บทคัดย่อภาษาไทย

พื้นฐานสำคัญในการศึกษาการขยายตัวเชิงอุณหภาพ เกี่ยวข้องกับการทำความเข้าใจพฤติกรรมการผิดรูปของวัสดุเนื่องจากการสั่นของโครงผลึก งานวิจัยนี้ได้ทำการศึกษาการเปลี่ยนโครงสร้างของชั้นโบรอนไนไตรด์ แกรฟีน และซิลิซีน ภายใต้เงื่อนไขความเค้นต่าง ๆ (ในช่วง -0.2 ถึง 0.2) โดยทฤษฎีฟังก์ชันนัลของความหนาแน่นแบบเฟิร์สพรินซิเพิล ข้อมูลของการผ่อนคลายโครงสร้างภายใต้ความเค้นในแนวต่าง ๆ สามารถหาได้จากพื้นผิวของพลังงานความเค้น ผลลัพธ์ที่ได้ทำให้ทราบคุณสมบัติเชิงกลของแผ่นเยื่อ เช่น อัตราส่วนปัวซง ความทนแตกหัก และ ความยืดหยุ่นเชิงระนาบ ข้อมูลที่ได้สามารถเปรียบเทียบได้กับการทดสอบแบบโดมความดัน พฤติกรรมการผิดรูปของแผ่นเยื่ออธิบายได้โดยผลเฉลยของเฮงกี ผลเฉลยนี้ให้รูปแบบของแผ่นเยื่อภายใต้ความดันและให้ความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความสูงของโดม ซึ่งสามารถประมาณค่าความเค้นของแผ่นเยื่อได้โดยตรง รวมทั้งพลังงานการยึดติดระหว่างแผ่นเยื่อกับซับสเตรตในการวัดจริง

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

บทคัดย่อภาษาอังกฤษ

The fundamental ground of thermal expansion is related to the deformation behavior of materials under lattice vibration. In this work, the structural deformation of single-layer boron nitride, 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 stress 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 and adhesion energy of the membrane with the substrate for real measurement.

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี