บทที่ 5

สรุปผลและข้อเสนอแนะ

5.1 สรุปผลการวิจัย

5.1.1 การคำนวณโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์

5.1.1.1 คลัสเตอร์โมเดลอะตอม $Pb_{13}Te_{14}$

คลัสเตอร์โมเดลอะตอม $Pb_{13}Te_{14}$ ออกแบบด้วยโปรแกรม DV-Xα ประกอบด้วยอะตอม Te และ อะตอม Pb มีโครงสร้างผลึกจัดเรียงตัวแบบ Face Centered Cubic ซึ่งหน่วยเซลล์ประกอบด้วยอะตอมอยู่ตรงมุมในลักษณะที่ใช้ร่วมกับหน่วยเซลล์อื่น และอีก 6 อะตอม จะอยู่กึ่งกลางของผิวทั้งหกด้าน

5.1.1.2 ระดับพลังงานของคลัสเตอร์โมเดลอะตอม $Pb_{13}Te_{14}$

คลัสเตอร์โมเดลอะตอมของ $Pb_{13}Te_{14}$ มีการจัดเรียงระดับพลังงานเป็น Pb5d, Pb6s, Pb6p, Te4d, Te5s และ Te5p มีช่องว่างพลังงานจะมีค่าเท่ากับ 2.28 eV เนื่องจากมีพลังงานสูงสุดของแถบเวเลนจ์เป็น –0.16 eV และพลังงานต่ำสุดของแถบนำเป็น 2.11 eV และพลังงานเฟอร์มิมีค่าเป็น 0.97 eV

5.1.1.3 ความหนาแน่นสถานะของคลัสเตอร์โมเดลอะตอม $Pb_{13}Te_{14}$

คลัสเตอร์โมเดลอะตอม $Pb_{13}Te_{14}$ มีความหนาแน่นสถานะสูงสุดในระดับพลังงานที่ต่ำกว่า 0 นั้นคือมีความหนาแน่นสถานะของอิเล็กตรอนมากกว่าโฮล ลักษณะนี้จึงแสดงสมบัติเป็นวัสดุผันไฟฟ้าจากความร้อนชนิด n

5.1.1.4 คอนทัวร์แม็พของคลัสเตอร์โมเดลอะตอม $Pb_{13}Te_{14}$

คอนทัวร์แม็พของคลัสเตอร์โมเดลอะตอม Pb_4Te_4 แสดงฟังก์ชันคลื่นในออร์บิทัลต่าง ๆ และมีลักษณะแตกต่างกันตามการจัดเรียงอิเล็กตรอนในออร์บิทัล และแสดงเป็นรูปวงกลมเนื่องจากอิเล็กตรอนเคลื่อนที่รอบนิวเคลียส เส้นนอกสุดจะเป็นอิเล็กตรอนอิสระ

5.1.1.5 ฟังก์ชันคลื่นของคลัสเตอร์โมเดลอะตอม Pb_4Te_4

ฟังก์ชันคลื่นของคลัสเตอร์โมเดลอะตอม Pb_4Te_4 เป็นความสัมพันธ์ระหว่างอะตอม Pb และ Te เพื่อบอกลักษณะการยึดเหนี่ยวระหว่างอะตอม ความสมดุลของการออกแบบโครงสร้างอะตอมที่ได้ และระดับพลังงานของอิเล็กตรอน

5.1.2 การคำนวณสมบัติเชิงกลของเลดเทลลูไลด์

แลตทิซพารามิเตอร์และ Bulk modulus ของเลดซัลไฟด์ เลดเซลิไนด์ เลดเทลลูไลด์ และแคดเมียมเทลลูไลด์มีค่าสอดคล้องกับผลการทดลองของ J. E. Ni et al. (exp.) และ F. Ren et al อย่างดีเยี่ยม ที่ปริมาตรและความดันคงตัวมีค่า Bulk modulus ลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น ส่วน Shear modulus และ Young's modulus มีค่าลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น สอดคล้องอย่างดีเยี่ยมกับข้อมูลการทดลอง

5.1.3 การคำนวณสมบัติเชิงความร้อนของเลดเทลลูไลด์

5.1.3.1 การออกแบบคลัสเตอร์อะตอมขนาดใหญ่

โครงสร้างเรขาคณิตคลัสเตอร์อะตอมของเลดซัลไฟด์ เลดเซลิไนด์ เลดเทลลูไลด์ และแคดเมียมเทลลูไลด์ออกแบบโดยใช้วิธีพลศาสตร์โมเลกุล ประกอบด้วย anions-256 และ cations-256 หรือเรียกว่า Supper lattice มีขนาด $4 \times 4 \times 4$ เท่าของหน่วยเซลล์ ซึ่งมีไอออนของ Pb^{2+}, Cd^{2+}, S^{2-} Se^{2-} และ Te^{2-} ที่อุณหภูมิสูงหน่วยเซลล์ของสารเหล่านี้แสดง Bredig transition เนื่องจากเป็นพันธะแบบโคเวเลนจ์และมีการสั้นน้อยมาก

5.1.3.2 การขยายตัวเชิงเส้นเนื่องจากความร้อน

ในช่วงอุณหภูมิ 300-600 K สภาพอัดได้ของเลดซัลไฟด์ เลดเซลิไนด์ เลดเทลลูไลด์ และแคดเมียมเทลลูไลด์มีค่าคงตัว และในช่วงอุณหภูมิ 600-700 K มีค่าเพิ่มขึ้นเล็กน้อย ทำให้การขยายตัวเชิงเส้นเนื่องจากความร้อนมีแนวโน้มเพิ่มขึ้นและสอดคล้องกับการทดลองอย่างดีเยี่ยม อย่างไรก็ตามการขยายตัวเชิงเส้นเนื่องจากความร้อนสารประกอบเลดเทลลูไลด์ขึ้นอยู่กับรูปร่างของศักย์ระหว่างอะตอม

5.1.3.3 ความจุความร้อน

ในช่วงอุณหภูมิ 300-500 K ความจุความร้อนของเลดซัลไฟด์ เลดเซลิไนด์ เลดเทลลูไลด์ และแคดเมียมเทลลูไลด์ที่ความดันดันคงตัวมีค่าสอดคล้องกับรายงานของ Y. Bencherif et al. (2011) ซึ่งการวัดความจุความร้อนอาศัยพาหะที่มีอุณหภูมิสูงกว่าอุณหภูมิเดเบรย อย่างไรก็ตามความจุความร้อนเป็นสมบัติทางกายภาพที่แสดงพฤติกรรมผิดปกติในบริเวณการเปลี่ยนเฟส

5.1.3.4 สภาพนำความร้อน

สารประกอบเลดซัลไฟด์ เลดเซลิไนด์ เลดเทลลูไลด์ และแคดเมียมเทลลูไลด์มีค่าสภาพนำความร้อนเนื่องจากแลตทิซหรือโฟนอน $\kappa_L(T)$ ลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น เป็นการทำปฏิกิริยาระหว่างโฟนอนกับโฟนอน (Umklapp process) ที่อุณหภูมิสูง ในทางทฤษฎีเราสามารถคำนวณหาสภาพนำความร้อนเนื่องจากโฟนอนได้จากความสัมพันธ์ของ $\kappa_L = \frac{1}{3} C_l v_s l_l$ และสภาพนำความร้อนของก้อนผลึกคำนวณได้จากความสัมพันธ์ $e^{\Theta_D / bT}$

5.1.3.5 สภาพนำไฟฟ้า

สภาพนำไฟฟ้าของเลดซัลไฟด์ เลดเซลิไนด์ เลดเทลลูไลด์ และแคดเมียมเทลลูไลด์มีค่าลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น แสดงให้เห็นว่าสารประกอบเหล่านี้มีพฤติกรรมเป็นสารกึ่งตัวนำ

5.1.4 การวิเคราะห์โครงสร้างผลึก

สารประกอบเลดเทลลูไลด์มีโครงสร้างผลึกเป็นแบบลูกบาศก์สอดคล้องกับ PDF#781905

5.1.5 การวัดความหนาแน่นและความแข็งแบบวิกเกอร์ของเลดเทลลูไลด์

เลดเทลลูไลด์มีความหนาแน่นเฉลี่ยเป็น 8.12 g/cm^3 และความแข็งแบบวิกเกอร์เฉลี่ยเป็น 35.36 HV

5.1.6 การวัดสมบัติเชิงการผันไฟฟ้าจากความร้อนของเลดเทลลูไลด์

5.1.6.1 สภาพต้านทานไฟฟ้า

เลดเทลลูไลด์มีสภาพต้านทานไฟฟ้าเท่ากับ 3.1 mΩ-cm ที่อุณหภูมิห้อง และมีแนวแนวโน้มเพิ่มขึ้นเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นสอดคล้องกับรายงานของ Y.L. Pei *et al*. (2012) เพราะว่าเลดเทลลูไลด์แสดงพฤติกรรมเป็นฉนวนที่อุณหภูมิสูง

5.1.6.2 สัมประสิทธิ์ซีเบค

เลดเทลลูไลด์มีสัมประสิทธิ์ซีเบคเท่ากับ –194.85 μV K^{-1} ที่อุณหภูมิห้อง และมีแนวแนวโน้มลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นสอดคล้องกับรายงานของ Y.L. Pei *et al*. (2012) และค่าสัมประสิทธิ์ซีเบคเป็นลบแสดงให้เห็นว่าเลดเทลลูไลด์เป็นสารกึ่งตัวนำชนิด n

5.1.6.3 สภาพนำความร้อน

เลดเทลลูไลด์มีสภาพนำความร้อนของเท่ากับ 0.49 W m^{-1} K^{-1} ที่อุณหภูมิห้อง และมีแนวแนวโน้มเพิ่มขึ้นเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นสอดคล้องกับสัมประสิทธิ์ซีเบค และมีค่ามากกว่ารายงานของ Y.L. Pei *et al*. (2012)

5.1.6.4 ไดเมนชันเลสฟิเกอร์ออฟเมริท

เลดเทลลูไลด์มีไดเมนชันเลสฟิเกอร์ออฟเมริทของเลดเทลลูไลด์เท่ากับ 2.50×10^{-4} ที่อุณหภูมิห้อง มีแนวแนวโน้มลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น และมีค่าน้อยกว่ารายงานของ Y.L. Pei *et al*. (2012) เพราะสภาพนำความร้อนมีค่าสูงขึ้น

5.2 ข้อเสนอแนะ

5.2.1 ถ้าต้องการความถูกต้องแม่นยำของการคำนวณโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ของเลดเทลลูไลด์ เราต้องทราบถึงสมบัติของธาตุนั้น ๆ ก่อน เช่นความหนาแน่น จุดเดือด จุดหลอมเหลว Space group number และแลตทิตพารามิเตอร์ เป็นต้น ที่สำคัญควรคำนวณหลาย ๆ รอบด้วยคอมพิวเตอร์ความเร็วสูง

5.2.2 ถ้าต้องการทำนายสมบัติเชิงความร้อนของเลดเทลลูไลด์ให้สอดคล้องกับผลการทดลอง ควรออกแบบคลัสเตอร์อะตอมให้สมมาตรและมีขนาดมากว่า 4×4×4 เท่าของหน่วยเซลล์

5.2.3 ในวัดสมบัติผันไฟฟ้าจากความร้อนของเลดเทลลูไลด์ควรทำการวัดในบรรยากาศแก๊สเฉื่อยเพื่อลดการทำปฏิกิริยาของแก๊สออกซิเจน