

อภิญญา งอยพาลา : การศึกษาบทบาทของการเจือฟอสฟอรัสต่อการเพิ่มการนำไฟฟ้าใน
ขั้วไฟฟ้าแອโนดบิสมัท瓦เนเดตโดยวิธีเฟิร์สทพրินซิเพล (ROLE OF PHOSPHORUS
DOPING IN ENHANCING THE ELECTRONIC CONDUCTIVITY OF BISMUTH
VANADATE PHOTOANODES: A FIRST-PRINCIPLES STUDY) อาจารย์ที่ปรึกษา :
ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.สุวิทย์ สุธีรากุล, 143 หน้า.

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้ได้ใช้วิธี DFT + U ในการศึกษาบทบาทของการเจือฟอสฟอรัสต่อการเปลี่ยนแปลงสมบัติทาง โครงสร้าง และอิเล็กทรอนิกส์ ความเสถียรของกาเกิดช่องว่างของออกซิเจน และการขนส่งประจุในขั้วไฟฟ้าแອโนดบิสมัท瓦เนเดต ผลการคำนวณแสดงให้เห็นว่า การเจือฟอสฟอรัสไม่ส่งผลอย่างมีนัยสำคัญต่อสมบัติทาง โครงสร้าง และอิเล็กทรอนิกส์ของบิสมัท วาเนเดต ในทางตรงกันข้าม การเจือฟอสฟอรัสทำให้บิสมัท瓦เนเดตถูกรีดิวช์ได้ดีขึ้นดังสะท้อนจากผลกระทบของพลังงานของการเกิดช่องว่างของออกซิเจน การมีหนึ่งช่องว่างของออกซิเจนจะทำให้เกิดอิเล็กตรอนโพลารอนสองตัวที่ตำแหน่งของวานเดียมสองอะตอมที่อยู่ใกล้กัน ซึ่งโพลารอนหนึ่งตัวจะติดอยู่ที่บริเวณจุดบกพร่อง ในขณะที่โพลารอนอีกหนึ่งตัวจะเคลื่อนที่ได้ ผลกระทบค่า พลังงานสำหรับการเคลื่อนที่ของโพลารอนจากที่หนึ่งไปยังที่หนึ่งและสภาพคล่องตัวของประจุที่ได้จากการจำลองแบบ ไคแนติกมอนติคาร์โลแสดงให้เห็นว่า การเจือฟอสฟอรัสไม่ได้เปลี่ยนแปลง การขนส่งโพลารอนอย่างมีนัยสำคัญ ดังนั้นจึงสรุปได้ว่า การเจือฟอสฟอรัสทำให้บิสมัท瓦เนเดตถูกรีดิวช์ได้ดีขึ้น ซึ่งส่งผลให้เกิดการเพิ่มประจุพาหะในบิสมัทวา-neเดต การเพิ่มขึ้นของความเข้มข้นพาหะจากการเกิดช่องว่างของออกซิเจนดังที่กล่าวมาข้างต้นจึงส่งผลทำให้เกิดการเพิ่มการนำไฟฟ้าในขั้วไฟฟ้าแອโนดบิสมัท瓦เนเดต

สาขาวิชาฟิสิกส์
ปีการศึกษา 2562

ลายมือชื่อนักศึกษา ธิตญา คงฤทธิ์
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา สุวิทย์ สุธีรากุล
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม นิตยา รุ่งเรือง

APINYA NGOIPALA : ROLE OF PHOSPHORUS DOPING IN
ENHANCING THE ELECTRONIC CONDUCTIVITY OF BISMUTH
VANADATE PHOTOANODES: A FIRST-PRINCIPLES STUDY.
THESIS ADVISOR : ASST. PROF. SUWIT SUTHIRAKUN, Ph.D. 143 PP.

PHOTOANODES/DOPING/OXYGEN VACANCY/CHARGE CARRIERS

In this thesis, DFT+U method was used to study the role of P doping on the change of the geometrical and electronic structures, the stabilities of oxygen vacancies and charge transport properties of BiVO₄ photoanodes. Our computations reveal that P impurities does not significantly affect the geometrical and electronic structure of BiVO₄. On the other hand, P doping improves the reducibility of BiVO₄ as reflect through the lower energies of oxygen vacancy formation. The generated oxygen vacancy yields two electron polarons localized at the two nearest V centers, where one polaron is always trapped at the defect site, while the other polaron is relatively mobile. The calculated polaron hopping barriers and their mobilities obtained from kinetic Monte Carlo simulations indicate that P impurity by itself does not significantly alter the behavior of polaron transport. To conclude, P doping improves reducibility of BiVO₄ which in turn increases the number of charge carriers in the material. The increased carrier concentration arising from oxygen vacancy formation could yield the improved electronic conductivity of BiVO₄ photoanodes.

School of Physics

Academic Year 2019

Student's Signature พงษ์นภา วงศ์พานิช

Advisor's Signature สุวิท ศุทธิรักษ์

Co-Advisor's Signature ปิยวราณี บุญเรือง