

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ : MRG5680186

ชื่อโครงการ : การออกแบบอุปกรณ์ตรวจจับแก๊สแบบใหม่ซึ่งใช้ซิลิซีน

ชื่อนักวิจัย : ดร. จริญญาณี ประสงค์กิจ

E-mail Address : jariyanee.prasongkit.npu.ac.th

ระยะเวลาโครงการ : กรกฎาคม 2556 - กรกฎาคม 2558

การตรวจวัดชนิดของแก๊สในสิ่งแวดล้อมหรือการรั่วไหลของแก๊สในงานอันตรายเป็นความน่ากังวลอย่างยิ่งหลวงซึ่งเกี่ยวพันต่อสุขภาพ ความปลอดภัย และ ความเสี่ยงด้านสิ่งแวดล้อม ในความพยายามที่จะพัฒนาความสามารถในการตรวจจับแก๊ส วัสดุนาโนได้ถูกพิจารณาในฐานะเครื่องมืออันเป็นความหวังที่จะเอาชนะปัจจัยที่จำกัดหลักๆของเทคโนโลยีแก๊สเซ็นเซอร์ อันได้แก่ ความจำเพาะ ความไว เวลาตอบสนอง และ ความเสถียร เป็นต้น ความก้าวหน้าในการสร้างซิลิซีนได้ยกระดับความหวังอันน่าตื่นเต้นสำหรับการประยุกต์ใช้ในเชิงปฏิบัติสำหรับการตรวจจับแก๊ส โครงการวิจัยนี้ได้ศึกษาความสามารถในการตรวจจับแก๊สของนาโนเซ็นเซอร์ซิลิซีน สำหรับแก๊สที่แตกต่างกัน 4 ชนิด ได้แก่ NO , NO_2 , NH_3 และ CO ในเทอมของความจำเพาะและความไว ซึ่งใช้ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นและวิธีการฟังก์ชันนัลสมมูล สัญฐานเชิงโครงสร้าง ตำแหน่งการดูดซับ พลังงานยึดเหนี่ยว และการถ่ายโอนประจุของโมเลกุลแก๊สทั้งหมดที่ถูกศึกษาบนนาโนเซ็นเซอร์ซิลิซีนได้ถูกอภิปรายอย่างเป็นระบบ ผลการคำนวณชี้ให้เห็นว่า ซิลิซีนบริสุทธิ์แสดงความไวอย่างมากสำหรับแก๊ส NO และ NO_2 ขณะที่ไม่สามารถตรวจจับแก๊ส CO และ NH_3 ได้ ในความพยายามที่จะเอาชนะข้อจำกัดในด้านความไวอันเป็นผลจากอันตรกิริยาแวนเดอร์วาลส์อย่างอ่อนของแก๊ส CO และ NH_3 บนอุปกรณ์ เราได้ทำการโด๊ปซิลิซีนด้วย B และ N ซึ่งนำมาสู่การเพิ่มขึ้นของพลังงานยึดเหนี่ยวและการถ่ายประจุและเป็นผลให้อุปกรณ์มีความไวที่ดีขึ้น อุปกรณ์ซิลิซีนแสดงความเป็นไปได้ในการแยกความต่างระหว่างแก๊สที่ถูกศึกษาทั้งสิ้นชนิด จึงเป็นความหวังของนาโนเซ็นเซอร์ยุคถัดไปสำหรับการเป็นอุปกรณ์ตรวจจับแก๊สที่มีความไวและความจำเพาะสูง

คำหลัก : ซิลิซีน อุปกรณ์นาโน ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น แก๊สเซ็นเซอร์

Abstract

Project Code : MRG5680186

Project Title : A new gas sensor design based on silicene

Investigator : Dr. Jariyanee Prasongkit

E-mail Address : jariyanee.prasongkit.npu.ac.th

Project Period : July 2556 - July 2558

Detection of chemical species in environment or gas leak in hazardous work is of a great concern as it involves health, safety and environmental risks. In an attempt to improve gas sensing performance, nanomaterials are being considered as a promising tool to overcome the main limiting factor of gas sensor technology; selectivity and sensitivity, response time and stability. Recent advances in the fabrication of silicene devices have raised exciting prospects for practical applications such as gas sensing. We investigated the gas detection performance of silicene nanosensors for four different gases (NO, NO₂, NH₃ and CO) in terms of sensitivity and selectivity, employing density functional theory and non-equilibrium Green's function method. The structural configurations, adsorption sites, binding energies and charge transfer of all studied gas molecules on silicene nanosensors are systematically discussed in this work. Our results indicate that pristine silicene exhibits strong sensitivity for NO and NO₂, while it appears incapable of sensing CO and NH₃. In an attempt to overcome sensitivity limitations due to weak van der Waals interaction of those latter gas molecules on the device, we doped pristine silicene with either B or N atoms, leading to enhanced binding energy as well as charge transfer, and subsequently a significant improvement of sensitivity. A distinction between the four studied gases based on the silicene devices appear possible, and thus promising to be next-generation nanosensors for highly sensitive and selective gas detection.

Keywords : Silicene, Nanodevices, Density Functional Theory, Gas sensor