

บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้ได้ศึกษาคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์และเทอร์โมอิเล็กทริกของสารสตรอนเทียมไททาเนตของโครงสร้างสตรอนเทียมไททาเนตบริสุทธิ์ โครงสร้างที่เจือด้วยไนโตรเจนและโครงสร้างที่มีช่องว่างในตำแหน่งของออกซิเจน ใช้โปรแกรม VASP ซึ่งเป็นโปรแกรมที่อาศัยพื้นฐานทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นในการคำนวณคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ โดยเพิ่มการพิจารณาค่าฮับบาร์ดพารามิเตอร์เพื่อแก้ไขข้อบกพร่องของการคำนวณอันตรกิริยาคูลอมป์ของอิเล็กตรอนใน d ออร์บิทัล ส่วนคุณสมบัติทางเทอร์โมอิเล็กทริกคำนวณโดยใช้โปรแกรม BoltzTrap จากผลการคำนวณคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์โดยใช้ GGA+U ($U=8.7$ eV) พบว่าค่าช่องว่างพลังงานของสตรอนเทียมไททาเนตบริสุทธิ์มีค่าเป็น 3.11 eV ซึ่งมีค่าน้อยกว่าผลจากการทดลอง อันเนื่องมาจากข้อจำกัดของ DFT ส่วนโครงสร้างที่เจือด้วยไนโตรเจนมีสถานะเกิดขึ้นเหนือแถบวาเลนซ์ เป็นผลให้ช่องว่างพลังงานแคบลง 0.38 eV และโครงสร้างที่มีช่องว่างในตำแหน่งของออกซิเจนทำให้เกิดความบกพร่องของโครงสร้างส่งผลให้เกิดสถานะขึ้นด้านล่างแถบการนำ นอกจากนี้การเจือไนโตรเจนและช่องว่างในตำแหน่งของออกซิเจนยังทำให้เพิ่มประสิทธิภาพทางเทอร์โมอิเล็กทริกค่า ZT ที่สูงขึ้น และเพิ่มขึ้นตามอุณหภูมิ การเจือธาตุในกลุ่มแรเอิร์ธ (La และ Dy) ลงในสตรอนเทียมไททาเนตเป็นการเพิ่มสภาพนำไฟฟ้าและการเจือไนโตรเจนเป็นการลดช่องว่างแถบพลังงานจาก 3.17 เป็น 2.72 eV ซึ่งจากผลที่ได้นี้ทำให้สามารถประยุกต์ใช้สตรอนเทียมไททาเนตได้ในหลายรูปแบบ

ABSTRACT

In this work, 3 models of strontium titanate, including pure STO, N-doped STO and O-vacancy STO models, were investigated to study electronic and thermoelectric properties. Vienna Ab initio simulation package (VASP) which based on density functional theory was used to calculate electronic structure of strontium titanate with addition of Hubbard parameter (U) to treat the strong on-site Coulomb interaction in d-electron and thermoelectric properties were also investigated with BoltzTrap program. The results indicate that pure SrTiO₃ has energy band gap of 3.11 eV for GGA+U (U=8.7 eV) calculation which is underestimated compared with experimental value due to limitation of DFT. For N-doped model, there are states induced above valence band resulting in band gap narrowing about 0.38 eV. Removing of Oxygen atom makes strontium titanate structure defect which lead to formation of a band below the conduction band. Thermoelectric results show that doping strontium titanate with Nitrogen and Oxygen vacancy can improve thermoelectrical efficient of strontium titanate because of larger ZT which increase with temperature. The rare earth elements doping on the STO could promote electrical conductivity per relaxation time of the STO and, the N-doped STO could obviously decrease band gap width of the STO from 3.17 to 2.72 eV. From this point, it is interesting that La and Dy doping on the STO would have an ability to improve electrical conductivity of the STO and being narrower of the E_g after N doping is an optional way to improve optical properties of the STO. These advantages could lead the STO to be more utilized in widely various field and higher efficiency applications for more benefits.