Abstract

Project Code : TRG5780068

Project Title : Synthesis and electrical properties of conducting tellurium oxide pyrochlores

Investigator : Assist. Prof. Dr. Theeranun Siritanon
School of Chemistry, Institute of Science,
Suranaree University of Technology

E-mail Address : theeranun@sut.ac.th

Project Period : 2 years

The preparation and electronic properties of $Cs_{1-x}A_xAl_{0.33}Te_{1.67}O_6$ (A = K, Rb, and Cs) are reported. Replacing Cs with smaller Rb and K reduces cell parameters of the compounds but does not affect the overall structure. Electronic conductivity of all samples were measured and explained based on the band conduction model. Although XPS $Te3d_{5/2}$ spectra indicate that all samples contain similar amount of Te^{4+}/Te^{6+} mixed valency, their conductivity is varied from about 0.1 Scm in $CsAl_{0.33}Te_{1.67}O_6$ to 3 x 10^{-5}Scm in $RbAl_{0.33}Te_{1.67}O_6$ and 3 x 10^{-7}Scm in $KAl_{0.33}Te_{1.67}O_6$ at 300K. To explain such large differences, the band structure diagrams are proposed based on the UV-Vis spectra and XPS spectra at valence band region. When the obtained activation energy of conduction and the proposed band diagram are considered, it is concluded that $AAl_{0.33}Te_{1.67}O_6$ (A = K, Rb, and Cs) are n-type semiconductors. The defect levels in these samples originate from Te^{4+} whose energy level relative to the conduction band minimum is different from samples to samples. Such differences are affected by Cs content in the structure as Cs seems to lower the band gap energy and increase the valence band maximum. It is the position of these defect levels that determines the electronic conductivity of the compounds.

Keywords : Pyrochlores, oxides, electronic properties, X-ray photoelectron spectroscopy

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ : TRG5780068

ชื่อโครงการ : การสังเคราะห์และสมบัติทางไฟฟ้าของสารประกอบเทลลูเรียมออกไซด์ไพโรคลอที่นำไฟฟ้าได้

ชื่อนักวิจัย : Assist. Prof. Dr. Theeranun Siritanon
School of Chemistry, Institute of Science,
Suranaree University of Technology

E-mail Address : theeranun@sut.ac.th

ระยะเวลาโครงการ : 2 years

โครงการวิจัยนี้รายงานการเตรียมและสมบัติทางไฟฟ้าของ $Cs_{1-x}A_xAl_{0.33}Te_{1.67}O_6$ (A = K, Rb, and Cs) โดยพบว่าการแทนที่ Cs ด้วย Rb และ K ซึ่งมีขนาดเล็กกว่าไม่ส่งผลทำให้โครงสร้างเปลี่ยนแปลง นอกจากนี้ยังศึกษาสมบัติทางไฟฟ้าของสารและอธิบายสมบัติดังกล่าวโดยอาศัยโครงสร้างแถบพลังงาน (band structure) ทั้งนี้ถึงแม้ว่าการศึกษาด้วยเทคนิคสเปคโตรสโคปีของอนุภาคอิเล็กตรอนที่ถูกปลดปล่อยด้วยรังสีเอกซ์หรือ XPS พบว่าสารตัวอย่างทั้งหมดมีองค์ประกอบของ Te^{4+} และ Te^{6+} ผสมกันอยู่ในปริมาณที่ใกล้เคียงกันแต่การนำฟ้าในสารตัวอย่างกลับมีความแตกต่างกันมากคือสารตัวอย่าง $CsAl_{0.33}Te_{1.67}O_6$ มีความนำไฟฟ้า 0.1 Scm ที่อุณหภูมิห้อง ในขณะที่ $RbAl_{0.33}Te_{1.67}O_6$ และ $KAl_{0.33}Te_{1.67}O_6$ มีความนำไฟฟ้าเพียง 3×10^{-5} Scm และ 3×10^{-7} Scm ตามลำดับเท่านั้น เพื่ออธิบายความแตกต่างดังกล่าวโครงการวิจัยจึงอาศัยผลการทดลองสมบัติการดูดกลืนแสงและ XPS ในการเสนอโครงสร้างแถบพลังงานของสารตัวอย่างขึ้น ซึ่งทำให้อธิบายได้ว่าสารตัวอย่างมีสมบัติเป็นสารกึ่งตัวนำชนิดเอ็นเนื่องจากมีระดับพลังงานเจือ (defect level) ของ Te^{4+} โดยความแตกต่างระหว่างระดับพลังงานเจือนี้กับแถบตัวนำ (conduction band) เป็นตัวกำหนดความสามารถในการนำไฟฟ้าของสารและ Cs ในโครงสร้างมีบทบาททำให้ช่องว่างพลังงาน (band gap energy) ลดลงและตำแหน่งของแถบเวเลนซ์สูงขึ้นซึ่งส่งผลให้ความแตกต่างระหว่างระดับพลังงานเจือกับแถบตัวนำมีค่าต่างกันเมื่อมีปริมาณ Cs ในโครงสร้างต่างกันและทำให้สารตัวอย่างมีความนำไฟฟ้าต่างกันในที่สุด

คำสำคัญ :ไพโรคลอ, ออกไซด์, สมบัติทางไฟฟ้า, สเปคโตรสโคปีของอนุภาคอิเล็กตรอนที่ถูกปลดปล่อยด้วยรังสีเอกซ์