

PROJECT CODE : TRG5780264

PROJECT TITLE : ENERGETICS OF NATIVE DEFECTS IN ANATASE TiO₂: A HYBRID DENSITY FUNCTIONAL STUDY

INVESTIGATOR : ADISAK BOONCHUN

E-MAIL ADDRESS : NANODSCI@GMAIL.COM

PROJECT PERIOD : 15 JULY 2014 - 14 JULY 2016

ABSTRACT

The energetics and electronic structures of native defects in anatase TiO₂ are comprehensively studied using hybrid density functional calculations. We demonstrate that oxygen vacancies (V_O) and titanium interstitials (Ti_i) act as shallow donors, and can form with substantial concentrations, giving rise to free electrons with carrier densities from 10^{11} to 10^{19} cm^{-3} for oxygen-rich and oxygen-poor conditions, respectively. The titanium vacancies (V_{Ti}), identified as deep acceptors and induced hole carriers, are incapable of fully compensating for the free electrons originating from the donor-type defects at any oxygen chemical potential. Even under an extreme oxygen-rich condition, the Fermi level, which is determined from the charge neutrality condition among charge defects, electron and hole carriers are located 2.34 eV above the valence band maximum, indicating that *p*-type conductivity can never be realized under any growth conditions without external doping. This is consistent with common observations of intrinsic *n*-type conductivity of TiO₂. At a typical annealing temperature and under a typical oxygen partial pressure, the carrier concentration is found to be approximately $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$.

KEYWORDS: DENSITY FUNCTIONAL THEORY, ANATASE TiO₂, NATIVE DEFECT, DEFECT CALCULATION

รหัสโครงการ : TRG5780264

ชื่อโครงการ: การศึกษาพลังงานในการเกิดความบกพร่องผลึกของไทเทเนียมไดออกไซด์ โดยใช้
ทฤษฎีฟังก์ชันนัลของความหนาแน่นแบบไฮบริด

ผู้วิจัยหลัก: ผศ.ดร. อติศักดิ์ บุญชื่น

อีเมล : fsciasb@ku.ac.th

ระยะเวลาโครงการ : เริ่มตั้งแต่ 15 กรกฎาคม 2014 ถึง 14 กรกฎาคม 2016

บทคัดย่อ: พลังงานและโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ของความบกพร่องผลึกในไททาเนียมไดออกไซด์ (TiO_2) แบบอนาเทส (anatase) ได้ถูกศึกษาโดยใช้ทฤษฎีฟังก์ชันนัลของความหนาแน่นแบบไฮบริด, การวิจัยพบว่าการหายไปของออกซิเจน (V_O) และการแทรกของไททาเนียม (Ti_i) จะเกิดระดับพลังงานผู้ให้แบบตื้น (shallow donors) ซึ่งเป็นผลให้ค่าความหนาแน่นอิเล็กตรอนอิสระมีค่ามาก ประมาณ 10^{11} และ 10^{19} อิเล็กตรอนต่อลูกบาศก์เซนติเมตร. ในสถานะออกซิเจนมากและ ออกซิเจนน้อย ตามลำดับ สำหรับการหายไปของไทเทเนียม จะให้ระดับพลังงานผู้รับแบบลึก (deep acceptor) ซึ่งทำให้เกิดพาหะโฮล โดยไม่สามารถจับกับอิเล็กตรอนอิสระในสถานะการปลูกผลึกแบบต่างๆ ในสถานะปลูกผลึกที่เติมไปด้วยออกซิเจนระดับพลังงานเฟอร์มีซึ่งหาได้จากสภาพความเป็นกลางของประจุผลึก ของผลึกที่มีความบกพร่อง ระดับพลังงานเฟอร์มีถูกตรึงไว้ที่ระดับ 2.34 อิเล็กตรอนโวลท์ เหนือแถบพลังงานวาเลนซ์สูงสุด จึงสรุปได้ว่า สารกึ่งตัวนำของ ไม่สามารถเกิดเป็นชนิดพีได้ ภายใต้การปลูกผลึกได้สถานะใดๆ เมื่อไม่ได้มีสารเจือ งานวิจัยนี้สอดคล้องกับการพบการนำไฟฟ้าชนิดเอ็น ของสารไทเทเนียมไดออกไซด์ นอกจากนี้พบว่าภายในการปลูกผลึกสภาวะปกติ ความหนาแน่นพาหะมีค่าประมาณ 5×10^{13} อิเล็กตรอนต่อลูกบาศก์เซนติเมตร.