

ภาคภูมิ เรือนจันทร์ : การศึกษาแบบเฟิสต์พริ้นซิเพิลของความบกพร่องแบบซับซ้อนที่
คัดเลือกในสารกึ่งตัวนำ (FIRST-PRINCIPLES STUDY OF SELECTED DEFECT
COMPLEXES IN SEMICONDUCTORS)

อาจารย์ที่ปรึกษา : ศาสตราจารย์ ดร. ชูกิจ ลิ้มปิจำนงค์, 173 หน้า.

ความบกพร่องมูลฐานแบบเฉพาะที่ สารเจือ และความบกพร่องแบบซับซ้อนที่รวมความ
บกพร่องมูลฐานและสารเจือ มีบทบาทสำคัญอย่างยิ่งในสารกึ่งตัวนำ ในวิทยานิพนธ์นี้ ได้มี
การศึกษาความบกพร่องแบบซับซ้อนหลายแบบในสารกึ่งตัวนำหลายชนิดเชิงทฤษฎีโดยอาศัยการ
คำนวณแบบเฟิสต์พริ้นซิเพิลบนพื้นฐานของวิธีฟังก์ชันนัลของความหนาแน่น สมบัติหลักของความ
บกพร่องที่ศึกษาได้แก่ เสถียรภาพทางพลังงาน โครงสร้างสถานะพลังงานอิเล็กทรอนิกส์ และในบาง
กรณีได้ศึกษาสมบัติทางพลศาสตร์ด้วย ระบบความบกพร่องแบบซับซ้อนที่ได้ทำการศึกษาได้แก่
(1) ความบกพร่องแบบซับซ้อนระหว่างอะตอม Zn แบบเกิน และ อะตอม N แบบแทนที่ ในผลึก
ZnO ซึ่งความบกพร่องแบบซับซ้อนดังกล่าว มีสมบัติสอดคล้องกับโดเนอร์ที่พบในตัวอย่างที่ผ่าน
การยิงด้วยอิเล็กตรอนพลังงานสูง (2) ความบกพร่องชนิดซับซ้อนระหว่างซิลิกอน และ ไนโตรเจน
ในไดลูตไนไทรด์ ($\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$) (การคำนวณพบว่าอะตอมของ Si และ N ชอบที่จะจับตัวกันในรูปแบบ
ชนิดสปลิท-อินเตอร์สติเชียล ซึ่งสอดคล้องกับการทดลองที่พบว่า Si และ N หักล้างผลซึ่งกันและ
กัน) (3) ความบกพร่องชนิดซับซ้อนระหว่างคาร์บอน และ ไนโตรเจน ในผลึก GaAs และ GaP
(ความถี่การสั่นที่ได้จากการคำนวณของโมเลกุล CN ที่แทนที่แอนไอออน สอดคล้องกับสเปกตรัม
แสงใต้แดงที่ได้จากการทดลอง)

PAKPOOM REUNCHAN : FIRST-PRINCIPLES STUDY OF SELECTED
DEFECT COMPLEXES IN SEMICONDUCTORS. THESIS ADVISOR :
PROF. SUKIT LIMPIJUMNONG, Ph.D. 173 PP.

FIRST-PRINCIPLES/DEFECTS/SEMICONDUCTORS

Native point defects, impurities and also their complexes play a crucial role in semiconductors. In this thesis, several defect complexes in a number of semiconductors were theoretically studied using first-principles methods based on density functional theory. The main properties studied include energetic stability, electronic structures, and in some cases the dynamic behaviors. The studied defect systems are: (1) the complex between Zn interstitial and N substitution in ZnO which is consistent with the donor observed in electron irradiated ZnO samples, (2) the split-interstitial Si-N complex in dilute nitrides ($\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$) (The Si-N in the split-interstitial form is consistent with the mutual passivation experiments), (3) carbon-nitrogen complex in GaAs and GaP (The calculated vibration frequencies of substitutional CN molecule is consistent with the observed infrared spectroscopy).

School of Physics

Academic Year 2009

Student's Signature _____

Advisor's Signature _____