ฉราศักดิ์ พันเดช : การศึกษาสมบัติเชิงโครงสร้างและอิเล็กทรอนิกส์ของสารกลุ่มแฮไลด์เพอรอฟสไกต์บางชนิดโดยวิธีเฟิร์สพรินซิเพิล (FIRST PRINCIPLES STUDY OF STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF SOME SELECTED HALIDE PEROVSKITE MATERIALS) อาจารย์ที่ปรึกษา :รองศาสตราจารย์ ดร.สิริโชค จึงถาวรรณ, 154 หน้า.

ในวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ได้มีการศึกษาคุณสมบัติเชิงโครงสร้างและอิเล็กทรอนิกส์ของสารประกอบแฮไลด์เพอรอฟสไกต์ ABX_3, (A = CH_3NH_3 หรือ เมทิลแอมโมเนียมโมเลกุล; B = Pb, Sn, Ge; X = I, Br, Cl) โดยวิธีคำนวณแบบเฟิร์สพรินซิเพิล (first-principles) หรือ แอบ อินิชิโอ (*ab initio*) ค่าอันตรกิริยาของ แวน เดอร์ วาลส์ (van der Waals interaction) ได้ถูกพิจารณาร่วมด้วยกับระเบียบวิธีคำนวณแบบเฟิร์สพรินซิเพิล เพื่อศึกษาผลของตัวแปรนี้ต่ออันตรกิริยาภายในระหว่างเมทิลแอมโมเนียมโมเลกุลและโครงสร้างของ BX_6 ในสารเพอรอฟสไกต์ดังกล่าว ผลการศึกษาพบว่าอันตรกิริยาภายในระหว่างเมทิลแอมโมเนียมโมเลกุลและโครงสร้างของ BX_6 มีอิทธิพลต่อการวางตัวและตำแหน่งของเมทิลแอมโมเนียมโมเลกุลซึ่งส่งผลให้โครงสร้างของ BX_6 เกิดการบิดเบี้ยว และมีผลต่อโครงสร้างและคุณสมบัติอิเล็กทรอนิกส์ของสารกลุ่มนี้ โดยสามารถเปลี่ยนลักษณะของโครงสร้างแถบพลังงานจากช่องว่างพลังงานแบบตรง (direct bandgap) ไปเป็นช่องว่างพลังงานแบบไม่ตรง (indirect bandgap) และความน่าเชื่อถือของการศึกษานี้ยืนยันได้จากการคำนวณโดยฟังก์ชันนัลลูกผสม (hybrid functional) และการคำนวณแบบความต้องกันตนเองแบบจีดับเบิลยู (self-consistent GW) รวมกับการพิจารณาผลจากการคู่ควบสปิน-วงโคจร (spin-orbit coupling) ด้วย

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

สาขาวิชาฟิสิกส์
ปีการศึกษา 2562

ลายมือชื่อนักศึกษา _____
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา _____
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม _____

NARASAK PANDECH : FIRST-PRINCIPLES STUDY OF STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF SOME SELECTED HALIDE PEROVSKITE MATERIALS. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. SIRICHOK JUNGTHAWAN, 154 PP.

STRUCTURAL/ELECTRONIC PROPERTIES/HALIDE PEROVSKITES/FIRST PRINCIPLES

In this thesis, the structural and electronic properties of selected halide perovskite materials ABX_3, (A = CH_3NH_3 shortly MA^+; B = Pb, Sn, Ge; X = I, Br, Cl) were studied using first principles (or *ab initio*) methods. Van der Waals (vdW) correction to DFT is considered for revealing the effects of the internal interactions between the MA^+ cation and the BX_6 inorganic framework. Our results reveal that the vdW-interactions between the MA^+ cation and the inorganic framework can strongly affect the optimized orientation and position of the molecule and the resulting distortion of the inorganic framework. Consequently, it also affects the electronic properties of the materials and specifically can change the band structure from direct to indirect bandgap. The robustness of this result is studied by comparing hybrid functional calculations and quasiparticle self-consistent GW calculations as well as spin-orbit coupling.

School of Physics

Academic Year 2019

Student's Signature Narasak

Advisor's Signature Sirichok

Co-advisor's Signature