

รหัสโครงการ: RSA5880058

ชื่อโครงการ: สมบัติทางไฟฟ้าและวิศวกรรมโครงสร้างแถบพลังงานของวัสดุภายใต้สภาวะรุนแรง

ชื่อนักวิจัย: รองศาสตราจารย์ ดร.ธิตี บวรรัตนรักษ์

ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

E-mail Address: thiti.b@chula.ac.th

ระยะเวลาโครงการ: 3 ปี

บทคัดย่อ

ความสัมพันธ์ระหว่างเสถียรภาพทางอุณหพลศาสตร์กับสมบัติความเป็นตัวนำยิ่งยวดของวัสดุเป็นประเด็นที่น่าสนใจสำหรับสาขาฟิสิกส์ธรณีฟิสิกส์และเคมีมาอย่างยาวนาน ตั้งแต่มีการค้นพบโครงสร้างที่มีความซับซ้อนสูงกว่าปกติเช่นโครงสร้างแบบไฮส เกส ในธาตุโลหะภายใต้ความดันสูงทำให้มีคำถามว่ากระบวนการใดที่ทำให้โครงสร้างของธาตุโลหะมีความซับซ้อนสูงและมีสภาพเหมือนมีการแยกตัวออกเป็นอะตอมที่มีโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์สองรูปแบบได้ ซึ่งหลายครั้งรวมไปถึงการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางกายภาพสมบัติทางเคมีและโดยเฉพาะอย่างยิ่งสมบัติทางไฟฟ้าเช่นโครงสร้างแถบพลังงาน ดังนั้นงานวิจัยในสาขาฟิสิกส์สภาวะรุนแรงที่เกี่ยวข้องกับวัสดุพลังงานจึงมุ่งเน้นประเด็นไปที่การปรับปรุงโครงสร้างแถบพลังงานของวัสดุเหล่านี้โดยใช้กระบวนการความดันสูง ไม่เพียงแต่โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์เท่านั้นสมบัติเชิงกลก็เป็นประเด็นที่ได้รับการศึกษาอย่างกว้างขวาง โดยเฉพาะอย่างยิ่งการพัฒนาสมบัติความแข็งแรงยิ่งยวดในวัสดุหลากหลายประเภทเพื่อมาทดแทนเพชรในอุตสาหกรรม

งานวิจัยนี้ได้ทำการศึกษาเชิงทฤษฎีกับเซลล์สุริยะแบบเพอรอฟสไกต์ และสารกึ่งตัวนำในกลุ่มเทอเนอริย์ พร้อมทั้งวัสดุพลังงานอื่นๆโดยพุ่งเป้าไปที่วิศวกรรมโครงสร้างแถบพลังงานภายใต้สภาวะรุนแรงซึ่งในมุมมองของการศึกษาเชิงทฤษฎีไม่เพียงแต่จำเป็นจะต้องเลือกใช้ฟังก์ชันแนล ที่เหมาะสมเท่านั้นแต่จะต้องมีการศึกษาอย่างเป็นระบบซึ่งโครงการวิจัยนี้ได้พัฒนาขึ้นรวมถึงการศึกษากการเปลี่ยนแปลงสมบัติเชิงโครงสร้างในวัสดุเหล่านี้ด้วย

คำหลัก: การเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์ การเปลี่ยนแปลงโครงสร้าง ไดมอนด์แอนวิลเซลล์

ทฤษฎีฟังก์ชันแนลความหนาแน่น ความดันสูง

Project Code: RSA5880058

Project Title: Electrical Properties and Band Gap Engineering in Materials under Extreme Conditions

Investigator: Associate Professor Dr.Thiti Bovornratanaraks

Department of Physics, Faculty of Science, Chulalongkorn University

E-mail Address: Thiti.b@chula.ac.th

Project Period: 3 years

Abstract

The relation between thermodynamically stable and superconductivity preparation is one of the fundamental questions in physics, geophysics and chemistry. Since the discovery of the novel structure, this has remained as one of the main questions regarding the very foundation of elemental metals. Needless to say this has also bearings on extreme conditions physics, where again the relation between structure and performance is of direct interest. Ternary compound semiconductors as well as Perovskite solar cell materials are energy materials which their energy band gap vary drastically under extreme conditions. Not only their electrical properties that highly sensitive to pressure but also their crystal structure as well as their mechanical properties. In this research, theoretical investigation of Perovskite solar cell and ternary compound semiconductors as well as other energy materials have been carried out. Band gap engineering mechanism exploit extreme conditions will also be proposed. The suitable functional for different type of materials have also been systematically studied. Structural phase transitions and their stability under various pressure have also been reported.

Keywords: X-ray diffraction, Structural phase transition, Diamond anvil cell, Density Functional Theory, High Pressure