

อภิญา งอยผลา : การศึกษาบทบาทของการเจือฟอสฟอรัสต่อการเพิ่มการนำไฟฟ้าใน
ขั้วไฟฟ้าแอนโดบิสมัทวานเนดตโดยวิธีเฟิร์สพริ้นซิเพิล (ROLE OF PHOSPHORUS
DOPING IN ENHANCING THE ELECTRONIC CONDUCTIVITY OF BISMUTH
VANADATE PHOTOANODES: A FIRST-PRINCIPLES STUDY) อาจารย์ที่ปรึกษา :
ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ศิวิทธิ์ สุธีรากุล, 143 หน้า.

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้ได้ใช้วิธี DFT + U ในการศึกษาบทบาทของการเจือฟอสฟอรัสต่อการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางโครงสร้างและอิเล็กทรอนิกส์ ความเสถียรของการเกิดช่องว่างของออกซิเจน และการขนส่งประจุในขั้วไฟฟ้าแอนโดบิสมัทวานเนดต ผลการคำนวณแสดงให้เห็นว่าการเจือฟอสฟอรัสไม่ส่งผลอย่างมีนัยสำคัญต่อสมบัติทางโครงสร้างและอิเล็กทรอนิกส์ของบิสมัทวานเนดต ในทางตรงกันข้าม การเจือฟอสฟอรัสทำให้บิสมัทวานเนดตถูกรีดิวซ์ได้ดีขึ้นดังสะท้อนจากการลดลงของพลังงานของการเกิดช่องว่างของออกซิเจน การมีหนึ่งช่องว่างของออกซิเจนจะทำให้เกิดอิเล็กตรอนโพลารอนสองตัวที่ตำแหน่งของวานเดียมสองอะตอมที่อยู่ใกล้กัน ซึ่งโพลารอนหนึ่งตัวจะติดอยู่ที่บริเวณจุดบกพร่อง ในขณะที่โพลารอนอีกหนึ่งตัวจะเคลื่อนที่ได้ ผลของค่าพลังงานสำหรับการเคลื่อนที่ของโพลารอนจากที่หนึ่งไปยังที่หนึ่งและสภาพคล่องตัวของประจุที่ได้จากการจำลองแบบโคเนติกมอนติคาร์โลแสดงให้เห็นว่า การเจือฟอสฟอรัสไม่ได้เปลี่ยนแปลงการขนส่งโพลารอนอย่างมีนัยสำคัญ ดังนั้นจึงสรุปได้ว่า การเจือฟอสฟอรัสทำให้บิสมัทวานเนดตถูกรีดิวซ์ได้ดีขึ้น ซึ่งส่งผลให้เกิดการเพิ่มประจุพาหะในบิสมัทวานเนดต การเพิ่มขึ้นของความเข้มข้นพาหะจากการเกิดช่องว่างของออกซิเจนดังที่กล่าวมาข้างต้นจึงส่งผลทำให้เกิดการเพิ่มการนำไฟฟ้าในขั้วไฟฟ้าแอนโดบิสมัทวานเนดต

สาขาวิชาฟิสิกส์
ปีการศึกษา 2562

ลายมือชื่อนักศึกษา อภิญา งอยผลา
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา [ลายมือ]
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม [ลายมือ]

