จิรโรจน์ ต.เทียนประเสริฐ : การระบุโครงสร้างของความบกพร่องจากสเปกตรัมการดูดกลืนแสงย่านใต้แดงและรังสีเอกซ์: การคำนวณแบบเฟิสต์พรินซิเพิล (IDENTIFICATION OF DEFECT STRUCTURES THROUGH INFRARED AND X-RAY ABSORPTION SPECTROSCOPIES: FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS) อาจารย์ที่ปรึกษา : ศาสตราจารย์ ดร.ชูกิจ ลิมปิจำนงค์, 164 หน้า.

ในวิทยานิพนธ์นี้ได้ใช้การคำนวณแบบเฟิสต์พรินซิเพิล คำนวณอัตลักษณ์ของความบกพร่องหรือสารเจือและเปรียบเทียบกับผลการทดลองที่มี ในวิทยานิพนธ์นี้มุ่งเน้นการคำนวณหาอัตลักษณ์ของสารเจืออยู่สองสิ่ง ที่มีความสัมพันธ์กับโครงสร้างโดยรอบของสารเจือเป็นอย่างมาก นั่นคือ ความถี่การสั่นและการดูดกลืนรังสีเอกซ์ ซึ่งผลการศึกษาที่สำคัญสามารถสรุปได้ดังต่อไปนี้ (1) จากผลการคำนวณความถี่การสั่นของสารเจือ ออกซิเจนและไฮโดรเจนในรูปแบบต่าง ๆ ในผลึกแคดเมียมแทลูไลด์ แสดงให้เห็นว่ากลุ่มนักทดลองได้อธิบายผลการทดลองผิดพลาดจากผลการศึกษาในวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ จึงได้มีการเขียนบทความเพื่อท้วงติง (2) จากการเปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลการทดลองการดูดกลืนรังสีเอกซ์ ทำให้สามารถระบุสัดส่วนโครงสร้างโดยรอบของอินเดียม นั่นคือ แบบ 4 ทบ และ 6 ทบ ในสารตัวอย่างอินเดียมออกซิไนไตรด์ที่มีอัตราส่วนของออกซิเจนและไนโตรเจนแตกต่างกัน (3) สเปกตรัมการดูดกลืนรังสีเอกซ์ของคลอรีนและแคลเซียม ได้ถูกนำมาใช้เพื่อตรวจสอบความถูกต้องของโครงสร้างการเคลื่อนที่ของไอออนในน้ำที่จำลองได้จากการคำนวณแบบผสมระหว่างควอนตัมและโมเลกุล ซึ่งในที่นี้ได้มีการพัฒนาวิธีการคำนวณค่าเฉลี่ยของสเปกตรัมการดูดกลืนที่คำนวณได้ โดยมีการวิเคราะห์เชิงเปรียบเทียบระหว่างผลการคำนวณกับผลการทดลอง

สาขาวิชาฟิสิกส์ ลายมือชื่อนักศึกษา _____

ปีการศึกษา 2551 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา _____

JIRAROJ T-THIENPRASERT : IDENTIFICATION OF DEFECT STRUCTURES THROUGH INFRARED AND X-RAY ABSORPTION SPECTROSCOPIES: FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS.
THESIS ADVISOR : PROF. SUKIT LIMPIJUMNONG, Ph.D. 164 PP.

FIRST PRINCIPLES/ INFRARED SPECTROSCOPY/ LOCAL VIBRATIONAL MODE/ X-RAY ABSORPTION

In this thesis, signatures of many defects in different materials have been calculated using first-principles approaches. They are compared with available experimental results. The main focus is on two types of signatures that are strongly related to the local structures of defects; the vibrational frequencies and the x-ray absorption spectra. Important results can be briefly summarized as following. (1) The calculated vibrational frequencies of various O and H defects in CdTe indicate that experimental group has made a wrong interpretation in their manuscript. Based on this work, the comment is published. (2) The amounts of four-fold and six-fold indium atoms in each indium oxynitride alloy sample with varied O:N ratio, in each sample have been determined by directly comparing the simulations with the measurements. (3) The x-ray absorption spectra of ions (Cl^- and Ca^{2+}) in water have been used to determine the validity of the dynamical simulation based on QM/MM calculations. The regime to extract the average absorption spectra based on the dynamical simulation has been developed. The resulting spectra in comparison with experimental results are discussed.

School of Physics Student's Signature _____

Academic Year 2008 Advisor's Signature _____