

# การศึกษาโลหะออกไซด์และโลหะซัลไฟด์เชิงคำนวณ สำหรับอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ยุคใหม่



หัวหน้าโครงการวิจัย: รศ.ดร.สิริโชค จิวถาวรณ <sup>1</sup>

นักวิจัยร่วมโครงการ: รศ.ดร.จิรโรจน์ ต.เทียนประเสริฐ <sup>2</sup>, พศ.ดร.ภาคภูมิ เรือนจันทร์ <sup>2</sup>, พศ.ดร. อติศักดิ์ บุญชื่น <sup>2</sup>, พศ.ดร.จริญญาณี ประสมศึก <sup>3</sup>, ดร.อัคริพล ฟองแก้ว <sup>1</sup>

นักศึกษา: นายฐานันดร กวนอก <sup>1</sup>, นายณรศักดิ์ พันธเดช <sup>1</sup>, นายธนวิทย์ สวัสดิ์ <sup>1</sup>, นายกฤษชัชพงศ์ ดาบสมุทร <sup>2</sup>, น.ส.ศุภรัตน์ เจริญผล <sup>2</sup>, นายปฐมภพ ภาคิภูต <sup>2</sup>

<sup>1</sup>สาขาวิชาฟิสิกส์ สำนักวิชาวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี, <sup>2</sup>ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์, <sup>3</sup>ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยนครพนม

## เป้าหมายของโครงการ

- ▶ พัฒนาเทคนิคการคำนวณและทฤษฎีที่เหมาะสมในการศึกษาสมบัติและปรับปรุงวัสดุใหม่ในกลุ่มโลหะออกไซด์ โลหะซัลไฟด์ และวัสดุที่เกี่ยวข้อง
- ▶ ศึกษาและพัฒนาสมบัติทางแสง ไฟฟ้า แม่เหล็ก หรือการควบคุมระหว่างสมบัติเหล่านั้นของวัสดุที่เกี่ยวข้อง
- ▶ ผลิตผลงานวิจัยที่ได้รับการยอมรับระดับนานาชาติ ในรอบของวัสดุที่ระบุในขอบเขตการวิจัย

## ประสิทธิผล

องค์ความรู้: พัฒนาวงศ์ความรู้ด้านการปรับปรุงสมบัติของวัสดุสำหรับอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ยุคใหม่  
 ผลผลิต: นักศึกษาปริญญาเอก 3 คน (กำลังศึกษา), นักศึกษาปริญญาโท 3 คน, บทความตีพิมพ์ในวารสารนานาชาติ 17 บทความ

## ความสอดคล้อง

- ▶ สร้างและพัฒนางค์ความรู้ เทคโนโลยี เพื่อเพิ่มความสามารถในการแข่งขันของอุตสาหกรรมชิ้นส่วนอิเล็กทรอนิกส์อัจฉริยะ
- ▶ สร้างบุคลากรที่มีทักษะในอุตสาหกรรมใหม่ เพื่อให้เข้ากับการเปลี่ยนแปลงทางด้านเทคโนโลยีที่รวดเร็ว

## ผลกระทบ

- ▶ สร้างศักยภาพการวิจัยวัสดุเชิงคำนวณของประเทศให้สามารถสนับสนุนภาคการผลิต (อุตสาหกรรม) โดยเฉพาะอย่างยิ่งที่เกี่ยวข้องกับเทคโนโลยีวัสดุในการวิเคราะห์วิจัยวัสดุใหม่
- ▶ ลดการพึ่งพาต่างประเทศด้านวัสดุมูลค่าเพิ่มราคาแพงของประเทศ เมื่อสามารถสังเคราะห์ได้เอง
- ▶ สร้างภูมิคุ้มกันของประเทศด้านวัสดุพลังงาน ซึ่งต่อให้เทคโนโลยีวัสดุขั้นสูง

## ความยั่งยืน

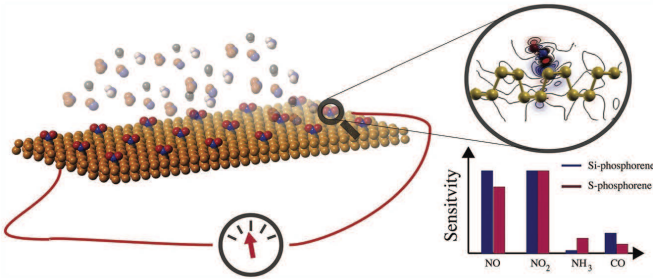
มององค์ความรู้และเทคโนโลยีที่เหมาะสมกับบริบทของประเทศไทยเพื่อเป็นฐานในการสร้างนวัตกรรมวัสดุขั้นสูงและการเพิ่มพูนจากต่างประเทศ

## งบประมาณและช่วงเวลาดำเนินการ

งบประมาณรวม: 3,110,000 บาท  
 ช่วงเวลาดำเนินการ: 1 มีนาคม พ.ศ. 2560 – 29 กุมภาพันธ์ พ.ศ. 2563

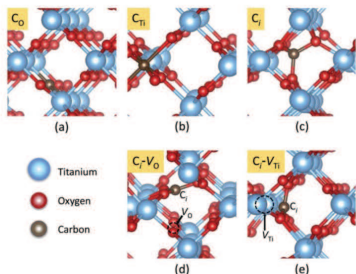
## ผลการดำเนินงาน

การออกแบบแก๊สเซ็นเซอร์ในฟอสฟอรีนที่เชื่อมด้วยซิลิคอนและกำมะถันที่มีความไวและความจำเพาะสูง



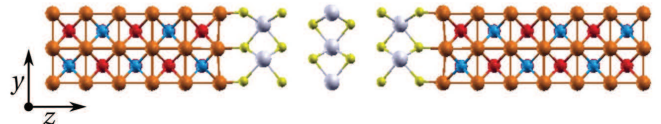
ที่มา: Prasongkit, Jariyane, et al. "Ultra-high-sensitive gas sensors based on doped phosphorene: A first-principles investigation." Applied Surface Science 497 (2019): 143660.

การศึกษาเสถียรภาพของพลัมบานและคุณสมบัติทางแสงของคาร์บอนที่เชื่อมกับในไทเทเนียมไดออกไซด์ที่มีโครงสร้างแบบรูกลึกลง เพื่อปรับปรุงความสามารถในการดูดกลืนแสง ทำให้ประสิทธิภาพของการใช้ไทเทเนียมไดออกไซด์เป็นตัวเร่งปฏิกิริยาทางแสงมีประสิทธิภาพเพิ่มขึ้น



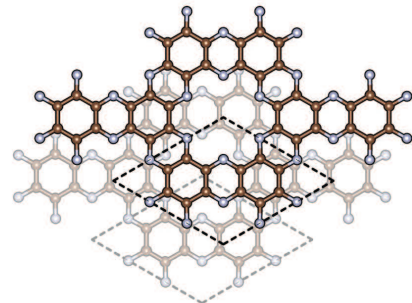
ที่มา: Charoenphon, Supparat, et al. "Energetics and optical properties of carbon impurities in rutile TiO<sub>2</sub>." RSC Advances 10.33 (2020): 19648-19654.

การจำลองรอยต่อระหว่างโลหะผสมฮอยส์เลอร์ Fe<sub>3</sub>Si และโมลิบดีนัมไดซัลไฟด์ MoS<sub>2</sub> ซึ่งแสดงสมบัติการกั้นกระแสสปินของอิเล็กตรอนข้ามรอยต่อ เพื่อใช้ในการสร้างสถานะทางควอนตัมสำหรับการเก็บข้อมูลในอุปกรณ์คอมพิวเตอร์



ที่มา: Rotjanapittayakul, Worasak, et al. "Spin injection and magnetoresistance in MoS<sub>2</sub>-based tunnel junctions using Fe<sub>3</sub>Si Heusler alloy electrodes." Scientific Reports 8.1 (2018): 1-8.

การค้นพบเสถียรภาพใหม่ของสารสองมิติชนิดสองชั้น C<sub>2</sub>N ที่มีความสามารถในการปรับเปลี่ยนค่าของแถบช่องว่างพลังงานได้ตามการเรียงตัวของอะตอม ซึ่งสามารถนำมาสร้างเป็นอุปกรณ์นาโนอิเล็กทรอนิกส์ในอนาคตได้



ที่มา: Klichchupong, Dabsamut, et al. "Stacking stability of C<sub>2</sub>N bilayer nanosheet." Scientific Reports (Nature Publisher Group) 9.1 (2019).

### บทความที่โดดเด่น

- [1] Koldiazhyi, Taras, et al. "Disentangling small-polaron and Anderson-localization effects in ceria: Combined experimental and first-principles study." Physical Review B 99.3 (2019): 035144.
- [2] Palietzko, Patompo, et al. "Hybrid-functional study of native defects and W/Mo-doped in monoclinic-bismuth vanadate." The Journal of Physical Chemistry C 123.23 (2019): 14508-14516.
- [3] Klichchupong, Dabsamut, et al. "Stacking stability of C<sub>2</sub>N bilayer nanosheet." Scientific Reports (Nature Publisher Group) 9.1 (2019).
- [4] Simalaoon, Kodachon, et al. "Energetics of native defects in ZnRh<sub>2</sub>O<sub>4</sub> spinel from hybrid density functional calculations." Journal of Applied Physics 125.16 (2019): 165703.
- [5] Rotjanapittayakul, Worasak, et al. "Spin injection and magnetoresistance in MoS<sub>2</sub>-based tunnel junctions using Fe<sub>3</sub>Si Heusler alloy electrodes." Scientific reports 8.1 (2018): 1-8.
- [6] Ngaijapa, Apinya, et al. "On the Enhanced Reducibility and Charge Transport Properties of Phosphorus-Doped BiVO<sub>4</sub> as Photocatalysts: A Computational Study." The Journal of Physical Chemistry C 124.8 (2020): 4352-4362.



บทความทั้งหมด

โปสเตอร์สรุปโครงการวิจัย 2560

การประชุมศูนย์ความเป็นเลิศด้านฟิสิกส์ ประจำปี 2563

ณ โรงแรม เดอะ สุโกศล กรุงเทพมหานคร วันที่ 28 สิงหาคม พ.ศ. 2563



http://thep-center.org