

สรุปและวิจารณ์ผลการทดลอง

เนื่องจากสารทั้งสี่ตัวนำทั้ง 4 สาร ได้มีนักวิทยาศาสตร์และบุคคลอื่น ๆ เคยทำการศึกษาค่าคงที่แลตทิซ a และ c มาแล้ว เมื่อนำมาเปรียบเทียบกับค่าคงที่แลตทิซ a และ c ที่ได้จากการทดลองในครั้งนี้ พบว่ามีค่าใกล้เคียงกัน ดังแสดงในตารางที่ 5.1

ตารางที่ 5.1 แสดงค่าคงที่แลตทิซ a และ c ของสาร AgGaTe_2 , AgInSe_2 , AgInTe_2 และ CuInTe_2 ที่ได้จากการทดลองในครั้งนี้ เปรียบเทียบกับค่าที่ได้จากการทดลองของนักวิทยาศาสตร์และบุคคลอื่น ๆ (2, 8, 30)

ชื่อสาร	a(Å)	c(Å)	ผู้ทำการทดลอง
AgGaTe_2	6.301	11.96	ชานห์และคณะ สตันซ์และคณะ ธงชัย พันธุ์เมธาฤทธิ จากการทดลองในครั้งนี้
	6.29	11.95	
	6.3260	11.9937	
	6.3184(2)	11.9841(7)	
AgInSe_2	6.092	11.64	เลอร์เนอร์ ชานห์และคณะ บอยคและคณะ สเปียร์และคณะ โกรยูโนวา จากการทดลองในครั้งนี้
	6.102	11.69	
	6.0913	11.7122	
	6.109(1)	11.717(5)	
	6.09	11.69	
	6.1087(3)	11.7063(6)	
AgInTe_2	6.40	12.54	โกรยูโนวา ชานห์และคณะ วูลเลย์และวิลเลียม จากการทดลองในครั้งนี้
	6.419	12.58	
	6.446	12.634	
	6.4571(6)	12.652(3)	
CuInTe_2	6.179	12.36	ชานห์และคณะ โกรยูโนวา จากการทดลองในครั้งนี้
	6.16	12.32	
	6.2078(6)	12.395(1)	

ในการปรับโครงสร้างของผลึกนั้นเกิดมีปัญหาคือว่า ผลึกผงที่ถ่ายจากกล้องกีเนียร์ - เฮกส์และเครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์ จะให้จำนวนจุดสะท้อน hkl ออกมาประมาณ 15 - 35 จุดเป็นอย่างมาก จึงไม่เหมาะในการทำวิลสันพลอต (Wilson plot) และแผนภาพความหนาแน่นอิเล็กตรอน ดังนั้นค่าแฟกเตอร์สเกล (k) และค่าพารามิเตอร์อุณหภูมิแบบไอโซทรอปิก B_{iso}^{over} ก่อนปรับโครงสร้างจึงกำหนดค่าเป็น 1.00 และ 2.00 ตามลำดับเท่ากันทุกสาร ส่วนตำแหน่งของอะตอมกลุ่ม VI หรือค่า x จะใช้ค่าที่คำนวณได้จาก CTB บวกเงื่อนไข $\eta = \eta_{expt}$ แต่ปัญหาที่ตามมาอีกก็คือว่าในการคำนวณหาค่า x จากทฤษฎี CTB บวกเงื่อนไข $\eta = \eta_{expt}$ จะใช้ค่ารัศมีอะตอมตามแบบของแซนนอน - ฟรีวิทท์, พอลิงหรือตามแบบของแวน เวกซ์เทินและฟิลลิปส์ ดังแสดงผลการคำนวณไว้ในตารางที่ 5.2 ซึ่งพบว่ารัศมีตามแบบของแวน เวกซ์เทินและฟิลลิปส์นั้น ถ้า $R_{AC} = R_{BC}$ แล้วจะไม่สามารถคำนวณหาค่า a และ x ได้ เมื่อเปรียบเทียบค่า η , a และ x พบว่าค่าที่คำนวณโดยใช้รัศมีพอลิง จะให้ค่าอยู่ในช่วงระหว่างกลาง ๆ ของทั้ง 3 แบบ ดังนั้นในการศึกษาวิจัยครั้งนี้จึงตัดสินใจเลือกใช้รัศมีพอลิงในการคำนวณหาค่า เหมือนกับที่จาฟเฟอและซุงเกอร์ใช้

ส่วนผลึกเดี่ยว $AgGaTe_2$ และ $AgInSe_2$ นั้น จำนวนจุดสะท้อน hkl ทั้งหมดที่วัดได้จากภาพถ่ายไวซ์เซนเบอร์กรวม 130 จุดและ 106 จุดตามลำดับ ดังนั้นค่า k และ B_{iso}^{over} จะหาได้จากการทำวิลสันพลอต ส่วนค่า x จะหาได้จากแผนภาพความหนาแน่นอิเล็กตรอน อย่างไรก็ตามก็ได้ใช้ค่า x ตั้งต้นจากทฤษฎี CTB บวกเงื่อนไข $\eta = \eta_{expt}$ ด้วย ทั้งนี้เพื่อเปรียบเทียบว่าหลังจากปรับโครงสร้างแล้วจะให้ผลแตกต่างกันอย่างไร ผลจากการปรับโครงสร้างดังแสดงในตารางที่ 5.3

นอกจากนี้แล้วค่า x (หรือ u) ที่คำนวณจากสูตรของอับบราฮัมและเบิร์นส์ไตน์ที่เสนอไว้แต่แรกตามสมการที่ (2.4) นั่นคือ

$$u = u_{tet}(\eta) = \frac{1}{2} - \frac{1}{4}(2\eta^2 - 1)^{\frac{1}{2}} \quad (5.1)$$

ใช้ได้ไม่ค่อยดีกับสารประกอบสาม $A^I B^{III} C_2^{VI}$ ดังได้กล่าวมาแล้ว ต่อมาอับบราฮัมและเบิร์นส์ไตน์(9)ได้เสนอว่า ถ้าจะให้ค่า u ที่คำนวณตามสมการที่ (5.1)

ตารางที่ 5.2 แสดงผลการคำนวณ η , a และ x ตามทฤษฎี CTB บวกเงื่อนไข $\eta = \eta_{\text{expt}}$ ของสาร AgGaTe_2 , AgInSe_2 , AgInTe_2 และ CuInTe_2 โดยใช้ค่ารัศมีตามแบบของเซนต์นอน - พรวิทท์, พอลิงและทิลลิปส์

ทฤษฎีที่ใช้คำนวณ	ชื่อสาร	รัศมีของเซนต์นอน - พรวิทท์	รัศมีพอลิง	รัศมีแวน เวกซ์เพนและทิลลิปส์
CTB บวกเงื่อนไข $\eta = \eta_{\text{expt}}$	AgGaTe_2	$\eta = 0.948$	$\eta = 0.948$	$\eta = 0.948$
		$a = 6.601$	$a = 6.299$	$a = 6.383$
		$x = 0.294$	$x = 0.285$	$x = 0.274$
	AgInSe_2	$\eta = 0.958$	$\eta = 0.958$	$\eta = 0.958$
		$a = 6.276$	$a = 6.134$	$a = 0$
		$x = 0.271$	$x = 0.261$	$x = \text{หาค่าไม่ได้}$
	AgInTe_2	$\eta = 0.980$	$\eta = 0.980$	$\eta = 0.980$
		$a = 6.767$	$a = 6.509$	$a = 0$
		$x = 0.270$	$x = 0.261$	$x = \text{หาค่าไม่ได้}$
	CuInTe_2	$\eta = 0.998$	$\eta = 0.998$	$\eta = 0.988$
		$a = 6.397$	$a = 6.272$	$a = 6.278$
		$x = 0.232$	$x = 0.238$	$x = 0.225$

ตารางที่ 5.3 แสดงผลการปรับโครงสร้างของหลัก AgGaTe₂, AgInSe₂, AgInTe₂ และ CuInTe₂
 หมายถึง * เป็นค่าที่ยังไม่ได้ทำการปรับค่าพารามิเตอร์อัญมณี

ชื่อสาร	ค่าตั้งต้น			ผลการปรับโครงสร้าง							เครื่องมือที่ใช้
	k	B _{Iso}	x	x*	R*	x	B _{Iso}	k	R	จำนวนจุด	
AgGaTe ₂	1.00	2.00	0.285 (จากทฤษฎี)	0.273(3)	0.100	0.273(2)	0.7(5)	4.502	0.077	24	กีเบียร์ - เขก
	1.00	2.00	0.285 (จากทฤษฎี)	0.254(7)	0.166	0.261(9)	1.3(4)	0.242	0.119	31	
	1.07							1.491			
	1.07	1.54	0.253 (จากทดลอง)	0.2771(5)	0.105	0.2771(5)	1.7(1)	2.263	0.106	130	
1.07							2.140			ไวซ์เซนเบอร์ก	
1.07							2.374				
1.07	1.54	0.285 (จากทฤษฎี)	0.2771(5)	0.105	0.2771(5)	1.7(1)	1.491	0.106	130		
1.07							2.263				
							2.140				
							2.374				

ตารางที่ 5.3 (ต่อ) แสดงผลการปรับโครงสร้างของผลึก AgGaTe_2 , AgInSe_2 , AgInTe_2 และ CuInTe_2

หมายเหตุ * เป็นค่าที่ยังไม่ได้ทำการปรับค่าพารามิเตอร์อุณหภูมิ

ชื่อสาร	ค่าตั้งต้น		ผลการปรับโครงสร้าง								เครื่องมือที่ใช้เก็บข้อมูล
	k	Bover iso	x	x*	R*	x	Bover Iso	k	R	จำนวนจุด	
AgInSe_2	1.00	2.00	0.261 (จากทฤษฎี)	0.290(7)	0.112	0.294(5)	0.4(5)	3.780	0.083	17	กีเนียร์ - เซก
	1.00	2.00	0.261 (จากทฤษฎี)	0.25(2)	0.151	0.23(2)	1.3(5)	0.198	0.140	20	
	1.03	2.04	0.254 (จากทดลอง)	0.284(1)	0.116	0.284(1)	1.6(1)	2.176 2.501 2.583 4.134	0.104	106	ไวซ์เซาเบอร์
	1.03	2.04	0.261 (จากทฤษฎี)	0.284(1)	0.104	0.284(1)	1.6(1)	2.174 2.496 2.581 4.128	0.104	106	



ตารางที่ 5.3 (ต่อ) แสดงผลการปรับโครงสร้างของผลึก $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$
 หมายเหตุ * เป็นค่าที่ยังไม่ได้ทำการปรับค่าพารามิเตอร์อุณหภูมิ

ชื่อสาร	ค่าตั้งต้น			ผลการปรับโครงสร้าง							เครื่องมือที่ใช้เก็บข้อมูล
	k	Over Iso	x	*x	R*	x	Over Iso	k	R	จำนวนจุด	
$AgInTe_2$	1.00	2.00	0.261 (จากทฤษฎี)	0.279(5)	0.091	0.284(5)	0.9(6)	5.375	0.072	16	สปีเยอร์ - เชกก
	1.00	2.00	0.261 (จากทฤษฎี)	0.313(8)	0.150	0.312(7)	1.3(5)	0.381	0.146	20	ดิฟแฟรกโทมิเตอร์
$CuInTe_2$	1.00	2.00	0.237 (จากทฤษฎี)	0.221(8)	0.204	0.221(9)	2.1(1.5)	3.366	0.202	14	สปีเยอร์ - เชกก
	1.00	2.00	0.237 (จากทฤษฎี)	0.229(4)	0.158	0.226(4)	1.3(5)	0.151	0.133	19	ดิฟแฟรกโทมิเตอร์

สอดคล้องกับค่า u ที่ได้จากการทดลองของสารประกอบสาม $A^I B^{III} C_2^{VI}$ จะมีค่า Δy ที่แตกต่างไปจากที่คำนวณได้ตามสมการที่ (5.1) ซึ่งมีความสัมพันธ์กับค่าสภาพไฟฟ้าลบ X_A, X_B และ X_C ตามทฤษฎีของฟิลลิปส์ (Phillips, J.C) (31) ดังนี้

$$\Delta y = 0.0049 X_A + 0.0254 X_B - 0.0236 X_C \quad (5.2)$$

ดังนั้นค่า u ที่ถูกต้องจะหาได้จากความสัมพันธ์ดังนี้

$$u = u(\text{ตามสมการ 5.1}) + \Delta y \quad (5.3)$$

เมื่อใช้สมการที่ (5.3) คำนวณค่า u ของสาร $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$ ได้ผลลัพธ์แสดงในตารางที่ 5.4

ตารางที่ 5.4 แสดงค่า u ที่คำนวณตามสมการ (5.3) ของสาร $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$

ชื่อสาร	X_A	X_B	X_C	Δy	u
$AgGaTe_2$	0.67	1.13	1.47	-0.0027	0.274
$AgInSe_2$	0.67	0.99	1.79	-0.0138	0.258
$AgInTe_2$	0.67	0.99	1.47	-0.0063	0.254
$CuInTe_2$	0.79	0.99	1.47	-0.0057	0.245

เมื่อทำการเปรียบเทียบค่า x (หรือ u) ที่ได้จากการทดลองนี้ เทียบกับค่า x ที่ได้จากทฤษฎีและข้อมูลการทดลองของนักวิทยาศาสตร์ต่าง ๆ ที่ได้ทำการศึกษาเอาไว้ก่อนแล้ว ดังในตารางที่ 5.5

จากตารางที่ 5.3 และ 5.5 จะเห็นว่า ค่า x ที่ได้จากการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผงในกล้องกีเนียร์ - เฮกส์และเครื่องดิฟแฟรคโตมิเตอร์นั้น สาร $AgGaTe_2$ และ $CuInTe_2$ จะให้ค่า x ใกล้เคียงกัน ส่วนสาร $AgInSe_2$ และ

ตารางที่ 5.5 เปรียบเทียบค่า x (หรือ n) ที่ได้จากการทดลองนี้กับค่าที่คำนวณจากทางทฤษฎีและการทดลองของ นักวิทยาศาสตร์อื่น ๆ (8)

ชื่อสาร	ค่า x ของสารประกอบสาม A ^I B ^{III} C ^{VI} ₂					
	จากการทดลองนี้			จากทฤษฎีและการทดลองของนักวิทยาศาสตร์อื่น ๆ		
	กีเนียร์-เฮกก์	ดิฟแฟร็กโทมิเตอร์	ไวซ์เซนเบอร์ก	ทฤษฎี CTB บวกเงื่อนไข $\eta = \eta_{\text{expt}}$	ทฤษฎีตาม สมการ 5.3	การทดลองของนักวิทยาศาสตร์
AgGaTe ₂	0.273(2)	0.261(9)	0.2771(5)	0.285	0.274	0.26 (ชานห์และคณะ)
AgInSe ₂	0.294(5)	0.23(2)	0.284(1)	0.261	0.258	0.25 (ชานห์และคณะ) 0.250(1) (สเปียร์และคณะ)
AgInTe ₂	0.284(5)	0.312(7)	-	0.261	0.254	0.25 (ชานห์และคณะ)
CuInTe ₂	0.221(9)	0.226(4)	-	0.237	0.245	0.225 (ชานห์และคณะ)

AgInTe₂ จะให้ค่า x แตกต่างกัน ส่วนข้อมูลการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกเดี่ยว จากกล้องไวซ์เซนเบอร์กของสาร AgGaTe₂ และ AgInSe₂ พบว่า ถ้าใช้ค่า k , B_{iso}^{over} และข้อมูลความเข้มของจุดสะท้อน hkl ของแต่ละสารเหมือนเดิม ถึงแม้ว่า จะใช้ค่า x ตั้งต้นที่หาได้จากแผนภาพแพทเทอรัลสันและปรับตำแหน่งโดยวิธีของบูร์ซึ่งเป็น ขั้นตอนปกติของการหาโครงสร้าง หรือจากที่คำนวณโดยทฤษฎี CTB บวกเงื่อนไข $\eta = \eta_{expt}$ ซึ่งมีค่าไม่เท่ากันก็ตาม แต่หลังจากทำการปรับโครงสร้างแล้วพบว่าให้ ค่า x ของแต่ละสารเท่ากัน แสดงว่าค่า x ตั้งต้นจากทฤษฎี CTB บวกเงื่อนไข $\eta = \eta_{expt}$ ถูกต้องพอที่จะใช้เป็นค่าตั้งต้นได้ แต่ค่า x ตั้งต้นที่ใช้ผิดไปจากที่ควรจะเป็นมาก ก็จะมีผลทำให้การคำนวณการปรับโครงสร้างโดยคอมพิวเตอร์อาจผิดพลาดทาง ไปได้

เมื่อทำการเปรียบเทียบค่า x ที่ได้จากผลึกผงและผลึกเดี่ยวพบว่า สาร AgGaTe₂ จะให้ค่า x อยู่ในช่วงอันดับ (order) เดียวกัน ส่วนสาร AgInSe₂ ค่า x จากกล้องกีเนียร์ - เฮกเกอร์และกล้องไวซ์เซนเบอร์กจะอยู่ในช่วงอันดับเดียวกัน แต่จาก เครื่องคิฟแฟรคโตมิเตอร์จะให้ค่าน้อยกว่า ข้อที่น่าสังเกตก็คือในการปรับโครงสร้าง ของผลึกเพื่อหาโครงสร้างที่ถูกต้องของผลึกนั้น โดยทั่วไปจะอาศัยข้อมูลการเลี้ยวเบน รังสีเอ็กซ์จากผลึกเดี่ยว แต่จะไม่นิยมใช้ข้อมูลการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์โดยผลึกผง เพราะผลึกผงให้จำนวนจุดสะท้อนน้อยทำให้การปรับโครงสร้างมีความแม่นยำดีไม่เท่าที่ ควร แต่ในการทดลองนี้ก็ทดลองทำเพื่อจะได้เปรียบเทียบผลดูกับข้อมูลจากผลึกเดี่ยว

เมื่อทำการเปรียบเทียบค่า x จากการทดลองและจากที่คำนวณทางทฤษฎี สำหรับสาร AgGaTe₂ ค่า x จากการทดลองจะใกล้เคียงกับที่คำนวณทางทฤษฎีตาม สมการ (5.3) แต่จะน้อยกว่าทฤษฎี CTB บวกเงื่อนไข $\eta = \eta_{expt}$ ส่วนสาร AgInSe₂ ค่า x จากการทดลองจะมากกว่าที่คำนวณได้จากทฤษฎีทั้งหมด (ยกเว้นจาก เครื่องคิฟแฟรคโตมิเตอร์ที่ให้ค่าน้อยกว่า) ส่วนสาร AgInTe₂ และ CuInTe₂ จะมีเฉพาะข้อมูลผลึกผง โดย AgInTe₂ จะให้ค่า x มากกว่าที่คำนวณได้จากทฤษฎี ทั้งหมด แต่สาร CuInTe₂ จะให้ค่า x จากการทดลองทั้งสองวิธีใกล้เคียงกับที่คำนวณ จากทางทฤษฎี โดยมีค่าน้อยกว่าทางทฤษฎีเพียงเล็กน้อย อย่างไรก็ตามค่า x ที่ได้ จากการทดลองในครั้งนี้ สาร CuInTe₂ จะให้ค่า x ใกล้เคียงกับทฤษฎีและจากการ

ทดลองของนักวิทยาศาสตร์อื่นมากที่สุด สาร AgGaTe_2 จะให้ค่า x ใกล้เคียงกับทางทฤษฎีและผลการทดลองของนักวิทยาศาสตร์เช่นกัน ส่วนสาร AgInSe_2 และสาร AgInTe_2 จะให้ค่า x แตกต่างจากทฤษฎีและผลการทดลองของนักวิทยาศาสตร์อื่นมาก โดยเฉพาะข้อมูลจากผลึกเดี่ยวของสาร AgInSe_2 ซึ่งน่าจะให้ผลที่ถูกต้องเพราะจำนวนจุดสะท้อนมาก ยิ่งกว่านั้นค่าที่ได้จากผลึกเดี่ยวและผลึกผงจากเครื่องดิฟแฟร็กโทมิเตอร์ก็ต่างกัน ทั้งนี้อาจจะเนื่องมาจากสาเหตุต่อไปนี้

1. วิธีการเตรียมผลึกและความสมบูรณ์ของผลึก ผลึกของสารทั้งสี่ที่ใช้ในการศึกษาวิจัยนี้ เตรียมโดยเทคนิคของบริดจ์แมน (Bridgman technique) แบบ (directional freezing) คือลดอุณหภูมิเตาโดยให้เกรเดียนต์อุณหภูมิ (temperature gradient) ของเตาผ่านสารตัวอย่างในแนวอนค้วยอัตรา 24°C ต่อ 24 ชั่วโมง และในช่วงที่ผ่านจุดหลอมเหลว (melting point) ที่ 560°C จะลดค้วยอัตรา 100°C ต่อ 24 ชั่วโมงจนกระทั่งถึงอุณหภูมิ 270°C จึงดับเตา ส่วนของบีนอยท์และคณะ (P. Benoit et al.) (32) เตรียมสาร AgInSe_2 โดยเทคนิคของบริดจ์แมนเช่นเดียวกันโดยใช้เตา 2 โซนแบบแนวตั้ง (two vertical-zone furnace) แต่ใช้เทคนิคการเตรียมหลายชั้นตอนที่ยุ่งยากกว่า สาร AgInSe_2 ที่เตรียมได้ครั้งนี้มีลักษณะเป็นแท่งของแข็ง เนื้อสารมีรอยแตกอยู่ทั่วไปแสดงว่าเป็นผลึกที่อาจจะมีข้อบกพร่อง (defects) และอยู่ภายใต้ความเครียด (strain) เล็กหาผลึกเดี่ยวได้ยากมาก ผลึกเดี่ยวที่เลือกได้มีรูปทรงทั่วไป

2. เครื่องมือที่ใช้ ในกรณีของผลึกเดี่ยวเก็บข้อมูลจากกล้องไวซ์เซน-เบอร์กและวัดความเข้มค้วยตา ส่วนของบีนอยท์และคณะเก็บข้อมูลความเข้มค้วยเครื่อง CAD-4 Enraf-Nonius diffractometer ทำให้เก็บข้อมูลได้มากกว่าและถูกต้องกว่า

3. ค่าความเข้มของพวกจุดสะท้อน hkl เมื่อ $l=2n+1$ จากผลึกเดี่ยวจะมีค่าความเข้มน้อยอาจเป็นสาเหตุทำให้วัดค่าความเข้มผิดพลาดได้ง่าย ข้อมูลความเข้มของจุดสะท้อนพวกนี้มีผลต่อการคำนวณ X_{Se} มาก (32)

4. ข้อมูลจากกราฟที่บันทึกโดยเครื่องดิฟแฟร็กโทมิเตอร์ ที่ภาควิชา

ธรณีวิทยา คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย เป็นเครื่องที่ใช้สำหรับงานโดยทั่ว ๆ ไปไม่ได้ใช้สำหรับงานเก็บข้อมูลความเข้มโดยเฉพาะ ความเข้มที่วัดได้ใช้วิธีค้นหาพื้นที่ใดกราฟเพื่อหาค่าความเข้มอินทิเกรต ค่าจะถูกต้องแก้ไขขึ้นอยู่กับวิธีการลากเส้นเฉลี่ยเพื่อหารูปร่างของพีคและความละเอียดในการแบ่งนับ นอกจากนี้ข้อมูลความเข้มที่ได้จากเครื่องดิฟแฟร็กโทมิเตอร์ก็ได้แก่ความผิดพลาดเชิงระบบต่าง ๆ ที่เกี่ยวข้อง ดังนั้นข้อมูลความเข้มที่ได้จึงอาจจะไม่มีความละเอียดดีนัก

ในกรณีของผลึกเดี่ยวจุดสะท้อน hkl ที่มีค่าความเข้มจางมาก ๆ จนไม่สามารถสังเกตได้ด้วยตาเปล่านั้น สำหรับผลึกเดี่ยว $AgGaTe_2$ มี 2 จุดคือ $1\ 0\ 7$ และ $1\ 0\ 9$ เมื่อกำหนดให้ค่า $I = I_{min}/2$ แล้วเพิ่มเข้าไปในการปรับโครงสร้าง จะให้ค่า $x = 0.2771(5)$ และ $B_{iso}^{over} = 1.7(1)$ เหมือนกับเมื่อตอนที่ยังไม่เพิ่มเข้าไป ส่วนผลึกเดี่ยว $AgInSe_2$ มีอยู่ 3 จุดคือ $3\ 0\ 7$, $5\ 0\ 3$ และ $4\ 3\ 7$ เมื่อกำหนดให้ค่า $I = I_{min}/2$ จะให้ค่า $|F_O|$ น้อยกว่า $|F_C|$ มาก จึงลองกำหนดให้ $I = I_{min}$ ก็ยังคงมีค่า $|F_O|$ ต่างจาก $|F_C|$ อยู่ โดยให้ค่า $x = 0.282(1)$ และ $B_{iso}^{over} = 1.6(2)$ ดังนั้นในการปรับโครงสร้างของผลึก $AgInSe_2$ จึงไม่คิดรวมจุดพวกนี้

จากที่กล่าวมาพอจะสรุปได้ว่าประโยชน์ที่ได้รับจากการศึกษาวิจัยนี้ก็คือ ทำให้ทราบวิธีการหาโครงสร้างของผลึกโดยการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ และทำให้ทราบลักษณะโครงสร้างของผลึก $AgGaTe_2$, $AgInSe_2$, $AgInTe_2$ และ $CuInTe_2$ นอกจากนี้ยังจะเห็นว่าในระดับของเครื่องมือที่เรามีอยู่ ก็สามารถทำการทดลองให้ได้ผลส่วนใหญ่ใกล้เคียงกับผลการทดลองของนักวิทยาศาสตร์อื่น ๆ ที่มีมากทั้งประสบการณ์และเครื่องมืออันทันสมัยได้เช่นกัน แต่อย่างไรก็ตามยังมีความจำเป็นที่จะต้องอาศัยผู้ที่สนใจ ได้ช่วยทำการทดลองสารดังกล่าวตลอดจนสารตัวอื่น ๆ ในกลุ่ม $A^{I}B^{III}C^{VI}_2$ เพื่อหาข้อมูลมาตรวจสอบความถูกต้องของทฤษฎีและค่าโครงสร้างที่ถูกต้องของสารเอง อันจะทำให้มีความน่าเชื่อถือและยอมรับมากขึ้น