

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ: TRG5680092

ชื่อโครงการ: การอธิบายวัสดุเฉพาะทางขั้นสูงและคุณสมบัติของวัสดุเชิงอะตอม

ชื่อนักวิจัย: รศ. ดร.สิริโชค จิงถาวรณ สาขาวิชาฟิสิกส์ สำนักวิชาวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

E-mail Address: sirichok@sut.ac.th

ระยะเวลาโครงการ: 2 ปี 6 เดือน

งานวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อศึกษาคุณสมบัติเชิงอิเล็กทรอนิกส์ โครงสร้าง และการผิดรูปของวัสดุเฉพาะทางขั้นสูงที่มีโครงสร้างแบบ 2 มิติ โดยวิธีเชิงคำนวณแบบเฟอร์สพรีนซิเพิล โดยทำการศึกษาพฤติกรรม การผิดรูปและการเปลี่ยนโครงสร้างของชั้นโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรฟีน (graphene) และซิลิซีน (silicene) ภายใต้เงื่อนไขความเค้นต่าง ๆ (ในช่วง -0.2 ถึง 0.2) ซึ่งวัสดุทั้ง 3 ชนิด สามารถประยุกต์เป็นแผ่นเยื่อคัดกรองโมเลกุลขนาดต่าง ๆ ได้ โดยทฤษฎีฟังก์ชันัลของความหนาแน่นแบบเฟอร์สพรีนซิเพิล ผลการคำนวณให้ข้อมูลของการผ่อนคลายโครงสร้าง ภายใต้ความเค้นในแนวต่าง ๆ ซึ่งสามารถหาได้จากพื้นผิวของพลังงานความเค้น ทำให้ทราบคุณสมบัติเชิงกลของแผ่นเยื่อ เช่น อัตราส่วนปัวซอง ความทนแตกหัก และความยืดหยุ่นเชิงระนาบ ข้อมูลที่ได้สามารถเปรียบเทียบกับ การทดสอบแบบโดมความดัน (pressurized blister test) ทั้งนี้พฤติกรรมผิดรูปของแผ่นเยื่อสามารถอธิบายได้ โดยผลเฉลยของเฮงกี ผลเฉลยนี้ให้รูปแบบของแผ่นเยื่อภายใต้ความดันและให้ความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความสูงของโดม ซึ่งสามารถประมาณค่าความเค้นของแผ่นเยื่อได้โดยตรงทำให้ทราบถึงความสัมพันธ์ระหว่างความดันกับความเค้นที่เกิดขึ้นในแต่ละบริเวณบนแผ่นเยื่อ ผลการคำนวณพบว่าวัสดุที่มีอัตราส่วนปัวซองและความยืดหยุ่นเชิงระนาบที่ต่างกันจะมีความเหมาะสมกับการใช้งานที่ความดันต่างกัน ที่ความเค้นระดับเดียวกันพบว่าแกรฟีน เหมาะกับการใช้งานที่ความดันสูงและซิลิซีนเหมาะกับการใช้งานที่ความดันต่ำ ผลลัพธ์ที่ได้จากการวิจัยนี้เป็นรากฐานสำคัญในการศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างความดันหรือความเค้นของแผ่นเยื่อกับคุณสมบัติการส่งผ่านของโมเลกุลและปริมาณต่าง ๆ ที่เกี่ยวข้องในระบบจริงซึ่งมีส่วนสำคัญในการประยุกต์ด้านพลังงานทดแทนและวัสดุสำหรับกักเก็บไฮโดรเจน

คำหลัก: ผลเฉลยของเฮงกี แผ่นเยื่อ แกรฟีน ความเค้น ความดัน การคัดกรองแก๊ส

Abstract

Project Code: TRG5680092

Project Title: Atomistic description of advanced functional materials and its properties

Investigator: Assoc. Prof. Dr. Sirichok Jungthawan, School of Physics, Institute of Science, Suranaree University of Technology

E-mail Address: sirichok@sut.ac.th

Project Period: 2 Years 6 Months

The project aims to study the electronic properties, structural properties, and deformation behavior of two dimensional materials based on first-principles calculations. The structural deformation of single-layer boron nitride (BN), graphene, and silicene under different strain conditions (in the range of -0.2 to 0.2) have been investigated using first-principles density functional theory. The information of lateral relaxation under uniaxial strain can be extracted from the strain energy surface. The results provide key mechanical properties of the membranes such as Poisson's ratio, ultimate strength, and in-plane elastic stiffness. Under pressurized blister test, the deformation behavior of the membrane is describe by using Hencky's solution. This solution provides the membrane profile and the relationship between the pressure and the blister height that can directly estimate strain in the membrane. Materials with different Poisson's ratio and in-plane elastic stiffness are suitable for different pressure range. At the same strain, graphene is suitable for high pressure application whereas silicene is suitable for low pressure application. The relationship between pressure or strain and diffusion properties of various gas molecules is subjected for further study for renewable energy applications and hydrogen storage.

Keywords: Hencky's solution, membrane, graphene, strain, pressure, gas separation