

กราฟีนนาโนฟิลลา: การศึกษาด้วยทฤษฎีเชิงคำนวณระดับเบื้องต้น
ของสมบัติเชิงโครงสร้างและเชิงอิเล็กทรอนิกส์
Graphene Nanopillars: Preliminary Theoretical Calculation Studies of
their Structures and Electronic Properties

พิกุล พูลแก้ว¹ และอนรรักษ์ อุดมเวช^{2*}
Pikul Poolkaew¹ and Anurak Udomvech^{2*}

บทคัดย่อ

ได้ศึกษาโครงสร้างของกราฟีนนาโนฟิลลาซึ่งเป็นวัสดุที่เกิดจากการนำแผ่นกราฟีนเชื่อมต่อกับท่อนาโนคาร์บอน โดยการจำลองแบบบนคอมพิวเตอร์และวิธีทฤษฎีเชิงคำนวณพบว่ารูปแบบรอยต่อของกราฟีนนาโนฟิลลาขึ้นอยู่กับขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางที่แตกต่างกันของท่อนาโนคาร์บอนและมีลักษณะรูปร่างรอยต่อที่ซับซ้อน โดยโครงสร้างกราฟีนนาโนฟิลลาแบบรอยต่อตรงมีจำนวนวงเจ็ดเหลี่ยมเพิ่มขึ้นตามเลขดัชนี chiral ของท่อนาโนคาร์บอน ในขณะที่โครงสร้างแบบรอยต่อไม่ตรงไม่มีการเปลี่ยนแปลงจำนวนวงเจ็ดเหลี่ยมซึ่งมีจำนวน 6 วงเท่ากัน ผลการคำนวณความเสถียรของกราฟีนนาโนฟิลลาจากพลังงานการก่อรูปพบว่าทั้งแบบคายความร้อนและแบบดูดความร้อน สำหรับสมบัติเชิงอิเล็กทรอนิกส์ สถานะ HOMO และ LUMO เปลี่ยนแปลงขึ้นกับลักษณะรอยต่อระหว่างกราฟีนและท่อนาโนคาร์บอน และพบว่าสถานะของช่องว่างพลังงานของทุกโครงสร้างแสดงสมบัติเชิงอิเล็กทรอนิกส์ในแบบกึ่งโลหะ ซึ่งเป็นไปตามระดับความถูกต้องแม่นยำที่ค่อนข้างมีประสิทธิภาพต่ำกว่าค่าที่ยอมรับได้ในเชิงคำนวณของทฤษฎีการคำนวณแบบ Density Functional Tight Binding

คำสำคัญ : กราฟีนนาโนฟิลลา พลังงานการก่อรูป สถานะของช่องว่างพลังงาน

¹ นิสิตปริญญาตรี สาขาวิทยาศาสตร์-ฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยทักษิณ สงขลา 90000

² อ., สาขาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยทักษิณ สงขลา 90000

* Corresponding author: e-mail: nu_fermi1@yahoo.com

จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557

Abstract

We have studied the graphene nanopillar materials which have been arisen from a connecting graphene sheet and carbon nanotubes by using theoretical calculations. It was found that the structures of graphene nanopillars were depending on the size of a diameter of carbon nanotubes at its boundaries and also look sophisticated. Seamlessly joints straight structures of graphene nanopillar had numbers of heptagon ring matched an increasing of the chiral indices of carbon nanotubes. While tilted structures does not change the numbers of heptagon rings. The stability of graphene nanopillars which calculated via the formation energy has been found to be both exothermic and endothermic processes. For the properties of electronic HOMO and LUMO states, it depends on the shapes of interface between graphene and carbon nanotubes. The energy gap state of all structures shows behavior of semi-metallic which is the underestimation in electronic properties results of the density functional tight binding method.

Keywords : Graphene Nanopillars, Formation Energy, Energy Gap State

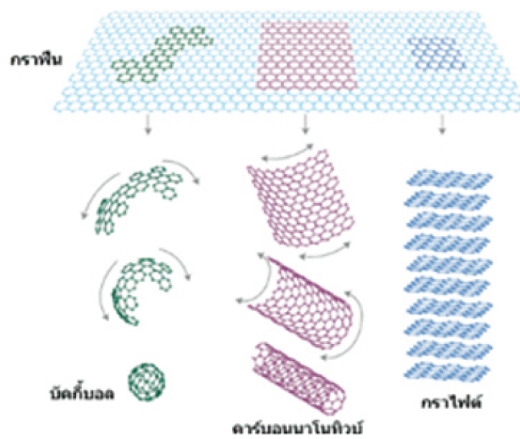
บทนำ

“กราฟีน (Graphene)” ดังภาพที่ 1(a) ค้นพบในปี 2547 เป็นวัสดุที่มีโครงสร้างแผ่นระนาบราบ 2 มิติ ซึ่งประกอบขึ้นจากอะตอมคาร์บอนรูปหกเหลี่ยมเรียงกัน หนาหนึ่งอะตอมของคาร์บอน โดยอะตอมคาร์บอนยึดกันด้วยพันธะแบบ sp^2 มีความยาวพันธะระหว่างอะตอมคาร์บอนในกราฟีนประมาณ 0.142 นาโนเมตร นักวิจัยพบว่ากราฟีนมีคุณสมบัติการคงรูปและมีความเสถียรทางไฟฟ้าที่อุณหภูมิห้อง [1] อะตอมคาร์บอนในแผ่นกราฟีนยึดเหนี่ยวกันด้วยแรงโคเวเลนต์ ซึ่งมีความแข็งแรง ทำให้กราฟีนมีคุณสมบัติแข็งแรงและเหนียวกว่าเหล็ก 20 เท่าและสามารถยืดหยุ่นได้ถึงร้อยละ 20 โปร่งแสงและนำไฟฟ้าได้ดีกว่าทองแดง คุณสมบัติทางไฟฟ้าของกราฟีนที่โดดเด่น คือ อิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนที่บนแผ่นกราฟีนได้แบบเป็นเส้นตรงคล้ายลูกปืน เรียกว่า Ballistic Transport และเป็นการเคลื่อนที่ที่แทบจะไม่มีมวลเรียกว่า Massless Relativistic Particle ซึ่งอิเล็กตรอนสามารถเคลื่อนที่บนแผ่นกราฟีนโดยไม่มีการสูญเสียโมเมนตัม [2]

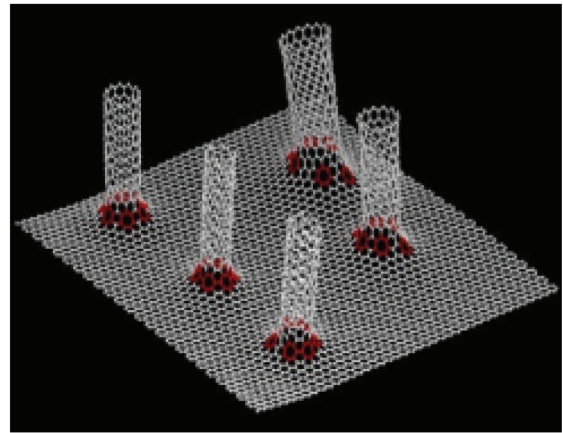
ถ้านำกราฟีนมาม้วนเป็นท่อจะได้เป็นท่อนาโนคาร์บอน (Carbon Nanotube) ดังภาพที่ท่อนาโนคาร์บอนเป็นท่อขนาดเล็กจิ๋วหนึ่งมิติ มีขนาดเส้นผ่าศูนย์กลางสเกลระดับนาโนเมตร โดยจากการสังเคราะห์พบว่ามีเส้นผ่านศูนย์กลางอยู่ระหว่าง 0.4-4.0 นาโนเมตร [3] และสามารถสังเคราะห์โครงสร้างที่มีความยาวได้ถึงระดับเซนติเมตร [4] ปัจจุบันท่อนาโนคาร์บอนแบ่งออกเป็น 2 ลักษณะ ได้แก่ แบบมีผนังชั้นเดียวหรือผนังเดี่ยว (Single-Wall Carbon Nanotube : SWCNT) และแบบมีผนังหลายชั้น (Multi-Wall Carbon Nanotube: MWCNT) ซึ่งคล้ายกับการเอาท่อนาโนคาร์บอนเล็กซ้อนในท่อใหญ่หลายชั้น

สำหรับงานนี้ได้สนใจศึกษาโครงสร้างผสมของกราฟีนและท่อนาโนคาร์บอนเรียกว่า “Graphene Nanopillars” เป็นโครงสร้าง 3 มิติ ดังภาพที่ 1(b) โดยยึดเหนี่ยวกันด้วยพันธะโคเวเลนต์ ซึ่งหมายความว่าคาร์บอนที่อยู่ติดกันใช้อิเล็กตรอนร่วมกันภายใต้โครงสร้างที่แข็งแรง สำหรับ Graphene Nanopillars ท่อนาโนคาร์บอนไม่ได้เกาะอยู่บนแผ่นกราฟีนเท่านั้น แต่ได้กลายเป็นส่วนหนึ่งของแผ่นกราฟีน เกิดเป็นวัสดุที่ไร้รอยต่อ การรวมตัวกันของกราฟีนและท่อนาโนคาร์บอนเกิดเป็น Graphene Nanopillars มีศักยภาพสามารถพัฒนาเป็นส่วนประกอบทางอิเล็กทรอนิกส์ได้อย่างดีเยี่ยมเหมือนกับ Supercapacitor (ตัวเก็บประจุที่ใช้กักเก็บพลังงาน) [5] เนื่องจากมีพื้นที่ผิวจำนวนมาก อาจจะควบคุมการ

จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557



ภาพที่ 1 (a) แสดงโครงสร้างของกราฟีน
และท่อนาโนคาร์บอน [5]



ภาพที่ 1 (b) แสดงภาพจำลอง
Graphene Nanopillar [6]

จัดเก็บพลังงานที่มากในขนาดพื้นที่เล็กได้ นักวิจัยแห่งมหาวิทยาลัยไรซ์ [8] ได้ทำการสังเคราะห์กราฟีน โดยการปลูก กราฟีน ลงบนโลหะทองแดง และปลูกท่อนาโนคาร์บอนลงบนกราฟีนโดยเกิดการเชื่อมต่อกันระหว่างท่อนาโนคาร์บอน และข้อไฟฟ้าโลหะ ซึ่งเป็นกระบวนการถ่ายเทความร้อนระหว่างเฟส ทำให้ท่อนาโนคาร์บอนกลายเป็นส่วนหนึ่งของแผ่นกราฟีน จากการทดลองทำให้ได้วัสดุที่มีพื้นที่ผิวใหญ่มากถึง 2,000 ตารางเมตรต่อกรัม สำหรับการศึกษาโครงสร้างและสมบัติของ Graphene Nanopillars นี้ ได้ทำการศึกษาดังวิธีทฤษฎีเชิงคำนวณทางกลศาสตร์ควอนตัมของ density functional tight binding (DFTB) ถึงสมบัติเชิงโครงสร้างโดยศึกษาพลังงานรวม (Total energy) พลังงานการก่อรูป (Formation energy) และสมบัติเชิงอิเล็กทรอนิกส์ในระดับเบื้องต้นของโครงสร้าง Graphene Nanopillars ที่มีขนาดของท่อนาโนคาร์บอนที่แตกต่างกัน

ระเบียบวิธีวิจัย

การศึกษาก่อรูปการสร้างแบบจำลอง Graphene Nanopillars บนคอมพิวเตอร์ โดยได้สร้างแบบจำลองของ Graphene Nanopillars เป็น 2 กลุ่ม คือโครงสร้าง Graphene Nanopillars ที่มีขนาดของท่อนาโนคาร์บอนที่แตกต่างกัน และมีรอยต่อแบบตรง ดังภาพที่ 2 และโครงสร้าง Graphene Nanopillars ที่มีขนาดของท่อนาโนคาร์บอนที่แตกต่างกันและมีรอยต่อแบบเอียง ดังภาพที่ 3 โดยใช้สัญลักษณ์ OE-Gnp_(n,0) และ OE-Gnp_(n,n) แทนโครงสร้าง Graphene Nanopillars ที่เปลี่ยนค่าดัชนี Chiral n ของท่อนาโนคาร์บอน เมื่อ n เป็นเลขจำนวนเต็มบวก ด้วยวิธีการศาสตร์นิวตันเชิงโมเลกุล (Molecular Mechanics : MM+) เพื่อให้ได้แบบจำลองโครงสร้างเบื้องต้น แล้วนำไปคำนวณด้วยวิธีการศาสตร์ควอนตัมของ DFTB ซึ่งมีความถูกต้องแม่นยำในระดับเบื้องต้นของทฤษฎีควอนตัม ทำให้การคำนวณใช้เวลาไม่นาน โดยใช้ code สำเร็จรูป DFTB+ [9] ซึ่งเป็น code แบบเปิด (Open source) เนื่องจากโครงสร้างแบบจำลอง Graphene Nanopillars มีขนาดใหญ่ โดยการหาโครงสร้างที่ดีที่สุด (Optimized Structure) ซึ่งมีค่าพลังงานรวมต่ำสุด (Minimized Total Energy) ของ Graphene, ท่อนาโนคาร์บอนและ Graphene Nanopillars เพื่อนำไปใช้คำนวณสำหรับศึกษาพลังงานการก่อรูป (Formation energy: ΔH) ดังสมการ

จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557

$$\Delta H = \frac{-E_{tot} + (E_{junction} + E_{graphene} + E_{tube})}{N_c}$$

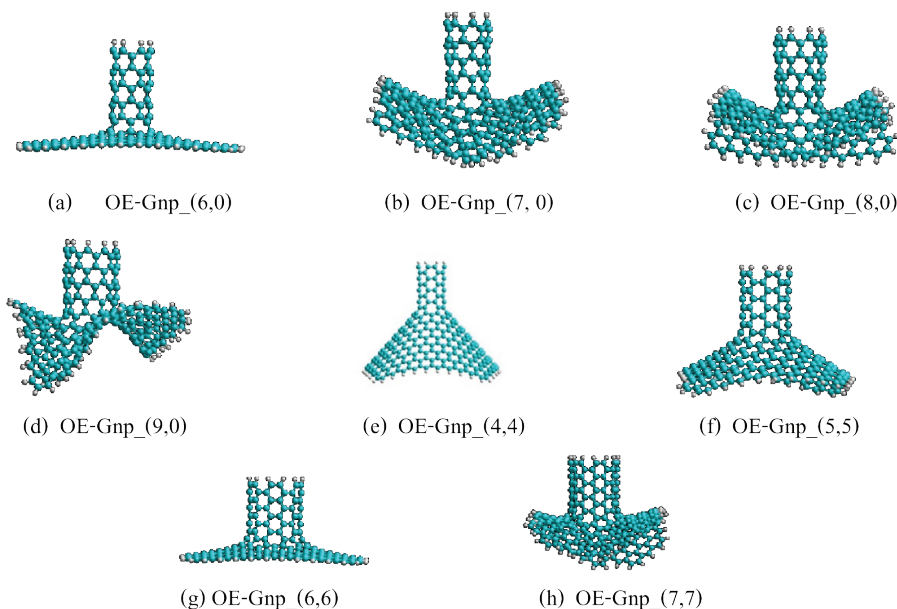
สำหรับสมบัติเชิงอิเล็กทรอนิกส์ของ Graphene Nanopillars ได้ศึกษาสถานะพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนเต็ม (Highest Occupied Molecular Orbital: HOMO) และสถานะพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนเต็ม (Lowest Unoccupied Molecular Orbital: LUMO) และค่าสถานะช่องว่างพลังงาน (Energy gap state)

ผลการวิจัยและอภิปรายผลการวิจัย

การศึกษาด้วยวิธีทฤษฎีเชิงคำนวณของโครงสร้าง Graphene Nanopillars โดยการใช้กลศาสตร์นิวตันเชิงโมเลกุลและกลศาสตร์ควอนตัมของ DFTB ทำให้สามารถศึกษาถึงคุณสมบัติเชิงกายภาพของโครงสร้าง Graphene Nanopillars โดยได้จัดแบ่งกลุ่มโครงสร้าง Graphene Nanopillars ไว้สองกลุ่มคือ Graphene Nanopillars แบบ Model-A ซึ่งเป็นกรณีท่อตรงและ Model-B ซึ่งเป็นกรณีท่อเอียงได้ดังภาพที่ 2 และ 3 ตามลำดับ และผลการคำนวณเชิงโครงสร้าง ค่าพลังงานการก่อรูปและโครงสร้างเชิงอิเล็กทรอนิกส์ได้ผลดังนี้

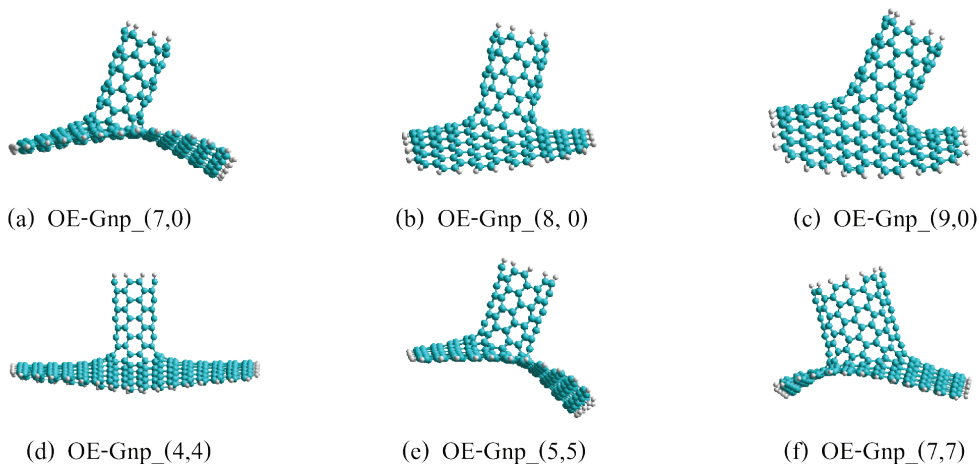
1. ลักษณะเชิงโครงสร้างของบริเวณรอยต่อ

- โครงสร้าง Graphene Nanopillars รอยต่อแบบท่อตรง พบว่า ทุกโครงสร้างจะประกอบด้วยวงเจ็ด



ภาพที่ 2 แสดงโครงสร้าง Graphene Nanopillars แบบ Model-A เมื่อขนาดของท่อนาโนคาร์บอนแตกต่างกันแบบรอยต่อท่อตรง โดย (a) – (d) เป็นโครงสร้าง Graphene Nanopillars ของกราฟีนและท่อนาโนคาร์บอนแบบ Zigzag (n,0) หรือ “OE-Gnp_(n,0)” เมื่อ n = 6,7,8,9 และ (e) – (h) เป็นโครงสร้าง Graphene Nanopillars ของกราฟีนและท่อนาโนคาร์บอนแบบ Armchair (n,n) หรือ “OE-Gnp_(n,n)” เมื่อ n = 4,5,6,7

จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557



ภาพที่ 3 แสดงโครงสร้าง Graphene Nanopillars แบบ Model-B ที่เมื่อขนาดของท่อนาโนคาร์บอนแตกต่างกันแบบรอยต่อทอเอียง โดย (a) – (d) เป็นโครงสร้าง Graphene Nanopillars ของกราฟีนและท่อนาโนคาร์บอนแบบ Zigzag ($n,0$) หรือ “OE-Gnp_($n,0$)” เมื่อ $n = 6,7,8,9$ และ (e) – (h) เป็นโครงสร้าง Graphene Nanopillars ของกราฟีนและท่อนาโนคาร์บอนแบบ Armchair (n,n) หรือ “OE-Gnp_(n,n)” เมื่อ $n = 4,5,6,7$ เหลี่ยมแปดเหลี่ยมตามค่าดัชนี chiral n โดยโครงสร้าง OE-Gnp_(n,n) เมื่อ $n = 4,5,6,7$ จะมีวงเจ็ดเหลี่ยมเรียงตัวสลับกับวงหกเหลี่ยม (Hexagon ring) ส่วนโครงสร้าง OE-Gnp_($n,0$) เมื่อ $n = 6,7,8,9$ จะมีวงเจ็ดเหลี่ยมเรียงตัวอยู่ติดกัน

• โครงสร้าง Graphene Nanopillars รอยต่อแบบทอเอียง พบว่า ประกอบด้วยวงเจ็ดเหลี่ยมจำนวน 6 วงทุกโครงสร้างและเรียงตัวในตำแหน่งที่แตกต่างกันไปตามการเปลี่ยนค่าดัชนี Chiral n

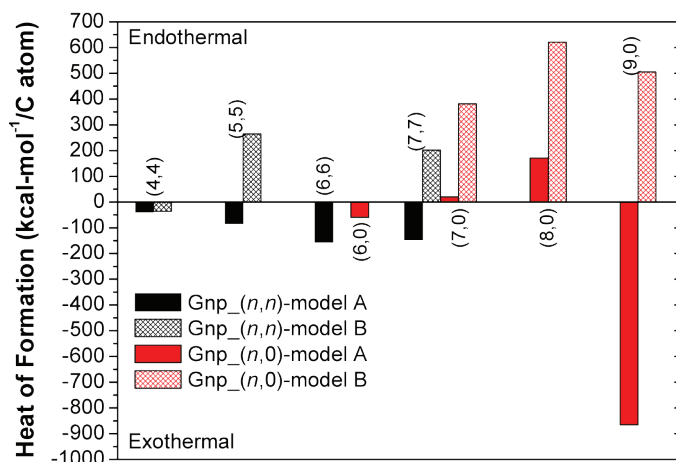
นอกจากนี้ได้พบว่าประจุเฉลี่ยโดยรวมของโครงสร้าง Graphene Nanopillars ทุกโครงสร้างมีค่าคงที่เท่ากับศูนย์ นั่นคือ มีความเป็นกลางทางไฟฟ้า จึงทำให้โครงสร้าง Graphene Nanopillars มีความเสถียรทางไฟฟ้า แม้จะเป็นท่อนาโนคาร์บอนที่มีขนาดและรูปแบบที่แตกต่างกัน

2. พลังงานการก่อรูป (Formation energy: ΔH)

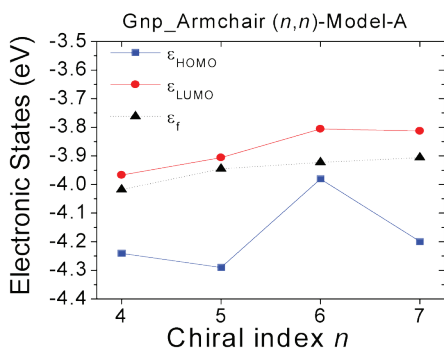
ผลการคำนวณพลังงานการก่อรูปของโครงสร้างดังแสดงภาพที่ 4 พบว่าพลังงานการก่อรูปของ Graphene Nanopillars รอยต่อกรณีทอตรง (Model-A) โครงสร้าง OE-Gnp_(7,0) และ OE-Gnp_(8,0) (ภาพที่ 2b และ 2c) มีค่าพลังงานการก่อรูปเป็น 19.79 kcal-mol⁻¹/C atom และ 171.524 kcal-mol⁻¹/C atom (ภาพที่ 4 กราฟสีแดงทึบ) ซึ่งเป็นแบบดูดความร้อน (Endothermic Process) และบ่งบอกว่าจะสามารถก่อรูปได้ต้องอาศัยพลังงานความร้อนจากภายนอกหรือสิ่งแวดล้อมมาช่วยในการก่อรูป จึงเป็นไปได้ว่าโอกาสจะเกิดโครงสร้างดังกล่าวเป็นไปได้ยากกว่าโครงสร้าง OE-Gnp_(6,0) และ OE-Gnp_(9,0) (ภาพที่ 2a และ 2d) ซึ่งมีค่าพลังงานการก่อรูปเป็น -59.65 kcal-mol⁻¹/C atom และ -865.431 kcal-mol⁻¹/C atom ซึ่งเป็นแบบคายความร้อน (Exothermic Process) โดยทั้ง OE-Gnp_(6,0) และ OE-Gnp_(9,0) เป็นโครงสร้างที่น่าจะก่อรูปได้ง่ายเนื่องจากมีโอกาสก่อรูปได้เองโดยไม่ต้องอาศัยพลังงานจากภายนอก และสำหรับ Graphene Nanopillars รอยต่อกรณีทอตรงแบบโครงสร้าง OE-Gnp_(4,4), OE-Gnp_(5,5),

จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557

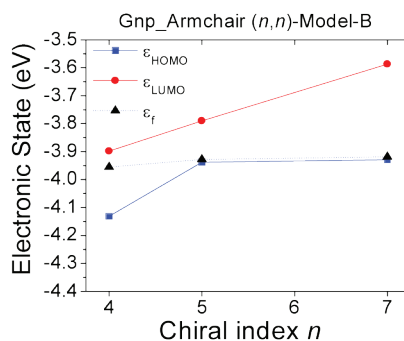
OE-Gnp_(6,6) และ OE-Gnp_(7,7) มีลักษณะพลังงานการก่อรูปแบบคายความร้อนเช่นเดียวกัน (ภาพที่ 4 กราฟสีดำทึบ) แต่สำหรับพลังงานการก่อรูปของ Graphene Nanopillars รอยต่อกรณีทอเอียง (Model-B) โครงสร้าง OE-Gnp_(7,0), OE-Gnp_(8,0), OE-Gnp_(9,0) (ภาพที่ 3a, 3b และ 3c), OE-Gnp_(5,5) และ OE-Gnp_(7,7) (ภาพที่ 3e และ 3f) พบว่าค่าพลังงานการก่อรูปเป็นแบบดูดความร้อน (ภาพที่ 4 กราฟสีแดงและสีแดงจาง) ซึ่งบ่งบอกว่าโครงสร้าง Graphene Nanopillars จะสามารถก่อรูปได้ต้องอาศัยพลังงาน



ภาพที่ 4 แสดงค่าพลังงานการก่อรูป (Formation energy: ΔH) ของโครงสร้าง OE-Gnp_(n,n) เมื่อ $n = 4,5,6,7$ และ OE-Gnp_(n,0) เมื่อ $n = 6,7,8,9$ กรณีทอตรง (Model-A) และโครงสร้าง OE-Gnp_(n,n) เมื่อ $n = 4,5,7$ และ OE-Gnp_(n,0) เมื่อ $n = 7,8,9$ กรณีทอเอียง (Model-B)



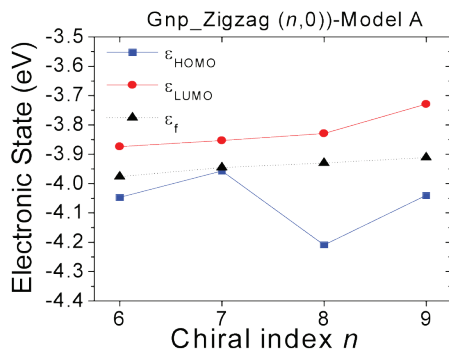
(a)



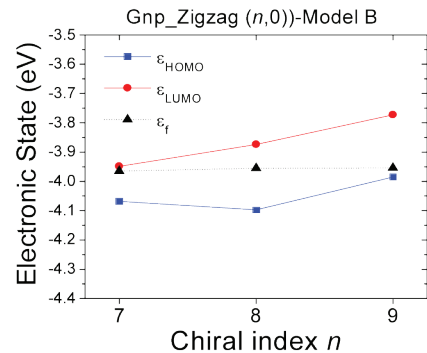
(b)

ภาพที่ 5 แสดงสถานะพลังงาน HOMO, LUMO และ Fermi Energy ของ (a) โครงสร้าง OE-Gnp_(n,n) เมื่อ $n = 4,5,6,7$ กรณีทอตรงและ (b) โครงสร้าง OE-Gnp_(n,n) เมื่อ $n = 4,5,7$ กรณีทอเอียง

จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557

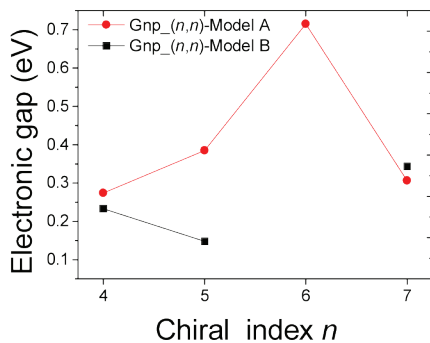


(a)

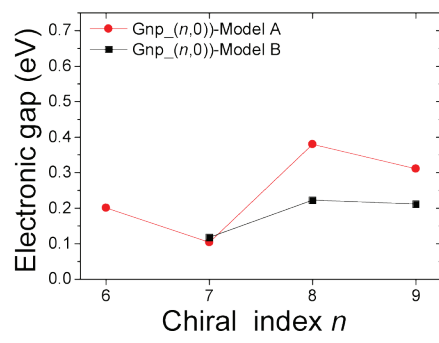


(b)

ภาพที่ 6 แสดงสถานะพลังงาน HOMO, LUMO และ Fermi Energy ของ (a) โครงสร้าง OE-Gnp_(n,0) เมื่อ $n = 6, 7, 8, 9$ กรณีท่อตรงและ (b) โครงสร้าง OE-Gnp_(n,0) เมื่อ $n = 7, 8, 9$ กรณีท่อเอียง



(a)



(b)

ภาพที่ 7 เปรียบเทียบค่าสถานะช่องว่างพลังงาน (Energy gap state) ของโครงสร้าง Graphene Nanopillars ทั้งสองกรณี (a) โครงสร้าง Graphene Nanopillars แบบ OE-GNP_(n,n) และ (b) โครงสร้าง Graphene Nanopillars แบบ OE-GNP_(n,0)

ความร้อนจากภายนอกมาช่วยในการก่อรูป แต่มีเพียงโครงสร้าง OE-Gnp_(4,4) (ภาพที่ 3d) เท่านั้นที่แสดงสมบัติแบบคายความร้อน

จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557

3. โครงสร้างเชิงอิเล็กทรอนิกส์ (Electronic Structures)

ผลการคำนวณทางกลศาสตร์ควอนตัมของ DFTB เป็นไปดังภาพที่ 5 และ 6 ทำให้ทราบถึงความแตกต่างของสถานะพลังงาน (Energy state) ของโครงสร้างเชิงอิเล็กทรอนิกส์ระดับควอนตัมของโครงสร้าง Graphene Nanopillars ที่มีขนาดของท่อนาโนคาร์บอนแตกต่างกันทั้งกรณีท่อตรงและท่อเอียง สถานะพลังงานโครงสร้างเชิงอิเล็กทรอนิกส์ของโครงสร้าง Graphene Nanopillars ที่มีขนาดของท่อนาโนคาร์บอนที่แตกต่างกันทั้งสองกรณี พบว่าค่าระดับชั้นสถานะพลังงาน HOMO (จุดสีเหลี่ยมและเส้นกราฟสีน้ำเงิน) และค่าระดับชั้นสถานะพลังงาน LUMO (จุดวงกลมและเส้นกราฟสีแดง) ของทุกโครงสร้างจะมีค่าน้อยกว่าศูนย์ โดยระดับชั้นสถานะพลังงาน LUMO ของทุกโครงสร้างจะมีค่ามากกว่าพลังงานสถานะ HOMO และค่า Fermi Energy (จุดสามเหลี่ยมและเส้นกราฟสีดำ) จะเป็นค่าที่อยู่ตรงกลางระหว่างระดับชั้นสถานะพลังงาน HOMO และ LUMO ซึ่งค่าระดับชั้นสถานะพลังงาน HOMO, LUMO และ Fermi Energy ของแต่ละโครงสร้างจะมีค่าแตกต่างกัน แสดงว่าโครงสร้าง Graphene Nanopillars ที่สร้างจากท่อนาโนคาร์บอนที่มีขนาดต่างกัน ทั้งกรณีท่อตรงและท่อเอียงส่งผลให้ได้รอยต่อที่ไปกระทบต่อโครงสร้างเชิงอิเล็กทรอนิกส์ของระดับชั้นสถานะพลังงาน HOMO และ LUMO อย่างมีนัยยะสำคัญ นอกจากนี้การสร้างโครงสร้าง Graphene Nanopillars ในกรณีท่อตรงและท่อเอียงซึ่งเกิดจากบริเวณรอยต่อมีรูปแบบที่ต่างกัน ได้สร้างผลกระทบต่อสมบัติเชิงอิเล็กทรอนิกส์ซึ่งทำให้สามารถเปลี่ยนแปลงสมบัติเชิงอิเล็กทรอนิกส์ได้หากสามารถหาวิธีควบคุมรูปแบบการก่อรูปของรอยต่อได้เช่นกัน โดยค่าพลังงานสถานะพื้น (Ground state energy) ของโครงสร้าง Graphene Nanopillars แต่ละโครงสร้างจะมีค่าแตกต่างกันออกไป

สำหรับสถานะช่องว่างพลังงาน (Energy gap state) ของโครงสร้าง Graphene Nanopillars ที่มีขนาดของท่อนาโนคาร์บอนที่แตกต่างกันทั้งกรณีท่อตรง (Model A) และกรณีท่อเอียง (Model B) พบว่าโครงสร้าง Graphene Nanopillars ทุกโครงสร้างมีค่าช่องว่างพลังงานที่สามารถบอกได้ว่า Graphene Nanopillars ทุกโครงสร้างน่าจะเป็นประพจน์ตัวเป็น semi-metallic ซึ่งเป็นผลจากความถูกต้องแม่นยำของการคำนวณด้วยวิธี DFTB มีค่าความถูกต้องในผลทางโครงสร้างเชิงอิเล็กทรอนิกส์ที่ค่อนข้างต่ำ (Underestimate) โดยที่โครงสร้าง OE-Gnp_(7,0) กรณีท่อตรงมีสถานะช่องว่างพลังงานแคบที่สุดคือ ~0.104 eV ในขณะที่โครงสร้าง OE-Gnp_(5,5) กรณีท่อเอียงมีสถานะช่องว่างพลังงานแคบมากที่สุด ~0.148 eV ซึ่งกล่าวในที่นี้ได้ว่าโครงสร้าง OE-Gnp_(7,0) ดังกล่าวอาจจะประพจน์ตัวเป็น semi-metallic ได้มากที่สุด และค่าสถานะช่องว่างพลังงานของ Graphene Nanopillars แต่ละโครงสร้างจะมีค่าแตกต่างกันไปตามลักษณะเฉพาะของรอยต่อ

สรุปผลการวิจัย

โครงสร้าง Graphene Nanopillars ที่มีขนาดของท่อนาโนคาร์บอนที่แตกต่างกันพบว่าโครงสร้าง OE-Gnp_(n,n) เมื่อ $n = 4, 5, 6, 7$ และโครงสร้าง OE-Gnp_(n,0) เมื่อ $n = 6, 7, 8, 9$ กรณีท่อตรงมีจำนวนวงเจ็ดเหลี่ยม ณ บริเวณรอยต่อแปรผันตามค่าดัชนี Chiral n ของท่อนาโนคาร์บอนที่เปลี่ยนไป โดยโครงสร้าง OE-Gnp_(n,n) จะมีวงเจ็ดเหลี่ยมเรียงตัวสลับกับวงหกเหลี่ยมและโครงสร้าง OE-Gnp_(n,0) มีวงเจ็ดเหลี่ยมเรียงตัวชิดติดกัน ผลการศึกษาลักษณะพลังงานการก่อรูป (ΔH) ของ Graphene Nanopillars ที่มีขนาดท่อนาโนคาร์บอนแตกต่างกันด้วยวิธีกลศาสตร์ควอนตัมแบบ DFTB พบว่าค่าพลังงานการก่อรูปของ Graphene Nanopillars กรณีท่อตรงของโครงสร้าง OE-Gnp_(n,0) เมื่อ $n = 6$ และ 9 และ OE-Gnp_(n,n) เมื่อ $n = 4, 5, 6, 7$ เป็นแบบคายความร้อน ในขณะที่โครงสร้างกรณีท่อเอียงเกือบทุกโครงสร้างเป็นแบบดูดความร้อน ยกเว้นโครงสร้าง OE-Gnp_(4,4) เป็นแบบคายความร้อน นั้นแสดงว่าลักษณะของท่อนาโนคาร์บอนที่ต่อเข้ากับแผ่นกราฟีนในกรณีท่อตรงและท่อเอียงมีผลต่อค่าพลังงานการก่อรูป

จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557

ผลการศึกษาโครงสร้างเชิงอิเล็กทรอนิกส์ของ Graphene Nanopillars ที่มีขนาดท่อนาโนคาร์บอนที่ต่างกัน ทั้งกรณีท่อตรงและท่อเอียง พบว่าค่าระดับชั้นสถานะพลังงานอิเล็กทรอนิกส์ HOMO และ LUMO ขึ้นอยู่กับรูปแบบของ รอยต่อและขนาดท่อนาโนคาร์บอนที่นำมาต่อเป็นโครงสร้าง Graphene Nanopillars ผลการเปลี่ยนแปลงสถานะ ช่องว่างพลังงาน (Energy gap) ของทุกโครงสร้างมีพฤติกรรมเชิงอิเล็กทรอนิกส์เป็นแบบ semi-metallic โดยโครงสร้าง OE-Gnp_(7,0) มีสถานะของช่องว่างพลังงานแคบที่สุด (~ 0.104 eV) กรณีท่อตรง ในขณะที่โครงสร้าง OE-Gnp_(5,5) มีสถานะของช่องว่างพลังงานแคบมากที่สุด (~ 0.148 eV) กรณีท่อเอียง แต่อย่างไรก็ตาม ด้วยข้อจำกัดของความถูกต้องเชิงทฤษฎีของวิธีการคำนวณเชิงควอนตัมแบบ DFTB จึงทำให้การศึกษานี้กล่าวได้เพียงในเชิงคุณภาพซึ่งเป็นการศึกษาเบื้องต้นสำหรับโครงสร้าง Graphene Nanopillars

คำขอบคุณ

ผู้เขียนบทความขอขอบคุณสำหรับเงินสนับสนุนการทำโครงการวิจัยของนักศึกษาระดับปริญญาตรี หลักสูตร วิทยาศาสตร์-ฟิสิกส์ 5 ปี จากคณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยทักษิณ พ.ศ. 2556

เอกสารอ้างอิง

- [1] Geim, A. K. and Novoselov, K. S. (2007). The rise of graphene. **Nature Materials**. 6(3), 183-191.
- [2] Wilson, M. (2006). Electron in atomically thin carbon sheet behave like massless particles. **Physics Today**. 59(1), 21-23.
- [3] Guan, L., Suenaga, K. and Iijima, S. (2008). Smallest carbon nanotube assigned with atomic resolution accuracy. **Nano Letters**. 8(2), 459-462.
- [4] Wang, X., Li, Q., Xie, J., Jin, Z., Wang, J., Li, Y., Jiang, K. and Fan, S. (2009). Fabrication of ultralong and electrically uniform single-walled carbon nanotubes on clean substrates. **Nano Letters**. 9(9), 3137-3141.
- [5] Stoner, B.R., Akshay, S.R., Billyde, B., Charles, B.P. and Jeffrey, T.G. (2011). Graphenated carbon nanotubes for enhanced electrochemical double layer capacitor performance. **Appl. Phys. Lett.** 99(18), 183104.
- [6] _____. (2553). โครงสร้างของกราฟีนและท่อนาโนคาร์บอน. สืบค้นเมื่อวันที่ 10 สิงหาคม 2556, จาก <http://www.vcharkarn.com/varticle/41610>.
- [7] _____. (2555). ภาพจำลอง Graphene Nanopillar. สืบค้นเมื่อวันที่ 16 สิงหาคม 2556, จาก <http://news.rice.edu/wp-content/uploads/2012/11/1130-NANOTUBE-2.jpg>.
- [8] Zhu, Y., et. al. (2012). A seamless three-dimensional carbon nanotube graphene hybrid material. **Nature Communications**, 3(1225), 1-7.
- [9] Elstner, M., Porezag, D., Jungnickel, G., Elsner, J., Haugk, M., Frauenheim, T., Suhai, S., Seifert, G. (1998). Self-consistent-charge density-functional tight-binding method for simulations of complex materials properties, **Phys. Rev. B**. 58, 7260.