ภาคผนวก

มหาวิทยาลัยบูรพา
Burapha University

ภาคผนวก ก

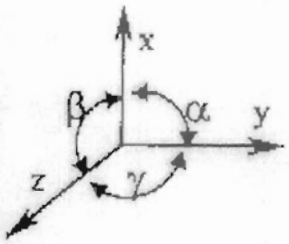
การคำนวณหาค่าคงที่แลตทิซ (Lattice Constants) และขนาดผลึก (Crystallite Size)

มหาวิทยาลัยบูรพา
Burapha University

การคำนวณหาค่าคงที่แลตทิซ (Lattice Constants)

โครงสร้างผลึก (Crystal Structure)

ในการศึกษาโครงสร้างผลึกที่เข้าใจง่ายขึ้นเราจะกำหนดแกนสมมุติและมุมขึ้นภายในรูปผลึกซึ่งมีอะตอมอยู่ตามเหลี่ยมมุมต่าง ๆ ในทิศทาง 3 มิติ (ภาพที่ ก-1 ประกอบ) โดยให้



a, b, c เป็นระยะห่างระหว่างอะตอม เรียกว่า สเปซแลททิซ (Space lattice) มีหน่วยเป็นแองสตอม (Å) โดยที่ 1 Angstom = 10^{-10}m.

x, y, z เป็นแกนสมมุติอ้างอิงโดยมีจุดกำเนิด O (Origin) อยู่ตรงตำแหน่งอะตอมหนึ่ง ๆ ของหน่วยเซลล์หนึ่ง เรียกว่า แลททิซเวคเตอร์ (Lattice vector)

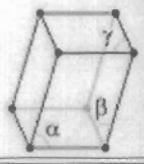
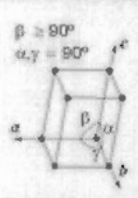
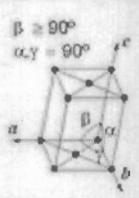
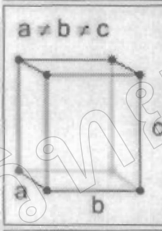
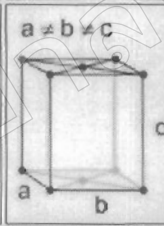
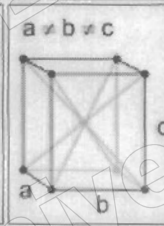
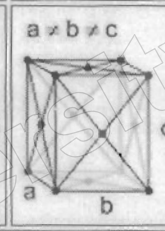
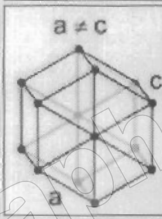
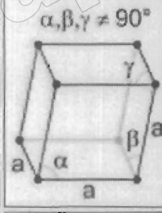
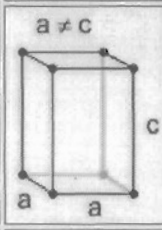
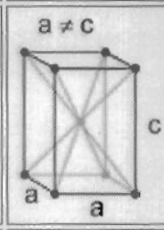
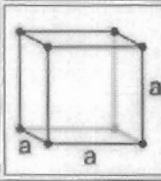
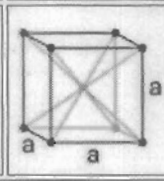
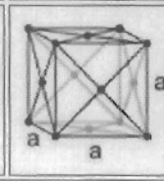
α, β, γ เป็นมุมที่เกิดขึ้นภายในผลึกอยู่ระหว่างแกน x, y, z

ภาพที่ ก-1 แกนสมมุติและมุมขึ้นภายในรูปผลึก

สเปซแลททิซ (Space Lattice) มีอยู่ทั้งหมด 230 แบบด้วยกัน แต่จะสรุปลงเหลือเพียง 14 แบบใหญ่ ๆ ด้วยกันและมีรูปแบบที่สอดคล้องกับโครงสร้างระบบผลึก (Crystal structure) ได้ 7 ระบบด้วยกันคือ

1. ไตรคลินิก (Triclinic) แกนทั้ง 3 แกนยาวไม่เท่ากัน แกนทั้ง 3 แกนทำมุมไม่เท่ากันและไม่ตั้งฉากกัน
2. โมโนคลินิก (Monoclinic) แกนทั้ง 3 แกนยาวไม่เท่ากัน มีแกน 2 แกนที่จะทำมุมตั้งฉากกัน แต่แกนที่ 3 ไม่ตั้งฉาก
3. ออร์ทอรอห์มนิก (Orthorhombic) หรือโอห์มบิก (Rhombic) แกนทั้ง 3 แกนยาวไม่เท่ากัน แต่ทุกแกนจะทำมุมตั้งฉากกันและกัน
4. เตตระโกนอล (Tetragonal) มีแกน 2 แกนยาวเท่ากันแต่อีกแกนหนึ่งจะสั้น หรือบางกว่า แกนทั้ง 3 แกน ทำมุมตั้งฉากกันและกัน
5. โอห์บอฮีดรอล (Rhombohedral) แกนทั้ง 3 แกนยาวเท่ากัน แกนทั้ง 3 แกนทำมุมเท่ากัน แต่ทั้ง 3 มุมไม่เป็น 90 องศา
6. เฮกซะโกนอล (Hexagonal) มีแกน 3 แกนอยู่ในแนวระนาบ (Plane) ทำมุมภายในเท่ากับ 120 องศา ต่อกัน แกนที่ 4 ทำมุม 90 องศา กับแนวระนาบ (Plane) แกน 3 แกนแรกจะเท่ากันแต่จะไม่เท่ากับแกนที่ 4
7. สี่เหลี่ยมจัตุรัส (Cubic) แกนทั้ง 3 แกนยาวเท่ากันและตั้งฉากซึ่งกันและกัน

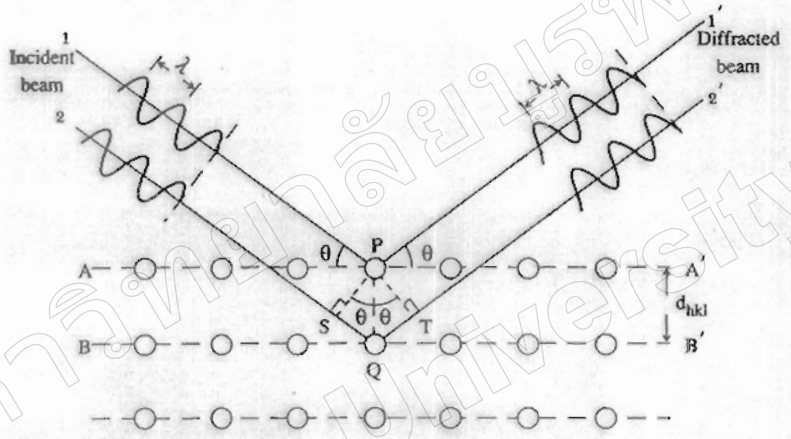
มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

ระบบผลึก	แลตทิซ			
ไตรคลินิก (triclinic)				
โมโนคลินิก (monoclinic)	simple	centered		
				
ออร์โธรอมบิก (orthorhombic)	simple	base-centered	body-centered	face-centered
				
เฮกซาโกนอล (hexagonal)				
รอมโบฮีดรัล (rhombohedral) (trigonal)				
เตตระโกนอล (tetragonal)	simple	body-centered		
				
คิวบิค (isometric)	simple	body-centered	face-centered	
				

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

โดยปกติแล้วโครเมียมไนไตรด์และวาเนเดียมไนไตรด์บริสุทธิ์ มีโครงสร้างผลึกแบบคิวบิก แต่จากงานวิจัยของ (Hilmar Kjartansson Danielsen &John Hald, 2007) พบว่าฟิล์มบางโครเมียมวาเนเดียมไนไตรด์มีโครงสร้างผลึกแบบเตตระโกนอล โดยสอดคล้องกับงานวิจัยนี้ที่เคลือบด้วยระบบ รีแอคตีฟแมกนีตรอนโคสปัตเตอริง ซึ่งพบว่าฟิล์มที่ได้มีโครงสร้างผลึกแบบเตตระโกนอล

<u>กฎของแบรกก์ (Bragg's law)</u>



ภาพที่ ก-2 แบบจำลองการเรียงตัวของอะตอม

$$2d_{hkl}\sin\theta \quad = \quad n\lambda \qquad \text{(ก-1)}$$

เมื่อ d_{hkl} เป็นระยะห่างระหว่างระนาบผลึก ($h\,k\,l$)

θ เป็นมุมตกกระทบและมุมสะท้อน เมื่อวัดจากแนวระนาบ (ในหน่วย radians)

n ลำดับการสะท้อน

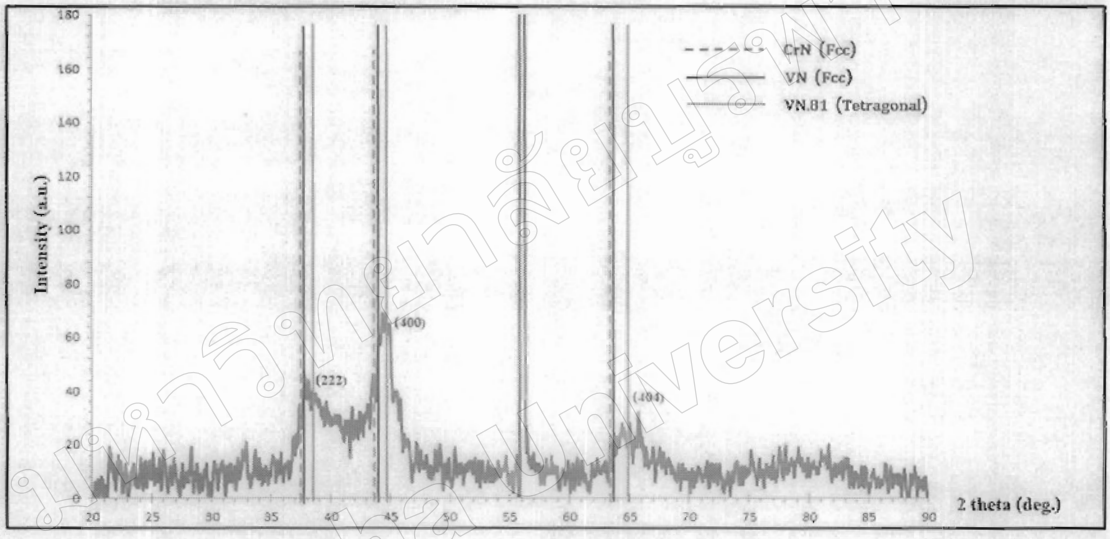
λ ความยาวคลื่น ($\lambda = 1.5406$ Å)

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

สูตรคำนวณระยะห่างระหว่างระนาบในระบบผลึกแบบแบบเตตระโกนอล

tetragonal;
$$\frac{1}{d_{hkl}^{\ 2}} = \frac{h^2+k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \qquad \text{(ก-2)}$$

ตัวอย่าง ก-1 การคำนวณหาระยะห่างระหว่างระนาบผลึก (*d*-spacing) ที่ระนาบต่าง ๆ



ภาพที่ ก-3 รูปแบบการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ของฟิล์มบางโครเมียมวาเนเดียมไนไตรด์

ตารางที่ ก-1 รูปแบบการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ของฟิล์มบางโครเมียมวาเนเดียมไนไตรด์

No.	2 Theta	Intensity	h k l	d-spacing
1	38.98	54	2 2 2	2.31
2	44.46.	71	4 0 0	2.04
3	64.62	24	4 0 4	1.44

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

1. หาระยะห่างระหว่างระนาบผลึกที่ระนาบต่าง ๆ

กำหนด λ = 1.5406 Å; มุมθหน่วยเป็น เรเดียน

แทนค่ามุมθในหน่วยเรเดียนในสมการที่ ก-1 จะได้ *d*-spacing ที่ระนาบต่าง ๆ ดังนี้

$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda \qquad \text{(ก-1)}$$

ที่ระนาบ (222); $d_{hkl} = 2.31$

2. หาค่าคงที่ (Latice Constant)

tetragonal;
$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2+k^2}{a^2}+\frac{l^2}{c^2} \qquad \text{(ก-2)}$$

ที่ระนาบ (222);
$$\frac{1}{2.31^2} = \frac{2^2+2^2}{a^2}+\frac{2^2}{c^2}$$

$$\frac{1}{5.33} = \frac{8}{a^2}+\frac{4}{c^2} \qquad \text{(ก-3)}$$

ที่ระนาบ (400);
$$\frac{1}{2.04^2} = \frac{4^2+0^2}{a^2}+\frac{0^2}{c^2}$$

$$\frac{1}{4.15} = \frac{16}{a^2}+\frac{0}{c^2} \qquad \text{(ก-4)}$$

$$\therefore \quad a = 8.14 \text{ Å}$$

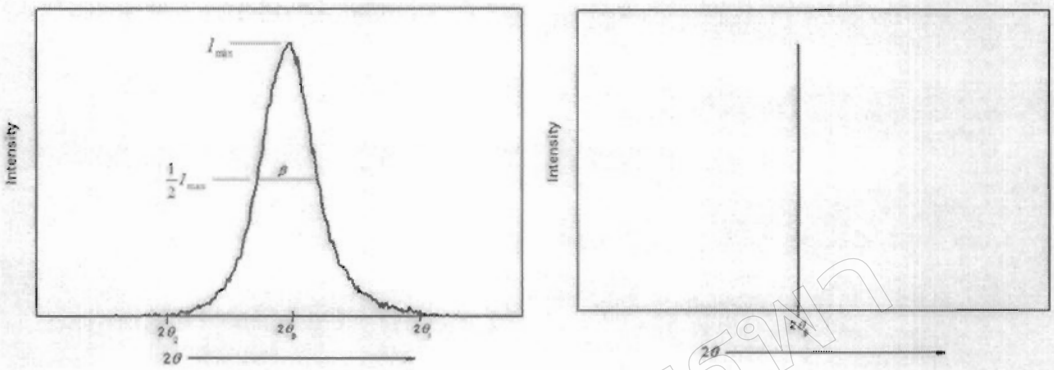
นำค่า a ไปแทนในสมการ (ก-3) จะได้

$$\frac{1}{5.33} = \frac{8}{8.14^2}+\frac{4}{c^2}$$

$$\therefore \quad c = 7.73 \text{ Å}$$

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

การคำนวณหาขนาดผลึก (Crystallite size)



ภาพที่ ก-4 Effect of crystallite size on diffraction curves (schematic)(Cullity, 1978)

Scherrer Equation $$L = \frac{k\lambda}{\beta \cos\theta_\beta} \qquad \text{(ก-3)}$$

เมื่อ L คือ ขนาดของผลึกฟิล์มบางโครเมียมวาเนเดียมไนไตรด์ หน่วย นาโนเมตร (nm)

k คือ ค่าคงที่เท่ากับ 0.9

λ คือ ความยาวคลื่นของรังสีเอกซ์ (CuK_α = 1.5406 Å)

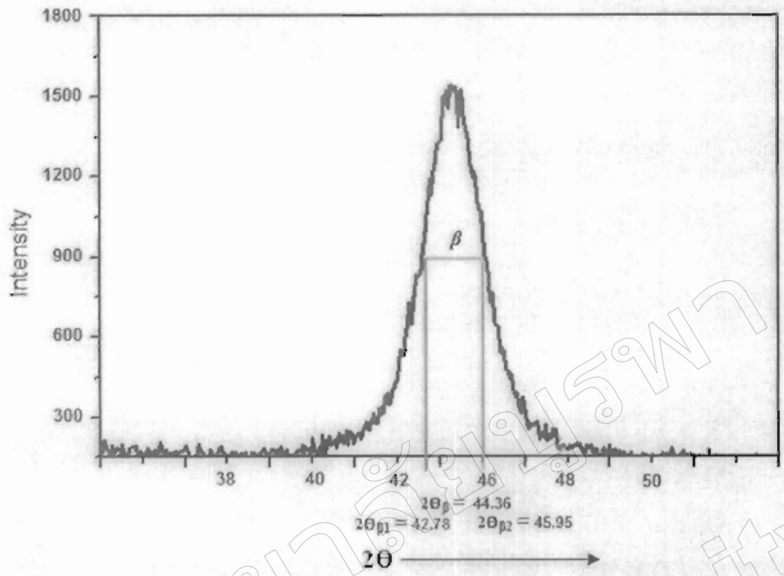
θ คือ ครึ่งหนึ่งของมุมตรงจุดศูนย์กลางพีค หน่วย เรเดียน

β คือ ความกว้างครึ่งหนึ่งของพีคที่มีค่าความเข้มสูงสุด (Full Width at Half Maximum; FWHM) ซึ่งคำนวณได้จากสมการ ก-4

$$\beta = \frac{2\theta_{\beta 2} - 2\theta_{\beta 1}}{2} \qquad \text{(ก-4)}$$

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

ตัวอย่าง ก-2 การคำนวณขนาดผลึก



ภาพที่ ก-5 การหาความกว้างครึ่งหนึ่งของพีคที่มีค่าความเข้มสูงสุด

วิธีคำนวณ หาค่า β จากสมการ ก-4

$$\beta = \frac{2\theta_{\beta 2} - 2\theta_{\beta 1}}{2}$$

$$\beta = \frac{45.95 - 42.78}{2} = 0.600 \text{ องศา} = 0.015 \text{ เรเดียน}$$

นำค่า β แทนในสมการ ก-3 จะได้

$$L = \frac{k\lambda}{\beta \cos\theta_{\beta}} \; ; \; \cos\theta_{\beta} = 0.926 \text{ เรเดียน}$$

$$L = \frac{(0.9)(0.15406\ nm)}{(0.0105)(0.926)} = 14.30 \text{ nm}$$

ดังนั้น ผลึกมีขนาดเท่ากับ 14.30 nm

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

ภาคผนวก ข

ผลงานวิจัยที่ได้รับการตีพิมพ์เผยแพร่

มหาวิทยาลัยบูรพา
Burapha University

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

การประชุมวิชาการระดับชาติ "วิทยาศาสตร์วิจัย" ครั้งที่ 6

PY-O-002

การเตรียมและศึกษาลักษณะเฉพาะของฟิล์มบางโครเมียมวาเนเดียมไนไตรด์ซึ่งเคลือบด้วยวิธีรีแอคตีฟ ดีซี แมกนีตรอน โคสปัตเตอริง

Preparation and characterization of CrVN thin films deposited by reactive dc magmetron co-sputtering

สิทธิวัฒน์ จุ่นจิตร, อดิศร บูรณวงศ์ และ สุรสิงห์ ไชยคุณ

ห้องปฏิบัติการวิจัยเทคโนโลยีสุญญากาศและฟิล์มบาง ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยบูรพา

บทคัดย่อ

ฟิล์มบางโครเมียมวาเนเดียมไนไตรด์ (CrVN) ถูกเคลือบด้วยวิธีรีแอคตีฟ ดีซี แมกนีตรอน โคสปัตเตอริงบนกระจกสไลด์และซิลิกอน เพื่อศึกษาผลของกระแสไฟฟ้าในการสปัตเตอร์ของเป้าวาเนเดียม (I_v) ต่อโครงสร้างผลึก ลักษณะพื้นผิวและความหนา โดยโครงสร้างผลึก ลักษณะพื้นผิวและความหนาศึกษาด้วยเทคนิค XRD และ AFM ตามลำดับ ผลการศึกษาพบว่าค่ากระแสไฟฟ้าในการสปัตเตอร์เป้าวาเนเดียมมีผลโดยตรงต่อโครงสร้างผลึก ลักษณะพื้นผิวและความหนาของฟิล์ม โดยฟิล์มที่ได้แสดงโครงสร้างผลึกของโครเมียมวาเนเดียมไนไตรด์ ระนาบ (111) (200) และ (220) ความหนาและความหยาบผิวของฟิล์มที่ได้มีค่าในช่วง 883 -1048 นาโนเมตร และ 3.75-4.96 นาโนเมตร ตามลำดับ

คำสำคัญ: ฟิล์มบาง / โครเมียมวาเนเดียมไนไตรด์ / รีแอคตีฟ โคสปัตเตอริง

Abstract

Chromium vanadium nitride (CrVN) thin film was deposited by reactive DC magnetron Co-sputtering method on glass slide and silicon. The effect of vanadium sputtering current (I_v) on the crystal structure, surface morphology and thickness were investigated. The crystal structure , surface morphology and thickness were characterized by XRD and AFM techniques, respectively. The result show that the crystal structure , surface morphology and thickness of the film are strongly depended on the vanadium sputtering current. The as-deposited films were compose of CrVN with (111), (200), (220) planes. The roughness and thickness of the as-deposited films were in the range of 883 to 1048 nm and 3.75 to 4.96 nm, respectively.

Keywords: Thin films / chromium vanadium nitride / reactive co-sputtering

*Corresponding author. E-mail: Bj_maxx@hotmail.com

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

Burapha University มหาวิทยาลัยบูรพา