

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ: TRG5780050

ชื่อโครงการ: คุณสมบัติเชิงการดูดซับไฮโดรเจนและไดอิเล็กทริกซ์ของวัสดุออกไซด์

ชื่อนักวิจัย: ผศ. ดร. พรจักร ศรีพัชรารุณ

E-mail Address: spornj@kku.ac.th

ระยะเวลาโครงการ: กรกฎาคม 2557 - กรกฎาคม 2559

คุณสมบัติการดูดซับไฮโดรเจน เทอร์โมอิเล็กทริกซ์ และไดอิเล็กทริกซ์ ได้ถูกศึกษาโดยวิธีเฟิร์ส-พรินซิเพิล สำหรับคุณสมบัติการดูดซับไฮโดรเจน ผู้วิจัยได้ทำการเติมแต่ง Ti ลงบนพื้นผิวของวัสดุ Mg-MOF-74 หลังจากนั้นจึงได้ทำการเติมโมเลกุลไฮโดรเจนลงบนอะตอม Ti ผลการคำนวณแสดงให้เห็นว่าพลังงานดูดซับของไฮโดรเจนอยู่ในช่วงที่ต้องการสำหรับการใช้งานจริงในวัสดุกักเก็บไฮโดรเจน นอกจากนี้ ความสามารถในการกักเก็บไฮโดรเจนที่อุณหภูมิ 77, 150 และ 298 เคลวินและที่ความดันปกติมีค่าเท่ากับ 1.81, 1.74, และ 1.29 เปอร์เซ็นต์ไฮโดรเจนโดยน้ำหนักตามลำดับ สำหรับคุณสมบัติเชิงเทอร์โมอิเล็กทริกซ์ ผู้วิจัยได้ทำการเจือ Fe ลงในโครงสร้าง CCO โดยโครงสร้างใหม่นี้จะเรียกว่า CCO-Fe ผลการคำนวณพบว่ามีสองสิ่งที่เปลี่ยนแปลงในความหนาแน่นสถานะของอิเล็กตรอนของ CCO-Fe สิ่งแรกที่เปลี่ยนแปลงคือพลังงานเฟอร์มีจะเลื่อนไปในทิศทางที่พลังงานสูงขึ้น โดยพลังงานนี้จะติดกับขอบของแถบวาเลนซ์ที่มีความชันมากที่สุด ซึ่งสิ่งนี้เกี่ยวข้องกับการเพิ่มขึ้นของกำลังเทอร์โมในวัสดุนี้ สิ่งที่สองที่เปลี่ยนแปลงก็คือการมีสถานะของ Fe ที่อยู่ที่ระดับพลังงานสูงกว่าพลังงานเฟอร์มี 0.1 eV โดยการมีอยู่ของสถานะดังกล่าวทำให้เกิดการนำไฟฟ้าที่ดีขึ้น นั่นก็ส่งผลให้กำลังเทอร์โมเพิ่มขึ้น ดังนั้นกำลังเทอร์โมในวัสดุ CCO-Fe จึงมีค่าสูงกว่าวัสดุ CCO สำหรับคุณสมบัติไดอิเล็กทริกซ์ ผู้วิจัยได้ทำการเจือ Al และ Sb ลงใน TiO_2 ที่มีโครงสร้างแบบรูไทล์ (ASTO) ที่ความถี่ 100 เฮิร์ตซ์ พบว่าค่าคงที่ไดอิเล็กทริกซ์ของ ASTO มีค่าลดลงจาก 6572 เป็น 454 เมื่อขนาดของเกรนมีค่าเพิ่มขึ้น นอกจากนี้ผลการวิเคราะห์ประจุแสดงให้เห็นว่าการมีอยู่ของ Al และช่องว่าง O ทำให้เกิดความมีขั้วในโครงสร้างนี้ นอกจากนี้ยังพบว่า อะตอม Sb ยังสามารถทำให้เกิดการมีขั้วในวัสดุได้อีกด้วย นั่นก็ส่งผลให้ค่าคงที่ไดอิเล็กทริกซ์ของ ASTO มีค่าสูงกว่า TiO_2 ที่ไม่มีการเจือ

คำสำคัญ: การกักเก็บไฮโดรเจน วัสดุโครงข่ายอินทรีย์ที่มีแมกนีเซียมเป็นฐาน แคลเซียมโคบอลไทต์ วัสดุออกไซด์เทอร์โมอิเล็กทริกซ์ ไทเทเนียมที่เจือด้วยอลูมิเนียมและแอนติโมนี วัสดุไดอิเล็กทริกซ์

Abstract

Project Code: TRG5780050

Project Title: Hydrogen Adsorption and Dielectric Properties of Oxide Materials

Investigator: Asst. Prof. Pornjuk Srepusharawoot

E-mail Address: spornj@kku.ac.th

Project Period: July 2014 – July 2016

Hydrogen adsorption, thermoelectric and dielectric properties of three oxide materials were investigated by means of first-principle calculations. For hydrogen adsorption property, we decorated Ti on Mg-MOF-74, structure and then place various H₂ loadings on Ti atom. Our results revealed that hydrogen adsorption energy is in the desirable range for practical hydrogen-storage applications. In addition, we found that hydrogen uptake by Ti-functionalized Mg-MOF-74 at temperatures of 77, 150, and 298 K and ambient pressure were 1.81, 1.74, and 1.29 H₂wt%, respectively. For thermoelectric property, we doped Fe into the CCO structure and we labelled this newly structure as CCO-Fe. Based on our calculations, we found two obvious changes of density of states in CCO-Fe. Firstly, the Fermi energy has shifted to the higher level value and intercepted at the edge of the valence band where the slope is maximum. This characteristic enhances the thermopower of the system. The second change is the additional states ~0.1 eV above the Fermi level coming from the states of Fe atoms. These states are interpreted as a source of charge reservoir providing holes for electrical conduction in the CoO₂ layer. Consequently, thermopower in CCO-Fe is higher than that in CCO. For dielectric property, we co-doped Al and Sb in rutile TiO₂ (ASTO). Our results show that the dielectric permittivity of ASTO ceramics was significantly reduced from 6572 to 454 at 10² Hz as the mean grain size increased. Based on the charge analysis, the existence of both Al and O vacancy caused creation of defect-dipole moments in the TiO₂ structure. Similarly, the Sb atoms could also generate the charge trapping in this structure. Consequently, high dielectric response in the ASTO ceramics is significantly enhanced in comparison to the un-doped TiO₂ ceramic

Keywords: Hydrogen Storage, Magnesium based metal-organic frameworks, Calcium Cobaltite, thermoelectric oxide materials, Al and Sb co-doped Titania, Dielectric materials.