

บทที่ 5

สรุปผลการทดลอง

ผลการจำลองโครงสร้างของซิงค์ออกไซด์และซิงค์ออกไซด์ที่มีความไม่สมบูรณ์ของผลึกแบบจุดที่ได้จากการคำนวณตามระเบียบวิธี Density-Functional Theory โดยการประมาณค่าฟังก์ชัน exchange correlation แบบ BLYP และ PBE ด้วยโปรแกรม CPMD พบว่าโครงสร้างที่จำลองได้จัดอยู่ในกลุ่มสมมาตรแบบ P6₃mc หรือ C_{6v} โดยมีค่าคงที่ของเซลล์เท่ากับ $a = b = 3.25 \text{ \AA}$, $c = 5.20 \text{ \AA}$ โดยมีค่าความยาวพันธะของ Zn-O เท่ากับ 1.99 Å และ 1.98 Å ตามลำดับ และเมื่อแทนที่ด้วยไอออนของโลหะมลทินทำให้ความยาวพันธะของโลหะมลทินกับออกซิเจนยืดยาวขึ้น โดยเฉพาะในแนวแกน z โดยที่ความยาวพันธะที่ยืดออกสอดคล้องกับความยาวพันธะในผลึกออกไซด์ของโลหะมลทิน ซึ่งโลหะมลทินบรรจุอยู่โพรงทรงเหลี่ยมแปดหน้า (octahedral) ซึ่งมีขนาดใหญ่กว่าโพรงทรงเหลี่ยมสี่หน้า (tetrahedral) จึงทำให้เมื่อแทนที่ซิงค์ด้วยโลหะมลทินในโพรงทรงเหลี่ยมสี่หน้า จึงเกิดการขยายออกเพื่อให้สอดคล้องกับโพรงผลึกเดิม สำหรับสมบัติทางโครงสร้างของซิงค์ออกไซด์ที่มีความไม่สมบูรณ์ของผลึกแบบช่องว่างมีการเปลี่ยนแปลงของโครงสร้างน้อยที่สุดเมื่อเทียบกับโครงสร้างที่มีการแทนที่ด้วยโลหะ เมื่อพิจารณาค่าพลังงานช่องว่างของซิงค์ออกไซด์ (energy band gap) พบว่ามีค่าประมาณ 3.9 eV ทั้งจากการคำนวณซึ่งมีค่าใกล้เคียงกับค่าที่คำนวณได้ในงานวิจัยก่อนหน้านี้ และเมื่อพิจารณาค่าพลังงานช่องว่างของซิงค์ออกไซด์ที่มีความไม่สมบูรณ์ของผลึกแบบจุด โดยการแทนที่ด้วย โคบอลต์ นิกเกิล และ ช่องว่าง มีค่าพลังงานช่องว่างที่ลดลง ($E_{gCo} > E_{gNi} > E_{gvacan}$) และมีแนวโน้มลดลงมากขึ้นเมื่อเพิ่มจำนวนของโลหะแทนที่ โดยค่าพลังงานช่องว่างที่คำนวณได้จากงานวิจัยนี้สอดคล้องกับผลการทดลองและการคำนวณด้วยเทคนิคอื่น ในขณะที่ค่าพลังงานช่องว่างของซิงค์ออกไซด์ที่แทนที่ด้วยแมงกานีสมีแนวโน้มที่เพิ่มมากขึ้นและเพิ่มมากขึ้นเมื่อเพิ่มจำนวนของโลหะแทนที่ จากการศึกษาพลวัตเชิงโมเลกุลของซิงค์ออกไซด์ที่มีจุดบกพร่องแบบช่องว่าง พบว่าที่อุณหภูมิต่ำกว่า 1000 องศาเซลเซียสอนุภาคซิงค์และออกซิเจนเกิดแค่การสั่นของอนุภาคเท่านั้น ซึ่งออกซิเจนที่ใกล้กับจุดบกพร่องมีการสั่นมากที่สุด ในขณะที่อุณหภูมิมากกว่า 1000 องศาเซลเซียสขึ้นไปจะเกิดการเคลื่อนย้ายตำแหน่งของช่องว่างและมีแนวโน้มที่จะเกิดจุดบกพร่องเพิ่มมากขึ้น