นุชลี ชเวิร์ตเฟเกอร์ : การคำนวณการวัดด้วยรังสีเอ็กซ์ของสารที่เลือกศึกษาโดยวิธีเฟิสต์พรินซิเพิล (FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS OF X-RAY MEASUREMENTS ON SELECTED MATERIALS) อาจารย์ที่ปรึกษา : ศาสตราจารย์ ดร.ชูกิจ ลิมปิจำนงค์, 101 หน้า

เครื่องกำเนิดแสงซินโครตอนนับว่าเป็นแหล่งกำเนิดของเทคนิคเอ็กซ์เรย์ ที่มีประสิทธิภาพในการศึกษาคุณสมบัติของสารมากมาย โดยในวิทยานิพนธ์นี้ได้มีการศึกษาเกี่ยวข้องกับเทคนิคสองชนิด คือ RXES ซึ่งมีประสิทธิภาพสูงในการศึกษาแถบอิเล็กทรอนิกส์ของสารและ XANES ซึ่งใช้ในการศึกษาโครงสร้างทางกายภาพของสาร อย่างไรก็ตาม การทดลองเพียงอย่างเดียวไม่สามารถทำให้เกิดความเข้าใจในเชิงลึกในสารที่ศึกษาได้ดีเท่าที่ควร ในวิทยานิพนธ์นี้การคำนวณแบบเฟิร์สพรินซิเพิลซึ่งมีความแม่นยำและเป็นที่ยอมรับอย่างดีมาช่วยในการทำความเข้าใจคุณสมบัติของสารให้แม่น ยำและลึกซึ้งมากขึ้น โดยได้เลือกศึกษาสาร 3 ชนิด ดังนี้ 1) กราฟีน คำนวณแถบอิเล็กทรอนิกส์ด้วยวิธีเฟิร์สพรินซิเพิลพร้อมทั้งคำนวณสเปกตรัม RXES ด้วยโปรแกรมที่ถูกสร้างไว้ใน FP-LMTO ตลอดจนวิเคราะห์เปรียบเทียบกับผลการทดลองโดยมีการนำเสนอวิธีการพิจารณาผลของที่ว่างที่เกิดขึ้นในชั้นพลังงานต่ำสุด ที่มีต่อการเลื่อนตำแหน่งของเสปกตรัม RXES เพื่อการเปรียบเทียบที่แม่นยำ ซึ่งไม่เคยมีใครทำมาก่อน ผลการคำนวณและผลการทดลองตรงกันอย่างมาก 2) อินเดียมไนโตรด์ คำนวณแถบอิเล็กทรอนิกส์ด้วยวิธีเฟิร์ส พรินซิเพิลและใช้การประมาณแบบ QSGW ซึ่งได้ถูกสร้างไว้ในโปรแกรม FP-LMTO ซึ่งทำให้ได้ค่าช่องว่างระหว่างแถบพลังงานที่แม่นยำใกล้เคียงกับผลการทดลอง พร้อมทั้งคำนวณสเป็กตรัม RXES ที่มุมตกกระทบเกือบขนานและเกือบตั้งฉากกับระนาบของผลึก เพื่อที่จะศึกษาแถบพลังงานที่ต่างกันในแถบอิเล็กทรอนิกส์ของสาร ผลการคำนวณได้ถูกนำไปเปรียบเทียบกับการทดลอง และทำให้สามารถอธิบายแถบอิเล็กทรอนิกส์ของสารนี้ได้ชัดเจนมากขึ้น 3) $Bi(Mg_{0.5}Ti_{0.5})O_3$ โดยสารนี้ได้ใช้การคำนวณแบบเฟิร์ส พรินซิเพิลด้วย VASP เพื่อคำนวณหาโครงสร้างที่น่าจะเป็นของสารและทำการคำนวณสเป็กตรัม XANES ของสารด้วยชุดโปรแกรม FEFF เพื่อศึกษาลักษณะของสเปกตรัมที่เป็นตัวบ่งชี้ถึงการเลื่อนออกจากศูนย์กลางของไอออนบวกในสารนี้ ซึ่งจะสามารถใช้เป็นแนวทางในการตรวจสอบโครงสร้างที่แท้จริงของสารด้วยการทดลองวัดสเป็กตรัม XANES ในอนาคต โดยสรุป การคำนวณแบบเฟิร์สพรินซิเพิลเป็นเทคนิคที่มีประสิทธิภาพสูงในการคำนวณโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์และคุณสมบัติเชิงกายภาพของสาร เทคนิค RXES เป็นเทคนิคที่เหมาะสำหรับใช้ในการศึกษาโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ของสาร ในขณะที่เทคนิค XANES เหมาะสำหรับการศึกษาโครงสร้างทางกายภาพของสาร การคำนวณแบบเฟิร์สพรินซิเพิลร่วมกับการทดลองด้วยเทคนิคเอ็กซ์เรย์จะสามารถทำให้เกิดความเข้าใจในสารนั้นๆ

ที่ลึกซึ้งยิ่งขึ้น ซึ่งนับว่ามีความสำคัญอย่างยิ่งต่อการพัฒนาวัสดุที่ดีขึ้นสำหรับอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์

สาขาวิชาฟิสิกส์ ลายมือชื่อนักศึกษา _____

ปีการศึกษา 2559 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา _____

NUCHALEE SCHWERTFAGER : FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS OF X-RAY MEASUREMENTS ON SELECTED MATERIALS. THESIS ADVISOR : PROF. SUKIT LIMPIJUMNONG, Ph.D. 101 PP.

XANES/RXES/FIRST PRINCIPLES CALCULATION/ELECTRONIC BAND STRUCTURE/GRAPHENE/INDIUM NITRIDE/ $Bi(Mg_{0.5}Ti_{0.5})O_3$

Synchrotron light source is the origin of various highly effective x-ray techniques for studying properties of materials. This thesis involves two well-known techniques including RXES which is highly appropriate for studying electronic band structures of materials and XANES technique which is widely used for probing physical properties of materials. However, the experiments alone are generally not sufficient to gain a deep understanding of material properties. Therefore, in this thesis first principle calculation, which is unbiased and well accepted, is employed to help gaining a deeper and more accurate understanding of material properties. Three materials were chosen as follows. 1) Graphene, its electronic band structures were calculated along with RXES spectra employing first principle calculation as implemented in the FP-LMTO code. The calculated spectra were analyzed and compared with the experiments. The corehole effects on the spectra shifting were also taken into account for more accurate analysis, which has never been done before. Good agreements between the calculation and the experiment were obtained. 2) Indium Nitride, its electronic band structures were calculated with first principles calculation based on QSGW approximation as implemented in FP-LMTO code. The calculated band gap was highly accurate and agree well with previous experiment. The RXES

spectra were calculated at near grazing and near normal angles of incidence in order to probe different parts of the electronic band structures. The calculated spectra were compared to the experimental ones and help to explain the electronic band structure of this material in more detailed. 3) $Bi(Mg_{0.5}Ti_{0.5})O_3$, first principles calculation as implemented in VASP was employed to find the actual structure of this material and XANES spectra for the possible structures were calculated with FEFF code in order to find the cation off-centering features in the spectra. The results can be used to determine the actual structure of the material for the future experiments. In summary, first principles calculation is a very powerful method to be used to study the electronic band structure and physical structure of materials. The RXES technique is suitable to study electronic band structure, while XANES is good for the study of local structure of materials. When first principles calculation is used incorporated with the X-ray techniques, a much deeper understanding of materials can be obtained which is crucial to the development of better materials for electronic devices.

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

School of Physics Student's Signature _____

Academic Year 2016 Advisor's Signature _____