

สิริโชค จิ่งถาวรณ : ผลของการเรียงตัวในระบบอัลลอยของสารกึ่งตัวนำกลุ่ม III-V: การศึกษาเชิงทฤษฎีและเชิงคำนวณ (EFFECTS OF ORDERING IN III-V SEMICONDUCTOR ALLOY SYSTEMS: A THEORETICAL AND COMPUTATIONAL STUDY)  
อาจารย์ที่ปรึกษา : ศาสตราจารย์ ดร. ชูกิจ ลิมปิจันทร์, 174 หน้า.

วิทยานิพนธ์นี้ได้ศึกษาคุณสมบัติของสารกึ่งตัวนำผสมชนิดสามธาตุและสี่ธาตุ โดยวิธี แจกแจงโดยตรง โดยพิจารณารูปแบบต่างๆ ของการจัดเรียงตัวของธาตุผสม ในแบบจำลอง ทางทฤษฎี ภายใต้ขนาดของเซลล์หน่วยที่กำหนด ได้ทำการศึกษาคุณสมบัติของสารผสม ในโครงสร้างเหล่านี้โดยวิธีพลังงานศักย์เทียมเชิงเอมพิริคัล และวิธีฟังก์ชันนัลของความหนาแน่น ได้ทำการทดสอบความถูกต้องของตัวแปรเสริมของพลังงานศักย์เทียมเชิงเอมพิริคัลสำหรับระบบ สารผสม โดยเปรียบเทียบกับการคำนวณแบบเฟสฟิลด์พริซิเพิล ซึ่งแสดงให้เห็นถึงความสอดคล้อง กัน ทั้งนี้ได้ทำการศึกษาโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ของสารผสมเจือจาง AlGaAs และ GaInP โดยการ แจกแจงรูปร่างของเซลล์ทุกแบบโดยตรง และการขยายรูปร่างของเซลล์หน่วยที่มีขนาดเล็ก เพื่อ จำลองการเรียงตัวแบบกลุ่ม พบว่าการลดของแถบพลังงานและการเพิ่มของมวลยังผล จะเกิดขึ้น ในการเรียงตัวของซูเปอร์แลตทิซในบางทิศทาง แถบพลังงานในสารผสมสี่ธาตุ AlGaInP นั้น ขึ้นกับการเรียงตัวของแคตไอออนอย่างมาก สำหรับประเภทของแถบพลังงาน ได้แก่ แบบตรง และ แบบอ้อม พบว่าขึ้นกับองค์ประกอบของสารผสมอย่างมาก แต่ขึ้นกับการเรียงตัวของแคตไอออน เพียงเล็กน้อย ได้แสดงขอบเขตของแถบพลังงานแบบตรง ในปฏิภูมิขององค์ประกอบของสารผสม ได้แนะนำวิธีการตรวจสอบองค์ประกอบของสารผสม โดยเทคนิคการดูดกลืนรังสีเอกซ์

สาขาวิชาฟิสิกส์  
ปีการศึกษา 2550

ลายมือชื่อนักศึกษา สิริโชค จิ่งถาวรณ  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา ชูกิจ ลิมปิจันทร์  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม Waisorn Kim

SIRICHOK JUNGTHAWAN : EFFECTS OF ORDERING IN III–V  
SEMICONDUCTOR ALLOY SYSTEMS: A THEORETICAL AND  
COMPUTATIONAL STUDY. THESIS ADVISOR : PROF. SUKIT  
LIMPIJUMNONG, Ph.D. 174 PP.

## SEMICONDUCTOR ALLOYS/DIRECT ENUMERATION

In this thesis, the properties of ternary and quaternary alloys are studied using direct enumeration approach by considering a large number of the arrangements of the constituent elements in theoretical model within a specified size of the unit cell. The empirical pseudo potential method (EPM) and the density functional theory are used to study the properties of alloys in these configurations. The validity of EPM for alloys is tested against first–principles calculations and a reasonable agreement is obtained. The electronic band structures of dilute AlGaAs and GaInP alloys are also studied. The alloy configurations are generated up to desired concentration by direct enumerating all possible cell shapes and by expanding the cell shape already found in smaller cell to simulate the cluster–like configurations. The bandgap reductions and increasing effective masses are observed in superlattice ordering in some specific directions. The bandgaps of AlGaInP are found to depend strongly on the arrangement of the cations. The type of the bandgap (direct or indirect) is found to depend strongly on the alloy composition but only weakly on the cation arrangement. The domains in the alloy composition space for the direct and indirect bandgaps are identified. The analysis of alloy composition using x–ray absorption spectroscopy is suggested.

School of Physics

Academic Year 2007

Student's Signature Sirichok Jungthawan

Advisor's Signature Sukit Limpijumnong

Co–advisor's Signature Phisorn Keim