

บทที่ 7 สรุปและวิจารณ์

ในวิทยานันท์ฉบับนี้ได้รวบรวมและวิเคราะห์ผลการวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการเกิดเดตรา โคนอล ดิสทอร์ชัน ซึ่งเป็นผลงานที่มีตีพิมพ์ในวารสารต่างๆ และยังไม่มีการรวมเป็นรูปเล่ม ในผลงานเหล่านี้ประกอบด้วยการอธิบายทั้งในแบบของนักเคมีและนักฟิสิกส์

การอธิบายสมบัติของสสารแบบนักเคมีมักอธิบายโดยใช้ทฤษฎีพันธะเคมี ซึ่งแบ่งชนิดของพันธะที่เชื่อมอะตอมเข้าด้วยกันเป็นแบบไอออนิก แบบโควาเลนต์ แบบโลหะ โดยใช้ค่าอิเล็กโตรเนกาติวิตีในการพิจารณา สมบัติต่างๆของสสารจึงขึ้นกับค่าอิเล็กโตรเนกาติวิตีของธาตุที่เป็นองค์ประกอบ ตัวอย่างการอธิบายสมบัติของสสารแบบนักเคมีเช่น การจำแนกสารประกอบไบนารีตามลักษณะโครงสร้างผลึกของโมเชอร์และเบียร์สัน โดยใช้เลขควอนตัมเฉลี่ยและผลต่างของค่าอิเล็กโตรเนกาติวิตีของธาตุที่เป็นองค์ประกอบ ทำให้ทราบว่า สารที่ประกอบด้วยอะตอมคู่ที่มีค่าอิเล็กโตรเนกาติวิตี หรือค่าเลขควอนตัมเฉลี่ยต่างกันจะมีโครงสร้างผลึกต่างกัน การอธิบายโดยใช้ทฤษฎีพันธะเคมี ทำให้เรามองเห็นได้ว่า ลักษณะการจัดตัวของอะตอมเป็นโครงสร้างผลึกแบบต่างๆ เกิดขึ้นได้อย่างไร

การอธิบายสมบัติของสสารตามแบบของนักฟิสิกส์ มักอธิบายสมบัติต่างๆ ของสสารในลักษณะของแถบพลังงาน มีการแบ่งสสารตามความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานเป็นตัวนำ (โลหะ) สารกึ่งตัวนำ และฉนวน พลังงานของอิเล็กตรอนในผลึกมีค่าอยู่ในระดับอิเล็กตรอนโวลต์ การคำนวณระดับพลังงานของอิเล็กตรอนโดยใช้ทฤษฎีแถบพลังงานตามวิธีของนักฟิสิกส์ ทำให้ได้ค่าพลังงานที่ค่อนข้างละเอียดถูกต้อง แต่ไม่สามารถอธิบายการจัดตัวของอะตอมเกิดเป็นโครงสร้างผลึกแบบต่างๆได้

การอธิบายสมบัติของสสารตามแบบของนักเคมีและนักฟิสิกส์ต่างก็มีข้อดีและข้อเสียด้วยกันทั้งคู่ ดังนั้นถ้าเราสามารถรวมวิธีการอธิบายสมบัติของสาร ทั้ง 2 แบบเข้าด้วยกัน จะทำให้การอธิบายสมบัติของสาร ได้ดีขึ้น

ฟิลลิปส์ได้รวมแนวความคิดในการอธิบายสมบัติของสสารแบบนักเคมีและนักฟิสิกส์เข้าด้วยกัน โดยการนิยามค่าความกว้างของแถบช่องว่างพลังงานที่เกิดจากการสร้างพันธะโควาเลนต์ (E_k) และค่าความกว้างของแถบช่องว่างพลังงานที่เกิดจากการสร้างพันธะไอออนิก (C) ตามสมการ (4.2.1), (4.2.6) และ (4.2.8) และใช้ในการจำแนกโครงสร้างผลึกของสารประกอบไบนารี ปรากฏว่า ได้ผลดีกว่าการจำแนกโดยใช้วิธีของนักเคมี แต่เพียงอย่างเดียว ทั้งนี้เพราะว่า เมื่อหาความสัมพันธ์ระหว่างส่วนกลับของความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานที่เกิดจากการสร้างพันธะโควาเลนต์ ($1/E_k$) และความกว้างของ

ช่องว่างแถบพลังงานที่เกิดจากการสร้างพันธะ ไอออนิก (C) กับค่าเลขควอนตัมเฉลี่ย (\bar{n}) และผลต่างของค่าอิเล็กโตรเนกาติวิตีของพอลิง (ΔX) บ่งชี้ว่า ได้ความสัมพันธ์เป็นเชิงเส้นตรง แต่การอธิบายโดยใช้ค่าความกว้างของแถบช่องว่างพลังงานมีข้อดีตรงที่ให้ความละเอียดถูกต้องมากกว่า ทำให้สามารถจำแนกโครงสร้างผลึกได้ถูกต้องชัดเจนมากกว่า

ในกรณีของการศึกษาโครงสร้างผลึกของสารประกอบโบนารี ผลจากการศึกษาระดับพลังงานของอิเล็กตรอนในอะตอม ทำให้พบว่ารัศมีวงโคจรของอิเล็กตรอนในอะตอมเดียวกันที่เลขโมเมนตัมเชิงมุมต่างกันจะต่างกัน และในอะตอมต่างชนิดกันรัศมีวงโคจรของอิเล็กตรอนที่มีเลขโมเมนตัมเชิงมุมต่างกันก็จะต่างกันด้วย มีการนำรัศมีวงโคจรซึ่งเป็นสมบัติเฉพาะตัวของอะตอมไปใช้ในการจำแนกโครงสร้างผลึก โดยการนิยามค่า R_p และ R_s ตามสมการ (4.7.1), (4.7.2) ซึ่งปรากฏว่า ได้ผลดีกว่าวิธีการของฟิลลิปส์ ดังในรูปที่ 4.4 รูปที่ 4.6 และ รูปที่ 4.11 ในบทที่ 4 เทคนิคในการคำนวณค่ารัศมีวงโคจรของอิเล็กตรอนก็ได้มีการปรับปรุงให้มีความละเอียดถูกต้องมากขึ้น วิลลาร์สได้พยายามใช้พารามิเตอร์ที่เกิดจากการนำสมบัติต่างๆ ของอะตอมมาบวก ลบ คูณ หารกัน ทำให้สามารถจำแนกโครงสร้างผลึกของสารประกอบโบนารี 3046 ชนิด ได้ถูกต้องถึง 97 % และเมื่อขยายไปใช้ในกรณีของสารประกอบเทอร์นารี ก็ประสบปัญหาที่เกิดจากข้อมูลที่มีอยู่มีจำนวนน้อย และรูปแบบของโครงสร้างผลึกที่มีอยู่มากมาย ทำให้ทำนายได้เฉพาะการเกิดของสารประกอบเทอร์นารีเท่านั้น

เมื่อนำเอาวิธีของวิลลาร์สมาใช้ในการศึกษาการเกิดเตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน โดยการลองเขียนกราฟระหว่าง $2-c/a$ กับพารามิเตอร์ที่เป็นฟังก์ชันของสมบัติของอะตอมที่เป็นองค์ประกอบ เช่นค่าพลังงานไอออนไนเซชัน ($I_A - I_B$) รัศมีวงโคจรของไฮมอนส-

$$\frac{I_A}{I_B}$$

 บล็อก ($\frac{R_p(A) - R_p(B)}{R_p(C)}$), $R_p(A) + R_p(B) + R_p(C)$ และลองใช้รัศมีวงโคจรของซุงเกอร์

ปรากฏว่า กราฟระหว่าง $2-c/a$ และ $\frac{R_p(A) - R_p(B)}{R_p(C)}$ ซึ่งใช้รัศมีของซุงเกอร์ดังรูปที่ 6.3

ในบทที่ 6 ให้ความสัมพันธ์ที่ดีที่สุด เมื่อลองเขียนกราฟระหว่าง $2-c/a$ กับ $\frac{r_s(A) - r_s(B)}{r_s(C)}$

ปรากฏว่า กราฟที่ได้มีการกระจายมากกว่า กราฟระหว่าง $2-c/a$ กับ $\frac{R_p(A) - R_p(B)}{R_p(C)}$

ทั้งนี้เพราะว่า R_p ได้รวมเอาผลที่เกิดจากการมีอิเล็กตรอนในวงโคจร p เข้าไปด้วย จากการศึกษาลักษณะแถบพลังงานของสารประกอบที่มีโครงสร้างผลึกแบบซิงค์เบลนด์ กับแบบซาลโคไฟไรต์ ซึ่งเป็นการศึกษาเปรียบเทียบระหว่างสารประกอบโบนารี และสารประกอบ

เทอร์นารีที่สมมูลกัน ดังในบทที่ 5 ปรากฏว่า สารประกอบซาลโคไพไรท์จะมีความกว้างของแถบช่องว่างพลังงานแคบกว่าสารประกอบซิงค์เบลนด์ที่สมมูลกัน ทั้งนี้เป็นเพราะ ในสารประกอบซาลโคไพไรท์มีอิเล็กตรอนในชั้นพลังงาน d อยู่ด้วย โดยมีอัตราส่วนดังตารางที่ 6.1 ในบทที่ 6 พารามิเตอร์ที่ใช้ในการอธิบายการเปลี่ยนแปลงของเตตระโกนอลดิสทอร์ชัน $2-c/a$ จึงควรรวมผลเนื่องจากอิเล็กตรอนในวงโคจร d นี้เข้าไปด้วย โดยอาศัยความสัมพันธ์ของชอกท์และสิงห์ในสมการ (6.3.1) - (6.3.2) ทำให้คำนวณค่า $R_L(A) - R_L(B)$ ซึ่งเป็นค่าผลต่างของค่าอิเล็กโตรเนกติวิตีได้ดังตารางที่ 6.2 ในบทที่ 6 ซึ่ง

$$R_L(C)$$

เมื่อเขียนกราฟระหว่าง $2-c/a$ กับ $\frac{R_L(A) - R_L(B)}{R_L(C)}$ ที่คิดผลจากอิเล็กตรอนในวงโคจร d

ด้วยปรากฏว่า กราฟที่ได้ไม่ได้ต่างไปจากกรณีที่ไม่คิดผลจากอิเล็กตรอนในวงโคจร d (ดังรูปที่ 6.3 ในบทที่ 6) มากนัก นอกจากนี้ยังปรากฏว่า ในกราฟที่ได้กราฟของสารประกอบซาลโคไพไรท์กลุ่ม I-III-VI₂ และกลุ่ม II-IV-V₂ จะแยกออกจากกัน และเมื่อพิจารณาในแต่ละกลุ่มยังพบว่ามีการแบ่งเป็นกลุ่มย่อยๆ ต่อไปได้อีก

ในทฤษฎีซีทีบีได้มีการหาความสัมพันธ์ระหว่าง $2-c/a$ กับฟังก์ชันของรัศมีของอะตอมในขณะสร้างพันธะแบบเตตระฮีดรอล (ρ) ดังนิยามไว้ในสมการ (6.4.5) , (6.4.10) ความสัมพันธ์ที่ได้เป็นความสัมพันธ์เชิงเส้นตรงดังรูปที่ 6.4 ในบทที่ 6 ผลการทำนายจากทฤษฎีนี้และผลการทดลองยังมีความแตกต่างกัน และเมื่อศึกษาความสัมพันธ์ระหว่าง ρ และ $[R_L(A) - R_L(B)]/R_L(C)$ ดังรูปที่ 6.7 ในบทที่ 6 ปรากฏว่า ความสัมพันธ์ที่ได้มีลักษณะเป็นเส้นตรง แสดงว่า ρ เป็นปริมาณโดยตรงกับผลต่างของค่าอิเล็กโตรเนกติวิตีของอะตอม A และอะตอม B เทียบกับอะตอม C เช่นกัน การพยายามที่จะพัฒนาความสัมพันธ์ที่อธิบายการเปลี่ยนแปลงของค่า $2-c/a$ จากทฤษฎีซีทีบีให้อยู่ในรูปความสัมพันธ์ระหว่าง $2-c/a$ กับ $[R_L(A) - R_L(B)]/R_L(C)$ ซึ่งให้ความสัมพันธ์ดังรูปที่ 6.7 และรูปที่ 6.8 ในบทที่ 6 ไม่ได้ให้ผลดีขึ้นดังที่คาดไว้

ผลการหาความสัมพันธ์ระหว่าง ρ และ $[R_L(A) - R_L(B)]/R_L(C)$ ทำให้ทราบว่า ผลจากทฤษฎีซีทีบีจะทำนายความสัมพันธ์ของ $2-c/a$ กับ $[R_L(A) - R_L(B)]/R_L(C)$ ได้ในรูปเส้นตรงดังรูปที่ 6.8 ในบทที่ 6 ค่า $2-c/a$ ที่ทำนายได้ดังกล่าวเป็นค่าเฉลี่ยระหว่างกลุ่ม I-III-VI₂ และกลุ่ม II-IV-V₂ ดังนั้นทฤษฎีซีทีบีจึงไม่สามารถบอกความแตกต่างของเตตระโกนอลดิสทอร์ชันของสารทั้ง 2 กลุ่มได้ ในขณะที่การเขียนกราฟหาความสัมพันธ์ของเตตระโกนอลดิสทอร์ชัน ตามวิธีของวิลลาร์สที่เราใช้สามารถบอกความแตกต่างนี้ได้ นอกจากนี้ยังทำให้พบว่า ความสัมพันธ์ของเตตระโกนอลดิสทอร์ชัน $2-c/a$ กับ $[R_L(A) - R_L(B)]/R_L(C)$ ของแต่ละกลุ่มย่อยยังแตกต่างกันด้วย