



ศึกษาความคล่องตัวของพาหะในกราฟีน :

การประยุกต์ใช้วิธีมอนติคาร์โล

โดย

สุรัชย์ เฟ่งมานะยล

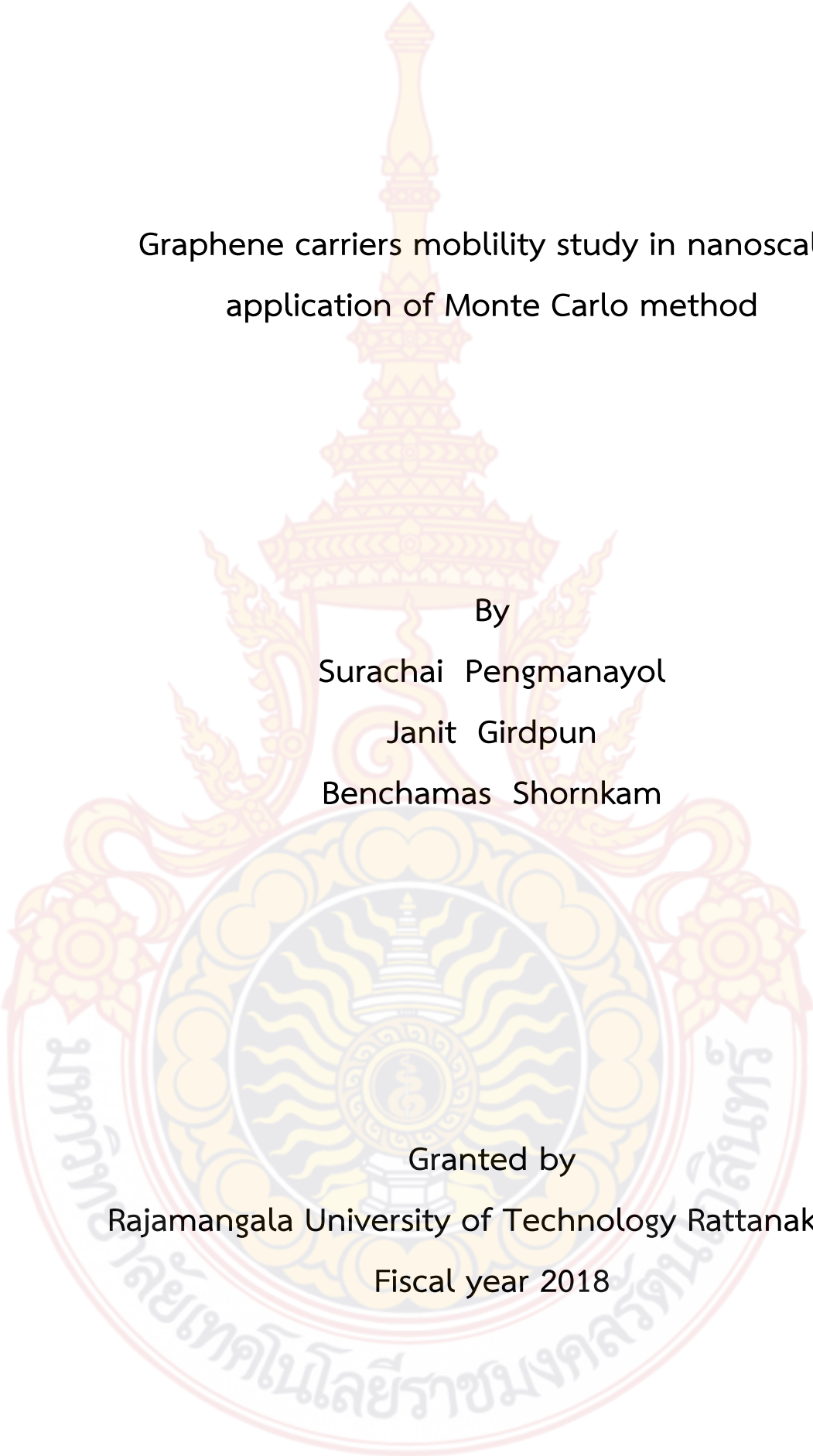
ญาณิศ เกิดพันธุ์

เบญจมาศ สอนคำ

สนับสนุนงบประมาณโดย

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลรัตนโกสินทร์

ประจำปีงบประมาณ ปีที่ได้รับทุนสนับสนุน 2561



Graphene carriers mobility study in nanoscale:
application of Monte Carlo method

By

Surachai Pengmanayol

Janit Girdpun

Benchamas Shornkam

Granted by

Rajamangala University of Technology Rattanakosin

Fiscal year 2018

กิตติกรรมประกาศ

คณะผู้ทำวิจัยขอขอบคุณ สถาบันวิจัยและพัฒนา มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคล
รัตนโกสินทร์ ที่ให้เงินสนับสนุนการวิจัยเรื่อง ศึกษาความคล่องตัวของพาหะในกราฟีน : การ
ประยุกต์ใช้วิธีมอนติคาร์โล

สุรชัย เฟ่งมานะยล และคณะ

สิงหาคม 2562



บทคัดย่อ

รหัสโครงการ : A-57/2561

ชื่อโครงการ ศึกษาความคล่องตัวของพาหะในกราฟีน : การประยุกต์ใช้วิธีมอนติคาร์โล

ชื่อนักวิจัย : สุรชัย เพ่งมานะยล ญาณิศ เกิดพันธุ์ และ เบญจมาศ สอนคำ

กราฟีนการจัดเรียงอะตอมเป็นแนวโครงสร้างอย่างสมบูรณ์แบบ ด้วยสมบัติทางกลและไฟฟ้าที่โดดเด่นจากความสามารถในการคงตัวอยู่ได้ของโครงสร้างที่เกิดจากคาร์บอนเรียงตัวหนาเพียงอะตอม 1 ชั้น แบบสองมิติ กราฟีนยังมีคุณสมบัติในการนำไฟฟ้าได้ดีกว่าทองแดง 4 เท่า มีพื้นที่ผิวมากกว่าท่อนาโนคาร์บอน 2 เท่า แข็งแรงกว่าเหล็ก 200 เท่าและแกร่งกว่าเพชร ยืดหยุ่นได้ดี และโปร่งแสงในระดับที่ยอมให้แสงผ่านได้ถึงร้อยละ 97 ซึ่งน่าสนใจสำหรับการศึกษาขั้นพื้นฐานและการใช้งานในอนาคต จึงทำให้สามารถนำกราฟีนไปผลิตได้จริงเป็นผลสำเร็จในการนำแผ่นกราฟีนเป็นตัวนำโปร่งแสงที่สามารถใช้ในอุปกรณ์ต่างๆ เช่น หน้าจอแบบสัมผัส เซลล์แสงอาทิตย์ ซึ่งสามารถใช้แทนที่การผลิตเซลล์แสงอาทิตย์โดยใช้แทนอินเดียมทินออกไซด์ ที่เป็นวัสดุราคาแพงได้

เนื่องจากปัจจุบันนี้สารกราฟีนมีบทบาทสำคัญในการสร้างอุปกรณ์แสดงผลเช่น จอแอลซีดี ตัวเก็บประจุ แบตเตอรี่ โซลาร์เซลล์ เป็นต้น ซึ่งการอธิบายการเคลื่อนที่ของพาหะในโครงสร้างได้ยากมากจึงซึ่งแบบจำลองแบบดั้งเดิมอธิบายไม่ได้ ต้องใช้แบบจำลองใหม่ที่มีชื่อว่าแบบจำลองฮอปปีง ดังนั้นการรู้ถึงกลไกการนำไฟฟ้าของพาหะจึงเป็นสิ่งสำคัญในการเข้าใจลักษณะเฉพาะในกราฟีนเหล่านั้น ทำให้สามารถนำไปประยุกต์ใช้ได้อย่างมีประสิทธิภาพ

คำสำคัญ : กราฟีน, ความคล่องตัวของพาหะ, วิธีมอนติคาร์โล

E-mail Address : surachai.p@rmutr.ac.th

ระยะเวลาโครงการ : ตุลาคม 2560 – กันยายน 2562



Abstract

Code of project : A-57/2561

Project name : Graphene carriers mobility study in nanoscale: application of Monte Carlo method

Researcher name : Surachai Pengmanayol, Janit Girdpun and Benchamas Shornkam

Graphene atoms are arranged horizontally structured perfectly. With mechanical and electrical distinguished by their ability to remain on the structure of carbon arranged in one atomic layer in two-dimensional. Graphene is capable of bringing electricity better than copper four times and the surface area of more than two times stronger than steel, carbon nanotubes 200 times stronger than diamond. Flexible and translucent allowing light to pass through up to 97 percent are interesting for basic education and deployment in the future. It can be used to produce graphene actually succeed in bringing sheets of graphene as transparent conductor that can be used in devices such as touch screens solar cell. It can be used to replace the production of solar cells by replacing indium tin oxide which expensive material.

Since this material graphene has an important role in the creation of display devices such as LCD, capacitor, battery and solar cell, which describes the movement of the carrier in the lattice can be very difficult by traditional model. Hopping model is the new model to describe carrier transport that to know the carrier mechanism. it is important characteristics of graphene to applied effectively.

Keywords: graphene, carrier mobility, Monte Carlo method

E-mail Address : surachai.p@rmutr.ac.th

Period of project : October 2017 – September 2019

สารบัญ

	หน้า
กิตติกรรมประกาศ	ก
บทคัดย่อภาษาไทย	ข
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ	ค
สารบัญ	ง
สารบัญตาราง	ฉ
สารบัญภาพ	ช
บทที่ 1 บทนำ	1
1. ความสำคัญและที่มาของปัญหา	1
2. วัตถุประสงค์ของการวิจัย	2
3. ขอบเขตของงานวิจัย	2
4. ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ	2
บทที่ 2 เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	3
1. งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	3
2. วิธีมอนติคาร์โล	5
บทที่ 3 วิธีดำเนินการวิจัย	8
1. สารกราฟีน	8
2. ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น	16
บทที่ 4 ผลการคำนวณและการวิเคราะห์ข้อมูล	17
1. ผลของความหนาแน่นของพาหะต่อระดับพลังงานและผลของอุณหภูมิที่มีต่อตัวแปรทางอุณหพลศาสตร์	18
2. วิเคราะห์ผลของข้อมูลทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น	27
บทที่ 5 สรุปอภิปรายผลและข้อเสนอแนะ	35

สารบัญ(ต่อ)

หน้า

บรรณานุกรม

36

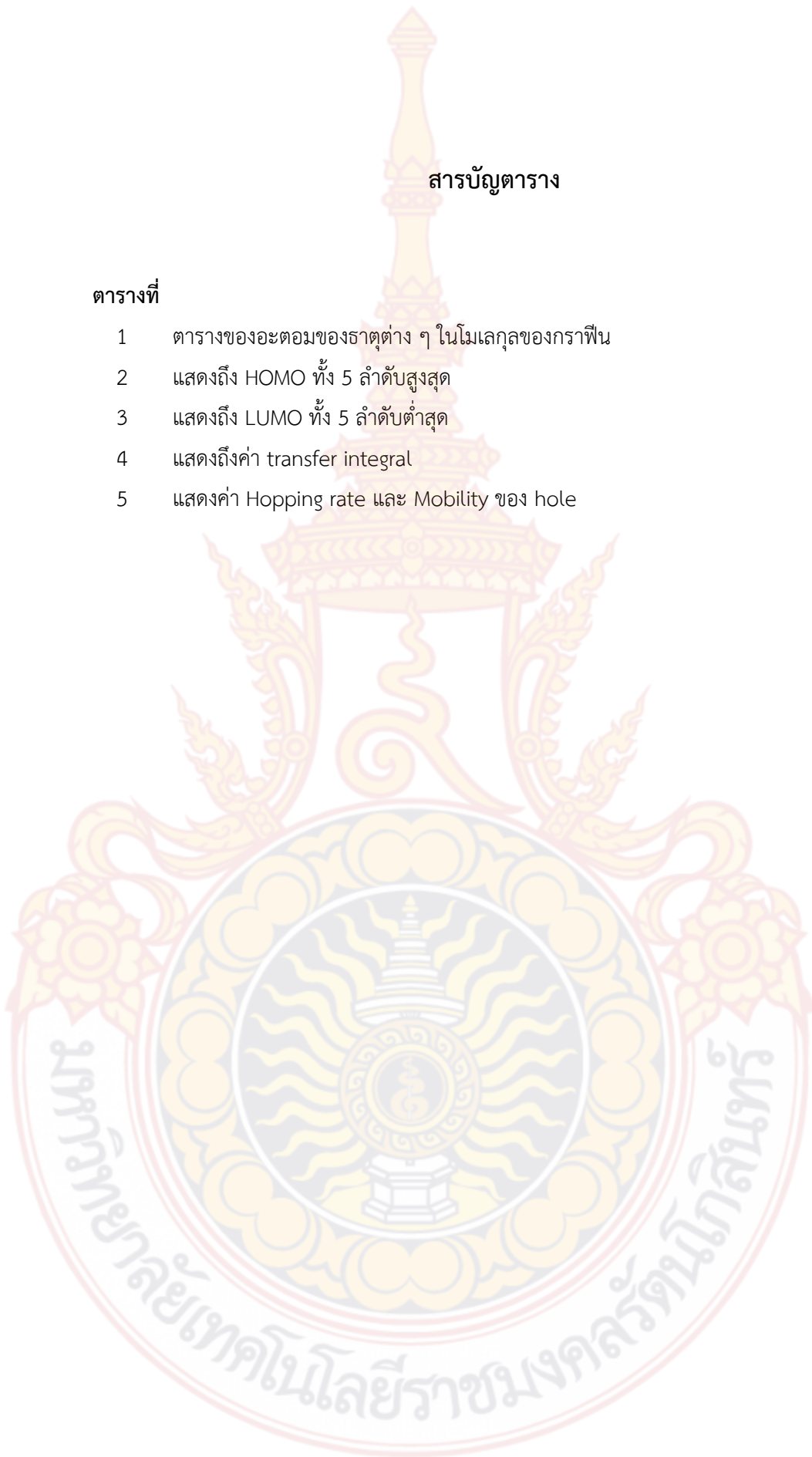
ประวัติผู้วิจัย

37



สารบัญตาราง

ตารางที่		หน้า
1	ตารางของอะตอมของธาตุต่าง ๆ ในโมเลกุลของกราฟีน	9
2	แสดงถึง HOMO ทั้ง 5 ลำดับสูงสุด	27
3	แสดงถึง LUMO ทั้ง 5 ลำดับต่ำสุด	30
4	แสดงถึงค่า transfer integral	32
5	แสดงค่า Hopping rate และ Mobility ของ hole	33



สารบัญภาพ

ภาพที่		หน้า
1	การหาค่า π	5
2	ผลของสนามไฟฟ้าที่มีต่อระดับพลังงานของกราฟีน	6
3	โครงสร้างโมเลกุลของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 3 วง	8
4	โครงสร้างโมเลกุลของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 3 วงพร้อมไฮโดรเจน	11
5	โครงสร้างโมเลกุลของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 6 วง	12
6	โครงสร้างโมเลกุลของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 6 วงพร้อมไฮโดรเจน	13
7	โครงสร้างโมเลกุลของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 12 วง	14
8	โครงสร้างโมเลกุลของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 12 วงพร้อมไฮโดรเจน	15
9	ความหนาแน่นของพาหะของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 3 วง	18
10	ความพารามิเตอร์ทางอุณหพลศาสตร์ของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 3 วง	19
11	ความหนาแน่นของพาหะของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 6 วง	20
12	พารามิเตอร์ทางอุณหพลศาสตร์ของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 6 วง	21
13	ความหนาแน่นของพาหะของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 12 วง	22
14	พารามิเตอร์ทางอุณหพลศาสตร์ของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 12 วง	23
15	การกระจายตัวของประจุของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 3 วง	24
16	การกระจายตัวของประจุของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 6 วง	25
17	การกระจายตัวของประจุของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 12 วง	26
18	ผลของสนามไฟฟ้าที่มีต่อ HOMO 5 ลำดับ	29
19	ผลของสนามไฟฟ้าที่มีต่อ LUMO 5 ลำดับ	29
20	ค่าความคล่องตัวของพาหะ	34

บทที่ 1

บทนำ

1. ความสำคัญและที่มาของปัญหา

กราฟีนการจัดเรียงอะตอมเป็นแนวโครงสร้างอย่างสมบูรณ์แบบ” (Graphene – The perfect atomic lattice) ด้วยสมบัติทางกลและไฟฟ้าที่โดดเด่นจากความสามารถในการคงตัวอยู่ได้ของโครงสร้างที่เกิดจากคาร์บอนเรียงตัวหนาเพียงอะตอม 1 ชั้น (single layer of carbon) แบบสองมิติ (Two-Dimensional: 2D) กราฟีนยังมีคุณสมบัติในการนำไฟฟ้าได้ดีกว่าทองแดง 4 เท่า มีพื้นที่ผิวมากกว่าท่อนาโนคาร์บอน 2 เท่า แข็งแรงกว่าเหล็ก 200 เท่าและแกร่งกว่าเพชร ยืดหยุ่นได้ดี และโปร่งแสงในระดับที่ยอมให้แสงผ่านได้ถึงร้อยละ 97 ซึ่งน่าสนใจสำหรับการศึกษาขั้นพื้นฐานและการใช้งานในอนาคต

กราฟีนมีคุณสมบัติที่น่าสนใจหลากหลายซึ่งเหมาะกับการใช้งานที่แตกต่างกัน โดยเป็นตัวนำไฟฟ้าที่บางมาก สมบัติเชิงกลที่แข็งแรง โปร่งแสง และมีความยืดหยุ่น ซึ่งสามารถปรับแต่งได้อย่างหลากหลายโดยการเติมสารเคมี หรือโดยการใช้สนามไฟฟ้า ซึ่งทำให้กราฟีนเป็นวัสดุที่น่าสนใจมากสำหรับการใช้ไฟฟ้าความถี่สูง และจากการความสามารถในการแยกแผ่นกราฟีนออกมาในขนาดที่ใหญ่ขึ้นใช้ในอุตสาหกรรมที่ให้ความกว้างของแผ่นกราฟีน 70 ซม. จึงทำให้สามารถนำกราฟีนไปผลิตได้จริงเป็นผลสำเร็จในการนำแผ่นกราฟีนเป็นตัวนำโปร่งแสงที่สามารถใช้ในอุปกรณ์ต่างๆ เช่น หน้าจอแบบสัมผัส (touch screen) เซลล์แสงอาทิตย์ (solar cells) ซึ่งสามารถใช้แทนที่การผลิตเซลล์แสงอาทิตย์โดยใช้แทนอินเดียมทินออกไซด์ (Indium - Tin - Oxide : ITO) ที่เป็นวัสดุราคาแพงได้ และเซนเซอร์ตรวจจับแก๊ส (gas sensor)

กราฟีนสามารถศึกษาโดยใช้ทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่น(Density Functional Theory, DFT) ทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่นเป็นเครื่องมือในการศึกษาอันตรกิริยาระหว่างแผ่นกราฟีนกับสารอินทรีย์ระเหยง่าย เครื่องมือนี้จะมีสำคัญในการวิจัยที่จะต้องมีการดำเนินการเชื่อมโยงระหว่างการค้นพบทฤษฎีและการทดลองเช่นเดียวกับการก้าวหน้าทางเคมีในปัจจุบันและความเข้าใจคุณสมบัติทางกายภาพของวัสดุ กราฟีนและ VOCs

2. วัตถุประสงค์ของการวิจัย

1. ใช้เทคนิคมอนติคาร์โลเพื่อศึกษาการขนส่งพาหะในแผ่นแกรฟีน
2. ศึกษาโครงสร้างแถบอิเล็กทรอนิกส์ของกราฟีนเพื่อศึกษาการขนส่งพาหะในกราฟีน
3. สร้างความรู้ใหม่เกี่ยวกับการขนส่งพาหะในแกรฟีน
4. นำความรู้ใหม่ไปใช้ในการศึกษาระดับอุดมศึกษา

3. ขอบเขตของการวิจัย

1. วัสดุในการศึกษานี้คือแผ่นกราฟีน
2. เทคนิคการศึกษาการขนส่งของผู้ให้บริการคือวิธีมอนติคาร์โล
3. สนามไฟฟ้าที่ใช้ระหว่าง $1 \text{ kV} / \text{cm}$ ถึง $100 \text{ kV} / \text{cm}$
4. จำลองการขนส่งพาหะที่อุณหภูมิห้อง cm^2

4. ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

การวิจัยครั้งนี้คาดว่าจะได้รับประโยชน์ดังต่อไปนี้

1. นักวิจัยทราบคุณสมบัติของสารกราฟีน
2. นักวิจัยค้นพบองค์ความรู้ใหม่
3. นักวิจัยสามารถประยุกต์ใช้สารกราฟีนได้

บทที่ 2

เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

1 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

กราฟีนวัสดุถูกค้นพบโดย Geim และ Novoselovin ในปี 2004 ซึ่งนำไปสู่รางวัลโนเบลปี 2010 ในสาขาฟิสิกส์กราฟิกได้รับการศึกษาอย่างกว้างขวางและได้รับการทบทวนอย่างกว้างขวางในหลาย ๆ ด้าน วัสดุมีการคาดการณ์ว่าจะมีผลกระทบต่ออุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์พลังงานพื้นที่สารเคมีและการใช้งานทางชีวภาพแกรฟีนเป็นวัสดุสองมิติล้วนเกิดขึ้นจากการจัดเรียงหกเหลี่ยมของอะตอมคาร์บอน มันอาจถูกมองว่าเป็นชั้นอะตอมเดียวของกราฟไฟต์, คาร์บอนนาโนทิวบ์ที่คล้ายซิปปหรือฟูลเลอร์รีนที่ไม่มีการปลดปล่อย

โครงสร้างของกราฟีนที่เป็นเอกลักษณ์ได้รับการศึกษาก่อนการค้นพบการทดลองของมัน อะตอมชั้นเดียวของกราฟไฟต์เชื่อว่าไม่เสถียรทางอุณหพลศาสตร์ ดังนั้นการค้นพบของแกรฟีนแสดงให้เห็นว่าเป็นวัสดุที่น่าแปลกใจเนื่องจากมีคุณสมบัติที่น่าสนใจและเป็นเอกลักษณ์มากมาย: ความแข็งแรงเชิงกลที่สูงที่สุดค่าการนำความร้อนที่เหนือกว่าการเคลื่อนที่ของพาหะนำแสงที่สูงมาก ยิ่งไปกว่านั้นคุณสมบัติที่เป็นเอกลักษณ์ของกราฟีนได้นำไปสู่การสังเกตลักษณะทางกายภาพที่แปลกใหม่ เช่นการขนส่งพาหะในแผ่นกราฟีนนี้

ความเป็นไปได้ของการใช้กราฟีนในการประยุกต์ที่มีมากมายเช่น ในฐานะตัวนำโปร่งใสในหน้าจอสัมผัสเซลล์แสงอาทิตย์และแผงไฟอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ที่ยืดหยุ่นอุปกรณ์ความเร็วสูงและความถี่สูงและเซ็นเซอร์อิเล็กทรอนิกส์สารเคมีและชีวภาพชนิดต่าง ๆ ส่วนใหญ่ ของการใช้งานจริงเหล่านี้ต้องการกราฟีนที่จะได้รับการสนับสนุนบนพื้นผิวฉนวนซึ่งมีผลกระทบต่อ การเคลื่อนที่ของพาหะ

ในการศึกษานี้คุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของกราฟีนที่อยู่ภายในนั้นมีความสำคัญ งานวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อตรวจสอบพารามิเตอร์การขนส่งของกราฟีนซึ่งรวมถึงโครงสร้างแถบพลังงานอิเล็กทรอนิกส์ โครงสร้างแถบพลังงานใช้ในการคำนวณอัตราการกระเจิงของพาหะ การคำนวณนี้เราใช้เทคนิค Monte Carlo เพื่อคำนวณพารามิเตอร์การขนส่งของ Boltzmann สำหรับตัวอย่างการเคลื่อนย้ายพาหะ การกระเจิงของพาหะซึ่งได้รับผลกระทบจากสิ่งเจือปนที่มีประจุของการกระจายและความหนาแน่นต่าง ๆ กับสนามแม่เหล็กไฟฟ้า ผลลัพธ์เหล่านี้เราสามารถคำนวณโดยใช้การ

จำลองด้วยคอมพิวเตอร์เพื่อทำความเข้าใจพฤติกรรมการขนส่งของพาหะในโครงสร้างนาโนของกราฟีนและนำวัสดุนี้ไปใช้กับอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์

กราฟีนยังมีค่าการนำไฟฟ้าที่ค่อนข้างสูง อย่างไรก็ตามไม่เหมือนกับโลหะที่สามารถนำไฟฟ้าได้อย่างง่ายดายผ่านแรงดันไฟฟ้าโดยการปรับความหนาแน่นของพาหะในกราฟีน ความสามารถในการปรับค่าการนำไฟฟ้าของกราฟีนช่วยให้สามารถใช้งานเช่น ตัวรับแสง (Liu et al., 2011) ยิ่งไปกว่านั้นการปรับระดับเฟอร์มีในกราฟีนให้อยู่ใกล้กับจุด Dirac เป็นสิ่งที่น่าสนใจ การวัดค่าการนำไฟฟ้าใกล้จุด Dirac จะแสดงค่าการนำไฟฟ้าขั้นต่ำที่ไม่เป็นศูนย์เสมอ (Novoselov et al., 2005; Tan et al., 2007) ค่าการนำไฟฟ้านี้เกิดจากการกระจายตัวของความหนาแน่นประจุของกราฟีนใกล้กับจุด Dirac (Adam et al., 2007) ซึ่งมักเรียกกันว่าแองอิเล็คตรอน

ความคล่องตัวของพาหะในกราฟีนนั้นสูงเป็นพิเศษดังที่ได้แสดงให้เห็นจากการวัดหลายค่า ตั้งแต่ $10^5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ใกล้อุณหภูมิห้อง (Bolotin et al., 2008a; Mayorov et al., 2011) ถึง $10^7 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ที่อุณหภูมิลดลง (Neugebauer et al., 2009) ความสามารถในการเคลื่อนที่ของพาหะสูงในกราฟีนนั้นเกิดจากความเร็วที่สูงและคงที่ของ Fermi ($\approx 10^6 \text{ m/s}$) ซึ่งมีขนาดน้อยกว่าความเร็วแสงเพียง 300 เท่าในสุญญากาศ อย่างไรก็ตามความสามารถในการเคลื่อนที่ของกราฟีนนั้นอ่อนไหวต่อสารยับยั้ง (Fratini และ Guinea, 2008) และความไม่เป็นระเบียบของโครงสร้างในบริเวณใกล้เคียง (Mucciolo และ Lewenkopf, 2010)

กราฟีนเป็นการจัดเรียงของอะตอมคาร์บอนหกเหลี่ยม การรวมกันเชิงเส้นของอะตอมของ orbitals ของอะตอมคาร์บอนอะตอมที่ใกล้ที่สุดหรือที่รู้จักกันทั่วไปว่าเป็นค่าประมาณ N-NTB ใช้คำนวณโครงสร้างแถบกราฟีนที่ค่อนข้างแม่นยำและผลลัพธ์ในสมการต่อไปนี้:

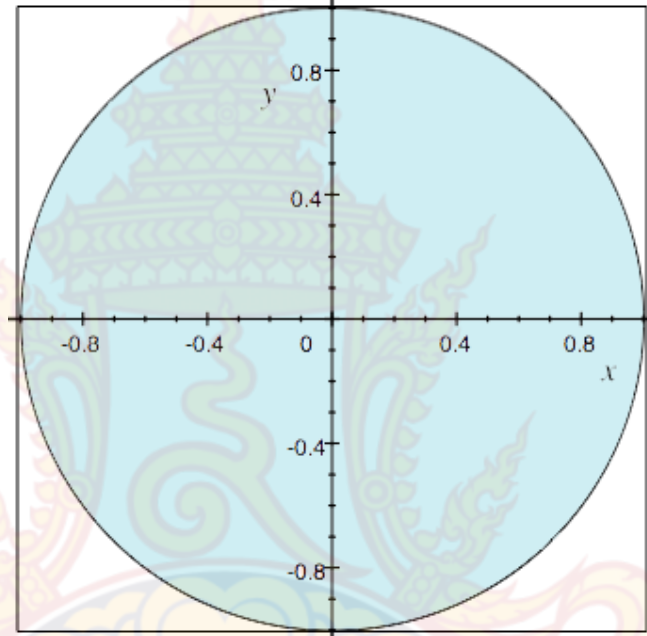
$$E_{\pm}(k_x, k_y) = \pm t_0 \left[1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} a k_y\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} a k_x\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2} a k_y\right) \right]^{\frac{1}{2}},$$

โดยที่เครื่องหมาย + และ - สอดคล้องกับแถบการนำและแถบเวเลนซ์ตามลำดับและ t_0 เป็นพลังงานกระโดดที่ใกล้เคียงที่สุด (2.8 eV)

2 วิธีมอนติคาร์โล

วิธีมอนติคาร์โล เป็นชื่อเรียกรวมๆ ของวิธีการคำนวณที่ใช้หลักความน่าจะเป็นเข้ามาประยุกต์
พูดได้ว่าวิธีการคำนวณค่าตัวเลขวิธีไหนก็ตามที่ใช้ความน่าจะเป็นเข้ามาจับ จะเรียกว่า วิธีมอนติคาร์-
โล และแน่นอนว่าการคำนวณแบบนี้ ถ้าเราทำการรันสองครั้ง ค่าที่ได้มักจะไม่ได้ค่าที่เท่ากันหรือ

ตัวอย่างเช่น สมมติว่าเราต้องการหาค่า π



ภาพที่ 1 การหาค่า π

ให้ p แทนความน่าจะเป็นที่สุ่มจุดมา 1 จุด ภายในสี่เหลี่ยมจัตุรัสตั้งรูป แล้วจุดที่ได้จะอยู่ใน
วงกลม ให้ X แทนพื้นผิววงกลม และให้ A แทนพื้นที่ของรูปสี่เหลี่ยมจัตุรัส

จะได้ว่า

$$p = \frac{X}{A} = \frac{\pi \cdot 1^2}{2 \cdot 2} = \frac{\pi}{4}$$

ดังนั้น

$$\pi = 4p$$

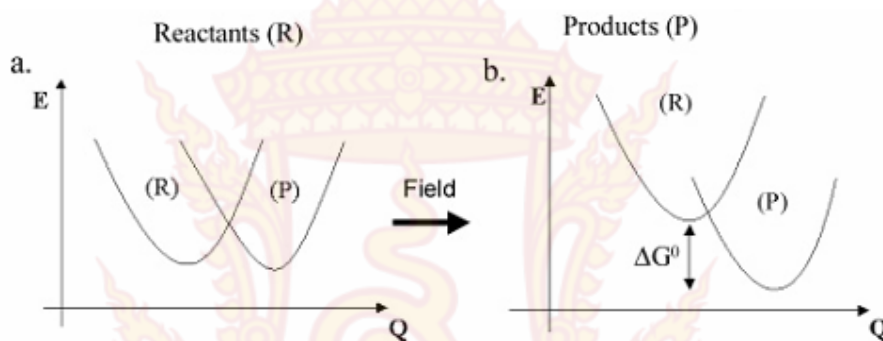
ดังนั้นเราอาจจะคำนวณพื้นที่ โดยการสุ่มจุด (x,y) โดยที่ $-2 \leq x \leq 2$ และ $-2 \leq y \leq 2$ มา
เป็นจำนวน N จุด แล้วตรวจสอบว่ามีจุดที่สุ่มมานั้นอยู่ภายในวงกลมกี่จุด (โดยตรวจสอบว่า $x^2 + y^2 \leq 1$
หรือไม่)

สมมติว่ามีจุดที่อยู่ภายในวงกลม n จุด เราจะได้ว่าพื้นที่ๆเราต้องการหาคือ

$$x = 4 \left(\frac{n}{N} \right)$$

เมื่อทดลองดูซ้ำๆจะได้ผลลัพธ์แต่ละครั้งจะให้ค่าไม่เท่ากัน

สำหรับแบบจำลองฮอปปีง ในสารเพนทาซีนโดยมีสนามไฟฟ้าในทิศตั้งฉากกับโมเลกุลทั้งสองแสดงได้ดังรูป



ภาพที่ 2 ผลของสนามไฟฟ้าที่มีต่อระดับพลังงานของกราฟีน

โดยความสามารถในการกระโดดของพาหะคำนวณจากสมการของ Marcus คือ

โดย \hbar คือ ค่าคงที่ของพลังค์หารด้วยสอง π

t คือ transfer integral

λ คือ total reorganization energy

k_B คือค่าคงที่ของโบลมานต์

จากการคำนวณโดยวิธี DFT จะได้ค่าระดับพลังงานที่ Molecular orbital ต่าง เราสามารถคำนวณค่า t จากการ split ของระดับพลังงานของ HOMO หรือ LUMO และเมื่อได้ค่า t แล้วก็สามารถคำนวณค่า Hopping rate และสามารถนำไปคำนวณความคล่องตัวตามสมการนี้

$$\mu = \frac{d}{\tau F}$$

โดย τ คือค่าความน่าจะเป็นที่พาหะจะสามารถกระโดดไปในทิศทางที่มีการพิจารณา



บทที่ 3 วิธีดำเนินการวิจัย

การวิจัยครั้งนี้มุ่งศึกษาผลของสนามไฟฟ้าที่มีต่อพาหะในสารกราฟีน โดยใช้ Density Functional Theory ในการดำเนินการวิจัยครั้งนี้มีขั้นตอนดังต่อไปนี้

1. สร้างสารกราฟีน
2. ใช้ Density Functional Theory คำนวณสารกราฟีน
3. สรุปผลการวิจัย

1. สารกราฟีน

ตำแหน่งของอะตอมต่างๆใน สารกราฟีน สามารถแสดงได้ดังภาพที่ 1

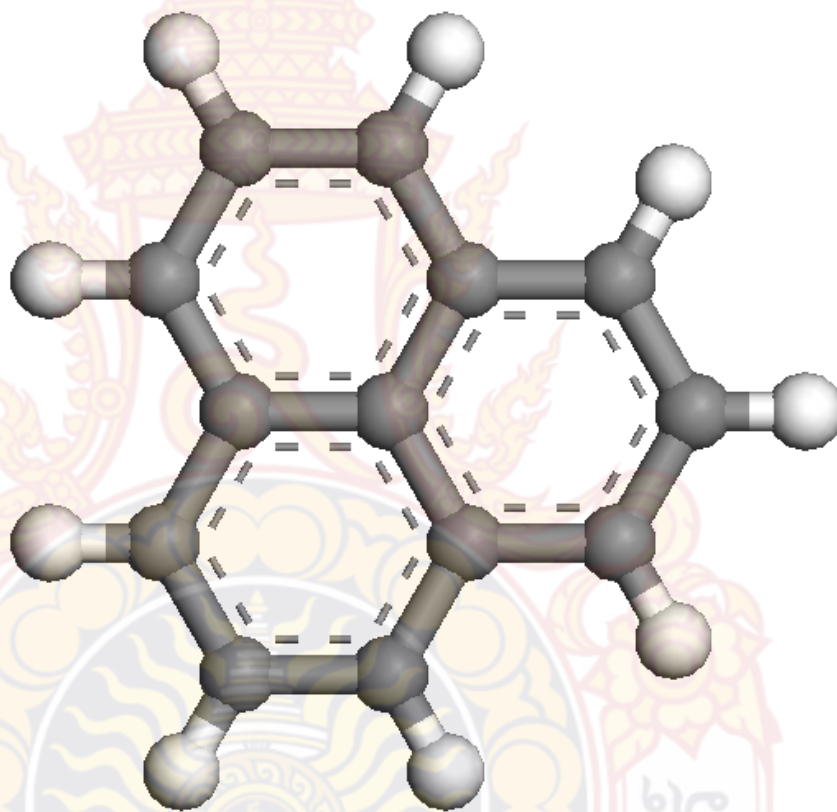


ภาพที่ 3 โครงสร้างโมเลกุลของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 3 วง

สำหรับตำแหน่งของอะตอมของธาตุต่างๆใน โมเลกุลของ กราฟีน แสดงในตารางที่ 1
 ตารางที่ 1 ตำแหน่งของอะตอมของธาตุต่างๆใน โมเลกุลของ กราฟีน

ธาตุ	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	0.0462	-0.0126	0.2825
C	0.7951	-1.3576	0.3236
C	2.3346	-1.3828	0.3125
C	3.1263	-0.0629	0.2641
C	2.3778	1.2823	0.2319
C	0.8378	1.3077	0.2402
C	-1.494	0.0128	0.2936
C	-2.2422	1.3585	0.2598
C	-1.4508	2.6786	0.2132
C	0.0892	2.6532	0.2064
C	0.0034	-2.6779	0.3694
C	-1.5372	-2.6525	0.3767
C	-2.2857	-1.3071	0.3416
C	3.1689	2.6027	0.1951
C	2.4206	3.9486	0.1658
C	0.8811	3.9734	0.1651
C	3.0816	-2.7288	0.3394
C	2.2912	-4.0485	0.4063
C	0.7514	-4.0234	0.4154
C	-3.7821	1.3842	0.2706
C	-4.5732	0.0642	0.3251
C	-3.8253	-1.2813	0.358
C	-2.1989	4.024	0.1771
C	-3.7386	4.0495	0.1845
C	-4.5305	2.7296	0.2316
C	0.1326	5.3192	0.1261
C	-1.4072	5.3441	0.1317

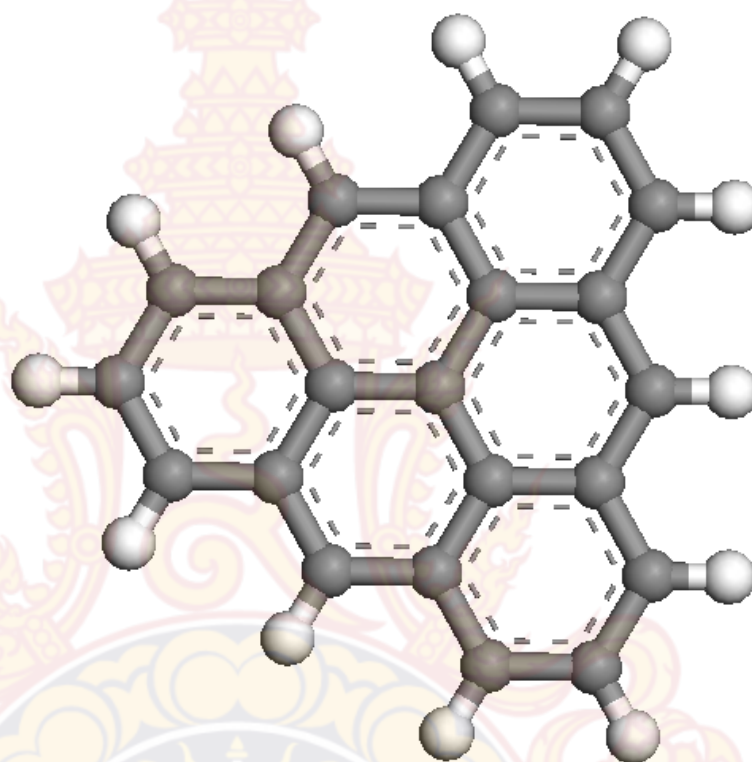
ธาตุ	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	4.6654	-0.0882	0.2489
C	5.4572	1.2319	0.2109
C	4.7085	2.5774	0.1853
C	4.6208	-2.7548	0.3111
C	5.4124	-1.4349	0.2666
C	-2.3296	-3.9723	0.4273
C	-1.5817	-5.3175	0.4666
C	-0.0416	-5.3429	0.4627
C	-3.8696	-3.9469	0.4371
C	-4.6173	-2.6011	0.4051
H	3.0064	4.9265	0.1408
H	2.8462	-5.0438	0.4418
H	-5.7127	0.0829	0.3391
H	-4.2919	5.0456	0.1548
H	-5.6704	2.7486	0.239
H	0.7181	6.2969	0.0948
H	-1.9611	6.34	0.1024
H	6.5969	1.2127	0.2003
H	5.2942	3.555	0.1574
H	5.1747	-3.7512	0.3273
H	6.5519	-1.4548	0.2447
H	-2.1683	-6.2946	0.5007
H	0.5117	-6.3391	0.495
H	-4.456	-4.9239	0.4714
H	-5.757	-2.5818	0.4174



ภาพที่ 4 โครงสร้างโมเลกุลของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 3 วงพร้อมไฮโดรเจน



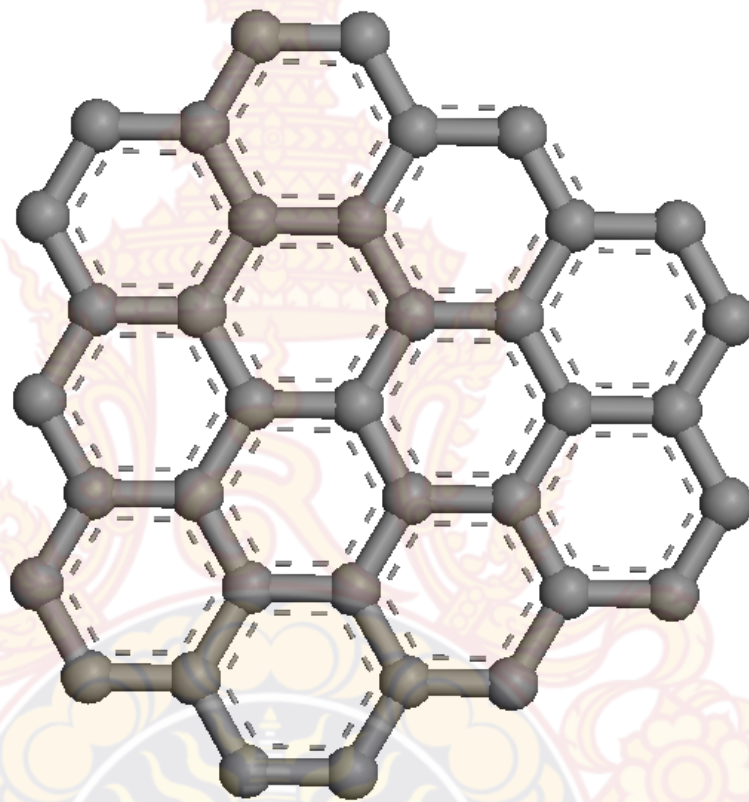
ภาพที่ 5 โครงสร้างโมเลกุลของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 6 วง



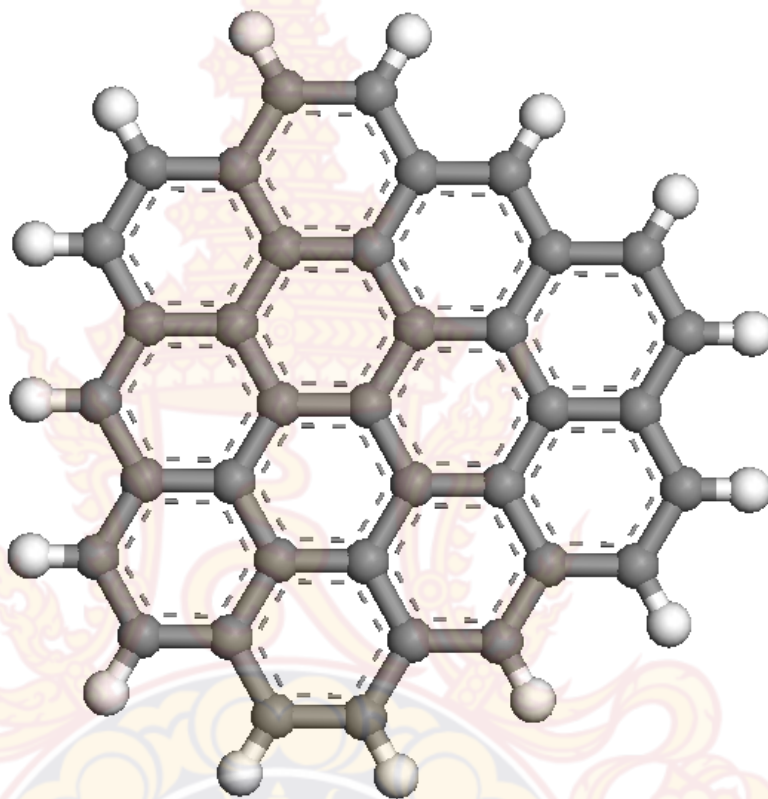
Y
↑
↓
↑
↓

ภาพที่ 6 โครงสร้างโมเลกุลของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 6 วงพร้อมไฮโดรเจน

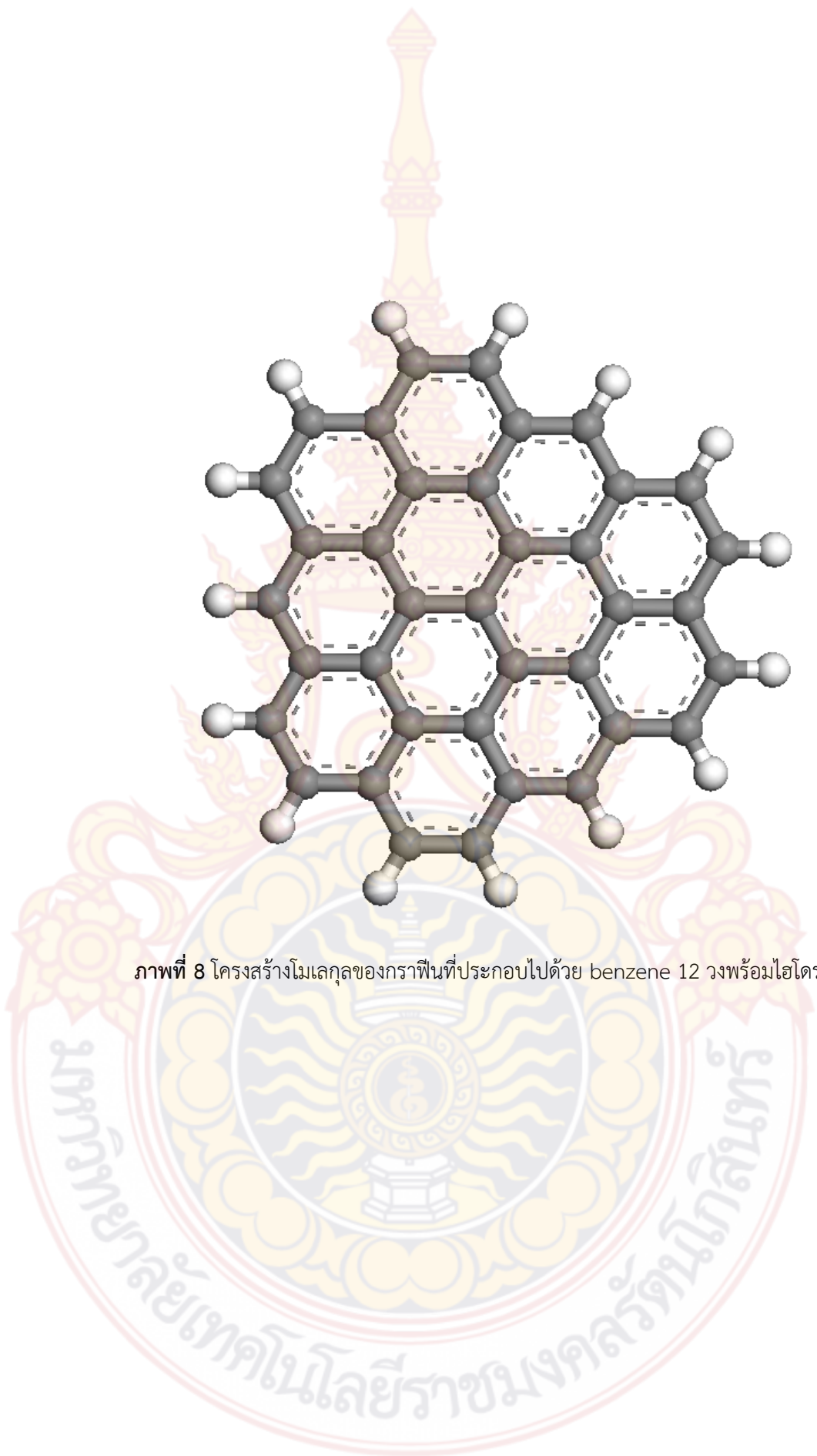
มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลธัญบุรี



ภาพที่ 7 โครงสร้างโมเลกุลของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 12 วง



ภาพที่ 8 โครงสร้างโมเลกุลของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 12 วงพร้อมไฮโดรเจน



2. ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น (Density Functional Theory)

ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น (density functional theory, DFT) เป็นทฤษฎีหนึ่ง ที่ประสบความสำเร็จอย่างมากสำหรับใช้อธิบายสมบัติต่างๆ ของโลหะ สารกึ่งตัวนำ และฉนวน ไม่เพียงเท่านั้น ทฤษฎีนี้ยังสามารถนำไปใช้ คำนวณหาสมบัติต่างๆ ของโปรตีน โมเลกุลซูปรา และวัสดุนาโน ได้เป็นอย่างดีเช่นกัน โดยแนวคิดหลักของทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นคือ การอธิบายถึงอันตรกิริยาในระบบของเฟอร์มิออน (fermions) ต่างๆ อันได้แก่ อิเล็กตรอน โปรตอนและนิวตรอนผ่านความหนาแน่นของเฟอร์มิออน เหล่านั้นในระบบ โดยไม่ได้ผ่านฟังก์ชันคลื่นของ เฟอร์มิออน กล่าวคือสำหรับระบบที่มีจำนวนอิเล็กตรอนเท่ากับ N ตัว ซึ่งมีพฤติกรรมเป็นไปตามหลักของเพาลี (Pauli) นั่นคือ อิเล็กตรอนจะผลัดกันเอง ผ่านพลังงานศักย์คูลอมบ์ (Coulomb potential) หมายความว่าตัวแปรพื้นฐานของระบบ จึงขึ้นอยู่กับ ระยะพิคตหรือโคออร์ดิเนตเท่านั้น ที่ถูกนำมาใช้ในฟังก์ชันของความหนาแน่นของอิเล็กตรอน ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นในปัจจุบัน ได้ถูกพัฒนาออกเป็นระดับย่อยต่างๆ โดยระดับของทฤษฎีพบว่า เป็นที่นิยมนำมาใช้ในงานวิจัยได้แก่ระดับ B3LYP/6-31G(d,p), B3LYP/6-311+G(d,p), B3LYP/LANL2DZ, PBEPBE/6-31G(d,p), LSDA/6-31G(d,p) และ B3PW91/6-31G(d,p) เป็นต้น

2.1 การประยุกต์ใช้ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นใน สมบัติเชิงโครงสร้าง

สมบัติเชิงโครงสร้างของโมเลกุล ได้จากการคำนวณหาโครงสร้างที่เหมาะสมที่สุดซึ่งเป็นโครงสร้างที่มีพลังงานต่ำสุด จากโครงสร้างที่เป็นไปได้ทั้งหมดของโมเลกุล สมบัติเชิงโครงสร้างที่สำคัญได้แก่ ความยาวพันธะ มุมพันธะ มุมไดฮีดรอล รวมทั้งภาพรวมของรูปร่างโมเลกุลเช่น ขนาดโพรง ของโมเลกุล ความกะกะของโมเลกุล เป็นต้น

2.2 การประยุกต์ใช้ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นในออร์บิทัลของโมเลกุล

ออร์บิทัลของโมเลกุล เป็นสมบัติหนึ่งที่ใช้อธิบายการเกิด เป็นสารประกอบเชิงซ้อน โดยเฉพาะอย่างยิ่งตำแหน่งของออร์บิทัลของโมเลกุลที่มีพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (Highest Occupied Molecular Orbital, HOMO) และตำแหน่งของออร์บิทัลของโมเลกุลที่มีพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (Lowest Unoccupied Molecular Orbital, LUMO) สามารถใช้ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นของตัวตรวจจับไอออนลบที่มีหมู่ยูเรีย ซึ่งศึกษาโดยใช้ทฤษฎีที่ระดับ B3LYP/6-311+G(d,p) เพื่อคำนวณหาโครงสร้างที่เหมาะสมของตัวตรวจจับและโครงสร้างของสารประกอบเชิงซ้อนระหว่างตัวตรวจจับกับไอออนลบต่างๆ จากนั้นนำโครงสร้างที่เหมาะสมมาคำนวณหาพลังงานการยึดจับระหว่างตัวตรวจจับกับไอออน

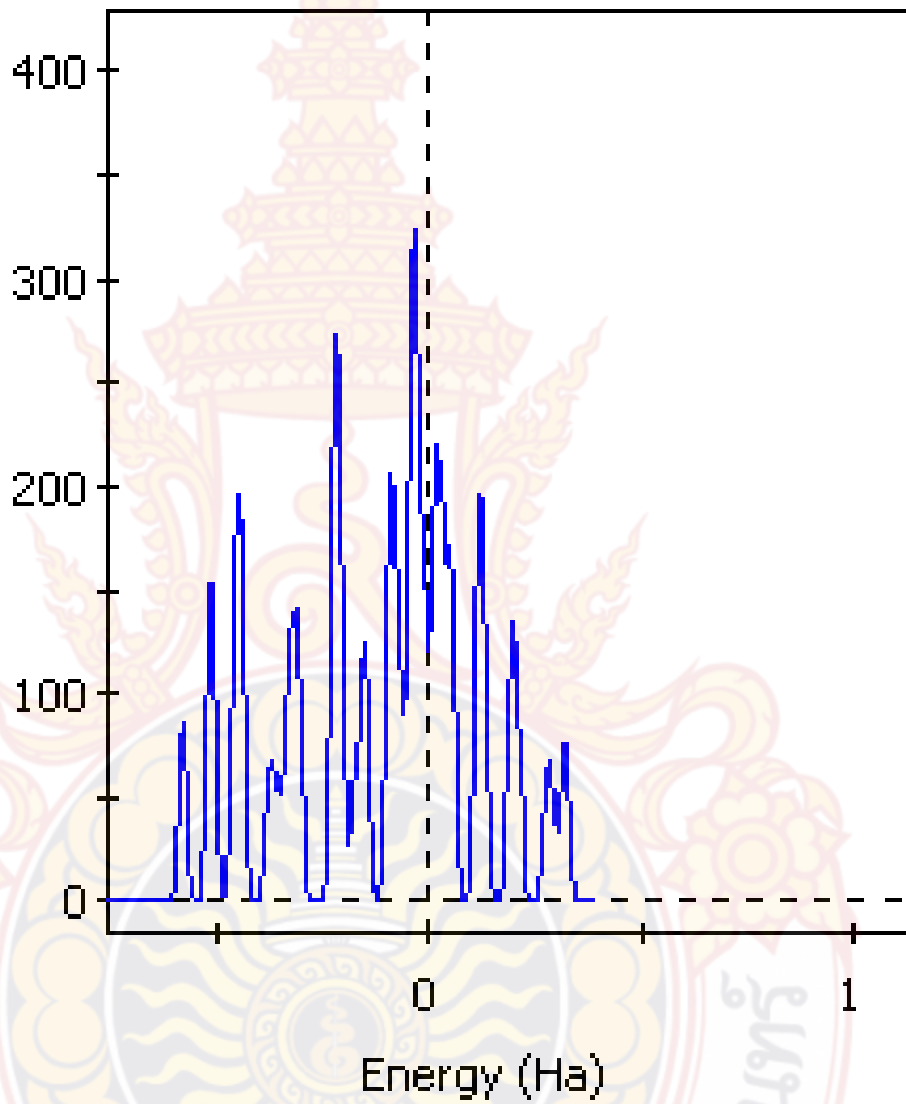
บทที่ 4

ผลการคำนวณและวิเคราะห์ข้อมูล

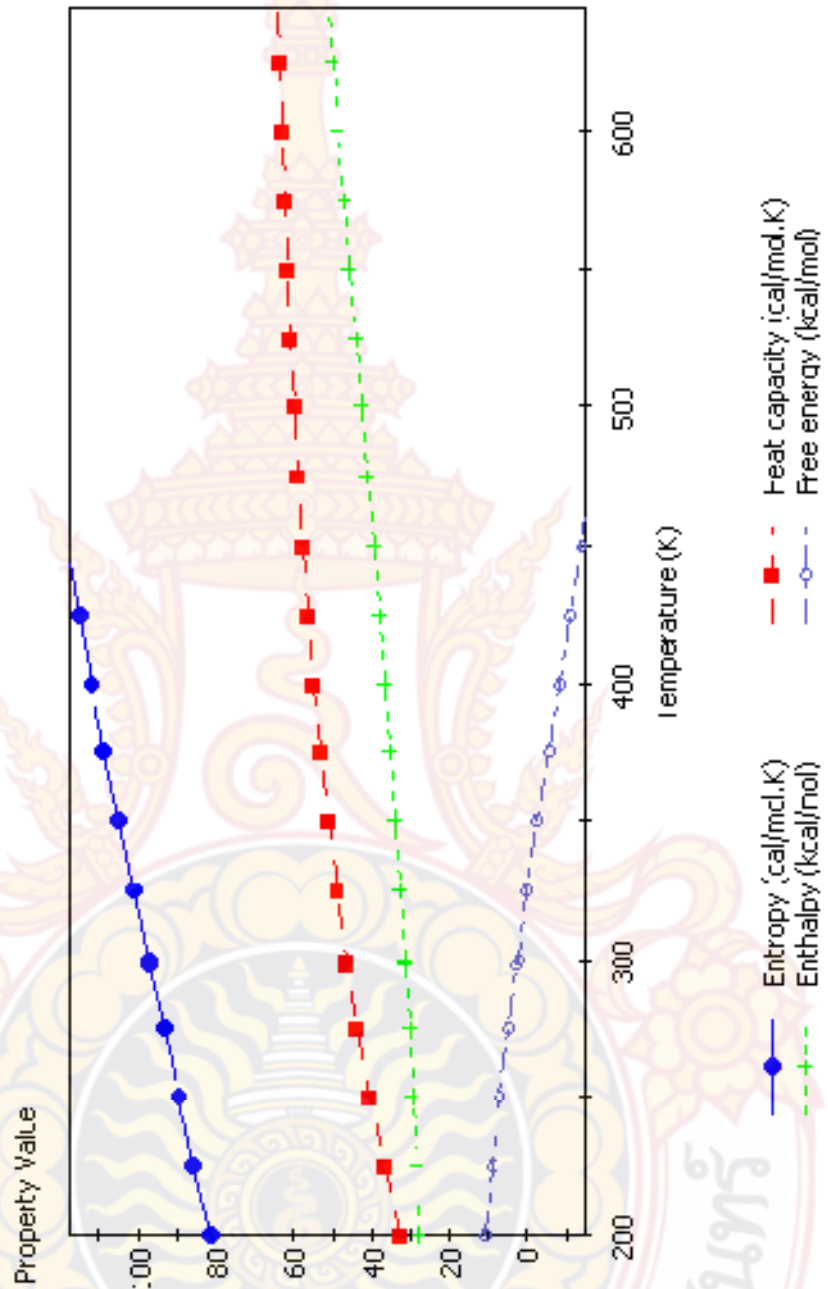
ผลการวิจัยโดยใช้ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นเพื่อคำนวณสถานะต่างๆของพาหะ โดยสามารถแยกพิจารณาผลการคำนวณได้สองส่วนดังต่อไปนี้ คือ ผลของความหนาแน่นของพาหะต่อระดับพลังงาน (Density of states, electron / HA) และผลของอุณหภูมิที่มีต่อตัวแปรทางอุณหพลศาสตร์

1. ผลของความหนาแน่นของพาหะต่อระดับพลังงานและผลของอุณหภูมิที่มีต่อตัวแปรทางอุณหพลศาสตร์

Density of States (electrons/Ha)

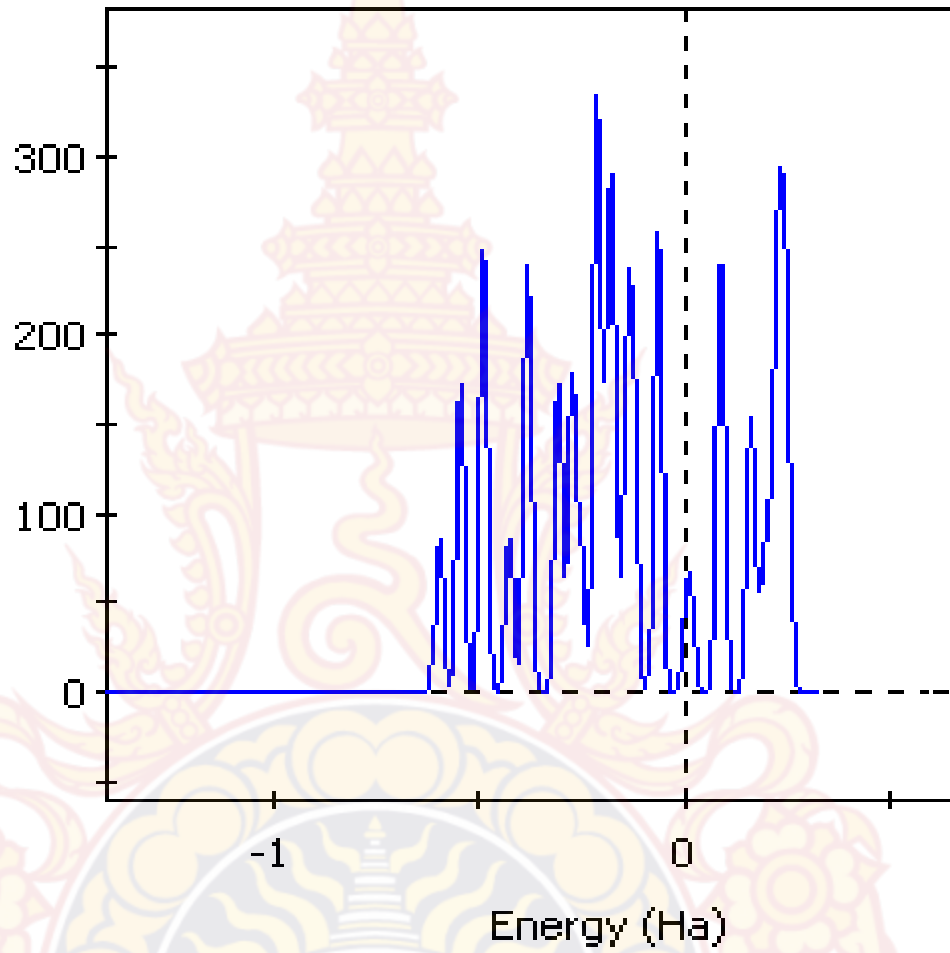


ภาพที่ 9 ความหนาแน่นของพาหะของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 3 วง

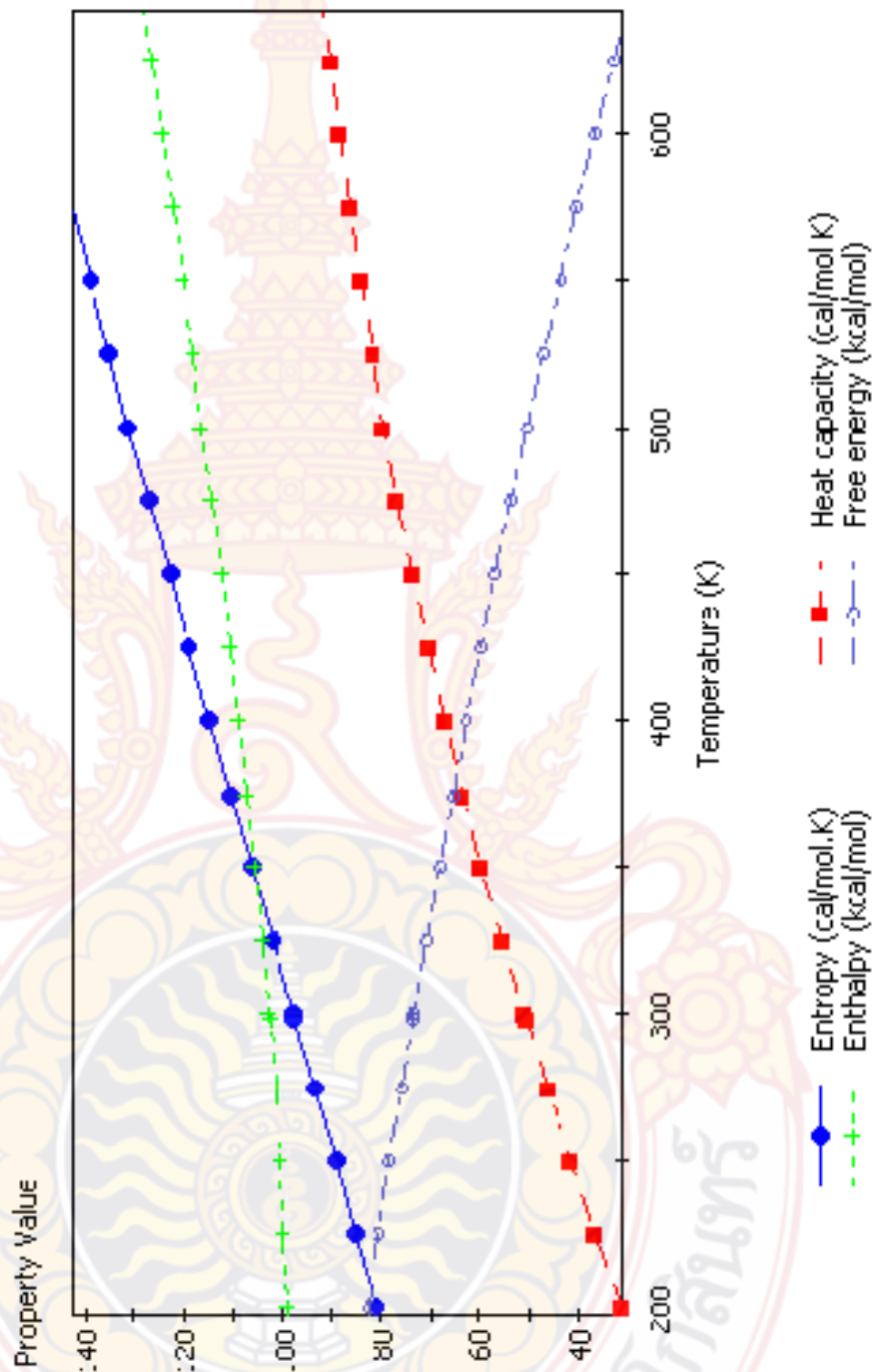


ภาพที่ 10 ความพารามิเตอร์ทางอุณหพลศาสตร์ของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 3 วง

Density of States (electrons/Ha)

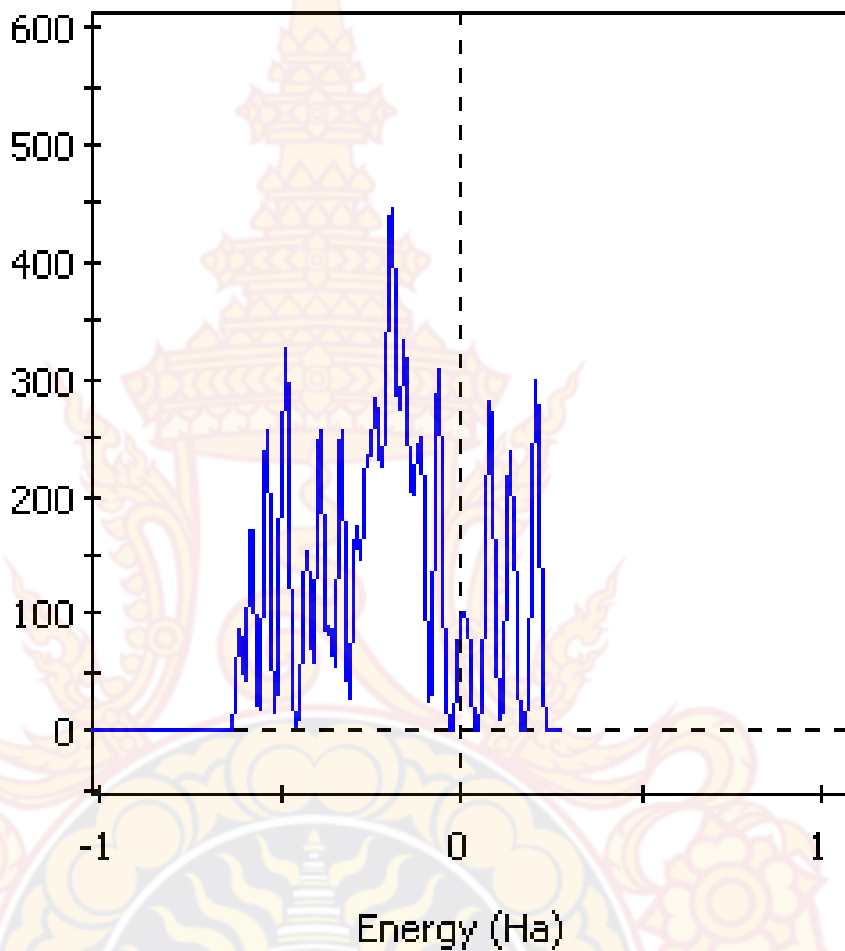


ภาพที่ 11 ความหนาแน่นของพาหะของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 6 วง

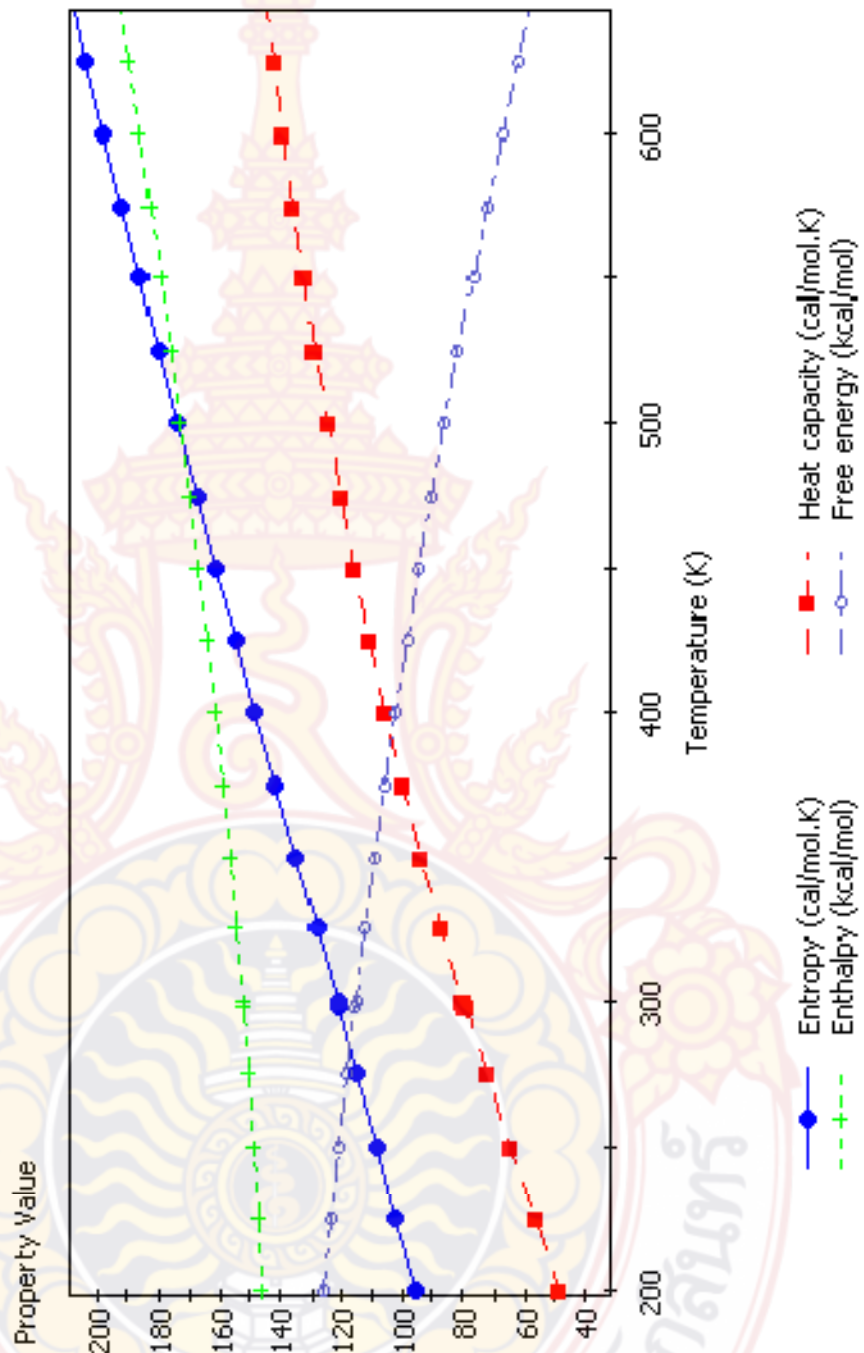


ภาพที่ 12 ความพารามิเตอร์ทางอุณหพลศาสตร์ของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 6 วง

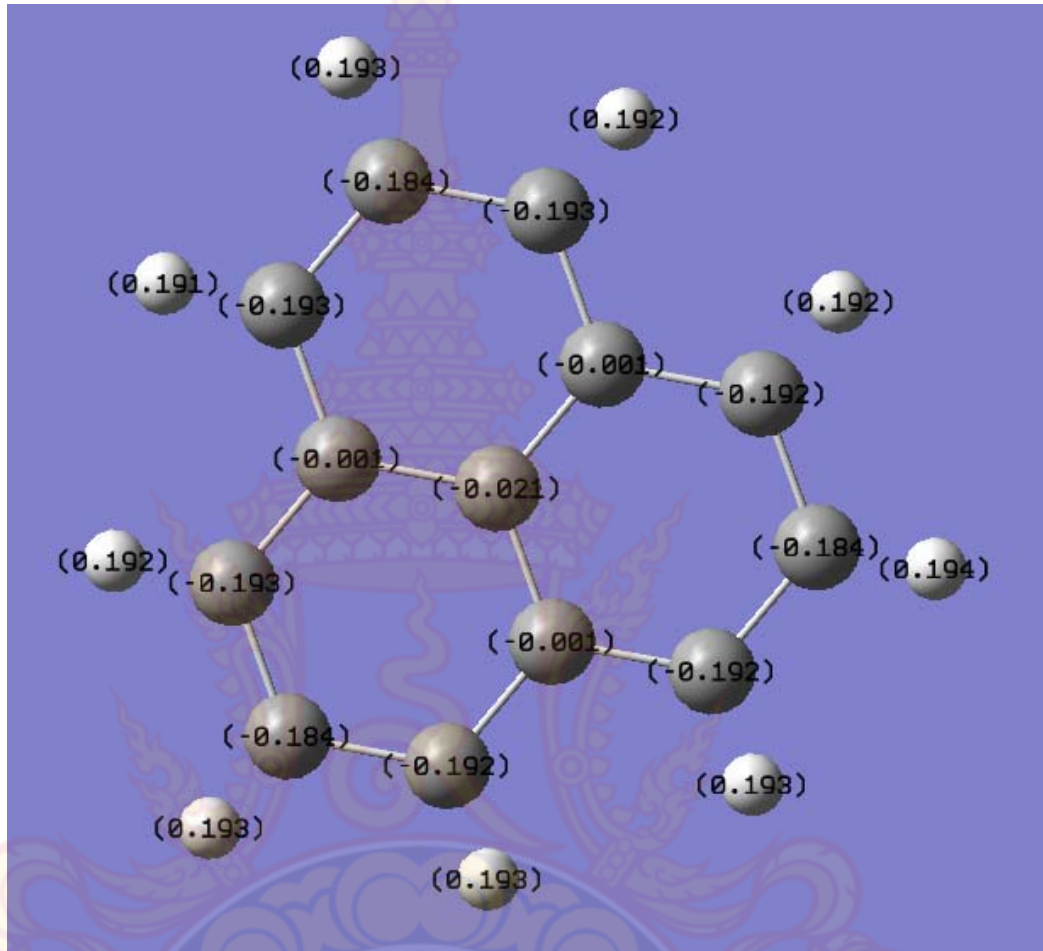
Density of States (electrons/Ha)



ภาพที่ 13 ความหนาแน่นของพาหะของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 12 วง

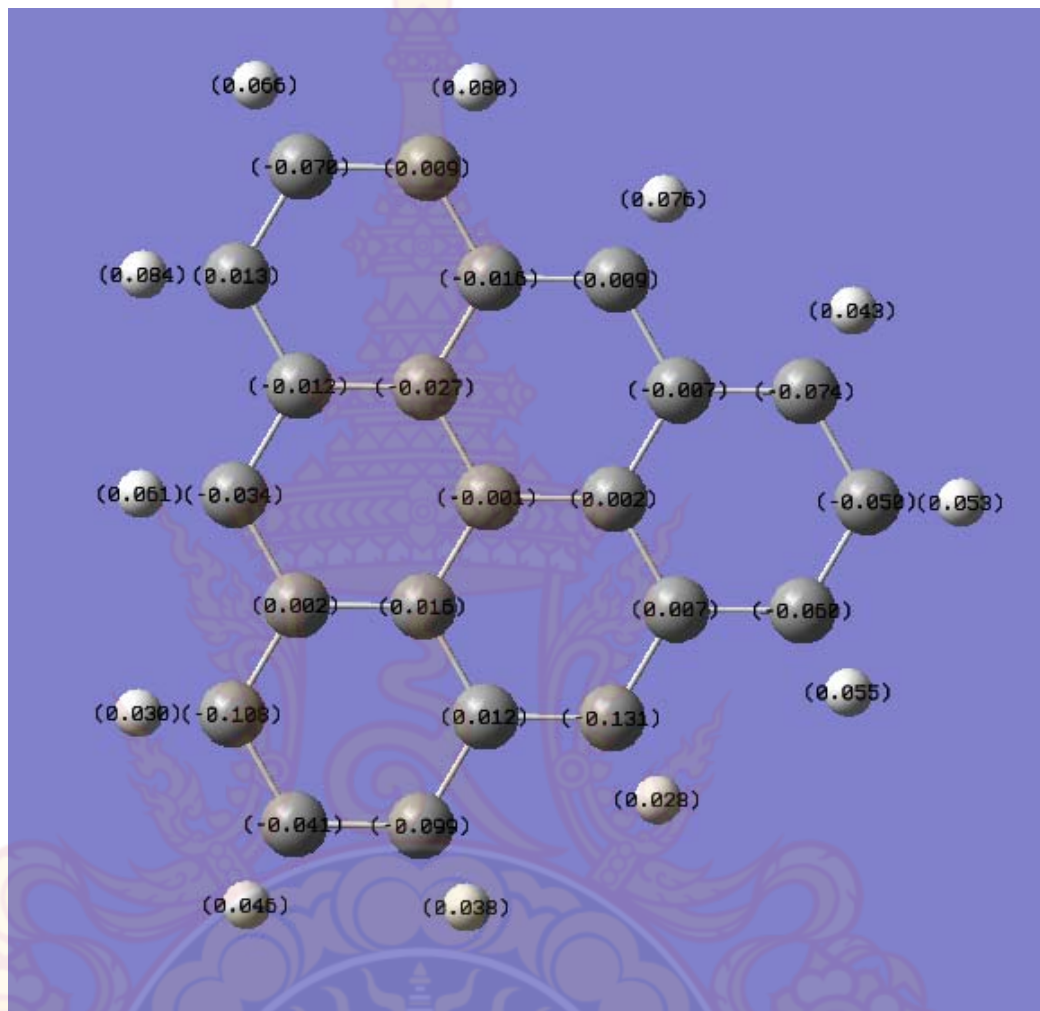


ภาพที่ 14 ความพารามิเตอร์ทางอุณหพลศาสตร์ของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 12 วง



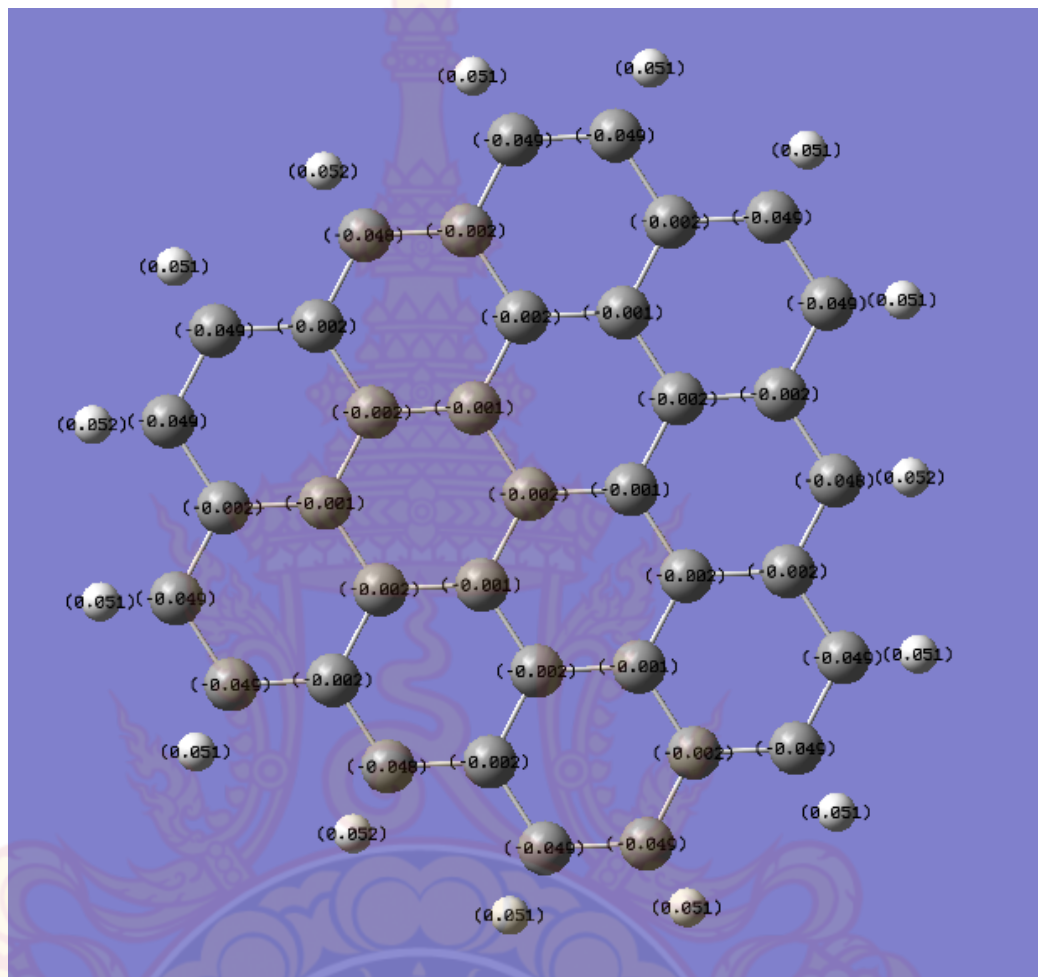
ภาพที่ 15 การกระจายตัวของประจุของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 3 วง





ภาพที่ 16 การกระจายตัวของประจุของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 6 วง





ภาพที่ 17 การกระจายตัวของประจุของกราฟีนที่ประกอบไปด้วย benzene 12 วง



2. วิเคราะห์ผลของข้อมูลทฤษฎีฟังก์ชันัลความหนาแน่น

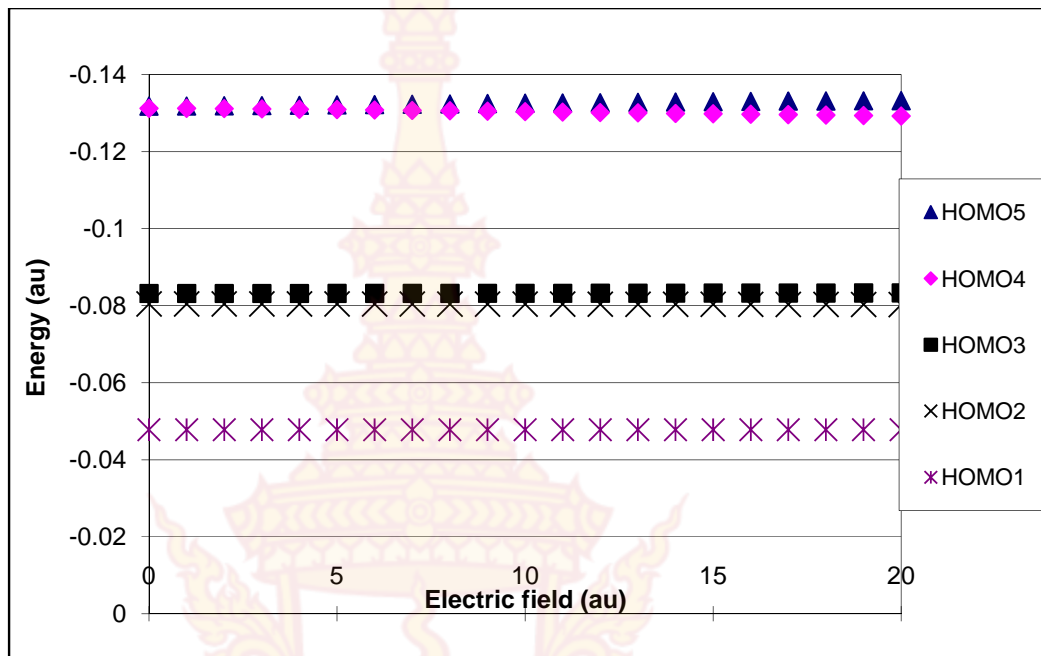
โดยข้อมูลของผลที่ได้จากการใช้แบบจำลองฮอปปีงที่ค่าสนามไฟฟ้าต่างๆจะพบว่าเมื่อสนามไฟฟ้าเพิ่มขึ้นความสามารถของพาหะที่จะกระโดดไปทิศเดียวกับสนามไฟฟ้ามีค่ามากขึ้น แต่พาหะก็สามารถกระโดดไปทิศตรงข้ามกับสนามไฟฟ้าซึ่งมีโอกาสน้อยกว่า ส่งผลทำให้ความคล่องตัวของพาหะเพิ่มขึ้นเมื่อมีการเพิ่มค่าสนามไฟฟ้าแสดงดังตาราง

ผลของสนามไฟฟ้าที่มีต่อ molecular orbital ทั้ง HOMO และ LUMO แสดงดังตารางที่ 2 และ 3

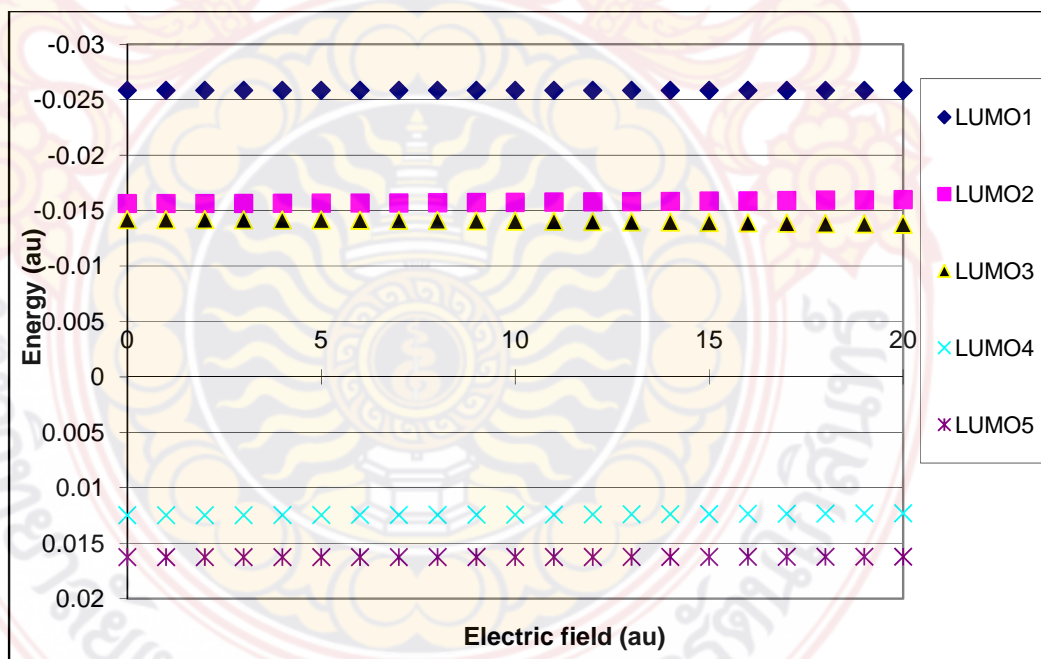
ตารางที่ 2 แสดงถึง HOMO ทั้ง 5 ลำดับสูงสุด

	Energy(au)				
F(au)	HOMO ₁	HOMO ₂	HOMO ₃	HOMO ₄	HOMO ₅
0	-0.02585	-0.01564	-0.01418	0.01247	0.01625
1	-0.02585	-0.01564	-0.01418	0.01247	0.01625
2	-0.02585	-0.01564	-0.01418	0.01247	0.01625
3	-0.02585	-0.01565	-0.01417	0.01247	0.01625
4	-0.02585	-0.01566	-0.01416	0.01246	0.01625
5	-0.02584	-0.01567	-0.01415	0.01246	0.01625
6	-0.02584	-0.01568	-0.01413	0.01245	0.01625
7	-0.02584	-0.01569	-0.01412	0.01245	0.01625
8	-0.02584	-0.01571	-0.01411	0.01244	0.01624
9	-0.02584	-0.01573	-0.01408	0.01243	0.01624

	Energy(au)				
F(au)	HOMO ₁	HOMO ₂	HOMO ₃	HOMO ₄	HOMO ₅
10	-0.02584	-0.01574	-0.01406	0.01243	0.01624
11	-0.02584	-0.01577	-0.01404	0.01242	0.01624
12	-0.02584	-0.01579	-0.01401	0.01241	0.01624
13	-0.02584	-0.01581	-0.01398	0.01239	0.01623
14	-0.02584	-0.01583	-0.01396	0.01238	0.01623
15	-0.02584	-0.01586	-0.01393	0.01237	0.01623
16	-0.02584	-0.01588	-0.0139	0.01235	0.01622
17	-0.02583	-0.01591	-0.01387	0.01234	0.01622
18	-0.02583	-0.01594	-0.01383	0.01232	0.01622
19	-0.02583	-0.01596	-0.0138	0.0123	0.01621
20	-0.02583	-0.01599	-0.01377	0.01229	0.01621



ภาพที่ 18 โครงสร้างผลของสนามไฟฟ้าที่มีต่อ HOMO 5 ลำดับ



ภาพที่ 19 โครงสร้างผลของสนามไฟฟ้าที่มีต่อ LUMO 5 ลำดับ

ตารางที่ 3 แสดงถึง LUMO ทั้ง 5 ลำดับต่ำสุด

F(au)	Energy(au)				
	LUMO ₅	LUMO ₄	LUMO ₃	LUMO ₂	LUMO ₁
0	-0.13182	-0.13125	-0.08318	-0.08046	-0.0478
1	-0.13184	-0.13123	-0.08318	-0.08046	-0.0478
2	-0.13189	-0.13118	-0.08318	-0.08046	-0.0478
3	-0.13196	-0.1311	-0.08318	-0.08046	-0.0478
4	-0.13204	-0.13101	-0.08318	-0.08045	-0.0478
5	-0.13212	-0.13092	-0.08319	-0.08045	-0.0478
6	-0.13221	-0.13082	-0.08319	-0.08044	-0.0478
7	-0.1323	-0.13071	-0.0832	-0.08044	-0.0478
8	-0.13239	-0.13061	-0.0832	-0.08043	-0.0478
9	-0.13248	-0.1305	-0.08321	-0.08043	-0.0478
10	-0.13257	-0.13039	-0.08322	-0.08042	-0.0478
11	-0.13266	-0.13027	-0.08322	-0.08041	-0.0478
12	-0.13274	-0.13016	-0.08323	-0.0804	-0.0478
13	-0.13282	-0.13005	-0.08324	-0.08039	-0.0478
14	-0.1329	-0.12993	-0.08325	-0.08038	-0.0478
15	-0.13297	-0.12982	-0.08327	-0.08037	-0.0478

Energy(au)					
F(au)	LUMO ₅	LUMO ₄	LUMO ₃	LUMO ₂	LUMO ₁
16	-0.13304	-0.1297	-0.08328	-0.08036	-0.0478
17	-0.1331	-0.12958	-0.08329	-0.08035	-0.0478
18	-0.13316	-0.12947	-0.0833	-0.08033	-0.0478
19	-0.13321	-0.12935	-0.08332	-0.08032	-0.0478
20	-0.13324	-0.12923	-0.08333	-0.08031	-0.0478

จากผลการคำนวณเมื่อไม่มีสนามไฟฟ้าจะพบว่าค่าระดับพลังงานของ Molecular Orbital ของ LUMO ลำดับที่ 1 ถึง ลำดับที่ 5 คือ -0.13182, -0.13125, -0.08318, -0.08046 และ -0.0478 และของ HOMO ลำดับที่ 1 ถึง ลำดับที่ 5 คือ -0.02585, -0.01564, -0.01418, 0.01247 และ 0.01625 โดยค่าทั้ง 10 ค่าเป็นสถานะที่ไม่มีการใส่สนามไฟฟ้าลงไป และเมื่อมีการใส่สนามไฟฟ้าอยู่ในช่วง 1 ถึง 20 au จะพบว่า HOMO1-3 ค่าระดับพลังงานมีค่าลดลงเล็กน้อยเมื่อสนามไฟฟ้ามีค่าเพิ่มขึ้น ส่วน HOMO ที่ 4 และ 5 เมื่อสนามไฟฟ้าน้อยกว่า 5 au พบว่า HOMO ที่ 4 มีค่าพลังงานใกล้เคียงกันแต่เมื่อค่าสนามไฟฟ้าเพิ่มขึ้น 20 au พบว่า ค่าผลต่างของระดับพลังงานทั้งสองเป็น 0.01 au สำหรับ LUMO จะพบว่า ค่าระดับพลังงานมีค่าลดลงเล็กน้อยเมื่อสนามไฟฟ้ามีค่าเพิ่มขึ้น ยกเว้น LUMO ที่ 3 ค่าพลังงานมีค่าเพิ่มขึ้น โดยกราฟของ LUMO และ HOMU สามารถแสดงในรูปที่ 18 และ 19

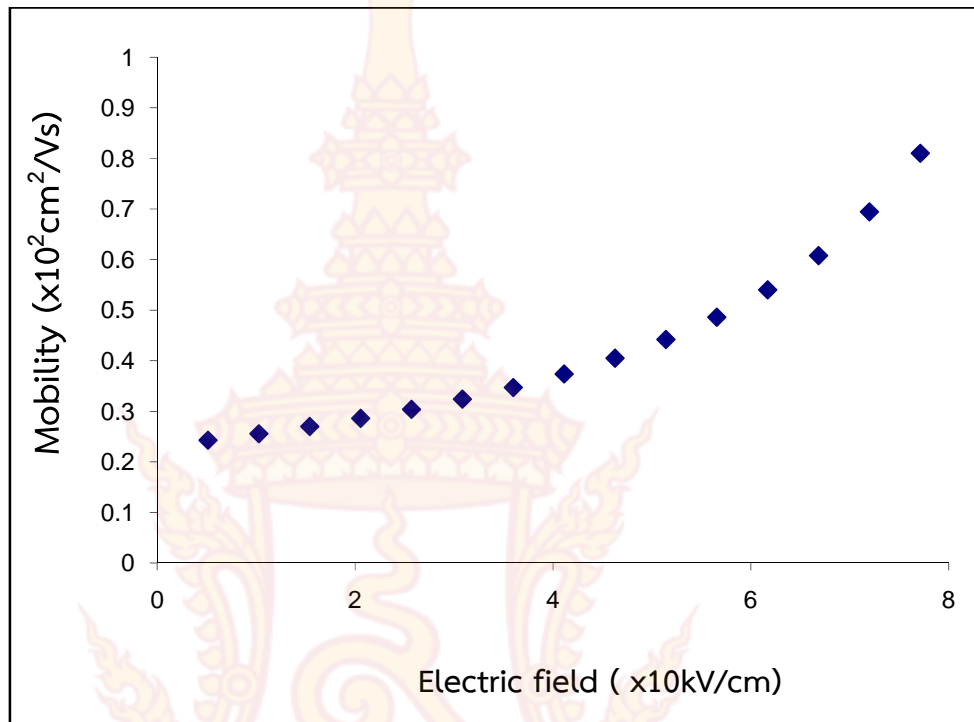
ตารางที่ 4 แสดงถึงค่า transfer integral

F ($\times 10^3$ kV/cm)	t'_{HOMO} (eV)	t'_{LUMO} (eV)
0	0.888724	0.277828
0.514221	0.888724	0.277828
1.028441	0.888724	0.277828
1.542662	0.888724	0.277556
2.056883	0.886003	0.271025
2.571103	0.886275	0.27157
3.085324	0.888179	0.276468
3.599544	0.888179	0.276196
4.113765	0.887907	0.275651
4.627986	0.887907	0.275107
5.142206	0.887635	0.274835
5.656427	0.887363	0.274019
6.170648	0.887091	0.273474
6.684868	0.886819	0.27293
7.199089	0.886547	0.272386
7.713309	0.886275	0.27157

F (x10 ³ kV/cm)	t_{HOMO} (eV)	t_{LUMO} (eV)
8.22753	0.886003	0.271025
8.741751	0.88573	0.269937
9.255971	0.885186	0.269121
9.770192	0.884914	0.268576
10.28441	0.884642	0.26776

ตารางที่ 5 แสดงค่า Hopping rate และ Mobility ของ hole

F (x10 ³ kV/cm)	k_{\rightarrow} (hole) (s ⁻¹)	k_{\leftarrow} (hole) (s ⁻¹)	μ_{hole} (x10 ² cm ² /Vs)
0.514221	5.17E+15	4.76E+14	0.243086
1.028441	5.17E+15	4.78E+14	0.25588
1.542662	5.18E+15	4.81E+14	0.270096
2.056883	5.18E+15	4.85E+14	0.285984
2.571103	5.19E+15	4.87E+14	0.303858
3.085324	5.19E+15	4.9E+14	0.324115
3.599544	5.19E+15	4.92E+14	0.347266
4.113765	5.2E+15	4.94E+14	0.373979
4.627986	5.2E+15	4.96E+14	0.405144
5.142206	5.2E+15	4.99E+14	0.441975



ภาพที่ 20 ค่าความคล่องตัวของพาหะ

จากข้อมูลที่ได้เราพบว่าความสามารถในการเคลื่อนที่ของพาหะจะมีค่าเพิ่มขึ้นตามความเข้มของสนามไฟฟ้าเป็นไปตามฟังก์ชันแบบพหุคูณ โดยค่า hopping rate ของพาหะอยู่ในช่วง 5.17×10^{15} - 5.2×10^{15} ในกรณีที่พาหะเคลื่อนที่ไปตามทิศทางเดียวกับกระแสไฟฟ้า แต่ในกรณีที่พาหะเคลื่อนที่ไปตามทิศทางตรงข้ามกับกระแสไฟฟ้าค่า hopping rate ของพาหะอยู่ในช่วง 4.76×10^{14} - 4.99×10^{14} โดยค่าทั้งสองต่างกันถึงสิบเท่า โดยค่าทั้งสองนี้จะส่งผลโดยตรงกับการคำนวณค่าความคล่องตัว

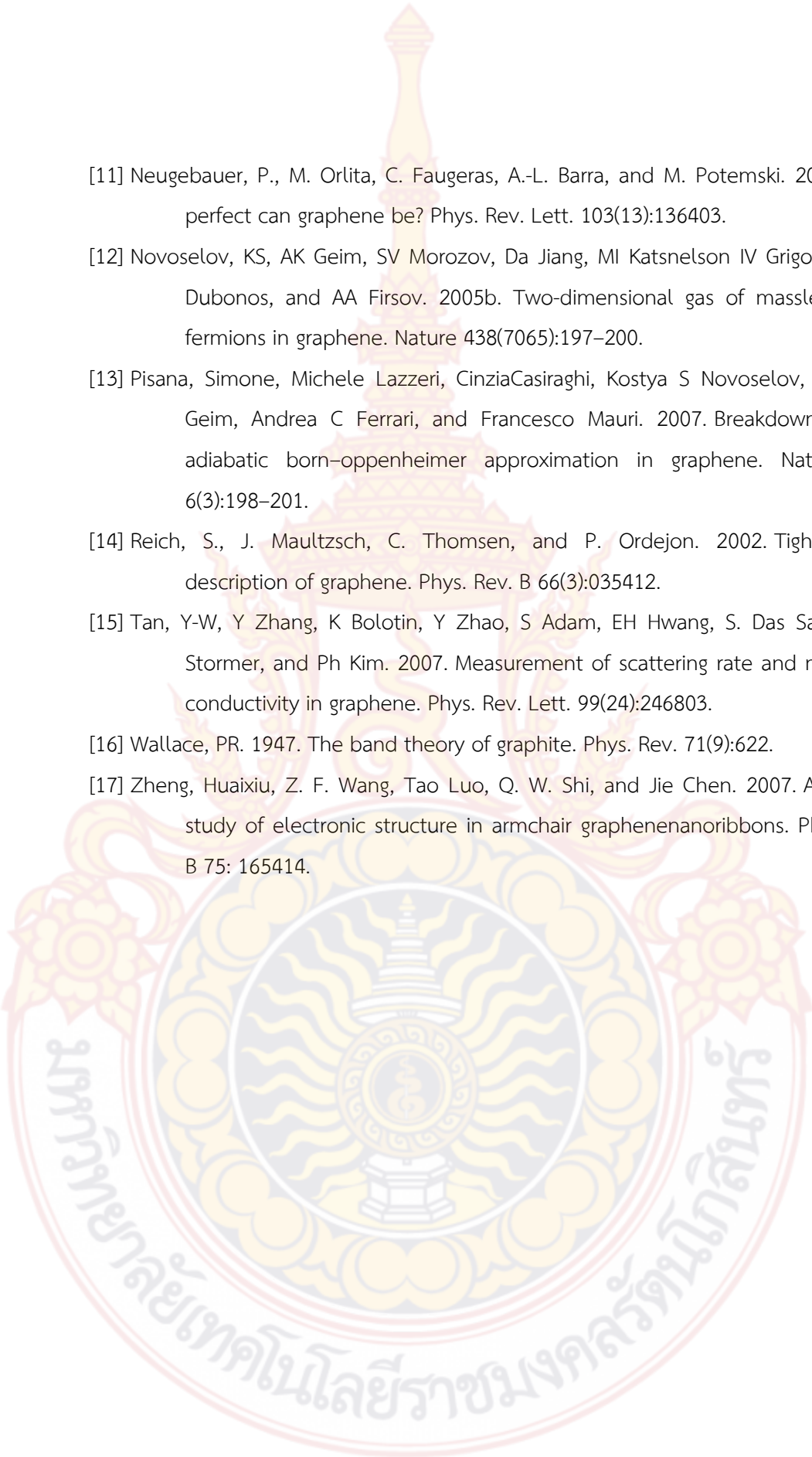
บทที่ 5

สรุปผล อภิปรายผลและข้อเสนอแนะ

โดยข้อมูลของผลที่ได้จากการใช้แบบจำลองฮอปปีงที่คานามไฟฟ้าต่างๆจะพบว่าเมื่อคานามไฟฟ้าเพิ่มขึ้นความสามารถของพาหะที่จะกระโดดไปทิศเดียวกับคานามไฟฟ้ามีค่ามากขึ้น แต่พาหะก็สามารถกระโดดไปทิศตรงข้ามกับคานามไฟฟ้าซึ่งมีโอกาสน้อยกว่า ส่งผลทำให้ความคล่องตัวของพาหะเพิ่มขึ้นเมื่อมีการเพิ่มคานามไฟฟ้า ผลของคานามไฟฟ้าที่มีต่อ molecular orbital ทั้ง HOMO และ LUMO จากผลการคำนวณเมื่อไม่มีคานามไฟฟ้าจะพบว่าค่าระดับพลังงานของ Molecular Orbital ของ LUMO ลำดับที่ 1 ถึง ลำดับที่ 5 คือ -0.13182, -0.13125, -0.08318, -0.08046 และ -0.0478 และของ HOMO ลำดับที่ 1 ถึง ลำดับที่ 5 คือ -0.02585, -0.01564, -0.01418, 0.01247 และ 0.01625 โดยค่าทั้ง 10 ค่าเป็นสถานะที่ไม่มีกระแสคานามไฟฟ้าลงไป และเมื่อมีการใส่คานามไฟฟ้าอยู่ในช่วง 1 ถึง 20 au จะพบว่า HOMO1-3 ค่าระดับพลังงานมีค่าลดลงเล็กน้อยเมื่อคานามไฟฟ้ามีค่าเพิ่มขึ้น ส่วน HOMO ที่ 4 และ 5 เมื่อคานามไฟฟ้าน้อยกว่า 5 au พบว่า HOMO ที่ 4 มีค่าพลังงานใกล้เคียงกันแต่เมื่อคานามไฟฟ้าเพิ่มขึ้น 20 au พบว่า ค่าผลต่างของระดับพลังงานทั้งสองเป็น 0.01 au สำหรับ LUMO จะพบว่า ค่าระดับพลังงานมีค่าลดลงเล็กน้อยเมื่อคานามไฟฟ้ามีค่าเพิ่มขึ้น ยกเว้น LUMO ที่ 3 ค่าพลังงานมีค่าเพิ่มขึ้น จากข้อมูลที่ได้เราพบว่าความสามารถในการเคลื่อนที่ของพาหะจะมีค่าเพิ่มขึ้นตามความเข้มของคานามไฟฟ้าเป็นไปตามฟังก์ชันแบบพหุคูณ โดยค่า hopping rate ของพาหะอยู่ในช่วง 5.17×10^{15} - 5.2×10^{15} ในกรณีที่พาหะเคลื่อนที่ไปตามทิศทางเดียวกับกระแสไฟฟ้า แต่ในกรณีที่พาหะเคลื่อนที่ไปตามทิศทางตรงข้ามกับกระแสไฟฟ้าค่า hopping rate ของพาหะอยู่ในช่วง 4.76×10^{14} - 4.99×10^{14} โดยค่าทั้งสองต่างกันถึงสิบเท่า โดยค่าทั้งสองนี้จะส่งผลโดยตรงกับการคำนวณค่าความคล่องตัว

บรรณานุกรม

- [1] Adam, Shaffique, E. H. Hwang, V. M. Galitski, and S. Das Sarma. 2007. A selfconsistent theory for graphene transport. Proc. Natl. Acad. Sci. USA 104(47): 18392–18397.
- [2] Bolotin, K. I., K. J. Sikes, J. Hone, H. L. Stormer, and P. Kim. 2008. Temperature dependent transport in suspended graphene. Phys. Rev. Lett. 101(9):096802.
- [3] Borysenko, K. M., J. T. Mullen, E. A. Barry, S. Paul, Y. G. Semenov, J. M. Zavada, M. BuongiornoNardelli, and K. W. Kim. 2010. First-principles analysis of electron-phonon interactions in graphene. Phys. Rev. B 81(12):121412.
- [4] Ferrari, Andrea C. 2007. Raman spectroscopy of graphene and graphite: disorder, electron–phonon coupling, doping and nonadiabatic effects. Solid State Commun. 143(1):47–57.
- [5] Fratini, S., and F. Guinea. 2008. Substrate-limited electron dynamics in graphene. Phys. Rev. B 77:195415.
- [6] Kundu, Rupali. 2011. Tight binding parameters for graphene. Mod. Phys. Lett. B 25(03):163–173.
- [7] Liu, Ming, Xiaobo Yin, Erick Ulin-Avila, BaisongGeng, Thomas Zentgraf, Long Ju, Feng Wang, and Xiang Zhang. 2011. A graphene-based broadband optical modulator. Nature 474(7349):64–67.
- [8] Lundstrom, M. 2000. Fundamentals of carrier transport. Cambridge University Press.
- [9] Mayorov, Alexander S., Roman V. Gorbachev, Sergey V. Morozov, Liam Britnell, Rashid Jalil, Leonid A. Ponomarenko, Peter Blake, Kostya S. Novoselov, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, and A. K. Geim. 2011. Micrometer-scale ballistic transport in encapsulated graphene at room temperature. Nano Lett. 11(6):2396– 2399.
- [10] Mucciolo, Eduardo R, and Caio H Lewenkopf. 2010. Disorder and electronic transport in graphene. J. Phys.: Condens. Matter 22(27):273201.

- 
- [11] Neugebauer, P., M. Orlita, C. Faugeras, A.-L. Barra, and M. Potemski. 2009. How perfect can graphene be? *Phys. Rev. Lett.* 103(13):136403.
- [12] Novoselov, KS, AK Geim, SV Morozov, Da Jiang, MI Katsnelson IV Grigorieva, SV Dubonos, and AA Firsov. 2005b. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *Nature* 438(7065):197–200.
- [13] Pisana, Simone, Michele Lazzeri, CinziaCasiraghi, Kostya S Novoselov, Andre K Geim, Andrea C Ferrari, and Francesco Mauri. 2007. Breakdown of the adiabatic born–oppenheimer approximation in graphene. *Nat. Mater.* 6(3):198–201.
- [14] Reich, S., J. Maultzsch, C. Thomsen, and P. Ordejon. 2002. Tight-binding description of graphene. *Phys. Rev. B* 66(3):035412.
- [15] Tan, Y-W, Y Zhang, K Bolotin, Y Zhao, S Adam, EH Hwang, S. Das Sarma, HL Stormer, and Ph Kim. 2007. Measurement of scattering rate and minimum conductivity in graphene. *Phys. Rev. Lett.* 99(24):246803.
- [16] Wallace, PR. 1947. The band theory of graphite. *Phys. Rev.* 71(9):622.
- [17] Zheng, Huaixiu, Z. F. Wang, Tao Luo, Q. W. Shi, and Jie Chen. 2007. Analytical study of electronic structure in armchair graphenenanoribbons. *Phys. Rev. B* 75: 165414.

ประวัติผู้วิจัย

1. ชื่อ - นามสกุล (ภาษาไทย) ดร.สุรชัย เพ่งมานะยอล
ชื่อ - นามสกุล (ภาษาอังกฤษ) Dr. Surachai Pengmanayol
2. ตำแหน่งปัจจุบัน
อาจารย์ สาขาวิชาศึกษาทั่วไปวิทยาศาสตร์(ฟิสิกส์)
3. หน่วยงานที่สามารถติดต่อได้
คณะศิลปศาสตร์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลธัญบุรี
กระทรวงศึกษาธิการ
96 หมู่3 ต.ศาลายา อ.พุทธมณฑล จ.นครปฐม 73170
โทรศัพท์ 02 4416 083 โทรสาร 02 8894 585-7 ต่อ 2920
E-mail : surachai.p@rmutr.ac.th มือถือ 084-643-9043
4. ประวัติการศึกษา
วท.บ.(ฟิสิกส์) ม.ศิลปากร
วท.ม.(ฟิสิกส์) ม.มหิดล
ปร.ด.(ฟิสิกส์) ม.มหิดล
5. สาขาวิชาการที่มีความชำนาญพิเศษ (แตกต่างจากวุฒิการศึกษา) ระบุสาขาวิชาการ
สาขาวิชาฟิสิกส์เชิงคำนวณ