บทที่ 1

บทนำ

1.1 หลักการและเหตุผล

การวิจัยในศตวรรษที่ 20 นั้นไม่มีพรมแดนแห่งศาสตร์และแขนงวิชามากั้น เป็นการวิจัยที่หลอมรวมองค์ความรู้ทุกศาสตร์เข้าด้วยกันเพื่อให้การวิจัยนั้นเกิดประโยชน์สูงสุดกับมนุษย์ชาติ ดังนั้นการเริ่มต้นวิจัยหลอมรวมองค์ความรู้ในศาสตร์ที่ใกล้เคียงกัน น่าจะปร ะสบความสำเร็จเร็วที่สุด เช่น คณิตศาสตร์ ฟิสิกส์ ซึ่งจัดอยู่ในกลุ่มวิทยาศาสตร์กายภาพเหมือนกัน เพื่อช่วยแก้ปัญหาของโลกใบนี้ เช่น ภาวะโลกร้อน เป็นภาวะวิกฤตที่ทุกคนในโลกใบนี้ต้องช่วยกันแก้ไข โดยเฉพาะ ฟิสิกส์ต้องการเปลี่ยนวิกฤตนี้ให้เป็นโอกาส นำพลังงานความร้อนที่ได้รับมาใช้ให้เกิดประโยชน์โดยเปลี่ยนพลังงานความร้อนให้เป็นพลังงานไฟฟ้า และ ทำความเย็น ซึ่งกระบวนการดังกล่าวจะขาดองค์ความรู้ทางด้านคณิตศาสตร์ไม่ได้จึงมีความจำเป็นอย่างยิ่งที่นักคณิตศาสตร์จะช่วยวิจัยเชิงทฤษฎี คำนวณหาสมบัติ และความเป็นไปได้ของวัสดุที่นักฟิสิกส์คิดที่จะทำการทดลองหรือประดิษฐ์ขึ้นมา เพื่อให้การทดลองนั้นเกิดข้อผิดพลาดน้อยที่สุด และเกิดประโยชน์สูงสุดต่อมวลมนุษย์ โดยเฉพาะด้านพลังงานที่ผู้คนในโลกต้องการบริโภคอีกเป็นปริมาณ มาก และที่สำคัญต้องเป็นพลังงานสะอาด ง่ายต่อการบำรุงรักษา และราคาถูก

วัสดุผันไฟฟ้าจากความร้อนสามารถผันความร้อนให้เป็นกระแสไฟฟ้าและผันกระแสไฟฟ้าให้เป็นความเย็นได้ ขบวนการผันไฟฟ้าจากความร้อนนี้เกิดขึ้นภายในวัสดุ ไม่เคลื่อนที่ มีราคาถูก บำรุงรักษาง่าย มีอายุการใช้งานยาวนาน ยิ่งไปกว่านั้นการเปลี่ยนพลังงานดังกล่าว เป็นพลังงานสะอาด ก่อของเสียหรือก่อมลพิษต่อสิ่งแวดล้อม ถึงแม้ว่าประสิทธิภาพไม่สูงมากเรา ก็สามารถประยุกต์ใช้ อุปกรณ์ผันไฟฟ้าจากความร้อนได้ เช่น เครื่องกระตุ้นหัวใจ นาฬิกาข้อมือ หมวกระบายความร้อน ตู้เย็น และ รถยนต์ที่ใช้พลังงานจากอุปกรณ์ผันไฟฟ้าจากความร้อน

อย่างไรก็ตาม การเริ่มต้นจากการคำนวณสมบัติต่าง ๆ ของวัสดุผันไฟฟ้าจากความร้อนก็ยังจำเป็นอย่างยิ่ง โปรแกรม Discrete Variation–Xα (DV-Xα) ใช้คำนวณโครงสร้างอิเล็กทรอนิก ส์สำหรับโมเลกุลที่มีขนาดใหญ่บนพื้นฐานของ Hartree-Fock-Slater เป็นการพัฒนา องค์ความรู้ด้านกลศาสตร์ควอนตัมและทฤษฎีการออกแบบโมเลกุล เพื่อคำนวณโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิก ส์ของวัสดุผันไฟฟ้าจากความร้อน เช่น Bi_2Te_3 , Al_2Te_3 , Ga_2Te_3 , In_2Te_3 และ Tl_2Te_3 เป็นต้น

การคำนวณสมบัติเชิงความร้อนของวัสดุผันไฟฟ้าจากความร้อนมีความจำเป็นอย่างยิ่ง เพราะช่วยประหยัดเวลาและประหยัดพลังงานในการวิเคราะห์ข้อมูลจากการปฏิบัติทดลอง ที่สำคัญเราสามารถ

ออกแบบและควบคุมอุณหภูมิ ความดัน ได้อย่างแม่นยำ ซึ่งวิธี พลศาสตร์โมเลกุล (molecular dynamics : MD) สามารถคำนวณหาสมบัติเชิงความร้อนของวัสดุผันไฟฟ้าจากความร้อน ได้อย่างรวดเร็ว โดยได้แลตทิซพารามิเตอร์ (lattice parameter : a) สภาพอัดได้ (compressibility : β) สัมประสิทธิ์การขยายตัวเชิงเส้น (linear thermal expansion coefficient : α_{lin}) ความจุความร้อนที่ปริมาตรคงตัว (heat capacity at constant volume : C_V) ความจุความร้อนในรูปของการยืดของแลตทิซ (heat capacity of lattice dilational term : C_d) และความจุความร้อนที่ความดันคงตัว (the heat capacity at constant pressure : C_P) และสภาพนำความร้อน (thermal conductivity : κ) ของเลดเทลลูไลด์ (Lead Telluride : เลดเทลลูไลด์)

เนื่องจากกระบวนการประดิษฐ์ อุปกรณ์ผันไฟฟ้าจากความร้อนจะต้องศึกษาทุกด้านให้ถ่องแท้ เพื่อลดปัญหาและประหยัดเวลา คณะผู้วิจัย จึงสนใจศึกษาสมบัติผันไฟฟ้าจากความร้อนของเลดเทลลูไลด์ทั้งด้านทฤษฎี และการทดลอง เนื่องจากเลดเทลลูไลด์สามารถเตรียมในรูปพหุผลึก และมีสมบัติทางไฟฟ้าดีจากการอ้างอิงและการสืบค้นข้อมูล เพื่อพัฒนาเป็นเครื่องกำเนิดผันไฟฟ้าจากความร้อนต่อไป

1.2 วัตถุประสงค์ของโครงการวิจัย

1.2.1 เพื่อคำนวณสมบัติทางไฟฟ้าของเลดเทลลูไลด์ด้วยวิธี Discrete Variational-Xα

1.2.2 เพื่อคำนวณสมบัติความร้อนของสารเลดเทลลูไลด์ด้วยวิธีพลศาสตร์โมเลกุล

1.2.3 เพื่อวัดสมบัติการผันไฟฟ้าจากความร้อนของสารเลดเทลลูไลด์

1.3 ขอบเขตของโครงการวิจัย

ใช้โปรแกรม FORTRAN ศึกษาสมบัติทางไฟฟ้าด้วยวิธี DV-Xα ใช้วิธีพลศาสตร์โมเลกุลศึกษาสมบัติทางความร้อนของสารเลดเทลลูไลด์ และทำการทดลองวัดสมบัติการผันไฟฟ้าจากความร้อน เช่น สภาพต้านทานไฟฟ้า สัมประสิทธิ์ซีเบคและสภาพนำความร้อนด้วยเครื่องมือที่สร้างขึ้นเองที่ศูนย์วิทยาศาสตร์โมอิเล็กทริก

1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับจากโครงการวิจัย

1.4.1 ได้ความองค์ความรู้เกี่ยวกับโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ สมบัติเชิงร้อนของเลดเทลลูไลด์ทั้งเชิงทฤษฎีและเชิงทดลอง

1.4.2 ได้บทความวิชาการเผยแพร่ในระดับชาติและนานาชาติ

1.4.3 อุปกรณ์ผันไฟฟ้าจากความร้อนของเลดเทลลูไลด์ต้นแบบ

1.4.4 นักศึกษาปริญญาตรีที่สำเร็จการศึกษามีงานวิจัยเกี่ยวโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ สมบัติเชิงร้อนของเลดเทลลูไลด์

1.4.5 เอกสารคำสอนรายวิชาเทคโนโลยีเทอร์โมอิเล็กทริกสำหรับบัณฑิตศึกษา

1.5 นิยามศัพท์เฉพาะ

1.5.1 คลัสเตอร์ของ $Pb_{13}Te_{14}$ คือ คลัสเตอร์ของโมเลกุล Pb และ Te ในอัตราส่วนโมเลกุล 13 ต่อ 14

1.5.2 วัสดุผันไฟฟ้าจากความร้อน (thermoelectric material) หมายถึง วัสดุที่สามารถผันความร้อนให้เป็นพลังงานไฟฟ้าโดยการสั่นสะเทือนของโครงสร้าง และการเคลื่อนที่อิเล็กตรอนภายในของวัสดุผันไฟฟ้าจากความร้อน

1.5.3 พลศาสตร์โมเลกุล เป็นวิธีในการใช้คำนวณหาสมบัติเชิงความร้อนของวัสดุผันไฟฟ้าจากความร้อน