

บทคัดย่อ

ได้ทำการคำนวณสมบัติทางโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์และแม่เหล็กของสาร CeO_2 ที่ทำการเจือด้วยด้วยธาตุ Mn, Fe, Co, และ C ($\text{A}_x\text{Ce}_{1-x}\text{O}_2$, A=Mn, Fe, Co, C) และมีช่องว่างของอ็อกซิเจน โดยการใช้การคำนวณแบบ the first principle และใช้การประมาณแบบ local density approximation (LDA) และ LDA+U ซึ่งอยู่ในโปรแกรม ABINIT การคำนวณใช้ชุดโพเทนเชียลแบบ projected augmented plane wave (PAW) ซึ่งแสดงผลการคำนวณแสดงว่า CeO_2 บริสุทธิ์มีช่องว่างแถบพลังงานเป็น 2.72 eV และ CeO_2 ที่เจือด้วยธาตุและที่มีช่องว่างอ็อกซิเจนแสดงสมบัติทางแม่เหล็กแบบเฟอร์โร และนอกจากนี้ยังได้ทำการคำนวณโครงสร้างแถบพลังงานของ $\text{Si}_{(1-x-y)}\text{Ge}_x\text{Sn}_y$ ที่ทำการปลูกวัสดุรองรับ CeO_2 หรือ $(\text{Si}_{(1-x-y)}\text{Ge}_x\text{Sn}_y/\text{CeO}_2)$ ด้วยปรับอัตราส่วนปริมาณของสารองค์ประกอบในโลหะผสม x และ y ระหว่าง 0 ถึง 0.4 โดยใช้วิธี empirical-pseudopotential ซึ่งผลการคำนวณแสดงความเป็นไปได้ที่โลหะผสมจะเปลี่ยนแปลงสมบัติจากสารกึ่งตัวนำแบบแถบพลังงานไม่ตรงเป็นสารกึ่งตัวนำแบบช่องว่างแถบพลังงานตรง โดยค่าของช่องว่างแถบพลังงานนั้นมีค่าปรับเปลี่ยนได้ตั้งแต่ 0 ถึง 0.8 eV โดยการปรับเปลี่ยนปริมาณของ Si Ge และ Sn ที่เหมาะสม และปรับค่าคงที่แลตทิซของวัสดุรองรับ CeO_2 ให้เหมาะสม ดังนั้นโลหะผสมที่ทำการปลูกวัสดุรองรับ CeO_2 ($\text{Si}_{(1-x-y)}\text{Ge}_x\text{Sn}_y/\text{CeO}_2$) จึงมีความเป็นไปได้ที่จะสามารถประยุกต์ใช้ในด้าน optoelectronic อย่างเช่น เลเซอร์ เซลล์แสงอาทิตย์ และทางด้าน spintronics

Abstract

Electronic structure and magnetic properties for Mn-, Fe-, Co-, and C-doped cerium dioxide ($A_x\text{Ce}_{1-x}\text{O}_2$, $A=\text{Mn, Fe, Co, C}$) with homogeneously oxygen vacancies have been investigated by means of the first principle calculations based on local density approximation (LDA) and LDA+U scheme, packaged in the ABINIT code. The calculation was performed using self-consistent pseudo-potential plane wave and projected augmented plane wave (PAW). The results indicate that CeO_2 has energy band-gap about 2.72 eV and the transition doped and oxygen vacancies seem to be crucial for the appearance of a ferromagnetic. Furthermore, the band structure of $\text{Si}_{(1-x-y)}\text{Ge}_x\text{Sn}_y$ grown on CeO_2 substrate ($\text{Si}_{(1-x-y)}\text{Ge}_x\text{Sn}_y/\text{CeO}_2$) with x and y varying in the range 0 to 0.4 was calculated by empirical-pseudopotential method. It shows possibility of achieving of direct band-gap semiconductor (0 to 0.8 eV) by using appropriate silicon germanium and tin composition. Therefore, the ($\text{Si}_{(1-x-y)}\text{Ge}_x\text{Sn}_y/\text{CeO}_2$) alloy can be useful for a number of optoelectronic applications, such as laser and solar cell, and spintronic applications.
