นิรวิทธ์ ปาลกะวงศ์ ณ อยุธยา : การศึกษาแบบเฟิสต์พรินซิเพิลของความบกพร่องชนิดแทนที่ในโลหะออกไซด์และโลหะไนไตรด์ (FIRST-PRINCIPLES STUDY OF SUBSTITUTIONAL DEFECTS IN METAL OXIDES AND METAL NITRIDES) อาจารย์ที่ปรึกษา : ศาสตราจารย์ ดร.ชูกิจ ลิมปิจำนงค์, 130 หน้า.

ความบกพร่องและสารเจือปนต่าง ๆ ในสารกึ่งตัวนำไม่ว่าจะเกิดขึ้นเองโดยธรรมชาติหรือเกิดขึ้นจากความตั้งใจก็ตามล้วนมีผลกระทบอย่างมากต่อคุณสมบัติของวัสดุ ในวิทยานิพนธ์ฉบับนี้จะมุ่งเน้นการศึกษาความบกพร่องที่เกิดขึ้นจากการแทนที่บนตำแหน่งของแคตไอออนและแอนไอออนด้วยอะตอมชนิดอื่น ๆ ในกลุ่มของสารประกอบโลหะออกไซด์และโลหะไนไตรด์ที่มีองค์ประกอบสองชนิดด้วยวิธีการคำนวณแบบเฟิสต์พรินซิเพิลที่อยู่บนพื้นฐานของทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น โดยวัตถุประสงค์ของวิทยานิพนธ์ฉบับนี้สามารถแบ่งออกได้เป็นสามส่วนหลัก ๆ ได้แก่ ส่วนที่หนึ่ง เพื่อศึกษาความบกพร่องชนิดที่เกิดจากการแทนที่อะตอม N ลงในกลุ่มของสารประกอบโลหะออกไซด์ที่มีองค์ประกอบสองชนิดและการแทนที่อะตอม O ลงในกลุ่มของสารประกอบโลหะไนไตรด์ที่มีองค์ประกอบสองชนิด เพื่อศึกษาความสัมพันธ์ของความบกพร่องแบบการแทนที่ดังกล่าวในกลุ่มของสารประกอบโลหะออกไซด์และโลหะไนไตรด์ที่แตกต่างกัน ส่วนที่สอง เพื่อตรวจสอบสภาพแวดล้อมเฉพาะที่ของ Mg ในสารตัวอย่างที่ได้จากการเจือ Mg ลงในสารประกอบ ZnO ด้วยวิธีการผสมผสานกันระหว่างการคำนวณแบบเฟิสต์พรินซิเพิลและเทคนิคการวัดการดูดกลืนรังสีเอกซ์ และส่วนที่สาม เพื่อศึกษาผลของความเค้นต่อระดับพลังงานตัวรับที่เกิดจากอะตอม Ga ที่เข้าไปแทนที่อะตอม Sn ในสารประกอบ SnO_2 โดยความเค้นที่เกิดขึ้นนั้นสามารถสร้างขึ้นโดยการบีบอัดขนาดของเซลล์ผลึกโดยตรงหรือการเจืออะตอมอื่นที่เล็กกว่าอะตอม Sn ลงไปเพื่อแทนที่ตำแหน่งของอะตอม Sn

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

สาขาวิชาฟิสิกส์ ลายมือชื่อนักศึกษา _____

ปีการศึกษา 2559 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา _____

NIRAWITH PALAKAWONG : FIRST-PRINCIPLES STUDY OF SUBSTITUTIONAL DEFECTS IN METAL OXIDES AND METAL NITRIDES. THESIS ADVISOR : PROF. SUKIT LIMPIJUMNONG, Ph.D. 130 PP.

FIRST-PRINCIPLES/DEFECTS/METAL OXIDES/METAL NITRIDES

The defects and impurities in semiconductors, which are intentionally or unintentionally introduced, have a significant effect on material properties. In this thesis, the substitutional defects for cation's and anion's sites in various selected binary metal-oxides/nitrides were theoretically investigated by using first-principles density functional calculations. The main purposes of this thesis can be classified into three parts: (1) investigation of N and O substitutional defects in selected binary metal oxides/metal nitrides to determine the relationship of these substitutional defects among different metal oxides/nitrides, (2) identification of local environments of Mg in $Mg_xZn_{1-x}O$ alloy sample by using a combination of first-principles calculations and x-ray absorption spectroscopy, and (3) investigation of Ga acceptor defect level in SnO_2 with/without compressive strains by directly compressing the unit cell or alloying with the smaller cation to create the strain.

School of Physics Student's Signature Nirawith Palakawong

Academic Year 2016 Advisor's Signature