ภัทรพงศ์ นิจอภัย : การใช้เทคนิคการดูดกลืนรังสีเอกซเรย์และการจำลองโครงสร้างของระบบแก้ว แมงกานีส ลิเทียม โบเรท (X-RAY ABSORPTION SPECTROSCOPY AND STRUCTURAL SIMULATION OF MANGANESE LITHIUM BORATE-BASED GLASS SYSTEM), อาจารย์ที่ปรึกษา: รองศาสตรจารย์ ดร.ประพันธ์ แม่นยำ, 107 หน้า

คำสำคัญ: เทคนิคการดูดกลืนรังสีเอกซเรย์, การจำลองโครงสร้าง, แก้ว

ในช่วงไม่นานมานี้แก้วที่มีโครงสร้างรากฐานจากโบเรทกำลังได้รับความนิยมในการศึกษาเพื่อที่จะนำมาใช้เป็นอุปกรณ์จัดเก็บพลังงาน เช่น เป็นส่วนประกอบของตัวเก็บประจุแบบยิ่งยวด, เป็นขั้วแคโทดของแบตเตอรี่ เป็นต้น วิทยานิพนธ์ฉบับนี้ได้ศึกษาแก้วที่มีรากฐานจากโบเรท-แมงกานีส-ลีเทียม $xMnO_2$-(1-x)(LiO_2-$2B_2O_3$) เมื่อ x =0.2, 0.25 และ 0.3 ด้วยเทคนิคทางการดูดกลืนรังสีเอกซเรย์ (XAS), การจำลองพลวัตของโมเลกุล (MD) และเทคนิคการปรับแต่งด้วยวิธีการย้อนกลับของมอนติ-คาร์โล (RMC) ซึ่งแบบจำลองโครงสร้างของแก้วที่ได้จากวิธีการจำลองทางคอมพิวเตอร์ MD และ MD-RMC-XAS สอดคล้องกับผลที่วัดได้จากการทดลอง โดยที่แมงกานีสและออกซิเจนมีเลขโคออดิเนชันอยู่ที่ 4.34, 4.42 และ 4.50 ตามลำดับ ส่วนการศึกษาเลขออกซิเดชันของแมงกานีสในแก้วตัวอย่างพบว่า มีการผสมกันระหว่างเลขออกซิเดชัน Mn^{2+} และ Mn^{3+} ในอัตราส่วนประมาณ 60:40

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

สาขาวิชาฟิสิกส์ ลายมือชื่อนักศึกษา_____

ปีการศึกษา 2564 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา_____

PATTARAPONG NIJAPAI : X-RAY ABSORPTION SPECTROSCOPY AND STRUCTURAL SIMULATION OF MANGANESE LITHIUM BORATE-BASED GLASS SYSTEM, THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. PRAPAN MANYAM, Ph.D. 107 PP.

Keyword: XAS, Computer Simulation, Glass

Recently, glasses based on borate have aroused interest in energy storage device technology. For example, they can serve as a supercapacitor component or be used as the cathode in batteries. In this thesis, the structure of manganese lithium borate-based glass, denoted as xMnO2-(1-x)(Li_2O-$2B_2O_3$) where x is 0.2, 0.25, and 0.3, was studied using X-ray absorption spectroscopy (XAS), molecular dynamics (MD) simulation, and reverse Monte Carlo (RMC) refinement methods. A good agreement between the structural models from MD simulation, MD-RMC-XAS method, and the obtained experimental data was achieved. The mean Mn-O coordination numbers were found to be 4.37, 4.42, and 4.50, respectively. The oxidation state of Mn in MLB glasses was determined to be a mixture of Mn^{2+} and Mn^{3+} with a ratio of 60:40.

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

School of Physics Student's signature Pattarapong Nijapai

Academic Year 2021 Advisor's signature P. Manyam