

## โครงการ

# การเรียนการสอนเพื่อเสริมประสบการณ์

ชื่อโครงการ การศึกษาผลจากความเครียดเฉือนที่มีต่อคุณสมบัติทางไฟฟ้าของโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว ด้วยทฤษฎีฟังก์ชันแนลความหนาแน่น

IMPACT OF SHEAR STRAIN ON ELECTRONIC PROPERTIES OF MONOLAYER BORON NITRIDE BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY

ชื่อนิสิต นายจิรภัทร ช่างกล่อม

เลขประจำตัว 6033405723

ภาควิชา ฟิสิกส์

ปีการศึกษา 2563

คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ชื่อโครงการ : การศึกษาผลจากความเครียดเฉือนที่มีต่อคุณสมบัติทางไฟฟ้าของโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว ด้วย  
ทฤษฎีฟังก์ชันแนลความหนาแน่น

ชื่อนิติ : นายจิรภัทร ช่างกล่อม

รหัสประจำตัวนิติ : 6033405723

ภาควิชา : ฟิสิกส์

ปีการศึกษา : 2563

อาจารย์ที่ปรึกษาโครงการ : รองศาสตราจารย์ ดร.ธิตี บวรรัตนรักษ์

อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม : อาจารย์ ดร.อรรณพ เอกธาราวงศ์

---

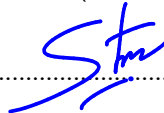
โครงการนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต ภาควิชาฟิสิกส์ คณะ  
วิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ภาคการศึกษาปลาย ปีการศึกษา 2563

คณะกรรมการได้รับรองรายงานฉบับนี้แล้ว



.....ประธานกรรมการ

(รองศาสตราจารย์ ดร.นคร ไพศาลกิตติสกุล)



.....กรรมการ

(รองศาสตราจารย์ ดร.สกุลธรรม เสนาะหิมพ์)



.....อาจารย์ที่ปรึกษา

(รองศาสตราจารย์ ดร.ธิตี บวรรัตนรักษ์)

**อรรณพ เอกธารวงศ์**

.....อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

(อาจารย์ ดร.อรรณพ เอกธาราวงศ์)

**ชื่อโครงการ :** การศึกษาผลจากความเครียดเฉือนที่มีต่อคุณสมบัติทางไฟฟ้าของโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว ด้วย  
ทฤษฎีฟังก์ชันแนลความหนาแน่น

**ชื่อนิติ :** นายจิรภัทร ช่างกล่อม **รหัสประจำตัวนิติ :** 6033405723

**ภาควิชา :** ฟิสิกส์

**ปีการศึกษา :** 2563

**อาจารย์ที่ปรึกษาโครงการ :** รองศาสตราจารย์ ดร.ธิตี บวรรัตนารักษ์

**อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม :** อาจารย์ ดร.อรรรณพ เอกธาราวงศ์

---

## บทคัดย่อ

โบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN) เป็นวัสดุสองมิติที่มีความเป็นฉนวนสูงมาก กล่าวคือมีความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (band gap) ที่ค่อนข้างกว้าง ซึ่งในงานนี้พบว่าที่อุณหภูมิ 0 K ในสภาวะปกติที่ไม่มีผลของความเครียดมากระทำ ช่องว่างแถบพลังงานของ h-BN จะเป็นแบบ direct โดยที่จุดสูงสุดของแถบเวเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำกระแสจะอยู่ที่ตำแหน่ง K ในโซนบริลลวนที่หนึ่งและมีค่าอยู่ที่ 4.67 eV ด้วยการคำนวณจากทฤษฎีฟังก์ชันแนลความหนาแน่น และจากการพิจารณาโครงสร้างแถบพลังงานและความหนาแน่นสถานะ (density of states) พบว่าความเครียดมีผลต่อคุณสมบัติทางไฟฟ้าของโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว ซึ่งพิจารณาความเครียดทั้งสองแกนที่ตั้งฉากกันบนระนาบวัสดุ (biaxial strain) โดยมีแนวโน้มที่ความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานจะมีค่าน้อยลง หรืออาจกล่าวได้ว่าผลของความเครียดทำให้ h-BN ชั้นเดียวมีความสามารถในการนำไฟฟ้าที่ดีขึ้น กรณีที่เพิ่มความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัด (compressive) ไปเรื่อย ๆ พบว่า จุดสูงสุดของแถบเวเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำกระแสแบบ direct ตำแหน่ง  $\Gamma$  นั้นมีแนวโน้มที่จะเคลื่อนตัวเข้าหากันแต่ที่ตำแหน่ง K มีแนวโน้มเคลื่อนตัวออกจากกัน ในขณะที่กรณีที่เพิ่มความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง (tensile) มีแนวโน้มเคลื่อนตัวเข้าหากันทั้งสองตำแหน่ง นอกจากนี้พบว่าที่ความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึงประมาณ 19 % หรือมากกว่า ช่องว่างแถบพลังงานของ h-BN จะเปลี่ยนจากแบบ direct ที่ตำแหน่ง K สู่แบบ indirect โดยที่จุดสูงสุดของแถบเวเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำกระแสจะอยู่ที่ตำแหน่ง K และ  $\Gamma$  ตามลำดับ แต่ถ้าเพิ่มความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดไปเรื่อย ๆ พบว่า ในช่วงของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดที่มากกว่า 0 % เล็กน้อยช่องว่างแถบพลังงานแบบ direct ที่ตำแหน่ง K ของ h-BN จะเปลี่ยนเป็นแบบ indirect ที่ตำแหน่ง K และ  $\Gamma$  อย่างไรก็ตาม ที่ความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดมากกว่า 19 % โดยประมาณ ช่องว่างแถบพลังงานของ h-BN จะเปลี่ยนเป็นแบบ direct อีกครั้งที่ตำแหน่ง  $\Gamma$

**คำสำคัญ :** ความเครียด, โบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN), ทฤษฎีฟังก์ชันแนลความหนาแน่น

**Title :** IMPACT OF SHEAR STRAIN ON ELECTRONIC PROPERTIES OF MONOLAYER BORON NITRIDE BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY

**Name :** Mr. Jiraphat Changklom **Student's code :** 6033405723

**Major :** Physics

**Academic year :** 2020

**Adviser :** Assoc. Prof. Dr. Thiti Bovornratanaraks

**Co-adviser :** Dr. Annop Ektarawong

---

## Abstract

Monolayer of hexagonal boron nitride (h-BN) is a 2-dimensional material. Because of its large electronic band gap, h-BN is classified as an electrical insulator. Through computational simulations, based on the density functional theory (DFT), monolayer h-BN is predicted at absolute zero and at zero strain to exhibit a direct band gap of 4.67 eV at the  $K$  point of the first Brillouin zone. Upon applying either biaxial compressive strain or biaxial tensile strain to monolayer h-BN, the band gap of the material decreases, as demonstrated by its electronic band structure and electronic density of states. In addition to the decrease in the value of electronic band gap, the simulations reveal that, as the degree of biaxial compressive strain increases to approximately 19 %, the electronic character of monolayer h-BN changes from a direct band gap at the  $K$  point to an indirect band gap, where the valence and conduction band edges are located at the  $K$  and  $\Gamma$  points, respectively. The DFT simulations further show that biaxial tensile strain ranging from 0 % - 1 % approximately, results in an electronic phase transition, as the material's direct band gap at the  $K$  point changes to an indirect band gap along the path  $K$ - $\Gamma$ . This is in analogy to that induced by the biaxial compressive strain. However, when the biaxial tensile strain of larger than  $\sim 19$  % is applied to monolayer h-BN, another electronic transition is predicted, and the material exhibits a direct band-gap character at the  $\Gamma$  point.

**Keyword :** strain, monolayer Boron Nitride (h-BN), Density Functional Theory

## กิตติกรรมประกาศ

โครงการวิจัย “การศึกษาผลจากความเครียดเรื้อรังที่มีต่อคุณสมบัติทางไฟฟ้าของโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว ด้วยทฤษฎีฟังก์ชันแนลความหนาแน่น” นี้ ไม่อาจสำเร็จลุล่วงไปได้เลยหากปราศจากความอนุเคราะห์ ความช่วยเหลือ และการสนับสนุนจากบุคคลมากมายหลายท่าน ซึ่งข้าพเจ้าผู้จัดทำโครงการรู้สึกซาบซึ้งใจเป็นอย่างยิ่ง

ขอขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร.ธิตี บวรรัตนารักษ์ ผู้เป็นอาจารย์ที่ปรึกษาโครงการ ที่แม้จะมีเวลาส่วนตัวเพียงน้อยนิดจากภาระรับผิดชอบมากมายก็ยังคอยให้ความกรุณาเอาใจใส่ ให้การสนับสนุน และให้คำปรึกษาเป็นอย่างดีมาโดยตลอด ไม่ว่าจะเป็นคำปรึกษาทางด้านวิชาการหรือปัญหาส่วนตัวเองก็ตาม อีกทั้งยังเป็นส่วนหนึ่งในแรงบันดาลใจที่ทำให้ข้าพเจ้าสนใจงานวิจัยทางด้านฟิสิกส์สสารควบแน่น จึงอยากจะกราบขอบพระคุณอาจารย์มา ณ ที่นี้

ขอขอบพระคุณ อาจารย์ ดร.อรรณพ เอกธาราวงค์ ผู้เป็นอาจารย์ที่ปรึกษาร่วมเป็นอย่างยิ่ง ขอขอบพระคุณในความกรุณาที่สละเวลาอันมีค่ามากมายเพื่อมาตรวจทานความถูกต้องในโครงการนี้อย่างถี่ถ้วน รวมถึงให้ความรู้และคำแนะนำอันประเมินค่ามิได้ต่อการทำงานวิจัยโครงการนี้ อีกทั้งยังคอยติดตามและกำหนดกรอบเวลาในการนำเสนอความคืบหน้าของงานมาโดยตลอด ข้าพเจ้ารู้สึกขอบพระคุณจากใจ

ขอขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร.อุดมศิลป์ ปิ่นสุข อาจารย์ผู้สอนรายวิชา 2304499 โครงการงานวิทยาศาสตร์ สำหรับการติดตามดูแลและให้คำแนะนำตลอดการทำงานวิจัยโครงการนี้

ขอขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร.นคร ไพศาลกิตติสกุล ที่ให้ความกรุณาสละเวลาส่วนตัวมาเป็นประธานกรรมการสอบ และรองศาสตราจารย์ ดร.สกุลธรรม เสนาะหิมพ์ ผู้เป็นกรรมการสอบ ขอขอบพระคุณอาจารย์ทั้งสองท่านสำหรับคำแนะนำต่าง ๆ ซึ่งเป็นส่วนสำคัญต่อการปรับปรุงเนื้อหาและความถูกต้องในงานวิจัยโครงการนี้

ขอขอบคุณ สมาชิกในกลุ่มวิจัย ECPRL นายสกันต์ คำแก้ว และโดยเฉพาะอย่างยิ่ง นายชญานนท์ อรรถปักษ์ ที่ให้ความช่วยเหลือในการทำงานวิจัยโครงการนี้เป็นอย่างดี ให้คำแนะนำและคำปรึกษาอันเป็นประโยชน์มากมาย อีกทั้งยังสละเวลาส่วนตัวมาช่วยตรวจสอบถูกต้องของงานวิจัยโครงการนี้ด้วย

ขอขอบพระคุณ ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย สำหรับทุนสนับสนุนการดำเนินโครงการนี้

สุดท้ายนี้ขอขอบคุณครอบครัวอันเป็นที่รักของข้าพเจ้า ขอขอบคุณคุณแม่ น้ำชาย และน้องชาย ที่คอยเป็นกำลังใจและให้การสนับสนุนเสมอมา ขอขอบคุณเพื่อน ๆ พี่ ๆ น้อง ๆ มากมาย ซึ่งเป็นการยากที่จะกล่าวถึงได้อย่างครบถ้วน ณ ที่นี้ ขอขอบคุณที่ให้การสนับสนุนกันมาตลอดจนกระทั่งทุกอย่างสามารถสำเร็จลุล่วงไปได้ ขอขอบคุณผู้มีส่วนเกี่ยวข้องอื่น ๆ ที่คอยเป็นกำลังใจ หรือให้การสนับสนุนแก่ข้าพเจ้าซึ่งอาจไม่ได้กล่าวถึงไว้ ณ ที่นี้ด้วย

หากมีความผิดพลาดประการใดยังคงหลงเหลืออยู่ในงานวิจัยโครงการนี้ ความผิดพลาดนั้นย่อมเกิดจากความสะเพร่าของข้าพเจ้าผู้จัดทำโครงการแต่เพียงผู้เดียว และหากว่างานวิจัยโครงการนี้สามารถเป็นประโยชน์ต่อไปได้ในทางใดทางหนึ่ง ความดีความชอบทั้งหมดถือเป็นของพวกเขาเหล่านั้นที่ข้าพเจ้าได้เอ่ยถึงทั้งสิ้น

นายจิรภัทร ช่างล้อม

นิสิตผู้จัดทำโครงการ

# สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อ (ภาษาไทย).....	ก
บทคัดย่อ (ภาษาอังกฤษ).....	ข
กิตติกรรมประกาศ .....	ค
สารบัญ .....	จ
สารบัญตาราง .....	ช
สารบัญรูปภาพ.....	ณ
บทที่ 1 .....	1
บทนำ.....	1
1.1 ความเป็นมาและมูลเหตุจูงใจในการเสนอโครงการ .....	1
1.1.1 วัสดุสองมิติ (two-dimensional materials).....	1
1.1.2 วัสดุสองมิติโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN).....	1
1.1.3 ความเค้นกับ h-BN .....	3
1.1.4 การสร้างแบบจำลองของระบบ .....	3
1.2 วัตถุประสงค์ของโครงการ .....	4
1.3 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ .....	4
1.3.1 ประโยชน์ต่อตัวนิสิตเอง .....	4
1.3.2 ประโยชน์ต่อผู้อื่น.....	4
บทที่ 2.....	5
ทฤษฎี.....	5
2.1 ทฤษฎีฟังก์ชันแนลความหนาแน่น .....	5
2.1.1 ทฤษฎีของโฮเซนเบิร์ก-โคห์น และสมการของโคห์ม-ชาม .....	6

2.1.2 พลังงานแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ (exchange-correlation energy).....	8
2.1.3 พลังงานคัทออฟ และปริภูมิส่วนกลับ .....	9
2.2 ความเค้น และความเครียด .....	11
2.2.1 ความเค้น (stress) .....	11
2.2.2 ความเครียด (strain).....	12
บทที่ 3.....	13
แผนการดำเนินการศึกษา.....	13
3.1 แผนการศึกษา.....	13
3.2 แผนการดำเนินงานและระยะเวลา .....	15
บทที่ 4.....	16
ผลและอภิปรายผลการศึกษา .....	16
4.1 การศึกษาโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN).....	16
4.1.1 เงื่อนไขการจำลองที่เหมาะสมของระบบ .....	16
4.1.1.1 พลังงานค่าคัทออฟ .....	17
4.1.1.2 จำนวนจุดในปริภูมิส่วนกลับ (k-point).....	19
4.1.1.3 ค่า lattice parameter c .....	20
4.1.1 ผลการจำลองโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN).....	23
4.1.1.2 การผ่อนคลายผลึก (relaxation).....	23
4.1.1.3 โครงสร้างแถบพลังงาน และช่องว่างแถบพลังงาน.....	24
4.2 ผลของความเครียดที่มีต่อคุณสมบัติทางไฟฟ้าของโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN).....	27
4.2.1 การให้ความเครียดแก่ระบบ .....	27
4.2.2 ผลของความเครียดที่มีต่อพลังงานรวมของระบบ .....	27
4.2.3 ผลของความเครียดต่อโครงสร้างแถบพลังงาน และความหนาแน่นสถานะ .....	29



4.2.3.1 แนวโน้มการเคลื่อนตัวของแถบพลังงาน .....	29
4.2.3.2 ผลของความเครียดที่มีต่อความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน .....	33
4.3 วิเคราะห์ผลของความเครียดที่มีต่อโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียวกับการประยุกต์ใช้ .....	38
บทที่ 5 .....	40
สรุปผลและข้อเสนอแนะ .....	40
5.1 สรุปผลการศึกษา .....	40
5.2 ข้อเสนอแนะ .....	41
บรรณานุกรม .....	42
ภาคผนวก .....	45

## สารบัญตาราง

หน้า

ตารางที่ 1 แสดงโครงสร้างหน่วยเซลล์ (primitive unit cell) เริ่มต้นของ hexagonal boron nitride (h-BN). 17	17
ตารางที่ 2 ตารางแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $ecutwfc$ (Ry) และ พลังงานรวมของระบบ (eV)..... 18	18
ตารางที่ 3 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างผลคูณของจำนวนจุดในปริภูมิส่วนกลับ และพลังงานรวมของระบบ (eV) 19	19
ตารางที่ 4 แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง ค่า lattice parameter $c$ (angstrom) กับพลังงานรวมของระบบ (eV) 21	21
ตารางที่ 5 แสดงโครงสร้างหน่วยเซลล์ (primitive unit cell) ที่เหมาะสมของ hexagonal boron nitride (h-BN)..... 22	22
ตารางที่ 6 แสดงโครงสร้างหน่วยเซลล์ (primitive unit cell) ที่เหมาะสมของ hexagonal boron nitride (h-BN) หลังจากผ่อนคลายแบบจำลองผลึกแล้ว..... 23	23
ตารางที่ 7 ตารางแสดงการเปรียบเทียบค่าความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานในงานวิจัยนี้ และงานวิจัยอื่น ๆ ทั้งแบบที่ใช้ DFT ในการคำนวณและแบบที่มาจากการทดลอง..... 25	25
ตารางที่ 8 แสดงความไม่เข้ากันของแลตทิซสำหรับวัสดุสองมิติอื่น ๆ เทียบกับโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN)... 38	38

# สารบัญรูปภาพ

หน้า

รูปที่ 1 โครงสร้างผลึกสามมิติของ h-BN ที่พบได้ทั่วไปในธรรมชาติ ซึ่งแสดงในหน่วยเซลล์ (primitive cell) .....	2
รูปที่ 2 โครงสร้างของ h-BN ชั้นเดียวจากมุมมองตามแนวแกน c .....	2
รูปที่ 3 แผนผังแสดงกระบวนการแก้สมการโคห์น-ชามเพื่อหาพลังงานรวมของระบบ .....	11
รูปที่ 4 แสดงค่าคู่เข้าของพลังงานรวมของระบบ (Ry) กับ $ecutwfc$ (Ry) , แสดงค่าการเปลี่ยนของพลังงานรวม (eV) สำหรับการเพิ่มค่า $ecutwfc$ (Ry) .....	18
รูปที่ 5 แสดงค่าคู่เข้าของพลังงานรวมของระบบ (Ry) กับ ค่าจำนวนจุด N ในปริภูมิส่วนกลับ, แสดงค่าการเปลี่ยนของพลังงานรวม (eV) สำหรับการเพิ่มค่าจำนวนจุดในปริภูมิส่วนกลับ N .....	20
รูปที่ 6 แสดงค่าคู่เข้าของพลังงานรวมของระบบ (Ry) กับ ค่า lattice parameter c (angstrom) , แสดงค่าการเปลี่ยนของพลังงานรวม (eV) สำหรับการเพิ่มค่า lattice parameter c (angstrom) .....	21
รูปที่ 7 แสดงโครงสร้างโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียวที่สร้างโดยนำผลึกสามมิติมาลดจำนวนชั้นลงทำให้ชั้นที่อยู่ติดกันห่างกันมาเกินพอจนเหมือนเป็นผิวชั้นเดียวแยกกันอยู่ .....	22
รูปที่ 8 จุดแลตทิซในปริภูมิส่วนกลับ (reciprocal space) ที่มีสมมาตรสูงของโครงสร้างผลึกแบบเฮกซะโกนอล (hexagonal) โนโซนบริลลูวีนที่หนึ่ง (first Brillouin zone) .....	24
รูปที่ 9 แสดงโครงสร้างแถบพลังงาน (band structure) และความหนาแน่นของสถานะ (density of states) ของโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN) ที่สภาวะปกติ .....	24
รูปที่ 10 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานรวมของระบบ (eV) กับความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัด (compressive strain) ค่าต่าง ๆ .....	27
รูปที่ 11 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานรวมของระบบ (eV) กับความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง (tensile strain) ค่าต่าง ๆ .....	28
รูปที่ 12 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานรวมของระบบ (eV) กับความเครียดค่าต่าง ๆ ตั้งแต่ -30 ถึง 30 % .....	28
รูปที่ 13 แสดงโครงสร้างแถบพลังงานของโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN) ที่ compressive strain 10 % และ 20 % เทียบกับสภาวะปกติซึ่งไม่มีความเครียดมากกระทำ (0 %) .....	29
รูปที่ 14 แสดงโครงสร้างแถบพลังงานของโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN) ที่ tensile strain 10 % และ 20 % เทียบกับสภาวะปกติซึ่งไม่มีความเครียดมากกระทำ (0 %) .....	30
รูปที่ 15 เปรียบเทียบระหว่างโครงสร้างแถบพลังงานที่ความเครียด 2 % ของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดและความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง .....	31

รูปที่ 16 เปรียบเทียบระหว่างโครงสร้างแถบพลังงานที่ความเครียด 8 % ของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดและความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง.....	31
รูปที่ 17 เปรียบเทียบระหว่างโครงสร้างแถบพลังงานที่ความเครียด 14 % ของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดและความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง.....	32
รูปที่ 18 เปรียบเทียบระหว่างโครงสร้างแถบพลังงานที่ความเครียด 20 % ของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดและความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง.....	32
รูปที่ 19 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (eV) กับความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัด (ค่าบวก) และความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง (ค่าลบ) (%).....	33
รูปที่ 20 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างพลังงาน (eV) ของ CBM และ VBM ที่ความเครียด (%) ค่าต่าง ๆ.....	34
รูปที่ 21 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (eV) แบบ direct ที่ตำแหน่ง K และความเครียด (%).....	35
รูปที่ 22 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (eV) แบบ direct ที่ตำแหน่ง $\Gamma$ และความเครียด (%).....	35
รูปที่ 23 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (eV) แบบ indirect.....	36
รูปที่ 24 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (eV) แบบ indirect.....	36
รูปที่ 25 กราฟเปรียบเทียบของความสัมพันธ์ระหว่างความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (eV) ทั้งแบบ direct เมื่อจุดสูงสุดของแถบเวเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำกระแสอยู่ที่ตำแหน่ง K , $\Gamma$ และแบบ indirect (%).....	37
รูปที่ 26 ภาคผนวกรูปที่ 1 .....	45
รูปที่ 27 ภาคผนวกรูปที่ 2 .....	46
รูปที่ 28 ภาคผนวกรูปที่ 3 .....	46
รูปที่ 29 ภาคผนวกรูปที่ 4 .....	47
รูปที่ 30 ภาคผนวกรูปที่ 5 .....	47
รูปที่ 31 ภาคผนวกรูปที่ 6 .....	48
รูปที่ 32 ภาคผนวกรูปที่ 7 .....	48
รูปที่ 33 ภาคผนวกรูปที่ 8 .....	49
รูปที่ 34 ภาคผนวกรูปที่ 9 .....	49
รูปที่ 35 ภาคผนวกรูปที่ 10 .....	50
รูปที่ 36 ภาคผนวกรูปที่ 11 .....	50
รูปที่ 37 ภาคผนวกรูปที่ 12 .....	51

รูปที่ 38 ภาคผนวกรูปที่ 13 .....	51
รูปที่ 39 ภาคผนวกรูปที่ 14 .....	52
รูปที่ 40 ภาคผนวกรูปที่ 15 .....	53

# บทที่ 1

## บทนำ

### 1.1 ความเป็นมาและมูลเหตุจูงใจในการเสนอโครงการ

#### 1.1.1 วัสดุสองมิติ (two-dimensional materials)

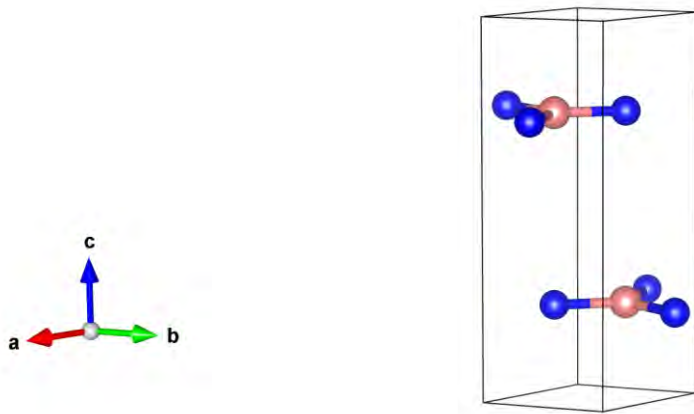
ในปี 2010 นักฟิสิกส์ชาวรัสเซียที่ทำงานอยู่ในสหราชอาณาจักรสองท่านได้รับรางวัลโนเบลสาขาฟิสิกส์จากการศึกษาวัสดุที่ชื่อกราฟีน (graphene) [1] และสามารถสังเคราะห์ได้สำเร็จเป็นครั้งแรกด้วยวิธีการที่แสนจะง่ายตายอย่าง scotch tape method ซึ่งกราฟีนนี้เองเป็นวัสดุที่เรียกว่า วัสดุสองมิติ (two-dimensional materials / monolayer materials) เพราะเป็นวัสดุที่มีชั้นอะตอมเรียงตัวกันเพียงหนึ่งชั้นเท่านั้น ในกรณีของกราฟีนคือวัสดุชั้นเดียวซึ่งสังเคราะห์ได้จากการลอกผลึกวัสดุสามมิติคือกราไฟต์ (graphite) ซึ่งเป็นโครงสร้างหรืออัญรูปหนึ่งของคาร์บอน เมื่อลอกออกจนเหลือเพียงหนึ่งชั้นอะตอมแล้วทำให้มีคุณสมบัติอันน่าประหลาดใจมากมายซึ่งแตกต่างไปจากวัสดุสามมิติเดิม(กราไฟต์)ที่เคยมีอยู่ ไม่ว่าจะเป็นคุณสมบัติทางไฟฟ้า ความแข็งแรง และความยืดหยุ่น รวมไปถึงความโปร่งใสของวัสดุ ด้วยคุณสมบัติพิเศษเหล่านี้ทำให้วัสดุสองมิติซึ่งมีความบางในระดับอะตอมส่งผลต่อความก้าวหน้าทางด้านนาโนเทคโนโลยีเป็นอย่างมากในปัจจุบัน

แต่วัสดุสองมิติไม่ได้มีเพียงกราฟีนเท่านั้น ยังมีวัสดุสองมิติอีกหลายชนิดที่ได้รับความสนใจในปัจจุบันไม่แพ้กัน และมีการศึกษาคุณสมบัติของพวกอย่างต่อเนื่อง อาทิ Transition Metal Dichalcogenides หรือ TMD ซึ่งมีหลายชนิดด้วยกัน ไม่ว่าจะเป็น  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{WSe}_2$  เป็นต้น นอกจากนี้ยังมีวัสดุสองมิติอย่าง Phosphorene และ “hexagonal Boron Nitride” (h-BN) หรือ monolayer Boron Nitride” ซึ่งเป็นวัสดุที่จะทำการศึกษาในงานวิจัยโครงการนี้ และยังมีอีกหลายชนิดที่ไม่ได้กล่าวถึงในที่นี้

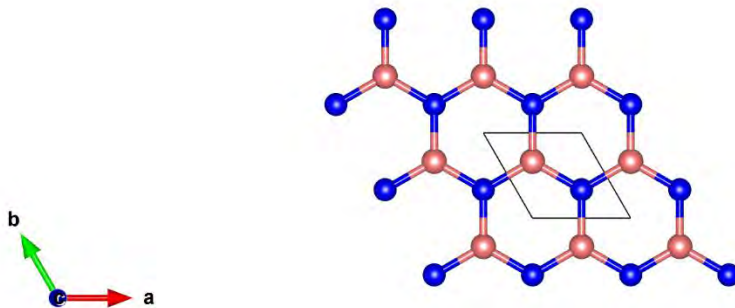
#### 1.1.2 วัสดุสองมิติโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN)

hexagonal Boron Nitride (h-BN) มีโครงสร้างเป็นโครงข่ายรังผึ้ง (honeycomb) เหมือนกันกับกราไฟต์ซึ่งเป็นวัสดุสามมิติของกราฟีน (bulk materials) โดยในแต่ละชั้นจะยึดกันด้วยพันธะโควาเลนต์ และระหว่างชั้นยึดกันด้วยแรงแวนเดอร์วาลส์อ่อน ๆ เท่านั้นดังรูปที่ 1 และเมื่อทำให้กลายเป็นวัสดุสองมิติโดยการลอกหรือลดจำนวนชั้นอะตอมลงจนกลายเป็นโครงสร้างแบบชั้นเดียวแล้วก็มีลักษณะคล้ายคลึงกับกราฟีนอีกเช่นเดิมดังรูปที่ 2 ทำให้บางครั้งเรียกว่าเป็น กราฟีนขาว (white graphene) ซึ่งมีคุณสมบัติที่น่าสนใจหลายประการ [2] อย่างการที่เป็นฉนวนที่ดีมากแม้จะมีโครงสร้างที่คล้ายกราฟีนซึ่งเป็นตัวนำไฟฟ้าที่ดีมากก็ตาม อีกทั้งไม่ไวต่อปฏิกิริยาทาง

เคมี และทนความร้อนได้สูง เป็นต้น ในช่วงเวลาหลายปีที่ผ่านมา h-BN ชั้นเดียวถูกนำไปห่อหุ้มหรือประกบกับวัสดุสองมิติอีกหลายประเภทเพื่อทำเป็นโครงสร้างหลายชั้น (heterostructure) จนได้คุณสมบัติใหม่ ๆ ที่น่าสนใจ หรือเพื่อปรับปรุงคุณสมบัติเดิมของวัสดุนั้น ๆ เพื่อการใช้งานที่หลากหลายมากขึ้น เช่น การทำโครงสร้าง heterostructure กับกราฟีน (graphene) [25] เป็นต้น



รูปที่ 1 โครงสร้างผลึกสามมิติของ h-BN ที่พบได้ทั่วไปในธรรมชาติ ซึ่งแสดงในหน่วยเซลล์ (primitive cell) โดยสีชมพูแสดงถึงอะตอมของโบรอน สีน้ำเงินแสดงถึงอะตอมของไนโตรเจน



รูปที่ 2 โครงสร้างของ h-BN ชั้นเดียวจากมุมมองตามแนวแกน c

### 1.1.3 ความเค้นกับ h-BN

หนึ่งในวิธีการปรับปรุงคุณสมบัติของวัสดุคือการทำให้โครงสร้างที่เรียกว่า heterostructure ซึ่งอาจทำได้โดยการนำวัสดุชนิดเดียวกัน สองชนิด หรือหลายชนิดมาสร้างพันธะเข้าด้วยกัน ในกรณีของวัสดุสองมิติอย่างโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN) ถูกนำไปพัฒนาคุณภาพวัสดุด้วยวิธีการนี้อยู่บ่อยครั้ง และการศึกษาคุณสมบัติที่เกิดขึ้นเมื่อประกบโครงสร้างของวัสดุสองมิติเหล่านี้เข้าด้วยกันเป็นสิ่งที่ได้รับความสนใจในปัจจุบันอย่างที่กำลังกล่าวไปแล้ว

อย่างไรก็ดี ในการประกบโครงสร้างของวัสดุนั้นมีปัญหาอย่างหนึ่งคือ ความไม่เข้ากันของแลตทิซ (lattice mismatch) เกิดขึ้น เนื่องจากวัสดุแต่ละชนิดมีค่า lattice parameter ที่ไม่เท่ากัน ทำให้การนำมาสร้างพันธะกันจำเป็นจะต้องมีแรงมากระทำจนเกิดเป็นความเค้น (stress) ต่อโครงสร้างวัสดุ เพื่อดึงหรืออัดให้วัสดุสามารถสร้างพันธะกันได้ ซึ่งแน่นอนว่าจะทำให้วัสดุมีความเครียด (strain) เกิดขึ้นตามความไม่เข้ากันนั่นเอง

แต่เมื่อวัสดุมีความเครียดเกิดขึ้นในโครงสร้างก็อาจทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของคุณสมบัติไปจากเดิมด้วย เช่นอาจเกิด piezoelectric effect [3] ได้ หรือเกิดการเปลี่ยนแปลงคุณสมบัติทางไฟฟ้าอื่น ๆ เป็นต้น h-BN เป็นวัสดุที่ไม่มีสมมาตรศูนย์กลาง อีกทั้งยังไม่นำไฟฟ้าและมีความแข็งแรงมากพอสมควร หากทราบว่าความเค้นมีผลต่อคุณสมบัติทางไฟฟ้าอย่างไร ก็จะทำให้สามารถนำไปประยุกต์ใช้งานได้อีกมากมาย เช่น อาจนำไปสร้างวัสดุหรืออุปกรณ์ไฟฟ้าที่สามารถเปลี่ยนแปลงคุณสมบัติได้เมื่อมีการยืดหรือหด หรือเพื่อนำไปทำเป็นโครงสร้าง heterostructure อย่างที่ได้กล่าวไป เป็นต้น

### 1.1.4 การสร้างแบบจำลองของระบบ

วัสดุสองมิติ h-BN ชั้นเดียวเป็นวัสดุที่มีสถานะเป็นของแข็ง ซึ่งเป็นระบบที่มีอะตอมเป็นจำนวนมากในช่วงอันดับของเลขอวกาศคือช่วง  $10^{23}$  อะตอม การจะศึกษาคุณสมบัติต่าง ๆ ของวัสดุเช่นนี้อาจทำได้ด้วยการทดลอง แต่การทดลองในปัจจุบันหลายครั้งไม่สามารถทำได้โดยง่าย หรือหากทำได้โดยง่ายเช่นวิธี scotch tape method ก็อาจได้ปริมาณวัสดุที่ไม่เพียงพอต่อการใช้งาน การศึกษาวิจัย หรืออยู่ในลักษณะที่ไม่เหมาะสมต่อการนำไปวิเคราะห์และศึกษาคุณสมบัติต่าง ๆ ซึ่งถ้าต้องการใช้งานเป็นจำนวนมากเพื่อนำไปศึกษาก็ยังมีค่าใช้จ่ายมากขึ้น และต้องใช้ทรัพยากรการผลิตที่ขึ้นสูงตามไปด้วย

การจำลองจึงเป็นวิธีการหนึ่งที่สามารถช่วยแก้ปัญหาดังกล่าวได้ ในช่วงเวลาหลายสิบปีที่ผ่านมา ทฤษฎีฟังก์ชันแนลความหนาแน่น (Density Functional Theory) หรือ DFT [4] ถือเป็นทฤษฎีหนึ่งที่ได้รับนิยามและน่าเชื่อถือเป็นอย่างมากในการศึกษาและคำนวณระบบของแข็งหรือระบบที่มีอนุภาคจำนวนมากและนำไปสร้างเป็นแบบจำลองได้ดี ซึ่งทฤษฎีดังกล่าวได้รับรางวัลโนเบลในปี 1998 และจะขอกกล่าวถึงรายละเอียดของทฤษฎี



ในลำดับต่อ ๆ ไป ด้วยเหตุนี้เองในงานวิจัยโครงการนี้จึงสนใจที่จะศึกษาผลของความเครียดเฉือนที่มีต่อคุณสมบัติทางไฟฟ้าของ h-BN ชั้นเดียวผ่านการคำนวณด้วย DFT

## 1.2 วัตถุประสงค์ของโครงการ

1) เพื่อศึกษาแนวโน้มและการเปลี่ยนแปลงคุณสมบัติทางไฟฟ้าของโบรอนไนไตรด์ (h-BN) ชั้นเดียวที่เกิดขึ้นภายใต้ความเครียดเฉือนค่าต่าง ๆ ผ่านการพิจารณาโครงสร้างแถบพลังงาน (band structure) ความหนาแน่นของสถานะ (density of state) และความแตกต่างระหว่างผลของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง (tensile strain) และความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัด (compressive strain) ซึ่งคำนวณได้จาก DFT

## 1.3 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

### 1.3.1 ประโยชน์ต่อตัวนิสิตเอง

1) เพื่อศึกษาและเข้าใจคุณสมบัติทางไฟฟ้าของโบรอนไนไตรด์ (h-BN) แบบชั้นเดียวที่เกิดขึ้นภายใต้ความเครียดเฉือน

2) เพื่อเสริมสร้างเข้าใจเกี่ยวกับฟิสิกส์ของสสารควบแน่น และทฤษฎีฟังก์ชันแนลความหนาแน่น (DFT) และการสร้างแบบจำลองเพื่อทำงานวิจัยทางด้านฟิสิกส์ของสสารควบแน่น

### 1.3.2 ประโยชน์ต่อผู้อื่น

1) เพื่อศึกษาและเข้าใจคุณสมบัติทางไฟฟ้าของโบรอนไนไตรด์ (BN) แบบชั้นเดียวที่เกิดขึ้นภายใต้ความเครียดเฉือน ทำให้สามารถนำไปประยุกต์และใช้งานได้อย่างเหมาะสมกับลักษณะงาน ซึ่งอาจนำไปสู่การพัฒนาเทคโนโลยีเกี่ยวกับวัสดุสองมิติได้ต่อไปในอนาคต

## บทที่ 2

### ทฤษฎี

#### 2.1 ทฤษฎีฟังก์ชันแนลความหนาแน่น [5]

ในช่วงเวลาที่ผ่านมาแม้เป็นที่รู้กันว่าสามารถคำนวณหาพลังงานของระบบที่มีอนุภาคเป็นจำนวนมาก (many body system) ได้จากการแก้สมการของชโรดิงเจอร์ (Schrodinger equation) แต่เมื่อพิจารณาฮามิลโตเนียน (Hamiltonian) ของระบบที่ประกอบไปด้วยนิวเคลียสจำนวน  $M$  นิวเคลียสและอิเล็กตรอนจำนวน  $N$  ตัว จากนั้นนำไปแทนลงในสมการของชโรดิงเจอร์ซึ่งมีฟังก์ชันคลื่นที่ขึ้นอยู่กับตำแหน่งของอนุภาคทุกตัวในระบบ จะพบว่าการแก้สมการของชโรดิงเจอร์เพื่อให้ได้ผลเฉลยที่แม่นยำตรง (exact solution) นั้นเป็นเรื่องที่ทำได้ยากมาก

หนึ่งในวิธีการที่จะช่วยให้การแก้สมการของชโรดิงเจอร์ของระบบซึ่งประกอบไปด้วยอนุภาคจำนวนมาก ดังที่กล่าวไปแล้วข้างต้นให้เป็นไปได้โดยง่ายขึ้นก็คือการประมาณ ซึ่งทำได้โดยแยกการคำนวณระหว่างส่วนของอิเล็กตรอนและนิวเคลียสออกจากกัน (การแก้สมการของชโรดิงเจอร์แต่เดิมนั้นต้องพิจารณาฮามิลโตเนียนทั้งส่วนของอิเล็กตรอนและนิวเคลียส) แต่เพราะนิวเคลียสถือว่ามีความเร็วช้ามากเมื่อเทียบกับอิเล็กตรอน จึงสามารถประมาณได้ว่านิวเคลียสนั้นหยุดนิ่ง โดยเรียกการประมาณที่อาศัยหลักการเช่นนี้ว่า การประมาณของบอร์น-ออปเพนไฮเมอร์ (Born-Oppenheimer approximation) ซึ่งทำให้พลังงานในส่วนของนิวเคลียสมีค่าคงที่ และฮามิลโตเนียนของระบบก็จะลดลง ดังสมการที่ 2.1

$$\hat{H}_{elec} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i^N \nabla_i^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \sum_{I=1}^M \frac{Z_I e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i^N \sum_{j>i}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.1)$$

ถึงกระนั้นก็ยังไม่ได้ทำให้การคำนวณสามารถทำได้โดยง่ายมากขึ้นนัก เพราะฟังก์ชันคลื่นยังคงขึ้นอยู่กับตำแหน่งของอิเล็กตรอนทุกตัวในระบบอยู่ดี ซึ่งอิเล็กตรอนแต่ละตัวสามารถเคลื่อนที่ไปได้ทั้ง 3 พิกัด (coordinate) ดังสมการที่ 2.2 ทำให้มีตัวแปรที่ต้องแก้เพื่อหาคำตอบของสมการถึง  $3N$  ตัวแปรด้วยกัน ซึ่งในภาพรวมของสมการก็ยังคงมีความซับซ้อนเช่นเดิม

$$\hat{H}_{elec}\psi_{elec}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = E_{elec}\psi_{elec}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (2.2)$$

แต่หลังจากนั้นก็มียุทธวิธีที่เรียกว่า ยุทธวิธีฟังก์ชันแนลความหนาแน่น (Density Functional Theory) หรือ DFT เกิดขึ้นและสามารถแก้ปัญหาดังกล่าวได้ โดยยุทธวิธีนี้สามารถหาพลังงานที่สถานะพื้น (ground state energy) ของระบบอิเล็กตรอน N ตัวได้ จากการมองว่าพลังงานรวมของระบบเป็นฟังก์ชันแนลที่ขึ้นอยู่กับความหนาแน่นของอิเล็กตรอน (electron density) ซึ่งความหนาแน่นดังกล่าวจะเป็นฟังก์ชันของตำแหน่งต่าง ๆ ในระบบจึงทำให้ตัวแปรลดลงเหลือเพียง 3 ตัวแปร โดยยุทธวิธีนี้อาศัยแนวคิดหลัก ๆ จากยุทธวิธีของโฮเฮนเบิร์ก-โคห์น (Hohenberg-Kohn theorem) และสมการของโคห์น-ชาม (Kohn-Sham equation)

### 2.1.1 ยุทธวิธีของโฮเฮนเบิร์ก-โคห์น [6] และสมการของโคห์น-ชาม [7]

ยุทธวิธีของโฮเฮนเบิร์ก-โคห์นมีอยู่สองยุทธวิธีคือ

**ยุทธวิธีที่ 1** กล่าวว่า พลังงานที่สถานะพื้นจากสมการของชโรดิงเจอร์จะเป็นฟังก์ชันแนลเฉพาะของความหนาแน่นอิเล็กตรอน และสำหรับระบบใด ๆ ที่อนุภาคมีอันตรกิริยาต่อกันภายใต้ศักย์ภายนอก (external potential) และศักย์ภายนอกนั้นสามารถคำนวณได้จากความหนาแน่นของอนุภาคมูลฐานในระบบ ซึ่งคือความหนาแน่นของอิเล็กตรอน หมายความว่า ‘ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนค่าใด ๆ จะสามารถให้ค่าพลังงานที่สถานะพื้นออกมาได้เพียงหนึ่งค่าเท่านั้น’

**ยุทธวิธีที่ 2** กล่าวว่า ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนที่ทำให้พลังงานของระบบมีค่าต่ำสุด ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนค่านี้จะเป็นความหนาแน่นที่แท้จริงของระบบ ซึ่งสอดคล้องกับผลเฉลยจากสมการของชโรดิงเจอร์ ต่อมาโคห์นและชามอาศัยยุทธวิธีดังกล่าวและเขียนกระจายพลังงานรวมของระบบได้ดังสมการที่ 2.3 โดยพจน์ของพลังงาน  $E[n(r)]$  จะเป็นฟังก์ชันแนลกับความหนาแน่นของอิเล็กตรอน  $n(r)$

$$E[n(\vec{r})] = T_s[n(\vec{r})] + U[n(\vec{r})] + E_{xc}[n(\vec{r})] \quad (2.3)$$

เมื่อ  $T_s$  คือ พลังงานจลน์ของอิเล็กตรอนที่ไม่มีอันตรกิริยาต่อกันในระบบ

และ  $U$  คือ พลังงานศักย์ส่วนที่มาจากอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนกับอิเล็กตรอน และพลังงานศักย์อันเกิดจากอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนกับนิวเคลียส

และ  $E_{xc}$  คือ พลังงานแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ (exchange-correlation) ของอิเล็กตรอนในระบบ ซึ่งเป็นพจน์ที่ต้องใช้การประมาณ โดยปัจจุบันไม่มีค่าตายตัวที่เป็นสากลแต่จะมีค่าประมาณที่เรียกว่าฟังก์ชันแนล (functional) มากมายซึ่งถูกพัฒนาขึ้นเพื่อใช้กับงานที่เหมาะสมแตกต่างกันไป

จากนั้นโคห์นและชามก็ใช้หลักการการแปรผัน (variational principle) ในการแก้สมการ ซึ่งสมการที่ได้นั้นมีรูปแบบที่ค่อนข้างคล้ายคลึงกับสมการของชโรดิงเจอร์ของระบบหลายอนุภาคที่ไม่มีอันตรกิริยาต่อกัน และเรียกสมการนี้ว่า สมการโคห์น-ชาม (Kohn-Sham equation) ซึ่งเป็นไปตาม ดังสมการ 2.4

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{eff}(\vec{r})\right]\psi_i = \epsilon_i\psi_i(\vec{r}) \quad (2.4)$$

เมื่อ  $\psi$  คือ Kohn-Sham orbital ซึ่งมีรูปแบบในการใช้คำนวณที่คล้ายคลึงกับฟังก์ชันคลื่นในสมการของชโรดิงเจอร์ แต่ก็ไม่ใช่ฟังก์ชันคลื่นแบบในสมการของชโรดิงเจอร์

และ  $V_{eff}$  คือ ศักย์ยังผล (effective potential) ซึ่งศักย์ยังผลสามารถเขียนกระจายได้ ดังสมการ 2.5

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + V_H[n] + V_{xc}[n] \quad (2.5)$$

เมื่อ  $V_{ext}$  คือ ศักย์ภายนอกอันเนื่องมาจากศักย์คูโลมบ์ของนิวเคลียส

$V_H$  คือ ศักย์ของฮาร์ทรี (Hartree potential) ซึ่งเป็นศักย์ไฟฟ้าของอิเล็กตรอนกับอิเล็กตรอนซึ่งขึ้นกับฟังก์ชันความหนาแน่นของอิเล็กตรอน แต่ยังไม่ใช่อันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนด้วยกัน เพียงแต่เป็นพลังงานศักย์ไฟฟ้าของคูโลมบ์ตามกลศาสตร์ดั้งเดิม (classical mechanic)

และ  $V_{xc}$  คือ ศักย์แลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ (exchange-correlation) ของอิเล็กตรอนในระบบที่ขึ้นกับความหนาแน่นของอิเล็กตรอนโดยรวมเอาผลทางควอนตัมทั้งหมดไว้ในนี้

## 2.1.2 พลังงานแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ (exchange-correlation energy)

พลังงานแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ (exchange-correlation energy) ดังที่กล่าวไปแล้วก่อนหน้านี้ คือพลังงานอันเนื่องมาจากการรวมผลทางควอนตัมซึ่งกล่าวได้ว่าเป็นผลอันเนื่องมาจากสปินของอิเล็กตรอน อิเล็กตรอนซึ่งมีสถานะของสปินเหมือนกันจะอยู่ในออร์บิทัลที่แตกต่างกันตามหลักกีดกันของเพาลี (Pauli exclusion principle) กล่าวโดยสังเขปคือ จะมีแรงผลักระหว่างอิเล็กตรอนที่มีสปินเหมือนกันให้เคลื่อนที่ออกจากกันเรียกว่า exchange และอิเล็กตรอนที่มีสปินตรงข้ามกันสามารถอยู่ในออร์บิทัลเดียวกันได้ด้วยแรงดึงดูดบางอย่างที่เรียกว่า correlation ซึ่งพลังงานที่ทำให้เกิดแรงดังกล่าวนี้คือ พลังงานแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ (exchange-correlation energy) ซึ่งมีผลต่อความหนาแน่นของอิเล็กตรอนในแต่ละบริเวณของระบบ

ซึ่งค่าพลังงานแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ (exchange-correlation energy) นี้เองยังไม่มีค่าตายตัวที่เป็นสากลจึงต้องใช้การประมาณเข้าช่วย โดยการประมาณในที่นี้มีหลัก ๆ ด้วยกันสองรูปแบบคือ

### 1) การประมาณแบบความหนาแน่นเฉพาะที่ (Local Density Approximation : LDA) [7]

เป็นการประมาณที่กำหนดให้พลังงานแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ (exchange-correlation energy) ของแต่ละตำแหน่งมีค่าเท่ากับพลังงานแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ (exchange-correlation energy) ของระบบที่ทราบผลเฉลยแม่นยำตรงจากความหนาแน่นอิเล็กตรอนบริเวณนั้น ๆ ซึ่งระบบที่สามารถทราบค่าผลเฉลยแม่นยำตรงดังกล่าวได้ก็คือ ระบบของอิเล็กตรอนแก๊สที่มีความหนาแน่นสม่ำเสมอ (uniform electron gas) โดยมีพลังงานแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ (exchange-correlation energy) ดังสมการ 2.6

$$E_{xc}^{LDA} [n(\vec{r})] = \int n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}^{homo} n(\vec{r}) d^3r \quad (2.6)$$

เมื่อ  $\varepsilon_{xc}^{homo}$  คือ พลังงานแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ (exchange-correlation energy) ต่ออนุภาคอิเล็กตรอนแก๊สที่มีความหนาแน่นสม่ำเสมอ

### 2) การประมาณแบบผลต่างทั่วไป (Generalized Gradient Approximation : GGA) [8]

เป็นการประมาณที่พัฒนาจากการประมาณแบบความหนาแน่นเฉพาะที่ (LDA) โดยพิจารณาอนุพันธ์ของความหนาแน่นอิเล็กตรอนเพิ่มเข้าไปด้วย โดยมีพลังงานแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ (exchange-correlation energy) ดังสมการ 2.7

$$E_{xc}^{GGA} [n(\vec{r})] = \int n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}^{GGA}(n(\vec{r}), \nabla n(\vec{r})) d^3r \quad (2.7)$$

ซึ่ง  $\varepsilon_{xc}^{GGA}(n(\vec{r}), \nabla n(\vec{r}))$  เป็นฟังก์ชันแนลที่มีหลายรูปแบบ โดยในโครงการนี้จะเลือกใช้ Perdew-Burke-Emzerhof functional (PBE) [9] ซึ่งเหมาะกับการศึกษาเกี่ยวกับอันตรกิริยาของโมเลกุลกับผิวโลหะ

### 2.1.3 พลังงานคัทออฟ และปริภูมิส่วนกลับ

ตามทฤษฎีบทของบรอก (Bloch's theorem) จะสามารถแสดงพลังงานได้ดังสมการ 2.8

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k} + \vec{G}) \quad (2.8)$$

เมื่อ  $\vec{G}$  คือ แลตทิซเวกเตอร์ในปริภูมิส่วนกลับ (reciprocal lattice vector)

ซึ่งขอบเขตในการพิจารณาค่า  $\vec{G}$  จะขึ้นอยู่กับสิ่งที่เรียกว่าพลังงานคัทออฟ (cutoff energy :  $E_{cut}$ ) ดังสมการ 2.9

$$E_{cut} = \frac{\hbar^2 \vec{G}_{max}^2}{2m} \quad (2.9)$$

สำหรับผลึกของแข็งซึ่งมีความซ้ำเป็นคาบสามารถเขียน kohn-sham orbital ในรูปของผลรวมเซตฐานคลื่นระนาบได้ ดังสมการที่ 2.10

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{\vec{G}}(\vec{k}) e^{i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} \quad (2.10)$$

เมื่อ  $\vec{k}$  คือ เวกเตอร์คลื่น และด้วยความเป็นคาบตามทฤษฎีดังกล่าวจึงแสดงได้

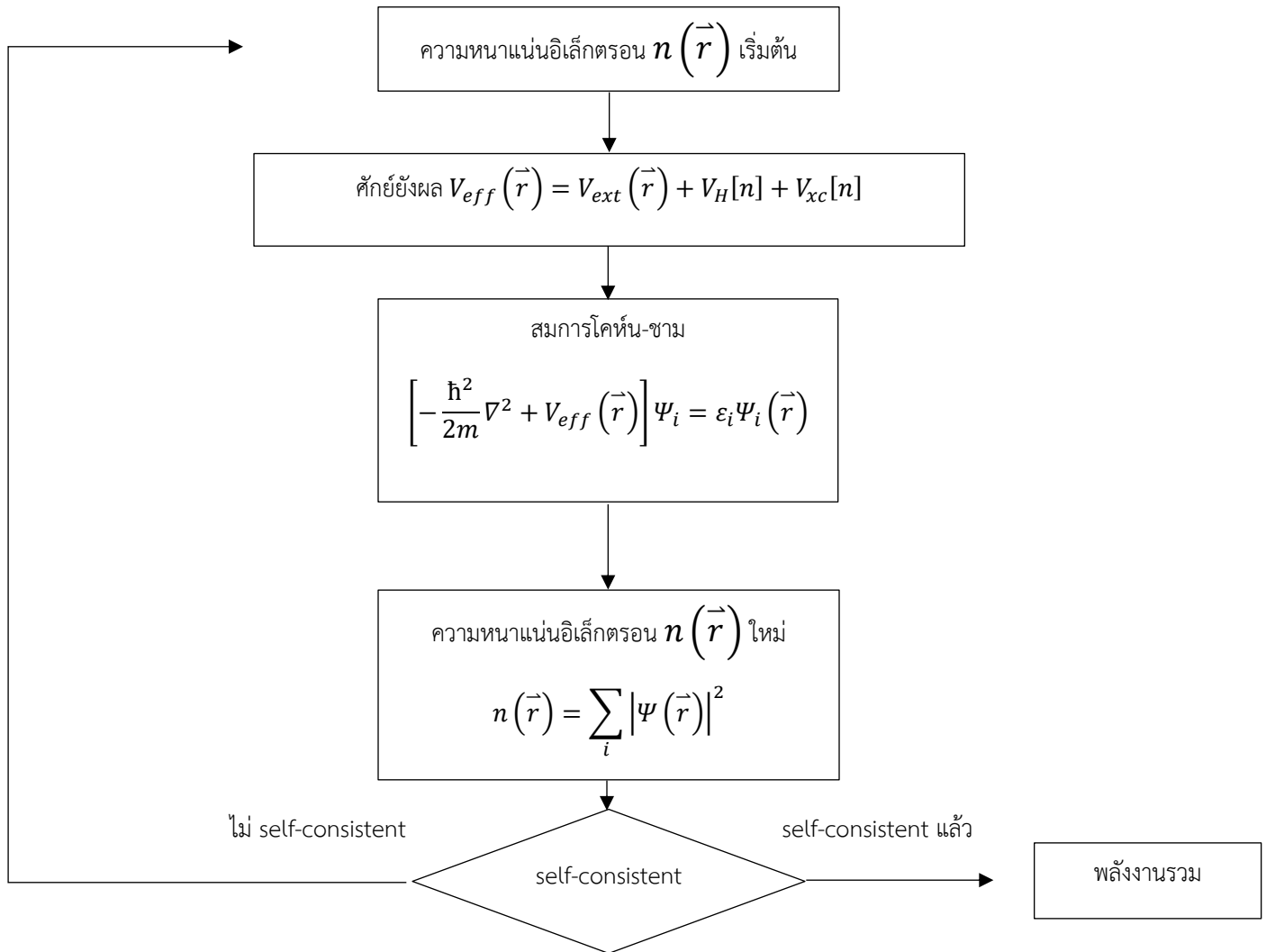
$c_G(\vec{k})$  คือ ค่าคงที่ในส่วนของความหนาแน่นอิเล็กตรอนซึ่งคำนวณได้ ดังสมการ 2.11

$$n(\vec{r}) = \sum_i |\psi(\vec{r})|^2 \quad (2.11)$$

จากสมการที่ 2.4 จะเห็นว่า การจะแก้สมการโคห์น-ชามได้จำเป็นต้องทราบค่าของศักย์ยังผล ซึ่งสามารถคำนวณได้จากการทราบค่าความหนาแน่นอิเล็กตรอน ซึ่งคำนวณได้จากการทราบค่า kohn-sham orbital อีกที่ ดังนั้นทั้งสามส่วนที่กล่าวมาจึงมีความสัมพันธ์กัน ดังนี้

$$n(\vec{r}) \rightarrow \psi(\vec{r}) \rightarrow V_{eff}(\vec{r}) \rightarrow n(\vec{r}) \dots \quad (2.12)$$

เมื่อพบว่าปริมาณดังกล่าวมีความสัมพันธ์กันเช่นนี้แล้ว จึงสามารถใช้วิธีคำนวณที่เรียกว่า Self-Consistent Field : SCF ประกอบกับหลักการแปรผัน (variational principle) ได้ โดยเริ่มจากการเดาความหนาแน่นของอิเล็กตรอนขึ้นมาค่าหนึ่ง จากนั้นแทนลงในสมการของ  $V_{eff}(\vec{r})$  เพื่อหาค่าคำตอบออกมา จากนั้นนำค่าที่ได้แทนลงในสมการของโคห์น-ชาม เพื่อหาโคห์น-ชามออร์บิทัล  $\psi(\vec{r})$  แล้วจึงนำไปคำนวณเป็นความหนาแน่นอิเล็กตรอน  $n(\vec{r})$  ค่าใหม่ ทำซ้ำด้วยวิธีการนี้จนพลังงานลู่เข้าสู่ค่าต่ำสุด (ที่ยอมรับได้) ตามหลักการแปรผัน (variational principle) แล้วจึงหยุดคำนวณ ซึ่งกระบวนการดังกล่าวสามารถแสดงได้ดังแผนผังดังต่อไปนี้



รูปที่ 3 แผนผังแสดงกระบวนการแก้สมการโคห์น-ชามเพื่อหาพลังงานรวมของระบบ

## 2.2 ความเค้น และความเครียด

### 2.2.1 ความเค้น (stress)

ความเค้น (stress) คือแรงที่กระทำต่อพื้นที่หน้าตัดของวัตถุ โดยนิยามได้ ดังสมการ 2.13

$$\sigma = \frac{F}{A} \quad (2.13)$$



เมื่อ  $F$  คือ แรงที่กระทำต่อวัตถุ

และ  $A$  คือ พื้นที่หน้าตัดของวัตถุ

โดยทั่วไปความเค้นอยู่หลายประเภท ความเค้นที่กระทำในกับวัตถุในแนวตั้งฉากคือ normal stress ในขณะที่ความเค้นซึ่งกระทำกับวัตถุในแนวขนานกับวัตถุคือ ความเค้นเฉือน หรือ shear stress ซึ่งในโครงการนี้จะสนใจเฉพาะ shear stress เมื่อวัตถุได้รับความเค้นก็จะเกิดสิ่งที่เรียกว่า ความเครียด (strain) ซึ่งจะกล่าวต่อไป

นอกจากนี้ก็ยังมี stress ในลักษณะที่เป็นแบบแกนเดียว uniaxial และ สองแกน biaxial อีกด้วย แต่ในที่นี้จะสนใจเฉพาะ biaxial เท่านั้น เนื่องจากพิจารณาได้ง่ายกว่า

## 2.2.2 ความเครียด (strain)

ความเครียด (strain) คือผลที่เกิดจากความเค้นซึ่งส่งผลให้วัตถุเปลี่ยนแปลงความยาวไปจากเดิม โดยนิยามได้ดังสมการ 2.14

$$\varepsilon = \frac{\Delta L}{L_0} \quad (2.14)$$

เมื่อ  $\Delta L$  คือ ความยาวที่เปลี่ยนแปลงไปของวัตถุ

และ  $L_0$  คือ ความยาวเดิมของวัตถุ

## บทที่ 3

### แผนการดำเนินการศึกษา

#### 3.1 แผนการศึกษา

1. ศึกษาสมบัติของวัสดุสองมิติโดยเฉพาะอย่างยิ่ง h-BN ชั้นเดียว
  - 1.1 ศึกษาคุณสมบัติเชิงโครงสร้าง
  - 1.2 ศึกษาคุณสมบัติทางไฟฟ้าและแนวทางการประยุกต์ใช้
2. ศึกษาวิธีการคำนวณ และวิธีการสร้างแบบจำลองของวัสดุสองมิติ
  - 2.1 ศึกษาทฤษฎีฟังก์ชันแนลความหนาแน่น (Density Functional Theory) หรือ DFT
  - 2.2 ศึกษาการใช้งานโปรแกรม Quantum Espresso (QE)
3. หาเงื่อนไขการจำลองที่เหมาะสมกับวัสดุสองมิติ h-BN ชั้นเดียว
  - 3.1 จำลองหน่วยเซลล์จาก lattice parameter และตำแหน่งของอะตอมในโครงสร้าง
  - 3.2 ปรับค่าเงื่อนไขต่าง ๆ เช่น พลังงานคัทออฟของฟังก์ชันคลื่น (ecutwfc) , จำนวนจุดในปริภูมิส่วนกลับ (k-point) , ค่า lattice parameter c ที่เหมาะสมกับระบบเพื่อให้ง่ายต่อการคำนวณด้วยทรัพยากรที่มี
4. จำลองโครงสร้างวัสดุสองมิติของ h-BN ชั้นเดียว
  - 4.1 ผ่อนคลายแบบจำลอง (relax) เพื่อปรับค่า lattice parameter และตำแหน่งอะตอมให้เข้าสู่สภาวะสมดุล
  - 4.2 คำนวณหาโครงสร้างแถบพลังงาน (band structure) , ช่องว่างแถบพลังงาน (band gap) และความหนาแน่นของสถานะ (density of states) ของระบบ
  - 4.3 เปรียบเทียบผลที่ได้จากการคำนวณ และการจำลองในงานวิจัยนี้กับงานวิจัยชิ้นอื่น ๆ หรือการทดลอง
5. ศึกษาผลของความเค้นเฉือนที่มีต่อโครงสร้างระบบ
  - 5.1 ศึกษาความสัมพันธ์ระหว่าง lattice parameter และความเค้นของระบบ

5.2 ศึกษาผลของความเค้นที่มีต่อโครงสร้างของวัสดุสองมิติ h-BN ชั้นเดียว โดยปรับค่า lattice parameter เพื่อวิเคราะห์แนวโน้มของคุณสมบัติทางไฟฟ้าที่อาจเปลี่ยนไปเนื่องจากความเค้นค่าต่าง ๆ

5.3 ศึกษาผลของความเค้นที่มีต่อโครงสร้างของวัสดุสองมิติ h-BN ชั้นเดียว

6. วิเคราะห์และอภิปรายผลของความเค้นเฉือนที่มีต่อคุณสมบัติทางไฟฟ้าของวัสดุสองมิติ h-BN ชั้นเดียวจากโครงสร้างแถบพลังงาน (band structure) , ช่องว่างแถบพลังงาน (band gap) และความหนาแน่นของสถานะ (density of states) ที่ได้ทั้งหมด รวมไปถึงแนวทางในการประยุกต์ใช้ที่เป็นไปได้ด้วย

7. จัดทำรูปเล่มรายงานผลการศึกษา

### 3.2 แผนการดำเนินงานและระยะเวลา

	รายการ	Sep /20	Oct /20	Nov /20	Dec /20	Jan /21	Feb /21	Mar /21	Apl /21
1	ศึกษาพื้นฐานของวัสดุสองมิติ โดยเฉพาะ h-BN								
2	ศึกษาการคำนวณและสร้างการ สร้างแบบจำลอง								
3	หาเงื่อนไขที่เหมาะสมในการ จำลองระบบ								
4	จำลองวัสดุสองมิติชั้นเดียวของ h-BN								
5	ศึกษาผลของความเค้นเฉือนที่มี ต่อโครงสร้างวัสดุสองมิติ								
6	จำลองวัสดุสองมิติชั้นเดียวของ h-BN ที่ lattice parameter ค่า ต่าง ๆ								
7	วิเคราะห์ข้อมูลและอภิปรายผล ของความเค้นที่มีต่อ h-BN ซึ่งได้ จากการจำลอง รวมไปถึงแนว ทางการประยุกต์ใช้ที่เป็นไปได้								
8	จัดทำสรุปรายงานผลการศึกษา								

## บทที่ 4

### ผลและอภิปรายผลการศึกษา

#### 4.1 การศึกษาโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN)

##### 4.1.1 เงื่อนไขการจำลองที่เหมาะสมของระบบ

การจำลองระบบของวัสดุสองมิติ hexagonal boron nitride จะเริ่มจากการใช้โครงสร้างตั้งต้นของ hexagonal boron nitride (h-BN) แบบผลึกสามมิติที่ฐานข้อมูลของเว็บไซต์ materialproject.org [13] รายงานไว้ก่อน จากนั้นจึงลดจำนวนชั้นลงให้เหลือเพียงหนึ่งชั้นในหน่วยเซลล์ (primitive unit cell) และเพิ่มค่า lattice parameter  $c$  ขึ้น ซึ่งในที่นี้ค่า lattice parameter  $c$  ที่เว็บไซต์ materialproject.org รายงานไว้สำหรับผลึกสามมิติที่เสถียรของ h-BN คือ 7.707 angstrom แต่เพื่อที่จะอนุมานได้ว่าผลของอันตรกิริยาระหว่างระนาบนั้นมีค่าน้อยมากจนทำให้เป็นเสมือนโครงสร้างผลึกแบบชั้นเดียวได้ (ระยะที่เสถียรแต่เดิมคือระยะห่างระหว่างชั้นในโครงสร้างธรรมชาติของผลึกสามมิติ) จึงต้องใช้ค่า lattice parameter  $c$  ที่มากกว่าค่าดังกล่าว

อย่างไรก็ตามเราจะเริ่มต้นตรวจสอบก่อนว่าค่า 7.707 angstrom นั้นเป็นระยะที่เสถียรแล้วจริงหรือไม่ โดยสมมติค่า lattice parameter  $c$  ขึ้นมาใหม่ ซึ่งในที่นี้จะลองใช้เป็น 15.414 angstrom โดยจะทำการคำนวณด้วยโปรแกรม Quantum Espresso (QE) [10] ซึ่งเป็นโปรแกรมหนึ่งที่มีความน่าเชื่อถือและนิยมใช้ในงานวิจัยที่คำนวณด้วย DFT โดยในที่นี้จะใช้ศักย์เทียมแบบ Projector Augmented-Wave (PAW) [11] และฟังก์ชันแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ (exchange-correlation) ของ Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) ซึ่งไม่คำนึงถึงผลของแรงแวนเดอร์วาลส์ เนื่องจากมีค่าน้อยมากเมื่อเทียบกับพันธะโควาเลนต์ที่ยึดเหนี่ยวอะตอมภายในระนาบผลึกชั้นเดียวกัน

ซึ่งค่า lattice parameter  $c$  เริ่มต้นกล่าวนี้เมื่อสามารถหาเงื่อนไขของระบบที่เหมาะสมใหม่ได้ ค่าดังกล่าวอาจเปลี่ยนแปลงไปตามการคำนวณของโปรแกรม QE ซึ่งจะเป็นค่าที่มีพลังงานรวมมีการลู่เข้าแล้วนั่นเอง

ตารางที่ 1 แสดงโครงสร้างหน่วยเซลล์ (primitive unit cell) เริ่มต้นของ hexagonal boron nitride (h-BN)

hexagonal lattice parameter			
a = 2.512 angstrom		c = 15.414 angstrom	
ธาตุ	atomic positions (fractional coordinates)		
B	0.33333333	0.66666667	0.25000000
N	0.66666667	0.33333333	0.25000000

สำหรับการหาเงื่อนไขที่เหมาะสมกับระบบอย่างการหาค่าพลังงานค่าคัทออฟของฟังก์ชันคลื่น (ecutwfc) และ lattice parameter c จะตั้งค่าให้การคำนวณพลังงานรวมของระบบต่อหน่วยเซลล์ (formula unit : f.u.) แสดงผลลัพธ์เมื่อมีการลู่อู่เข้าสู่พลังงานค่าที่ยอมรับได้จากการคำนวณ (convergence threshold) ต่ำกว่า  $10^{-6}$  Ry / f.u. ซึ่งเป็นค่าเริ่มต้น (default) ที่โปรแกรม QE แนะนำไว้

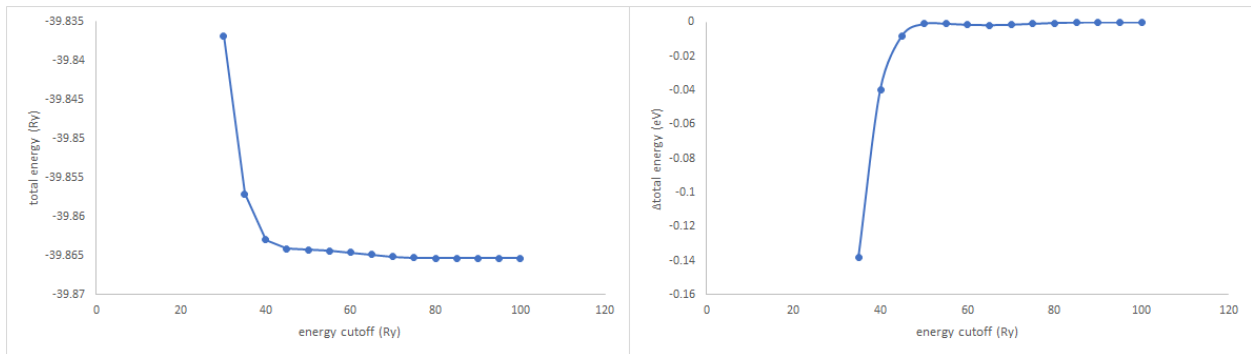
#### 4.1.1.1 พลังงานค่าคัทออฟ

พลังงานค่าคัทออฟเป็นเงื่อนไขสำคัญที่สุดเงื่อนไขหนึ่งในการคำนวณโดยใช้ทฤษฎีฟังก์ชันแนลความหนาแน่น หรือ DFT ในโปรแกรม Quantum Espresso (QE) ซึ่งเป็นขอบเขตในการพิจารณาพจน์ของฟังก์ชันคลื่น โดยการใช้พลังงานค่าคัทออฟที่มีค่าสูงในการคำนวณจะยิ่งให้ผลลัพธ์ที่มีความแม่นยำมากยิ่งขึ้น แต่อาจต้องใช้ทรัพยากรและเวลาในการคำนวณมากตามไปด้วยเช่นกัน

เราสามารถหาพลังงานค่าคัทออฟของฟังก์ชันคลื่น (ecutwfc) ที่เหมาะสมกับระบบได้ โดยการปรับค่า ecutwfc ตั้งแต่ 30 Ry ถึง 100 Ry จากนั้นพิจารณาว่าค่าใดที่ให้พลังงานรวมของระบบไม่เปลี่ยนแปลงเกินค่าการลู่อู่ของพลังงานที่ยอมรับได้จากการคำนวณ ซึ่งในโครงการนี้จะกำหนดให้อยู่ในช่วงของ  $10^{-3}$  eV / f.u. ถือว่าเป็นค่าที่ยอมรับได้ และเนื่องจากค่า input ของโปรแกรมนั้นใช้พลังงานในหน่วย Ry แต่เพื่อความสะดวกในการใช้งานต่อไปในงานวิจัยโครงการนี้ จึงจะนำเสนอในหน่วย eV โดยที่ 1 Ry มีค่าเท่ากับ 13.6056980659 eV และจะพิจารณาพลังงานค่าที่ยอมรับได้ในช่วงของ  $10^{-3}$  eV / f.u. ซึ่งผลที่ได้เป็นไปดังตารางและรูปต่อไปนี้

ตารางที่ 2 ตารางแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง  $ecutwfc$  (Ry) และ พลังงานรวมของระบบ (eV)

energy cutoff (Ry)	total energy (eV)
30	-541.7807
35	-542.0567
40	-542.1361
45	-542.1519
50	-542.1539
55	-542.1557
60	-542.1588
65	-542.1624
70	-542.1654
75	-542.1672
80	-542.1681
85	-542.1685
90	-542.1686
95	-542.1687
100	-542.1689



รูปที่ 4 แสดงค่าลู่ออกของพลังงานรวมของระบบ (Ry) กับ  $ecutwfc$  (Ry) (รูปซ้าย), แสดงค่าการเปลี่ยนของพลังงานรวม (eV) สำหรับการเพิ่มค่า  $ecutwfc$  (Ry) (รูปขวา)

จากผลการปรับค่าพลังงานคutoffฟังก์ชันคลื่น (ecutwfc) ให้เหมาะสมกับระบบ พบว่าค่าที่เหมาะสมคือ 75 Ry เพราะหลังจากนั้นผลต่างของพลังงานรวมในระบบจะไม่สูงเกินกว่า  $10^{-3}$  eV / f.u. อีกต่อไป ดังนั้นการคำนวณหลังจากนี้จะใช้ ecutwfc เป็น 75 Ry

#### 4.1.1.2 จำนวนจุดในปริภูมิส่วนกลับ (k-point)

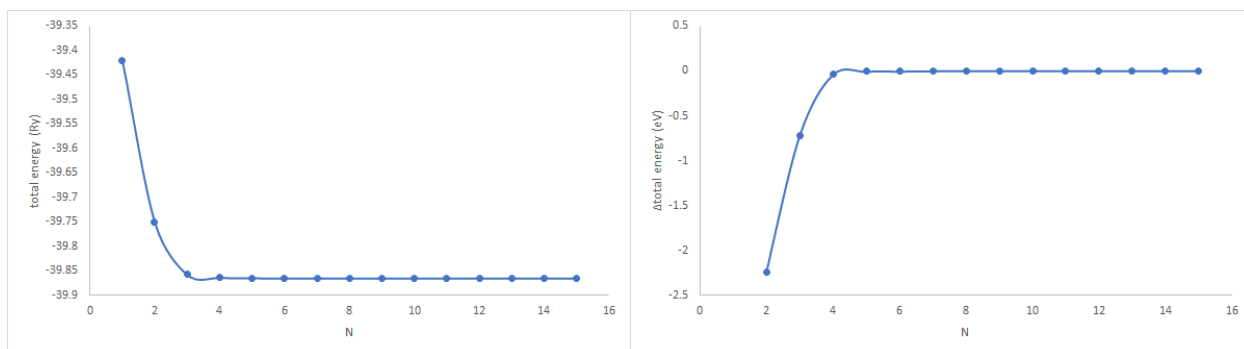
เงื่อนไขที่มีความสำคัญเป็นลำดับถัดมาคือ จำนวนจุดในปริภูมิส่วนกลับ หรือ k-point ซึ่งมีผลต่อการคำนวณพลังงานของระบบ โดยจะแบ่งกริด (grid) เพื่อคำนวณทั่วทั้งปริภูมิส่วนกลับ (reciprocal space) ซึ่งผลจากการคำนวณจะมีค่าแม่นยำมากขึ้นเมื่อใช้จำนวนจุดที่มากยิ่งขึ้น สำหรับการจำลองโครงสร้างวัสดุสองมิติจากโครงสร้างวัสดุสามมิติจะต้องให้ lattice parameter มีค่าค่อนข้างมากในปริภูมิจริง (real space) จึงทำให้แกน c ในปริภูมิส่วนกลับ (reciprocal space) มีค่าน้อยมาก ดังนั้นรูปแบบที่ใช้ตาม Monkhorst-Pack Grid [12] จึงเป็น  $N \times N \times 1$  ตามแนวแกนทั้งสามในปริภูมิส่วนกลับ โดยก่อนหน้านี้นี้เราคำนวณพลังงานรวมของระบบด้วย  $N = 9$  และกระจายแบบสมมาตรซึ่งตามค่าเริ่มต้นไปก่อน แต่การเพิ่มจำนวน k-point มากขึ้นอาจทำให้ต้องใช้ระยะเวลาในการคำนวณและทรัพยากรมากขึ้นตามไปด้วย ดังนั้นการหาค่าที่เหมาะสมจึงมีความจำเป็นและจะใช้ค่า ecutwfc ที่ได้ก่อนหน้านี้นี้ในการคำนวณ โดยปรับเปลี่ยน  $N$  ตั้งแต่ 1 ถึง 15 แล้วทำการคำนวณเช่นเดิม ซึ่งได้ดังตารางและรูปต่อไปนี้

ตารางที่ 3 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างผลคูณของจำนวนจุดในปริภูมิส่วนกลับ และพลังงานรวมของระบบ (eV)

$N \times N \times 1$	total energy (eV)
1 × 1 × 1	-536.1271
2 × 2 × 1	-540.6166
3 × 3 × 1	-542.0665
4 × 4 × 1	-542.1500
5 × 5 × 1	-542.1596
6 × 6 × 1	-542.1670
7 × 7 × 1	-542.1670
8 × 8 × 1	-542.1672
9 × 9 × 1	-542.1672
10 × 10 × 1	-542.1672
11 × 11 × 1	-542.1672



12 × 12 × 1	-542.1672
13 × 13 × 1	-542.1672
14 × 14 × 1	-542.1672
15 × 15 × 1	-542.1672



รูปที่ 5 แสดงค่าลู่เข้าของพลังงานรวมของระบบ (Ry) กับ ค่าจำนวนจุด  $N$  ในปริภูมิส่วนกลับ (รูปซ้าย), แสดงค่าการเปลี่ยนแปลงของพลังงานรวม (eV) สำหรับการเพิ่มค่าจำนวนจุดในปริภูมิส่วนกลับ  $N$  (รูปขวา)

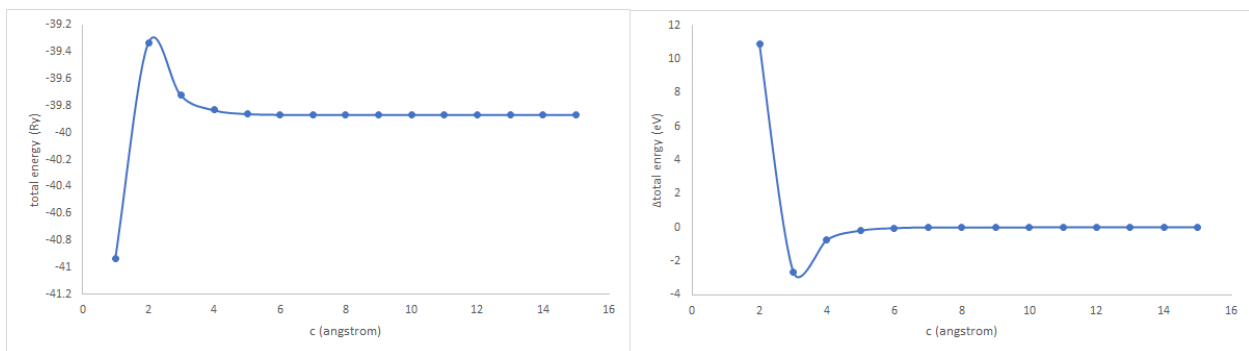
จากผลการปรับค่า  $N$  ให้เหมาะสมกับระบบพบว่าค่าที่เหมาะสมคือ  $N = 7$  เพราะหลังจากนั้นผลต่างพลังงานรวมของระบบไม่สูงเกินกว่า  $10^{-3}$  eV / f.u. อีกต่อไป ดังนั้นการคำนวณหลังจากนี้จะใช้  $N = 7$

#### 4.1.1.3 ค่า lattice parameter $c$

หลังจากที่ได้พลังงานคutoffฟังก์ชันคลื่นและจำนวนจุดในปริภูมิส่วนกลับที่เหมาะสมแล้ว สำหรับการจำลองระบบวัสดุสองมิติ ค่า lattice parameter  $c$  เป็นค่าที่ทำให้ระยะห่างระหว่างระนาบผลึกห่างกันมากพอที่จะไม่มีอันตรกิริยาซึ่งกันและกัน และเพื่อตรวจสอบว่าค่า  $c$  ดังกล่าวที่ใช้ตอนเริ่มต้นนั้นเพียงพอแล้วจริงหรือไม่ จึงทำการหาค่าพลังงานลู่เข้าเช่นเดียวกับ  $ecutwfc$  และ  $N$  ก่อนหน้านี้ ซึ่งจะปรับค่าจาก 1 ถึง 15 โดยผลที่ได้เป็นดังตารางและรูปต่อไปนี้

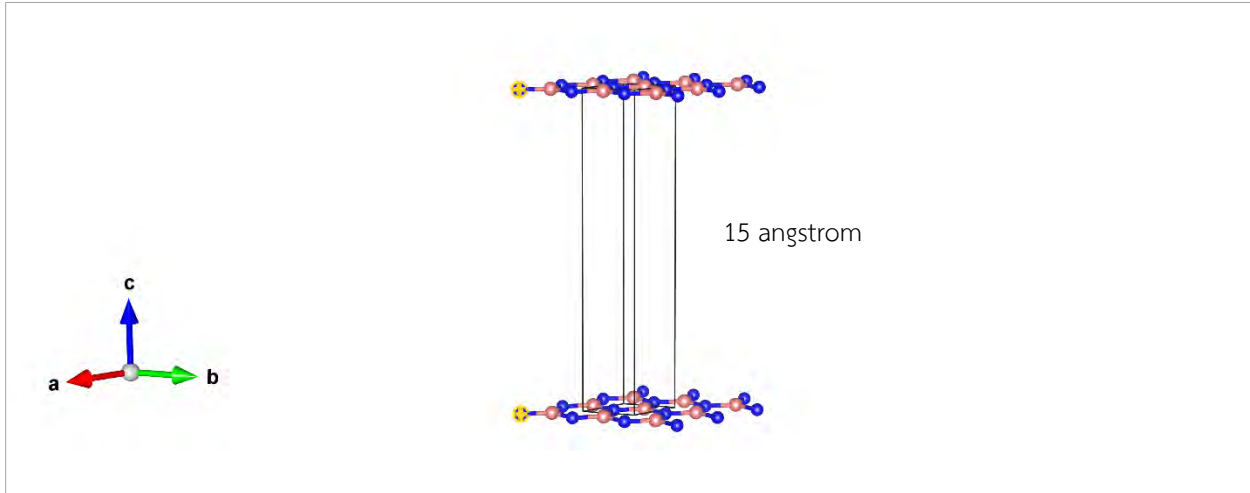
ตารางที่ 4 แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง ค่า lattice parameter  $c$  (angstrom) กับพลังงานรวมของระบบ (eV)

$c$ (angstrom)	total Energy (eV)
1.0	-556.7135
2.0	-534.9509
3.0	-540.2149
4.0	-541.6871
5.0	-542.0660
6.0	-542.1475
7.0	-542.1634
8.0	-542.1663
9.0	-542.1669
10	-542.1670
11	-542.1670
12	-542.1670
13	-542.1670
14	-542.1670
15	-542.1670



รูปที่ 6 แสดงค่าคู่เข้าของพลังงานรวมของระบบ (Ry) กับ ค่า lattice parameter  $c$  (angstrom) (รูปซ้าย) , แสดงค่าการเปลี่ยนของพลังงานรวม (eV) สำหรับการเพิ่มค่า lattice parameter  $c$  (angstrom) (รูปขวา)

จากผลการปรับค่า  $c$  เพื่อหาค่าที่เหมาะสมกับระบบ พบว่าตั้งแต่  $c = 6$  เป็นต้นไป ผลต่างพลังงานรวมของระบบสูงไม่เกินกว่า  $10^{-3}$  eV / f.u. แล้ว อย่างไรก็ตามในการคำนวณหลังจากนี้จะใช้  $c = 15$  angstrom ซึ่งเป็นค่าที่มากเกินไปและมั่นใจได้ว่าค่า  $c$  ดังกล่าวจะทำให้ระนาบผลึกสองมิติมีความห่างกันจนเหมือนไม่รู้สึกรังแรง แวนเดอวาลส์ที่กระทำต่อกันจนกลายเป็นการจำลองของระบบวัสดุที่มีผิวชั้นเดียวได้ ดังรูปด้านล่าง



รูปที่ 7 แสดงโครงสร้างโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียวที่สร้างโดยนำผลึกสามมิติมาลดจำนวนชั้นลงทำให้ชั้นที่อยู่ติดกันห่างกันมากเกินไปจนเหมือนเป็นผิวชั้นเดียวแยกกันอยู่

ดังนั้นเงื่อนไขที่เหมาะสมกับระบบซึ่งจะใช้คำนวณต่อไปหลังจากนี้คือ  $ecutwfc = 75$  Ry ,  $N \times N \times 1 = 7 \times 7 \times 1$  และ  $c = 15$  angstrom ซึ่งจะได้โครงสร้างหน่วยเซลล์ (primitive unit cell) ของ hexagonal boron nitride (h-BN) ชั้นเดียว หลังทราบเงื่อนไขที่เหมาะสมเป็นดังนี้

ตารางที่ 5 แสดงโครงสร้างหน่วยเซลล์ (primitive unit cell) ที่เหมาะสมของ hexagonal boron nitride (h-BN)

hexagonal lattice parameter			
a = 2.512 angstrom		c = 15 angstrom	
ธาตุ	atomic positions (fractional coordinates)		
B	0.33333333	0.66666667	0.25000000
N	0.66666667	0.33333333	0.25000000

#### 4.1.1 ผลการจำลองโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN)

##### 4.1.1.2 การผ่อนคลายผลึก (relaxation)

เพื่อผ่อนคลาย (relax) โครงสร้างของวัสดุให้เข้าสู่สมดุลหรือเพื่อให้มีพลังงานต่ำที่สุดแบบที่ควรจะเป็นในธรรมชาติจะทำการผ่อนคลายด้วยวิธี geometry optimization เพื่อปรับเปลี่ยนค่า lattice parameter และตำแหน่งของอะตอมในหน่วยเซลล์ให้นำไปสู่โครงสร้างที่เหมาะสมต่อไป โดยวิธีการนี้มีหลักการคือลดขนาดของแรงและความเค้นจนกระทั่งมีการลู่เข้าน้อยกว่าค่าของพลังงานที่ยอมรับได้จากการคำนวณ ซึ่งจะทำให้ตำแหน่งอะตอมและขนาดในหน่วยเซลล์เปลี่ยนแปลงไป โดยจะใช้อัลกอริทึมของ Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) [14] ในการคำนวณ และกำหนดค่าการลู่เข้าของพลังงานที่ได้จากการคำนวณ (convergence threshold) ไม่เกิน  $10^{-6}$  Ry / f.u. และกำหนดค่าการลู่เข้าของความเค้นที่ได้จากการคำนวณ (pressure convergence threshold) ไม่เกิน 0.5 Ry / f.u. ซึ่งเงื่อนไขเหล่านี้เพียงพอแล้วที่จะได้มาซึ่งโครงสร้างที่เหมาะสม โดยโครงสร้างหน่วยเซลล์ (primitive unit cell) ของ hexagonal boron nitride (h-BN) ชั้นเดียวหลังจากผ่อนคลายผลึกแล้วเป็นดังตารางต่อไปนี้

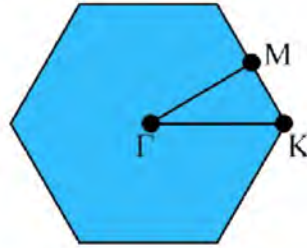
ตารางที่ 6 แสดงโครงสร้างหน่วยเซลล์ (primitive unit cell) ที่เหมาะสมของ hexagonal boron nitride (h-BN) หลังจากผ่อนคลายแบบจำลองผลึกแล้ว

hexagonal lattice parameter			
a = 2.515 angstrom		c = 15 angstrom	
ธาตุ	atomic positions (fractional coordinates)		
B	0.33333333	0.66666667	0.25000000
N	0.66666667	0.33333333	0.25000000

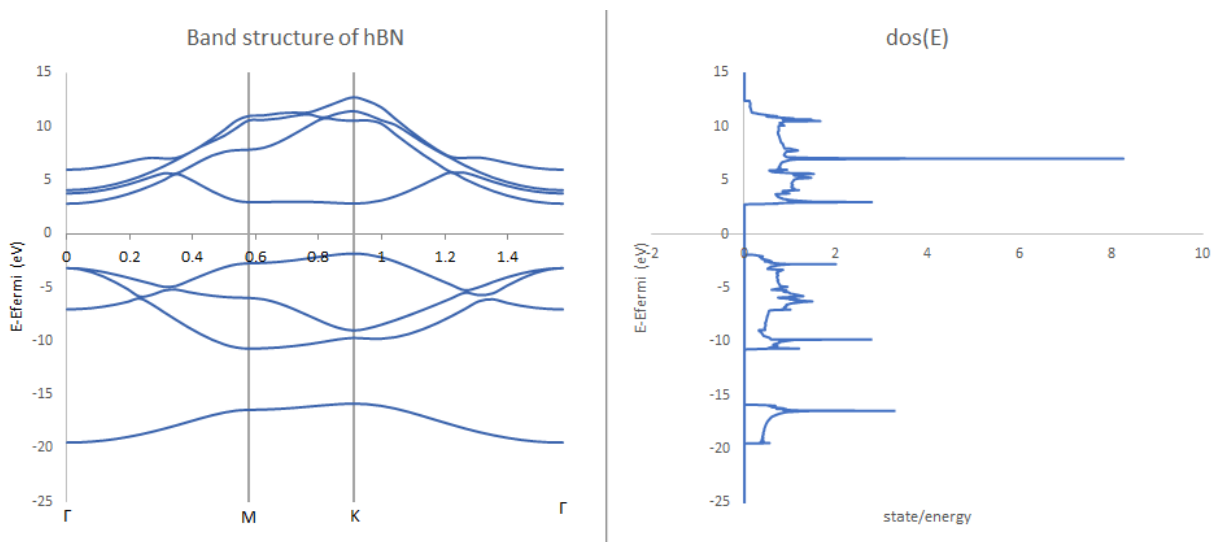
ซึ่งค่าที่ได้นี้จะสามารถนำไปคำนวณหาคุณสมบัติทางไฟฟ้า และคุณสมบัติอื่น ๆ ของวัสดุได้ต่อไป

### 4.1.1.3 โครงสร้างแถบพลังงาน และช่องว่างแถบพลังงาน

เมื่อได้โครงสร้างระบบของ h-BN ชั้นเดียวซึ่งผ่อนคลายผลึกแล้วก็จะสามารถนำไปคำนวณหาโครงสร้างแถบพลังงานและความหนาแน่นของสถานะ (density of state) ได้ โดยพิจารณาตามเส้นทาง (path) ในปริภูมิส่วนกลับ (reciprocal space) ที่มีสมมาตรสูงในโซนบริลลูวอนที่หนึ่ง (first Brillouin zone) ตามเส้นทาง  $\Gamma$ -M-K- $\Gamma$  ดังรูปที่ 8 และได้ผลดังรูปที่ 9 โดยที่ Fermi energy อยู่ที่ 0 eV



รูปที่ 8 จุดแลตทิซในปริภูมิส่วนกลับ (reciprocal space) ที่มีสมมาตรสูงของโครงสร้างผลึกแบบเฮกซะโกนอล (hexagonal) ในโซนบริลลูวอนที่หนึ่ง (first Brillouin zone) [15]



รูปที่ 9 แสดงโครงสร้างแถบพลังงาน (band structure) และความหนาแน่นสถานะ (density of states) ของโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN) ที่สภาวะปกติ โดยมีจุดสูงสุดของแถบเวเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำกระแสอยู่ที่ตำแหน่ง K มีค่าความกว้างช่องว่างแถบพลังงาน 4.67 eV โดยที่ Fermi energy อยู่ที่ 0 eV

จากโครงสร้างแถบพลังงาน (Band Structure) และความหนาแน่นสถานะ (density of states) ซึ่งได้จากการคำนวณในงานวิจัยโครงการนี้ พบว่า h-BN ชั้นเดียวดังกล่าว มีค่าความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานแบบ direct โดยพิจารณา CBM (conduction band minimum) และ VBM (valence band maximum) ที่ตำแหน่ง K อยู่ที่ 4.67 eV ซึ่งเป็นค่าที่ทำให้มีคุณสมบัติเป็นฉนวน (Insulator) ที่ดีมาก ซึ่งเมื่อเทียบกับการงานวิจัยชิ้นอื่น ๆ แล้วได้ผลดังตารางต่อไปนี้

ตารางที่ 7 ตารางแสดงการเปรียบเทียบค่าความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานในงานวิจัยนี้ และงานวิจัยอื่น ๆ ทั้งแบบที่ใช้ DFT ในการคำนวณและแบบที่มาจากทดลอง

งานวิจัยชิ้นอื่น	รายละเอียดงานวิจัยพอสังเขป	ช่องว่างของแถบพลังงานของ h-BN ชั้นเดียว (eV)	ความคลาดเคลื่อนจากงานวิจัยนี้ (%)
งานวิจัยที่ใช้ DFT คำนวณแบบจำลองโครงสร้าง (simulation)	ในงานวิจัยที่ใช้ฟังก์ชันแนลแบบ GGA และคำนวณด้วยโปรแกรม VASP ด้วยศักย์เทียม Vanderbilt (Ultrasoft) [16]	4.7	0.6
	ในงานวิจัยที่ใช้ฟังก์ชันแนลแบบ GGA และคำนวณด้วยโปรแกรม QE [19]	4.68	0.2
	ในงานวิจัยที่ใช้ฟังก์ชันแนลแบบ GGA และคำนวณด้วยโปรแกรม VASP [21]	4.67	0
	ในงานวิจัยที่ใช้ฟังก์ชันแนลแบบ LDA และคำนวณด้วยโปรแกรม VASP [22]	4.7	0.6
งานวิจัยทางด้านการทดลอง (experiment)	ในงานวิจัยที่ปลูกบนกราฟีนด้วยวิธี MBE เสริมด้วยการสะท้อนแสง และ photoluminescence spectroscopy [17]	6.1	30.6
	ในงานวิจัยที่ปลูกจากการพ่นผง BN ละอองสารละลาย H <sub>3</sub> BO <sub>4</sub> -BCL <sub>3</sub> H <sub>3</sub> BO <sub>4</sub> -BCL <sub>3</sub> -ethyl alcohol ลงบนแผ่นควอตซ์ และทำให้แห้งด้วยไนโตรเจน 1,070 องศาเซลเซียส [18]	5.28	13.1

	ในงานวิจัยที่ดูผลของ cathodoluminescence (CL) spectrum ในการทดลอง h-BN ชั้นเดียวที่อุณหภูมิห้อง [20]	5.76	23.3
--	--	------	------

ซึ่งความคลาดเคลื่อนที่เกิดขึ้นเมื่อเทียบกับการทดลอง 20-30 % โดยประมาณเป็นความคลาดเคลื่อนที่ทราบกันดีอยู่แล้วสำหรับการคำนวณจาก DFT ด้วยการใช้ฟังก์ชันแนลแบบ LDA หรือ GGA ซึ่งมักจะได้อาณาการกว้างของแถบพลังงานต่ำกว่าที่ควรจะเป็น (underestimated) [23] หากต้องการให้มีความแม่นยำที่ใกล้เคียงกับการทดลองมากขึ้น อาจจะต้องพิจารณารายละเอียดในการคำนวณ DFT เพิ่มเติม เช่น อาจจะต้องคำนวณด้วย hybrid functional [26] ซึ่งพิจารณาค่าแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ (exchange-correlation) ที่แม่นยำ (exact) จากทฤษฎีของฮาร์ตรี-ฟอค (Hartree-Fock) ร่วมกับค่าแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ จากแหล่งอื่น เช่น ab initio หรือจาก empirical เป็นต้น ซึ่งไม่ได้อยู่ในขอบเขตการศึกษาของงานวิจัยโครงการนี้

อย่างไรก็ดี เมื่อพิจารณาผลจากงานวิจัยในโครงการนี้เทียบกับงานวิจัยอื่น ๆ ซึ่งใช้ DFT ในการคำนวณและสร้างแบบจำลองโครงสร้างเหมือนกันแล้ว พบว่ามีความคลาดเคลื่อนเกิดขึ้นไม่ถึง 1 % ซึ่งเป็นความคลาดเคลื่อนที่ยอมรับได้ ซึ่งเป็นเพราะมีเงื่อนไขในการคำนวณที่แตกต่างกัน เช่น ในบางงานใช้ฟังก์ชันแนลแบบ LDA ในขณะที่งานวิจัยนี้ใช้ GGA , ในบางงานใช้ Basis set และฟังก์ชันแนลของพลังงานแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ ต่างจากงานวิจัยนี้ หรือแม้กระทั่งงานที่ใช้ Basis set และฟังก์ชันแนลของพลังงานแลกเปลี่ยน-สหสัมพันธ์ เดียวกันก็อาจให้ค่าที่ต่างกันได้เพราะอาจใช้ศักย์เทียมที่ต่างกัน จำนวนจุดในปริภูมิส่วนกลับต่างกัน ใช้พลังงานค่าคัทออฟต่างกัน เป็นต้น แต่ท้ายที่สุดแล้วความคลาดเคลื่อนที่เกิดขึ้นก็ยังอยู่ในระดับที่ยอมรับได้อย่างที่ได้กล่าวไป

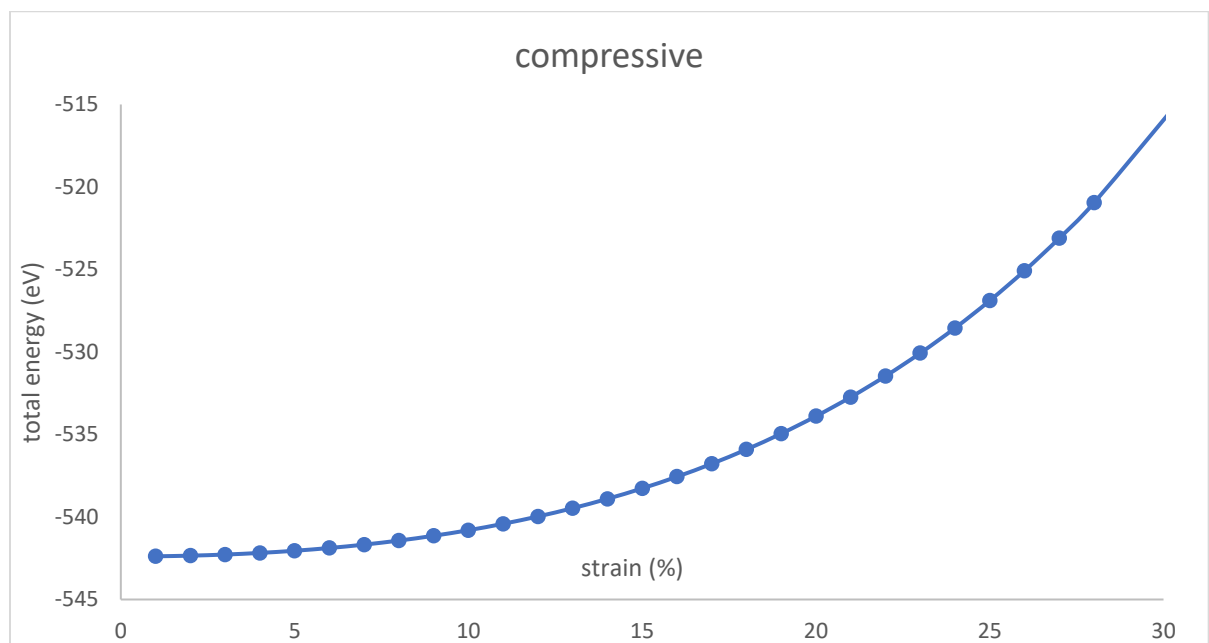
## 4.2 ผลของความเครียดที่มีต่อคุณสมบัติทางไฟฟ้าของโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN)

### 4.2.1 การให้ความเครียดแก่ระบบ

สำหรับงานวิจัยโครงการนี้จะนำเสนอค่าความเครียดในช่วง 0 – 30 % ทั้งแบบที่เป็นความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง (tensile Strain) และความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัด (compressive Strain) โดยจะพิจารณาในลักษณะที่เป็น biaxial strain คือการให้ความเครียดทั้งสองแกนเท่า ๆ กัน และเป็นความเครียดเฉือน (shear stain) ด้วยเนื่องจากเป็นความเครียดที่กระทำต่อผิววัสดุสองมิติเท่านั้น ผ่านการปรับเปลี่ยนค่า lattice parameter ไปเรื่อย ๆ แล้วพิจารณาคุณสมบัติทางไฟฟ้าผ่านการเปลี่ยนแปลงของพลังงานรวมของระบบ (total energy) , โครงสร้างแถบพลังงาน (band structure) และความหนาแน่นของสถานะ (density of states) ที่ได้จากการคำนวณด้วย DFT จากโปรแกรม QE

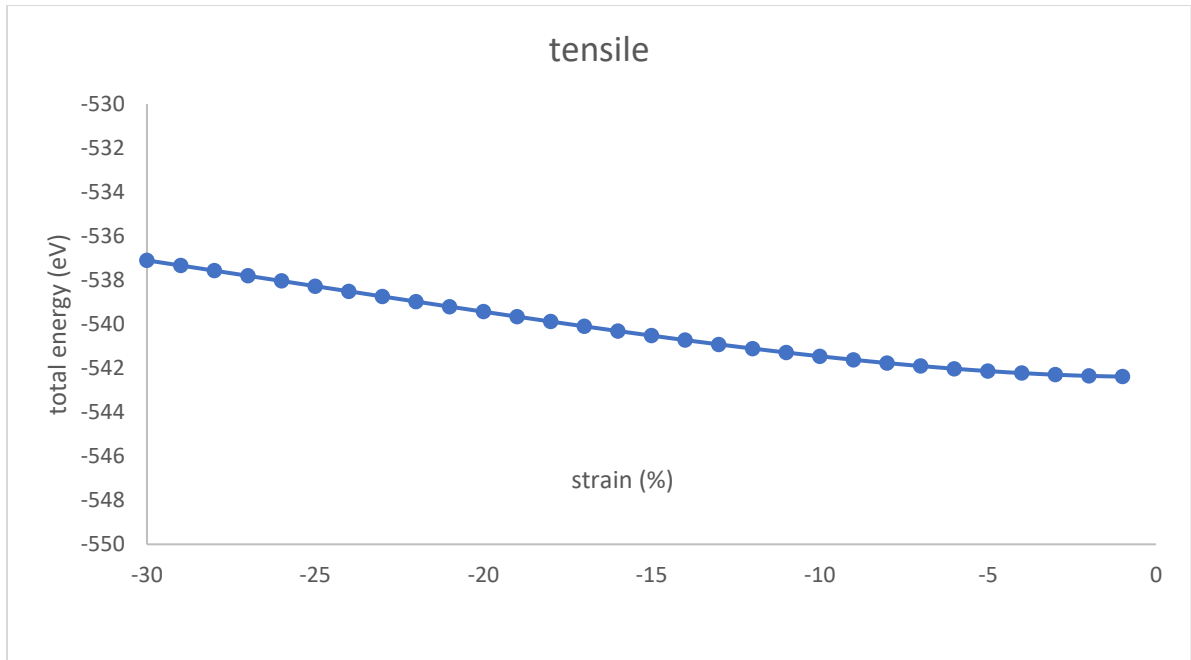
### 4.2.2 ผลของความเครียดที่มีต่อพลังงานรวมของระบบ

ผลที่ได้จากการจำลองโครงสร้าง h-BN ภายใต้ความเครียดค่าต่าง ๆ เป็นไปตามกราฟดังต่อไปนี้

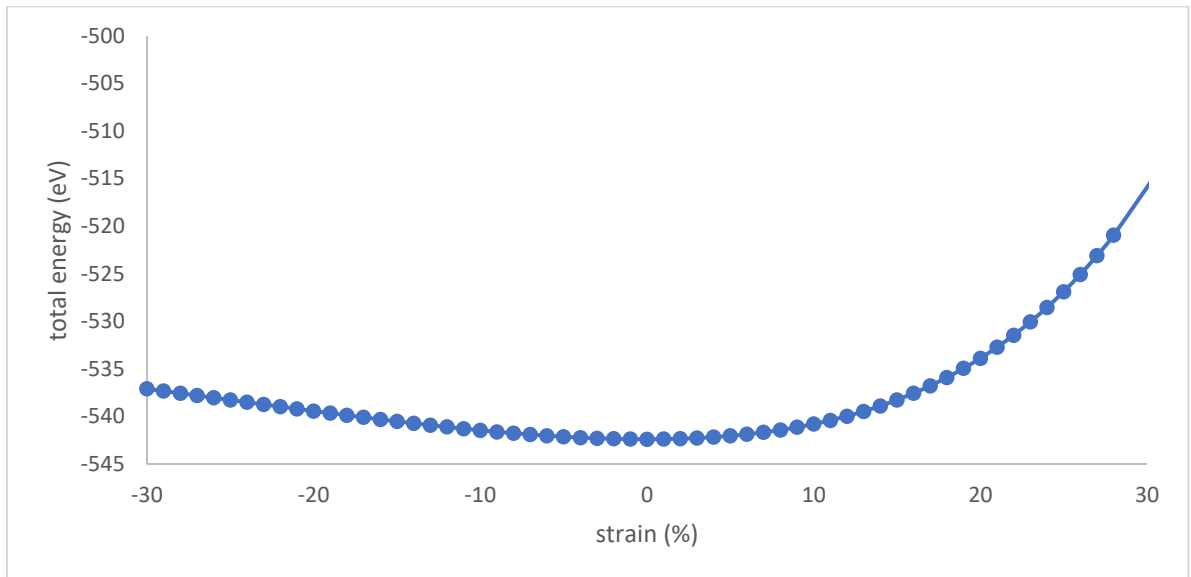


รูปที่ 10 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานรวมของระบบ (eV) กับความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัด (compressive strain) ค่าต่าง ๆ โดยในที่นี้นิยามให้ความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดมีค่าเป็นบวก





รูปที่ 11 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานรวมของระบบ (eV) กับความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง (tensile strain) ค่าต่าง ๆ โดยในที่นี้นิยามให้ความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึงมีค่าเป็นลบ



รูปที่ 12 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานรวมของระบบ (eV) กับความเครียดค่าต่าง ๆ ตั้งแต่ -30 ถึง 30 %

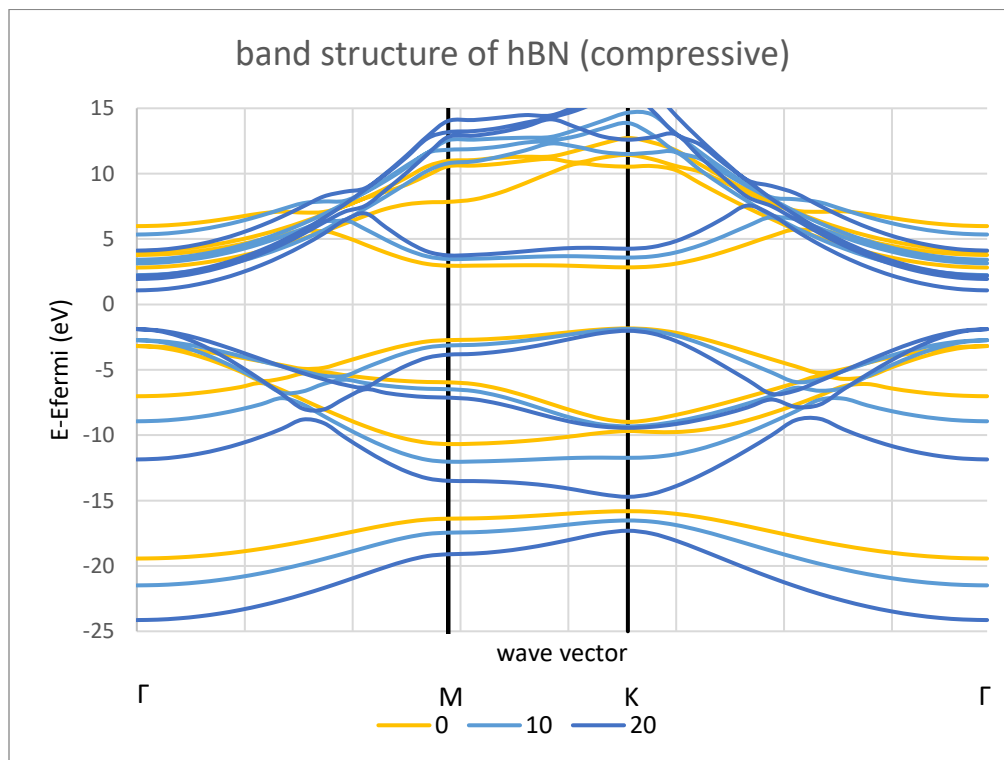
จะเห็นว่าภายใต้ความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง (tensile strain) และความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัด (compressive strain) นั้นพลังงานรวมของระบบ (total energy) มีค่าสูงขึ้น เมื่อเทียบกับกรณีที่โบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN) ไม่มีผลของความเครียดมากกระทำ (0 %) ด้วยกันทั้งสองแบบ

อาจกล่าวได้ว่าความเสถียรของระบบนั้นมีแนวโน้มที่จะลดลงภายใต้ผลของความเครียด อย่างไรก็ตามหากพิจารณาที่ละส่วนจะเห็นว่า การเปลี่ยนแปลงของพลังงานรวมของระบบสำหรับกรณีของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดมีการเปลี่ยนแปลงที่มากกว่ากรณีของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง ซึ่งสังเกตได้จากลักษณะของกราฟที่มีความชันมากกว่า นั่นอาจเพราะการที่อะตอมอยู่ภายใต้แรงอัดอะตอมจะอยู่ใกล้ชิดกันมากขึ้นเมื่อฟังก์ชันคลื่นของอิเล็กตรอนเกิดการซ้อนทับกันจึงทำให้พลังงานสูงขึ้นซึ่งเป็นผลมาจากหลักกีดกันของเพาลี (Pauli exclusion principle) ในขณะที่การอยู่ภายใต้ความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึงทำให้อันตรกิริยาระหว่างอะตอมนั้นน้อยลง แต่ก็ไม่ได้เสถียรไปกว่าการไม่มีผลของความเครียดมากกระทำ

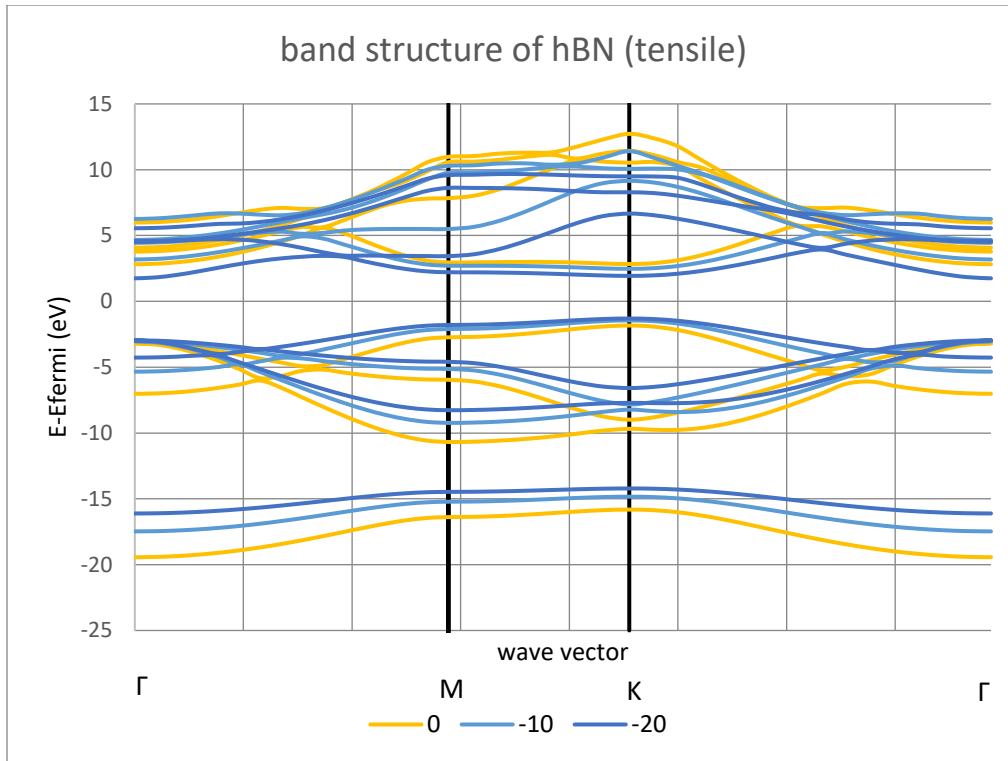
#### 4.2.3 ผลของความเครียดต่อโครงสร้างแถบพลังงาน และความหนาแน่นสถานะ

##### 4.2.3.1 แนวโน้มการเคลื่อนตัวของแถบพลังงาน

ในการคำนวณโครงสร้างแถบพลังงานโดยพิจารณาปริภูมิส่วนกลับตามเส้นทางที่มีสมมาตรสูงในโซนบริลลูวอนที่หนึ่ง (first Brillouin zone) ตามเส้นทาง  $\Gamma$ -M-K- $\Gamma$  ที่ความเครียดในช่วง -30 ถึง 30 % ได้แนวโน้มดังรูปด้านล่าง



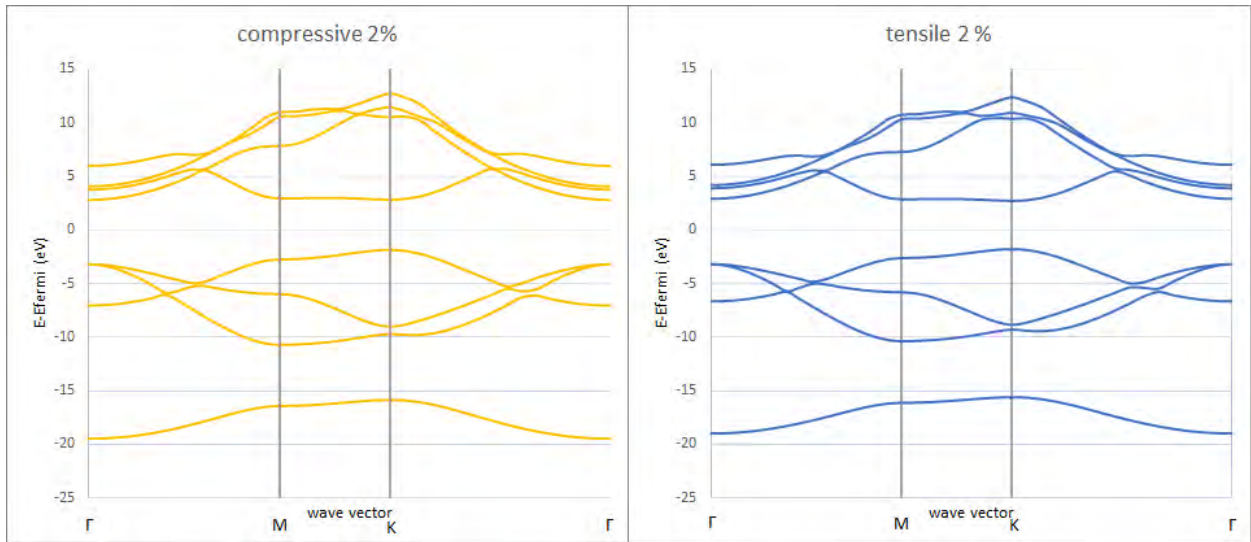
รูปที่ 13 แสดงโครงสร้างแถบพลังงานของโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN) ที่ compressive strain 10 % และ 20 % เทียบกับสภาวะปกติซึ่งไม่มีความเครียดมากกระทำ (0 %)



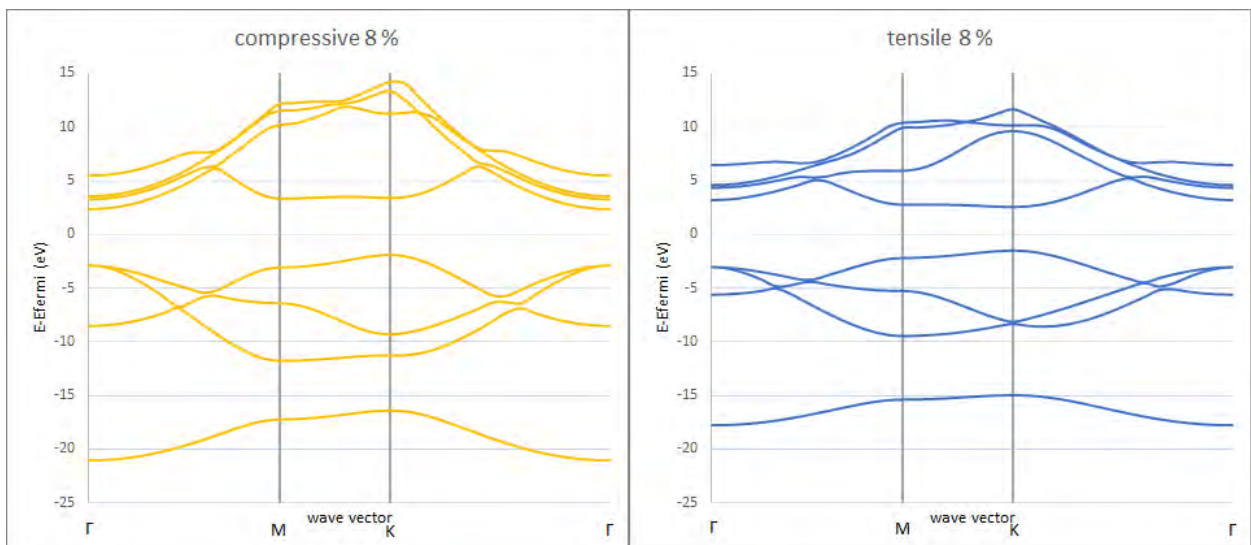
รูปที่ 14 แสดงโครงสร้างแถบพลังงานของโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN) ที่ tensile strain 10 % และ 20 % เทียบกับสถานะปกติซึ่งไม่มีความเครียดมากกระทำ (0 %)

เพื่อพิจารณาแนวโน้มข้อมูลได้โดยง่ายและชัดเจน ในที่นี้จึงแสดงให้เห็นเพียงโครงสร้างแถบพลังงานที่ความเครียดเป็น -20 % , -10 % , 10 % และ 20 % เทียบกับ 0 % เท่านั้น สำหรับแนวโน้มโครงสร้างแถบพลังงานที่ความเครียดค่าต่าง ๆ รายละเอียดมากยิ่งขึ้นจะนำไปแสดงไว้เพิ่มเติมใน ภาคผนวก

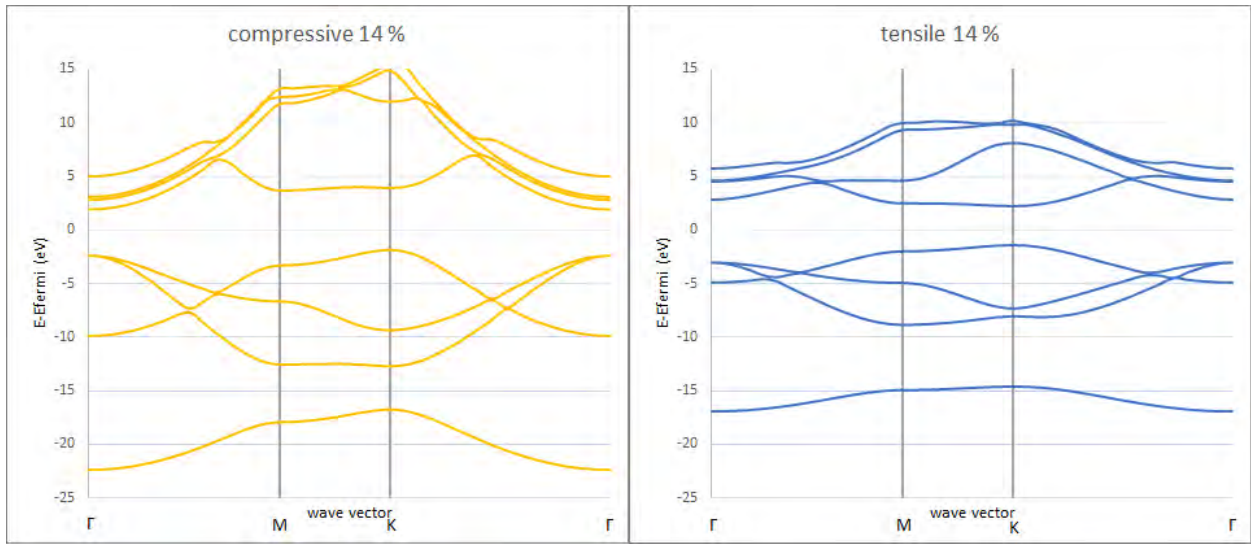
ต่อไปจะเป็นการเปรียบเทียบให้เห็นความแตกต่างโครงสร้างแถบพลังงานที่ความเครียดค่าที่เท่ากันของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดและความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง ซึ่งได้ผลดังรูปต่อไปนี้



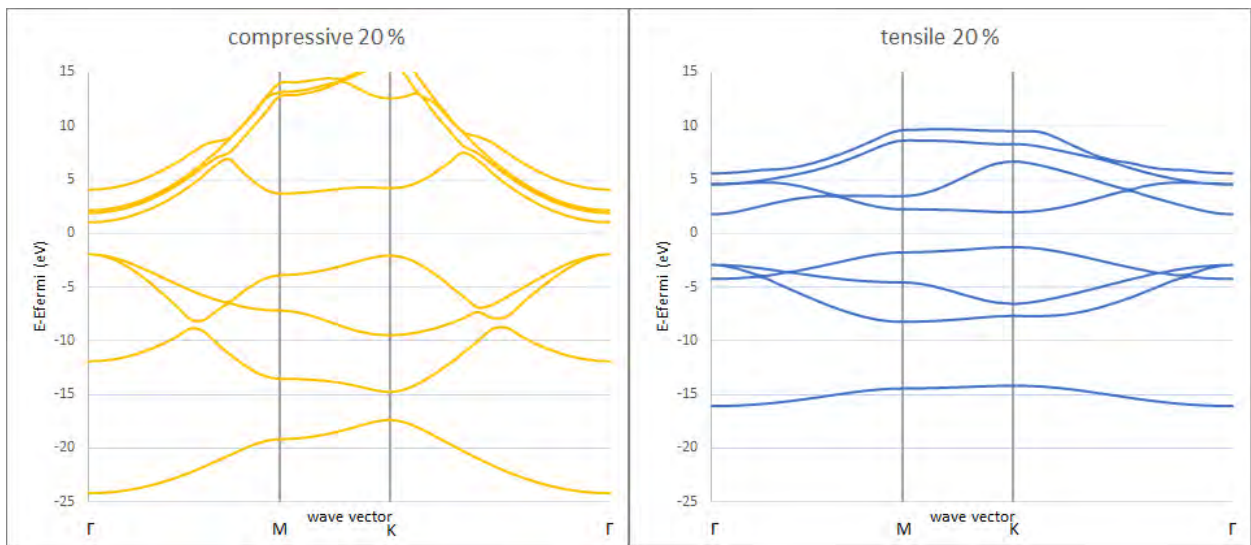
รูปที่ 15 เปรียบเทียบระหว่างโครงสร้างแถบพลังงานที่ความเครียด 2 % ของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดและความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง



รูปที่ 16 เปรียบเทียบระหว่างโครงสร้างแถบพลังงานที่ความเครียด 8 % ของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดและความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง



รูปที่ 17 เปรียบเทียบระหว่างโครงสร้างแถบพลังงานที่ความเครียด 14 % ของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดและความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง



รูปที่ 18 เปรียบเทียบระหว่างโครงสร้างแถบพลังงานที่ความเครียด 20 % ของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดและความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง

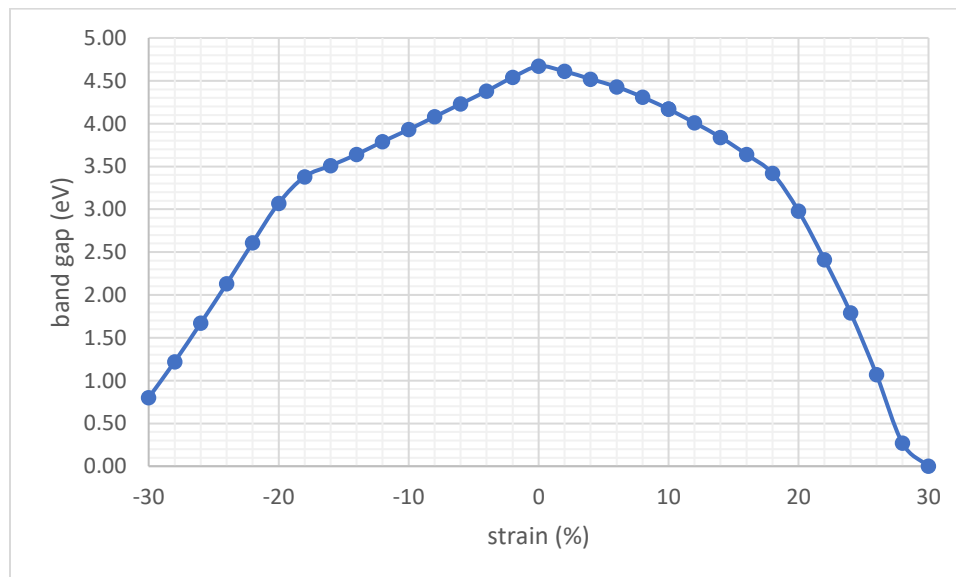
จากรูปที่ 15 ถึงรูปที่ 18 ในกรณีที่เพิ่มความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัด (compressive) ไปเรื่อย ๆ จะเห็นว่าถ้าพิจารณาจุดสูงสุดของแถบเวเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำกระแสที่ตำแหน่ง K แถบพลังงานจะมีแนวโน้มเคลื่อนตัวออกจากกัน ในขณะที่ถ้าพิจารณาที่ตำแหน่ง  $\Gamma$  แถบพลังงานมีแนวโน้มที่จะเคลื่อนตัวเข้าหากัน

ในทางตรงกันข้ามกรณีที่เพิ่มความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง (tensile) ไปเรื่อย ๆ จะเห็นว่าแม้พิจารณาจุดสูงสุดของแถบเวเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำกระแสที่ตำแหน่ง K หรือตำแหน่ง  $\Gamma$  แถบพลังงานก็มีแนวโน้มที่จะเคลื่อนตัวเข้าหากันเช่นเดียวกันทั้งคู่

และเช่นเดิมเพื่อให้พิจารณาแนวโน้มของข้อมูลได้โดยง่าย ในที่นี้จึงแสดงให้เห็นเพียงโครงสร้างแถบพลังงานที่เปรียบเทียบความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดและความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึงที่ 2 % , 8 % , 14 % และ 20 % ก่อนเท่านั้น สำหรับการเปรียบเทียบแนวโน้มโครงสร้างแถบพลังงานที่ความเครียดค่าต่าง ๆ เพิ่มเติมนอกจากนี้จะนำไปแสดงไว้เพิ่มเติมใน ภาคผนวก

#### 4.2.3.2 ผลของความเครียดที่มีต่อความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน

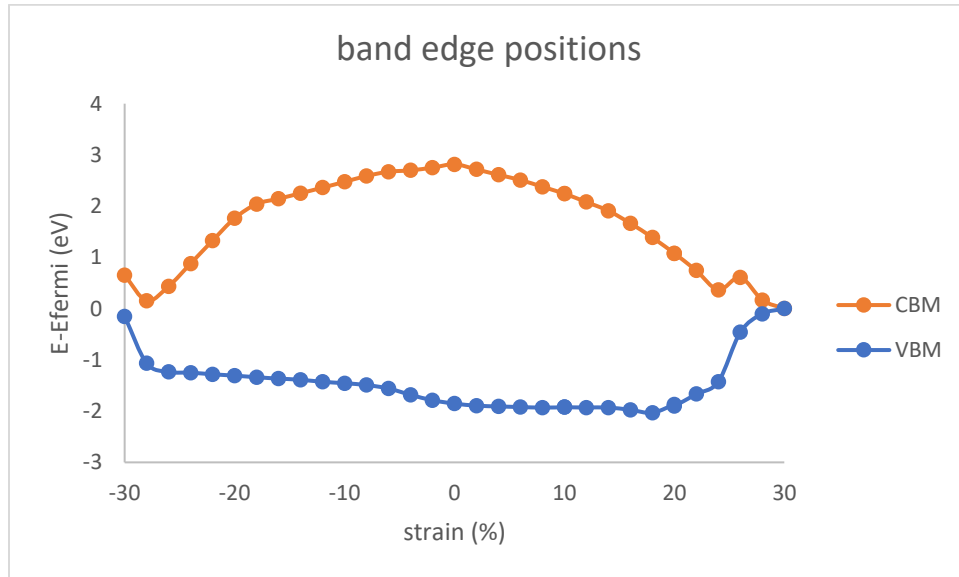
เมื่อคำนวณหาโครงสร้างแถบพลังงาน (band structure) และความหนาแน่นสถานะ (density of state) ได้ ดังรูปที่ 9 ก็จะสามารถหาได้ว่า CBM (conduction band minimum) และ VBM (valence band maximum) อยู่ที่ใดในโครงสร้างแถบพลังงาน (band structure) ซึ่งระยะระหว่าง CBM และ VBM คือความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (band gap) ที่แคบที่สุด โดยรายละเอียดในการเทียบโครงสร้างแถบพลังงานกับความหนาแน่นสถานะจะขอละไว้และจะนำไปเพิ่มเติมไว้ใน ภาคผนวก ซึ่งเมื่อทำเช่นนี้กับโครงสร้างของระบบที่อยู่ภายใต้ความเครียดค่าต่าง ๆ แล้ว ผลที่ได้เป็นไปดังรูปต่อไปนี้



รูปที่ 19 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (eV) กับความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัด (ค่าบวก) และความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง (ค่าลบ) (%)

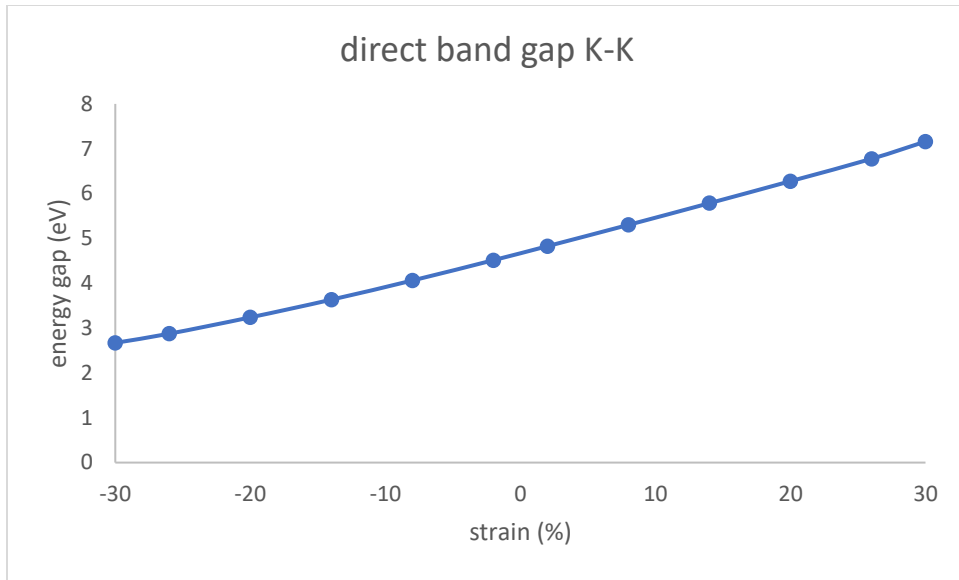
จะเห็นได้ว่าความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (band gap) มีค่าต่ำลงภายใต้ความเครียดทั้งสองรูปแบบ ซึ่งเมื่อเปรียบเทียบร้อยละของความเครียดที่เท่ากันของทั้งสองรูปแบบจะพบว่า ความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดนั้นทำให้ความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (band gap) ปิดลงได้เร็วกว่าความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง

นอกจากนี้หากพิจารณาการเคลื่อนตัวของตำแหน่งขอบในแถบพลังงาน (band structure) ซึ่งคือ CBM และ VBM พบว่าผลที่ได้เป็นดังรูปต่อไปนี้

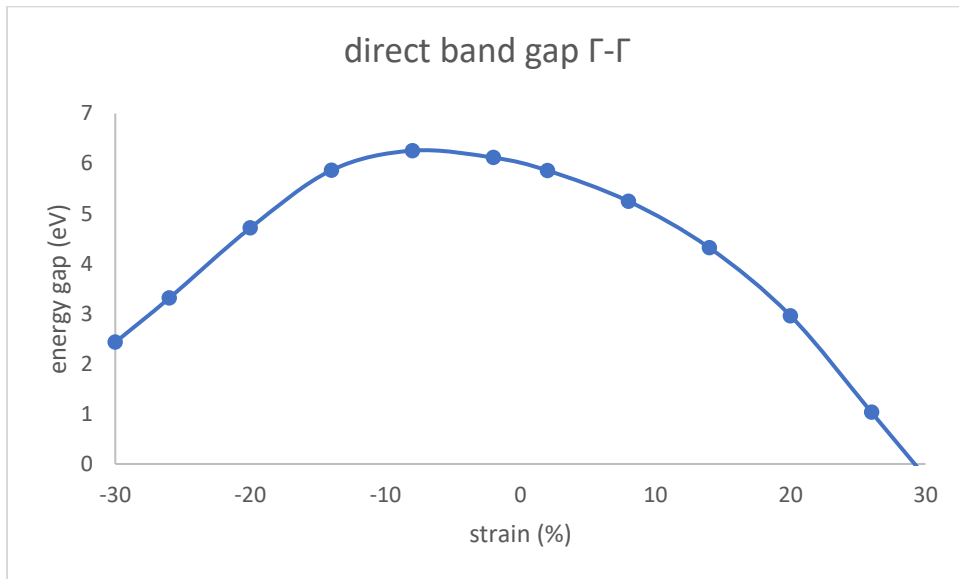


รูปที่ 20 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างพลังงาน (eV) ของ CBM และ VBM ที่ความเครียด (%) ค่าต่าง ๆ

ต่อมาหากพิจารณาความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (band gap) แบบ direct โดยจุดสูงสุดของแถบเวเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำกระแสที่ตำแหน่ง K และที่ตำแหน่ง  $\Gamma$  สำหรับช่วงความเครียดบางค่าที่แตกต่างกันได้ผลดังรูปต่อไปนี้



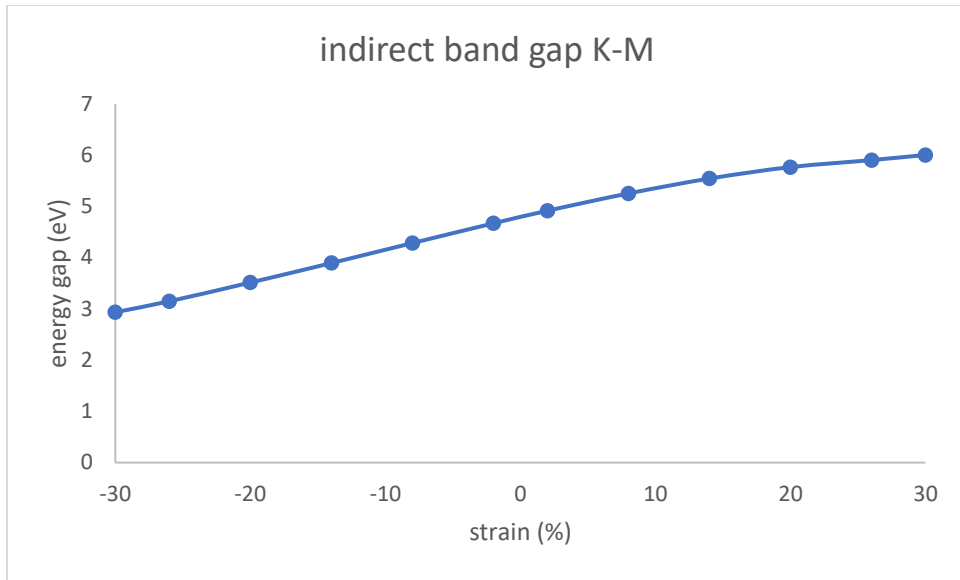
รูปที่ 21 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (eV) แบบ direct ที่ตำแหน่ง K กับ ความเครียด (%)



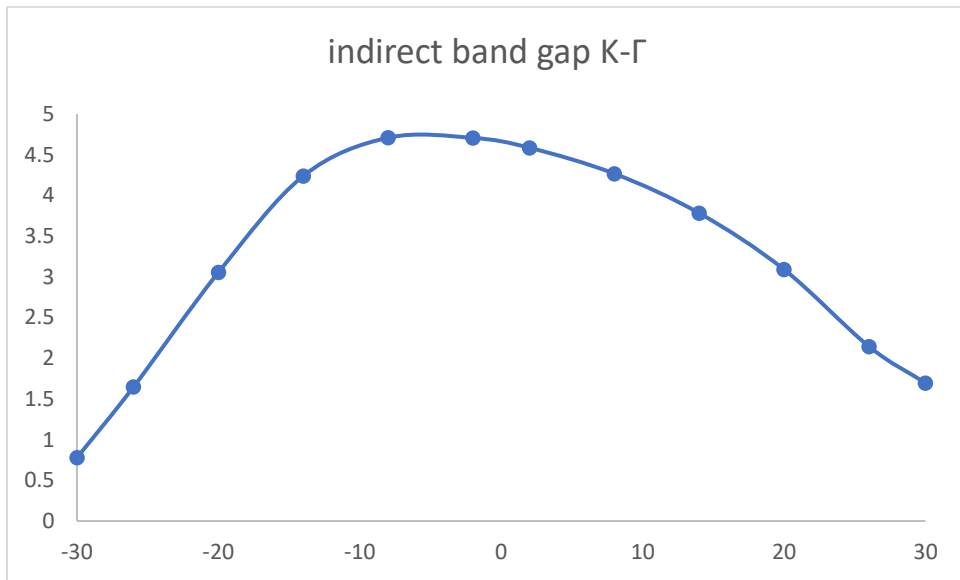
รูปที่ 22 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (eV) แบบ direct ที่ตำแหน่ง Γ กับ ความเครียด (%)

ต่อมาหากพิจารณาความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (band gap) แบบ indirect เมื่อจุดสูงสุดของแถบเวเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำกระแสอยู่ที่ตำแหน่ง K และ M กับที่ตำแหน่ง K และ Γ สำหรับช่วงความเครียดบางค่าที่แตกต่างกันได้ผลดังรูปต่อไปนี้

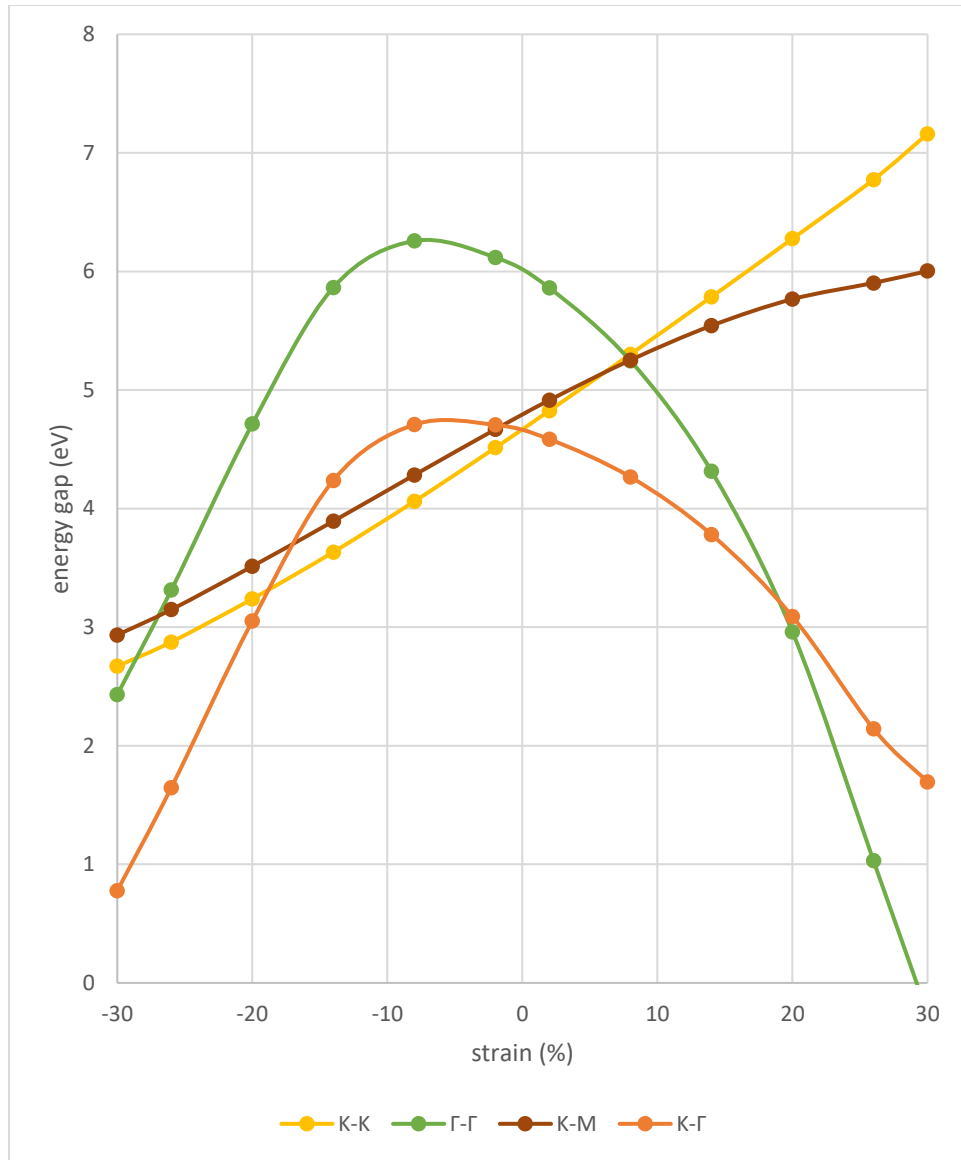




รูปที่ 23 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (eV) แบบ indirect เมื่อจุดสูงสุดของแถบเวเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำกระแสอยู่ที่ตำแหน่ง K และ M กับความเครียด (%)



รูปที่ 24 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (eV) แบบ indirect เมื่อจุดสูงสุดของแถบเวเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำกระแสอยู่ที่ตำแหน่ง K และ  $\Gamma$  ตามลำดับ กับความเครียด (%)



รูปที่ 25 กราฟเปรียบเทียบของความสัมพันธ์ระหว่างความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (eV) ทั้งแบบ direct เมื่อจุดสูงสุดของแถบเวเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำกระแสอยู่ที่ตำแหน่ง K,  $\Gamma$  และแบบ indirect เมื่อจุดสูงสุดของแถบเวเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำกระแสอยู่ที่ตำแหน่ง K และ  $\Gamma$ , K และ M ตามลำดับ กับความเครียด (%)

โดยปกติแล้ว h-BN ชั้นเดียวจะเป็นวัสดุสองมิติที่มีช่องว่างแถบพลังงานเป็นแบบ direct เมื่อจุดสูงสุดของแถบเวเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำกระแสอยู่ที่ตำแหน่ง K แต่จากรูปที่ 21 จนถึงรูปที่ 25 เมื่อพิจารณาภายใต้ความเครียดค่าต่าง ๆ พบว่า ในกรณีของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึงให้ผลการคำนวณช่องว่างแถบพลังงาน (band gap) จากการพิจารณาขอบของแถบพลังงาน CBM ต่ำสุด และ VBM สูงสุด ร่วมกับการพิจารณาความหนาแน่นสถานะ ผลที่ได้ค่อนข้างสอดคล้องกับการคำนวณช่องว่างแถบพลังงานที่เป็นแบบ direct ที่ตำแหน่ง K

อยู่ในช่วงความเครียดค่าหนึ่ง ก่อนที่จะเปลี่ยนไปเป็นแบบ indirect ที่ตำแหน่ง K และ  $\Gamma$  หรือมีการเปลี่ยนแปลงทางไฟฟ้า (electronic phase transition) ที่ช่วงความเครียด 19 % – 20 % โดยประมาณ ดังรูปที่ 25

แต่ในกรณีของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัด (compressive) มีแนวโน้มที่จะเปลี่ยนจากช่องว่างแถบพลังงานแบบ direct ที่ตำแหน่ง K และเปลี่ยนเป็น indirect ที่ตำแหน่ง K และ  $\Gamma$  ในช่วงความเครียดที่สั้นมาก ในช่วงแรกกล่าวคือแทบจะในทันทีที่ให้ความเครียดเข้าไปกระทำ และเมื่อให้ความเครียดเพิ่มขึ้นไปเรื่อย ๆ ถึงช่วงความเครียด 19 % – 20 % โดยประมาณ ก็เปลี่ยนกลับไปเป็นแบบ direct ได้อีกครั้งที่ตำแหน่ง  $\Gamma$

#### 4.3 วิเคราะห์ผลของความเครียดที่มีต่อโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียวกับการประยุกต์ใช้

ในการทำ heterostructure หรือนำไปห่อหุ้มวัสดุสองมิติด้วยกันเองอย่างมีประสิทธิภาพ วัสดุจำเป็นต้องมีความเข้ากันด้วย เพราะเหตุนี้เพื่อไม่ให้เกิดความไม่เข้ากัน (mismatch) ของวัสดุ จึงจำเป็นต้องมีความเค้น (stress) มากกระทำเพื่อให้สามารถยืดหรือหดโครงสร้างของวัสดุจนเกิดความเครียด (strain) หรือความเครียดเฉือน (shear strain) ขึ้นมาได้ดังที่กล่าวถึงรายละเอียดไปแล้วในบทที่ 1

จากข้อมูลของงานวิจัยอื่นที่มีการรวบรวมค่า lattice parameter ของวัสดุสองมิติบางส่วนไว้ แสดงดังตารางด้านล่าง [24] เราสามารถนำข้อมูลดังกล่าวมาคำนวณหาความไม่เข้ากัน (mismatch) ของโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN) กับวัสดุสองมิติบางส่วนได้

ตารางที่ 8 แสดงความไม่เข้ากันของแลตทิซสำหรับวัสดุสองมิติอื่น ๆ เทียบกับโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN)

2D materials	lattice parameter a=b (angstrom)	lattice mismatch (%)
graphene	2.464	-1.6
h-BN	2.504	0
MoS <sub>2</sub>	3.148	25.7
WS <sub>2</sub>	3.154	26.0
VS <sub>2</sub>	3.221	28.6
WSe <sub>2</sub>	3.286	31.2
MoSe <sub>2</sub>	3.289	31.3
SnS <sub>2</sub>	3.645	45.6

ซึ่งจะเห็นว่าข้อมูลในตารางจากงานจากวิจัยดังกล่าวรายงานค่า lattice parameter ของ h-BN ไว้ใกล้เคียงกับที่งานวิจัยโครงการนี้คำนวณได้ โดยมีความคลาดเคลื่อนเพียงเล็กน้อยเท่านั้นจึงสามารถใช้ข้อมูลดังกล่าวในการพิจารณาร้อยละความไม่เข้ากันได้ ในแง่หนึ่งความคลาดเคลื่อนของแลตทิซ (lattice mismatch) นี้เองก็คือร้อยละของ biaxial strain ที่ใช้ในงานนี้ด้วยเช่นกัน

หากจะนำ h-BN ไปสร้างเป็นโครงสร้างสองชั้น (bilayers) กับ กราฟีน (graphene) ก็จะทำให้ความไม่เข้ากันอยู่ที่ -1.6 % กล่าวคือกราฟีนนั้นมี lattice parameter ที่เล็กกว่า ซึ่งถ้าจะตรึงกราฟีนไว้แล้ววาง h-BN ลงไปสร้างพันธะกัน อาจต้องใช้ผลจากความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัด (compressive strain) กระทำกับ h-BN โดยจะเห็นได้จากผลในงานวิจัยโครงการนี้ เมื่อ h-BN อยู่ภายใต้ความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดจะมีความกว้างของช่องว่างพลังงานที่ลดลง แต่ก็ของกราฟีนดูเหมือนจะลดลงเพียงเล็กน้อยเท่านั้น จากรูปที่ 4.16 จะเห็นว่าช่วง 0 % - 2 % ของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดมีการเปลี่ยนแปลงของความกว้างของช่องว่างพลังงานไม่ถึง 0.1 eV เท่านั้น ดังนั้นกรณีของกราฟีนที่ไม่เข้ากันเพียง 1.6 % อาจไม่ส่งผลต่อการเปลี่ยนแปลงของความกว้างของช่องว่างพลังงานอย่างมีนัยสำคัญ

ในทำนองเดียวกันหากจะนำไปประกบกับวัสดุอื่นดังที่ยกมาในตารางข้างต้น อาจจะต้องใช้ผลจากความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง (tensile strain) เข้าช่วย ซึ่งแน่นอนว่าความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานของ h-BN ก็ยังคงลดลงเช่นเดิม เพียงแต่ไม่ได้ลดลงเร็วไปกว่าในกรณีของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัด ดังนั้นหากจะนำ h-BN ไปทำเป็นโครงสร้างในลักษณะนี้ เพื่อต้องการใช้งานคุณสมบัติในเรื่องของความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานก็อาจจะต้องคำนึงถึงผลของความเครียดที่มีต่อระบบร่วมด้วย

## บทที่ 5

### สรุปผลและข้อเสนอแนะ

#### 5.1 สรุปผลการศึกษา

จากการศึกษาในงานวิจัยโครงการนี้พบว่าโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN) เป็นวัสดุสองมิติที่มีความเป็นฉนวนสูงมาก กล่าวคือมีความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน (band gap) ที่ค่อนข้างกว้าง ซึ่งในงานนี้พบว่าที่อุณหภูมิ 0 K ในสภาวะปกติที่ไม่มีผลของความเครียดมากกระทำจะมีค่าอยู่ที่ 4.67 eV ด้วยการคำนวณจาก DFT ซึ่งจะอยู่ในช่วงที่ดูดซับคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าอย่าง ultraviolet ได้ดี (ช่วงความยาวคลื่นประมาณ 200 nm)

และพบว่าความเครียดมีผลต่อคุณสมบัติทางไฟฟ้าของโบรอนไนไตรด์ชั้นเดียว (h-BN) โดยมีแนวโน้มที่ความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานมีค่าลดน้อยลงทั้งในส่วนของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัด (compressive strain) และความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง (tensile strain) แต่ในส่วนของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดนั้นจะทำให้ความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานมีค่าลดน้อยลงเร็วกว่าความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง หรืออาจกล่าวได้ว่าผลของความเครียดทำให้ h-BN ชั้นเดียวมีความสามารถในการนำไฟฟ้าที่ดีขึ้น

ในกรณีที่เพิ่มความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัด (compressive) ไปเรื่อย ๆ พบว่า ถ้าพิจารณาจุดสูงสุดของแถบเวเลนซ์และจุดต่ำสุดของแถบนำกระแสอยู่ที่ตำแหน่ง  $k$  แถบพลังงานมีแนวโน้มจะเคลื่อนตัวออกจากกัน ในขณะที่ถ้าพิจารณาที่ตำแหน่ง  $\Gamma$  แถบพลังงานมีแนวโน้มที่จะเคลื่อนตัวเข้าหากัน ซึ่งในทางกลับกันกรณีที่เพิ่มความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง (tensile) ไปเรื่อย ๆ พบว่า แม้จะพิจารณาที่ตำแหน่ง  $k$  หรือตำแหน่ง  $\Gamma$  แถบพลังงานก็ยังมีแนวโน้มที่จะเคลื่อนตัวเข้าหากันในทำนองเดียวกันทั้งคู่

นอกจากนี้ยังพบว่าความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานมีการเปลี่ยนแปลงสำหรับความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดและความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึงในลักษณะที่แตกต่างกัน ในกรณีของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึงมีผลการคำนวณช่องว่างแถบพลังงาน (band gap) จากการพิจารณาจากขอบของแถบพลังงานต่ำสุดและสูงสุดร่วมกับความหนาแน่นสถานะ ซึ่งค่อนข้างสอดคล้องกับการคำนวณช่องว่างแถบพลังงานที่เป็นแบบ direct ที่ตำแหน่ง  $K$  อยู่ในช่วงความเครียดค่าหนึ่ง ก่อนที่จะเปลี่ยนไปเป็นแบบ indirect ที่ตำแหน่ง  $K$  และ  $\Gamma$  ซึ่งการเปลี่ยนจาก direct ไปเป็น indirect นี้ อาจทำให้ไม่สะดวกต่อการใช้งานได้ เพราะจะต้องอาศัยพลังงานเพิ่มเติมในการที่จะเปลี่ยนแปลงโมเมนตัมของอิเล็กตรอนในปริภูมิส่วนกลับเพื่อเปลี่ยนสถานะขึ้นไปยังแถบการนำไฟฟ้า (conduction band) ได้

แต่ในกรณีของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดกลับมีแนวโน้มที่จะเปลี่ยนจากช่องว่างแถบพลังงานจากแบบ direct ที่ตำแหน่ง K กลายเป็นแบบ indirect ที่ตำแหน่ง K และ  $\Gamma$  ในช่วงความเครียดที่สั้นมากช่วงแรก และเมื่อให้ความเครียดเพิ่มขึ้นไปเรื่อย ๆ ก็เปลี่ยนกลับไปเป็นแบบ direct อีกครั้งที่ตำแหน่ง  $\Gamma$  ซึ่งอาจเป็นสิ่งที่น่าสนใจ แต่อย่างไรก็ดีการที่เริ่มเปลี่ยนจาก indirect เป็น direct อีกครั้งที่ช่วงที่ความเครียดสูง ๆ ในความเป็นจริงอาจทำได้ยาก เพราะอะตอมจะเริ่มชิดกันมากขึ้นเรื่อย ๆ ทำให้โครงสร้างที่เกิดขึ้นอาจไม่เสถียรเนื่องจากมีพลังงานรวมในระบบค่อนข้างสูง

และเมื่อพิจารณาความสัมพันธ์ที่สอดคล้องระหว่างความไม่เข้ากัน (mismatch) และความเครียดที่เป็น biaxial strain ในงานนี้ก็พบว่า การนำ h-BN ไปทำเป็นโครงสร้างหลายชั้น (heterostructure) กับวัสดุสองมิติอื่น ๆ อาจต้องคำนึงถึงผลของความเครียดที่เกิดขึ้นจากการสร้างความเค้นเพื่อยึดหดพันธะให้มีความเข้ากันในขณะที่ประกบกับวัสดุด้วยเพื่อให้บรรลุวัตถุประสงค์ของการใช้งาน แต่อย่างไรก็ตามการนำไปประกบกับกราฟีนก็อาจไม่ต้องคำนึงถึงผลกระทบจากความเครียดมากนัก เนื่องจากความไม่เข้ากัน 1.6 % นั้นทำให้ความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานของ h-BN เปลี่ยนแปลงไปไม่ถึง 0.1 eV โดยประมาณ

## 5.2 ข้อเสนอแนะ

- 1) อาจต้องทำการคำนวณข้อมูลให้ละเอียดมากขึ้นเพื่อให้ได้แนวโน้มที่แม่นยำมากขึ้น
- 2) อาจต้องพิจารณาพลังงานที่ใช้ในการก่อพันธะด้วยว่า ณ เวลาที่มีผลเนื่องมาจากความเครียดค่าต่าง ๆ กระทำอยู่ จะทำให้อะตอมของวัสดุยังสามารถก่อพันธะซึ่งกันและกันได้หรือไม่
- 3) การคำนวณคุณสมบัติทางไฟฟ้าของวัสดุด้วย DFT เป็นที่ทราบกันดีว่าจะให้ค่าความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานที่แคบกว่าปกติ ถ้าคำนวณด้วยฟังก์ชันแนลที่ให้ผลแม่นยำกว่านี้ก็น่าจะได้ผลที่ดีขึ้น

## บรรณานุกรม

- [1] Geim, A. K. (2009). "Graphene: Status and Prospects". *Science*. 324(5934): 1530–1534. arXiv:0906.3799. Bibcode:2009Sci...324.1530G. doi:10.1126/science.1158877. PMID 19541989. S2CID 206513254.
- [2] Ares, P., Cea, T., Holwill, M., Wang, Y. B., Roldán, R., Guinea, F., Andreeva, D. V., Fumagalli, L., Novoselov, K. S., Woods, C. R., Piezoelectricity in Monolayer Hexagonal Boron Nitride. *Adv. Mater.* 2020, 32, 1905504. <https://doi.org/10.1002/adma.201905504>
- [3] Huang, T., Wei, W., Chen, X., Dai, N., Strained 2D Layered Materials and Heterojunctions. *ANNALENDERPHYSIK* 2019, 531,1800465. <https://doi.org/10.1002/andp.201800465>
- [4] Bagayoko, Diola (December 2014). "Understanding density functional theory (DFT) and completing it in practice". *AIP Advances*. 4 (12): 127104. doi:10.1063/1.4903408. ISSN 2158-3226
- [5] Kohn, W. (1999). Nobel Lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals. *Reviews of Modern Physics*, 71(5), 1253–1266. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.71.1253>
- [6] Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*, 136(3B), B864–B871. <https://doi.org/10.1103/physrev.136.b864>
- [7] Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, 140(4A), A1133–A1138. <https://doi.org/10.1103/physrev.140.a1133>
- [8] Perdew, J. P., Chevary, J. A., Vosko, S. H., Jackson, K. A., Pederson, M. R., Singh, D. J., & Fiolhais, C. (1992). Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation. *Physical Review B*, 46(11), 6671–6687. <https://doi.org/10.1103/physrevb.46.6671>
- [9] Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 77(18), 3865–3868. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.77.3865>

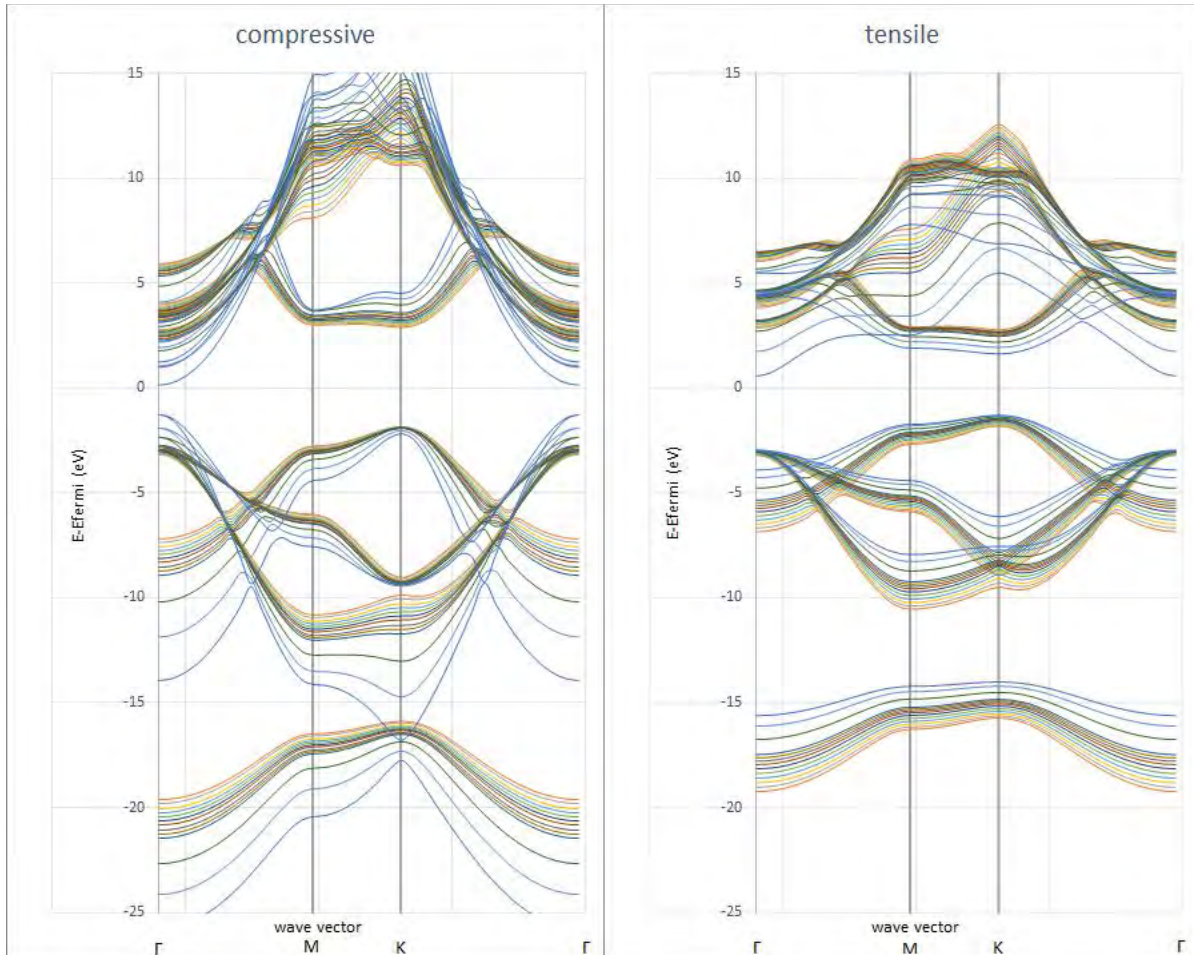
- [10] P. Giannozzi, O. Baseggio, P. Bonfà, D. Brunato, R. Car, I. Carnimeo, C. Cavazzoni, S. de Gironcoli, P. Delugas, F. Ferrari Ruffino, A. Ferretti, N. Marzari, I. Timrov, A. Urru, S. Baroni; *J. Chem. Phys.* **152**, 154105 (2020) <https://doi.org/10.1063/5.0005082>
- [11] Audouze, C., Jollet, F., Torrent, M., & Gonze, X. (2008). Comparison between projector augmented-wave and ultrasoft pseudopotential formalisms at the density-functional perturbation theory level. *Physical Review B*, 78(3). <https://doi.org/10.1103/physrevb.78.035105>
- [12] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* 13, 5188 (1976).
- [13] Materials Data on BN by Materials Project [Data set]. LBNL Materials Project; Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), Berkeley, CA (United States). <https://doi.org/10.17188/1281942>
- [14] Fletcher, Roger (1987), *Practical Methods of Optimization* (2nd ed.), New York: John Wiley & Sons, ISBN 978-0-471-91547-8
- [15] Ding, Yujiang & Peng, Yu-Gui & Zhu, Yifan & Xudong, Fan & Yang, Jing & Liang, Bin & Zhu, Xuefeng & Wan, Xiangang & Cheng, Jianchun. (2019). Experimental Demonstration of Acoustic Chern Insulators. *Physical Review Letters*. 122. 014302. [10.1103/PhysRevLett.122.014302](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.014302).
- [16] Zhou, J., Wang, Q., Sun, Q., & Jena, P. (2010). Electronic and magnetic properties of a BN sheet decorated with hydrogen and fluorine. *Physical Review B*, 81(8). <https://doi.org/10.1103/physrevb.81.085442>
- [17] Elias, C., Valvin, P., Pelini, T. et al. Direct band-gap crossover in epitaxial monolayer boron nitride. *Nat Commun* 10, 2639 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41467-019-10610-5>
- [18] Jin, M.-S., & Kim, N.-O. (2010). Photoluminescence of Hexagonal Boron Nitride (h-BN) Film. *Journal of Electrical Engineering and Technology*, 5(4), 637–639. <https://doi.org/10.5370/jeet.2010.5.4.637>



- [19] Duerloo, K.-A. N., Ong, M. T., & Reed, E. J. (2012). Intrinsic Piezoelectricity in Two-Dimensional Materials. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 3(19), 2871–2876. <https://doi.org/10.1021/jz3012436>
- [20] Watanabe, K., Taniguchi, T., & Kanda, H. (2004). Direct-bandgap properties and evidence for ultraviolet lasing of hexagonal boron nitride single crystal. *Nature Materials*, 3(6), 404–409. <https://doi.org/10.1038/nmat1134>
- [21] Peng, Q., & De, S. (2012). Tunable band gaps of mono-layer hexagonal BNC heterostructures. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 44(7–8), 1662–1666. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2012.04.011>
- [22] Giovannetti, G., Khomyakov, P. A., Brocks, G., Kelly, P. J., & van den Brink, J. (2007). Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: Ab initio density functional calculations. *Physical Review B*, 76(7). <https://doi.org/10.1103/physrevb.76.073103>
- [23] Perdew, J. P., Kurth, S., Zupan, A., & Blaha, P. (1999). Accurate Density Functional with Correct Formal Properties: A Step Beyond the Generalized Gradient Approximation. *Physical Review Letters*, 82(12), 2544–2547. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.82.2544>
- [24] Biroju, Ravi & Narayanan, Tharangattu & Vineesh, Thazhe Veetil. (2018). New advances in 2D electrochemistry—Catalysis and Sensing. 10.1201/9781315152042-7.
- [25] Yankowitz, M., Ma, Q., Jarillo-Herrero, P. et al. van der Waals heterostructures combining graphene and hexagonal boron nitride. *Nat Rev Phys* 1, 112–125 (2019). <https://doi.org/10.1038/s42254-018-0016-0>
- [26] Becke, A. D. (1993). A new mixing of Hartree–Fock and local density-functional theories. *The Journal of Chemical Physics*, 98(2), 1372–1377. <https://doi.org/10.1063/1.464304>

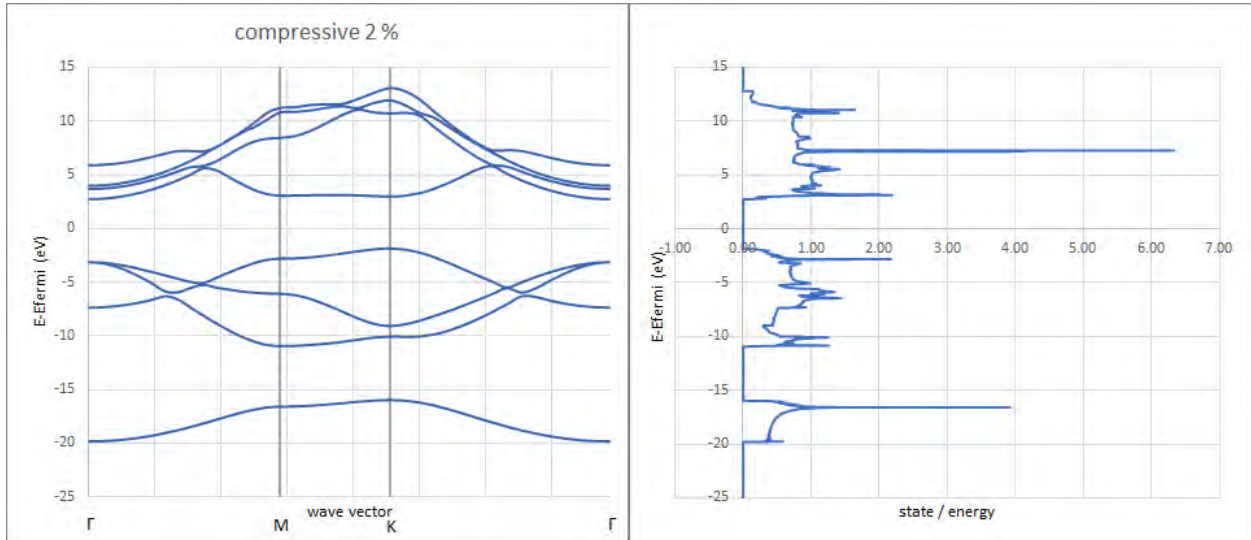
## ภาคผนวก

รูปที่ 26 ภาคผนวกรูปที่ 1 แสดงการเปรียบเทียบระหว่างโครงสร้างแถบพลังงาน (band structure) ภายใต้ความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง (tensile) และความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัด (compressive) ที่ความเครียด 1 % , 2 % , 3 % , ... , 25 %

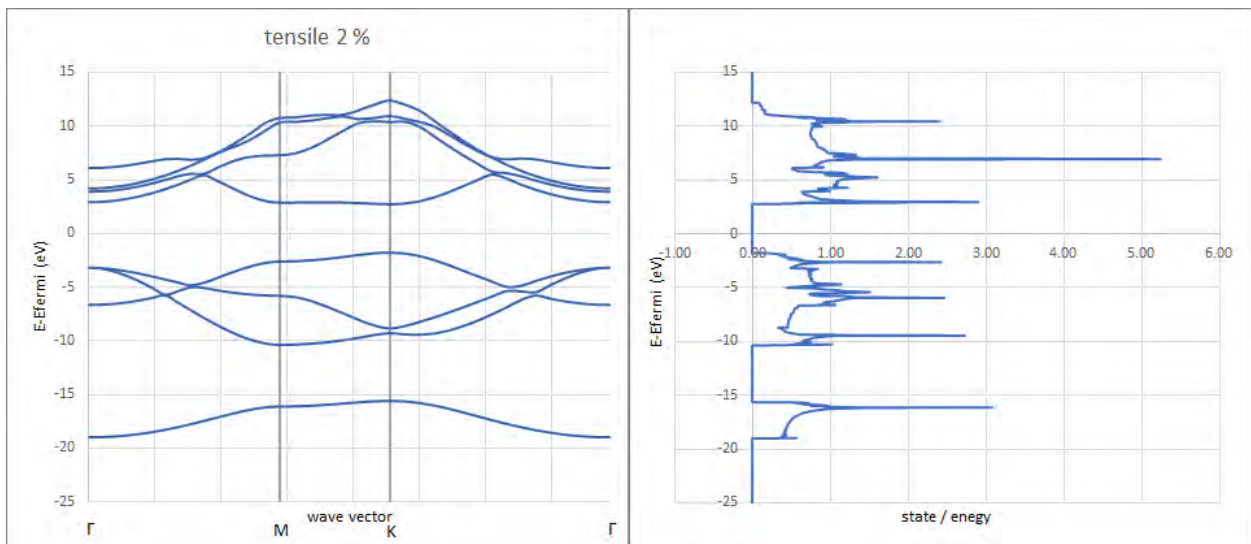


ภาคผนวก รูปที่ 2 ถึงรูปที่ 9 แสดงการเปรียบเทียบระหว่างโครงสร้างแถบพลังงานกับความหนาแน่นสถานะ เพื่อใช้พิจารณาความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานที่แคบที่สุดจาก CBM และ VBM ที่ความเครียดบางค่า

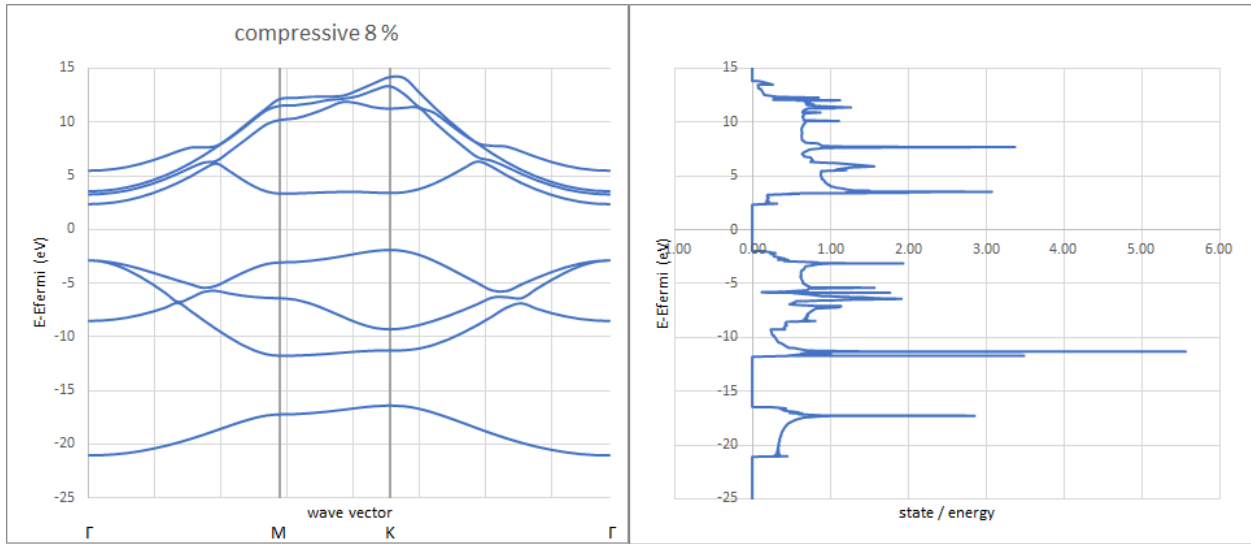
รูปที่ 27 ภาคผนวกรูปที่ 2



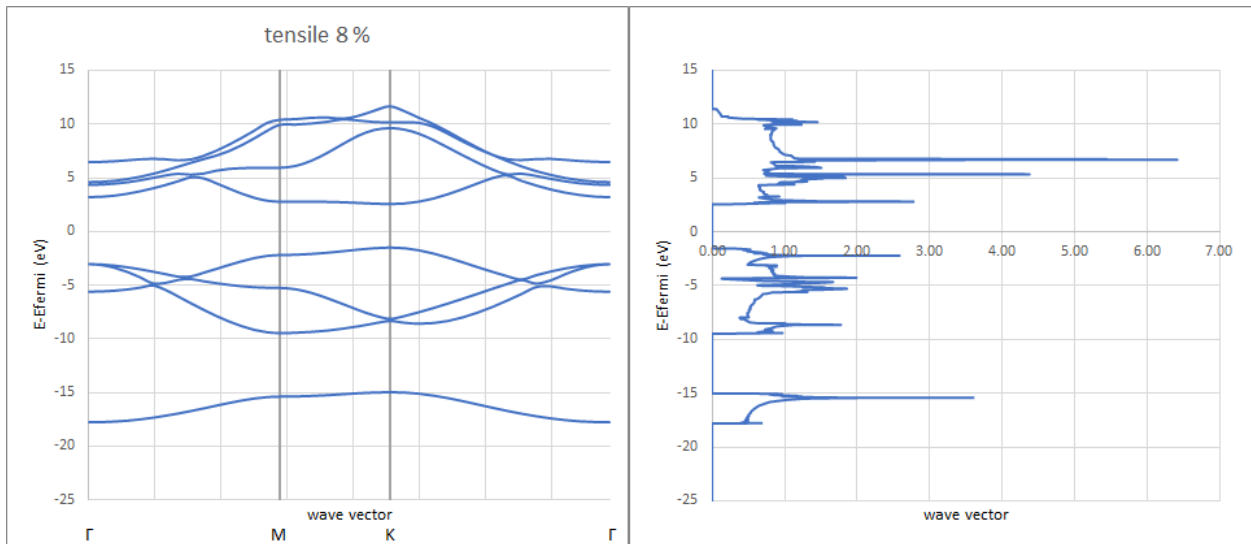
รูปที่ 28 ภาคผนวกรูปที่ 3



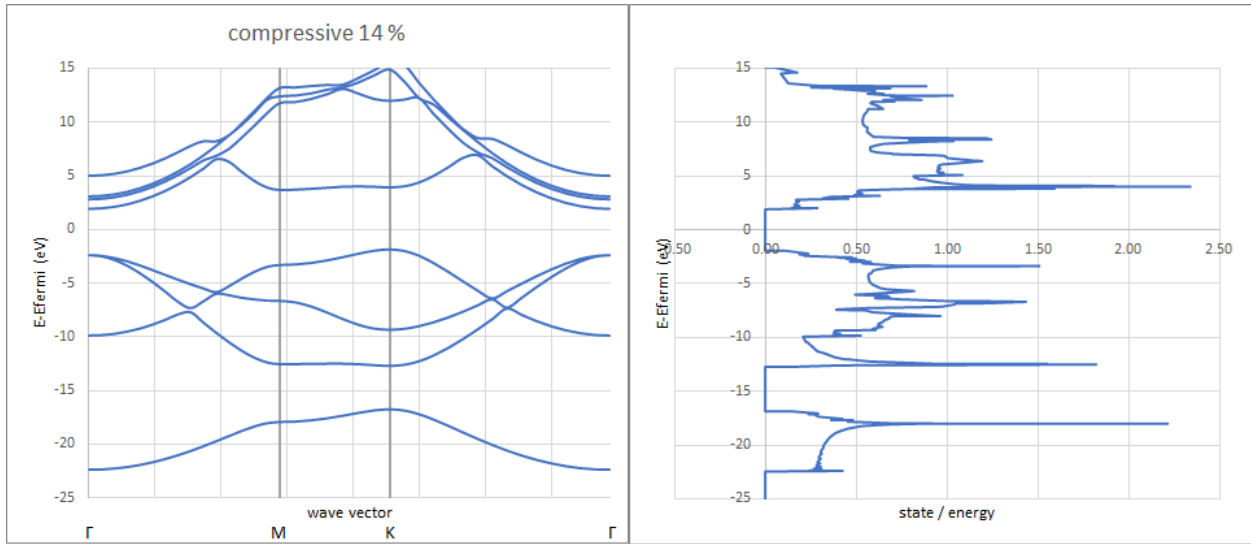
รูปที่ 29 ภาคผนวกรูปที่ 4



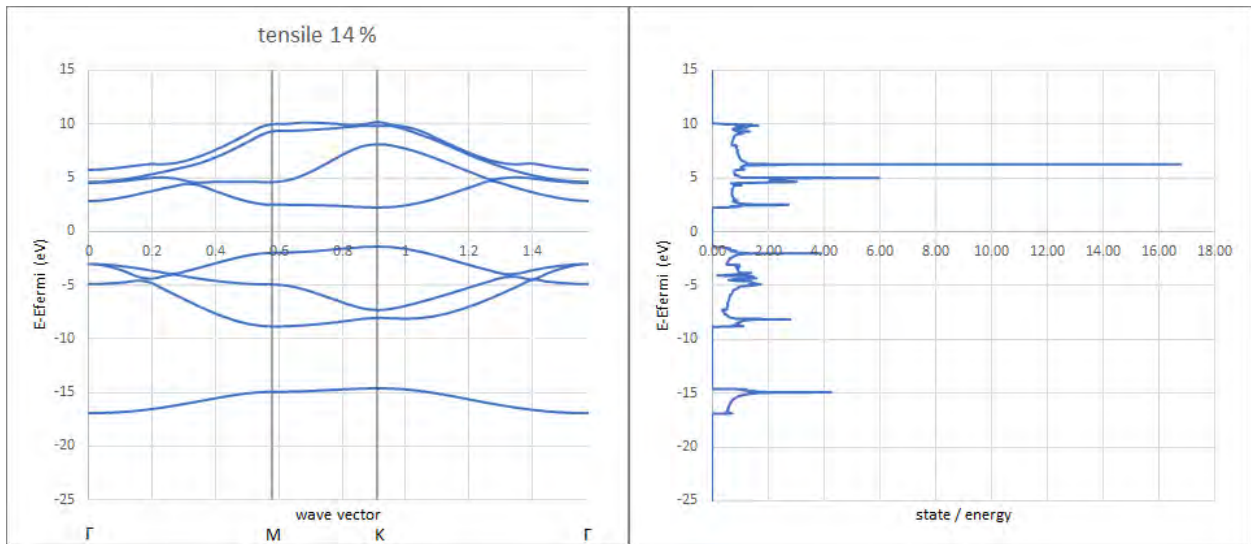
รูปที่ 30 ภาคผนวกรูปที่ 5



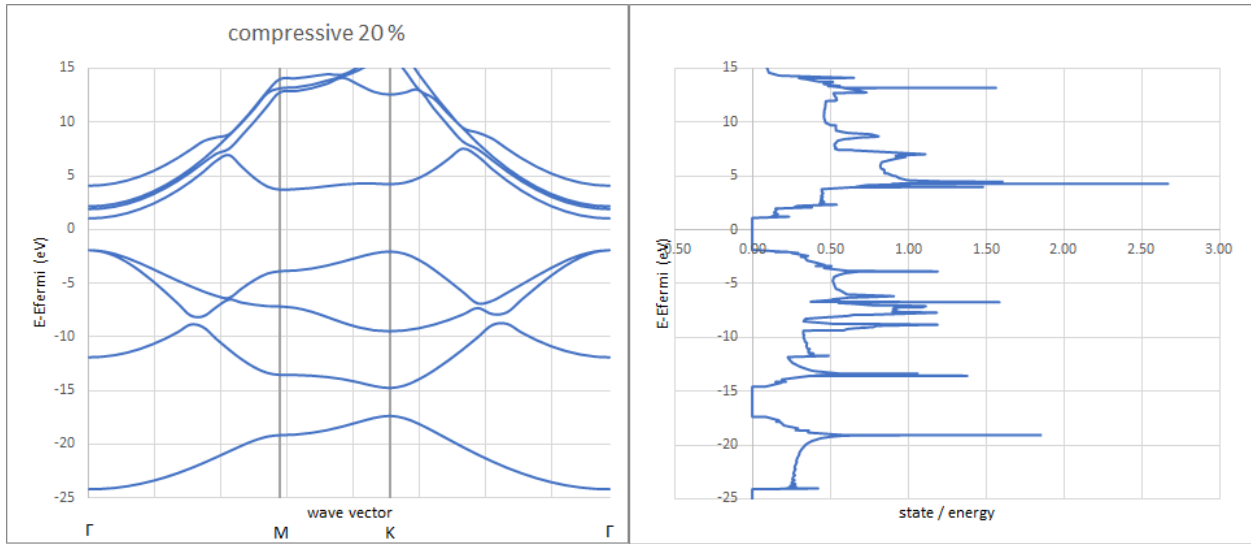
รูปที่ 31 ภาคผนวกรูปที่ 6



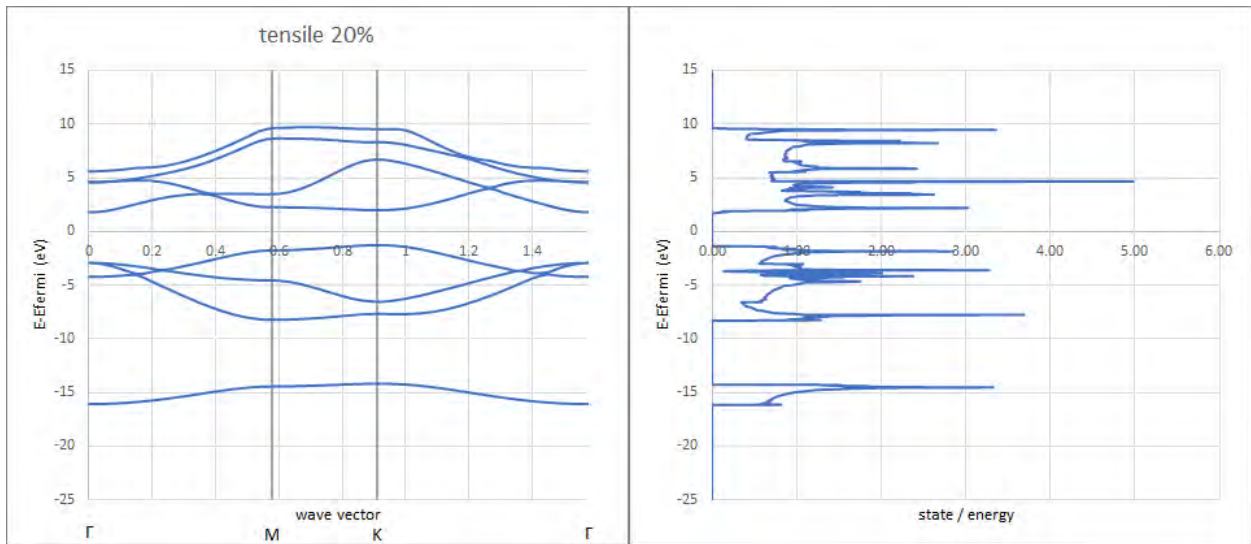
รูปที่ 32 ภาคผนวกรูปที่ 7



รูปที่ 33 ภาคผนวกรูปที่ 8

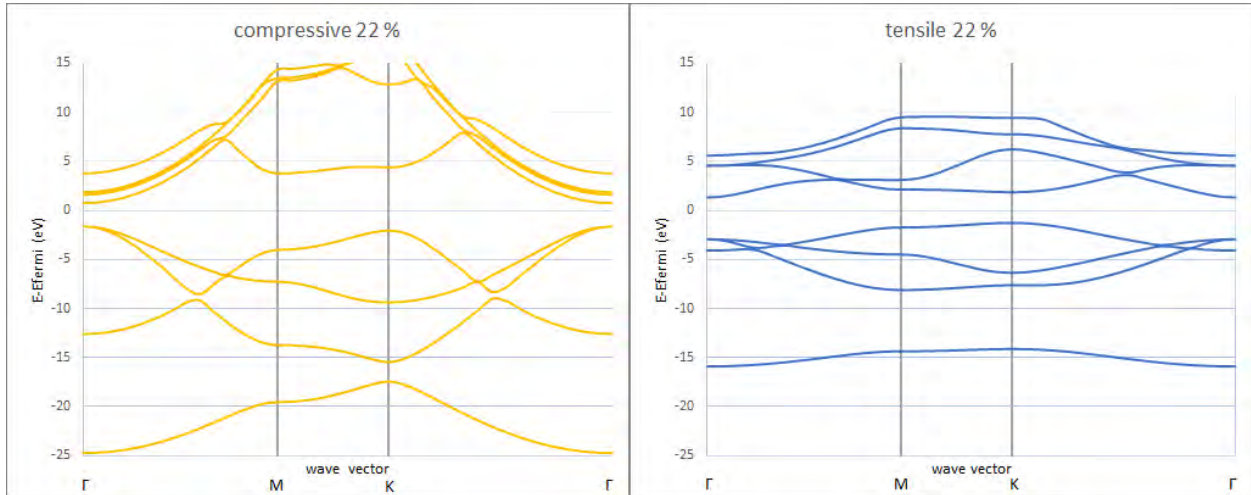


รูปที่ 34 ภาคผนวกรูปที่ 9

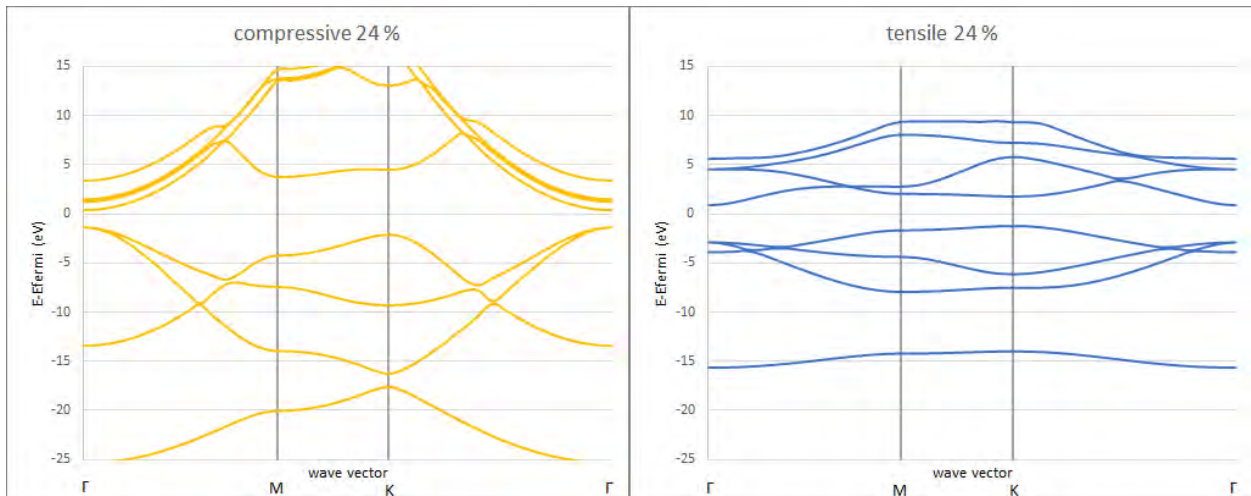


ภาคผนวก รูปที่ 10 ถึงรูปที่ 14 แสดงการเปรียบเทียบระหว่างโครงสร้างแถบพลังงานที่ความเครียด 22 % , 24 % , 26 % , 28 % และ 30 % ของความเครียดอันเนื่องมาจากแรงอัดและความเครียดอันเนื่องมาจากแรงดึง

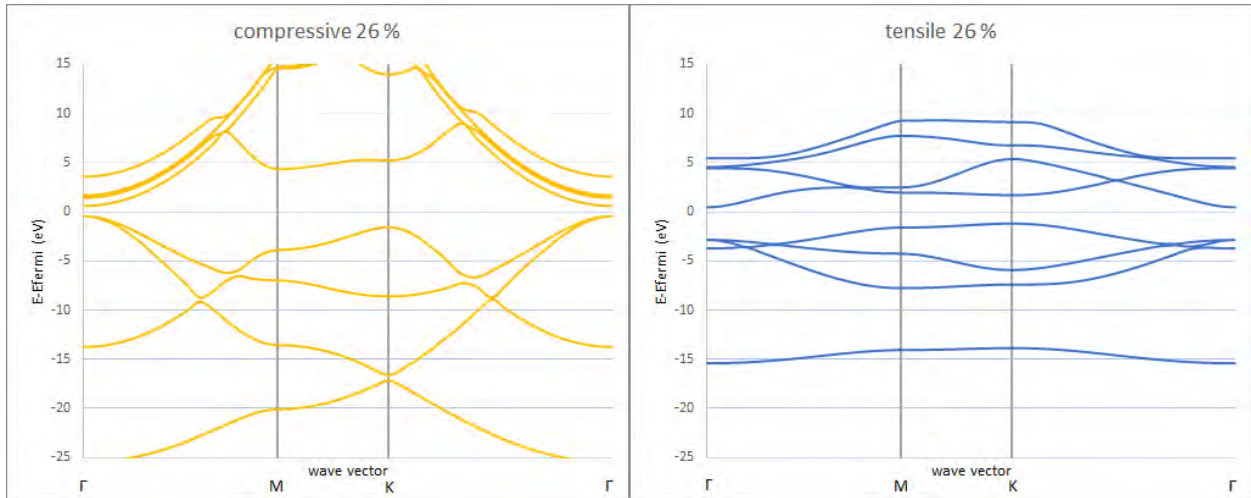
รูปที่ 35 ภาคผนวกรูปที่ 10



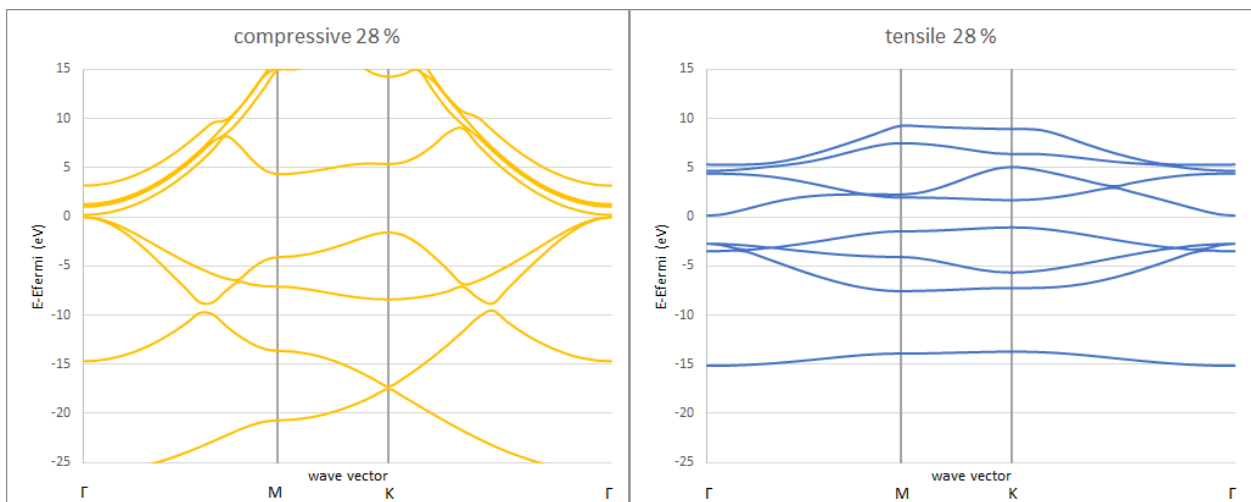
รูปที่ 36 ภาคผนวกรูปที่ 11



รูปที่ 37 ภาคผนวกรูปที่ 12

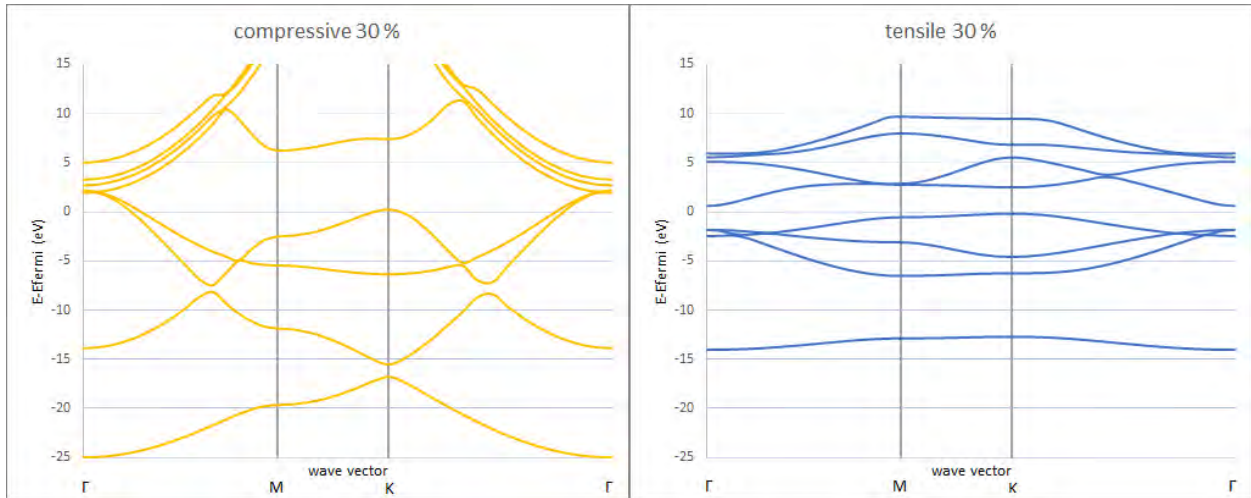


รูปที่ 38 ภาคผนวกรูปที่ 13

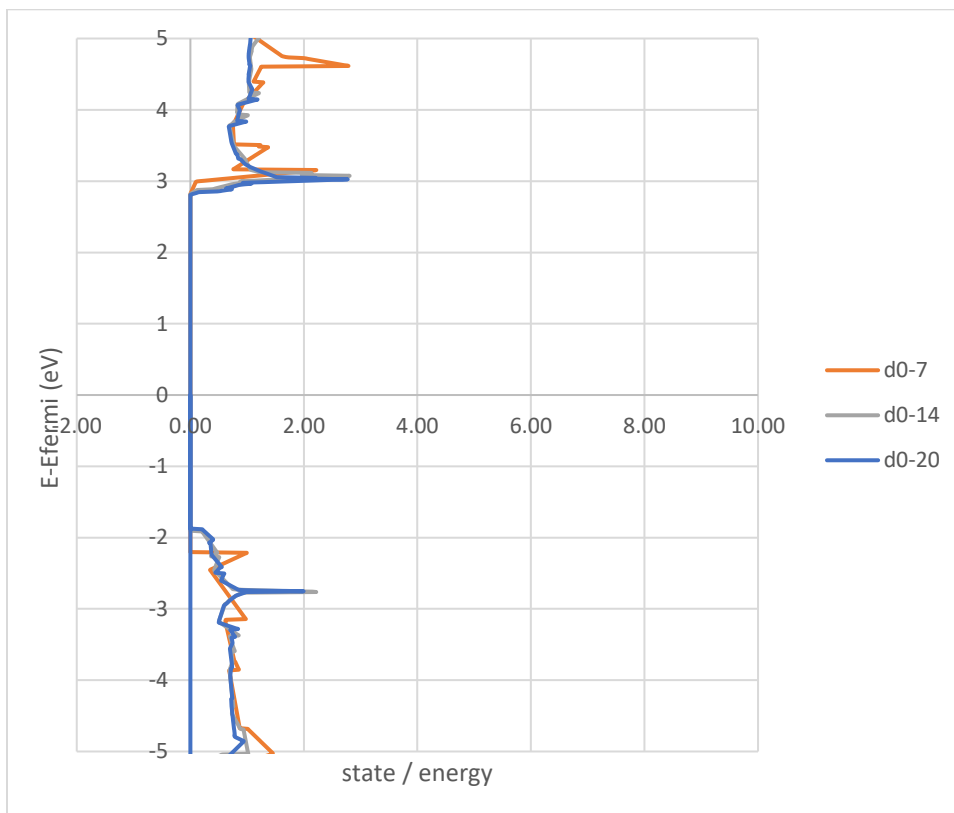




รูปที่ 39 ภาคผนวกรูปที่ 14



รูปที่ 40 ภาคผนวกรูปที่ 15 ในการคำนวณความหนาแน่นสถานะด้วย DFT ในโปรแกรม QE หลังจากที่ทำกระบวนการ SCF ไปแล้วเราจะไม่ทำ SCF อีก (NSCF) แต่จะเพิ่มจำนวนจุดในปริภูมิส่วนกลับเพื่อเพิ่มจำนวนจุดข้อมูลก่อนนำข้อมูลดังกล่าวมาสร้างเป็นกราฟความหนาแน่นสถานะ ซึ่งรูปด้านล่างแสดงความหนาแน่นสถานะของ h-BN ที่สภาวะปกติไม่มีผลของความเครียดมากระทำ แต่ใช้ค่า  $N$  ใน  $N \times N \times 1$  ที่ต่างกันคือ  $N = 7, 14$  และ  $20$  ตามลำดับ



ซึ่งจะเห็นว่าความกว้างของช่องว่างแถบพลังงานที่ได้จะมีค่าต่างกันอย่างเห็นได้ชัดในกรณีของ  $N = 7$  และ  $N = 14$  ในขณะที่  $N = 14$  และ  $N = 20$  ให้ค่าที่ค่อนข้างใกล้เคียงกัน อย่างไรก็ตามการใช้จำนวนจุดมากยิ่งทำให้ได้ค่าที่ละเอียดยิ่งขึ้น และการคำนวณของโปรแกรมที่  $N$  ค่าดังกล่าวที่เลือกมาแสดงไม่ได้ต่างกันมาก ในงานวิจัยโครงการนี้จึงใช้  $N = 20$  ในการสร้างกราฟความหนาแน่นสถานะ ซึ่งนำไปสู่การคำนวณหาความกว้างของช่องว่างแถบพลังงาน ซึ่งได้ผลเป็นไปตามบทที่ 4