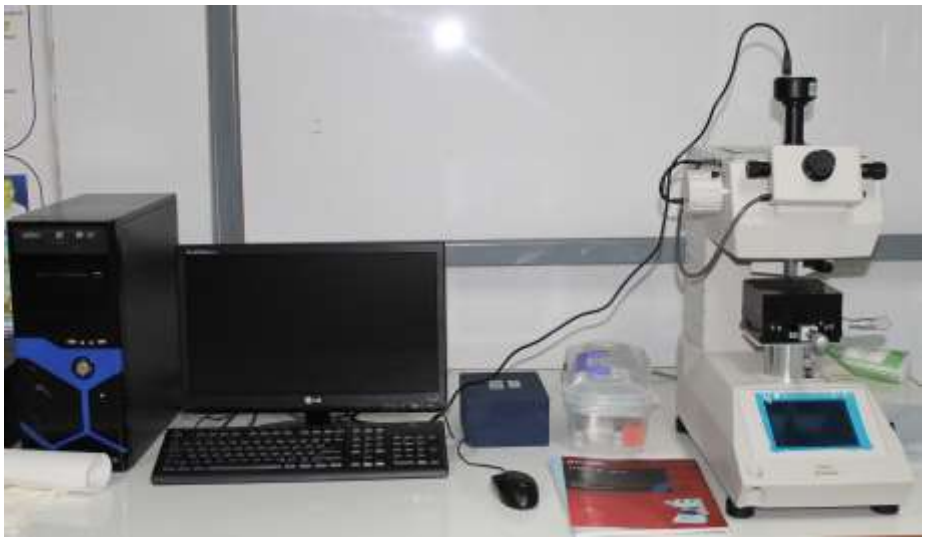
ความแข็งระดับจุลภาพแบบวิกเกอร์สามารถวัดได้ด้วยเครื่อง Hardness Micro Vickers (HMV) รุ่น HMV-2 บริษัท Shimadzu เราทำการวัด 10 ครั้งแล้วหาค่าเฉลี่ย แสดงดังภาพที่ 3.7

ความหนาแน่นแบบวิกเกอร์หาค่าได้จากสมการ (3.10) ใช้น้ำหนักกดลงบนผิวสารตัวอย่างและหาความยาวของเส้นทแยงมุมของรอยกด

$$HV = 0.1891\frac{F}{d^2} \tag{3.12}$$

เมื่อ F คือ น้ำหนักที่ใช้ทดสอบ (N)

d คือ ค่าเฉลี่ยของเส้นทแยงมุมของรอยกด (mm)



ภาพที่ 3.7 เครื่องวัดความแข็ง

3.8 การวัดสมบัติผันไฟฟ้าจากความร้อน

สมบัติผันไฟฟ้าจากความร้อนประกอบด้วยสภาพนำไฟฟ้า สัมประสิทธิ์ซีเบค และสภาพนำความร้อนทำการวัดโดยใช้เครื่องที่สร้างขึ้นโดยนักวิจัยของศูนย์วิจัยเทอร์โมอิเล็กทริกแสดงดังภาพที่ 3.8

ภาพที่ 3.8 เครื่องวัดสัมประสิทธิ์ซีเบคและสภาพต้านทานไฟฟ้า

3.8.1 หลักการวัดสัมประสิทธิ์ซีเบค

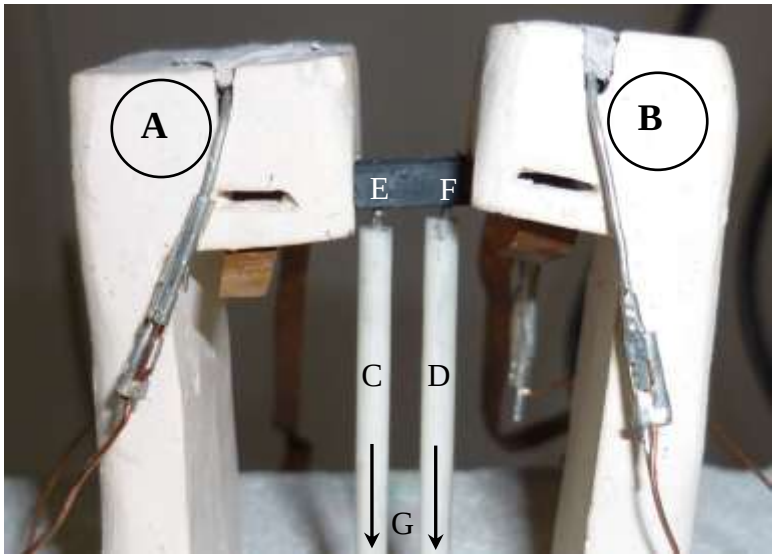
เมื่อฮีตเตอร์ A ทำงานในขณะที่ B ไม่ทำงาน จะทำให้เกิดผลต่างอุณหภูมิขึ้นที่จุด E และ F เทอร์โมคัปเปิล C จะวัดอุณหภูมิที่จุด E โดยอุปกรณ์หมายเลข 3 ในขณะที่เทอร์โมคัปเปิล D จะวัดอุณหภูมิที่จุด F โดยอุปกรณ์หมายเลข 4 เมื่อมีผลต่างอุณหภูมิจะเกิดความต่างศักย์ไฟฟ้าจากปรากฏการณ์ซีเบค ซึ่งจะวัดจากจุด G แสดงดังภาพที่ 3.9

ค่าสัมประสิทธิ์ซีเบคนิยามว่า เป็นอัตราส่วนของผลต่างของความต่างศักย์ (ΔV) กับผลต่างของอุณหภูมิ (ΔT) ดังสมการ (3.13)

$$S = \frac{\Delta V}{\Delta T} \tag{3.13}$$

เมื่อ ΔT คือ ผลต่างอุณหภูมิที่จุด E และ F

ΔV คือ ความต่างศักย์ที่จุด E และ F ซึ่งวัดที่จุด G



ภาพที่ 3.9 การวัดสัมประสิทธิ์ซีเบค

3.8.2 หลักการวัดสภาพต้านทานไฟฟ้า

เริ่มจากการจ่ายกระแสไฟฟ้า I ตั้งฉากกับพื้นที่หน้าตัด A ($A = xz$) ของตัวนำไฟฟ้าของสารตัวอย่าง แล้วใช้โวลต์มิเตอร์ V วัดความต่างศักย์ระหว่างจุด 2 จุดซึ่งห่างกัน จะได้ค่าความต่างศักย์ไฟฟ้า V และกระแสไฟฟ้า I แสดงดังภาพที่ 3.10 ซึ่งจะหาความต้านทานไฟฟ้าได้โดยใช้กฎของโอห์ม (Ohm'& Law)

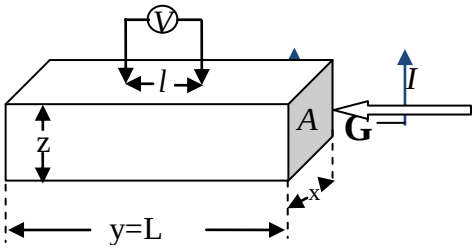
$$R = \frac{V}{I} = \frac{L}{\sigma A} \tag{3.14}$$

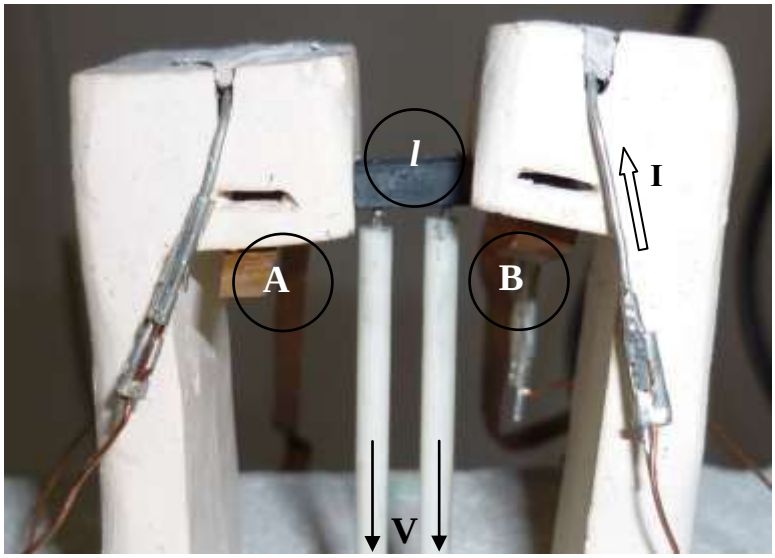
แทนค่า A ลงในสมการ (3.14) จะได้

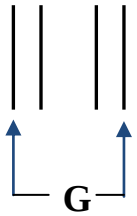
$$\frac{V}{I} = \frac{l}{\sigma(xz)} \tag{3.15}$$

$$\sigma = \frac{lI}{V(xz)} \tag{3.16}$$

เมื่อ σ คือ สภาพนำไฟฟ้า





ภาพที่ 3.10 การวัดสภาพต้านทานไฟฟ้า

สภาพนำไฟฟ้าของตัวนำของสารตัวอย่างเป็นสัดส่วนโดยตรงกับกระแสไฟฟ้าและความยาว l ระหว่างปลายทั้งสองของหัววัดของโวลต์มิเตอร์และเป็นสัดส่วนผกผันกับความต่างศักย์ และพื้นที่หน้าตัดของตัวนำของสารตัวอย่าง ดังนั้นเราสามารถหาสภาพต้านทานไฟฟ้าได้จากสัดส่วนผกผันกับสภาพนำไฟฟ้านั่นเอง