

ฐานันดร กงนอก : การศึกษาคุณสมบัติเชิงอิเล็กทรอนิกส์และเชิงแสงของสารกลุ่มทราน  
ซิชั่นเมทัลไดแคลโคจีไนด์ที่แทรกชั้นด้วยโลหะแอลคาไลโดยวิธีเฟิร์สทพรินซิเพิล (FIRST-  
PRINCIPLES STUDY OF ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF ALKALI  
METAL INTERCALATED TRANSITION METAL DICHALCOGENIDES) อาจารย์ที่ปรึกษา :  
รองศาสตราจารย์ ดร.ศิริโชค จิงถาวรณ, 109 หน้า.

คำสำคัญ : โครงสร้างเป็นชั้นซ้อนทับกัน/การแทรกตัวระหว่างชั้น

$\text{MoS}_2$  เป็นสารที่มีโครงสร้างเป็นชั้นรูปร่างคล้ายรวงผึ้งซ้อนทับกัน แต่ละชั้นดึงดูดกันแบบ  
อ่อน ๆ ด้วยแรงแวนเดอร์วาลส์ ทำให้สามารถปรับเปลี่ยนโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ได้โดยการแทรก  
โลหะเข้าไปที่ช่องว่างระหว่างชั้น งานวิจัยนี้ศึกษาผลของการแทรกโลหะแอลคาไลโดยวิธีเฟิร์สทพรินซิ  
เพิล ผลจากการคำนวณแสดงการขยายตัวของช่องว่างระหว่างชั้นและการเติมอิเล็กตรอน  
จากโลหะแอลคาไลไปที่แถบการนำ การขยายตัวของช่องว่างระหว่างชั้นนั้นเห็นได้ชัดว่าเพิ่มขึ้นตาม  
ขนาดอะตอมของโลหะ และการขยายนั้นยังทำให้ชนิดของช่องว่างแถบพลังงานเปลี่ยนจากแบบไม่ตรง  
เป็นแบบตรงได้เนื่องจากปฏิกิริยาระหว่างชั้นที่ลดลง ค่าคงที่ของแลททิซตามแนวระนาบขยาย  
เนื่องจากแรงผลักของไฟฟ้าสถิต คุณสมบัติอื่นที่สามารถนำไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองได้ เช่น  
ค่าคงที่เชิงโครงสร้าง กำลังพลังงานของการแพร่กระจาย และค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนยังถูก  
คำนวณอีกด้วย ทั้งนี้จากผลการคำนวณบ่งชี้ให้เห็นว่าเราสามารถปรับเปลี่ยนโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์  
ของสารกลุ่มทรานซิชั่นเมทัลไดแคลโคจีไนด์เพื่อนำไปประยุกต์ใช้กับอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เชิงแสงได้  
โดยการใช้ขนาดอะตอมที่แตกต่างกันและการเปลี่ยนความเข้มข้นของโลหะ

สาขาวิชาฟิสิกส์  
ปีการศึกษา 2564

ลายมือชื่อนักศึกษา ฐานันดร กงนอก  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา ศิริโชค

THANUNDON KONGNOK : FIRST-PRINCIPLES STUDY OF ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF ALKALI METAL INTERCALATED TRANSITION METAL DICHALCOGENIDES. THESIS ADVISOR : SIRICHOK JUNGTHAWAN, Ph.D. 109 PP.

Keyword : Layered structure/Intercalation

MoS<sub>2</sub> has a layered honeycomb structure with strong in-plane bonding and weak out-of-plane vdW interactions, which enables the engineering of electronic structures by intercalation. In this work, the effects of alkali metal intercalation on MoS<sub>2</sub> are investigated by using first-principles calculations. The results show a significant expansion of the interlayer spacing and contribution of electron donation from alkali metal to the conduction band of MoS<sub>2</sub>. The expansion obviously depends on the atomic radii of the intercalated metals. Moreover, the bandgap type changes from indirect to direct bandgap because of the reduction of electronic interactions between adjacent layers. In-plane lattice parameters increase proportionally to the concentration due to electrostatic repulsion. Other properties (such as structural parameters, diffusion barriers, absorption coefficients, etc.) that can be compared with experiments were calculated as well. Our results suggest that different atomic radii and concentrations of intercalated alkali metals could provide an opportunity to tune the electronic structures of TMDC materials and are promising in optoelectronic devices.

School of Physics  
Academic Year 2021

Student's Signature Thanundon Kongnok  
Advisor's Signature Sirichok Jungthawan