

บทที่ 4

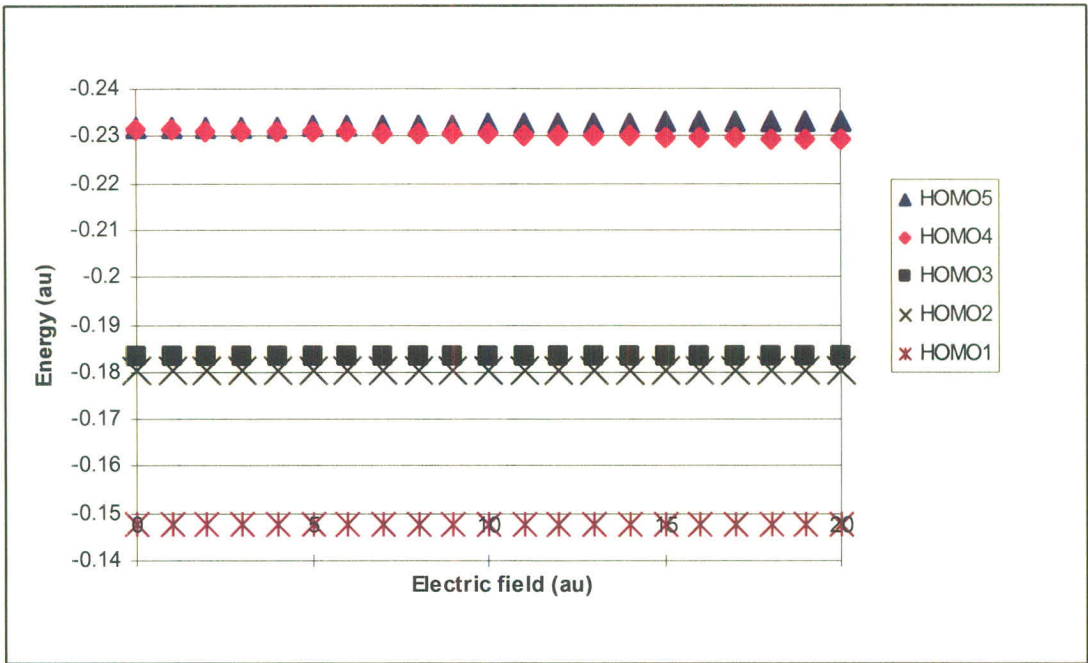
ผลและการวิเคราะห์ข้อมูล

1. ผลของข้อมูล

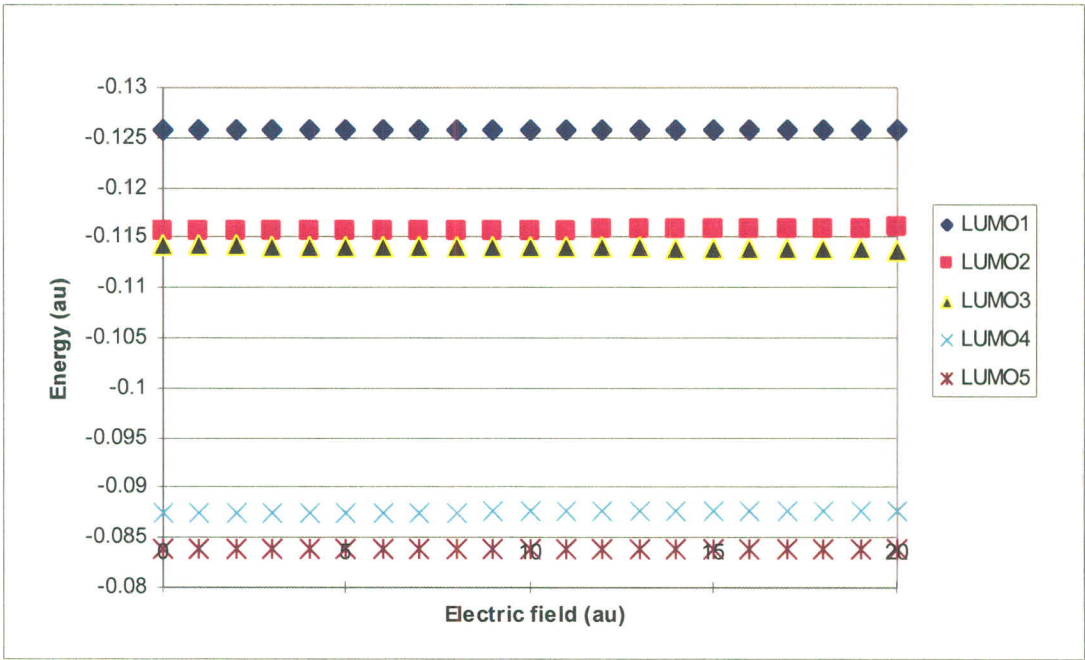
ผลของสนามไฟฟ้าที่มีต่อ molecular orbital ทั้ง HOMO และ LUMO แสดงดังตารางที่ 5 และ 6

ตารางที่ 5 แสดงถึง LUMO ทั้ง 5 ลำดับต่ำสุด

F(au)	Energy(au)				
	HOMO ₁	HOMO ₂	HOMO ₃	HOMO ₄	HOMO ₅
0	-0.23182	-0.23125	-0.18318	-0.18046	-0.1478
1	-0.23184	-0.23123	-0.18318	-0.18046	-0.1478
2	-0.23189	-0.23118	-0.18318	-0.18046	-0.1478
3	-0.23196	-0.2311	-0.18318	-0.18046	-0.1478
4	-0.23204	-0.23101	-0.18318	-0.18045	-0.1478
5	-0.23212	-0.23092	-0.18319	-0.18045	-0.1478
6	-0.23221	-0.23082	-0.18319	-0.18044	-0.1478
7	-0.2323	-0.23071	-0.1832	-0.18044	-0.1478
8	-0.23239	-0.23061	-0.1832	-0.18043	-0.1478
9	-0.23248	-0.2305	-0.18321	-0.18043	-0.1478
10	-0.23257	-0.23039	-0.18322	-0.18042	-0.1478
11	-0.23266	-0.23027	-0.18322	-0.18041	-0.1478
12	-0.23274	-0.23016	-0.18323	-0.1804	-0.1478
13	-0.23282	-0.23005	-0.18324	-0.18039	-0.1478
14	-0.2329	-0.22993	-0.18325	-0.18038	-0.1478
15	-0.23297	-0.22982	-0.18327	-0.18037	-0.1478
16	-0.23304	-0.2297	-0.18328	-0.18036	-0.1478
17	-0.2331	-0.22958	-0.18329	-0.18035	-0.1478
18	-0.23316	-0.22947	-0.1833	-0.18033	-0.1478
19	-0.23321	-0.22935	-0.18332	-0.18032	-0.1478
20	-0.23324	-0.22923	-0.18333	-0.18031	-0.1478



รูปที่ 16 ผลของสนามไฟฟ้าที่มีต่อ HOMO 5 ลำดับ



รูปที่ 17 ผลของสนามไฟฟ้าที่มีต่อ LUMO 5 ลำดับ

ตารางที่ 6 แสดงถึง HOMO ทั้ง 5 ลำดับสูงสุด

F(au)	Energy(au)				
	LUMO ₅	LUMO ₄	LUMO ₃	LUMO ₂	LUMO ₁
0	-0.12585	-0.11564	-0.11418	-0.08753	-0.08375
1	-0.12585	-0.11564	-0.11418	-0.08753	-0.08375
2	-0.12585	-0.11564	-0.11418	-0.08753	-0.08375
3	-0.12585	-0.11565	-0.11417	-0.08753	-0.08375
4	-0.12585	-0.11566	-0.11416	-0.08754	-0.08375
5	-0.12584	-0.11567	-0.11415	-0.08754	-0.08375
6	-0.12584	-0.11568	-0.11413	-0.08755	-0.08375
7	-0.12584	-0.11569	-0.11412	-0.08755	-0.08375
8	-0.12584	-0.11571	-0.1141	-0.08756	-0.08376
9	-0.12584	-0.11573	-0.11408	-0.08757	-0.08376
10	-0.12584	-0.11574	-0.11406	-0.08757	-0.08376
11	-0.12584	-0.11577	-0.11404	-0.08758	-0.08376
12	-0.12584	-0.11579	-0.11401	-0.08759	-0.08376
13	-0.12584	-0.11581	-0.11398	-0.08761	-0.08377
14	-0.12584	-0.11583	-0.11396	-0.08762	-0.08377
15	-0.12584	-0.11586	-0.11393	-0.08763	-0.08377
16	-0.12584	-0.11588	-0.1139	-0.08765	-0.08378
17	-0.12583	-0.11591	-0.11387	-0.08766	-0.08378
18	-0.12583	-0.11594	-0.11383	-0.08768	-0.08378
19	-0.12583	-0.11596	-0.1138	-0.0877	-0.08379
20	-0.12583	-0.11599	-0.11377	-0.08771	-0.08379

จากผลการคำนวณเมื่อไม่มีสนามไฟฟ้าจะพบว่าค่าระดับพลังงานของ Molecular Orbital ของ LUMO ลำดับที่ 1 ถึง ลำดับที่ 5 คือ -0.12585, -0.11564, -0.11418, -0.08753 และ -0.08375 และของ HOMO ลำดับที่ 1 ถึง ลำดับที่ 5 คือ -0.23182, -0.23125, -0.18318, -0.18046 และ -0.1478 โดยค่าทั้ง 10 ค่าเป็นสถานะที่ไม่มีการใส่สนามไฟฟ้าลงไป และเมื่อมีการใส่สนามไฟฟ้าอยู่ในช่วง 1 ถึง 20 au จะพบว่า HOMO1-3 ค่าระดับพลังงานมีค่าลดลงเล็กน้อยเมื่อสนามไฟฟ้ามีค่า

เพิ่มขึ้น ส่วน HOMO ที่ 4 และ 5 เมื่อสนามไฟฟ้าน้อยกว่า 5 au พบว่า HOMO ที่ 4 มีค่าพลังงานใกล้เคียงกันแต่เมื่อค่าสนามไฟฟ้าเพิ่มขึ้น 20 au พบว่า ค่าผลต่างของระดับพลังงานทั้งสองเป็น 0.01 au สำหรับ LUMO จะพบว่า ค่าระดับพลังงานมีค่าลดลงเล็กน้อยเมื่อสนามไฟฟ้ามีค่าเพิ่มขึ้น ยกเว้น LUMO ที่ 3 ค่าพลังงานมีค่าเพิ่มขึ้น โดยกราฟของ LUMO และ HOMU สามารถแสดงในรูปที่ 4.1 และ 4.2

ตารางที่ 7 แสดงถึงค่า transfer integral

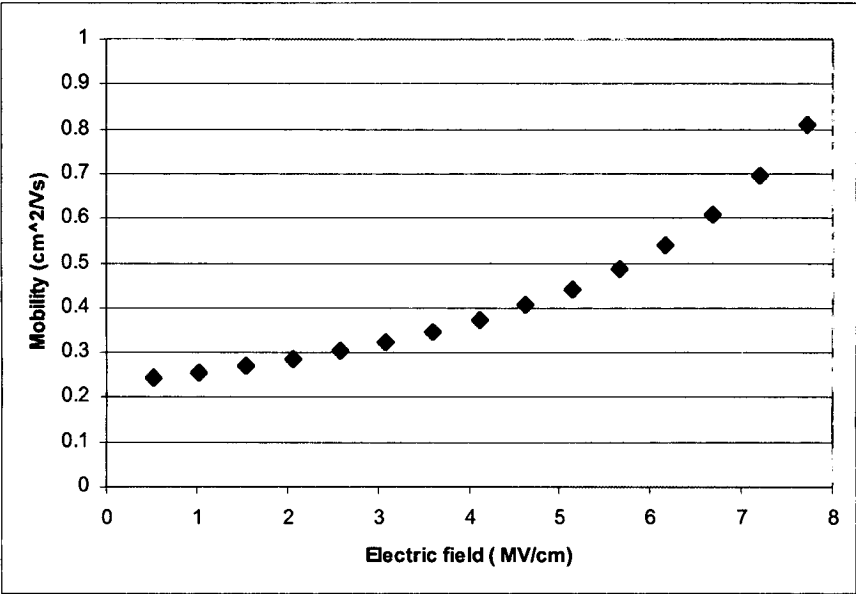
$F (x10^3 \text{ kV/cm})$	$t'_{HOMO} \text{ (eV)}$	$t'_{LUMO} \text{ (eV)}$
0	0.888724	0.277828
0.514221	0.888724	0.277828
1.028441	0.888724	0.277828
1.542662	0.888724	0.277556
2.056883	0.886003	0.271025
2.571103	0.886275	0.27157
3.085324	0.888179	0.276468
3.599544	0.888179	0.276196
4.113765	0.887907	0.275651
4.627986	0.887907	0.275107
5.142206	0.887635	0.274835
5.656427	0.887363	0.274019
6.170648	0.887091	0.273474
6.684868	0.886819	0.27293
7.199089	0.886547	0.272386
7.713309	0.886275	0.27157
8.22753	0.886003	0.271025
8.741751	0.88573	0.269937
9.255971	0.885186	0.269121
9.770192	0.884914	0.268576
10.28441	0.884642	0.26776

2. วิเคราะห์ผลของข้อมูล

โดยข้อมูลของผลที่ได้จากการใช้แบบจำลองฮอปปีงที่ค่าสนามไฟฟ้าต่างๆจะพบ ว่าเมื่อสนามไฟฟ้าเพิ่มขึ้นความสามารถของพาหะที่จะกระโดดไปทิศเดียวกับสนามไฟฟ้ามีค่ามากขึ้น แต่พาหะก็สามารถกระโดดไปทิศตรงข้ามกับสนามไฟฟ้าซึ่งมีโอกาสน้อยกว่า ส่งผลทำให้ความคล่องตัวของพาหะเพิ่มขึ้นเมื่อมีการเพิ่มค่าสนามไฟฟ้าแสดงดังตาราง

ตารางที่ 8 แสดงค่า Hopping rate และ Mobility ของ hole

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



รูปที่ 18 ค่าความคล่องตัวของพาหะ

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