กนกนันทน์ สารสมัคร : ความสัมพันธ์ระหว่างเอนทัลปีของเฟสที่แตกต่างกันในตัวแทนสารกึ่งตัวนำแบบเวิร์ตไซต์: การคำนวณแบบแอบ อินิธิโอ (ENTHALPY RELATIONS BETWEEN DIFFERENT PHASES IN REPRESENTATIVE WURTZITE SEMICONDUCTORS: *AB INITIO* CALCULATIONS)
อาจารย์ที่ปรึกษา : ศาสตราจารย์ ดร. ชูกิจ ลิมปิจำนงค์, 180 หน้า.

ในวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ได้มีการศึกษาคุณสมบัติเชิงกลบางอย่างของ SiC GaN InN ZnO และ CdSe โดยวิธีคำนวณแบบแอบ อินิธิโอ ภายใต้สภาวะปกติ พบว่า สารเหล่านี้มีโครงสร้างผลึกแบบเวิร์ตไซต์ ภายใต้สภาวะความดันสูงสารเหล่านี้สามารถเปลี่ยนโครงสร้างผลึกไปเป็นโครงสร้างผลึกแบบรอคซอลต์ได้ และได้คำนวณค่าความดันสมดุลสำหรับการเปลี่ยนโครงสร้างผลึกของสารประกอบเหล่านี้ นอกจากนั้นแล้วความเค้นแบบแกนเดี่ยวยังสามารถทำให้ผลึกเวิร์ตไซต์ เปลี่ยนโครงสร้างไปเป็นผลึกเวิร์ตไซต์ที่มีระนาบผลึกไม่โค้งงอได้ โดยพบว่าความเค้นที่สามารถทำให้เกิดการเปลี่ยนโครงสร้างดังกล่าวคือความเค้นกดแบบแกนเดี่ยวตามทิศทาง [0001] และความเค้นดึงแบบแกนเดี่ยวตามทิศทาง $[01\bar{1}0]$ ซึ่งได้คำนวณค่าความเค้นวิกฤติสำหรับกรณีต่าง ๆ ไว้ด้วยแล้ว นอกจากนั้นยังพบอีกว่าความเค้นดึงแบบแกนเดี่ยวตามทิศทาง [0001] สามารถทำให้ ZnO เกิดการเปลี่ยนโครงสร้างผลึกไปเป็นผลึกแบบเตตระโกนอลที่มีอะตอมอยู่ตรงกลาง (BCT-4) ซึ่งเป็นโครงสร้างใหม่ที่ยังไม่เคยมีการรายงานมาก่อนสำหรับ ZnO ความดันสมดุลหรือความเค้นสมดุลในการเปลี่ยนโครงสร้างที่คำนวณได้นี้สอดคล้องเป็นอย่างดีกับผลจากการคำนวณและการทดลองที่มีมาในอดีต ความเสถียรของแต่ละโครงสร้างนั้นศึกษาได้จากการวิเคราะห์ค่าเอนทัลปีเป็นฟังก์ชันของตัวแปรโครงผลึก *c/a* และ *b/a* ท้ายสุดยังมีการศึกษาพฤติกรรมของค่าคงที่ยืดหยุ่นที่เป็นฟังก์ชันของความดันของสารที่กล่าวข้างต้น โดยได้พบความสัมพันธ์กับการเปลี่ยนโครงสร้างผลึกจากแบบเวิร์ตไซต์ไปเป็นแบบรอคซอลต์ด้วย

สาขาวิชาฟิสิกส์ ลายมือชื่อนักศึกษา _____
ปีการศึกษา 2551 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา _____
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม _____

KANOKNAN SARASAMAK : ENTHALPY RELATIONS BETWEEN DIFFERENT PHASES IN REPRESENTATIVE WURTZITE SEMICONDUCTORS: *AB INITIO* CALCULATIONS. THESIS ADVISOR : PROF. SUKIT LIMPIJUMNONG, Ph.D. 180 PP.

ENTHALPY/WURTZITE/SEMICONDUCTORS/*AB INITIO*

In this thesis, some mechanical properties of SiC, GaN, InN, ZnO, and CdSe are studied using *ab initio* calculations method. Under ambient conditions, these compounds have the wurtzite (WZ) structure. Under large hydrostatic pressure, the transformation into the rocksalt (RS) structure can take place. The equilibrium transformation pressures are calculated. Moreover, uniaxial stresses can cause the transformation into an unbuckled wurtzite structure (HX) under uniaxial compressive stress along the [0001] crystalline direction or uniaxial tensile stress along the $[01\bar{1}0]$ crystalline direction and the critical stresses are calculated. In addition, the novel structure, a body centered tetragonal (BCT-4) structure was predicted for ZnO under uniaxial tensile stress along [0001] direction. The predicted equilibrium transformation pressures and stresses are in good agreement with available theoretical and experimental results. The stability of each crystal structure is studied by analyzing enthalpy as a function of lattice parameters *c/a* and *b/a*. The behavior of the elastic constants as a function of pressure, which related to the WZ-to-RS phase transformation, is also studied for above compounds.

School of Physics

Academic Year 2008

Student's Signature _____

Advisor's Signature _____

Co–advisor's Signature _____