จารุ จุติมูสิก : โครงสร้างเฉพาะบริเวณของผลึกนาโนแมกนีเซียมซิงค์ออกไซด์ (LOCAL STRUCTURE OF MAGNESIUM ZINC OXIDE NANOCRYSTALS) อาจารย์ที่ปรึกษา : ดร.สาโรช รุจิรวรรธน์, 114 หน้า.

แมกนีเซียมซิงค์ออกไซด์ เป็นสารประกอบกึ่งตัวนำที่มีช่องว่างแถบพลังงานกว้าง ซึ่งสามารถปรับค่าได้ครอบคลุมในช่วง 3.3-7.8 อิเล็กตรอนโวล์ ทำให้เป็นที่นิยมในการนำมาประยุกต์ใช้กับทัศนอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์สำหรับแสงในย่านความถี่อัลตราไวโอเลต ในทางทฤษฎีนั้น แมกนีเซียมซิงค์ออกไซด์สามารถเตรียมขึ้นได้จากการอัลลอยซิงค์ออกไซด์ให้เข้ากับแมกนีเซียมออกไซด์ และเนื่องจากแมกนีเซียมออกไซด์มีโครงสร้างแบบร็อคซอลต์ ขณะที่ซิงค์ออกไซด์มีโครงสร้างแบบเวอร์ทไซท์ ดังนั้นอัลลอยของแมกนีเซียมซิงค์ออกไซด์จึงควรจะมีโครงสร้างทั้งแบบเวอร์ทไซท์และร็อคซอลต์ ทั้งนี้ขึ้นอยู่กับอัตราส่วนของปริมาณแมกนีเซียมและสังกะสีที่ใช้ในการเตรียม ในการศึกษาครั้งนี้ได้เสนอวิธีการตกตะกอนร่วมเพื่อใช้ในการสังเคราะห์ผลึกนาโนแมกนีเซียมซิงค์ออกไซด์ที่มีปริมาณของแมกนีเซียมในอัตราส่วนต่าง ๆ กัน และในการวิเคราะห์ สมบัติทางโครงสร้างของผลึกนาโนแมกนีเซียมซิงค์ออกไซด์ที่เตรียมขึ้นนั้น ได้ใช้เครื่องมือวิเคราะห์แบบมาตรฐานต่าง ๆ ร่วมกับเทคนิคสเปกโทรสโกปีการดูดกลืนรังสีเอกซ์ ซึ่งจะนำมาใช้ศึกษาโครงสร้างเฉพาะบริเวณของอะตอมแมกนีเซียมและสังกะสีในผลึกนาโนแมกนีเซียมซิงค์ออกไซด์ที่เตรียมขึ้น

จากการศึกษาด้วยวิธีการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ พบว่าสารตัวอย่างแมกนีเซียมซิงค์ออกไซด์ที่มีปริมาณแมกนีเซียมน้อยกว่าหรือเท่ากับ 4% จะมีโครงสร้างเป็นแบบเวอร์ทไซท์ และสารตัวอย่างแมกนีเซียมซิงค์ออกไซด์ที่มีปริมาณแมกนีเซียมมากกว่าหรือเท่ากับ 90% จะมีโครงสร้างเป็นแบบร็อคซอลต์ สำหรับสารตัวอย่างที่มีปริมาณแมกนีเซียมอยู่ระหว่าง 4% ถึง 90% จะมีทั้งเฟสของเวอร์ทไซท์และร็อคซอลต์ผสมกันอยู่ ทั้งนี้ไม่ปรากฏว่ามีการเปลี่ยนโครงสร้างเฟสอย่างชัดเจนเกิดขึ้นภายใต้เงื่อนไขที่ได้ทำการสังเคราะห์ สำหรับขนาดของผลึกสารตัวอย่างนั้น พบว่ามีแนวโน้มเล็กลงเมื่อปริมาณแมกนีเซียมเพิ่มสูงขึ้น ซึ่งสอดคล้องกับการศึกษาโดยใช้กล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนแบบส่องผ่าน และ การศึกษาด้วยวิธีการเลี้ยวเบนลำอิเล็กตรอน

เมื่อทำการวิเคราะห์โครงสร้างโดยรอบของอะตอมแมกนีเซียมและสังกะสีในผลึกนาโนแมกนีเซียมซิงค์ออกไซด์ โดยใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีการดูดกลืนรังสีเอกซ์ในช่วง โครงสร้างบริเวณใกล้ขอบการดูดกลืน (XANES) โดยทำการวัดที่ขอบการดูดกลืน K ของอะตอมแมกนีเซียมและสังกะสี พบว่าสเปกตรัมทั้งหมดเกิดขึ้นจากโครงสร้างพื้นฐานสองแบบ นั่นคือเมื่ออะตอมโลหะมีโครงสร้างโดยรอบเป็นแบบร็อคซอลต์ (6 ทบ) และแบบเวอร์ทไซท์ (4 ทบ) จากการ

วิเคราะห์โดยใช้ การประมาณแบบเชิงเส้น ทำให้สามารถหาค่าอัตราส่วนของร็อคซอลต์ต่อเวอร์ทไซท์ของสารตัวอย่างทั้งหมดได้ และจากอัตราส่วนดังกล่าวพบว่าในสารตัวอย่างที่มีปริมาณแมกนีเซียมต่ำ ๆ อะตอมโลหะส่วนใหญ่จะอยู่ที่ตำแหน่งของเวอร์ทไซท์ สำหรับสารตัวอย่างที่มีปริมาณแมกนีเซียมสูง ๆ อะตอมโลหะส่วนใหญ่มักอยู่ที่ตำแหน่งของร็อคซอลต์ นอกจากนี้ ผลที่ได้จากการทดลองโดยใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีการดูดกลืนรังสีเอกซ์ยังสามารถสรุปได้ว่า สารตัวอย่างแต่ละตัวนั้นอะตอมแมกนีเซียมมีอัตราส่วนร็อคซอลต์ต่อเวอร์ทไซท์สูงกว่าอะตอมสังกะสี หรือสามารถแสดงให้เห็นได้อย่างชัดเจนโดยการทดลองว่าอะตอมแมกนีเซียมชอบที่จะอยู่ในตำแหน่ง 6 ทบ ขณะที่อะตอมของสังกะสีชอบที่จะอยู่ในตำแหน่ง 4 ทบมากกว่า เมื่ออัลลอยของแมกนีเซียมซิงค์ออกไซด์อยู่ในภาวะสมดุลทางความร้อนในระหว่างการสังเคราะห์ นอกจากนี้ อัตราส่วนของร็อคซอลต์ต่อเวอร์ทไซท์ได้ถูกนำมาใช้ในการจำลองสเปกตรัมการดูดกลืนรังสีเอกซ์ทางทฤษฎี โดยการใช้โปรแกรม FEFF ซึ่งผลที่ได้สอดคล้องเป็นอย่างดีกับผลจากการทดลอง

สาขาวิชาฟิสิกส์ ลายมือชื่อนักศึกษา________________________

ปีการศึกษา 2553 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา__________________

JARU JUTIMOOSIK : LOCAL STRUCTURE OF MAGNESIUM ZINC OXIDE NANOCRYSTALS. THESIS ADVISOR : SAROJ RUJIRAWAT, Ph.D. 114 PP.

MAGNESIUM ZINC OXIDE / X-RAY ABSORPTION SPECTROSCOPY/ NANOCRYSTAL

$Mg_xZn_{1-x}O$ (MZO) is an attractive wide-band gap semiconductor for deep ultraviolet optoelectronic device since its bandgap is tunable over a broad range, from 3.3-7.8 eV. In principle, MZO can be obtained from alloying MgO with ZnO. However, since MgO has rocksalt (RS) structure and ZnO has wurtzite (WZ) structure, MZO alloys would have RS and WZ structure depending on the magnesium concentration. In this study, the co-precipitation method was used to synthesize MZO nanocrystals with various Mg concentrations ($0 \leq x \leq 1$). The standard analytical instruments and the synchrotron-based x-ray absorption spectroscopy (XAS) were used to investigate the structural properties of MZO nanocrystals, especially to study the local structure of Mg and Zn in MZO nanocrystals.

From x-ray diffraction, it was found that the MZO nanocrystal samples with $x \leq 0.04$ exhibit pure WZ and the MZO samples with $x \geq 0.90$ have RS structure. For $0.04 < x < 0.90$, the samples have mixed WZ and RS phases. There is no clear evidence for the composition that structural phase transition takes place. The crystallite size tended to decrease as the Mg content increased. The results agreed well with the measurements from transmission electron microscope and electron diffraction.

Both Mg and Zn *K*-edges XANES spectra of MZO nanocrystal samples were taken to shed light on the local structure around Mg and Zn atoms. It was found that all spectra can be fitted by using two basis types when the central metal atoms resides in either RS local structure (6-folds) or WZ local structure (4-folds). By linear combination analysis the RS/WZ ratios were obtained for all samples. From RS/WZ, it was found that the majority of metal atoms occupy WZ sites for samples with low *x* and RS sites for samples with high *x*. Moreover, form XAS results, it can be concluded that for each sample (at the same concentration) Mg atom has higher RS/WZ ratio compared to that of Zn atom. This can be viewed as an experimental evidence that, in MZO alloys at thermal equilibrium, Mg atom prefers 6-fold site while Zn atom prefers 4-fold site. The RS/WZ ratios were also used for the simulation of XAS spectra using FEFF software. All features in the XANES spectra can be theoretical reproduced well in both Mg and Zn edges.

School of Physics   Student's Signature______________________

Academic Year 2010   Advisor's Signature______________________