ฐานันดร กงนอก : การศึกษาคุณสมบัติเชิงอิเล็กทรอนิกส์และเชิงแสงของสารกลุ่มทรานซิชั่นเมทัลไดแคลโคจิไนด์ที่แทรกชั้นด้วยโลหะแอลคาไลโดยวิธีเฟิร์สทพรินซิเพิล (FIRST-PRINCIPLES STUDY OF ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF ALKALI METAL INTERCALATED TRANSITION METAL DICHALCOGENIDES) อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.สิริโชค จึงถาวรรณ, 109 หน้า.

คำสำคัญ : โครงสร้างเป็นชั้นซ้อนทับกัน/การแทรกตัวระหว่างชั้น

MoS_2 เป็นสารที่มีโครงสร้างเป็นชั้นรูปร่างคล้ายรวงผึ้งซ้อนทับกัน แต่ละชั้นดึงดูดกันแบบอ่อน ๆ ด้วยแรงแวนเดอวาลส์ ทำให้สามารถปรับเปลี่ยนโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ได้โดยการแทรกโลหะเข้าไปที่ช่องว่างระหว่างชั้น งานวิจัยนี้ศึกษาผลของการแทรกโลหะแอลคาไลโดยวิธีเฟิร์สทพรินซิเพิล ผลจากการคำนวณแสดงการขยายตัวอย่างมากของช่องว่างระหว่างชั้นและการเติมอิเล็กตรอนจากโลหะแอลคาไลไปที่แถบการนำ การขยายตัวของช่องว่างระหว่างชั้นนั้นเห็นได้ชัดว่าเพิ่มขึ้นตามขนาดอะตอมของโลหะ และการขยายนั้นยังทำให้ชนิดของช่องว่างแถบพลังงานเปลี่ยนจากแบบไม่ตรงเป็นแบบตรงได้เนื่องจากปฏิกิริยาระหว่างชั้นที่ลดลง ค่าคงที่ของแลททิซตามแนวระนาบขยายเนื่องจากแรงผลักของไฟฟ้าสถิต คุณสมบัติอื่นที่สามารถนำไปเปรียบเทียบกับการทดลองได้ เช่น ค่าคงที่เชิงโครงสร้าง กำแพงพลังงานของการแพร่กระจาย และค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนยังถูกคำนวณอีกด้วย ทั้งนี้จากผลการคำนวณบ่งชี้ให้เห็นว่าเราสามารถปรับเปลี่ยนโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ของสารกลุ่มทรานซิชั่นเมทัลไดแคลโคจิไนด์เพื่อนำไปประยุกต์ใช้กับอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์เชิงแสงได้โดยการใช้ขนาดอะตอมที่แตกต่างกันและการเปลี่ยนความเข้มข้นของโลหะ

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

สาขาวิชาฟิสิกส์ ลายมือชื่อนักศึกษา ฐานันดร กงนอก

ปีการศึกษา 2564 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา สิริโชค

THANUNDON KONGNOK : FIRST-PRINCIPLES STUDY OF ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF ALKALI METAL INTERCALATED TRANSITION METAL DICHALCOGENIDES. THESIS ADVISOR : SIRICHOK JUNGTHAWAN, Ph.D. 109 PP.

Keyword : Layered structure/Intercalation

MoS_2 has a layered honeycomb structure with strong in-plane bonding and weak out-of-plane vdW interactions, which enables the engineering of electronic structures by intercalation. In this work, the effects of alkali metal intercalation on MoS_2 are investigated by using first-principles calculations. The results show a significant expansion of the interlayer spacing and contribution of electron donation from alkali metal to the conduction band of MoS_2. The expansion obviously depends on the atomic radii of the intercalated metals. Moreover, the bandgap type changes from indirect to direct bandgap because of the reduction of electronic interactions between adjacent layers. In-plane lattice parameters increase proportionally to the concentration due to electrostatic repulsion. Other properties (such as structural parameters, diffusion barriers, absorption coefficients, etc.) that can be compared with experiments were calculated as well. Our results suggest that different atomic radii and concentrations of intercalated alkali metals could provide an opportunity to tune the electronic structures of TMDC materials and are promising in optoelectronic devices.

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

School of Physics
Academic Year 2021

Student's Signature _____
Advisor's Signature _____