

วรากร จินดาทา : การเลื่อนของศักย์เคมีของไทเทเนียมคาร์ไบด์และไทเทเนียมคาร์บอนไนไตรด์ (แมกซีน) ที่เจือด้วยโพแทสเซียม (CHEMICAL POTENTIAL SHIFT OF K-DOPED TITANIUM CARBONITRIDES AND TITANIUM CARBIDES (MXENES)).  
อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.วรวุฒิ มีวาสนา, 94 หน้า.

สารประกอบโครงสร้างสองมิติโลหะทรานซิชันคาร์ไบด์ คาร์บอนไนไตรด์ และไนไตรด์ (แมกซีน) แสดงคุณสมบัติเฉพาะตัวได้แก่ มีค่าการนำไฟฟ้าสูง มีประสิทธิภาพในการให้ออกซิเจนแทรกเข้าไปในระหว่างชั้นของโครงสร้างได้ และมีปฏิกิริยารีดอกซ์แบบผันกลับได้ ส่งผลให้แมกซีนถูกนำไปประยุกต์ใช้ในหลากหลายแอปพลิเคชันได้แก่ การกักเก็บพลังงาน และการแปลงพลังงาน การป้องกันการรบกวนจากคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า และอิเล็กทรอนิกส์ จากการศึกษาการแทนที่อะตอมคาร์บอนด้วยอะตอมไนโตรเจนในโครงสร้างของสารประกอบไทเทเนียมคาร์ไบด์ ( $Ti_3C_2T_x$ ) เกิดเป็นสารประกอบไทเทเนียมคาร์บอนไนไตรด์ ( $Ti_3CNT_x$ ) ถูกพบว่าเป็นการนำไปสู่การเปลี่ยนแปลงของคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ที่แตกต่างกันระหว่าง  $Ti_3C_2T_x$  และ  $Ti_3CNT_x$  เช่น  $Ti_3CNT_x$  มีประจุลบที่บริเวณพื้นผิวสูงมากกว่า  $Ti_3C_2T_x$  เมื่ออยู่ในสารละลาย และ  $Ti_3CNT_x$  มีประสิทธิภาพในการป้องกันการรบกวนจากคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าสูงมากกว่า  $Ti_3C_2T_x$  วิทยานิพนธ์นี้นำเสนอผลการศึกษาทางทฤษฎีการใช้เทคนิคอัตรารังสีเอกซ์โพโตมิซชันสเปกโทรสโกปีเพื่อศึกษาโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ของสารประกอบ  $Ti_3CNT_x$  และ  $Ti_3C_2T_x$  ด้วยการเปรียบเทียบกัน ในฟังก์ชันของความหนาแน่นอิเล็กตรอน ผลการทดลองแสดงให้เห็นว่าโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ในระดับชั้นแกนกลาง 3p ของอะตอมไทเทเนียมของ  $Ti_3CNT_x$  แสดงการเลื่อนของศักย์เคมีที่ผิดปกติประมาณ 250 มิลลิอิเล็กตรอนโวลต์ ไปทางด้านพลังงานยึดเหนี่ยวลดลงเมื่อเพิ่มความหนาแน่นของอิเล็กตรอน ซึ่งโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ที่แสดงการเลื่อนของศักย์เคมีไปทางด้านพลังงานยึดเหนี่ยวลดลงเมื่อเพิ่มความหนาแน่นอิเล็กตรอนนี้ เป็นสัญลักษณ์ของคุณสมบัติการบีบอัดอิเล็กตรอนที่มีค่าติดลบ แต่อย่างไรก็ตาม ผลการทดลองโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ที่แสดงการเลื่อนของศักย์เคมีไปทางด้านพลังงานยึดเหนี่ยวลดลงในฟังก์ชันของการเพิ่มความหนาแน่นของอิเล็กตรอนไม่ถูกพบในผลการทดลองของ  $Ti_3C_2T_x$  ผลการทดลองโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์การเลื่อนของศักย์เคมีใน  $Ti_3CNT_x$  และ  $Ti_3C_2T_x$  ถูกอธิบายด้วยการคำนวณโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์การเลื่อนของศักย์เคมีทางทฤษฎีด้วยทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่น ผลการคำนวณด้วยทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่นแสดงให้เห็นว่าพันธะเคมีระหว่างอะตอมไทเทเนียมและอะตอมไนโตรเจนช่วยส่งเสริมให้อะตอมไทเทเนียมของ  $Ti_3CNT_x$  มีชั้นสถานะว่างสำหรับรองรับการเติมอิเล็กตรอนได้มากกว่าปกติที่บริเวณเหนือระดับชั้นพลังงานเฟอร์มิขึ้นไป ซึ่งเป็นการนำไปสู่การค้นพบคุณสมบัติการบีบอัดอิเล็กตรอนที่มีค่าติดลบใน  $Ti_3CNT_x$  ดังนั้นการศึกษาโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์การเลื่อนของศักย์เคมีในฟังก์ชันของ

การเพิ่มความหนาแน่นอิเล็กตรอนในสารประกอบ  $Ti_3CNT_x$  และ  $Ti_3C_2T_x$  ทางด้านการทดลองด้วยเทคนิคอัลตราไวโอเลตโฟโตอิมิซชันสเปกโทรสโกปี และการคำนวณทางทฤษฎีด้วยทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่น สามารถอธิบายได้ถึงความแตกต่างกันในคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของ  $Ti_3CNT_x$  และ  $Ti_3C_2T_x$  และยังนำเสนอวิธีการใหม่ที่จะประยุกต์ใช้คุณสมบัติการบีบอัดอิเล็กตรอนที่มีค่าดีคลบใน  $Ti_3CNT_x$  สำหรับแอปพลิเคชันทางการกักเก็บพลังงาน และการกักเก็บประจุ



สาขาวิชาฟิสิกส์  
ปีการศึกษา 2563

ลายมือชื่อนักศึกษา อรุณ จันทาม  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา [Signature]

WARAKORN JINDATA : CHEMICAL POTENTIAL SHIFT OF K-DOPED  
TITANIUM CARBONITRIDE AND TITANIUM CARBIDE (MXENES)

THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. WORAWAT MEEVASANA, Ph.D.

94 PP.

MXENE/TI<sub>3</sub>CNT<sub>x</sub>/TI<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub>/2D MATERIALS/ELECTRONIC STRUCTURE/  
PHOTOEMISSION SPECTROSCOPY/DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Two-dimensional transition metal carbides, carbonitrides, and nitrides called MXenes exhibit high metallic conductivity, ion intercalation capability and reversible redox activity, prompting their applications in energy storage and conversion, electromagnetic interference (EMI) shielding, and electronics, among many other fields. It has been shown that replacement of about 50% of carbon atoms in the most popular MXene family member, titanium carbide (Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub>), by nitrogen atoms, forming titanium carbonitride (Ti<sub>3</sub>CNT<sub>x</sub>), leads to drastically different properties. Such properties include very high negative charge in solution and extreme EMI shielding effectiveness, exceeding all known materials, even metals at comparable thicknesses. This thesis presents ultraviolet photoemission spectroscopy (UPS) experiments on the electronic structures of Ti<sub>3</sub>CNT<sub>x</sub> and Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXenes. The electronic structures of two MXenes are systematically investigated and compared as a function of electron density. We observe that, in contrast to Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub>, the Ti 3p core-level of Ti<sub>3</sub>CNT<sub>x</sub> exhibits a counterintuitive shift to a lower binding energy of up to approximately 250 meV upon increasing the electron density, which is a spectroscopic signature of negative electronic compressibility (NEC). These experimentally measured chemical potential shifts are

well captured by the density functional theory (DFT) calculation. The DFT results also further suggest that the hybridization of titanium-nitrogen bonding in  $\text{Ti}_3\text{CNT}_x$  helps promoting the available states of Ti atoms for receiving more electron above the Fermi level and leads to the observed NEC. Our UPS experiments and DFT calculations explain the differences in electronic properties between  $\text{Ti}_3\text{CNT}_x$  and  $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$  MXenes and suggest a new strategy to apply the NEC effect of  $\text{Ti}_3\text{CNT}_x$  in energy and charge storage applications.



School of Physics

Academic Year 2020

Student's Signature Warakorn Jindata

Advisor's Signature 