การศึกษาเชิงทฤษฎีของสมบัติทางโครงสร้างกราฟีนเพื่อใช้เป็นเซนเซอร์วัดความชื้น

THEORETICAL STUDY OF STRUCTURAL PROPERTIES OF GRPHENE-BASED HUMIDITY SENSORS

กิตติคุณ มากสุข
KITTIKUN MAKSUK

โครงงานพิเศษนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมวัสดุนาโน
วิทยาลัยนาโนเทคโนโลยีพระจอมเกล้าลาดกระบัง
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
พ.ศ. 2560

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

THEORETICAL STUDY OF STRUCTURAL PROPERTIES OF GRPHENE-BASED HUMIDITY SENSORS

KITTIKUN MAKSUK

A SPECIAL PROJECT SUBMTTED IN PARTIAL FULFILLMENT
OF THE REQUIREMENT FOR THE DEGREE OF
BACHELOR OF ENGINEERING
IN NANOMATERIAL ENGINEERING
COLLEGE OF NANOTECHNOLOGY
KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG
2017

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

COPYRIGHT 2017

COLLEGE OF NANOTECHNOLOGY

KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ภาควิชานาโนวิทยาและนาโนเทคโนโลยี
วิทยาลัยนาโนเทคโนโลยีพระจอมเกล้าลาดกระบัง
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
โครงงานพิเศษ

หัวข้อโครงงานพิเศษ	การศึกษาเชิงทฤษฎีของสมบัติทางโครงสร้างวัสดุกราฟีนเพื่อใช้เป็นเซนเซอร์วัดความชื้น
Special Project Title	THEORETICAL STUDY OF STRUCTURAL PROPERTIES OF GRPHENE-BASED HUMIDITY SENSORS
นักศึกษา	นายกิตติคุณ มากสุข
รหัสประจำตัว	57110002
ปริญญา	วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต
ภาควิชา	นาโนวิทยาและนาโนเทคโนโลยี
สาขาวิชา	วิศวกรรมวัสดุนาโน
ปีการศึกษา	2560
อาจารย์ที่ปรึกษา	ดร. มยุรี พลเยี่ยม

คณะกรรมการสอบโครงงานพิเศษ	ลายมือชื่อ
ดร. มยุรี พลเยี่ยม	
ดร. กนกทิพย์ บุณยรัตกลิน	
ผศ. ดร. กนกนันทน์ ภาชีรักษ์	

ภาควิชานาโนวิทยาและนาโนเทคโนโลยี วิทยาลัยนาโนเทคโนโลยีพระจอมเกล้าลาดกระบังอนุมัติให้โครงงานพิเศษนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษา หลักสูตรวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต สาขาวิศวกรรมวัสดุนาโน

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ดารินี พรหมโยธิน)
หัวหน้าภาควิชานาโนวิทยาและนาโนเทคโนโลยี
วันที่..... เดือน.....พ.ศ. 2561

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

หัวข้อโครงงานพิเศษ	การศึกษาเชิงทฤษฎีของสมบัติทางโครงสร้างของวัสดุกราฟีนเพื่อใช้เป็นเซนเซอร์วัดความชื้น
นักศึกษา	นายกิตติคุณ มากสุข
รหัสประจำตัว	57110002
ปริญญา	วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต
ภาควิชา	นาโนวิทยาและนาโนเทคโนโลยี
สาขาวิชา	วิศวกรรมวัสดุนาโน
ปีการศึกษา	2560
อาจารย์ที่ปรึกษา	ดร. มยุรี พลเยี่ยม

บทคัดย่อ

งานศึกษาวิจัยนี้สนใจในการใช้การคำนวณทางคอมพิวเตอร์มาเลือกใช้วัสดุตรวจวัดสำหรับดูดซับน้ำที่เหมาะสมสำหรับการตรวจวัดความชื้น โดยวัสดุตรวจวัดเป็นหนึ่งในส่วนประกอบสำคัญของเซนเซอร์วัดความชื้นซึ่งเป็นหน้าที่หลักสำหรับดูดซับน้ำโดยตรง ในปัจจุบันเซนเซอร์วัดความชื้นใช้วัสดุตรวจวัดเป็นจำนวนมากเช่นโพลิเมอร์ โลหะออกไซด์ โครงสร้างนาโนคาร์บอน เป็นต้น ในงานวิจัยนี้เลือกใช้วัสดุกราฟีนที่เหมาะสมสำหรับงานศึกษาวิจัยเนื่องจากคุณสมบัติที่โดดเด่นดังนี้ การตอบสนองที่สูง น้ำหนักเบา โปร่งแสง บิดงอ เป็นต้น แต่เนื่องจากโครงสร้างกราฟีนมีหลากหลายรูปแบบ ดังนั้นจึงใช้การคำนวณทางคอมพิวเตอร์มาคำนวณโครงสร้างวัสดุกราฟีนสำหรับดูดซับน้ำ งานศึกษาวิจัยนี้สนใจศึกษาโครงสร้างการดูดซับของโมเลกุลน้ำบนกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ เพื่อเปรียบเทียบพลังงานดูดซับและโครงสร้างอิเล็คทรอนิกส์ของแต่ละระบบโดยใช้วิธีการคำนวณทางคอมพิวเตอร์ด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น (Density Functional Theory: DFT) โดยระบบแบบจำลองโครงสร้างกราฟีนที่สนใจศึกษาแบ่งออกได้ 3 ส่วน คือ (1) พริสทีนกราฟีน (2) ศึกษาผลของการเจือธาตุลงไปในโครงสร้างกราฟีน ได้แก่ ไนโตรเจน โบรอน และอะลูมิเนียม (3) ศึกษาผลของการปรับปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ฟังก์ชัน ได้แก่ ไฮดรอกซิล กรดคาร์บอกซิลิค เอมีน และกรดซัลโฟนิค ปรากฏว่าผลของการเจือธาตุต่าง ๆ โดยระยะพันธะของอะตอมคาร์บอนในกราฟีนมีแนวโน้มตามขนาดอะตอมที่ถูกเจือซึ่งไนโตรเจนเหมาะสมที่สุดในบรรดาสามธาตุนี้เพราะว่าความเข้ากันของโครงสร้างและค่า bader charge ที่มีแนวโน้มรับอิเล็กตรอนจากโมเลกุลน้ำที่ดีที่สุด สำหรับการปรับปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ฟังก์ชันระยะห่างระหว่างอะตอมออกซิเจนกับไฮโดรเจนของกราฟีนและน้ำตามลำดับพบว่าระบบของกรดซัลโฟนิคมีค่า 1.7853 Å บ่งบอกถึงการดูดซับที่ดีซึ่งสอดคล้องกับค่าพลังงานดูดซับที่ -0.3885 eV ทำให้กราฟีนที่ปรับปรุงพื้นผิวด้วยกรดซัลโฟนิคเหมาะสมสำหรับการดูดซับน้ำ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Special Project Title	Theoretical study of structural properties of Graphene-based humidity sensors
Student	Kittikun Maskusk
Student ID	57110002
Degree	Bachelor of Engineering
Program	Nanomaterial Engineering
Year	2017
Special Project Advisor	Dr. Mayuree Phonyiem

Abstract

This study focused on using computational calculations to calculate the selection of sensing material for adsorb water molecule for humidity detection. The sensing material was one of the important humidity sensor component, which sensing material direct interact with water molecule and affects the detection response. Currently, the humidity sensor used various of sensing material such as polymer, metal oxide and nano-carbons structure. In this study, we chose graphene material as the study material because of the unique properties including high response, light mass, transparent and bendable. However, computational calculations help to calculate possibly structures for graphene materials for humidity adsorption. Therefore, this study investigates the adsorption structure of each graphene-based for adsorption energy comparison and investigates electronic structure of H_2O on graphene-based adsorption structure by using a Density Functional Theory (DFT) computerized theoretical. Structural modeling system graphene of interest is divided into 3 parts. (1) Pristine graphene (2) Element doping effect: nitrogen, boron and aluminum (3) Functional groups effect: hydroxyl, ether, amine and sulfonic acid to see the structural differences of graphene and the different energy values of graphene. It found that the effect of various elements doping. The carbon bonding length is likely to due to the atomic size, which nitrogen-doped was most suitable in these three elements because of the structural compatibility and bader charge that have possibly to gain electron from water molecules. For functionalize effect, the distance between the oxygen and hydrogen atom of graphene and water molecule, respectively, found that system of sulfonic acid was 1.7853 Å indicating great adsorption, which corresponds to adsorption energy at -0.3885 eV that makes graphene with sulfonic acid was suitable for water adsorption.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

กิตติกรรมประกาศ

ในการศึกษาวิจัยนี้ได้สำเร็จลุล่วงด้วยการช่วยเหลือ สนับสนุน และให้ความใส่ใจจากท่านอาจารย์ที่ปรึกษา ดร. มยุรี พลเยี่ยม เป็นผู้วิจัย ผู้สอน และเป็นผู้ให้คำปรึกษาที่ดีในยามที่ลำบากและมีปัญหา ซึ่งเป็นเกียรติมากที่ได้เป็นผู้เรียน ดังนั้นขอขอบพระคุณมา ณ ที่นี้

ขอขอบคุณคำแนะนำที่ดีจากบิดา มารดา ทุกคนที่เกี่ยวข้องกับงานศึกษาวิจัยนี้ และเพื่อน ๆ ในวิทยาลัยนาโนเทคโนโลยีพระจอมเกล้าลาดกระบัง สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง ที่สนับสนุนการศึกษาวิจัยนี้

นายกิตติคุณ มากสุข

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อ i

Abstract ii

กิตติกรรมประกาศ iii

สารบัญ iv

สารบัญภาพ viii

สารบัญตาราง x

บทที่ 1 บทนำ 1

1.1 ที่มาและความสำคัญของการศึกษาวิจัย 1

1.2 วัตถุประสงค์ 2

1.3 กรอบแนวคิดการศึกษาวิจัย 2

1.4 ขอบเขตการดำเนินงานศึกษาวิจัย 3

1.5 ขั้นตอนการดำเนินงานศึกษาวิจัย 3

1.6 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ 3

บทที่ 2 ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง 5

2.1 แก๊สเซนเซอร์ 5

2.1.1 หลักการทั่วไปและองค์ประกอบ 5

2.1.2 กลไกการตรวจวัด 5

2.2 เซนเซอร์วัดความชื้น 6

2.2.1 หลักการทั่วไปของเซนเซอร์วัดความชื้น 6

2.2.2 ประเภทของเซนเซอร์วัดความชื้น 6

2.2.3 วัสดุสำหรับใช้เป็นวัสดุตรวจวัด 8

2.2.4 กลไกการตรวจวัด 10

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญ (ต่อ)

หน้า

2.3 วัสดุกราฟีน 11

2.3.1 โครงสร้างของกราฟีน 11

2.3.2 คุณสมบัติที่โดดเด่นของกราฟีน 13

2.3.3 การนำกราฟีนมาใช้งานด้านเซนเซอร์ 13

2.3.4 แนวทางการพัฒนาประสิทธิภาพ 13

2.4 ระบบโครงสร้างผลึกและแบบจำลองโมเลกุล 14

2.4.1 แบบจำลองโครงสร้างกราฟีน 15

2.4.2 แบบจำลองโมเลกุลของน้ำ 15

2.5 ทฤษฎีการคำนวณที่เกี่ยวข้อง 16

2.5.1 ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น 16

2.5.2 สมบัติเชิงโครงสร้างของพื้นผิว 17

2.5.3 การดูดซับโมเลกุลบนพื้นผิว 17

2.5.4 โครงสร้างทางอิเล็คทรอนิกส์ 18

2.6 การทบทวนวารสารงานวิจัย 19

บทที่ 3 วิธีการดำเนินงานวิจัย 21

3.1 โปรแกรมที่ใช้ในการคำนวณและวิเคราะห์ผล 21

3.1.1 INPUT file 21

3.1.1 OUTPUT file 24

3.2 ระบบจำลองโมเลกุลที่เกี่ยวข้อง 27

3.2.1 ระบบแบบจำลองกราฟีนแบบบัลค์ 27

3.2.2 ระบบแบบจำลองกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ 28

3.2.3 ระบบแบบจำลองโมเลกุลน้ำ 31

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญ (ต่อ)

หน้า

3.2.4 ระบบแบบจำลองการดูดซับโมเลกุลของน้ำบนพื้นผิวกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ 32

3.3 วิธีการคำนวณหาพารามิเตอร์ที่เหมาะสมในการคำนวณ 32

3.3.1 ENCUT 32

3.3.2 KPOINT 33

3.3.3 Functional 34

3.3.4 Supercell 35

3.4 วิธีการคำนวณสมบัติทางโครงสร้างของแบบจำลอง 36

3.4.1 โครงสร้างบัลค์กราฟีน 36

3.4.2 โครงสร้างพื้นผิวกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ 36

3.4.3 โครงสร้างโมเลกุลของน้ำ 36

3.5 วิธีการคำนวณการดูดซับของโมเลกุลน้ำบนพื้นผิวกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ 36

3.6 วิธีการคำนวณสมบัติโครงสร้างอิเล็คโทรนิค 37

3.6.1 Bader charge 37

บทที่ 4 ผลการคำนวณและอภิปรายผล 38

4.1 สมบัติทางโครงสร้างและพลังงาน 38

4.1.1 โครงสร้างกราฟีนบัลค์ 38

4.1.2 โครงสร้างพื้นผิวกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ 38

4.1.3 โครงสร้างโมเลกุลน้ำ 43

4.2 สมบัติทางโครงสร้างและพลังงานการดูดซับ 44

4.2.1 ผลของจำนวนชั้นกราฟีน 44

4.2.2 ผลของการเจืออะตอมต่างชนิด 44

4.2.3 ผลการปรับปรุงโครงสร้างพื้นผิวกราฟีน 45

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญ (ต่อ)

หน้า

4.3 สมบัติทางโครงสร้างการกระจายตัวของประจุ 46

บทที่ 5 สรุปผลการศึกษาวิจัยและแนวทางการพัฒนา 51

5.1 สรุปผลการศึกษาวิจัย 51

5.2 แนวทางการพัฒนาการศึกษาวิจัย 51

บรรณานุกรม 52

ประวัติผู้เขียน 55

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญภาพ

รูปที่ **หน้า**

2.1 ส่วนประกอบของแก๊สเซนเซอร์ 5

2.2 รูปตัวอย่างแสดงโครงสร้างของเซนเซอร์วัดความชื้นเชิงต้านทาน 7

2.3 เซนเซอร์วัดความชื้นเชิงเก้บประจุโครงสร้างแบบแซนวิช 7

2.4 ตัวอย่างโครงสร้างของเซนเซอร์ที่มีโพลิเมอร์เป็นวัสดุตรวจวัด 8

2.5 ตัวอย่างโครงสร้างของเซนเซอร์ที่มีโลหะออกไซด์เป็นวัสดุตรวจวัด 9

2.6 ตัวอย่างโครงสร้างของเซนเซอร์ที่มีโครงสร้างนาโนคาร์บอนแบบกราฟีนเป็นวัสดุตรวจวัด 9

2.7 กลไกการตรวจวัดของเซนเซอร์วัดความชื้น 10

2.8 โครงสร้างพริสทีนกราฟีน 11

2.9 โครงสร้างกราฟีนที่เจือไนโตรเจน 12

2.10 โครงสร้างกราฟีนออกไซด์ 13

2.11 แลคทิสพารามิเตอร์ในระบบผลึก 14

2.12 เจ็ดกลุ่มระบบผลึก 15

2.13 ลักษณะการดูดซับโมเลกุลบนพื้นผิว 17

2.14 DoS; bulk (3D น้ำเงิน) Quantum well (2D แดง) Quantum wire (1D เขียว) และ Quantum dot (0D ดำ) 18

3.1 ตัวอย่างการตั้งค่าของไฟล์ INCAR 22

3.2 ตัวอย่างข้อมูลในไฟล์ POSCAR 22

3.3 ตัวอย่างข้อมูลไฟล์ POTCAR 23

3.4 ตัวอย่างข้อมูลไฟล์ KPOINTS 23

3.5 ตัวอย่างไฟล์ script.pbs 24

3.6 ตัวอย่างไฟล์ CONTCAR 25

3.7 ตัวอย่างไฟล์ OSZICAR 25

3.8 ตัวอย่างไฟล์ CHGCAR 26

3.9 ตัวอย่างไฟล์ OUTCAR 26

3.10 ระบบแบบจำลองกราฟีนแบบบัลค์ 27

3.11 ระบบแบบจำลองพริสทีนกราฟีน 28

3.12 ระบบแบบจำลองกราฟีนที่จำนวนชั้นต่างกัน (a) กราฟีนพื้นผิวหนาหนึ่งชั้น (b) กราฟีนพื้นผิวหนาสองชั้นและ (c) กราฟีนพื้นผิวหนาสามชั้น 29

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญภาพ (ต่อ)

รูปที่ **หน้า**

3.13 ระบบแบบจำลองกราฟีนที่เจืออะตอมต่างชนิดกัน (a) กราฟีนเจืออะตอมไนโตรเจน (b) กราฟีนเจืออะตอมโบรอนและ (c) กราฟีนเจืออะตอมอลูมิเนียม 30
3.14 ระบบแบบจำลองกราฟีนที่ปรับปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ฟังก์ชันต่างกัน (a) กราฟีนที่ปรังปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ไฮดรอกซิล (b) อีเทอร์ (c) กรดซัลโฟนิค และ (d) เอมีน 31
3.15 ระบบจำลองโมเลกุลน้ำ (a) ระบบน้ำหนึ่งโมเลกุล (b) ระบบน้ำสองโมเลกุล (c) ระบบน้ำสามโมเลกุล (d) ระบบน้ำสี่โมเลกุล 32
3.16 ไฟล์ INCAR และ KPOINTS สำหรับคอนเวอร์เจนซ์ ENCUT 33
3.17 กราฟคอนเวอร์เจนซ์ ENCUT 33
3.18 ไฟล์ INCAR และ KPOINTS สำหรับคอนเวอร์เจนซ์ KPOINTS 34
3.19 กราฟคอนเวอร์เจนซ์ KPOINTS 34
3.20 โครงสร้างขนาดซุปเปอร์เซลล์ (a) 1x1x1 (b) 2x2x1 (c) 3x3x1 35
4.1 ระบบโครงสร้างของพกราฟีนแบบบัลค์ 38
4.2 ระบบโครงสร้างของพรีสทีนกราฟีนที่จำนวนชั้นต่างกัน (a) กราฟีนพื้นผิวหนาหนึ่งชั้น (b) กราฟีนพื้นผิวหนาสองชั้นและ (c) กราฟีนพื้นผิวหนาสามชั้น 39
4.3 ระบบโครงสร้างของกราฟีนที่เจืออะตอมต่างกัน (a) ไนโตรเจน (b) โบรอน และ (c) อลูมิเนียม 40
4.4 ระบบโครงสร้างของกราฟีนที่เพิ่มหมู่ฟังก์ชัน (a) ไฮดรอกซิล (b) อีเทอร์ (c) เอมีน และ (d) กรดซัลโฟนิค 42
4.5 ระบบโครงสร้างของโมเลกุลน้ำที่จำนวนต่างกัน (a) ระบบน้ำหนึ่งโมเลกุล (b) ระบบน้ำสองโมเลกุล (c) ระบบน้ำสามโมเลกุล (d) ระบบน้ำสี่โมเลกุล 43
4.6 ระบบของการเลือกตำแหน่งการดูดซับน้ำและระบบการเจือธาตุต่างชนิด (a) ตำแหน่งการวางตัวของน้ำที่ Bridge-site (b) Hole-site (c) Top-site (d) ระบบโครงสร้างการดูดซับของน้ำตำแหน่งวางตัวแบบ Hole-site บนกราฟีนที่เจืออะตอมโบรอน (e) ไนโตรเจน (f) อลูมิเนียม 45
4.7 ระบบโครงสร้างการดูดซับของการปรับปรุงพื้นผิวกราฟีนด้วยหมู่ฟังก์ชัน (a) กรดซัลโฟนิค (b) เอมีน (c) ไฮดรอกซิล และ (d) อีเทอร์ 46
4.8 ตำแหน่งอะตอมของ Bader charge สำหรับพริสทีนกราฟีนแล้วกราฟีนที่เจือธาตุ 47
4.9 ตำแหน่งอะตอมของ Bader charge สำหรับกราฟีนที่มีหมู่ฟังก์ชันเกาะอยู่ (a) กรดซัลโฟนิค (b) เอมีน (c) ไฮดรอกซิล และ (d) อีเทอร์ 49

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญตาราง

ตารางที่ **หน้า**

1.1 ขั้นตอนการดำเนินงานศึกษาวิจัย 3

2.1 การเปรียบเทียบวัสดุต่าง ๆ 10

2.2 เจ็ดกลุ่มระบบผลึก1 14

3.1 พารามิเตอร์ของระบบผลึกกราฟีนแบบบัลค์ 27

3.2 แท็กของฟังก์ชันใน VASP 35

3.3 ตารางแสดงผลข้อมูลของซุปเปอร์เซลล์ 35

4.1 ตารางแสดงข้อมูลเปรียบเทียบของโครงสร้างกราฟีนบัลค์ 38

4.2 ตารางแสดงผลของการคำนวณพื้นผิวพริสทีนกราฟีน 39

4.3 ตารางแสดงผลของการคำนวณพื้นผิวกราฟีนที่เจืออะตอม 40

4.4 ตารางแสดงผลของการคำนวณพื้นผิวกราฟีนที่ปรับปรุงพื้นผิว 41

4.5 ตารางแสดงผลของการคำนวณโมเลกุลน้ำ 43

4.6 ตารางแสดงผลของค่าพลังงานการดูดซับสำหรับการเลือกตำแหน่งการดูดซับของน้ำ 44

4.7 พลังงานการดูดซับและพารามิเตอร์ของความยาวพันธะต่าง ๆ 45

4.8 พลังงานการดูดซับและพารามิเตอร์ของความยาวพันธะต่าง ๆ 46

4.9 Bader charge ของพริสทีนกราฟีนแล้วกราฟีนที่เจือธาตุ 48

4.10 Bader charge ของกราฟีนที่ปรับปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ฟังก์ชัน 50

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 1
บทนำ

1.1 ที่มาและความสำคัญของการศึกษาวิจัย

ในปัจจุบันแก๊สเซนเซอร์เป็นอุปกรณ์ที่สำคัญสำหรับระบบที่จำเป็นในการควบคุมปริมาณแก๊ส ยกตัวอย่าง เช่น ระบบการปลูกเนื้อเยื่อพืชที่ปลูกบนในหลอดทดลองที่จำเป็นควบคุมแก๊สออกซิเจน และคาร์บอนไดออกไซด์ หรือ โรงงานที่มีระบบป้องกันแก๊สรั่วหรือควบคุมปริมาณแก๊สที่เหมาะสม สำหรับระบบนั้น ๆ อุปกรณ์เหล่านี้มีความสำคัญต่อความปลอดภัยเพราะว่าเมื่อมีเหตุการณ์ผิดปกติ เช่น แก๊สที่มีความอันตรายเกิดการรั่วไหลแก๊สเซนเซอร์จะสามารถเตือนเพื่อหลีกเลี่ยงหรือควบคุมให้กลับมาสู่ความปกติได้ ดังนั้นแก๊สเซนเซอร์จริงมีบทบาทสำคัญสำหรับงานเหล่านี้ โดยแก๊สเซนเซอร์สามารถแบ่งประเภทตามแก๊สที่ตรวจวัดได้หลายประเภท เช่น เซนเซอร์วัดแก๊สออกซิเจน เซนเซอร์วัดแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ หรือเซนเซอร์วัดความชื้น เป็นต้น โดยงานศึกษาวิจัยนี้สนใจเกี่ยวกับเซนเซอร์วัดความชื้นเนื่องจากอุปกรณ์นี้ในปัจจุบันยังอยู่ในระหว่างพัฒนาสำหรับใช้งานที่สะดวกยิ่งขึ้น

เซนเซอร์วัดความชื้น คือ อุปกรณ์ที่ตรวจวัดปริมาณความชื้นหรือน้ำในสถานะแก๊สบนอากาศ เซนเซอร์วัดความชื้นเป็นอุปกรณ์ที่บทบาทสำคัญต่อระบบที่จำเป็นต้องควบคุมความชื้นในระดับต่ำ เพราะสำหรับบางวัสดุที่มีความไวต่อความชื้นซึ่งทำให้เกิดข้อผิดพลาดได้ ซึ่งอุปกรณ์นี้ช่วยตรวจวัดในช่วงความชื้นต่ำได้อย่างมีประสิทธิภาพ เซนเซอร์วัดความชื้นสามารถแบ่งประเภทตามหน่วยที่วัดหลัก ๆ ได้สองประเภท คือ (1) ประเภทเชิงการเก็บประจุ และ (2) ประเภทเชิงความต้านทาน โดย 2 ประเภทนี้มีความแตกต่างที่ไม่มากบางอุปกรณ์ใช้วัสดุตรวจวัดที่คล้ายกัน คุณสมบัติการเป็นเซนเซอร์ที่ดี คือ มีระยะการตรวจวัดที่กว้าง ตอบสนองสูง ระยะเวลาการตรวจวัดที่สั้น เป็นต้น แต่ด้วยที่มีคุณสมบัติที่ดีจึงทำให้มีราคาที่สูง ทำให้เซนเซอร์ที่ราคาต่ำลงมีคุณสมบัติไม่สูงมาก แต่ด้วยส่วนประกอบของเซนเซอร์วัดความชื้นไม่ได้ซับซ้อน สามารถทำการประกอบเองได้ ดังนั้นวัสดุสำหรับการทำเซนเซอร์จึงมีความสำคัญมาก ถ้าสามารถทราบได้ว่าวัสดุแบบไหนเหมาะสมสำหรับทำเซนเซอร์วัดความชื้น และมีราคาต่ำ ก็สามารถทำเซนเซอร์ที่มีคุณสมบัติที่ดีในราคาไม่สูงได้ การพัฒนาของเซนเซอร์วัดความชื้นได้มีการพัฒนามาต่อเนื่องตั้งแต่ออกแบบโครงสร้าง โครงแบบ จนถึงการเลือกใช้วัสดุสำหรับวัสดุตรวจวัด เพราะว่าหน้าที่ของตรวจวัด คือ ตรวจวัดกับละอองน้ำโดยตรง ดังนั้นวัสดุตรวจวัดเป็นส่วนสำคัญสำหรับการพัฒนาเซนเซอร์วัดความชื้น

โดยปกติแล้วเซนเซอร์วัดความชื้นสามารถใช้หลายชนิดในการสร้างขึ้นมา เช่น โพลิเมอร์ โลหะออกไซด์ และวัสดุโครงสร้างคาร์บอนระดับนาโน โดยมีงานวิจัยจำนวนมากได้แสดงให้เห็นว่าวัสดุกราฟีนเป็นวัสดุที่ค่าการตอบสนองที่สูงสำหรับการทำเป็นเซนเซอร์แต่กราฟีนไม่ได้มีโครงสร้างอยู่

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

แบบเดียว วัสดุกราฟีนสามารถปรับปรุงพื้นผิวหรือเจือธาตุต่าง ๆ เช่น กราฟีนออกไซด์ กราฟีนเจือธาตุไนโตรเจน เป็นต้น ดังนั้นจึงมีคำถามว่าวัสดุกราฟีนแบบไหนเหมาะสมสำหรับการทำเซนเซอร์วัดความชื้น

กราฟีนเป็นวัสดุโครงสร้างแบบนาโนคาร์บอนที่จัดเรียงแบบเฮกซะกอนอลอะตอมคาร์บอน โครงสร้างผลึกนี้เป็นโครงสร้างแบบรังผึ้งแบบแผ่นสองมิติของ $2p^2$ ไฮบริดคาร์บอนอะตอม โดยโครงสร้างนี้เป็นที่สนใจมากด้วยคุณสมบัติที่โดดเด่น เช่น ค่าการเหนี่ยวนำทางไฟฟ้าสูง มวลเบา ลักษณะโปร่งใส บิดงอโค้งงอได้ และยังมีการตอบสนองที่สูง วัสดุกราฟีนได้เริ่มมีการสนใจตั้งแต่ปี ค.ศ. 2010 ซึ่งเป็นงานวิจัยเกี่ยวกับการศึกษาคุณสมบัติของกราฟีน การสังเคราะห์ และการใช้งานของตัววัสดุ

โครงสร้างกราฟีนนั้นมีหลายรูปแบบที่เป็นไปได้ ดังนั้นในงานศึกษาวิจัยนี้จึงสนใจวัสดุกราฟีนเป็น 3 แบบ คือ (1) พริสทีนกราฟีน (2) กราฟีนเจือด้วยธาตุต่าง ๆ มีไนโตรเจน โบรอน และอลูมิเนียม และ (3) กราฟีนที่ปรับปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ฟังก์ชันนอลมีหมู่อีเทอร์ ไฮดรอกซิลิค เอมีน และกรดซัลโฟนิค โดยปัญหาของงานศึกษาวิจัยนี้ คือ ด้วยโครงสร้างกราฟีนมีหลากหลายรูปแบบ แต่ไม่ทราบว่าโครงสร้างแบบใดเหมาะสมที่สุดสำหรับดูดซับน้ำของเซนเซอร์วัดความชื้น จึงใช้วิธีการจำลองทางคอมพิวเตอร์มาช่วยในการคำนวณหาวัสดุที่เหมาะสมก่อนที่จะสังเคราะห์ในห้องปฏิบัติการจริง ซึ่งจะใช้ทฤษฎีฟังก์ชันนอลความหนาแน่นมาช่วยอธิบายโครงสร้างการดูดซับของโมเลกุลน้ำบนกราฟีนและกลไกการทำงานของการแลกเปลี่ยนอิเล็กตรอนระหว่างอะตอมในโครงสร้าง

1.2 วัตถุประสงค์

1. เพื่อศึกษาโครงสร้างการดูดซับของน้ำกับกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ กราฟีนโครงสร้างใดเหมาะสมสำหรับดูดซับน้ำสำหรับเซนเซอร์วัดความชื้น
2. เพื่อคำนวณโครงสร้างทางอิเล็คทรอนิกส์ของโครงสร้างการดูดซับของน้ำกับกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ สำหรับทำนายการจัดเรียงของอิเล็กตรอนหรือความหนาแน่นของอิเล็กตรอน

1.3 กรอบแนวคิดการศึกษาวิจัย

การศึกษาโครงสร้างการดูดซับของน้ำบนกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ โดยใช้การคำนวณทางคอมพิวเตอร์มาช่วยคำนวณเกี่ยวกับโครงสร้างของเซลล์และโครงสร้างทางอิเล็กตรอนโดยใช้วัสดุกราฟีน 3 รูปแบบ คือ พริสทีนกราฟีน เจือธาตุบนกราฟีน และกราฟีนที่มีหมู่ฟังก์ชันเกาะอยู่ที่มีโมเลกุลน้ำเกาะอยู่ด้านบนผิว

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

1.4 ขอบเขตการดำเนินงานศึกษาวิจัย

1. ในการคำนวณจะใช้รูปแบบวัสดุกราฟีน 3 รูปแบบ พริสทีนกราฟีน กราฟีนที่เจือธาตุต่าง ๆ และกราฟีนที่ปรับปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ฟังก์ชัน
2. ใช้พลังงานการดูดซับและโครงสร้างอิเล็คทรอนิกส์สำหรับค้นหาผลลัพธ์
3. ในการคำนวณจะใช้ทฤษฎีฟังก์ชันนอลความหนาแน่นเป็นหลัก

1.5 ขั้นตอนการดำเนินงานศึกษาวิจัย

ในการศึกษาวิจัยนี้จะสามารถแบ่งขั้นตอนหลักได้ทั้งหมด 4 ขั้นตอน

1. ออกแบบโครงสร้างบัลค์ของพริสทีนกราฟีนสำหรับหาค่าพารามิเตอร์ทั้งหมดให้เหมาะสมสำหรับทำการปรับโครงสร้างซุปเปอร์เซลล์ดังนี้ Encut Kpoint Supercell และ Functional
2. นำโครงสร้างบัลค์ที่ผ่านปรับโครงสร้างแล้วมาตัดระนาบเป็นโครงสร้างพื้นผิวจากนั้นเจือธาตุต่าง ๆ และปรับปรุงพื้นผิวด้วยกลุ่มฟังก์ชันจากนั้นให้ปรับโครงสร้างอีกหนึ่งครั้งสำหรับเตรียมเพิ่มโมเลกุลน้ำในลำดับถัดไป
3. หลังจากที่ปรับโครงสร้างทุกโครงสร้างแล้วให้เพิ่มโมเลกุลน้ำหนึ่งโมเลกุลไว้ทุกโครงสร้างสำหรับคำนวณค่าพลังงานดูดซับสำหรับเปรียบเทียบการดูดซับของน้ำ
4. คำนวณโครงสร้างอิเล็คทรอนิกส์ของทุกโครงสร้างการดูดซับสำหรับเปรียบเทียบการจัดเรียงตัวของอิเล็กตรอนในโครงสร้าง

1.6 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. เพื่อเข้าใจกลไกการทำงานปฏิกิริยาระหว่างโมเลกุลน้ำกับกราฟีน
2. เพื่อที่จะทราบว่ากราฟีนแบบไหนเหมาะสมกับเซนเซอร์วัดความชื้นที่สุด
3. เพื่อที่จะไปประยุกต์สำหรับการสังเคราะห์จริง

ตารางที่ 1.1 ขั้นตอนการดำเนินงานศึกษาวิจัย

ขั้นตอนการดำเนินงานศึกษาวิจัย	สิงหาคม 2560	กันยายน – พฤศจิกายน 2560	ธันวาคม 2560	มกราคม 2561	กุมภาพันธ์ – มีนาคม 2561	เมษายน – พฤษภาคม 2561
ขั้นตอนที่ 1						

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ขั้นตอนที่ 2						
เขียนเล่มบทที่ 1-3						
ขั้นตอนที่ 3						
ขั้นตอนที่ 4						
สรุปผลและเขียนเล่ม						

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 2
ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง

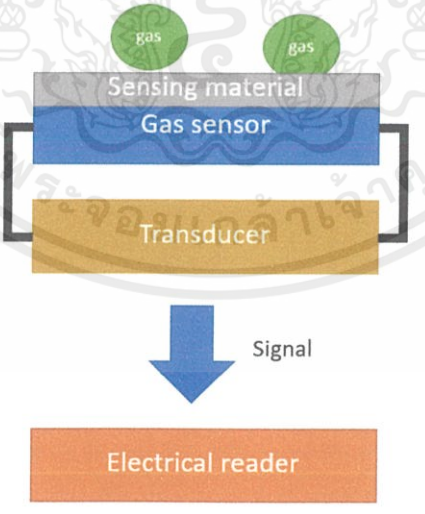
2.1 แก๊สเซนเซอร์

2.1.1 หลักการทั่วไปและองค์ประกอบ

แก๊สเซ็นเซอร์ คือ อุปกรณ์ที่ตรวจวัดแก๊สเมื่อแก๊สถูกดูดซับบนผิวของเซนเซอร์จะเกิดปฏิกิริยาตอบสนองบนผิวแล้วแปลงค่าเหล่านั้นเป็นสัญญาณทางไฟฟ้าสำหรับบันทึกค่าต่าง ๆ ส่วนประกอบหลักของเซนเซอร์มีซับสเตรท ขั้วไฟฟ้า และวัสดุตรวจวัด โดยการเป็นแก๊สเซนเซอร์ที่ดีต้องการตอบสนองที่สูง ใช้เวลาในการทำงานต่ำ ความเสถียรภาพสูง [1]

2.1.2 กลไกการตรวจวัด

กลไกการตรวจวัดของแก๊สเซนเซอร์นั้นมีหลายรูปแบบขึ้นอยู่กับวัสดุตรวจวัดกับแก๊สที่ตรวจวัด โดยกลไกลการตรวจวัดทั่วไปของแก๊สเซนเซอร์ คือ เมื่อแก๊สตรวจวัดถูกดูดซับหรือสัมผัสกับวัสดุตรวจวัดบนแก๊สเซนเซอร์โดยการจับอิเล็กตรอนที่ผิวหน้าระหว่างแก๊สกับวัสดุตรวจวัดจนเกิดเป็นชั้นไอออนหรืออิเล็กตรอนขึ้นมาหามีความหนาแน่นของแก๊สเพิ่มขึ้นส่งผลให้สมบัติทางไฟฟ้าของวัสดุตรวจวัดเปลี่ยนไป เช่น ค่าความต้านทางไฟฟ้าลดลง



รูปที่ 2.1 ส่วนประกอบของแก๊สเซนเซอร์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.2 เซนเซอร์วัดความชื้น

2.2.1 หลักการทั่วไปของเซนเซอร์วัดความชื้น

เซนเซอร์วัดความชื้น คือ อุปกรณ์ที่ตรวจวัดความชื้นในอากาศ โดยค่าพารามิเตอร์ที่บ่งบอกปริมาณความชื้นในอากาศมีหลายแบบ แต่ใช้ที่มากที่สุดคือ %RH (ความชื้นสัมพัทธ์) และ AB (ความชื้นสัมบูรณ์) หน่วย AB เป็นมาตรฐานวัดหลัก และ ความชื้นสัมพัทธ์เป็นหน่วยวัดรองในการตรวจจับไอน้ำความชื้นสัมบูรณ์ คือ อัตราส่วนของมวลของละอองน้ำในอากาศกับปริมาตรอากาศ

$$AB = \frac{m_w}{v} \tag{2.1}$$

นิยาม AB คือ ความชื้นสัมบูรณ์ (g/m^3 หรือ $grains/ft^3$) m_w คือ มวลของน้ำในอากาศและ v คือ ปริมาตรอากาศ (m^3 หรือ ft/m^3)

ความชื้นสัมพัทธ์ คือ อัตราส่วนของความดันของน้ำในอากาศกับความดันอิ่มตัวของน้ำอากาศที่จะสามารถมีน้ำได้มากที่สุด ซึ่งความชื้นสัมพัทธ์นั้นอุณหภูมินั้นมีผลต่อการวัดแต่ละครั้ง เนื่องจากใช้ความดันเป็นตัววัดโดยตรง

$$RH\% = \frac{P_V}{P_S} \times 100 \tag{2.2}$$

นิยาม P_V คือ ความดันน้ำจริงในอากาศ P_S คือ ความดันอิ่มตัวของน้ำในอากาศที่อุณหภูมิเท่ากัน (Bar หรือ kPa).

เซนเซอร์วัดความชื้นนั้นยังมีหน่วยการวัดอยู่หลายแบบขึ้นอยู่กับเทคนิคการสร้างอุปกรณ์ส่วนประกอบ กลไกการทำงานหลัก และเงื่อนไขการวัดละอองน้ำแต่ละครั้ง ในการวัดทั่วไปโดยปกติจะวัดในหน่วยของ %RH เพราะเป็นหน่วยวัดที่นิยมใช้มากที่สุด [9]

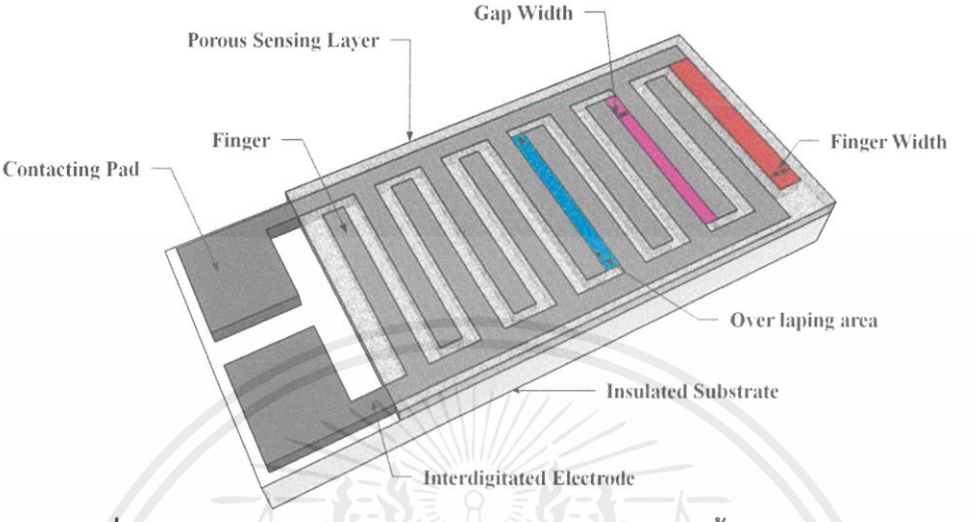
2.2.2 ประเภทของเซนเซอร์วัดความชื้น

2.2.2.1 ประเภทเชิงต้านทาน

เซ็นเซอร์วัดความชื้นเชิงต้านทาน เป็น การวัดความชื้นแล้วเปลี่ยนค่าเป็นความต้านทานทางไฟฟ้า การเปลี่ยนแปลงของความต้านทานนั้นโดยส่วนมากจะอยู่ในที่ระหว่าง 1 kΩ ถึง 100 MΩ ส่วนประกอบหลักของประเภทนี้นั้นมี (1) ซับสเตรทจะเป็นแก้วหรือเซรามิค (2) ขั้วอิเล็คโทรดโดยส่วนมากจะเป็นแบบขั้ว interdigitated และ (3) ฟิล์มบางของวัสดุตรวจจับโดยใช้เทคนิคปริ๊นท์ เคลือบแบบสปิน จุ่ม และ chemical vapor deposition (CVD) อย่างไรก็ตามใน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

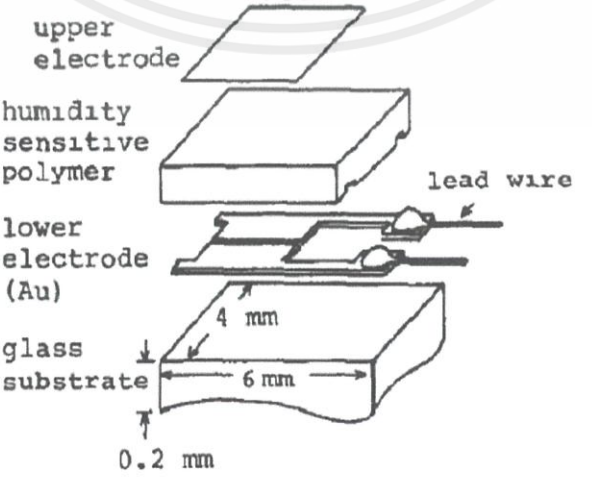
บรรดาเทคนิคเหล่านี้ CVD เป็นเทคนิคที่นิยมในการสังเคราะห์ฟิล์มบางสำหรับเซนเซอร์ การดูดซับของละอองน้ำด้วยการเพิ่มหมู่ฟังก์ชันของออกซิเจนก็เป็นการช่วยเรื่องการเหนี่ยวนำให้ดียิ่งขึ้น สำหรับรูปตัวอย่างแสดงโครงสร้างของเซนเซอร์วัดความชื้นเชิงต้านทานจะแสดงอยู่ที่รูปที่ 2.1



รูปที่ 2.2 รูปตัวอย่างแสดงโครงสร้างของเซนเซอร์วัดความชื้นเชิงต้านทาน

2.2.2.2 ประเภทเชิงเก็บประจุ

เซนเซอร์วัดความชื้นเชิงเก็บประจุนั้นวัดการเปลี่ยนของละอองน้ำเปลี่ยนเป็นการเปลี่ยนแปลงของค่าการเก็บประจุทางไฟฟ้า โดยส่วนประกอบหลักของเซนเซอร์ประเภทนี้ คือ (1) ซับสเตรทจะเป็นแก้วหรือเซรามิค (2) ขั้วอิเล็คโทรดจะเป็นแบบอินเทอร์ดิจิเททเหมือนกันกับเซนเซอร์ประเภทต้านทานหรือจะเป็นแบบขั้วประกบกันแบบแซนวิช (3) ฟิล์มบางสำหรับเป็นวัสดุตรวจวัดโดยปกติจะใช้โพลิเมอร์ หรือพอรัสโลหะออกไซด์ ในโครงสร้างแบบแซนวิชขั้วด้านบนมักจะเป็นขั้วสำหรับทำปฏิกิริยากับละอองน้ำ สำหรับโครงสร้างแบบแซนวิชจะแสดงอยู่ที่รูปที่ 2.2



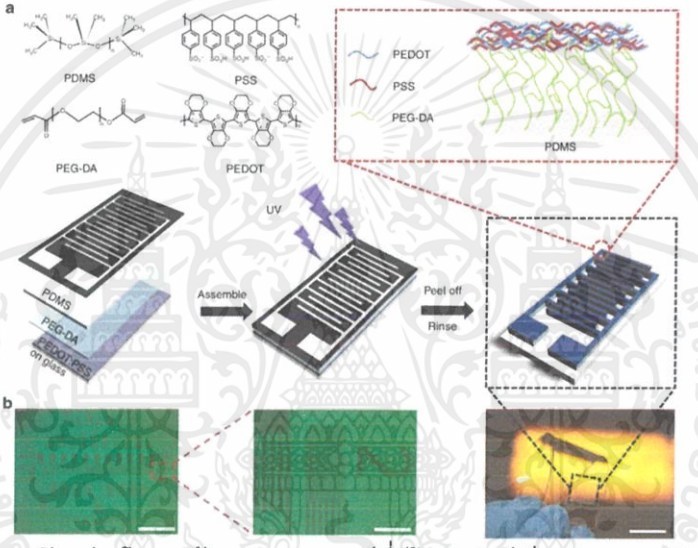
รูปที่ 2.3 เซนเซอร์วัดความชื้นเชิงเก้บประจุโครงสร้างแบบแซนวิช

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.2.3 วัสดุสำหรับใช้เป็นวัสดุตรวจวัด

2.2.3.1 โพลิเมอร์.

วัสดุตรวจวัดแบบโพลิเมอร์นั้นมักใช้ในการสังเคราะห์เชิงอุตสาหกรรมเพราะว่าด้วยราคาที่ต่ำ ง่ายต่อการสังเคราะห์ สามารถผลิตได้ครั้งละมาก ๆ มีความเสถียรภาพสูง และขอบเขตการตรวจวัดที่กว้าง ในปัจจุบันงานวิจัยที่เผยแพร่นั้นมี (1) เซนเซอร์วัดความชื้นเชิงเก็บประจุด้วยเพลทกรดพีไอบนเวฟอร์ซิลิกอนซับสเตรท (2) เซนเซอร์วัดความชื้นเชิงเก็บประจุโพลิเมอร์ด้วยขั้วแบบอินเทอร์ดิจิเททด้วยการตอบสนอง MEMS ที่สูง (3) เซนเซอร์วัดความชื้นเชิงเก็บประจุใช้ไอออนเจือด้วยโพลิเมอร์ [9]

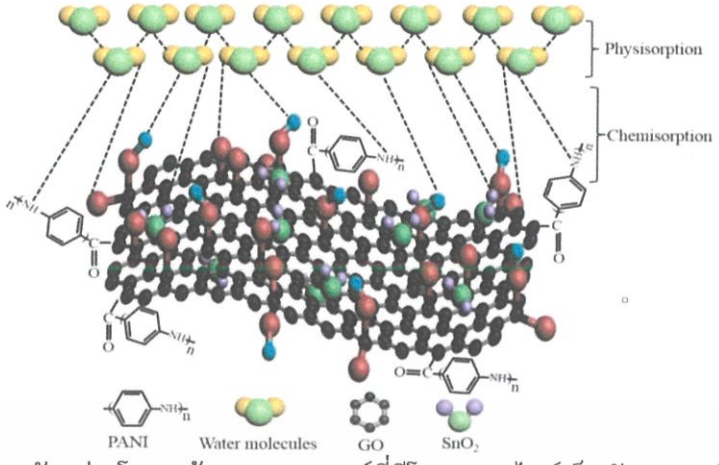


รูปที่ 2.4 ตัวอย่างโครงสร้างของเซนเซอร์ที่มีโพลิเมอร์เป็นวัสดุตรวจวัด [24]

2.2.3.2 เซรามิค / โลหะออกไซด์

วัสดุตรวจวัดแบบโลหะออกไซด์นั้นโดยส่วนมากมักใช้เป็นวัสดุตรวจวัดเพราะว่าเป็นหนึ่งในวัสดุที่สังเคราะห์ไม่ยาก ตัวอย่างเช่น อลูมิเนียมออกไซด์เป็นโครงสร้างที่ใช้เป็นวัสดุใช้เป็นวัสดุตรวจวัดใช้กลไกทะลุผ่านของอิเล็กตรอนในชั้นของน้ำบนผิววัสดุ รูเล็ก ๆ ของอลูมิเนียมนั้นตอบสนองต่อความชื้นที่ต่ำ เฉพาะสองเฟสของอลูมิเนียมแกรมม่าเฟส γ- Al_2O_3 (อมอฟัส) อัลฟ่าเฟส α- Al_2O_3 (คอรันดัม) มักเป็นเฟสที่ใช้เป็นวัสดุตรวจวัดในเซนเซอร์วัดความชื้น การสังเคราะห์ของอลูมิเนียมออกไซด์นั้นไม่ยากและค่าใช้จ่ายที่ต่ำโดยใช้โครงสร้างแบบขนานหรือ interdigitated [15] อย่างไรก็ตามยังมีวัสดุตรวจวัดแบบอื่นอีก เช่น ZnO และ TiO_2 ด้วยคุณสมบัติที่ดีและเหมาะสมสำหรับการเป็นวัสดุตรวจวัด เซนเซอร์วัดความชื้นเชิงเก็บประจุโดยใช้วัสดุฟิล์มบาง ZnO/TiO_2 นาโนร็อดสังเคราะห์จากกระบวนการโซลเจล

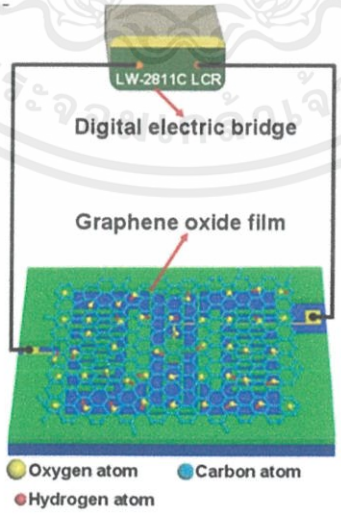
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 2.5 ตัวอย่างโครงสร้างของเซนเซอร์ที่มีโลหะออกไซด์เป็นวัสดุตรวจวัด [25]

2.2.3.3 โครงสร้างนาโนคาร์บอน

วัสดุนาโนคาร์บอนนั้น คือ วัสดุที่จำกัดด้านของมิติในแต่ละมิติโดยมีโครงสร้างหลักเป็นคาร์บอน ตัวอย่างเช่น ฟิล์มกราฟีนที่จำกัดมิติด้านสูง ดังนั้นตัวโครงสร้างจะเป็นแผ่นระนาบ หรือนาโนไฟเบอร์ ท่อนาโนคาร์บอนที่จำกัดมิติด้านกว้างและยาว ดังนั้นโครงสร้างจะเป็นเส้นยาวซึ่งวัสดุเหล่านี้เป็นที่นิยมสำหรับทำเซนเซอร์หรืออุปกรณ์ด้านอื่น ตัวอย่างเช่น เซนเซอร์วัดความชื้นที่มีฟิล์มบางของกราฟีนออกไซด์ที่สังเคราะห์โดยใช้เทคนิคอิงค์เจ็ทพรินท์โดยขั้วอิเล็คโทรดจะเป็น Ag สำหรับขั้ว interdigitated ซับสเตรทจะเป็นซิลิกอนเวเฟอร์ โดยอุปกรณ์นี้นั้นมีคุณสมบัติการเป็นเซนเซอร์ที่ดีสามารถตอบสนองต่อความชื้นต่ำได้ ความเสถียรภาพที่สูง และขอบเขตการตรวจวัดที่กว้าง หรือใช้ CNT หรือ Carbon nano-tube สำหรับเป็นวัสดุตรวจวัดของเซนเซอร์วัดความชื้นด้วยโครงสร้างที่เป็นลักษณะของท่อยาวที่ช่วยเพิ่มพื้นที่ผิวสำหรับการดูดซับทำให้มีการตอบสนองที่สูง [3]



รูปที่ 2.6 ตัวอย่างโครงสร้างของเซนเซอร์ที่มีโครงสร้างนาโนคาร์บอนแบบกราฟีนเป็นวัสดุตรวจวัด

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.2.3.4 การเปรียบเทียบวัสดุต่าง ๆ

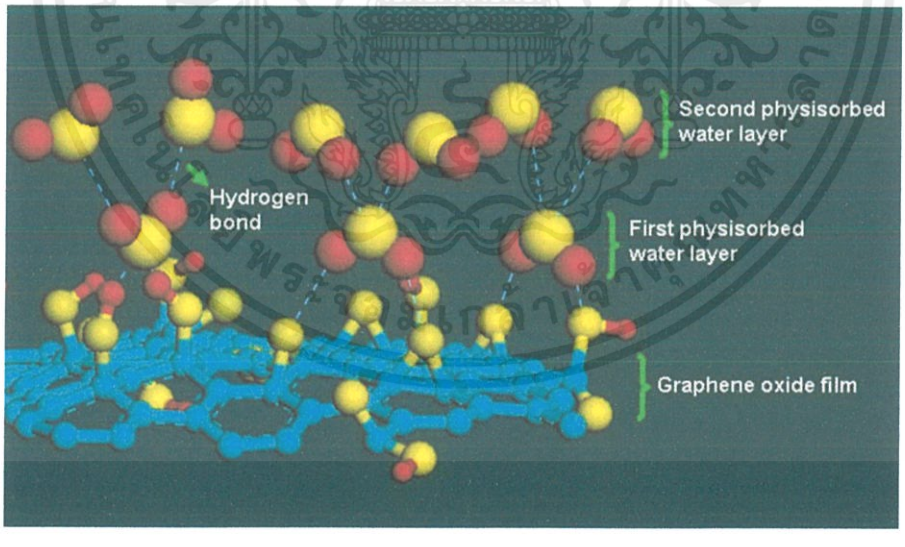
การเปรียบเทียบในด้านต่าง ๆ นั้นแสดงที่ตารางที่ 2.2 โดยจะเปรียบเทียบที่คุณสมบัติในด้านต่าง ๆ

ตารางที่ 2.1 การเปรียบเทียบวัสดุต่าง ๆ

วัสดุตรวจวัด	โพลิเมอร์	เซรามิค	นาโนคาร์บอน
การตอบสนอง	สูง	ค่อนข้างสูง	สูงมาก
ขอบเขตการตรวจวัด	กว้าง	ค่อนข้างกว้าง	กว้าง
การสังเคราะห์	ค่อนข้างง่าย	ง่าย	ค่อนข้างง่าย

2.2.4 กลไกการตรวจวัด

กลไกการตรวจวัดทั่วไปของเซนเซอร์วัดความชื้น คือ เมื่อโมเลกุลน้ำถูกดูดซับลงบนผิววัสดุตรวจวัดจะเกิดการแลกเปลี่ยนประจุระหว่างโมเลกุลน้ำกับวัสดุตรวจวัดเมื่อมีการดูดซับของโมเลกุลน้ำมากขึ้นจนเกิดเป็นเครือข่ายน้ำที่เป็นแผ่นถูกดูดซับอยู่บนผิววัสดุตรวจวัดจนเกิดการแลกเปลี่ยนประจุโปรตอนระหว่างโมเลกุลน้ำเองและกับวัสดุตรวจวัดจนทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางไฟฟ้าของผิววัสดุตรวจวัด เช่น ค่าความต้านทานทางไฟฟ้าลดลงหรือค่าความเก็บประจุทางไฟฟ้าเพิ่มขึ้นเมื่อมีโมเลกุลน้ำมาถูกดูดซับมากขึ้น



รูปที่ 2.7 กลไกการตรวจวัดของเซนเซอร์วัดความชื้น

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

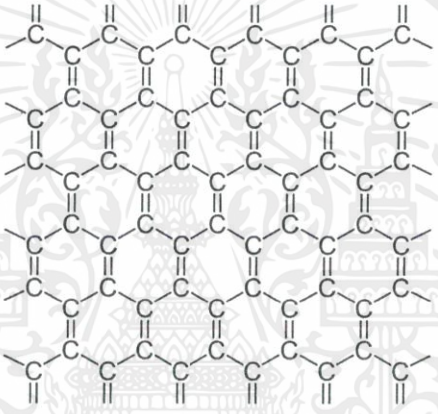
2.3 วัสดุกราฟีน

2.3.1 โครงสร้างของกราฟีน

กราฟีน คือ รูปแบบหนึ่งของผลึกคาร์บอนใกล้เคียงกับเพชร กราไฟท์ โดยที่คาร์บอนอะตอมของกราฟีนจัดเรียงกันตัวกันแบบหกเหลี่ยมรังผึ้งเป็นแผ่นระนาบหนาเพียงหนึ่งอะตอม ซึ่งวัสดุกราฟีนสามารถปรับปรุงโครงสร้างได้หลากหลายรูปแบบโดยจะยกตัวอย่างในหัวข้อถัดไป

2.3.1.1 พริสทีนกราฟีน

พริสทีนกราฟีน คือ กราฟีนที่อะตอมคาร์บอนโดยไม่มีอะตอมหรือโมเลกุลอื่นมาเจือหรือมาผสม พริสทีนกราฟีนอะตอมคาร์บอนนั้นมีพันธะอยู่ 4 พันธะ โดยมีพันธะ σ ล้อมรอบสามพันธะและมีพันธะ π หนึ่งพันธะส่วนความยาวพันธะเฉลี่ยที่ 1.42 Å [8]

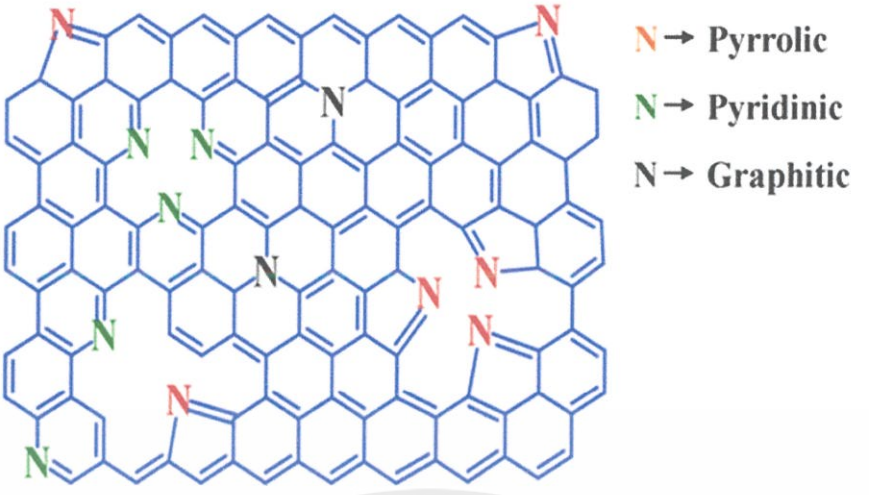


รูปที่ 2.8 โครงสร้างพริสทีนกราฟีน

2.3.1.2 กราฟีนที่เจือธาตุต่าง ๆ

กราฟีนโดยทั่วไปสามารถเจือธาตุต่าง ๆ เข้าไปในโครงสร้างได้ โดยธาตุที่เจือจะเข้าไปแทนตำแหน่งคาร์บอนที่มีอยู่เดิม ตัวอย่างเช่น กราฟีนที่เจือไนโตรเจนโดยทั่วไปโครงสร้างที่เจือนั้นมีหลากหลายรูปแบบมีทั้งแทนที่ เกิดวาแคนซี หรือปรับเปลี่ยนโครงสร้างที่ไม่ต่างจากเดิมมาก ดั่งในรูปที่ 2.4 [18]

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 2.9 โครงสร้างกราฟีนที่เจือไนโตรเจน

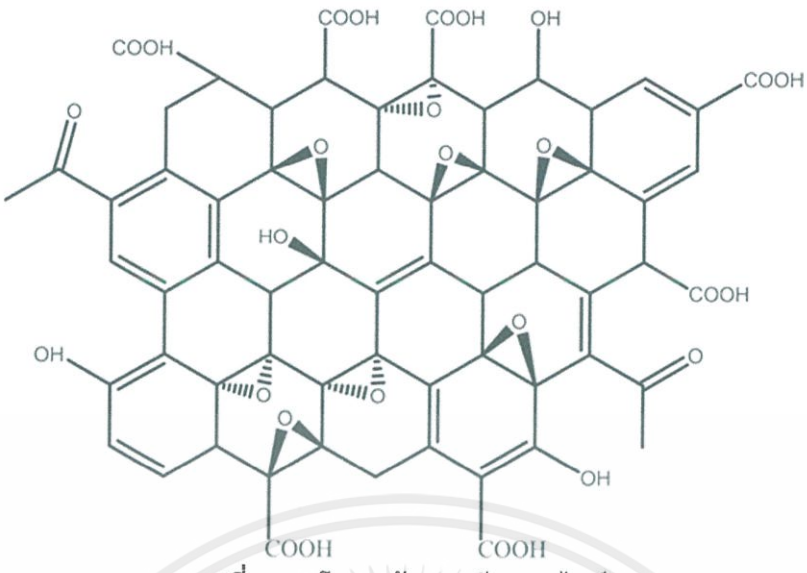
2.3.1.3 กราฟีนที่ปรับปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ฟังก์ชันเกาะ

วัสดุกราฟีนนอกจากเจือธาตุแล้วนั้นยังสามารถเพิ่มหมู่ฟังก์ชันเข้าไปในโครงสร้างเพิ่มปรับเปลี่ยนคุณสมบัติบางอย่างให้เหมาะสมกับชิ้นงานต่าง ๆ ได้ โดยทั่วไปหมู่ฟังก์ชันที่มักใช้ในเซนเซอร์วัดความชื้นจะเป็นหมู่ฟังก์ชันจำพวกออกซิเจน เช่น หมู่แอลกอฮอล อีเทอร์ กรดคาร์บอกซิลิค หรือหมู่อื่น ๆ เอมีน หรือแม้กระทั้งบางประเภทของโพลิเมอร์ โดยหมู่ที่เพิ่มเข้าไปต้องไม่ไปทำลายโครงสร้างเดิม เพื่อความเสถียรภาพที่ไม่ต่ำ

2.3.1.4 กราฟีนออกไซด์

กราฟีนออกไซด์ (GO) คือ กราฟีนที่มีกลุ่มฟังก์ชันของไฮดรอซิลิค คาร์บอกซิลิค และอีเทอร์ กราฟีนออกไซด์นั้นสามารถสังเคราะห์ได้ง่ายกว่าพริสทีนกราฟีนโดยใช้กระบวนการออกซิไดซ์ตัวพริสทีนกราฟีน โครงสร้างทั่วไปของกราฟีนออกไซด์นั้นแสดงอยู่ที่รูป 2.5

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 2.10 โครงสร้างกราฟีนออกไซด์

2.3.2 คุณสมบัติที่โดดเด่นของกราฟีน

กราฟีนมีคุณสมบัติทางไฟฟ้าที่โดดเด่นด้วยโครงสร้างที่เป็นแผ่นระนาบหนาหนึ่งอะตอมด้วยซีโร่แกปของเซมิคอนดักเตอร์ทำให้มีความเหนี่ยวนำทางไฟฟ้าที่สูงเพราะว่า โดยปกติคาร์บอนนั้นมีสี่อิเล็กตรอนที่ว่างไว้สำหรับสร้างพันธะแต่ในโครงสร้างกราฟีนนั้นมีพันธะต่อกันอยู่สามพันธะทำให้มีอิเล็กตรอนว่างอยู่ด้วยความเป็นแผ่นกราฟีนเลยมีความเหนี่ยวนำทางไฟฟ้าที่สูง คุณสมบัติทางความร้อนของกราฟีนนั้นมีความเหนี่ยวนำทางความร้อนที่สูงและสูงกว่าคาร์บอนนาโนทิวบ์และเพชร ด้วยคุณสมบัติเหล่านี้สามารถสังเคราะห์ที่อุณหภูมิสูงมากได้ ส่วนคุณสมบัติอื่น ตัวอย่างเช่น มีความแข็งแรงแต่บิดงอได้ บาง มวลต่ำ และโปร่งแสง

2.3.3 การนำกราฟีนมาใช้งานด้านเซนเซอร์

ช่วงปัจจุบันนี้วัสดุกราฟีนนั้นนิยมมาใช้ด้านเซนเซอร์เป็นจำนวนมากแก๊สเซนเซอร์จนถึงเซนเซอร์วัดความชื้นซึ่งด้วยคุณสมบัติที่โดดเด่นของวัสดุกราฟีน การตอบสนองที่สูง ค่าการเหนี่ยวนำทางไฟฟ้าที่ดี จึงเป็นเหตุผลหลักสำหรับการใช้งานด้านเซนเซอร์

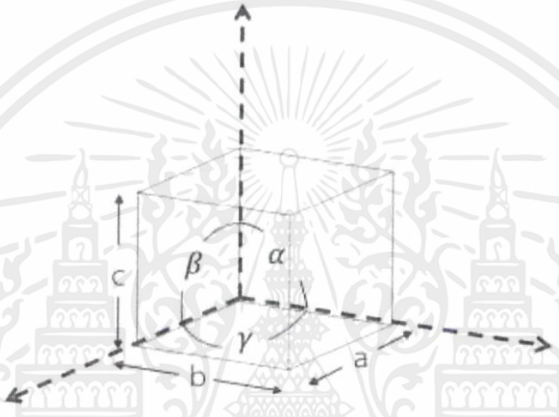
2.3.4 แนวทางการพัฒนาประสิทธิภาพ

สำหรับแนวทางการพัฒนาประสิทธิภาพของเซนเซอร์วัดความชื้นโดยในงานวิจัยช่วงปัจจุบันจะสนใจพัฒนาตรงส่วนของวัสดุตรวจวัดเป็นหลักตั้งแต่การเลือกใช้ พัฒนาสมบัติ การไฮบริด การเคลือบชั้นเพิ่ม เป็นต้น ซึ่งแนวทางการพัฒนาเหล่านี้จะตอบสนองต่อวัตถุประสงค์ของผู้จัดทำนั้น ๆ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.4 ระบบโครงสร้างผลึกและแบบจำลองโมเลกุล

โครงสร้างและสมบัติของวัสดุเป็นสิ่งที่มีความสัมพันธ์ต่อกันอย่างมากสมบัติต่าง ๆ ของวัสดุไม่ว่าจะเป็นสมบัติทางเคมีสมบัติทางกายภาพหรือ สมบัติด้านอื่น ๆ นอกจากจะขึ้นอยู่กับประเภทวัสดุที่แตกต่างกันแล้ว โครงสร้างภายในที่แตกต่างกันแม้จะเป็นวัสดุชนิดเดียวกันก็อาจมีสมบัติที่ต่างกัน ในระบบผลึกนั้นมีระบบที่แบ่งกลุ่มอยู่หลายระบบจะมีทั้งหมดเจ็ดกลุ่มหลัก แลคทิสพารามิเตอร์ หมายถึง ค่าที่กำหนดโครงสร้างผลึกในหนึ่งเซลล์ซึ่งจะมีความยาวของเซลล์ในระบบแกน x,y,z เป็น a,b,c และมุมในเซลล์กำหนดให้เป็น is α β และ γ



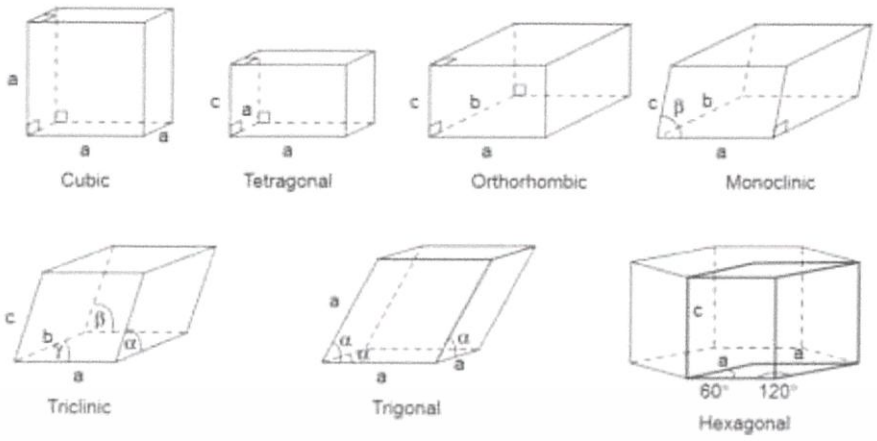
รูปที่ 2.11 แลคทิสพารามิเตอร์ในระบบผลึก

ตารางที่ 2.2 เจ็ดกลุ่มระบบผลึก

ระบบ	แกน	มุม
Cubic	a = b = c	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
Tetragonal	a = b ≠ c	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
Orthorhombic	a ≠ b ≠ c	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
Monoclinic	a ≠ b ≠ c	$\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$
Triclinic	a ≠ b ≠ c	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$
Hexagonal	a = a ≠ c	$\alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°$
Rhombohedral	a = b = c	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$

โดยในห้ากลุ่มของระบบผลึกนั้นค่อนข้างจะเหมือนกันแต่ในระบบเฮคซะกอนอลและรอบโบฮีดรอลนั้นไม่เหมือนกันกับห้าระบบแรก

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 2.12 เจ็ดกลุ่มระบบผลึก

2.4.1 แบบจำลองโครงสร้างกราฟีน

แบบจำลองโครงสร้างกราฟีนมีระบบผลึกเป็นเฮกซะโกนอล P1 space group มีแลตทิสพารามิเตอร์เป็น (a,b,c) เท่ากับ (7.4,7.4,23.48) และ (α,β,γ) เท่ากับ (90,90,120) ระยะพันธะของคาร์บอนอะตอมเท่ากับ 1.42 Å สำหรับโครงสร้างพื้นผิวกราฟีนหนาหนึ่งชั้นทุกรูปแบบจะใช้แลตทิสพารามิเตอร์แบบเดียวกันแต่ต่างกันที่ตำแหน่งของอะตอมในเซลล์และความสูงของเซลล์ห่างความหนาของกราฟีนเพิ่มขึ้น

2.4.2 แบบจำลองโมเลกุลของน้ำ

แบบจำลองโครงสร้างของน้ำมีระบบผลึกเป็นเป็นทรงลูกบาศก์ P1 space group มีแลตทิสพารามิเตอร์เป็น (a,b,c) เท่ากับ (10,10,10) และ (α,β,γ) เท่ากับ (90,90,90) ระยะพันธะระหว่างอะตอมออกซิเจนกับไฮโดรเจนเท่ากับ 0.97 Å สำหรับระบบแบบจำลองที่มีโมเลกุลน้ำมากกว่าหนึ่งตัว ระยะพันธะไฮโดรเจนจะตั้งค่าไว้ระหว่าง 1.1-1.5 Å

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.5 ทฤษฎีการคำนวณที่เกี่ยวข้อง

2.5.1 ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น

ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นเป็นวิธีที่นิยมใช้สำหรับการคำนวณหาโครงสร้างระดับอะตอมด้วยโปรแกรมคอมพิวเตอร์ ทฤษฎีนี้เป็นหนึ่งในกระบวนการแบบแอบอินิโช (Ab initio method) โดยเริ่มจากกฎและทฤษฎีในระบบอนุภาคและใช้การประมาณค่าเพื่อที่จะทำนายโครงสร้างและสมบัติของสารทั้งระบบ หลักการการคำนวณนั้นเริ่มจากใช้สมการโคห์น-ชามเป็นสมการทำนายกลุ่มก้อนความหนาแน่นของอิเล็กตรอนแทนที่ของสมการโชริงเงอร์ที่คำนวณอิเล็กตรอนทุกตัวสำหรับระบบจำลองโครงสร้างที่ขนาดไม่ใหญ่เกินไป

$$\hat{H}_{iKS}\Psi_i = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + V_{eff}\right]\Psi_i = E\Psi_i \tag{2.3}$$

สมการข้างต้น คือ สมการโคห์น-ชาม ซึ่งให้นิยาม $\hat{H}_{iKS}$ เป็นโคห์น-ชามฮามิโตเนี่ยน และ V_{eff} เป็นพลังงานโพเทนเชี่ยล สมการโคห์น-ชามนั้นคล้ายกับสมการโชริงเงอร์ในระบบพาร์ทิเคิลเดี่ยวแต่ต่างกันที่ผลของฟังก์ชัน Ψ_i

2.5.1.1 Local Density Approximation (LDA)

Local functional: Local Density Approximation (LDA) มักถูกใช้ในการคำนวณเกี่ยวกับแถบพลังงานและพลังงานรวม (total energy) สำหรับลักษณะทางกายภาพของของแข็ง แต่ไม่สามารถอธิบายควอนตัมเชิงเคมีได้ เนื่องจากไม่มีความแม่นยำพอในการอธิบายการทำพันธะเคมีในโมเลกุลสำหรับการคำนวณจะต้องไม่มากกว่า 1 kcal/mol ซึ่งมีค่าเท่ากับ 0.04336 eV/particle ในการคำนวณ ฟังก์ชันความหนาแน่นการประมาณค่า LDA ใน inhomogeneous many-body แยกเป็น 2 ส่วน คือ homogeneous interaction problem และ inhomogeneous noninteraction problem

2.5.1.2 Generalized gradient approximation (GGA)

Generalized Gradient Approximation (GGA) GGA ใช้ในการแก้ไขข้อจำกัดของวิธีอื่น ๆ โดยฟังก์ชันที่นิยมใช้ในทางกายภาพ คือ GGA PBE และในทางเคมี คือ BLYP ซึ่งในปัจจุบัน GGA สามารถบอกข้อมูลเกี่ยวกับพันธะเคมีได้ทุกพันธะ (พันธะไอออนิก; ionic bond, พันธะโลหะ; metallic bond, พันธะโควาเลนต์; covalent bond และพันธะไฮโดรเจน; hydrogen bridge แต่สำหรับแรงแวนเดอร์วาลล์ (Van der Waals interaction) GGA และ LDA ธรรมดาไม่สามารถอธิบายได้ แต่ทั้งในเชิงกายภาพและเคมีการใช้ GGA นำไปสู่ความก้าวหน้าที่ดีกว่า เมื่อเปรียบเทียบกับ LDA เนื่องจากความแม่นยำทางเคมีนั้นยังไม่มีความถูกต้องมากนัก แต่ถือว่ามีความแม่นยำว่า LDA

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.5.1.3 Correction method of Grimme (DFT-D3)

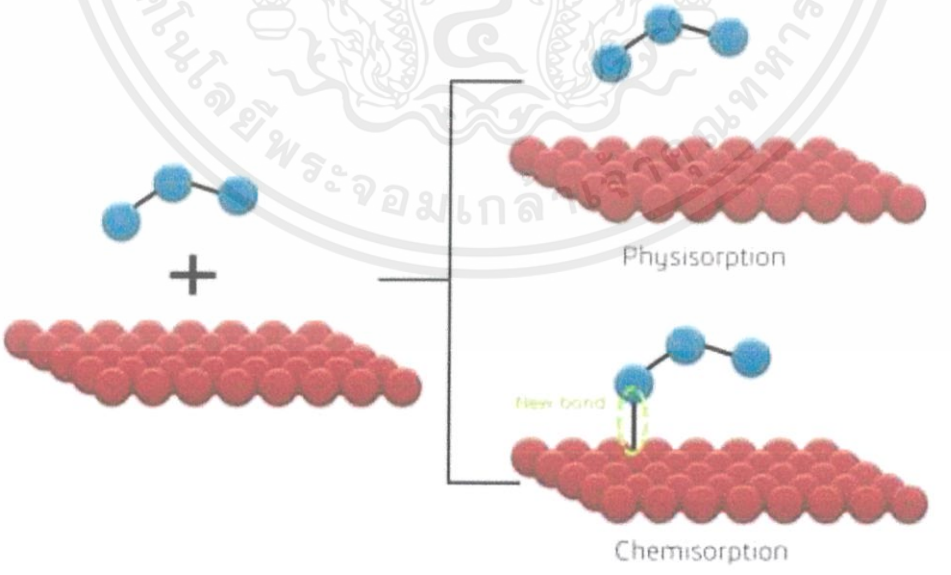
DFT-D3 เป็นวิธีการคำนวณของการกระจายตัวซึ่งสนับสนุนฟังก์ชันของโคห์น-ชาม ที่ช่วยเติมเต็มส่วนที่ขาดหายไปในเทอมของแรงแวนเดอร์วาลล์ พลังงานทั้งหมดนั้นอยู่ในสมการที่อยู่ต่อไปนี้ ซึ่งเหมาะกับการคำนวณระบบออแกนิค [6]

2.5.2 สมบัติเชิงโครงสร้างของพื้นผิว

โครงสร้างพื้นผิว คือ การตัดระนาบในโครงสร้างแบบบัลค์ สำหรับโครงสร้างของกราฟีนจะตัดเป็นโครงสร้างพื้นผิวที่ระนาบ (0 0 1) หรือตัดระนาบตามขวางของเซลล์เพื่อเป็นการตัดระนาบสำหรับแผ่นระนาบ

2.5.3 การดูดซับโมเลกุลบนพื้นผิว

การดูดซับโมเลกุลบนพื้นผิว คือ การที่โมเลกุลเกิดแรงยึดเหนี่ยวบนพื้นผิววัสดุ โดยแรงยึดเหนี่ยวนั้นมีสองประเภท คือ การดูดซับทางกายภาพและการดูดซับทางเคมี ซึ่งการดูดซับทางกายภาพ (Physical adsorption หรือ Physisorption) หมายถึง การดูดซับของตัวดูดซับ (absorbent) และตัวถูกดูดซับ (adsorbate) ที่เกี่ยวกับแรงแวนเดอร์วาลล์ (Van der Waals force) เท่านั้น ซึ่งเป็นแรงแบบอ่อน ดังนั้นจะไม่เกิดการเปลี่ยนแปลงใด ๆ กับความหนาแน่นของอิเล็กตรอนการดูดซับทางเคมี (Chemical adsorption หรือ Chemisorption) หมายถึง การดูดซับ ที่เกี่ยวกับพันธะเคมี (chemical bond) ซึ่งเกิดขึ้นระหว่างตัวดูดซับ และตัวถูกดูดซับ โดยพันธะเคมีนี้เกิดจากการเปลี่ยนความหนาแน่นของอิเล็กตรอน พันธะนี้มักจะอยู่ในลักษณะของพันธะไอออนิก (ionic bond) และพันธะโควาเลนต์ (covalent bond)



รูปที่ 2.13 ลักษณะการดูดซับโมเลกุลบนพื้นผิว

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

พลังงานการดูดซับ คือ การวัดการดูดซับของสารที่ถูกดูดซับและฐานรองรับในระบบที่อยู่ในสภาวะสมดุล สามารถคำนวณได้จากสมการที่ 2.4 โดยค่าพลังงานที่ได้นั้นยิ่งมีค่าเป็นลบมากแสดงถึงความแข็งแรงของอันตริกิริยาของสารที่ถูกดูดซับบนอะตอมพื้นผิว

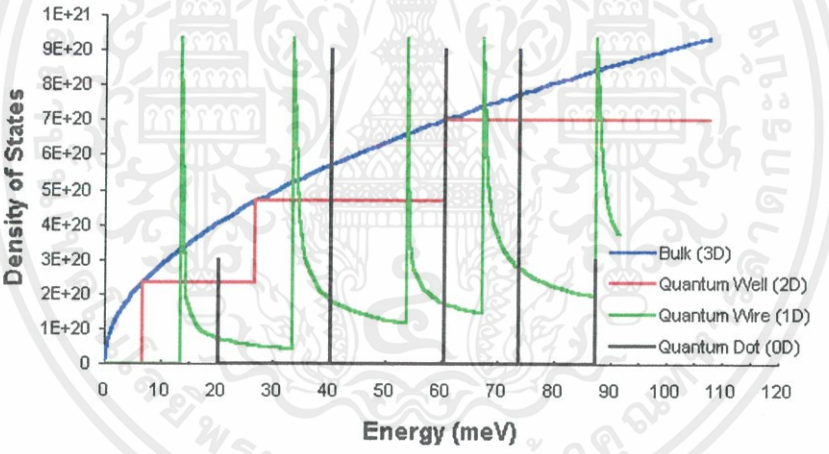
$$E_{ads} = E_{Adsorbate/surface} - (E_{absorbate} + E_{surface}) \quad (2.4)$$

นิยาม E_{ads} คือ พลังงานการดูดซับ $E_{absorbate}$ คือ พลังงานของโมเลกุลที่ถูกดูดซับในสุญญากาศ $E_{surface}$ คือ พลังงานของพื้นผิว $E_{Adsorbate/surface}$ คือ พลังงานทั้งหมดของโมเลกุลที่ถูกดูดซับบนพื้นผิว

2.5.4 โครงสร้างทางอิเล็คทรอนิกส์

2.5.4.1 Density of state

สำหรับ density of states (DoS) นั้นอธิบายเกี่ยวกับแถบสภานะต่าง ๆ ที่ว่างอยู่ในระบบสำหรับพลังงานการกระจายตัว ในเซมิคอนดักเตอร์มีอิสระการครอบตั้งแต่สอง หนึ่ง และศูนย์มิติ เมื่อปรับใช้ระบบมิติในบ่อควอนตัมนั้นได้เป็น Quantum well (2D) Quantum wire (1D) และ Quantum dot (0D)



รูปที่ 2.14 DoS; bulk (3D น้ำเงิน) Quantum well (2D แดง) Quantum wire (1D เขียว) และ Quantum dot (0D ดำ)

2.5.4.2 Bader charge

Bader charge ใช้สิ่งที่เรียกว่าผิวซีโร่ฟลักซ์เพื่อแบ่งอะตอม ผิวซีโร่ฟลักซ์เป็นพื้นผิว 2 มิติที่ความหนาแน่นประจุต่ำสุดตั้งฉากกับพื้นผิว โดยปกติในระบบโมเลกุลความหนาแน่นประจุจะมีค่าต่ำที่สุดระหว่างอะตอมและนี่เป็นที่ในการแยกอะตอมออก นอกเหนือจากการแสดงโครงสร้างอะตอมในโมเลกุลตัวคำจำกัดความของ Bader charge มักมีประโยชน์สำหรับการวิเคราะห์ค่า charge ตัวอย่างเช่นค่า charge ที่อยู่ในปริมาตร Bader charge เป็นค่าประมาณที่ใกล้เคียงกับค่า charge อิเล็กทรอนิกส์ทั้งหมดของอะตอม การกระจายค่า charge สามารถใช้เพื่อกำหนดช่วงเวลาที่

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

multipole ของอะตอมหรือโมเลกุลที่มีปฏิสัมพันธ์ การวิเคราะห์ของ Bader ถูกนำมาใช้เพื่อกำหนดความแข็งของอะตอมซึ่งสามารถนำมาใช้เพื่อหาค่า charge ในการลบประจุจากอะตอม [20]

2.6 การทบทวนวารสารงานวิจัย

(1) Liu Zhon และคณะได้ศึกษาเกี่ยวกับการคำนวณ DFT ของโครงสร้างกราฟีนที่มีรูปแบบที่เกี่ยวข้องโดยเริ่มที่วารสารของการศึกษาการคำนวณระบบโครงสร้างการดูดซับของปรอทบนกราฟีนที่เจือธาตุอลูมิเนียมซึ่งสนใจในโครงสร้างที่สมบูรณ์และโครงสร้างที่ถูกปรังปรุงซึ่งผลปรากฏว่าพลังงานการดูดซับของโครงสร้างที่สมบูรณ์และโครงสร้างที่ถูกปรังปรุงเท่ากับ -0.220 และ -0.342 eV เป็นการดูดซับทางกายภาพในขณะที่พลังงานพื้นผิวเท่ากับ -0.57 eV เป็นการดูดซับทางเคมี ในอีกด้านพลังงานการดูดซับจะเพิ่มขึ้นก็เมื่อเพิ่มอะตอมของอลูมิเนียมซึ่งสรุปได้ว่าการเพิ่มอะตอมอลูมิเนียมมีผลต่อการดูดซับปรอท [21]

(2) Indrani Choudhuri และคณะได้ศึกษาเกี่ยวกับการคำนวณ DFT ของโครงสร้างการดูดซับของแก๊สต่าง ๆ บนกราฟีนที่เจือโบรอนและไนโตรเจนซึ่งแก๊สเหล่านี้ คือ CO CO_2 NO และ NO_2 โดยระบบโครงสร้างกราฟีนมี 3 ระบบ คือ พริสทีนกราฟีน กราฟีนเจือโบรอน และ ไนโตรเจน ซึ่งระบบเหล่านี้จะคำนวณพลังงานดูดซับกับแก๊ส 4 ชนิดเปรียบเทียบเพื่อหาการเลือกดูดซับแก๊สของแต่ละโครงสร้างที่เหมาะสมซึ่งปรากฏว่าระบบของโครงสร้างกราฟีนเจือโบรอนและไนโตรเจนนั้นสามารถดูดซับแก๊สเหล่านี้ได้ดีกว่าพริสทีนกราฟีน [16]

(3) Hengchang Bi และคณะได้ศึกษาเกี่ยวกับเซนเซอร์วัดความชื้นที่ตอบสนองสูงโดยใช้วัสดุตรวจวัดเป็นกราฟีนออกไซด์ซึ่งการใช้วัดสุชนิดนี้จะส่งผลให้คุณสมบัติของเซนเซอร์เป็นไปทางที่ดีขึ้นเมื่อเปรียบเทียบกับเซนเซอร์ทั่วไปโดยเริ่มจากการตอบสนองที่สูงกว่าถึงสิบเท่า ระยะเวลาการตรวจวัดที่สั้นกว่าหนึ่งในสี่ของระยะเวลาการตรวจวัดของเซนเซอร์ทั่วไป ด้วยคุณสมบัติเหล่านี้ทำให้ยืนยันได้ว่ากราฟีนออกไซด์มีบทบาทสำคัญที่ช่วยเพิ่มประสิทธิภาพของเซนเซอร์วัดความชื้นอย่างสูง [22]

(4) Hong-Zhang Wu และคณะได้ศึกษาเกี่ยวกับคำนวณโครงสร้างการดูดซับของแก๊สแต่ละชนิดแต่ละตำแหน่งบนกราฟีนคอมโพสิทหรือ g-C_3N_4 ซึ่งแก๊สเหล่านี้มีดังนี้ H_2O H_2 O_2 CO NO และ CO_2 ปรากฏว่าการดูดซับแก๊สแต่ละชนิดเป็นการดูดซับแบบกายภาพและด้วยแก๊สแต่ละแบบมีโครงสร้างโมเลกุลไม่เหมือนกันทำให้ต้องกำหนดทิศทางการวางตำแหน่งแก๊สลงบนกราฟีนคอมโพสิทเพื่อที่จะทราบว่าในทุก ๆ ตำแหน่งหรือโอกาสการดูดซับที่เป็นไปได้แบบไหนเหมาะสมที่สุดผลปรากฏว่าพลังงานการดูดซับสัมพัทธ์ของ H_2O นั้นมีค่าที่เหมาะสมสำหรับทุกตำแหน่งการดูดซับ [23]

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

(5) Hongwei Goa และคณะได้ศึกษาเกี่ยวกับการคำนวณโครงสร้างการดูดซับของ NO บนพริสทีนกราฟีนที่ตำแหน่งดูดซับที่ต่างกันโดยมีสามตำแหน่ง ดังนี้ Top-site Bridge-site และ Hollow-site โดยในแต่ละตำแหน่งก็จะมีการจัดวางของโมเลกุล NO ที่ต่างกัน ซึ่งในวารสารนี้วิเคราะห์ด้วยการคำนวณพลังงานดูดซับของทุกระบบเพื่อเปรียบเทียบความเสถียรของโครงสร้างซึ่งโครงสร้างของ Bridge-site มีค่าพลังงานการดูดซับที่เหมาะสมที่สุด ถัดไปคำนวณ Muliken charge เพื่อทราบค่า electron transfer ของแต่ละตำแหน่งอะตอมและระหว่างกราฟีนกับแก๊ส NO ปรากฏว่าตำแหน่งของ B-site เป็นตำแหน่งที่มีการเปลี่ยนแปลงของ charge เยอะที่สุด ถัดไปคำนวณ electron density เพื่อทราบความเป็นไปได้ของกลุ่มความหนาแน่นอิเล็กตรอนว่าจัดเรียงตัวกันอย่างไรเมื่อดูดซับแก๊สแล้วพบว่าไม่มีการ overlap ระหว่างแก๊สและกราฟีนทำให้การดูดซับนี้เป็นการดูดซับทางกายภาพและความหนาแน่นของอิเล็กตรอนจากมากไปน้อย คือ B-site > T-site > H-site ถัดไปคำนวณ HOMO และ LUMO เพื่อทราบความแตกต่างระหว่างสองชั้นนี้ปรากฏว่าตำแหน่งของ B-site เป็นตำแหน่งที่เสถียรที่สุด สุดท้ายคำนวณ p-DoS เพื่อทราบการจะเรียงตัวของออบิทัลที่กำหนด จากข้อมูลเหล่านี้การคำนวณพลังงานการดูดซับอย่างเดียวอาจไม่ทราบสรุปผลต่าง ๆ ได้ จึงจำเป็นต้องทราบข้อมูลของโครงสร้างอิเล็คทรอนิกส์มาประกอบการตัดสินใจ [17]

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 3
วิธีการดำเนินการวิจัย

3.1 โปรแกรมที่ใช้ในการคำนวณและวิเคราะห์ผล

ในงานศึกษาวิจัยนี้ใช้โปแกรมการคำนวณทางควอนตัมชื่อ VASP (The Vienna Ab initio Simulation Package) คือ โปรแกรมสำหรับคำนวณโครงสร้างวัสดุระดับอะตอมและโครงสร้างทางอิเล็คทรอนิกส์ โดยทฤษฎีฟังก์ชันนอลความหนาแน่นเป็นหนึ่งในกระบวนการแบบเฟิร์สปรินซิเปิล โดยเริ่มจากการใช้ทฤษฎีพื้นฐานในระบบอนุภาคและใช้การประมาณบางอย่างเพื่อที่จะทำนายสมบัติของสารทั้งก้อน ในการคำนวณโดยใช้ VASP โดยทั่วไปจำเป็นต้องศึกษาพารามิเตอร์ซึ่งมีรายละเอียดที่เกี่ยวข้องดังนี้

3.1.1 INPUT file

โปรแกรม VASP จำเป็นต้องมีไฟล์สำคัญ 5 ไฟล์ในการคำนวณระบบ คือ ไฟล์ INCAR POSCAR POTCAR KPOINTS และ Script.pbs

1 INCAR คือ ไฟล์สำหรับตั้งค่าระบบทั้งหมด เงื่อนไขทุกอย่างจะสามารถตั้งค่าได้ที่ไฟล์นี้

1.1 ENCUT คือ ค่าพลังงานคัทออฟของคลื่นระนาบหน่วย eV สำหรับค่า ENCUT ควรจะเป็น 1.3 ENMAX ตามแต่ธาตุนั้น ๆ

1.2 ISTART เป็นไฟล์ที่กำหนดว่าอ่านไฟล์ WAVRCAR หรือไม่ ถ้าตั้งค่า ISTART = 1 ไฟล์ WAVECAR จะอ่านแต่ถ้า ISTART = 0 จะไม่อ่านและไม่มีไฟล์นี้อยู่

1.3 EDIFF ระบุเงื่อนไขการเบรกสำหรับ SC-loop แบบอิเล็คทรอนิกส์

1.4 EDIFFG กำหนดเงื่อนไขการเบรกสำหรับลูปของไอออนิครีแลคเซชั่น DIFFG ควรมีค่าเท่ากับ 0 ถ้าลูปของไอออนิครีแลคเซชั่นจะหยุดหลังลำดับของ NSW

1.5 IBRION กำหนดวิธีการปรับตำแหน่งของไอออนเช่นถ้าเท่ากับ 0 คือ ใช้ระบบไดนามิกส์ระดับโมเลกุล ถ้าเท่ากับ 1 คือ ใช้ไอออนิกรีแลคเซชั่น

1.6 ISIF กำหนดว่ามีการคำนวณความเครียดและองศาอิสระแบบไหนในการทำงานของโมเลกุลไดนามิกส์

1.7 ISMEAR กำหนดวิธีการครอบครอง f_{nk} คือ สำหรับตั้งค่าของแต่ละออบิทัล เช่น ถ้าเท่ากับ 0 คือ ใช้ Gauusian smeaing ถ้าเท่ากับ -1 ใช้ Fermi smearing แต่ถ้าใช้เท่ากับ -2 การอ่านข้อมูลบางส่วนจะถูกอ่านจากไฟล์ WAVECAR หรือ INCAR และเก็บไว้ตลอดระยะเวลาในการคำนวณ

1.8 SIGMA ระบุความกว้างของ smearing ในหน่วย eV โดยปกติจะตั้งค่าไว้เท่ากับ 0.2

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

1.9 LCHARG กำหนดการเขียนของไฟล์ CHGCAR

1.10 LWAVE กำหนดการเขียนของไฟล์ WAVECAR

1.11 NSW ตั้งค่าจำนวนลำดับการคำนวณที่มากที่สุด

1.12 PREC ระบุโหมดความแม่นยำ

1.13 IVDW = 11 คือ DFT-D3 (zero) วิธีการคำนวณของ Grimme

1.14 LAECHG = .TRUE. คือ การคำนวณของ bader charge

```
! General Setup
System  = mono layer N doped graphene with H2O ontop
PREC    = Accurate
ENCUT   = 500
ISTART  = 0
ICHARG  = 0
ISPIN   = 1
ISMEAR  = 1
SIGMA   = 0.2
SYMPREC = 1E-10

! Electronic Relaxation (SCF)
EDIFF   = 1.0E-05

! Ionic Relaxation
EDIFFG  = -0.05
NSW     = 50
IBRION  = 2
ISIF    = 3

! PAW's
LREAL = Auto

! output
LWAVE    = .TRUE.
LCHARGE  = .TRUE.

!bader charge
LAECHG = .TRUE.

! DFT-D3
IVDW = 11
```

รูปที่ 3.1 ตัวอย่างการตั้งค่าของไฟล์ INCAR

2. POSCAR คือ ไฟล์ที่สำหรับเก็บค่าตำแหน่งอะตอม ขนาดเซลล์ และ space group

```
20170817\Bulk\1x1\Graphene\structure\from\CIF1200017
2.4700000286
        1.0000000000          0.0000000000          0.0000000000
       -0.5000000000          0.8660254038          0.0000000000
        0.0000000000          0.0000000000          2.7489878070
    C
    4
Direct
     0.000000000          0.000000000          0.000000000
     0.000000000          0.000000000          0.500000000
     0.333333343          0.666666687          0.005000000
     0.666666627          0.333333313          0.504999995
```

รูปที่ 3.2 ตัวอย่างข้อมูลในไฟล์ POSCAR

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

3. POTCAR คือ ไฟล์ที่เก็บข้อมูลของ pseudopotential ของแต่ละชนิดอะตอม

```
 PAW_PBE C 08Apr2002
  4.00000000000000
parameters from PSCTR are:
  VRHFIN =C: s2p2
  LEXCH  = PE
  EATOM  =   147.1560 eV,   10.8157 Ry

  TITEL  = PAW_PBE C 08Apr2002
  LULTRA =        F    use ultrasoft PP ?
  IUNSCR =        1    unscreen: 0-lin 1-nonlin 2-no
  RPACOR =    1.200    partial core radius
  POMASS =   12.011; ZVAL   =    4.000    mass and valenz
  RCORE  =    1.500    outmost cutoff radius
  RWIGS  =    1.630; RWIGS  =    0.863    wigner-seitz radius (au A)
  ENMAX  =  400.000; ENMIN  =  300.000 eV
  ICORE  =        2    local potential
  LCOR   =        T    correct aug charges
  LPAW   =        T    paw PP
  EAUG   =  644.873
  DEXC   =    0.000
  RMAX   =    1.529    core radius for proj-oper
  RAUG   =    1.300    factor for augmentation sphere
  RDEP   =    1.501    radius for radial grids
  RDEPT  =    1.300    core radius for aug-charge

  Atomic configuration
   4 entries
     n  l   j            E       occ.
     1  0  0.50      -273.3789   2.0000
     2  0  0.50       -13.7508   2.0000
     2  1  0.50        -5.2854   2.0000
     3  2  1.50        -5.4423   0.0000
  Description
     l       E           TYP  RCUT    TYP  RCUT
     0     -13.7508458    23  1.200
     0      -8.2022199    23  1.200
     1      -5.2854383    23  1.500
     1      34.0145650    23  1.500
     2      -5.4423304     7  1.500
  Error from kinetic energy argument (eV)
  NDATA  =      100
```

รูปที่ 3.3 ตัวอย่างข้อมูลไฟล์ POTCAR

4. KPOINTS เก็บข้อมูล k-point และจำนวนขนาดของกริด

```
Automatic mesh
0
Monkhrost
15 15 15
0. 0. 0.

```

รูปที่ 3.4 ตัวอย่างข้อมูลไฟล์ KPOINTS

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

5. Script.pbs คือ ไฟล์สำหรับส่งอินพุทไฟล์คำนวณเข้าเซิฟเวอร์ VASP

```
1  ########## Require to PBS Scheduler ##########
2  ###### PBS queue name (default)
3  #PBS -q default
4  ###### PBS jobs requirement
5  #PBS -l nodes=1:ppn=4
6  ###### PBS output
7  #PBS -e error.$PBS_JOBID
8  #PBS -o output.$PBS_JOBID
9
10
11 ############### Set environment ##############
12 cd $PBS_O_WORKDIR
13 cat $PBS_NODEFILE > nodes.txt
14 NPROCS=`wc -l < $PBS_NODEFILE`
15
16
17 ############### export configs ###############
18 echo Working directory is $PBS_O_WORKDIR
19 echo Running on host `hostname`
20 echo This job has allocated $NPROCS cpus
21 echo Starting Time is `date`
22
23
24 ############### Run vasp program #############
25
26 /share/apps/openmpi/2.1.2/bin/mpirun -np $NPROCS
```

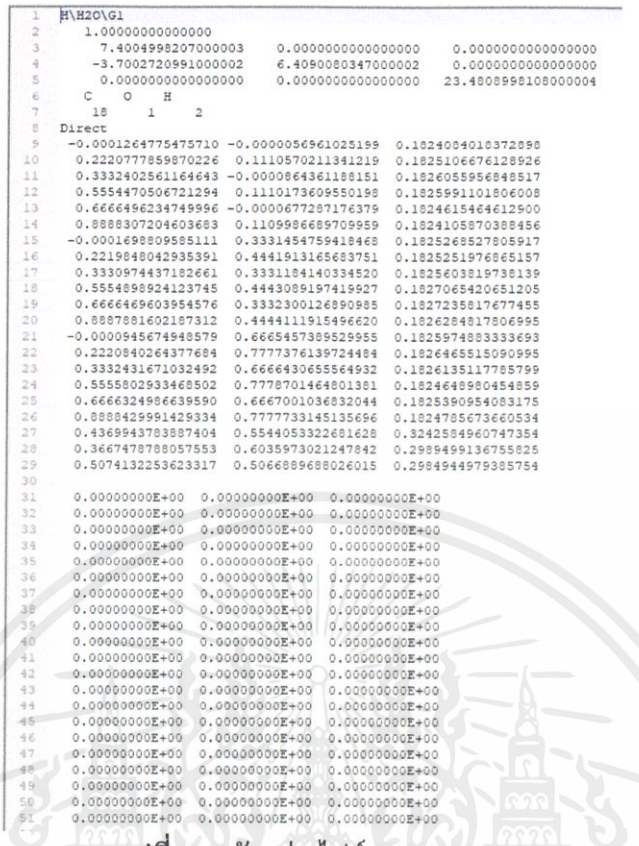
รูปที่ 3.5 ตัวอย่างไฟล์ script.pbs

3.1.1 OUTPUT file

ไฟล์เอาท์พุต คือ ไฟล์ที่มีข้อมูลสำคัญในการประกอบการวิเคราะห์คุณสมบัติต่าง ๆ

1. CONTCAR คือ ไฟล์โครงสร้างที่คำนวณลำดับล่าสุด

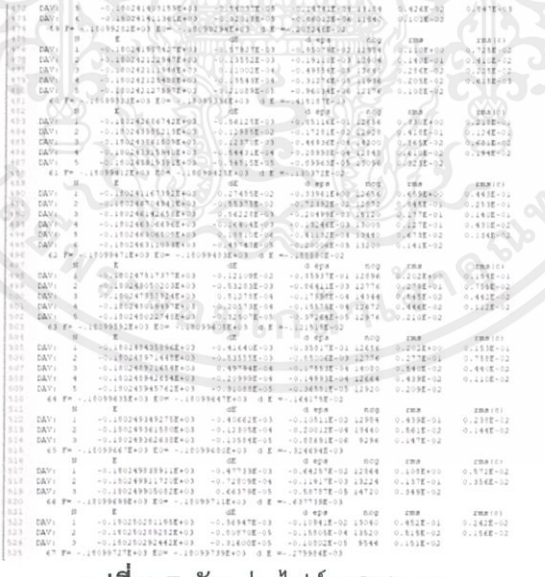
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



```
H\H2O\G1
   1.00000000000000
     7.4004998207000003     0.0000000000000000     0.0000000000000000
    -3.7002720991000002     6.4090080347000002     0.0000000000000000
     0.0000000000000000     0.0000000000000000    23.4808998108000004
   C    O    H
    18    1    2
Direct
 -0.0001264775475710 -0.0000056961025199  0.1624084018372898
  0.2220777859870226  0.1110570211341219  0.1825106676128926
  0.3332402561164643 -0.0000864361188151  0.1826055956848517
  0.5554470506721294  0.1110173609550198  0.1825991101806008
  0.6666496234749996 -0.0000677287176379  0.1824615464612900
  0.8888307204603683  0.1109986689709959  0.1824105870388456
 -0.0001698809585111  0.3331454759418468  0.1825268527805917
  0.2219848042935391  0.4441913165683751  0.1825251976865157
  0.3330974437182661  0.3331184140334520  0.1825603819738139
  0.5554898924123745  0.4443089197419927  0.1827065420651205
  0.6666469603954576  0.3332300126890985  0.1827235817677455
  0.8887881602187312  0.4444111915496620  0.1826284817806995
 -0.0000945674948579  0.6665457389529955  0.1825974883333693
  0.2220840264377684  0.7777376139724484  0.1826465515090995
  0.3332431671032492  0.6666430655564932  0.1826135117785799
  0.5555802933468502  0.7778701464801381  0.1824648980454859
  0.6666324986639590  0.6667001036832044  0.1825390954083175
  0.8888429991429334  0.7777733145135696  0.1824785673660534
  0.4369943783887404  0.5544053322681628  0.3242584960747354
  0.3667478788057553  0.6035973021247842  0.2989499136755825
  0.5074132253623317  0.5066889688026015  0.2984944979385754

  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
  0.00000000E+00  0.00000000E+00  0.00000000E+00
```

รูปที่ 3.6 ตัวอย่างไฟล์ CONTCAR

2. OSZICAR คือ ไฟล์ที่มีข้อมูลพลังงานรวมทั้งหมดของโครงสร้าง



รูปที่ 3.7 ตัวอย่างไฟล์ OSZICAR

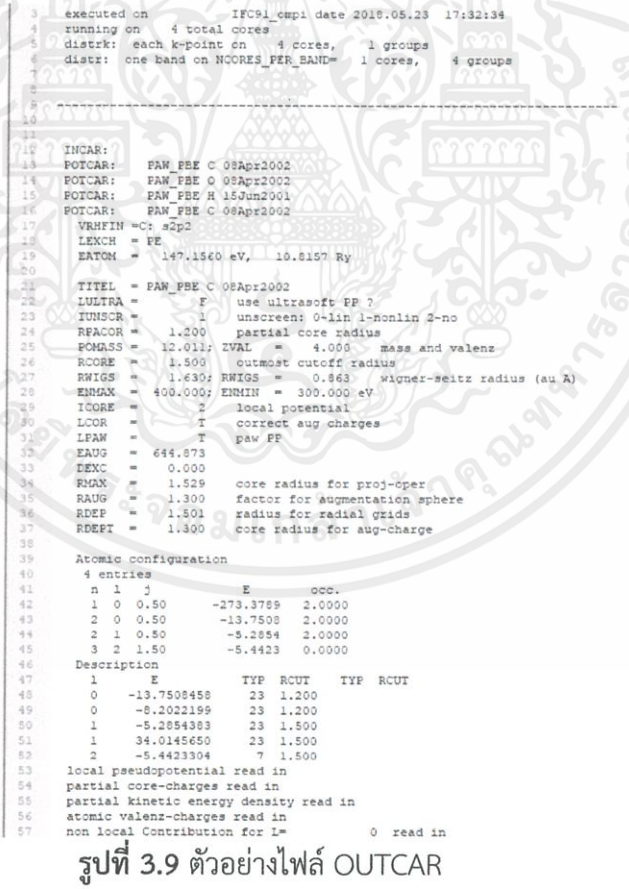
3. WAVECAR คือ ไฟล์ไบนารีที่เก็บข้อมูลฟังก์ชันคลื่นและไดนามิกซิมูเลชั่น
4. CHGCAR คือ ไฟล์ความหนาแน่นของประจุ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

```
   1.00000000000000
     7.400500     0.000000     0.000000
    -3.700272     6.409008     0.000000
     0.000000     0.000000    23.480900
   C    O    H
    18    1    2
Direct
  0.999674  0.999994  0.182408
  0.222076  0.111057  0.182511
  0.333240  0.999914  0.182696
  0.555447  0.111017  0.182599
  0.666650  0.999932  0.182462
  0.888831  0.110999  0.182411
  0.999830  0.333145  0.182527
  0.221965  0.444191  0.182525
  0.333097  0.333118  0.182560
  0.555490  0.444309  0.182707
  0.666647  0.333230  0.182724
  0.888788  0.444411  0.182628
  0.999905  0.666546  0.182597
  0.222054  0.777738  0.182647
  0.333243  0.666643  0.182414
  0.555589  0.777870  0.182465
  0.666632  0.666700  0.182539
  0.888843  0.777773  0.182479
  0.436594  0.554405  0.324258
  0.366748  0.603597  0.291950
  0.507413  0.506689  0.256494

  108  108  360
 0.18964570307E+01 0.18864294268E+01 0.15816837610E+01 0.11504329365E+01 0.68270855085E+00
 0.26199243748E+00 -.87038513153E-01 -.25849505515E+00 -.36071492428E+00 -.40098617656E+00
-.41713584508E+00 -.43373423495E+00 -.45751504276E+00 -.48185234167E+00 -.49637271069E+00
-.49541694690E+00 -.48210757953E+00 -.46595793302E+00 -.45690299932E+00 -.45955378797E+00
-.47104214767E+00 -.48341773177E+00 -.48860556888E+00 -.48396224984E+00 -.47125601684E+00
-.45545742381E+00 -.43752390730E+00 -.40993911322E+00 -.38591017259E+00 -.25439314568E+00
-.89244152304E-01 0.14124586690E+00 0.41877515246E+00 0.67063252338E+00 0.85666165691E+00
 0.11238974227E+01 0.11779198890E+01 0.11103910427E+01 0.93689850269E+00 0.69121436454E+00
 0.41550717248E+00 0.14982937856E+00 -.75945335529E-01 -.24596320274E+00 -.35795602160E+00
-.41979184109E+00 -.44480332065E+00 -.44745051334E+00 -.44022253163E+00 -.43199793698E+00
-.42764291003E+00 -.42847772416E+00 -.43327139694E+00 -.43950464042E+00 -.44463305320E+00
-.44710224807E+00 -.44685852350E+00 -.44523973691E+00 -.44404899756E+00 -.44462146505E+00
-.44613299951E+00 -.44455788512E+00 -.43202620644E+00 -.39717428356E+00 -.32678339127E+00
-.20882472277E+00 -.36600459421E-01 0.18682123914E+00 0.44402294256E+00 0.71200814632E+00
 0.94692074604E+00 0.11111141602E+01 0.11730243460E+01 0.11182354986E+01 0.95460675347E+00
 0.71120731313E+00 0.43955167302E+00 0.15867480973E+00 -.69954559195E-01 -.23697661047E+00
-.34319408802E+00 -.40312906468E+00 -.43614647125E+00 -.45789894161E+00 -.47575894767E+00
-.48887223434E+00 -.49325241163E+00 -.48705334490E+00 -.47375014756E+00 -.46114826624E+00
-.45703135123E+00 -.46424264225E+00 -.47841174173E+00 -.49006891880E+00 -.49009462304E+00
-.47868953089E+00 -.45231064741E+00 -.43005247630E+00 -.41504347805E+00 -.40022023640E+00
-.34034699439E+00 -.25923195412E+00 -.10526580317E-01 0.26029406708E+00 0.63061879638E+00
 0.11482161176E+01 0.15797632027E+01 0.18853262825E+01 0.19563367144E+01 0.15766991191E+01
 0.16620308941E+01 0.12923373412E+01 0.84773984185E+00 0.41506220384E+00 0.60951397317E-01
-.18252781436E+00 -.31991733165E+00 -.38110812975E+00 -.40408791624E+00 -.41877154834E+00
-.43882693976E+00 -.46232172901E+00 -.47963823947E+00 -.48288179668E+00 -.47187851813E+00
```

รูปที่ 3.8 ตัวอย่างไฟล์ CHGCAR

5. OUTCAR คือ ไฟล์ที่เก็บข้อมูลทุกอย่างที่ได้จากการคำนวณ



```
 executed on             IFC91_cmpl date 2018.05.23  17:32:34
 running on    4 total cores
 distrk:  each k-point on    4 cores,    1 groups
 distr:  one band on NCORES_PER_BAND=   1 cores,    4 groups


 ----------------------------------------------------------------------------



 INCAR:
 POTCAR:    PAW_PBE C 08Apr2002
 POTCAR:    PAW_PBE O 08Apr2002
 POTCAR:    PAW_PBE H 15Jun2001
 POTCAR:    PAW_PBE C 08Apr2002
  VRHFIN =C: s2p2
  LEXCH  = PE
  EATOM  =   147.1560 eV,   10.8157 Ry

  TITEL  = PAW_PBE C 08Apr2002
  LULTRA =        F    use ultrasoft PP ?
  IUNSCR =        1    unscreen: 0-lin 1-nonlin 2-no
  RPACOR =    1.200    partial core radius
  POMASS =   12.011; ZVAL   =    4.000    mass and valenz
  RCORE  =    1.500    outmost cutoff radius
  RWIGS  =    1.630; RWIGS =    0.863    wigner-seitz radius (au A)
  ENMAX  =  400.000; ENMIN  =  300.000 eV
  ICORE  =        2    local potential
  LCOR   =        T    correct aug charges
  LPAW   =        T    paw PP
  EAUG   =  644.873
  DEXC   =    0.000
  RMAX   =    1.529    core radius for proj-oper
  RAUG   =    1.300    factor for augmentation sphere
  RDEP   =    1.501    radius for radial grids
  RDEPT  =    1.300    core radius for aug-charge

   Atomic configuration
    4 entries
      n  l    j            E        occ.
      1  0  0.50      -273.3789   2.0000
      2  0  0.50       -13.7508   2.0000
      2  1  0.50        -5.2854   2.0000
      3  2  1.50        -5.4423   0.0000
   Description
      l      E           TYP  RCUT    TYP  RCUT
      0    -13.7508458    23  1.200
      0     -8.2022199    23  1.200
      1     -5.2854383    23  1.500
      1     34.0145650    23  1.500
      2     -5.4423304     7  1.500
  local pseudopotential read in
  partial core-charges read in
  partial kinetic energy density read in
  atomic valenz-charges read in
  non local Contribution for L=           0  read in
```

รูปที่ 3.9 ตัวอย่างไฟล์ OUTCAR

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

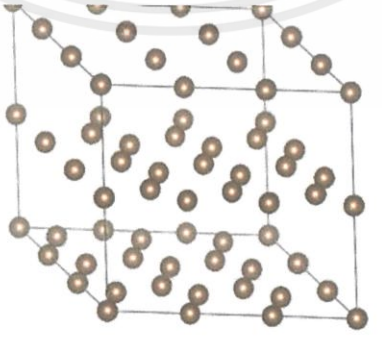
3.2 ระบบจำลองโมเลกุลที่เกี่ยวข้อง

3.2.1 ระบบแบบจำลองกราฟีนแบบบัลค์

เป็นระบบจำลองโครงสร้างของวัสดุกราฟีนที่ยังเป็นเนื้อเดียวกัน โดยนำโครงสร้างนี้มาจากแหล่งอ้างอิงซึ่งพารามิเตอร์ที่สำคัญมีดังนี้ ระยะพันธะของอะตอมคาร์บอนเท่ากับ 1.42 Å ระยะห่างระหว่างชั้นเท่ากับ 3.4 Å และระบบแลตทิซเซลล์เป็นระบบเฮกซะโกนอล

ตารางที่ 3.1 พารามิเตอร์ของระบบผลึกกราฟีนแบบบัลค์

พารามิเตอร์	รายละเอียด
Chemical formula structural	Carbon
Symmetry cell	Hexagonal
Space group IT number	186
Symmetry space group name Hall	P 6c -2c
Symmetry space group name H-M	P 63 m c
α	90°
β	90°
γ	120°
a	2.47 Å
b	2.47 Å
c	6.79 Å
Cell volume	35.9 $Å^3$



รูปที่ 3.10 ระบบแบบจำลองกราฟีนแบบบัลค์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

3.2.2 ระบบแบบจำลองกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ

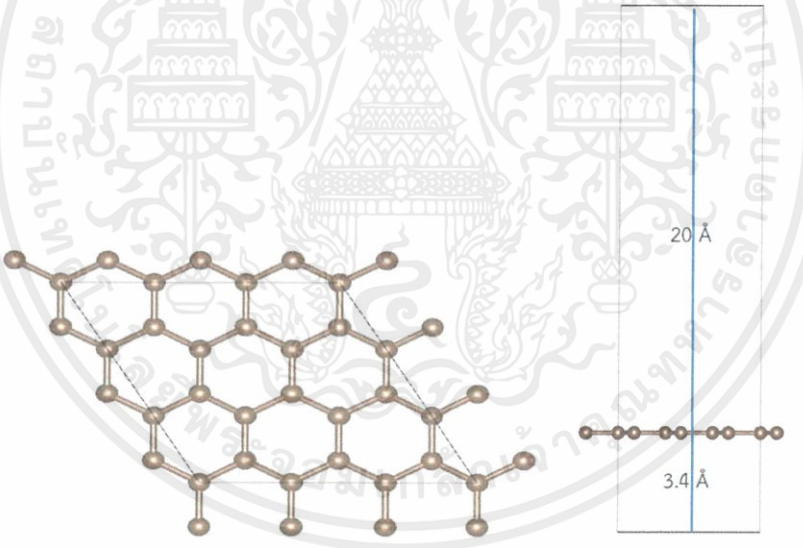
เป็นระบบจำลองโครงสร้างพื้นผิวกราฟีนในรูปแบบต่าง ๆ โดยจะยึดจากโครงสร้างกราฟีนแบบบัลค์มาตัดแต่งโครงสร้างออกเป็นแผ่นจากนั้นเพิ่มปริมาตรสุญญากาศบนพื้นผิวสูง 20 Å ด้านใต้พื้นผิวอีก 3.4 Å กับทุกโครงสร้าง โดยจะมีการตั้งชื่อแต่ละระบบจำลองโครงสร้างดังนี้

$$(H_2O)_n/XGn$$

นิยามให้ตำแหน่ง X เป็นตำแหน่งของส่วนที่ถูกปรับปรุงพื้นผิวหรือส่วนที่ถูกเจือลงไปบนโครงสร้างกราฟีน G หมายถึ งกราฟีน n หมายถึง จำนวนชั้นของโครงสร้างกราฟีนและ $(H_2O)_n$ หมายถึงจำนวนของโมเลกุลน้ำในระบบ ตัวอย่างเช่น กราฟีนสองชั้น คือ G2 กราฟีนที่เจืออะตอมไนโตรเจน คือ NG1 เป็นต้น

3.2.2.1 พริสทีนกราฟีน

เป็นระบบจำลองโครงสร้างพื้นผิวของกราฟีนที่ยังไม่ได้ปรับปรุงโครงสร้าง โดยพารามิเตอร์หลักจะคล้ายกับระบบโครงสร้างกราฟีนแบบบัลค์

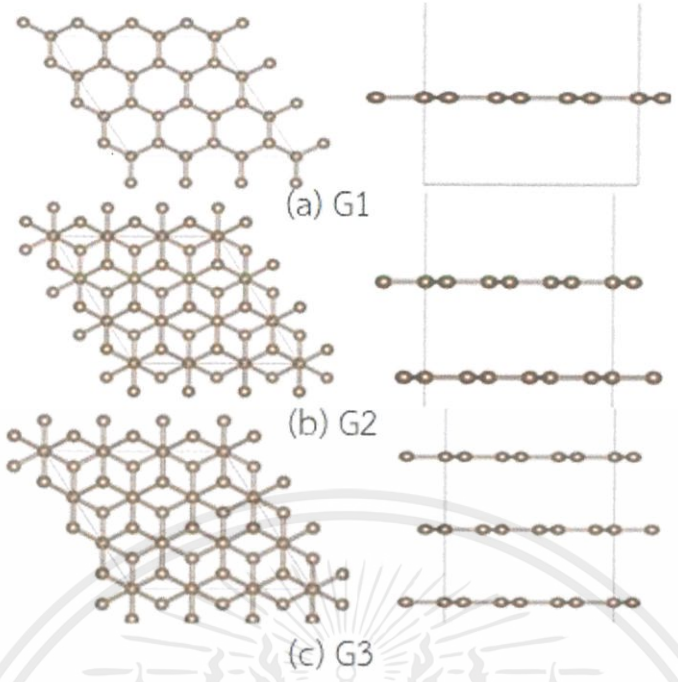


รูปที่ 3.11 ระบบแบบจำลองพริสทีนกราฟีน

3.2.2.2 กราฟีนที่จำนวนชั้นต่างกัน

เป็นระบบจำลองโครงสร้างพื้นผิวของพริสทีนกราฟีนที่เพิ่มจำนวนชั้นจากหนึ่งชั้นเป็นสองชั้นและสามชั้นตามลำดับ โดยระยะห่างระหว่างชั้นจะตั้งค่าไว้ที่ 3.4 Å

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

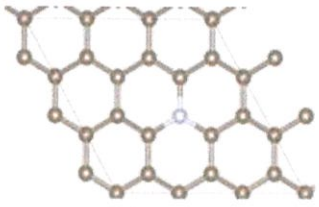


รูปที่ 3.12 ระบบแบบจำลองกราฟีนที่จำนวนชั้นต่างกัน (a) กราฟีนพื้นผิวหนาหนึ่งชั้น (b) กราฟีนพื้นผิวหนาสองชั้นและ (c) กราฟีนพื้นผิวหนาสามชั้น

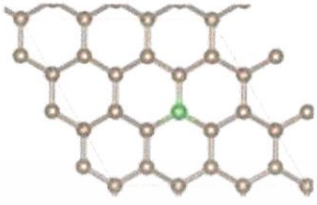
3.2.2.3 กราฟีนที่เจืออะตอมต่างชนิดกัน

เป็นระบบจำลองโครงสร้างของกราฟีนที่ได้ทำการเจืออะตอมที่ต่างชนิดกันที่ตำแหน่งเดียวกันสามอะตอม ได้แก่ อะตอมไนโตรเจน โบรอน และอลูมิเนียม ตามลำดับ

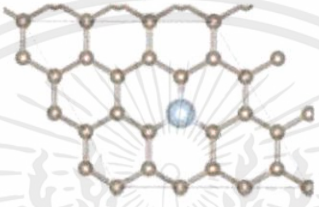
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



(a) NG1



(b) BG1



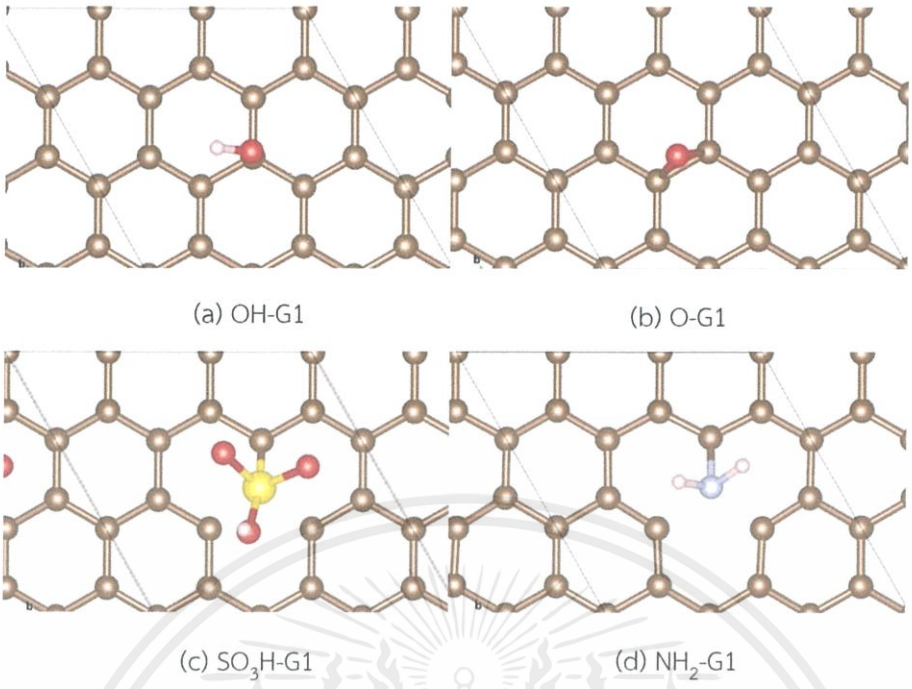
(c) AlG1

รูปที่ 3.13 ระบบแบบจำลองกราฟีนที่เจืออะตอมต่างชนิดกัน (a) กราฟีนเจืออะตอมไนโตรเจน (b) กราฟีนเจืออะตอมโบรอนและ (c) กราฟีนเจืออะตอมอลูมิเนียม

3.2.2.4 กราฟีนที่ปรับปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ฟังก์ชันต่างกัน

เป็นระบบจำลองโครงสร้างของกราฟีนที่ได้รับการปรับปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ฟังก์ชันต่างกันที่ตำแหน่งเดียวกันสี่ฟังก์ชัน ได้แก่ หมู่ไฮดรอกซิล อีเทอร์ กรดซัลโฟนิค และเอมีน ตามลำดับ สำหรับโครงสร้างของกรดซัลโฟนิคและเอมีนจำเป็นต้องปรับปรุงพื้นผิวของกราฟีนที่มีช่องว่างของอะตอมหรือวาแคนซีกราฟีนหลังจากนั้นจึงค่อยปรับปรุงพื้นผิวกรดซัลโฟนิคและเอมีนเพิ่มเข้าไปในโครงสร้าง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

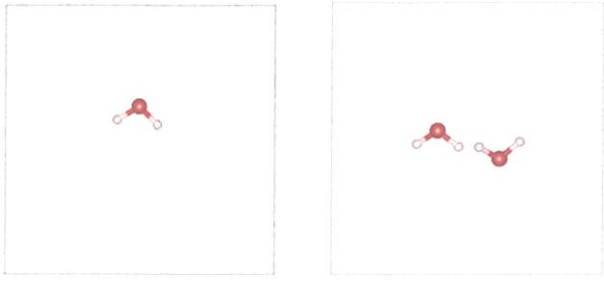


รูปที่ 3.14 ระบบแบบจำลองกราฟีนที่ปรับปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ฟังก์ชันต่างกัน (a) กราฟีนที่ปรังปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ไฮดรอกซิล (b) อีเทอร์ (c) กรดซัลโฟนิค และ (d) เอมีน

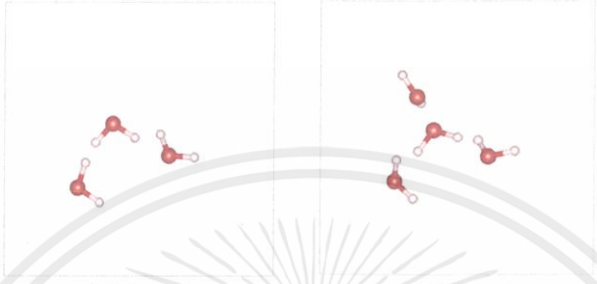
3.2.3 ระบบแบบจำลองโมเลกุลน้ำ

เป็นระบบจำลองโครงสร้างของโมเลกุลน้ำในกล่องสุญญากาศสี่เหลี่ยมจัตุรัสขนาด 10^3 ลูกบาศก์อังสตรอมเป็นกล่องบรรจุโมเลกุลน้ำสำหรับน้ำ 1 ถึง 4 โมเลกุล โดยจะวางตำแหน่งโมเลกุลให้อยู่ตรงกลางกล่อง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



(a) H_2O (b) $(H_2O)_2$



(c) $(H_2O)_3$ (d) $(H_2O)_4$

รูปที่ 3.15 ระบบจำลองโมเลกุลน้ำ (a) ระบบน้ำหนึ่งโมเลกุล (b) ระบบน้ำสองโมเลกุล (c) ระบบน้ำสามโมเลกุล (d) ระบบน้ำสี่โมเลกุล

3.2.4 ระบบแบบจำลองการดูดซับโมเลกุลของน้ำบนพื้นผิวกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ

เป็นระบบจำลองโครงสร้างการดูดซับของโมเลกุลน้ำบนกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ โดยจะนำโครงสร้างที่คำนวณเสร็จเรียบร้อยแล้วของโมเลกุลน้ำกับกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ

3.3 วิธีการคำนวณหาพารามิเตอร์ที่เหมาะสมในการคำนวณ

ในการคำนวณโครงสร้างต่าง ๆ จำเป็นต้องตั้งค่าพารามิเตอร์นการคำนวณที่เหมาะสมก่อนเพื่อที่จะได้ผลลัพธ์ที่เหมาะสมไว้สำหรับในการคำนวณครั้งต่อไป ได้แก่ ค่า ENCUT KPOINT เป็นต้น

3.3.1 ENCUT

ในการคำนวณโครงสร้างสำหรับบัลค์กราฟีนให้ตั้งค่า ENCUT หลายค่าและตั้งค่า k-point ค่าเดียว คือ KPOINTS เท่ากับ 15x15x15 ส่วนค่า ENCUT คือ 350 400 450 500 550 600 650 700 eV

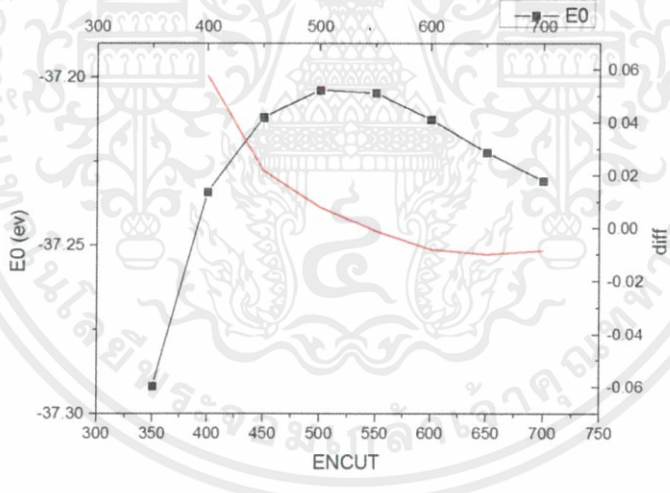
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

```
! General Setup
System = Graphene bulk 4 atoms
PREC   = Accurate
ENCUT  = 500   change ENCUT here
ISTART = 0
ICHARG = 0
ISPIN  = 1

! Electronic Relaxation (SCF)
EDIFF = 1.0E-05

! Ionic Relaxation
EDIFFG = -0.01
NSW    = 0   NSW = 0 for convergence test
IBRION = 2
ISIF   = 2

! PAW's
LREAL  = .FALSE.

! output
LWAVE  = .FALSE.
LCHARG = .FALSE.

!D3T-D3
IVDW = 11
```

```
Automatic mesh
0
Monkhrost
15 15 15   fixed KPOINTS
0. 0. 0.

```

รูปที่ 3.16 ไฟล์ INCAR และ KPOINTS สำหรับคอนเวอร์เจนซ์ ENCUT

หลักจากที่ได้ค่าของ ENCUT จากกราฟ 3.7 ค่า ENCUT เริ่มลู่เข้าที่ 500 eV ดังนั้น พารามิเตอร์หลักของค่า ENCUT คือ 500 eV สำหรับใช้ในการคำนวณระบบจำลองที่เหลือ



รูปที่ 3.17 กราฟคอนเวอร์เจนซ์ ENCUT

3.3.2 KPOINT

ในการคำนวณโครงสร้างสำหรับบัลค์กราฟีนให้ตั้งค่า Kpoints หลายค่าและตั้งค่า ENCUT ค่าเดียว คือ ENCUT เท่ากับ 500 eV ส่วนค่า Kpoints คือ = 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 และ 18

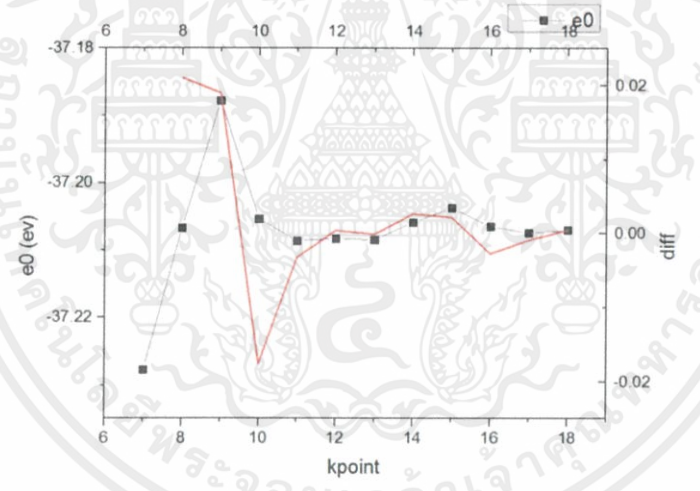
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

```
! General Setup
System = Graphene bulk 4 atoms
PREC   = Accurate
ENCUT  = 500        fixed ENCUT
ISTART = 0
ICHARG = 0
ISPIN  = 1

! Electronic Relaxation (SCF)
EDIFF = 1.0E-05

! Ionic Relaxation
EDIFFG = -0.01
NSW    = 0          NSW = 0 for convergence test
IBRION = 2
ISIF   = 2

! PAW's
LREAL  = .FALSE.

! output
LWAVE  = .FALSE.
LCHARG = .FALSE.

!D3T-D3
IVDW = 11
```

```
Automatic mesh
0
Monkhrost
15 15 15        Change KPOINTS here
0. 0. 0.

```

รูปที่ 3.18 ไฟล์ INCAR และ KPOINTS สำหรับคอนเวอร์เจนซ์ KPOINTS

หลักจากที่ได้ค่าของ Kpoints จากกราฟ 3.9 ค่า Kpoints เริ่มลู่เข้าที่ 15x15x15 ดังนั้น พารามิเตอร์หลักของค่า Kpoints คือ 15x15x15 สำหรับใช้ในการคำนวณระบบจำลองที่เหลือ



รูปที่ 3.19 กราฟคอนเวอร์เจนซ์ KPOINTS

3.3.3 Functional

ในการคำนวณใน VASP นั้นมีหลายฟังก์ชันนอลการคำนวณเช่น LDA GGA B3LYP และอื่น ๆ ซึ่งขั้นตอนนี้จำเป็นต้องหาฟังก์ชันที่เหมาะสม แม่นยำ และใช้เวลาไม่นานสำหรับการคำนวณแต่ละระบบ

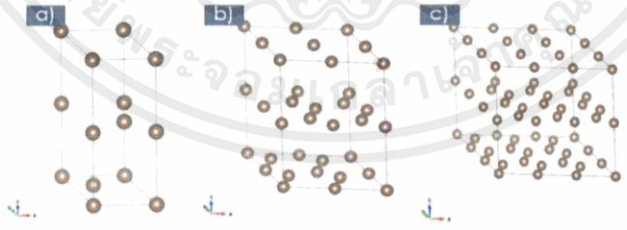
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 3.2 แท็กของฟังก์ชันใน VASP

Specific functional	TAG
GGA	GGA = 91 | PE | RP | PS | AM
B3LYP	LHFCALC = .TRUE. GGA = B3 AEXX = 0.2 AGGAX = 0.72 AGGAC = 0.81 ALDAC = 0.19
DFT-D3	IVDW = 11

3.3.4 Supercell

ในการคำนวณโครงสร้างที่เหมาะสมที่จำเป็นต้องเลือกการใช้ซุปเปอร์เซลล์ก่อนดังนั้นในการศึกษาวิจัยนี้ได้เลือกขนาดซุปเปอร์เซลล์ไว้ดังนี้ 1x1x1 2x2x1 และ 3x3x1 โดยรูปตัวอย่างซุปเปอร์เซลล์จะอยู่ในรูปที่ 3.10 ส่วนข้อมูลพารามิเตอร์ต่าง ๆ จะอยู่ในตารางที่ 3.5 โดยในการศึกษาวิจัยนี้จะเลือกใช้ระบบซุปเปอร์เซลล์ 3x3x1



รูปที่ 3.20 โครงสร้างขนาดซุปเปอร์เซลล์ (a) 1x1x1 (b) 2x2x1 (c) 3x3x1

ตารางที่ 3.3 ตารางแสดงผลข้อมูลของซุปเปอร์เซลล์

ซุปเปอร์เซลล์	จำนวนอะตอม	เวลาที่ใช้ (ชั่วโมง)	Total energy (eV)	C-C (Å)
1x1x1	4	0.13	-37.2247	
2x2x1	16	0.80	-148.9112	1.42417
3x3x1	36	64.38	-335.0487	

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

3.4 วิธีการคำนวณสมบัติทางโครงสร้างของแบบจำลอง

3.4.1 โครงสร้างบัลค์กราฟีน

เตรียมไฟล์ INPUT ทั้งห้าไฟล์สำหรับเริ่มต้นการคำนวณโดยเริ่มจากไฟล์ INCAR กำหนดค่าพารามิเตอร์เหมือนตัวอย่างไฟล์ INCAR ไฟล์ K-point กำหนดอยู่ที่ 15 15 15 ไฟล์ POSCAR นำมาจากแหล่งอ้างอิง POTCAR ของอะตอมคาร์บอน และไฟล์ pbs ใช้ชุดคำสั่งของเซิร์ฟเวอร์สำหรับส่งคำนวณการปรับโครงสร้างโดยผลที่สนใจจะเกี่ยวกับโครงสร้างหลังจากการปรับโครงสร้างสำหรับทำโครงสร้างพื้นผิว

3.4.2 โครงสร้างพื้นผิวกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ

เตรียมไฟล์ INPUT ทั้งห้าไฟล์สำหรับเริ่มต้นการคำนวณโดยเริ่มจากไฟล์ INCAR กำหนดค่าพารามิเตอร์เหมือนกันกับโครงสร้างกราฟีนแบบบัลค์แต่ปรับ ISIF = 2 ไฟล์ K-point กำหนดอยู่ที่ 15 15 1 ไฟล์ POSCAR นำมาจากการปรับปรุงพื้นผิวของบัลค์หลังจากตัดระนาบ 001 และเจืออะตอมเข้าไปในโครงสร้าง POTCAR จำเป็นต้องเปิดไฟล์ POSCAR เพื่อดูลำดับอะตอมให้ตรงกัน และไฟล์ pbs ใช้ชุดคำสั่งของเซิฟเวอร์ สำหรับส่งคำนวณการปรับโครงสร้างโดยผลที่สนใจจะเกี่ยวกับโครงสร้างหลังจากเจือธาตุและปรับปรุงพื้นผิวว่าการจัดเรียงตัวของอะตอมเป็นอย่างไรของแต่ละระบบ

3.4.3 โครงสร้างโมเลกุลของน้ำ

เตรียมไฟล์ INPUT ทั้งห้าไฟล์สำหรับเริ่มต้นการคำนวณโดยเริ่มจากไฟล์โดยทั้งห้าไฟล์จะเหมือนกันกับระบบที่แล้วแต่เปลี่ยนไฟล์ POSCAR เป็นของระบบจำลองโครงสร้างโมเลกุลน้ำ สำหรับส่งคำนวณการปรับโครงสร้างโดยผลที่สนใจจะเกี่ยวกับโครงสร้างหลังจากคำนวณที่อาจจะเป็นเครือข่ายพันธะไฮโดรเจน

3.5 วิธีการคำนวณการดูดซับของโมเลกุลน้ำบนพื้นผิวกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ

หลังจากที่ปรับโครงสร้างกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ จากนั้นคำนวณการดูดซับของน้ำบนกราฟีนอีกครั้งสำหรับใช้ค่าคำนวณในสมการ

$$E_{ad} = E_{total} - (E_{graphene} + E_{H_2O})$$

ซึ่ง E_{total} คือพลังงานรวมของระบบโครงสร้างการดูดซับน้ำบนกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ และ $E_{graphene} + E_{H_2O}$ คือ พลังงานของกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ และโมเลกุลน้ำตามลำดับ โดยข้อมูลเหล่านี้จะนำมาจากไฟล์ OSZICAR ในบรรทัดสุดท้ายของค่า E0

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

3.6 วิธีการคำนวณสมบัติโครงสร้างอิเล็คโทรนิค

3.6.1 Bader charge

โดยเริ่มจากทุกระบบโครงสร้างในไฟล์ INCAR เพิ่มแท็ก LAECHG = .TRUE. สำหรับเขียนไฟล์ ไฟล์ AECCAR0 AECCAR1 และ AECCAR2 จากนั้นให้รวมไฟล์ AECCAR0 และ AECCAR2 เป็นไฟล์ CHGCAR_sum ไว้สำหรับคำนวณไฟล์ bader ซึ่งก่อนหน้าที่จะคำนวณ bader จำเป็นต้องดาวโหลดไฟล์ bade.tar.xvf แตกไฟล์ในโฟลเดอร์ที่เก็บข้อมูล CHGCAR_sum และ CHGCAR จากข้อมูลเดิม จากนั้นใช้คำสั่ง bader CHGCAR -ref CHGCAR_sum จะได้ไฟล์ ACF.dat สำหรับดูค่า charge แต่ละอะตอมซึ่งต้องคำนวณในสมการเพื่อหาค่า bader charge ดูค่าโอกาสการรับและสูญเสียอิเล็กตรอน Charge ที่จะมาคำนวณในสมการต่อไปนี้

$$Bader = Z - core - charge$$

โดยให้ bader คือ bader charge, Z คือ เลขอะตอม, core คือ เลขจำนวน core และ charge ค่า charge ในไฟล์ ACF

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 4
ผลการคำนวณและอภิปรายผล

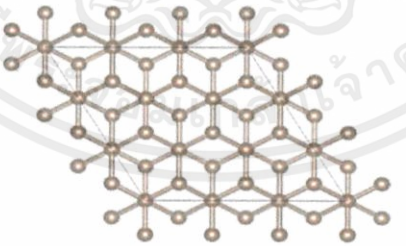
4.1 สมบัติทางโครงสร้างและพลังงาน

4.1.1 โครงสร้างกราฟีนบัลค์

โครงสร้างกราฟีนบัลค์นั้นมีสมบัติทางโครงสร้างต่อไปนี้ จำนวนอะตอมในเซลล์มี 36 อะตอม พลังงานรวมในระบบ -335.0487 eV ระยะพันธะเฉลี่ยอยู่ที่ 1.42417 Å ซุปเปอร์เซลล์มีขนาด 3×3×1 ซึ่งมีโครงสร้างที่ใกล้เคียงกับแหล่งอ้างอิงในตารางเปรียบเทียบตารางที่ 4.1

ตารางที่ 4.1 ตารางแสดงข้อมูลเปรียบเทียบของโครงสร้างกราฟีนบัลค์

พารามิเตอร์	รายละเอียดจากแหล่งอ้างอิง	รายละเอียดจากการคำนวณ
α	90°	90°
β	90°	90°
γ	120°	120°
a	7.41 Å	7.40 Å
b	7.41 Å	7.40 Å
c	6.79 Å	6.96 Å
Cell volume	322.87 $Å^3$	330.18 $Å^3$



รูปที่ 4.1 ระบบโครงสร้างของพกราฟีนแบบบัลค์

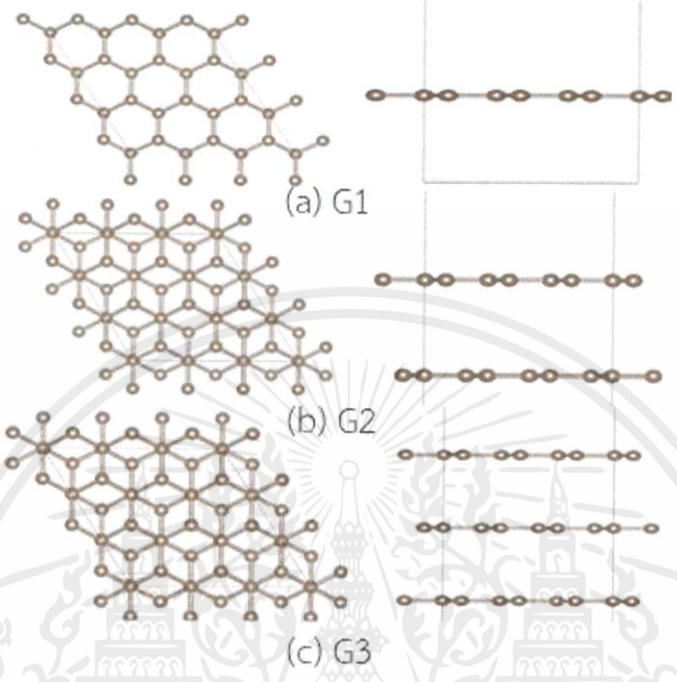
4.1.2 โครงสร้างพื้นผิวกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ

4.1.2.1 พริสทีนกราฟีน

สำหรับผลการคำนวณโครงสร้างของพื้นผิวกราฟีนที่ต่างจำนวนชั้นนั้นแสดงที่รูปที่ 4.2 สำหรับรูปร่างของโครงสร้างและตารางที่ 4.2 สำหรับข้อมูลพารามิเตอร์ต่าง ๆ เริ่มที่กำหนดให้ G1 G2 และ G3 คือ พริสทีนกราฟีนจำนวนหนึ่งชั้น สองชั้นและสามชั้นตามลำดับ ในเซลล์ของ G1

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

G2 และ G3 มีจำนวนที่ต่างกัน 18 36 และ 54 อะตอมทำให้พลังงานและระยะเวลาที่ใช้ในการคำนวณมากที่ขึ้น สำหรับโครงสร้างของตัวพริสทีนกราฟีนมีระยะพันธะเฉลี่ยที่ 1.42 Å ซึ่งโครงสร้างนี้นั้นตรงตามแหล่งที่อ้างอิงของโครงสร้างปกติของพริสทีนกราฟีน



รูปที่ 4.2 ระบบโครงสร้างของพรีสทีนกราฟีนที่จำนวนชั้นต่างกัน (a) กราฟีนพื้นผิวหนาหนึ่งชั้น (b) กราฟีนพื้นผิวหนาสองชั้นและ (c) กราฟีนพื้นผิวหนาสามชั้น

ตารางที่ 4.2 ตารางแสดงผลของการคำนวณพื้นผิวพริสทีนกราฟีน

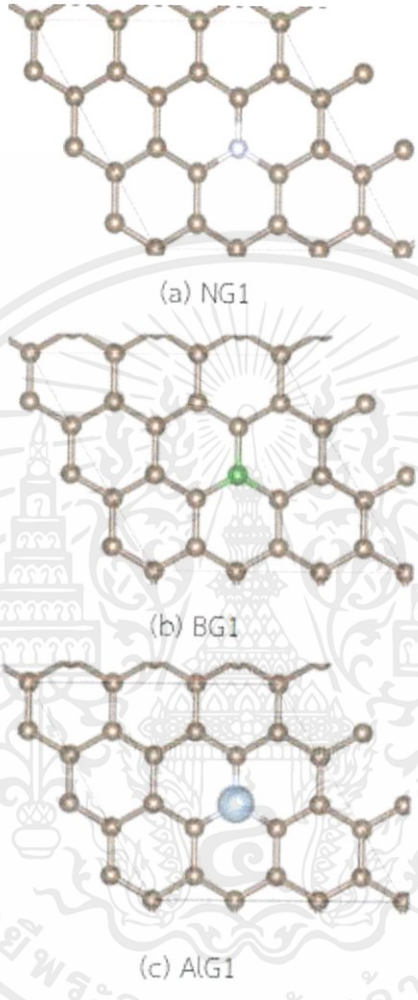
	จำนวนอะตอม	เวลาที่ใช้ (ชั่วโมง)	Total energy (eV)	C-C max (Å)	C-C min (Å)
G1	18	1.11	-166.66	1.4242	1.4242
G2	36	6.35	-334.34	1.4242	1.4242
G3	54	13.95	-501.63	1.4242	1.4242

4.1.2.2 กราฟีนเจืออะตอมต่างชนิด

โครงสร้างกราฟีนที่เจืออะตอมต่างชนิดจะเจืออยู่ตำแหน่งเดียวกันทั้งสามชนิด คือ (a) ไนโตรเจน (b) โบรอน และ (c) อลูมิเนียม ในรูปที่ 4.3 แสดงให้เห็นถึงโครงสร้างกราฟีนที่เจอทั้งสามธาตุ สำหรับโครงสร้างพารามิเตอร์ในการคำนวณจะแสดงอยู่ที่ตางรางที่ 4.3 โดยให้ X เป็นอะตอมที่เจือลงบนกราฟีนและ C-X เป็นระยะพันธะจากอะตอมคาร์บอนกับอะตอมที่เจือ ซึ่งหลังจากที่ได้รับการเจืออะตอมต่างชนิดไปแล้วนั้นโครงสร้างของกราฟีนนั้นได้มีการขยายและหดสั้นลงตาม

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ขนาดอะตอมที่เจือลงไป สังเกตได้จากค่า C-C max และ C-C min กราฟีนที่เจืออะตอมไนโตรเจนนั้น ค่าระยะพันธะเหล่านี้ใกล้เคียงกันมากเนื่องจากด้วยขนาดและลักษณะที่ใกล้เคียงกับอะตอมคาร์บอน แต่สำหรับโบรอนและอลูมิเนียมจากค่าระยะพันธะสูงสุดต่ำสุดที่มีขอบเขตเพิ่มขึ้นแสดงให้เห็นถึงความสำคัญของขนาดอะตอมที่เจือลงบนโครงสร้างกราฟีน



รูปที่ 4.3 ระบบโครงสร้างของกราฟีนที่เจืออะตอมต่างกัน (a) ไนโตรเจน (b) โบรอน และ (c) อลูมิเนียม

ตารางที่ 4.3 ตารางแสดงผลของการคำนวณพื้นผิวกราฟีนที่เจืออะตอม

	จำนวนอะตอม	เวลาที่ใช้ (ชั่วโมง)	Total energy (eV)	C-C min (Å)	C-C max (Å)	C-X min (Å)	C-X max (Å)
NG1	18	6.00	-164.73	1.4205	1.4341	1.4157	1.4157
BG1	18	3.28	-162.81	1.4045	1.4332	1.4782	1.4782
AlG1	18	18.73	-152.13	1.3550	1.4384	1.6803	1.6804

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

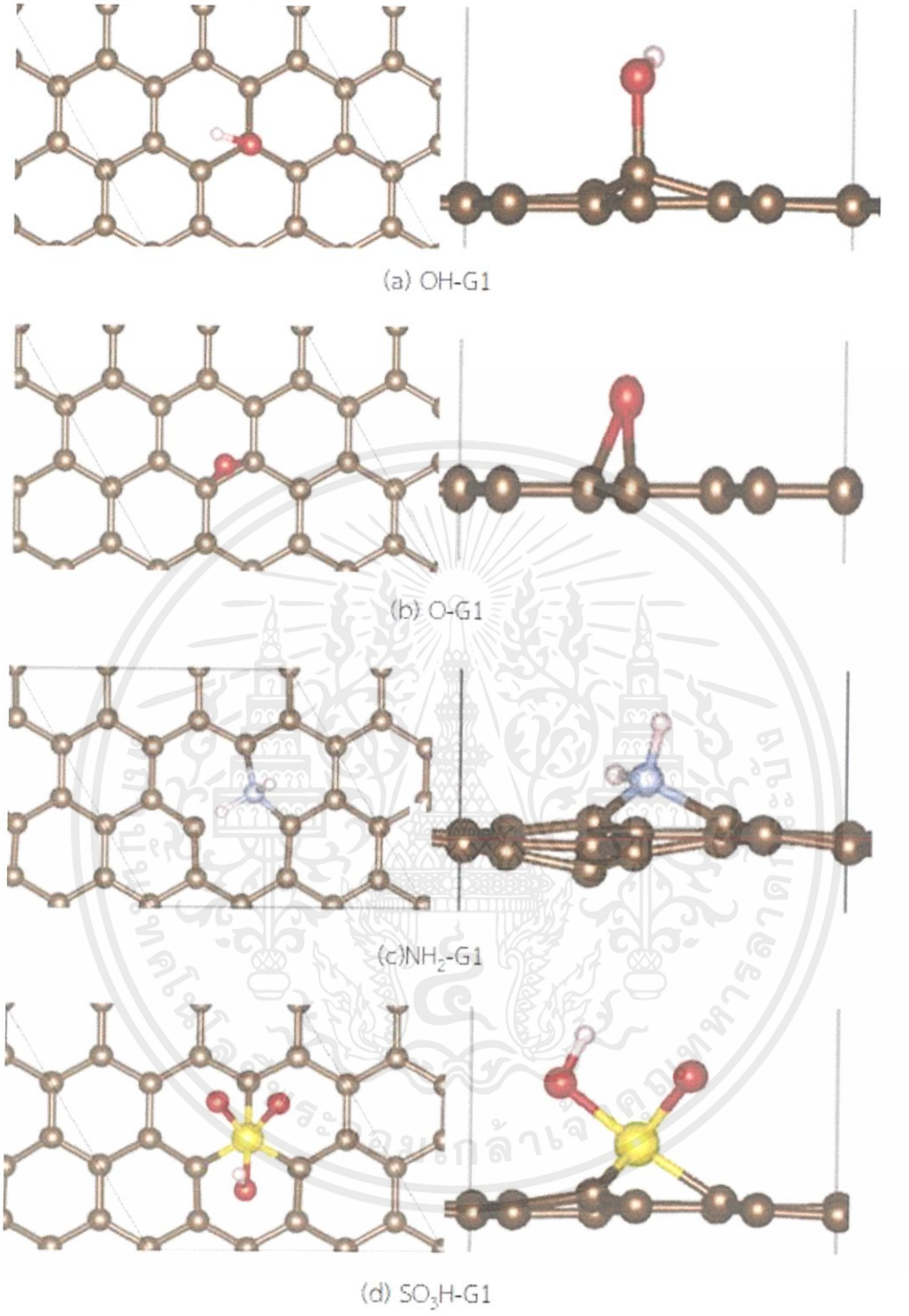
4.1.1.3 กราฟีนที่ปรับปรุงโครงสร้างพื้นผิว

สำหรับการคำนวณปรับโครงสร้างของการเพิ่มหมู่ฟังก์ชันลงไปบนกราฟีนแรกเริ่มที่กำหนดมีกรดคาร์บอกซิลิค ไฮดรอกซิล อีเทอร์ เอมีน และกรดซัลโฟนิค ในรูปที่ 4.4 แสดงให้เห็นถึงโครงสร้างหลังจากปรับปรุงพื้นผิวกราฟีน และในตารางที่ 4.4 แสดงค่าพารามิเตอร์ต่าง ๆ หลังจากปรับปรุงพื้นผิวบนกราฟีนแล้ว ด้วยลักษณะที่ปรับปรุงพื้นด้วยการเพิ่มหมู่ฟังก์ชันที่ไม่ใช่การเจืออะตอมลงไปในโครงสร้างของกราฟีนทำให้ขนาดอะตอมมีผลไม่มากเนื่องจากลักษณะการปรับปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ฟังก์ชันจะไม่ได้ไปแทนที่ตำแหน่งอะตอมคาร์บอนบนโครงสร้างกราฟีนซึ่งแตกต่างกับการเจือที่จะไปแทนที่อะตอมคาร์บอน แต่ลักษณะการเข้ากันของกราฟีนกับหมู่ฟังก์ชันต่างหากที่มีความสำคัญจากค่าระยะพันธะสูงสุดต่ำสุดของอะตอมคาร์บอน โครงสร้างของ OH-G1 และ SO_3H-G1 มีการขยายและหดตัวของระยะพันธะอะตอมคาร์บอนหรือค่าระยะพันธะสูงสุดต่ำสุดมีค่าใกล้เคียงกันเทียบกับสองโครงสร้างที่เหลือ 1.42052-1.4341 Å กับ 1.40483-1.4297 Å ตามลำดับ ซึ่งข้อมูลเหล่านี้บ่งบอกถึงความเข้ากันของโครงสร้างที่ดี

ตารางที่ 4.4 ตารางแสดงผลของการคำนวณพื้นผิวกราฟีนที่ปรับปรุงพื้นผิว

	จำนวนอะตอม	เวลาที่ใช้ (ชั่วโมง)	Total energy (eV)	C-C min (Å)	C-C max (Å)	C-X min (Å)	C-X max (Å)
OH-G1	20	13.59	-175.09	1.4205	1.4341	1.5098	1.5098
O-G1	19	53.74	-170.65	1.4077	1.4983	1.3790	1.3951
NH_2-G1	20	18.11	-166.99	1.3967	1.4464	1.5020	1.5024
SO_3H-G1	22	18.11	-176.29	1.4048	1.4297	1.7684	1.7966

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

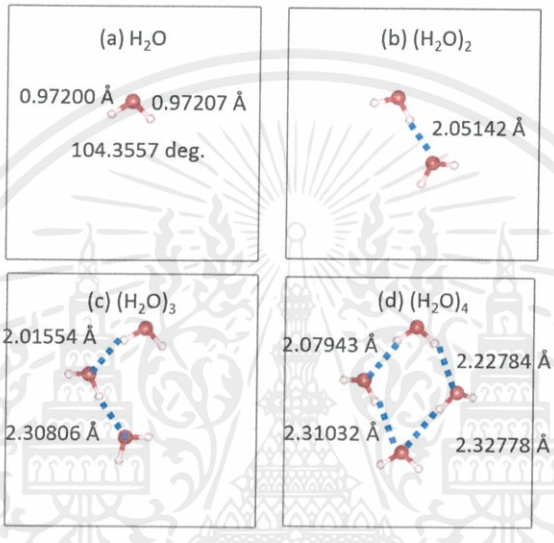


รูปที่ 4.4 ระบบโครงสร้างของกราฟีนที่เพิ่มหมู่ฟังก์ชัน (a) ไฮดรอกซิล (b) อีเทอร์ (c) เอมีน และ (d) กรดซัลโฟนิค

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

4.1.3 โครงสร้างโมเลกุลน้ำ

สำหรับโครงสร้างของโมเลกุลที่จะมานำคำนวณต่อจะแสดงอยู่รูปที่ 4.5 และค่าพลังงานและความยาวพันธะจะแสดงอยู่ที่ตารางที่ 4.5 จากข้อมูลทั้งหมดน้ำที่คำนวณในกล่องสุญญาณนั้นจัดเรียงตัวกันแบบเครือข่ายพันธะไฮโดรเจน มีการเกาะเกี่ยวของพันธะระหว่างออกซิเจนและไฮโดรเจน พลังงานรวมของแต่ละระบบจะเพิ่มขึ้นตามจำนวนอะตอมในโครงสร้าง ระยะห่างของพันธะไฮโดรเจนจะเฉลี่ยอยู่ที่ 2.2 Å โดยรวมแล้วโครงสร้างเหล่านี้จะเป็นโครงสร้างสำหรับการดูดซับของน้ำในลำดับถัดไปว่าจะเลือกใช้โมเลกุลน้ำเท่าไหร่



รูปที่ 4.5 ระบบโครงสร้างของโมเลกุลน้ำที่จำนวนต่างกัน (a) ระบบน้ำหนึ่งโมเลกุล (b) ระบบน้ำสองโมเลกุล (c) ระบบน้ำสามโมเลกุล (d) ระบบน้ำสี่โมเลกุล

ตารางที่ 4.5 ตารางแสดงผลของการคำนวณโมเลกุลน้ำ

	จำนวนอะตอม		เวลาที่ใช้	Total energy	O-H max (Å)	O-H min (Å)
	O	H	(นาที)	(eV)		
H_2O	1	2	7.37	-14.21	0.9716	0.9716
$(H_2O)_2$	2	4	24.18	-28.64	0.9781	0.9709
$(H_2O)_3$	3	6	32.95	-43.05	0.9796	0.9704
$(H_2O)_4$	4	8	46.04	-57.86	1.0031	0.9747

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

4.2 สมบัติทางโครงสร้างและพลังงานการดูดซับ

4.2.1 ผลของจำนวนชั้นกราฟีน

เนื่องจากเกิดข้อผิดพลาดในการออกแบบระบบ ข้อจำกัดทางทรัพยากร และระยะเวลาที่มีจำกัดทำให้ข้อมูลสมบัติทางโครงสร้างของ H_2O/G2 และ H_2O/G3 นั้นไม่สามารถคำนวณสำเร็จตามที่ตั้งเป้าหมายไว้

4.2.2 ผลของการเจืออะตอมต่างชนิด

โครงสร้างการดูดซับน้ำบนพื้นผิวกราฟีนนั้น คือ การนำโครงสร้างของโมเลกุลน้ำมาวางไว้ด้านบนกราฟีน สำหรับการศึกษาวิจัยนี้ในการคำนวณพลังงานดูดซับในส่วนของระบบจำลองโครงสร้างกราฟีนที่เจืออะตอมต่างชนิดจำเป็นต้องกำหนดตำแหน่งการดูดซับของน้ำในการคำนวณที่เหมาะสมโดยเลือกจากค่าพลังงานการดูดซับที่ต่ำที่สุด โดยในรูปที่ 4.6 จะแสดงระบบทั้งสามตำแหน่งการดูดซับของน้ำ ได้แก่ Top-site Bridge-site และ Hole-site สำหรับการคำนวณบนพริสทีนกราฟีน ในตารางที่ 4.6 ทั้งสามตำแหน่งมีตำแหน่งของ Hole-site จะเป็นตำแหน่งที่มีพลังงานการดูดซับที่ต่ำสุดโดยกำหนดให้ E_{ad} คือ พลังงานการดูดซับ C-H1 คือ ระยะห่างจากอะตอม H กับอะตอมที่ใกล้ที่สุด C-H2 คือ ระยะห่างจากอะตอม H กับอะตอมที่ไกลที่สุด O-H1 และ O-H2 คือ ระยะห่างของพันธะของโมเลกุลน้ำ ดังนั้นในการศึกษาวิจัยนี้จะเลือก Hole-site คำนวณระบบจำลองที่เหลือที่พลังงานการดูดซับที่ -0.11937 eV

ตารางที่ 4.6 ตารางแสดงผลของค่าพลังงานการดูดซับสำหรับการเลือกตำแหน่งการดูดซับของน้ำ

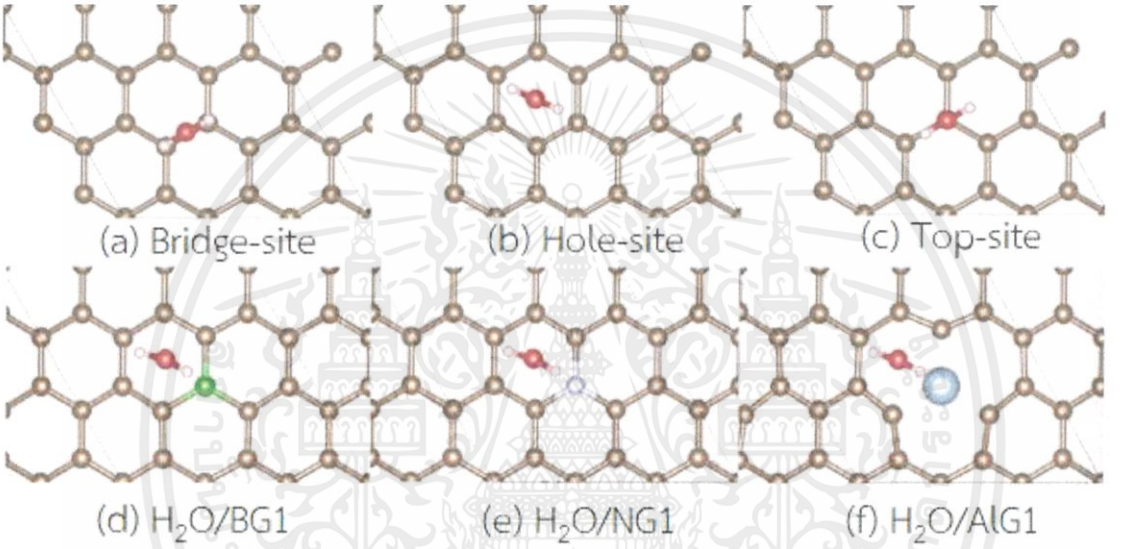
Configuration	E_{ad} (eV)	C-C min (Å)	C-C max (Å)	C-H1 (Å)	C-H2 (Å)	O-H1 (Å)	O-H2 (Å)
Top-site	-0.1018	1.4241	1.4243	2.0125	2.0555	0.9715	0.9716
Bridge-site	-0.1081	1.4241	1.4243	1.9135	1.9205	0.9717	0.9717
Hole-site	-0.1193	1.4241	1.4243	1.8990	1.8991	0.9715	0.9716

หลังจากที่เลือกตำแหน่งการดูดซับของน้ำเรียบร้อยนำข้อมูลทั้งหมดมาเปรียบเทียบพลังงานการดูดซับของน้ำบนกราฟีนรูปแบบต่าง ๆ ในรูปที่ 4.6 จะให้ H_2O/G1 คือ พริสทีนกราฟีน H_2O/NG1 H_2O/AlG1 H_2O/BG1 คือ กราฟีนที่เจืออะตอมโนโตรเจน อลูมีเนียม และโบรอนตามลำดับ ตารางที่ 4.7 แสดงค่าพลังงานดูดซับของแต่ละระบบโดยจะสังเกตได้ว่าในระบบเจืออะตอมบนกราฟีนอลูมิเนียมจะมีค่าพลังงานดูดซับที่ต่ำที่สุดที่พลังงานการดูดซับ -2.77152 eV

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.7 พลังงานการดูดซับและพารามิเตอร์ของความยาวพันธะต่าง ๆ

Configuration	E_{ad} (eV)	C-C min (Å)	C-C max (Å)	C-H1 (Å)	C-H2 (Å)	O-H1 (Å)	O-H2 (Å)
H_2O/G1	-0.1193	1.4241	1.4243	1.8990	1.8991	0.9715	0.9716
H_2O/NG1	-0.1017	1.4207	1.4344	2.6519	2.7334	0.9718	0.9729
H_2O/AlG1	-2.7715	1.4042	1.4353	2.7361	4.4756	0.9718	0.9726
H_2O/BG1	-0.1372	1.4039	1.4333	2.6258	2.7041	0.9723	0.9734



รูปที่ 4.6 ระบบของการเลือกตำแหน่งการดูดซับน้ำและระบบการเจือธาตุต่างชนิด (a) ตำแหน่งการวางตัวของน้ำที่ Bridge-site (b) Hole-site (c) Top-site (d) ระบบโครงสร้างการดูดซับของน้ำตำแหน่งวางตัวแบบ Hole-site บนกราฟีนที่เจืออะตอมโบรอน (e) ไนโตรเจน (f) อลูมิเนียม

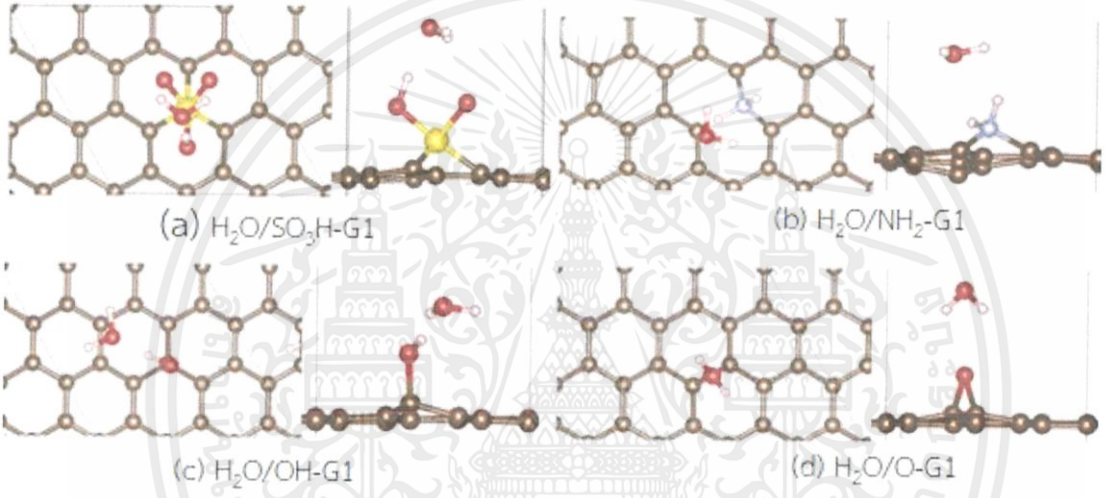
4.2.3 ผลการปรับปรุงโครงสร้างพื้นผิวกราฟีน

ตารางที่ 4.8 แสดงค่าพลังงานดูดซับของการปรับปรุงพื้นผิวของกราฟีนกำหนดให้ H_2O/OH-G1 H_2O/O-G1 H_2O/NH_2-G1 และ H_2O/SO_3H-G1 คือ โครงสร้างการดูดซับของโมเลกุลน้ำบนกราฟีนที่ปรับปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ฟังก์ชันไฮดรอกซิล อีเทอร์ เอมีน และกรดซัลโฟนิคตาม รูปที่ 4.7 สำหรับ O-H คือ ค่าระยะพันธะของอะตอมออกซิเจนในโมเลกุลน้ำกับอะตอมไฮโดรเจนบนหมู่ฟังก์ชันที่ใกล้ที่สุด แต่เฉพาะระบบของ O-G1 ที่ O-H คือ ค่าระยะห่างพันธะของอะตอมออกซิเจนบนหมู่ฟังก์ชันกับอะตอมไฮโดรเจนในโมเลกุลน้ำ ซึ่งระบบของ H_2O/OH-G1 และ H_2O/SO_3H-G1 มีค่า O-H และพลังงานการดูดซับที่ใกล้เคียงกันดังนี้ 1.7729 1.7853 Å และ -0.3861 -0.3885 eV ตามลำดับ ซึ่งสองระบบนี้เหมาะสมสำหรับการดูดซับน้ำ โดยสองระบบนี้จะไปพิจารณาต่อใน bader charge

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.8 พลังงานการดูดซับและพารามิเตอร์ของความยาวพันธะต่าง ๆ

Configuration	E_{ad} (eV)	C-C min (Å)	C-C max (Å)	O-H (Å)	O-H1 (Å)	O-H2 (Å)
H_2O/OH-G1	-0.3861	1.4067	1.5022	1.7729	0.9729	0.9755
H_2O/O-G1	-0.0937	1.3983	1.5077	2.2768	0.9727	0.9736
H_2O/NH_2-G1	-0.1016	1.3953	1.4541	2.3512	0.9712	0.9733
H_2O/SO_3H-G1	-0.3885	1.4046	1.4298	1.7853	0.9767	0.9769



รูปที่ 4.7 ระบบโครงสร้างการดูดซับของการปรับปรุงพื้นผิวกราฟีนด้วยหมู่ฟังก์ชัน (a) กรดซัลโฟนิค (b) เอมีน (c) ไฮดรอกซิล และ (d) อีเทอร์

4.3 สมบัติทางโครงสร้างการกระจายตัวของประจุ

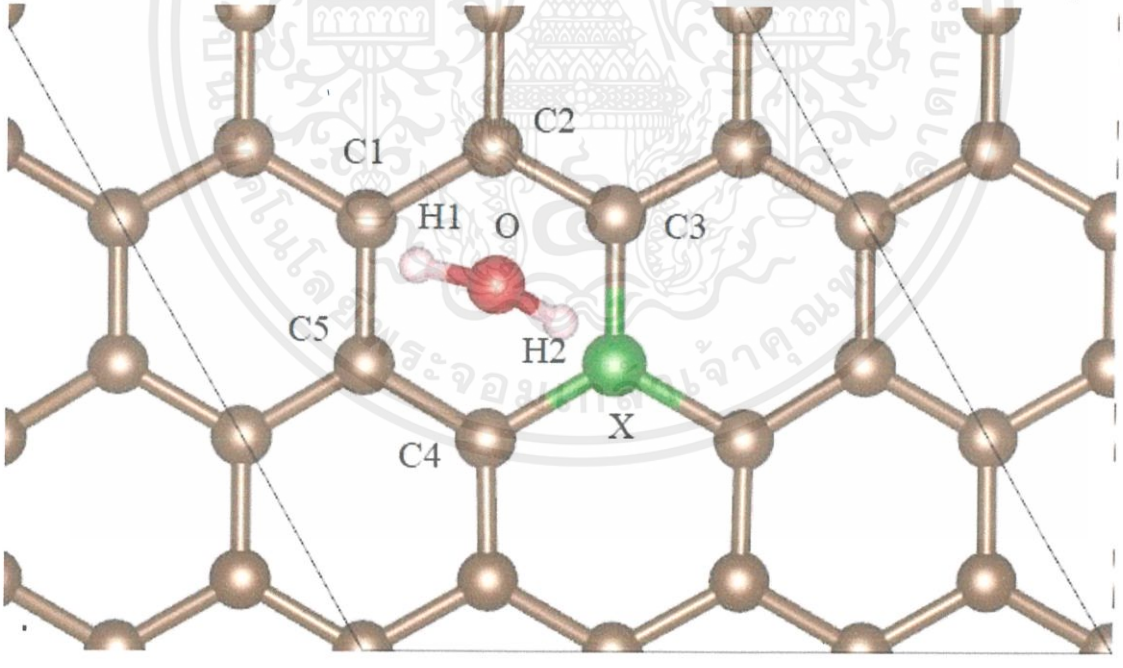
ในการคำนวณ Bader charge จะแบ่งการคำนวณสองแบบคือ (1) แบบ 6 อะตอม (2) แบบเฉพาะอะตอม โดยแบบแรกจะอยู่ในหมวดของการเจือและพริสทีนกราฟีน แบบหลังจะอยู่ในหมวดการเพิ่มหมู่ฟังก์ชัน ในรูปที่ 4.8 และ 4.9 จะแสดงถึงตำแหน่งอะตอมที่จะคำนวณที่คาร์บอน 5 อะตอมและอะตอม X 1 อะตอมกับแบบตำแหน่งเฉพาะอะตอมตามลำดับ ในตารางที่ 4.9 และ 4.10 แสดงให้เห็น Bader charge แต่ละตัวของทั้งระบบที่กำหนดไว้ โดยคิดจากไฟล์ ACF ข้อมูลในไฟล์นั้นสนใจอยู่เพียงค่า Charge ที่จะมาคำนวณในสมการต่อไปนี้

$$\text{Bader} = Z - \text{core} - \text{charge}$$

โดยให้ bader คือ bader charge, Z คือ เลขอะตอม, core คือ เลขจำนวน core electron และ charge คือ ค่า charge ในไฟล์ ACF

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ซึ่งค่าต่าง ๆ ที่อยู่ในตารางบ่งบอกถึงการมีอยู่ของอิเล็กตรอน ณ โครงสร้างนั้น ๆ ถ้าค่าของ bader มีค่าเป็นบวกบ่งบอกถึงแนวโน้มการสูญเสียอิเล็กตรอน ถ้าค่าเป็นลบบ่งบอกถึงแนวโน้มการรับอิเล็กตรอน เริ่มที่ตารางที่ 4.8 แถวของ X และ H2 เป็นตำแหน่งที่อะตอมที่เจือกับโฮโดรเจนในโมเลกุลน้ำเป็นตำแหน่งสำคัญสำหรับการดูดซับ แถวของ C1-C5 เป็นตำแหน่งของอะตอมคาร์บอนรอบข้างบ่งบอกถึงผลข้างเคียงหลังจากการดูดซับซึ่ง แถว X ระบบ BG1 มีค่าบวกสูงที่สุดบ่งบอกถึงแนวโน้มที่จะสูญเสียอิเล็กตรอนซึ่งไม่เหมาะสมสำหรับการดูดซับน้ำ ระบบ NG1 มีค่าลบสูงสุดบ่งบอกถึงแนวโน้มที่จะรับอิเล็กตรอนจาก H2 C3 C4 ซึ่งเหมาะสมสำหรับการดูดซับน้ำรองลงมา คือ ระบบ AlG1 และ G1 ตามลำดับ สำหรับตารางที่ 4.9 เนื่องจากตำแหน่งอะตอมนั้นไม่ตรงกันจึงจำเป็นต้องระบุตำแหน่งแต่ละตอมเฉพาะซึ่ง C1-C4 เป็นตัวแทนของอะตอมคาร์บอนของกราฟีน O1 H1 และ H2 เป็นตัวแทนของโมเลกุลน้ำ และตำแหน่งที่เหลือจะระบุเฉพาะของแต่ละระบบโดยเริ่มจากระบบ NH_2-G1 ตำแหน่ง O1 กับ H3 เป็นตำแหน่งที่เหมาะสมที่สุดสำหรับแลกเปลี่ยนอิเล็กตรอนซึ่งค่า bader charge เท่ากับ -1.15348 และ 0.44118 ระบบ H_2O/O-G1 ที่ตำแหน่ง O2 กับ H2 มีค่าเท่ากับ -0.7063 และ 0.6034 ระบบ H_2O/SO_3H-G1 ที่ตำแหน่ง O1 กับ H3 มีค่าเท่ากับ -1.2368 และ 0.6433 และระบบ H_2O/OH-G1 ที่ตำแหน่ง O1 กับ H3 มีค่าเท่ากับ -1.1724 และ 0.6154 ตามลำดับพบว่าระบบ H_2O/SO_3H-G1 มีค่า charge ตำแหน่งขนาดเยอะที่สุดหมายถึงความแตกต่างของค่า bader charge สองตำแหน่งนี้มีปริมาณที่กว้างบ่งบอกถึงการสูญเสียและรับอิเล็กตรอนที่สูง



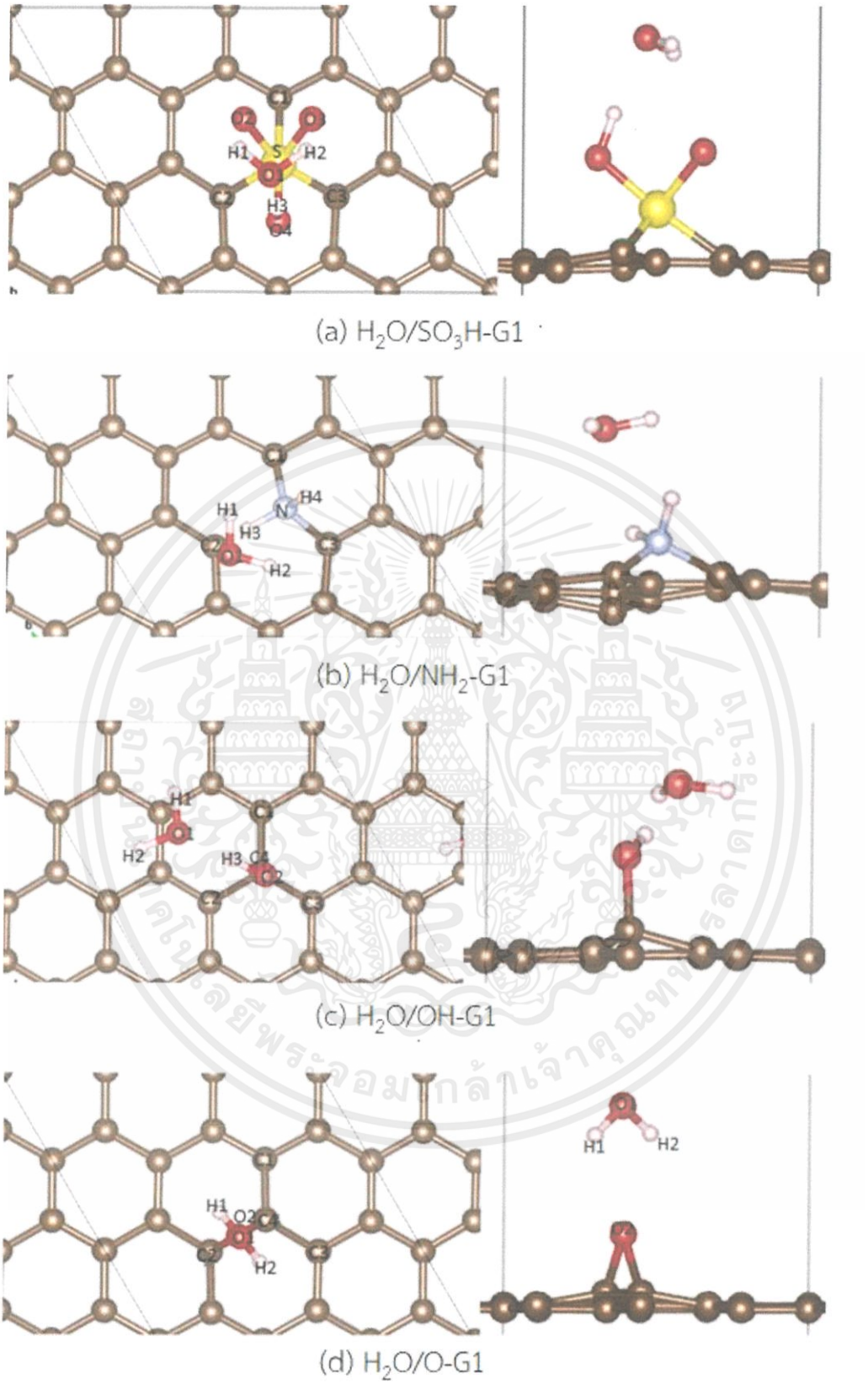
รูปที่ 4.8 ตำแหน่งอะตอมของ Bader charge สำหรับพริสทีนกราฟีนแล้วกราฟีนที่เจือธาตุ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.9 Bader charge ของ (1) พริสทีนกราฟีนแล้วกราฟีนที่เจือธาตุ (2) ไนโตรเจน (3) โบรอน และ (4) อลูมิเนียม

	H_2O/G1	H_2O/NG1	H_2O/BG1	H_2O/AlG1
X	-0.1041	-1.2716	1.8831	-0.4959
C1	-0.0815	0.0392	-0.0608	-2.1188
C2	-0.2725	-0.0924	-0.1118	-1.9641
C3	0.0657	0.2323	-0.4919	-2.4526
C4	-0.1039	0.2331	-0.4859	-2.4438
C5	0.0451	-0.0962	-0.1150	-1.9636
O	-0.8110	-1.0544	-1.1621	-2.9573
H1	0.7015	0.6333	0.5961	0.4608
H2	0.6740	0.6044	0.5685	0.4716

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 4.9 ตำแหน่งอะตอมของ Bader charge สำหรับกราฟีนที่มีหมู่ฟังก์ชันเกาะอยู่ (a) กรดซัลโฟนิค (b) เอมีน (c) ไฮดรอกซิล และ (d) อีเทอร์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.10 แสดงค่า Bader charge ของแต่ละตอมในโครงสร้างกราฟีนที่มีการปรับปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ฟังก์ชัน (1) กรดซัลโฟนิค (2) เอมีน (3) ไฮดรอกซิล และ (4) อีเทอร์

	H_2O/SO_3H-G1	H_2O/NH_2-G1	H_2O/OH-G1	H_2O/O-G1
C1	-0.0872	0.1581	0.0056	0.0358
C2	-0.1123	-0.1994	-0.0544	0.1888
C3	-0.1417	0.1349	-0.0629	0.0368
C4	-	-	0.4636	0.3485
O1	-1.2368	-1.1534	-1.1724	-1.1136
O2	-0.4992	-	-1.0683	-0.7063
O3	-0.5055	-	-	-
O4	-1.0551	-	-	-
H1	0.6119	0.5836	0.6113	0.5066
H2	0.6574	0.5929	0.5944	0.6034
H3	0.6433	0.4411	0.6154	-
H4	-	0.3774	-	-
S	9.5112	-	-	-
N	-	-0.9514	-	-

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 5
สรุปผลการศึกษาวิจัยและแนวทางการพัฒนา

5.1 สรุปผลการศึกษาวิจัย

การคำนวณพลังงานดูดซับของโมเลกุลน้ำบนกราฟีนในรูปแบบต่าง ๆ ทั้งหมดแปดระบบ คือ G1 NG1 BG1 AlG1 O-G1 OH-G1 NH_2G1 และ SO_3HG1 โดยพิจารณาจากพลังงานดูดซับและ bader charge อันดับแรกจะพิจารณาจากผลของการเจือธาตุต่าง ๆ โดยระยะพันธะของอะตอมคาร์บอนในกราฟีนมีแนวโน้มตามขนาดอะตอมที่ถูกเจือลงไปจากน้อยไปหามาก NG1>BG1>AlG1 บ่งบอกได้ว่า NG1 มีความเข้ากันได้ดีกับกราฟีนในทางกลับกันในพลังงานการดูดซับพบว่า AlG1 มีค่าต่ำที่สุดที่ -2.77152 eV แต่ใน Bader charge พบว่า NG1 เป็นระบบที่มีแนวโน้มการรับอิเล็กตรอนจากน้ำได้ดีที่สุดรองลงมา คือ ระบบ AlG1 และ BG1 สำหรับการปรับปรุงพื้นผิวด้วยหมู่ฟังก์ชันระยะห่างระหว่างอะตอมออกซิเจนกับไฮโดรเจนของกราฟีนและน้ำตามลำดับพบว่าระบบของ OH-G1 และ SO_3HG1 มีค่าน้อยที่สุดที่ 1.7729 และ 1.7853 Å ตามลำดับบ่งบอกถึงการดูดซับที่ดีซึ่งสอดคล้องกับค่าพลังงานดูดซับที่ -0.3861 และ -0.3885 ตามลำดับ ทั้งสองระบบมีผลที่ใกล้เคียงกันมากจึงจะใช้ Bader charge อธิบายแนวโน้มของการสูญเสียและรับอิเล็กตรอนว่ากราฟีนที่มีกรดซัลโฟนิคนั้นเหมาะสมกับการดูดซับน้ำที่สุดเพราะว่าด้วยโครงสร้างที่มีอะตอมออกซิเจนที่มีบทบาทของการดูดโปรตรอนของน้ำซึ่งมีความเป็นไปได้มากกว่ากราฟีนแบบอื่น

5.2 แนวทางการพัฒนาการศึกษาวิจัย

(1) เนื่องจากการศึกษาวิจัยนี้คำนวณระบบกราฟีนที่มีขนาดใหญ่จึงใช้เวลาในการคำนวณค่อนข้างนานทำให้ช่วงเวลาทดสอบระบบกินเวลามากเกินความจำเป็น ถ้ามีระยะเวลามากกว่านี้จะสามารถคำนวณชั้นกราฟีนที่มีมากกว่าหนึ่งชั้นได้

(2) สำหรับบุคคลท่านอื่นที่สนใจคำนวณโครงสร้างที่คล้ายคลึงกับกราฟีนสามารถนำพารามิเตอร์ต่าง ๆ ที่ทดสอบระบบมาคำนวณต่อเพื่อลดการใช้เวลาในการคำนวณลงได้

(3) นอกเหนือจากการเจืออะตอมไนโตรเจน โบรอน อลูมิเนียมหรือการเพิ่มหมู่ฟังก์ชันตามการศึกษาวิจัยนี้ หากบุคคลท่านอื่นสนใจปรับแต่งแบบอื่นก็สามารถใช้โครงสร้างที่คำนวณเสร็จเรียบร้อยไปพัฒนาต่อได้

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บรรณานุกรม

[1] G. KOROTCENKOV, CHEMICAL SESSORS : FUNDAMENTALS OF SENSING MATERIALS, New York: Momemtum Press, 2010.

[2] N. Yamazoe, "Toward innovations of gas sensor technology," *SCIENCE DIRECT,* pp. 2-14, 2005.

[3] E. U. Park, C. I. Byung, J. C. Kim, B. S. Woo, Y. G. Kim, Y. Choi และ S. W. Lee, "Correlation between the sensitivity and the hysteresis of humiditysensors based on graphene oxides," *Sensors and Actuators B: Chemical,* pp. 255-262, 2017.

[4] K. Osborne, "VIII-Metals-G-Electroplating," [ออนไลน์]. Available: https://nzic.org.nz/ChemProcesses/metals/8G.pdf.

[5] G. Dodd, M. Adam และ Bhaskar Mookerji, "Crystal Structure of Graphite, Graphene and Silicon," Physics for Solid State Applications, 2009.

[6] G. Stefan , A. Jens, E. Stephan และ K. Helge , "A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional," *AIP The journal of Chemical Physics,* p. 132, 2010.

[7] H. Inc, "HYGROMETRIX," 2004. [ออนไลน์]. Available: http://pasternack.ucdavis.edu/files/6213/7271/8210/hyd151_read13.pdf.

[8] T. Mauricio, B.-M. R. Andres, C.-D. Jessica, L.-U. Florentino, V.-C. I. Yadira, R.-M. J. Fernando, E. L. Ana , M.-S. Emilio, C.-M. G. Abraham, C. Jean-Christophe และ T. Humberto, "Graphene and graphite nanoribbons: Morphology,," *ScienceDirect,* pp. 351-372, 2010.

[9] F. Hamid, W. Rahman และ H. N. Mohd, "Humidity Sensors Principle, Mechanism, and Fabrication," *MDPI SENSOR,* pp. 7881-7939, 2014.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

[10] Z. Liu, Y. Zhang, B. Wang, H. Cheng, X. Cheng และ Z. Huang, "DFT study on Al-doped defective graphene towards," *ScienceDirect Volume 427 Part A,* pp. 547-553, 2018.

[11] P. U. Eun, I. C. Byung, K. C. Jong, W. Sang-Bong, K. Yong-Gyoo, C. Yoonseuk และ L. Sang-Wook, "Correlation between the sensitivity and the hysteresis of humiditysensors based on graphene oxides," *Sensors and Actuators B: Chemical,* pp. 255-262, 2018.

[12] D. W. Boukhvalov และ M. I. Katsnelson, "Modeling of Graphite Oxide," *JACE ARTICLES,* 2008.

[13] N. M. Harrison, "An Introduction to Density Functional," Department of Chemistry, Imperial College of Science Technology and CLRC, Daresbury Laboratory, Daresbury, Warrington, WA4 4AD, London.

[14] M. P. Allen, "Introduction to Molecular Dynamics Simulation," ใน *John von Neumann Institute for Computing,* Norbert Attig, Kurt Binder, Helmut Grubm¨ uller, Kurt Kremer (Eds.),, 2004, pp. 1-28.

[15] V. K. R.K. Nahar, "Ionic doping and inversion of the characteristic of thin film porous Al2O3 humidity sensor," *Sensors and Actuators B 46,* pp. 35-41, 1998.

[16] N. P. A. M. R. A. a. B. P. Indrani Choudhuri, "B–N Graphene: Highly Sensitive and Selective Gas Sensor," *THE JOURNAL OF PHYSICAL CEMISTRY.*

[17] Z. L. Hongwei Gao, "DFT study of NO adsorption on pristine graphene," *ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY,* pp. 13082-13091, 2017.

[18] B. P. Vinayan, "Heteroatom-Doped Graphene-Based Hybrid Materials for Hydrogen Energy Conversion," *Recent Advances in Graphene Research,* pp. 3-6, 2016.

[19] B. P. Laszlo, I. N. Peter และ L. Philippe, "Graphene: Nanoscale processing and recent applications," *Nanoscale,* เล่มที่ 4, pp. 1824-1839, 2011.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

[20] W. T. S. C. W. C. a. G. H. Andri Arnaldsson, "Code: Bader Charge Analysis," Henkelman Group, Texas, 2017.

[21] Z. Y. W. B. C. H. C. X. H. Z. Liu Zhong, "DFT study on Al-doped defective graphene towards adsorption of elemental mercury," *APSUSC,* 2017.

[22] K. Y. X. X. S. W. L. S. M. T. M. S. D. Hengchang Bi, "Ultrahigh humidity sensitivity of graphene oxide," *SCIENTEFIC REPORT,* 2013.

[23] J. L. L.-L. L. Z. W. Jateesh Bandaru, "Adsorption H2O, H2, O2, CO, NO, and CO2 on graphene/g-C3N4 nanocomposite investigated by density functional theory," *APSUSC,* 2017.

[24] G. Y. R. L. &. T. P. Zijie Zhu, "Photopatternable PEDOT:PSS/PEG hybrid thin film with moisture stability and sensitivity," *Nature,* 2017.

[25] D. W. X. Z. G. D. Y. Z. Dongzhi Zhang, "High-Performance QCM Humidity Sensor Based on Graphene Oxide/Tin Oxide/Polyaniline Ternary Nanocomposite Prepared by In-Situ Oxidative Polymerization Method," *Sensors and Actuators B,* 2018.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ประวัติผู้เขียน

ชื่อ-สกุล (ภาษาไทย)	นายกิตติคุณ มากสุข
ชื่อ-สกุล (ภาษาอังกฤษ)	Mr. Kittikun Maksuk
วัน-เดือน-ปีเกิด	3 พฤษภาคม พ.ศ. 2539
สถานที่เกิด	ปทุมธานี
ที่อยู่ปัจจุบัน	19 (513/547) มบ. รัตนโกสินทร์ 200 ปี ม.2 ถ.รังสิต-ปทุมธานี 14 ซอย 11/3 ต.ประชาธิปัตย์ อ.ธัญบุรี จ.ปทุมธานี 12130
ประวัติการศึกษา	ปีการศึกษา 2556 สำเร็จการศึกษาในระดับชั้นมัธยมศึกษา ที่โรงเรียนสายปัญญารังสิต ปทุมธานี สายการเรียน วิทยาศาสตร์-คณิตศาสตร์ ปีการศึกษา 2560 สาเร็จการศึกษาในระดับชั้นปริญญาตรี วิศวกรรมศาสตร์บัณฑิต (วศ.บ.) วิทยาลัยนาโนเทคโนโลยีพระจอมเกล้าลาดกระบัง สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้