ธีรวัฒน์ ม่อนหน่อ : สเปกโทรสโกปีการดูดกลืนรังสีเอกซ์ของโครงสร้างไร้ระเบียบสองระบบ: โครงสร้างไฮเดรชันของ Ca^{2+} และโครงสร้างซิงค์ออกซีไนไตรด์ (X-RAY ABSORPTION SPECTROSCOPY OF TWO DISORDERED SYSTEMS: Ca^{2+} HYDRATION STRUCTURE AND ZINC OXYNITRIDE STRUCTURE)
อาจารย์ที่ปรึกษา : อ. ดร. สาโรช รุจิรวรรธน์, 70 หน้า.

วัตถุที่มีโครงสร้างไร้ระเบียบ ซึ่งปราศจากสมบัติการมีโครงสร้างแบบเป็นคาบนั้น ยากที่จะถูกศึกษาด้วยวิธีมาตรฐาน เช่น การเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ หรือ กล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนกำลังแยกแยะสูง ในการศึกษาครั้งนี้จึงได้เสนอวิธีการสเปกโทรสโกปีการดูดกลืนรังสีเอกซ์เป็นทางเลือกหนึ่ง เพื่อใช้ศึกษาโครงสร้างระดับอะตอมของระบบไร้ระเบียบ โดยสองระบบที่ถูกเลือกศึกษา คือ โครงสร้างไฮเดรชันของ Ca^{2+} และโครงสร้างฟิล์มบางของซิงค์ออกซีไนไตรด์ โดยได้ใช้วิธีการดูดกลืนรังสีเอกซ์ทั้งในช่วง XANE และ EXAFS ในการศึกษาครั้งนี้ โดยแบบจำลองโครงสร้างไฮเดรชันของ Ca^{2+} ที่เลือกใช้ได้จากวิธี QM/MM ซึ่งคำนวณโดย รศ. ดร. อนันต์ ทองระอา และฟิล์มบางของสารซิงค์ออกซีไนไตรด์ได้ถูกเตรียมโดยกลุ่มวิจัยของ รศ. ดร. จิติ หนูแก้ว ซึ่งผลการวัดได้ถูกวิเคราะห์ให้ได้มาซึ่งตัวแปรโครงสร้างที่สำคัญ

สำหรับการศึกษาโครงสร้างของน้ำล้อมรอบไอออนแคลเซียมนั้น EXAFS ให้ระยะพันธะ Ca-O เฉลี่ย 2.431± 0.011 Å เลขโคออร์ดิเนชัน 6.56 ± 0.316 และ ค่าสัมประสิทธิเดอบาย-วอลเลอร์ 0.009 $Å^2$ โดยค่าที่ได้สำหรับตัวแปรเหล่านี้มีความสอดคล้องกันเป็นอย่างดีกับตัวแปรที่ได้จาก RDF ของแบบจำลองทางทฤษฎีตาม QM/MM คือ 2.445 Å, 6.8 และ 0.0096 $Å^2$ ตามลำดับ นอกจากนี้ สเปกตรัม XANES ที่ได้จากการวัด ยังเข้ากันได้ดีกับสเปกตรัม XANES ที่ได้จากการคำนวณจากแบบจำลอง QM/MM ซึ่งผลการวิเคราะห์ที่ได้สามารถสนับสนุนความถูกต้องของแบบจำลอง QM/MM ได้เป็นอย่างยิ่ง

ในการศึกษาโครงสร้างฟิล์มบางซิงค์ออกซีไนไตรด์ แบบจำลองได้ถูกสร้างขึ้นจากองค์ประกอบหลักที่รู้จักโดยใช้การวิเคราะแบบ linear combination ผลการวิเคราะห์สเปกตรัม XANES แสดงให้เห็นว่าวัสดุตัวอย่างดังกล่าวนั้น ประกอบด้วย ซิงค์ออกไซด์ และ โลหะสังกะสี ที่ปะปนกันเป็นผลึกขนาดนาโนเป็นหลัก

สาขาวิชาฟิสิกส์ ลายมือชื่อนักศึกษา _____

ปีการศึกษา 2552 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา _____

TEERAWAT MONNOR : X-RAY ABSORPTION SPECTROSCOPY OF TWO DISORDER SYSTEMS: Ca^{2+} HYDRATION STRUCTURE AND ZINC OXYNITRIDE STRUCTURE. THESIS ADVISOR SAROJ RUJIRAWAT, Ph.D. 70 PP.

X-RAY ABSORPTION SPECTROSCOPY/HYDRATION STRUCTURE /DISORDER SYSTEM

Disorder materials with no long-range periodic structure are difficult to be characterized by standard methods, such as x-ray diffraction or high resolution electron microscopy. In this work, x-ray absorption spectroscopy (XAS) was proposed as an alternative way to study the atomicstructure of disorder systems. Two selected disorder systems: Ca^{2+}_{aq} and zinc oxynitride thin films were studied by x-ray absorption near edge structures (XANE) and extended x-ray absorption fine structure (EXAFS). The candidate structural model for Ca^{2+}_{aq} was based on Quantum mechanics/Molecular mechanics (QM/MM) simulation by A. Tongraar. The zinc oxynitride thin films were obtained from J. Nukeaw. The measurement data were analyzed to obtain the important structural parameters to be compared with the calculated spectra.

For the study of Ca^{2+} hydration structure, EXAFS give an average Ca-O bond distance of 2.431± 0.011 Å, a coordination number of 6.56 ± 0.316 and a Debye-Waller factor of 0.009 $Å^2$. These parameters agreed well with the parameters obtained from RDF of the theoretical QM/MM simulation of 2.445 Å, 6.8 and 0.0096 $Å^2$, respectively. The measured XANES spectrum can be fitted very well with that obtained from QM/MM. This result strongly supported the accuracy of QM/MM model.

On the structural investigation of zinc oxynitride thin films, the model compounds were constructed from known reference compounds using a linear combination analysis (LCA). The XANES result suggested that the material mainly contained mixing ZnO nanocrystals and zinc metal nanocrystals.

School of Physics Student's Signature _____

Academic Year 2009 Advisor's Signature _____