

ณราศีกดิ์ พันเดช : การศึกษาสมบัติการยืดหยุ่นของสารเพอร์โรวสไกต์บางชนิดภายใต้
ภาวะแรงดันโดยวิธีเฟิร์สท์พริ้นซิเพิล (FIRST-PRINCIPLES STUDY OF PRESSURE
DEPENDENT ELASTIC PROPERTIES IN SELECTED PEROVSKITE MATERIALS)
อาจารย์ที่ปรึกษา : ศาสตราจารย์ ดร.ชูกิจ ลิมปิจำนงค์, 108 หน้า.

ในวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ได้มีการศึกษาคุณสมบัติความยืดหยุ่นของสารประกอบออกไซด์
แบบเพอร์โรวสไกต์บางชนิด ได้แก่ BeTiO_3 , MgTiO_3 , CaTiO_3 , SrTiO_3 , BaTiO_3 , PbTiO_3 , PbZrO_3
และ PbHfO_3 โดยวิธีคำนวณแบบเฟิร์สท์พริ้นซิเพิล (หรือ แอบ อินิธิโอ) โดยพบว่าค่าคงที่ความ
ยืดหยุ่นที่คำนวณได้นั้นสอดคล้องพอควรกับผลจากการคำนวณและการทดลองที่มีในอดีต สำหรับ
 PbTiO_3 และ PbZrO_3 นั้นได้ศึกษาผลของความดันต่อคุณสมบัติความยืดหยุ่นและความเร็วเสียง
ภายใต้ภาวะความดันในช่วง 0 ถึง 40 จิกะปาสกาล พบว่าค่าคงที่ความยืดหยุ่นและความเร็วเสียงมีค่า
เพิ่มขึ้นตามความดันเกือบจะเป็นรูปแบบการแปรผันตรงในช่วงดังกล่าว โดยค่าคงที่ความยืดหยุ่น
 C_{11} ได้เพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็วในขณะที่ค่าคงที่ความยืดหยุ่น C_{12} และ C_{44} มีการเปลี่ยนแปลงกับความ
ดันค่อนข้างน้อย นอกจากนี้แล้วยังได้ศึกษาผลของไอออนบวกที่มีต่อค่าคงที่ความยืดหยุ่น โดย
พบว่าค่าคงที่ความยืดหยุ่น C_{11} จะมีค่าสูงสุดเมื่อขนาดของไอออนบวกที่ตำแหน่ง A และ B มีขนาด
ใกล้เคียงกัน ค่าคงที่ความยืดหยุ่น C_{12} นั้นได้รับอิทธิพลจากไอออนบวกที่ตำแหน่ง B และค่าคงที่
ความยืดหยุ่น C_{44} ได้รับอิทธิพลจากไอออนบวกที่ตำแหน่ง A รายละเอียดและเหตุผลของการ
เปลี่ยนแปลงค่าความยืดหยุ่นกับไอออนบวกแต่ละชนิดได้ถูกอภิปรายในวิทยานิพนธ์นี้

สาขาวิชาฟิสิกส์
ปีการศึกษา 2556

ลายมือชื่อนักศึกษา _____
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา _____

NARASAK PANDECH : FIRST-PRINCIPLES STUDY OF PRESSURE
DEPENDENT ELASTIC PROPERTIES IN SELECTED PEROVSKITE
MATERIALS. THESIS ADVISOR : PROF. SUKIT LIMPIJUMNONG,
Ph.D. 108 PP.

ELASTIC PROPERTIES/PEROVSKITE/FIRST PRINCIPLES

In this thesis, the elastic properties of selected perovskite oxides materials, i.e., BeTiO₃, MgTiO₃, CaTiO₃, SrTiO₃, BaTiO₃, PbTiO₃, PbZrO₃ and PbHfO₃, were studied using first principles (or *ab initio*) methods. Our calculated elastic properties are in reasonable agreement with the available theoretical and experimental results. For PbTiO₃ and PbZrO₃, the pressure dependencies of their elastic properties and sound velocities were studied in the pressure range of 0 – 40 GPa. All elastic constants and sound velocities increase with the pressure in this range with an almost perfect linear trend. C_{11} elastic constant rapidly increases with the pressure while C_{12} and C_{44} are found to be less sensitive to the pressure. The effects of cation species on the elastic properties were also investigated. The maximum C_{11} elastic constant is found when the atomic size of the cations at the A-site and B-site are comparable. C_{12} elastic constant is sensitive to B-site cations while C_{44} elastic constant is sensitive to A-site cations. Details and reasons for such dependencies were discussed.

School of Physics

Academic Year 2013

Student's Signature _____

Advisor's Signature _____