

ภาคผนวก ก

ภาพผนวกที่ ก.1 แสดงตัวอย่างไฟล์ input ในการคำนวณหาฟังก์ชันคลื่นของระบบ

```
&INFO
zinc oxide
&END
&CPMD
OPTIMIZE WAVEFUNCTION
CONVERGENCE ORBITALS
5.00e-6
PRINT FORCES ON
ODIIS NO_RESET=20
5
LANCZOS DIAGONALIZATION RESET=5
MAXSTEP
1750
&END
&DFT
FUNCTIONAL PBE
&END
&SYSTEM
SYMMETRY
4
ANGSTROM
CELL
6.50000 1.00000 0.80106 0.0000 0.0000 -0.50000
SCALE SX=2 SY=2 SZ=1
KPOINT MONKHORST-PACK
2 2 2
CUTOFF
160.0
&END
&ATOMS
```

*Zn_MT_PBE_SEMI.psp KLEINMAN-BYLANDER

LMAX=D LOC=S

8

1.00000 1.00000 0.00000

0.60000 0.30000 0.50000

0.60000 1.30000 0.50000

2.00000 1.00000 0.00000

1.60000 0.30000 0.50000

1.00000 2.00000 0.00000

2.00000 2.00000 0.00000

1.60000 1.30000 0.50000

*O_MT_PBE.psp KLEINMAN-BYLANDER

LMAX=P

8

0.60000 0.30000 0.85000

1.00000 1.00000 0.35000

1.60000 0.30000 0.85000

2.00000 1.00000 0.35000

0.60000 1.30000 0.85000

1.00000 2.00000 0.35000

1.60000 1.30000 0.85000

2.00000 2.00000 0.35000

&END

&ATOMIC CHARGES

2

-2

2

&END

&BASIS

PSEUDO AO 3

0 1 2

&END

ภาคผนวกที่ ก.2 แสดงตัวอย่างไฟล์ output ในการคำนวณหาฟังก์ชันคลื่นของระบบ

PROGRAM CPMD STARTED AT: Wed Feb 15 10:07:33 2012

SETCNST| USING: CODATA 2006 UNITS

*****	*****	***	***	*****		
*****	*****	*****	*****	*****		
***	**	***	**	***	***	
**	**	***	**	**	**	**
**	*****	**	**	**	**	**
***	*****	**	**	**	**	***
*****	**	**	**	*****		
*****	**	**	**	*****		

VERSION 3.15.1

COPYRIGHT

IBM RESEARCH DIVISION

MPI FESTKOERPERFORSCHUNG STUTTGART

The CPMD consortium

Home Page: <http://www.cpmd.org>

Mailing List: cpmd-list@cpmd.org

E-mail: cpmd@cpmd.org

*** Dec 22 2011 -- 00:57:35 ***

THE INPUT FILE IS: ZnOdopelowCo4cell.inp

THIS JOB RUNS ON: c10

THE CURRENT DIRECTORY IS:

/home/kookkik/nong/ZnO4cell

THE TEMPORARY DIRECTORY IS:

/home/kookkik/nong/ZnO4cell

THE PROCESS ID IS:

25950

* INFO - INFO - INFO - INFO - INFO - INFO - INFO - INFO - INFO - INFO - INFO *

* zinc oxide *

NFI GEMAX CNORM ETOT DETOT TCPU

1 2.394E-01 1.052E-02 -569.599955 0.000E+00 18.32

.

.

.

ELECTRONIC GRADIENT:

MAX. COMPONENT = 4.69589E-06 NORM = 3.32368E-08

NUCLEAR GRADIENT:

MAX. COMPONENT = 3.23886E-02 NORM = 2.72038E-02

TOTAL INTEGRATED ELECTRONIC DENSITY

IN G-SPACE = 144.000000

IN R-SPACE = 144.000000

(K+E1+L+N+X) TOTAL ENERGY = -583.25148119 A.U.

(K) KINETIC ENERGY = 620.12629220 A.U.

(E1=A-S+R) ELECTROSTATIC ENERGY = -457.77103603 A.U.

(S) ESELF = 478.73073648 A.U.

(R) ESR = 1.47630993 A.U.

(L) LOCAL PSEUDOPOTENTIAL ENERGY = -37.58375218 A.U.

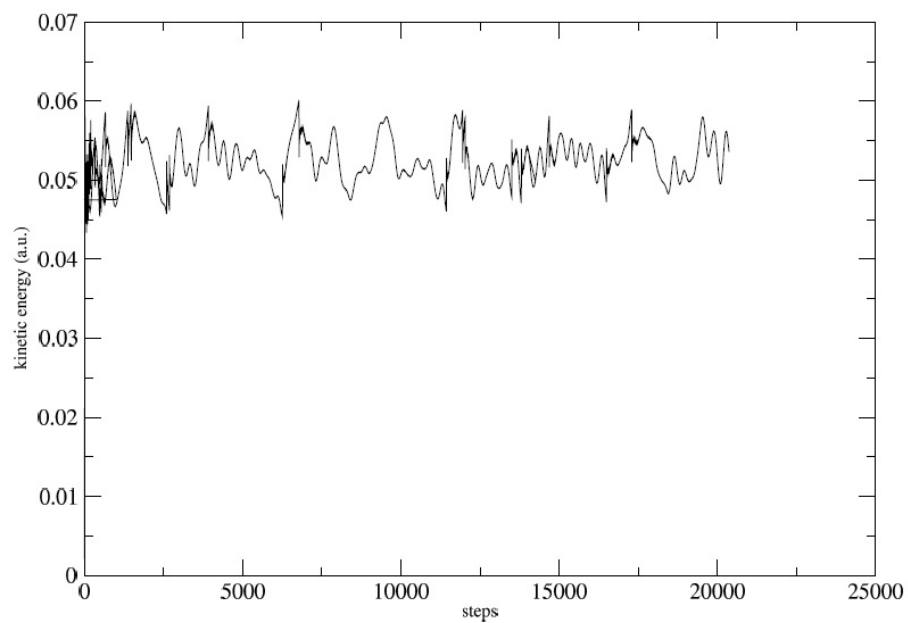
(N) N-L PSEUDOPOTENTIAL ENERGY = -611.11569326 A.U.

(X) EXCHANGE-CORRELATION ENERGY = -96.90729192 A.U.

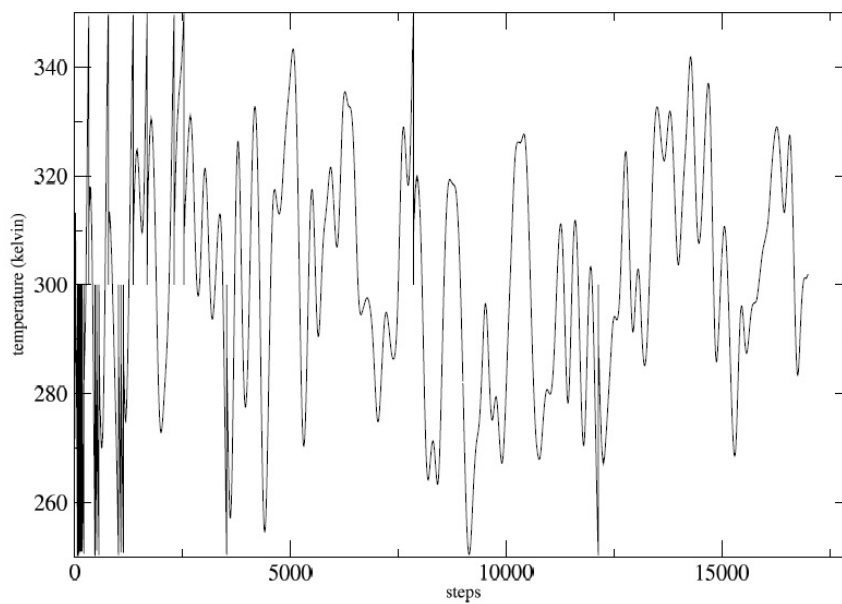
GRADIENT CORRECTION ENERGY = -2.21613211 A.U.

ภาคผนวก ข

ภาพผนวกที่ ข.1 แสดงการทำ equilibration ของซิงค์ออกไซด์ ณ อุณหภูมิ 27 องศาเซลเซียส

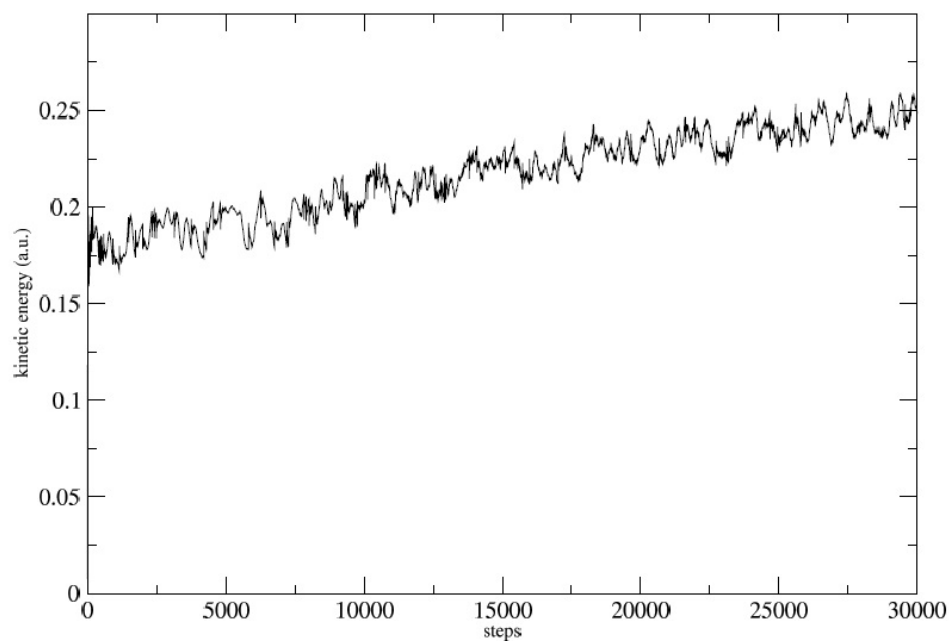


รูปที่ ข.1 แสดงค่าระยะเวลากับอุณหภูมิในการทำ equilibration ของซิงค์ออกไซด์ ณ อุณหภูมิ 27 องศาเซลเซียส

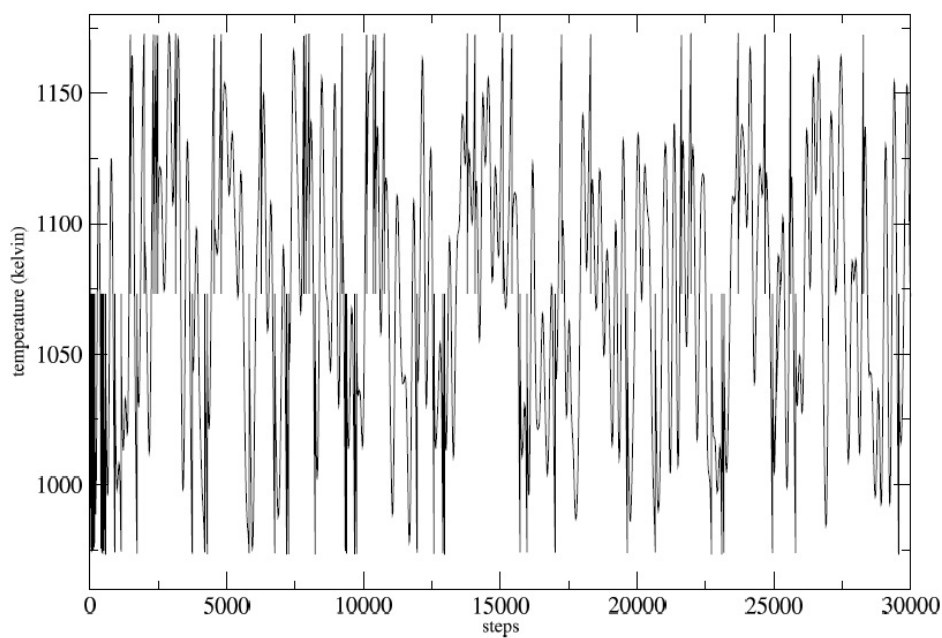


รูปที่ ข.2 แสดงค่าระยะเวลากับอุณหภูมิในการทำ equilibration ของซิงค์ออกไซด์ ณ อุณหภูมิ 27 องศาเซลเซียส

ภาพผนวกที่ ข.2 แสดงการทำ equilibration ของซิงค์ออกไซด์ ณ อุณหภูมิ 800 องศาเซลเซียส

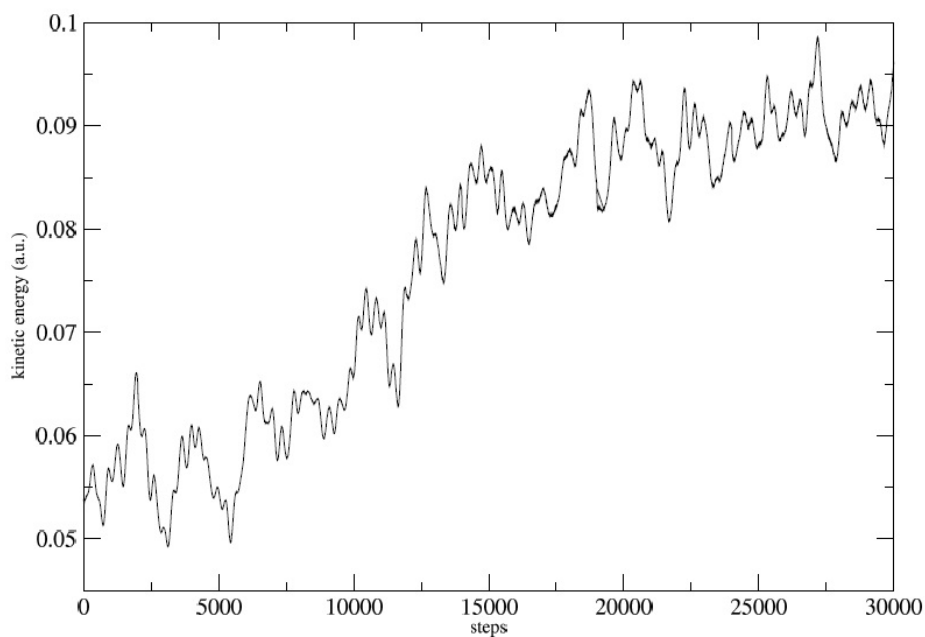


รูปที่ ข.3 แสดงค่าระยะเวลากับอุณหภูมิในการทำ equilibration ของซิงค์ออกไซด์ ณ อุณหภูมิ 800 องศาเซลเซียส

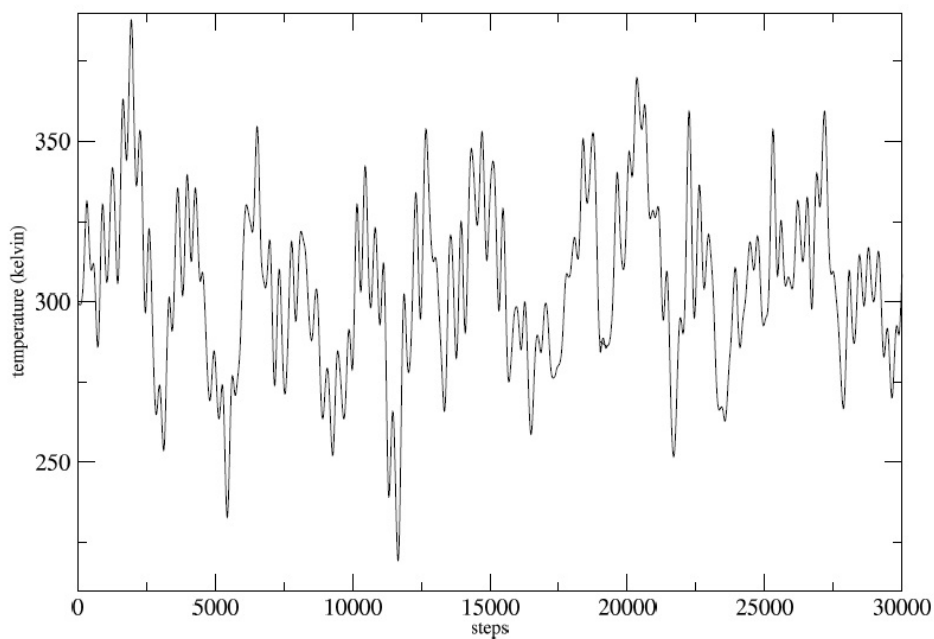


รูปที่ ข.4 แสดงค่าระยะเวลากับอุณหภูมิในการทำ equilibration ของซิงค์ออกไซด์ ณ อุณหภูมิ 800 องศาเซลเซียส

ภาพผนวกที่ ข.3 แสดงการทำ nose-thermostat ของซิงค์ออกไซด์ ณ อุณหภูมิ 27 องศาเซลเซียส

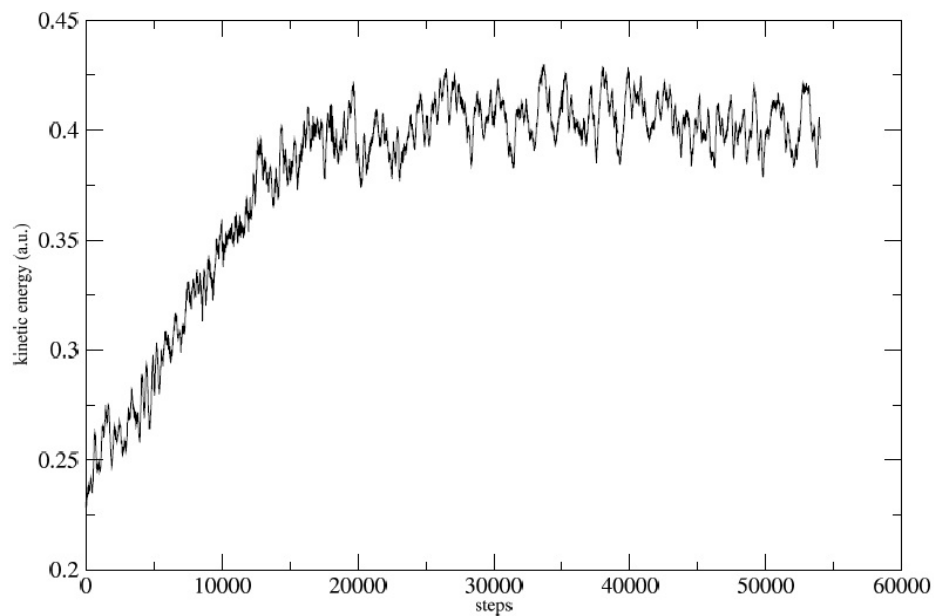


รูปที่ ข.5 แสดงค่าระยะเวลากับพลังงานจลน์ในการทำ nose-thermostat ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 27 องศาเซลเซียส

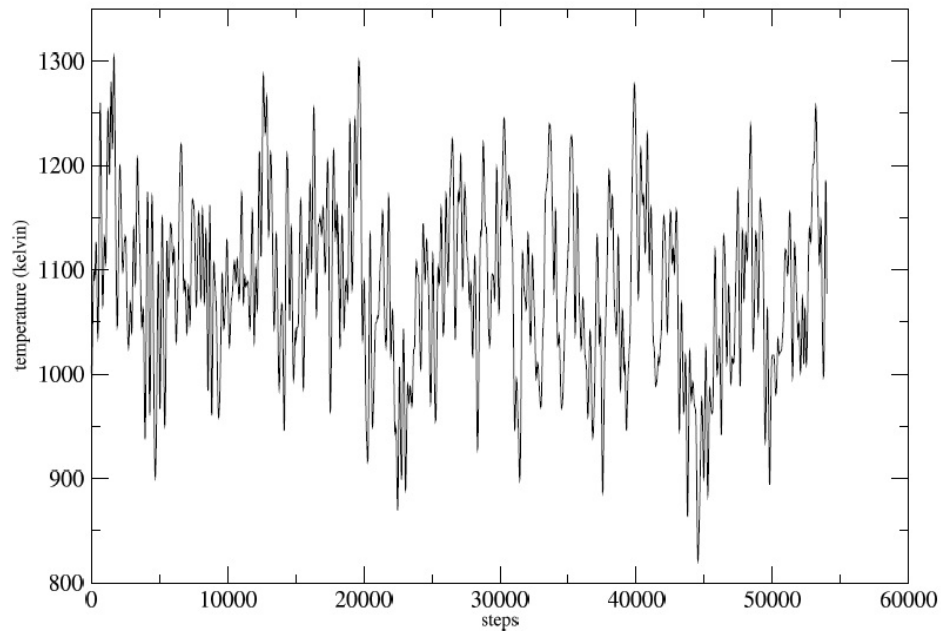


รูปที่ ข.6 แสดงค่าระยะเวลากับอุณหภูมิในการทำ nose-thermostat ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 27 องศาเซลเซียส

ภาพผนวกที่ ข.4 แสดงการทำ nose-thermostat ของซิงค์ออกไซด์ ณ อุณหภูมิ 800 องศาเซลเซียส

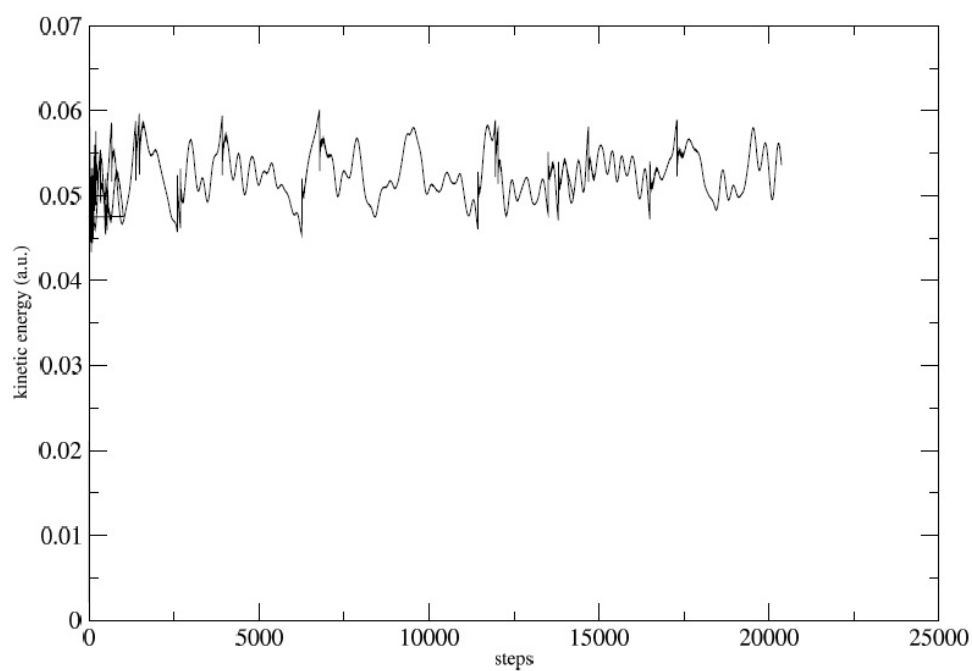


รูปที่ ข.7 แสดงค่าระยะเวลากับพลังงานจลน์ในการทำ nose-thermostat ของซิงค์ออกไซด์ ณ อุณหภูมิ 800 องศาเซลเซียส

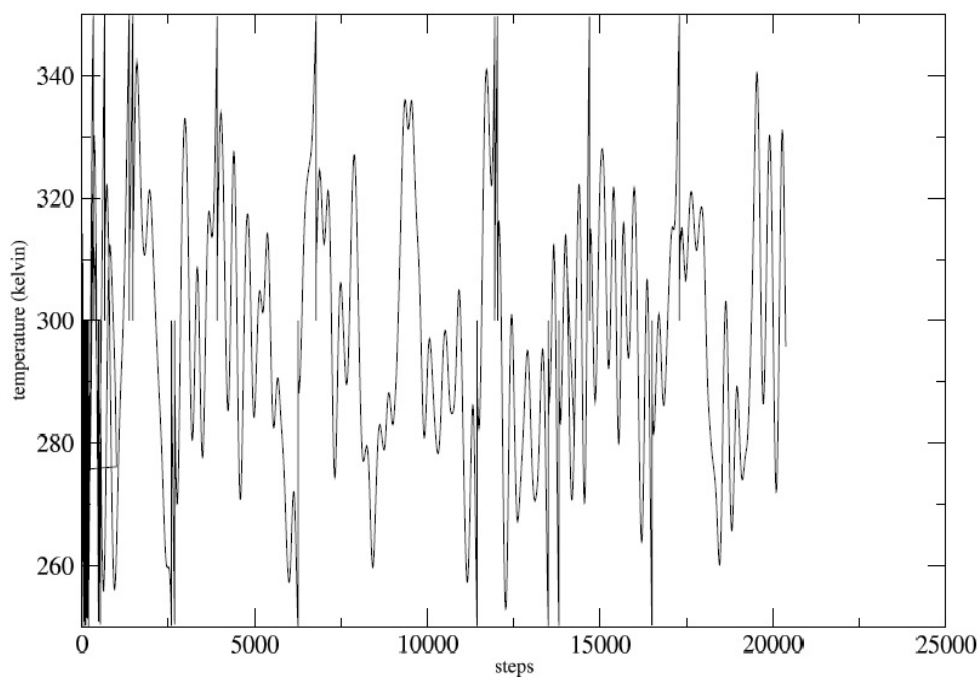


รูปที่ ข.8 แสดงค่าระยะเวลากับอุณหภูมิในการทำ nose-thermostat ของซิงค์ออกไซด์ ณ อุณหภูมิ 800 องศาเซลเซียส

ภาพผนวกที่ ข.5 แสดงการทำ equilibration ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 27 องศาเซลเซียส

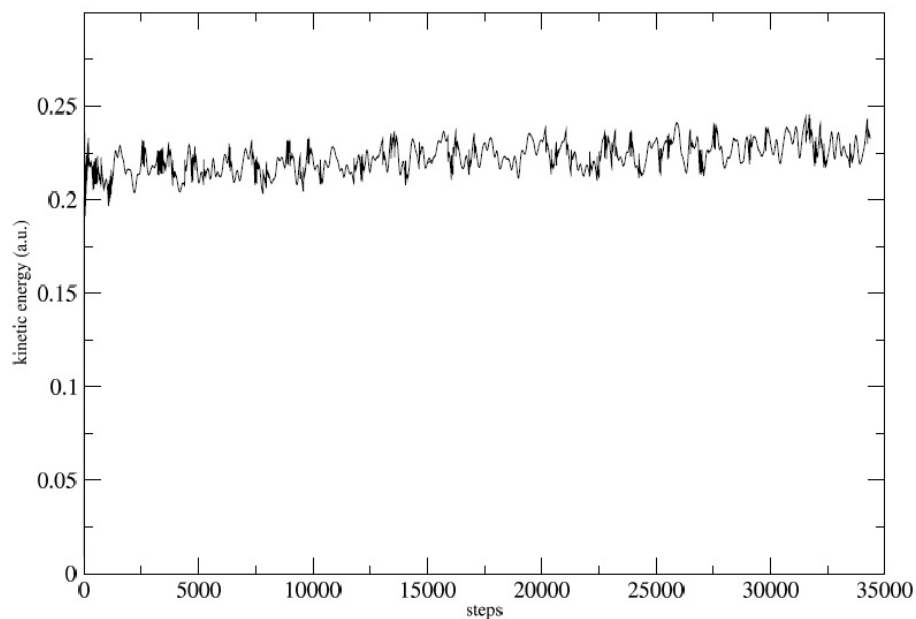


รูปที่ ข.9 แสดงค่าระยะเวลากับพลังงานจลน์ในการทำ equilibration ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 27 องศาเซลเซียส

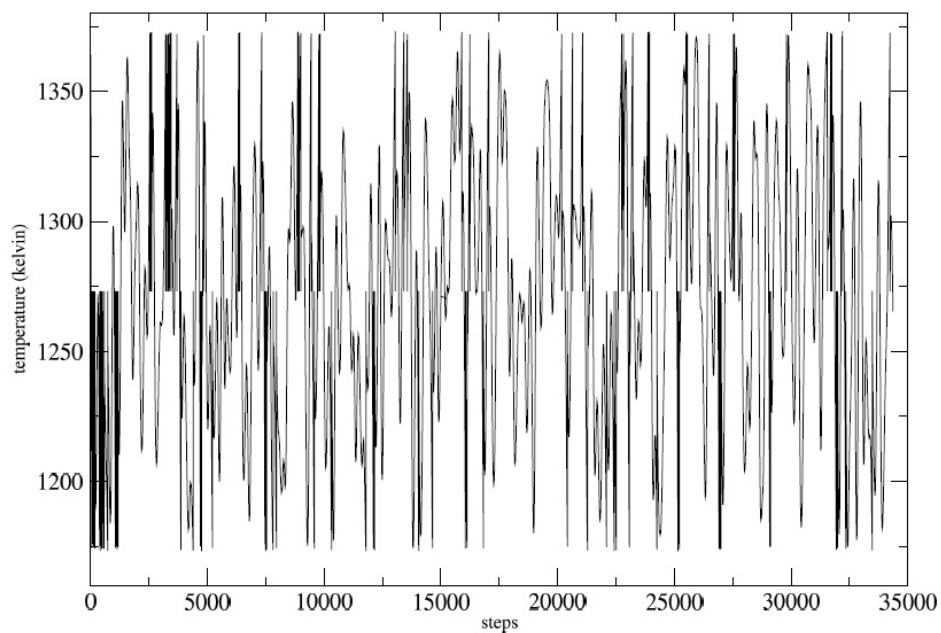


รูปที่ ข.10 แสดงค่าระยะเวลากับอุณหภูมิในการทำ equilibration ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 27 องศาเซลเซียส

ภาพผนวกที่ ข.6 แสดงการทำ equilibration ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 1000 องศาเซลเซียส

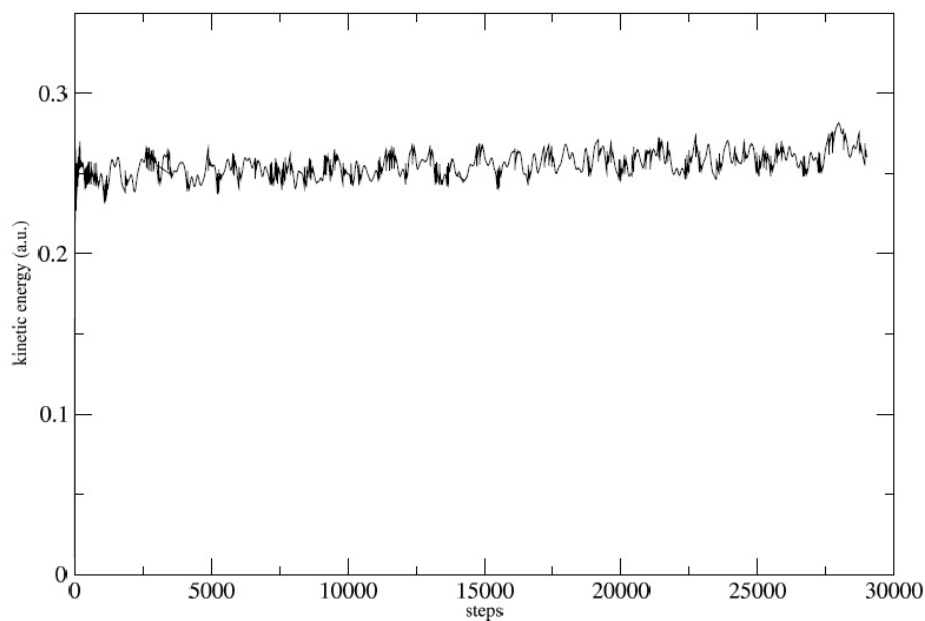


รูปที่ ข.11 แสดงค่าระยะเวลากับพลังงานจลน์ในการทำ equilibration ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 1000 องศาเซลเซียส

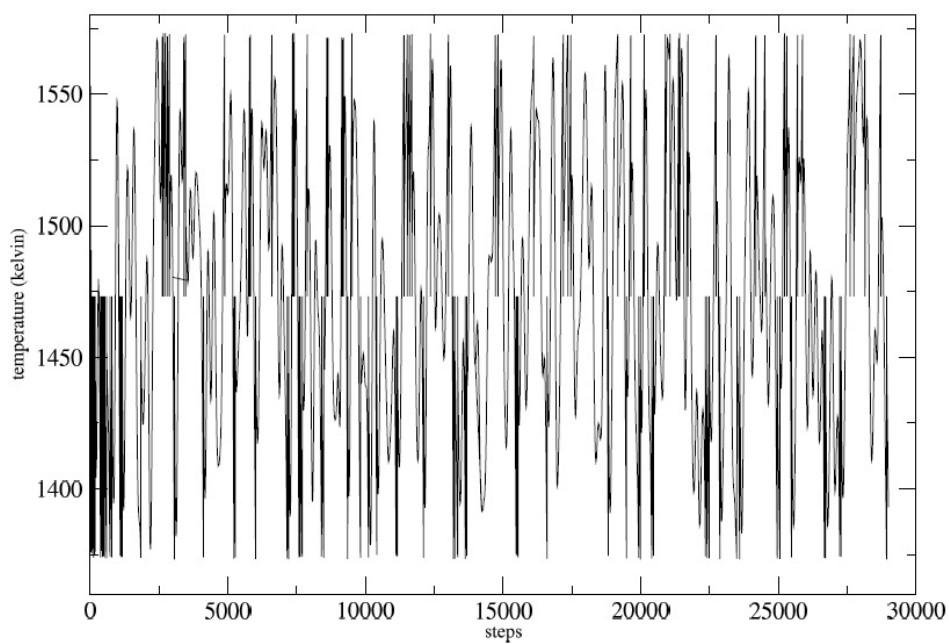


รูปที่ ข.12 แสดงค่าระยะเวลากับอุณหภูมิในการทำ equilibration ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 1000 องศาเซลเซียส

ภาพผนวกที่ ข.7 แสดงการทำ equilibration ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 1200 องศาเซลเซียส

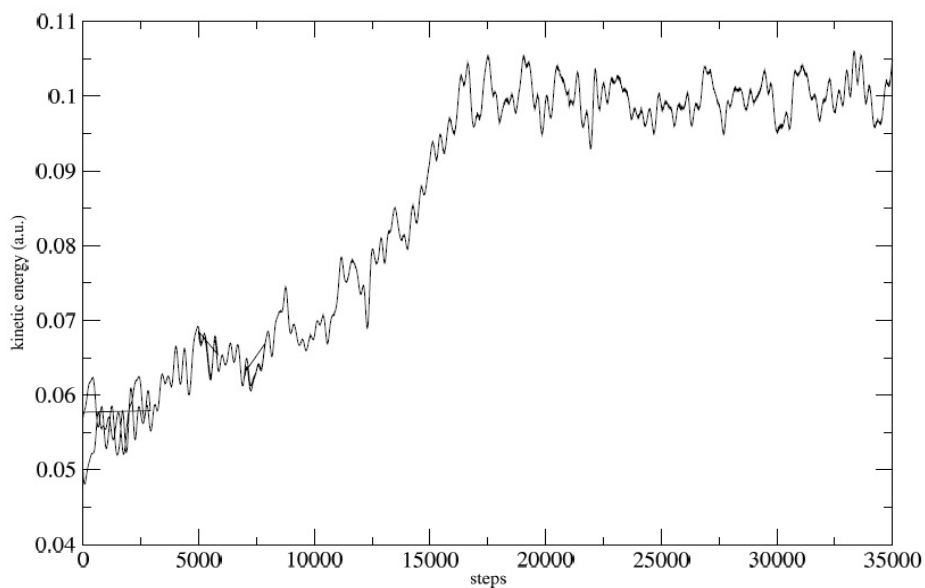


รูปที่ ข.13 แสดงค่าระยะเวลากับพลังงานจลน์ในการทำ equilibration ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 1200 องศาเซลเซียส

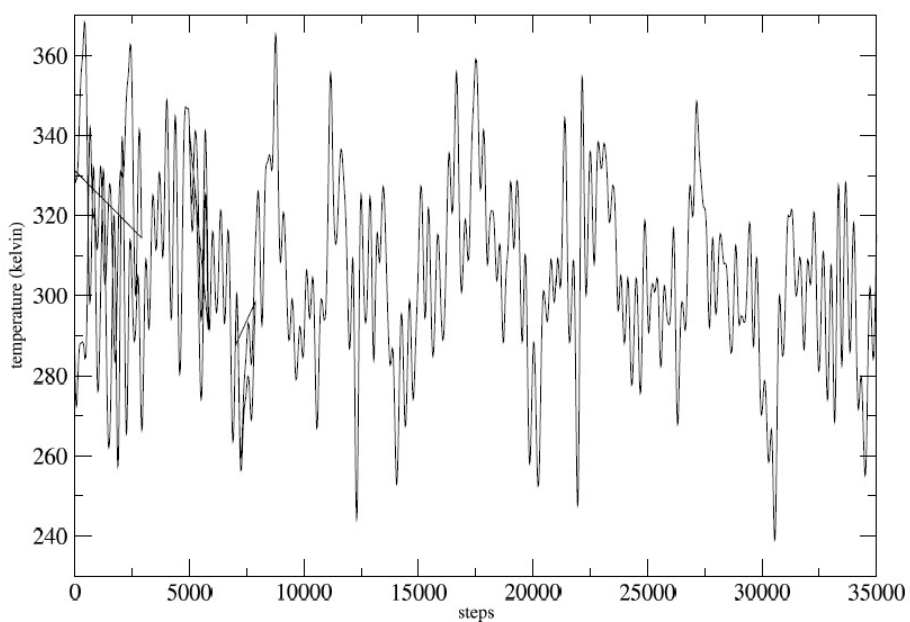


รูปที่ ข.14 แสดงค่าระยะเวลากับอุณหภูมิในการทำ equilibration ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 1200 องศาเซลเซียส

ภาพผนวกที่ ข.8 แสดงการทำ nose-thermostat ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 27 องศาเซลเซียส

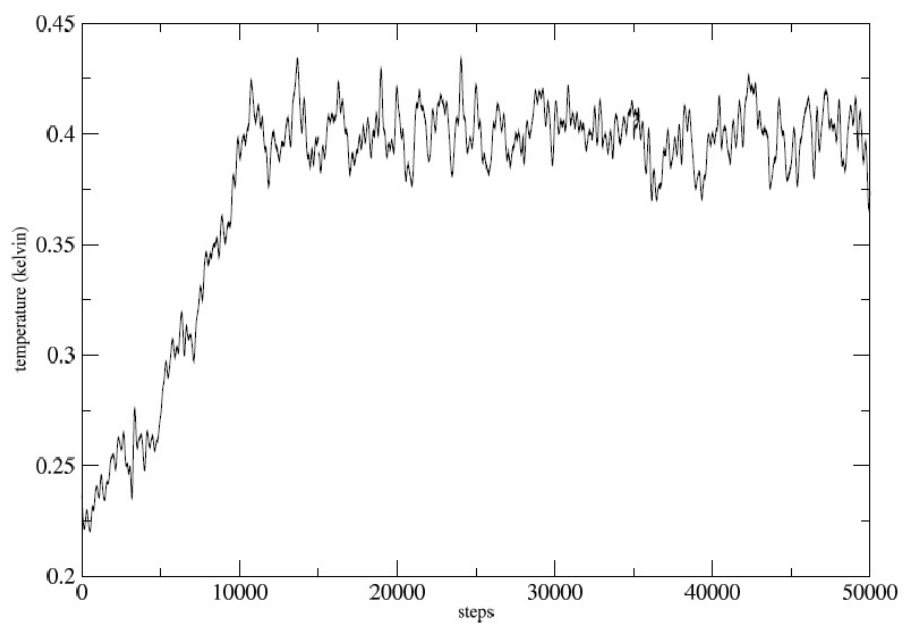


รูปที่ ข.15 แสดงค่าระยะเวลากับพลังงานจลน์ในการทำ nose thermostat ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 27 องศาเซลเซียส

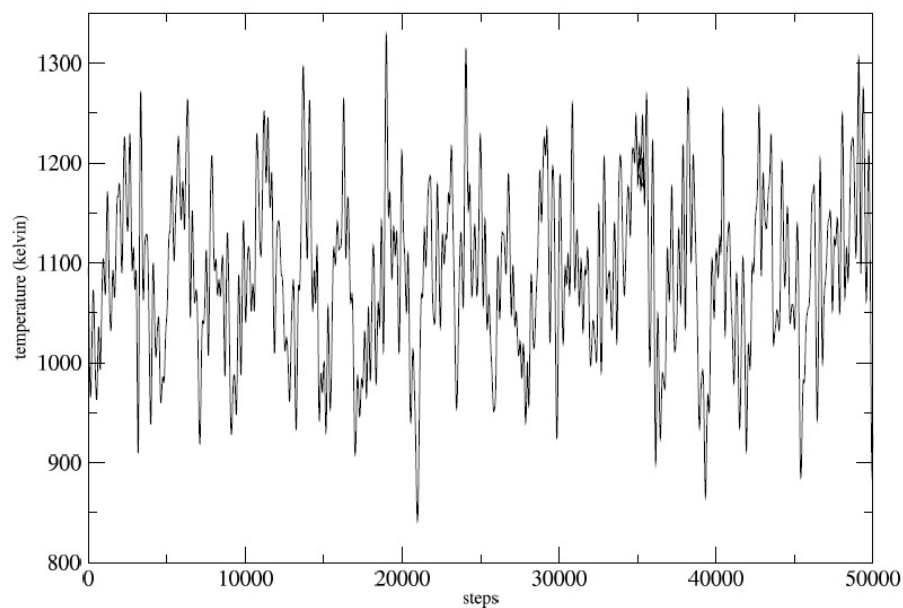


รูปที่ ข.16 แสดงค่าระยะเวลากับอุณหภูมิในการทำ nose thermostat ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 27 องศาเซลเซียส

ภาพผนวกที่ ข.8 แสดงการทำ nose-thermostat ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 800 องศาเซลเซียส

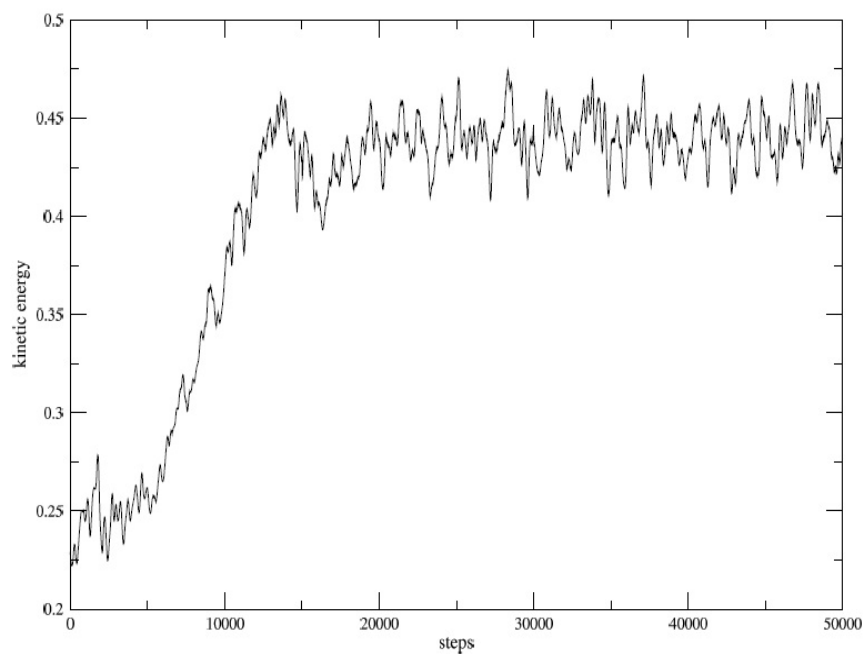


รูปที่ ข.17 แสดงค่าระยะเวลากับพลังงานจลน์ในการทำ nose thermostat ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 800 องศาเซลเซียส

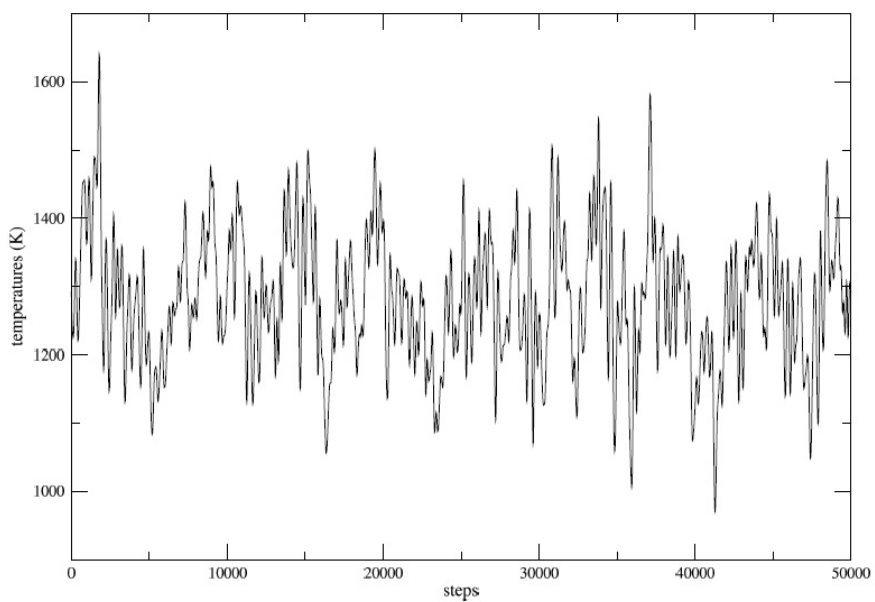


รูปที่ ข.18 แสดงค่าระยะเวลากับอุณหภูมิในการทำ nose thermostat ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 800 องศาเซลเซียส

ภาพผนวกที่ ข.9 แสดงการทำ nose-thermostat ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 1000 องศาเซลเซียส

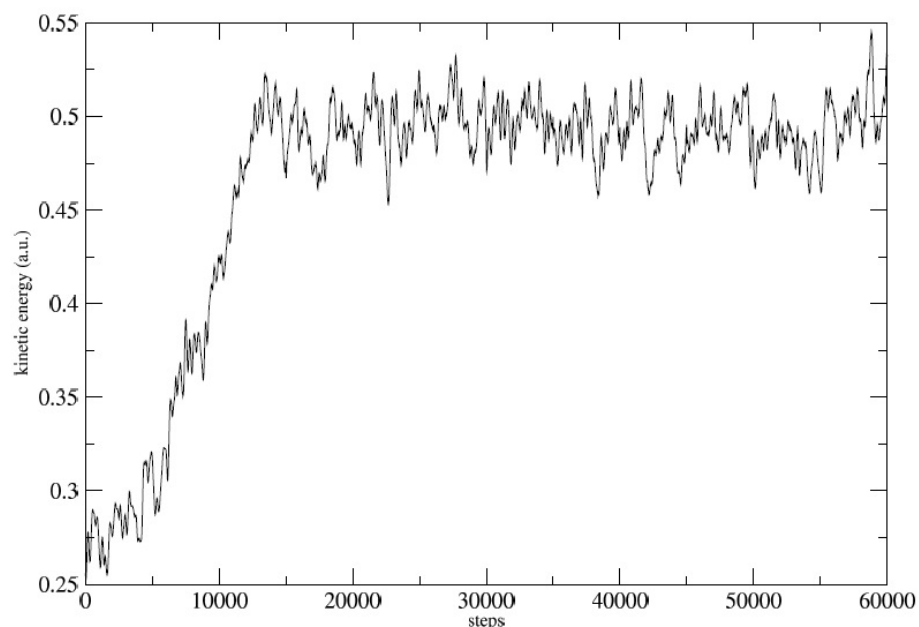


รูปที่ ข.19 แสดงค่าระยะเวลากับค่าพลังงานจลน์ในการทำ nose thermostat ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 1000 องศาเซลเซียส

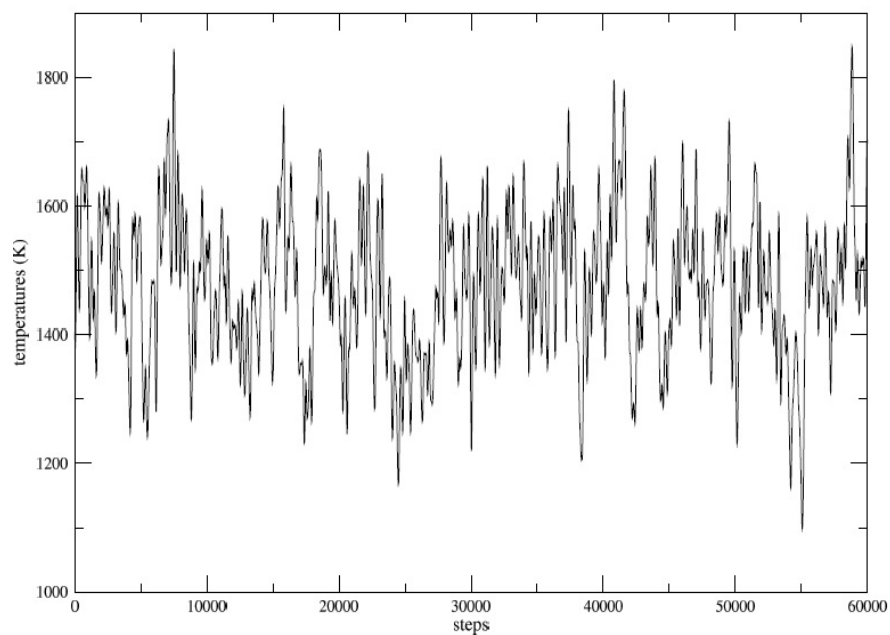


รูปที่ ข.20 แสดงค่าระยะเวลากับอุณหภูมิในการทำ nose thermostat ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 1000 องศาเซลเซียส

ภาพผนวกที่ ข.9 แสดงการทำ nose-thermostat ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 1200 องศาเซลเซียส



รูปที่ ข.21 แสดงค่าระยะเวลากับพลังงานจลน์ในการทำ nose thermostat ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 1200 องศาเซลเซียส



รูปที่ ข.22 แสดงค่าระยะเวลากับอุณหภูมิในการทำ nose thermostat ของซิงค์ออกไซด์ที่มีช่องว่าง ณ อุณหภูมิ 1200 องศาเซลเซียส

ประวัติผู้วิจัย

ชื่อ	นายชานินทร์ สุขอยู่
วัน เดือน ปี เกิด	5 ตุลาคม 2529
ภูมิลำเนา	พิจิตร
ประวัติการศึกษา	
ระดับมัธยมศึกษาตอนปลาย	สำเร็จการศึกษาจากโรงเรียนบางมูลนากภูมิวิทยาคม พ.ศ. 2549
ระดับปริญญาตรี	ปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิตสาขา เคมี จากมหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี พ.ศ. 2553
ระดับปริญญาโท	ปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิตสาขา เคมี จากมหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี พ.ศ. 2556
ผลงานเผยแพร่	Chanin Sukyoo and Aimorn Saksaengwijit, 2012, “Study on Structure Properties and Band-Gap Energy of Zinc Oxide Doped with Metal Ions”, Pure and Applied Chemistry International Conference , 11-13 January 2012, The Empress Hotel Chiang Mai

