

อิทธิพล ฟองแก้ว : การคำนวณแบบเฟิร์สพริન્ซิเพิลของความบกพร่องและรอยต่อบางชนิด
ในสารกลุ่มเพอโรฟสไกต์ออกไซด์ (FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS OF
SELECTED DEFECTS AND INTERFACES OF PEROVSKITE OXIDES)
อาจารย์ที่ปรึกษา : ศาสตราจารย์ ดร.ชูกิจ ลิมปิจำนงค์, 279 หน้า.

ในวิทยานิพนธ์นี้ได้ใช้การคำนวณแบบเฟิร์สพริન્ซิเพิลคำนวณ โครงสร้างภายในและ
อัตรลักษณ์ของความบกพร่อง หรือสารเจือและเปรียบเทียบกับผลการทดลองที่มี ในวิทยานิพนธ์นี้
มุ่งเน้นการคำนวณหาอัตรลักษณ์ของสารเจืออยู่สามสิ่งที่มีความสัมพันธ์กับโครงสร้างโดยรอบของ
สารเจือเป็นอย่างมาก นั่นคือ ความถี่การสั่น การดูดกลืนรังสีเอกซ์ และพลังงานของรังสีเอกซ์ใน
การกระตุ้นอิเล็กตรอนในอะตอมของ ซึ่งผลการศึกษาที่สำคัญสามารถสรุปได้ดังต่อไปนี้ (1) ได้
ทำการศึกษาความเสถียร ตำแหน่ง และความถี่การสั่นของอะตอมไฮโดรเจน (H) ใน SrTiO₃
เพอโรฟสไกต์ออกไซด์ ซึ่งได้เสนอสาเหตุของการพบช่วงความถี่การสั่น 3500 ต่อเซนติเมตร เกิด
จากการก่อตัวของ H กับความบกพร่องแบบช่องว่างของ Sr ($H-V_{Sr}$) ขณะที่ $2H-V_{Sr}$ สามารถเกิดขึ้น
ได้ด้วยกรณี H มีความเข้มข้นสูงซึ่งสามารถอธิบายพีกสัญญาณบริเวณใกล้ 3500 ต่อเซนติเมตรได้
และสอดคล้องกับการทดลองในการสังเกตพบช่วงความถี่การสั่น 3500 ต่อเซนติเมตรได้เป็นอย่างดี
ดี นอกจากนี้ ยังได้เสนอที่มาของการสังเกตพบพีกสัญญาณความถี่ที่ 3355 และ 3384 ต่อ
เซนติเมตรซึ่งเกิดจากการก่อตัวของการก่อตัวของ H กับความบกพร่องแบบช่องว่างของ Ti (2) ได้
นำเสนอวิธีการในการศึกษาและระบุตำแหน่ง โครงสร้างภายในของการเจือธาตุโลหะและโลหะ
ทรานสิชันในเพอโรฟสไกต์ออกไซด์โดยใช้การวิเคราะห์พลังงานงานการก่อตัวร่วมกับการจำลอง
สเปกตรัมการดูดกลืนรังสีเอกซ์แบบใกล้เคียงกับขีดเริ่มของการดูดกลืน ซึ่งผลที่ได้อธิบายและ
สอดคล้องกับการทดลองเป็นอย่างดี (3) ผลของการผ่อนคลายเชิงโครงสร้าง การเคลื่อนของอะตอม
ภายใน และการเจืออะตอมรวมถึงความบกพร่องบนผิวที่ส่งผลต่อการเกิดอิเล็กตรอนอิสระใน 2 มิติ
ในรอยต่อของ LAO/STO ในทิศ (001) ได้ถูกศึกษาโดยการจำลองหลายรูปแบบ โดยมุ่งเน้น
โมเดลจากความเป็นไปได้ของกระบวนการหลีกเลี่ยงความไม่ต่อเนื่องเชิงขั้วของโครงสร้าง การเกิด
หรือไม่เกิดอิเล็กตรอนอิสระใน 2 มิติ ในรอยต่อของ และกระบวนการปรับเปลี่ยนโครงสร้างเชิง
อิเล็กทรอนิกส์ ผลของโครงสร้างและความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแต่โมเดลได้ถูกวิเคราะห์และ
นำเสนอ (4) ได้ใช้การวิเคราะห์โดยใช้การทดลองวัดการกระตุ้นอิเล็กตรอนด้วยเอกซเรย์ ของ
อะตอมเจือและความบกพร่องบนผิวของ LAO ร่วมกับผลการคำนวณพลังงานยึดเหนี่ยว และระดับ

พลังงานยึดของอิเล็กตรอนชั้นในของอะตอม เพื่อใช้ในการอธิบายการเปลี่ยนแปลงสเปกตรัมจากการทดลองวัดการกระตุ้นอิเล็กตรอนด้วยเอกซเรย์ของฟิล์มบาง LAO ที่ถูกเตรียมจากเงื่อนไขที่แตกต่างกัน โดยพบว่าพีคของสเปกตรัมที่วัดได้จาก อะตอมออกซิเจนในชั้น $1s$ ที่สูงจากปริมาณทั่วไป 2 eV ไม่ได้เกิดจาก OH ดังการคาดการณ์ทั่วไป แต่เกิดจากออกซิเจนกลุ่มที่มีความสัมพันธ์กับคาร์บอน และสัมพันธ์กับการเปลี่ยนแปลงของสเปกตรัมที่วัดได้จากอะตอมคาร์บอนในชั้น $1s$.



สาขาวิชาฟิสิกส์
ปีการศึกษา 2559

ลายมือชื่อนักศึกษา อ. อดิสร
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา อ. อ. อ. อ.

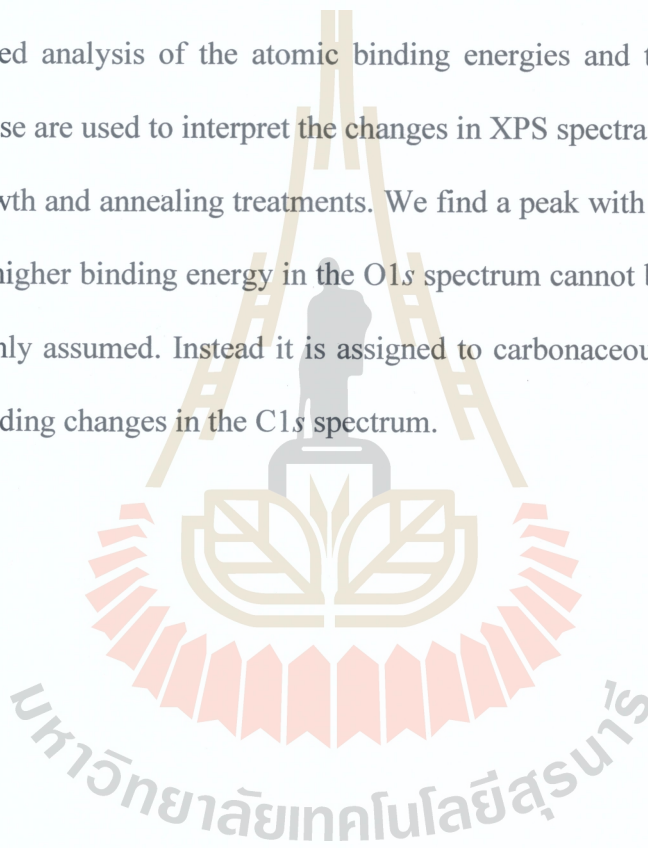
ITTIPON FONGKAEW : FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS OF
SELECTED DEFECTS AND INTERFACES OF PEROVSKITE OXIDES.

THESIS ADVISOR : PROF. SUKIT LIMPIJUMNONG, Ph.D. 279 PP.

KEYWORD: FIRST PRINCIPLES/ PEROVSKITE/INFRARED SPECTROSCOPY/
LOCAL VIBRATIONAL MODE/ X-RAY ABSORPTION

In this thesis, local structure and signatures of defects in different perovskite materials and their interfaces have been calculated using first-principles approaches. They are compared with available experimental results. The main focus is on three types of signatures that are strongly related to the local structures of defects; the vibrational frequencies, the x-ray absorption spectra, and x-ray photoelectron spectroscopy. Important results can be briefly summarized as following. (1) We have studied the stability and local vibration modes of a hydrogen (H) in cubic perovskite SrTiO_3 . We propose that the cause of the observed 3500 cm^{-1} band is a H in a Sr vacancy ($\text{H}-V_{\text{Sr}}$), while the $2\text{H}-V_{\text{Sr}}$ complexes which can also form in samples with high H concentrations have the frequencies consistent with the observed hump in agreement with the experimentally observed 3500 cm^{-1} band. In addition, we also propose that the distinct twin peaks at 3355 and 3384 cm^{-1} are associated with the complex defects between H and V_{Ti} . (2) We have been presented method to study and identify local structure of transition metal and metal doped in perovskite by combine formation energy approach with XANES simulation. Our results show good agreement with the measured spectra. (3) Effects of structural relaxation,

interdiffusion, and surface termination on 2DEG formation at the LAO/STO (001) interface were investigated by various models of LAO/STO interfaces with the goal of evaluating different possible mechanisms to avoid the polar discontinuity with or without formation of a 2DEG or electronic reconstruction. The resulting electron densities in various models are discussed. (4) We combined an experimental XPS study of the defect termination on LAO surfaces and their desorption under annealing with calculated analysis of the atomic binding energies and the core-level binding energies. These are used to interpret the changes in XPS spectra of an LAO film under different growth and annealing treatments. We find a peak with ~ 2 eV binding energy shift toward higher binding energy in the O1s spectrum cannot be associated with OH as is commonly assumed. Instead it is assigned to carbonaceous species by studying the corresponding changes in the C1s spectrum.



School of Physics

Academic Year 2016

Student's Signature IthiponAdvisor's Signature [Signature]