**ชื่อเรื่องวิทยานิพนธ์** การจำลองแบบของฟิล์มบางแมกนีไทต์ด้วยทฤษฎีเชิงฟังก์ชันของความหนาแน่น

**ผู้เขียน** นายสิทธิเชนทร์ พราหมณ์ชู

**ปริญญา** วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (ฟิสิกส์)

**อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์** รองศาสตราจารย์ ดร. ยงยุทธ เหล่าศิริถาวร

## บทคัดย่อ

ในงานวิจัยนี้ ได้ทำการศึกษาผลของความหนาของฟิล์มบางแมกนีไทต์ ในระนาบ (110) โดยใช้ทฤษฎีเชิงฟังก์ชันของความหนาแน่นแบบที่คิดผลของสปิน ด้วยวิธีการกระจายบนฐานของคลื่นระนาบร่วมกับการประมาณศักย์จากแต่ละอะตอม และการประมาณความหนาแน่นเฉพาะที่แบบที่คิดผลของสปิน (LSDA) ในที่นี้ได้ทำการจำลองแบบฟิล์มบางแมกนีไทต์ ระนาบ (110) ที่มีความหนาตั้งแต่ 1 ถึง 10 ชั้น เพื่อศึกษาคุณสมบัติทางแม่เหล็กเฟอร์โรที่สำคัญ โดยเฉพาะค่าแมกนีไตเซชันเป็นฟังก์ชันกับความหนา ทั้งนี้คุณสมบัติของแมกนีไทต์ที่มีโครงสร้างเชิงปริมาตรได้ถูกคำนวณด้วย เพื่อศึกษาแนวโน้มการเปลี่ยนแปลงคุณสมบัติเข้าสู่ค่าของโครงสร้างเชิงปริมาตรเมื่อความหนาเพิ่มขึ้น จากผลที่ได้แสดงให้เห็นว่าแม้ กราฟความหนาแน่นสถานะของแมกนีไทต์ที่มีโครงสร้างเชิงปริมาตรจะบ่งบอกถึงคุณสมบัติกึ่งโลหะ ที่มีช่องว่างพลังงานตรงส่วนของสปินหลักประมาณ 0.02 ฮาร์ทรี แต่ฟิล์มบางแมกนีไทต์ระนาบ (110) ทุกความหนามีคุณสมบัติเป็นโลหะ อย่างไรก็ตามความเป็นโลหะมีแนวโน้มที่จะเปลี่ยนเป็นกึ่งโลหะเมื่อความหนาของฟิล์มเพิ่มขึ้น นอกจากนี้จากค่าแมกนีไตเซชันสุทธิ และกราฟความหนาแน่นสถานะแสดงให้เห็นว่าฟิล์มบางทุกแบบจำลองแสดงคุณสมบัติเป็นสารแม่เหล็กเฟอร์ริ แม้ในการศึกษาครั้งนี้สามารถสรุปได้ว่าเฟสแม่เหล็กไม่ขึ้นกับความหนาของฟิล์ม แต่อย่างไรก็ตามค่าแมกนีไตเซชันจำเพาะมีแนวโน้มเปลี่ยนแปลงตามความหนากล่าวคือ เมื่อความหนาเพิ่มขึ้นค่าแมกนีไตเซชันมีแนวโน้มลู่เข้าสู่ค่าของโครงสร้างเชิงปริมาตร ผลที่ได้สอดคล้องกับการทดลอง ซึ่งแสดงให้เห็นถึงความสำคัญของความหนาที่มีต่อพฤติกรรมทางแม่เหล็กของฟิล์มบางแมกนีไทต์ระนาบ (110)

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved

**Thesis Title** Simulation of Magnetite Thin Films by Density Functional Theory

**Author** Mr. Sittichain Pramchu

**Degree** Master of Science (Physics)

**Thesis Advisor** Assoc. Prof. Dr. Yongyut Laosiritaworn

## ABSTRACT

In this research, the thickness dependence of magnetite ($Fe_3O_4$(110)) thin films, were simulated using the spin polarized version of density-functional theory under plane-wave and pseudopotential implementation as well as local-spin density approximation (LSDA). $Fe_3O_4$(110) thin films with thickness ranging from 1 layer (1L) to 10 layers (10L) were modeled to investigate important ferromagnetic properties, especially the magnetization, as a function of thicknesses. The bulk properties of $Fe_3O_4$ were also calculated to investigate the asymptotic behavior which describes how those properties converge to the bulk's value, under the influence of thickness increasing. From the results, even though, the total spin-up and spin-down DOS in bulk structure presents a half-metallic behavior with a band gap in the majority spin channel of approximately 0.02 Hartree, the DOS of all $Fe_3O_4$(110) models are continuous in the vicinity of the Fermi level, which demonstrate that they have metallic properties. However, the increase in films thickness, the metallic phase tends to change to half-metallic phase. In addition, the total magnetizations and DOS plots indicate that all structures have ferrimagnetic properties. Although, in this case, it can be concluded that the magnetic phase is thickness independence, the specific magnetization tends to vary. Namely, with increasing thin film thickness, the specific magnetization rises to the bulk's value. These results agree well with experimental data, where applicable, and suggest of how thickness play vital role on magnetic behavior in $Fe_3O_4$(110) thin films

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright© by Chiang Mai University
All rights reserved