

บทที่ 5

สรุปอภิปรายผลและข้อเสนอแนะ

1. สรุปอภิปรายผล

จากผลการคำนวณเมื่อไม่มีสนามไฟฟ้าจะพบว่าค่าระดับพลังงานของ Molecular Orbital ลำดับที่ 1 ถึง ลำดับที่ 5 คือ -0.12585, -0.11564, -0.11418, -0.08753, -0.08375 สำหรับของ LUMO และ ลำดับที่ 1 ถึง ลำดับที่ 5 คือ -0.23182, -0.23125, -0.18318, -0.18046, -0.1478 สำหรับของ HOMO โดยค่าทั้ง 10 ค่าเป็นสถานะที่ไม่มีการใส่สนามไฟฟ้าลงไป และเมื่อมีการใส่สนามไฟฟ้าอยู่ในช่วง 1 ถึง 20 au จะพบว่า HOMO1-3 ค่าระดับพลังงานมีค่าลดลงเล็กน้อยเมื่อสนามไฟฟ้ามีค่าเพิ่มขึ้น ส่วน HOMO ที่ 4 และ 5 เมื่อสนามไฟฟ้าน้อยกว่า 5 au พบว่า HOMO ที่ 4 มีค่าพลังงานใกล้เคียงกันแต่เมื่อค่าสนามไฟฟ้าเพิ่มขึ้น 20 au พบว่า ค่าผลต่างของระดับพลังงานทั้งสองเป็น 0.01 au สำหรับ LUMO จะพบว่า ค่าระดับพลังงานมีค่าลดลงเล็กน้อยเมื่อสนามไฟฟ้ามีค่าเพิ่มขึ้น ยกเว้น LUMO ที่ 3 ค่าพลังงานมีค่าเพิ่มขึ้น

โดยข้อมูลของผลที่ได้จากการใช้แบบจำลองฮอปปีงที่ค่าสนามไฟฟ้าต่างๆจะพบ ว่าเมื่อสนามไฟฟ้าเพิ่มขึ้นความสามารถของพาหะที่จะกระโดดไปทิศเดียวกับสนามไฟฟ้ามีค่ามากขึ้น แต่พาหะก็สามารถกระโดดไปทิศตรงข้ามกับสนามไฟฟ้าซึ่งมีโอกาสน้อยกว่า ส่งผลทำให้ความคล่องตัวของพาหะเพิ่มขึ้นเมื่อมีการเพิ่มค่าสนามไฟฟ้า จากข้อมูลที่ได้เราพบว่าความสามารถในการเคลื่อนที่ของพาหะจะมีค่าเพิ่มขึ้นตามความเข้มของสนามไฟฟ้าเป็นไปตามฟังก์ชันแบบพาลาโบลา 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

2. ข้อเสนอแนะการวิจัย

ผลการวิจัยโดยใช้ทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่นเพื่อคำนวณผลของสนามไฟฟ้าที่มีต่อโมเลกุล phthalocyanine ที่สนามไฟฟ้า พบว่า การขยับของ HOMO และ LUMO ที่ใช้ในการคำนวณ hopping model เราใช้เพียง HOMO หรือ LUMO ลำดับที่ 1 และ 2 เท่านั้น แต่จากการคำนวณโดยใช้ทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่น พบว่า สนามไฟฟ้ามีผลต่อ HOMO และ LUMO ในลำดับพลังงานที่ต่ำหรือสูงกว่านี้ คือลำดับที่ 4 และลำดับที่ 5 ซึ่งทั้งสองลำดับน่าจะส่งผลต่อการคำนวณค่าความคล่องตัวของพาหะ ดังนั้นข้อเสนอแนะในการทำวิจัยครั้งต่อไปก็คือรวมการคำนวณสถานะของพาหะในระดับพลังงานที่สูงขึ้น