ธนชาติ เอกนภากุล : โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์สองมิติบนพื้นผิววัสดุโลหะทรานซิชันไดแชลโคเจไนด์โดยเทคนิคโฟโตอิมิชชันสเปกโทสโกปี (TWO DIMENSIONAL ELECTRONIC STRUCTURES AT THE SURFACES OF TRANSITION METAL DICHALCOGENIDES MEASURED BY PHOTOEMISSION SPECTROSCOPY) อาจารย์ที่ปรึกษา : ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.วรวัฒน์ มีวาสนา, 146 หน้า.

โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์สองมิติที่เกิดในวัสดุแบบก้อนใหญ่ถูกพบว่าจะแสดงสมบัติแปลกใหม่ เช่น การแยกออกของสปินกับวงโคจรแบบรัชบาและแก๊สอิเล็กตรอนสองมิติ หลังจากการค้นพบกราฟีนในปี พ.ศ. 2548 มีการเพิ่มขึ้นของการศึกษาวัสดุสองมิติและวัสดุแบบชั้นเพื่อค้นหาวัสดุที่สามารถนำมาประยุกต์ใช้งานได้เหนือกว่าอุปกรณ์ในปัจจุบัน วิทยานิพนธ์นี้แบ่งออกเป็นสองส่วน คือ การศึกษาโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์สองมิติในวัสดุโลหะทรานซิชันออกไซด์และการศึกษาเกี่ยวกับวัสดุโลหะทรานซิชันไดแชลโคเจไนด์แบบชั้น โครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ของวัสดุถูกศึกษาโดยใช้เทคนิคโฟโตอิมิชชันแบบแยกแยะเชิงมุมและการคำนวณทางทฤษฎีถูกศึกษาโดยใช้ทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่น

ส่วนแรกจะเน้นไปที่การศึกษาโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์สองมิติของวัสดุโลหะทรานซิชันออกไซด์ ซึ่งการศึกษาในส่วนนี้มีความสำคัญเกี่ยวกับการทำความเข้าใจเทคนิคโฟโตอิมิชชันและเป็นพื้นฐานสำหรับโครงสร้างที่ซับซ้อนขึ้นในวัสดุโลหะทรานซิชันไดแชลโคเจไนด์ ในส่วนนี้ได้ทำการศึกษาเกี่ยวกับการสร้างและควบคุมสมบัติของแก๊สอิเล็กตรอนสองมิติและการประยุกต์เกี่ยวกับเซนเซอร์แสงของวัสดุ $SrTiO_3$ ประกอบกับการศึกษาโครงสร้างชั้นย่อยของแก๊สอิเล็กตรอนสองมิติในวัสดุ $KTaO_3$ โดยผลการศึกษาพบว่าช่องว่างของออกซิเจน การสะสมของอิเล็กตรอนบนพื้นผิวและสมบัติการมีขั้ว/ไม่มีขั้ว เป็นปัจจัยสำคัญเกี่ยวกับการเกิดโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์สองมิติ

ส่วนที่สองจะมุ่งเน้นไปที่การศึกษาเกี่ยวกับวัสดุโลหะทรานซิชันไดแชลโคเจไนด์ ซึ่งประกอบไปด้วยวัสดุ MoS_2 WSe_2 $PdTe_2$ และ $HfSe_2$ โดยเริ่มจากวัสดุ MoS_2 ซึ่งเป็นส่วนหลักของวิทยานิพนธ์และมีสมบัติที่น่าสนใจคือ วัสดุชนิดนี้มีการเปลี่ยนสมบัติจากประเภทช่องว่างแถบพลังงานแบบไม่ตรงเป็นประเภทช่องว่างแถบพลังงานแบบตรงเมื่อถูกทำให้บางลงจนเป็นแบบผิวชั้นเดียว งานวิจัยนี้ได้แสดงกลวิธีใหม่ที่อาจจะสามารถใช้ในการเตรียมวัสดุผิวชั้นเดียวขนาดใหญ่โดยการสอดแทรกของโพแทสเซียมเข้าไปในพื้นผิวของวัสดุ MoS_2 จากการทดลองพบว่าโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์มีการเปลี่ยนแปลงหลังจากการเจือด้วยโลหะแอลคาไลน์ ผลการ

ทดลองในวัสดุตัวอย่างแรกเริ่มแสดงให้เห็นว่าไม่มีหลักฐานการมีอยู่ของแถบตัวนำ และมีการค้นพบการแยกออกของสปินกับวงโคจรขนาดใหญ่ที่แถบวาเลนซ์ประมาณ 180 มิลลิอิเลกตรอนโวลท์ โดยหลังจากการเจือโพแทสเซียมลงบนผิวของวัสดุ MoS_2 แถบตัวนำสองมิติได้ถูกทำให้ปรากฏขึ้นและสิ่งที่น่าสนใจอย่างมากคือ แถบตัวนำที่เกิดขึ้นอยู่ที่โมเมนตัมใกล้เคียงอย่างมากกับแถบวาเลนซ์ กล่าวได้ว่าวัสดุนี้มีการเปลี่ยนแปลงจากประเภทช่องว่างแถบพลังงานแบบไม่ตรงเป็นประเภทช่องว่างแถบพลังงานแบบตรง จากการศึกษาด้วยเทคนิคเอกซเรย์โฟโตอิมิชชันสเปกโทสโกปีควบคู่กับการคำนวณพลังงานก่อเกิดชี้ให้เห็นว่า อะตอมของโพแทสเซียมได้สอดแทรกเข้าไปในชั้นบนสุดของวัสดุ MoS_2 และแสดงสภาพเสมือนของผิวชั้นเดียว นอกจากนี้ยังพบว่าการคำนวณโดยใช้แบบจำลองการขยายตัวของระยะห่างระหว่างชั้นมีความสอดคล้องอย่างมากกับผลการทดลอง ในส่วนที่สองจะเป็นการนำเสนอผลการทดลองเกี่ยวกับวัสดุโลหะทรานซิชันไดแชลโคเจไนด์ชนิดต่างๆ ที่ได้เป็นส่วนหนึ่งของโครงการวิจัย เริ่มจากการศึกษาการแยกออกของสปินกับวงโคจรในระบบที่ไม่มีสมมาตรแบบกลับและสมบัติการบีบอัดอิเล็กตรอนเชิงลบโดยการเจือด้วยโลหะแอลคาไลน์ในวัสดุ WSe_2 นอกจากนี้ ผลการทดลองเบื้องต้นเกี่ยวกับการค้นพบจุดดิแรกสามมิติและการแยกออกของรัชบาแบบกลับในวัสดุ $PdTe_2$ ประกอบกับการพบแถบพลังงานสองมิติของโซเดียมบนผิวของวัสดุ $HfSe_2$ จะถูกนำเสนอในลำดับสุดท้าย

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

สาขาวิชาฟิสิกส์ ลายมือชื่อนักศึกษา_____

ปีการศึกษา 2558 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา_____

TANACHAT EKNAPAKUL : TWO DIMENSIONAL ELECTRONIC STRUCTURES AT THE SURFACES OF TRANSITION METAL DICHALCOGENIDES MEASURED BY PHOTOEMISSION SPECTROSCOPY. THESIS ADVISOR : ASST. PROF. WORAWAT MEEVASANA, Ph.D. 146 PP.

TWO-DIMENSIONAL ELECTRONIC STRUCTURE/TRANSITION METAL DICHALCOGENIDES/ANGLE-RESOLVED PHOTOEMISSION SPECTROSCOPY

Two-dimensional (2D) electronic structure detected in many materials are known to exhibit exotic properties, including the emergence of Rashba spin-orbit splitting and two-dimensional electron gases (2DEGs). Interestingly, after graphene was discovered in 2005, there have been a number of studies on 2D materials focusing on 2DEGs and layered compounds, searching for novel applications beyond the conventional ones. This thesis has been divided into two main parts; the study of 2D electronic structure observed in transition metal oxides (TMOs) and the study of layered-transition metal dichalcogenides (Layered-TMDs). The electronic structure of materials has been studied by the angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) and the theoretical calculation has been done by density functional theory (DFT).

The first part focuses on the study of 2D electronic structure on TMOs. This study is very important which gives the essential knowledge prompting us to understand the electronic structures of TMDs. In this part, the creation and control of 2DEGs at the surface of $SrTiO_3$ have been studied. The subband structure of 2DEGs observed in $KTaO_3$ has also be studied to understand surface electron accumulation, and the polar/non-polar surface properties.

In the second part, the study of the layered-TMDs including MoS_2, WSe_2, $PdTe_2$ and $HfSe_2$ has been performed. Firstly, I will present the study of MoS_2 which is the main part of this thesis. MoS_2 exhibits a striking crossover from indirect to direct band gap while being thinned down to a monolayer. Here, we present the new way to prepare a large scale monolayer on MoS_2 surfaces by using potassium intercalation. Our ARPES result shows the change of electronic structure after dosing alkali metal at the sample surfaces. In pristine sample, we found the Fermi energy inside the gap and the large spin-orbit splitting at the valence band maximum (VBM) to be around 180 meV. After dosing of potassium, the 2D like state at the conduction band has emerged. Surprisingly, the conduction band minimum (CBM) appears to be nearly at the same momentum as the VBM, indicating the transition from indirect to direct band gap. The x-ray photoemission spectroscopy (XPS) data and the formation energy calculation claims the potassium intercalation process near the top layer giving the quasi-freestanding MoS_2 monolayer. Furthermore, the DFT calculation with c/a expansion is also in good agreement with the ARPES data. Secondly, I will give the brief information about the other layered-TMDs which I have participated as a part of projects. The strong spin-orbit spitting on inversion asymmetry system and the negative electron compressibility (NEC) by alkali metal doping have been described in WSe_2. The preliminary result of the discovery of 3D-Dirac point and inverted-Rashba splitting in $PdTe_2$ and the observation of 2D sodium bands formed at the surface of $HfSe_2$ have also been included.

School of Physics Student's Signature _____

Academic Year 2015 Advisor's Signature _____