ยุวดี สุวรรณ์ : การศึกษาเชิงทฤษฎีของการแพร่แก๊สผ่านแกรฟีนพรุนภายใต้ความดัน (THEORETICAL STUDY OF GAS DIFFUSION THROUGH POROUS GRAPHENE UNDER PRESSURE) อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.สิริโชค จึงถาวรรณ, 103 หน้า

วิทยานิพนธ์นี้ สมบัติการแพร่ของแก๊สผ่านแผ่นเยื่อแกรฟีนพรุนที่วางบนผิวซิลิกอนไดออกไซด์ ได้รับการตรวจสอบโดยใช้การคำนวณแบบเฟิสต์พรินซิเพิลบนพื้นฐานของทฤษฎีฟังก์ชันนอลความหนาแน่น โมเลกุลแก๊สที่ใช้ในการศึกษาครั้งนี้ ได้แก่ โมเลกุลแก๊สไฮโดรเจน ออกซิเจน และคาร์บอนไดออกไซด์ สำหรับอิทธิพลของแรงแวนเดอวาลล์ที่เกิดขึ้นระหว่างแผ่นเยื่อและผิวซิลิกอนไดออกไซด์ ได้รับการอธิบายโดยใช้ทฤษฎีสนามของแรงโดย Grimme วัตถุประสงค์ของการศึกษานี้ ได้แก่ ศึกษาการผิดรูปของแผ่นเยื่อแกรฟีนพรุนที่วางบนผิวซิลิกอนไดออกไซด์ภายใต้ความแตกต่างของความดัน ศึกษาอัตราการแพร่ของโมเลกุลแก๊สผ่านแผ่นเยื่อแกรฟีนพรุนที่ผิดรูปภายใต้ความแตกต่างของความดัน และศึกษาสมบัติการคัดกรองโมเลกุลแก๊สผ่านแผ่นเยื่อแกรฟีนพรุนที่วางบนผิวซิลิกอนไดออกไซด์ภายใต้ความแตกต่างของความดัน สำหรับแผ่นเยื่อที่ถูกยึดตรึงไว้กับผิวซิลิกอนไดออกไซด์มีพื้นที่เป็นวงกลมอยู่ภายใต้ความแตกต่างของความดัน การผิดรูปของแผ่นเยื่อที่แต่ละระดับความแตกต่างของความดันที่ให้ผ่านแผ่นเยื่อนั้น สามารถอธิบายได้โดยใช้วิธีการแก้ปัญหาของ Hencky ซึ่งแต่ละระดับความแตกต่างของความดันที่ให้ มีผลทำให้แผ่นเยื่อโป่งนูน การผิดรูปของแผ่นเยื่อส่งผลให้พื้นที่ผิวของแผ่นเยื่อเกิดการขยาย เป็นสาเหตุให้เกิดความเครียดขึ้นบนผิวของแผ่นเยื่อ ดังนั้นความแตกต่างของความดันที่ให้จึงมีความสัมพันธ์ที่อยู่ในรูปของความเครียดบนแผ่นเยื่อ สำหรับอัตราการแพร่ของโมเลกุลแก๊สผ่านแผ่นเยื่อแกรฟีนพรุนที่วางบนผิวซิลิกอนไดออกไซด์นั้น มีค่าขึ้นอยู่กับค่าอุปสรรคการแพร่และถูกคำนวณโดยใช้สมการ Arrhenius ค่าอุปสรรคการแพร่สำหรับแต่ละโมเลกุลแก๊สถูกคำนวณที่ความเครียดที่ต่างกันบนแผ่นเยื่อ โดยพบว่าค่าอุปสรรคการแพร่ที่คำนวณได้สำหรับโมเลกุลแก๊สไฮโดรเจน ออกซิเจน และ คาร์บอนไดออกไซด์ที่ระดับความเครียดของแผ่นเยื่อเป็นศูนย์ มีค่าเป็น 0.41 0.95 และ 1.61 อิเล็กตรอนโวลต์ตามลำดับ ความแตกต่างของความดันที่ให้แก่แผ่นเยื่อ มีประสิทธิภาพทำให้เกิดความเครียดบนแผ่นเยื่อเพิ่มขึ้น และทำให้แผ่นเยื่อเกิดการผิดรูป ในช่วงความดัน 0-3 เมกะปาสคาล พบว่าอัตราการแพร่ของโมเลกุลแก๊สไฮโดรเจน ออกซิเจน และคาร์บอนไดออกไซด์สามารถเพิ่มขึ้นได้ถึงเทอมของสิบยกกำลัง 4 8 และ 12 ตามลำดับ สำหรับสมบัติการคัดกรองโมเลกุลแก๊สไฮโดรเจน ออกซิเจน และ คาร์บอนไดออกไซด์นั้น ถูกกำหนดขึ้นโดยเปรียบเทียบจากอัตราการแพร่ของโมเลกุลแก๊สที่ความแตกต่างของความดัน 3 เมกะปาสคาลกับ

อัตราการแพร่โมเลกุลแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ที่ความแตกต่างของความดันศูนย์เมกะปาสคาล ที่รัศมีของแผ่นเยื่อ 5 ไมครอน พบว่าที่ความแตกต่างของความดัน 3 เมกกะปาสคาล แผ่นเยื่อแกรฟีนพรุนแสดงสมบัติการคัดกรองแก๊สไฮโดรเจน และออกซิเจนสูงกว่าแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ถึง 10^{12} และ 10^{7} ตามลำดับ แสดงถึงสมบัติการคัดกรองแก๊สที่สูงมาก ผลการคำนวณให้ขอบข่ายงานทางทฤษฎีเบื้องต้นในการศึกษาการแพร่ของแก๊สผ่านแผ่นเยื่อภายใต้ความแตกต่างของความดัน และชี้แนะว่าสมบัติการแยกแก๊สของแผ่นเยื่อแกรฟีนพรุนสามารถควบคุมได้โดยการให้ความแตกต่างของความดันผ่านแผ่นเยื่อ

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

สาขาวิชาฟิสิกส์ ลายมือชื่อนักศึกษา_____

ปีการศึกษา 2558 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา_____

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม_____

YUWADEE SUWAN : THEORETICAL STUDY OF GAS DIFFUSION THROUGH POROUS GRAPHENE UNDER PRESSURE. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. SIRICHOK JUNGTHAWAN, Ph.D. 103 PP.

POROUS GRAPHENE/SELECTIVITY/GAS SEPARATION/PRESSURE/ HENCKY'S SOLUTION

In this thesis, the gas diffusion properties of porous graphene (PG) membrane on SiO_2 substrate were investigated by using first-principles calculations based on the density functional theory (DFT). The gas molecules used in this study were H_2, O_2, and CO_2. The influence of the van der Waals interactions between membrane and substrate was described by using Grimme's force field. The purposes of this study include; structural distortion of PG membrane on SiO_2 substrate under pressure difference, diffusion rate of gas molecules through deformed PG membranes under pressure difference, and selectivity of PG membrane as a function of pressure difference. For the clamped circular membrane subjected to a pressure difference across the membrane, the deformation of the membrane can be described by using Hencky's solution. At a given pressure, the pressure difference across the membrane causes it to bulging. The deformation expands surface area causing the strain on the membrane. Thus, the strain is related to the applied pressure. The diffusion rate of gas molecules passing through membrane on SiO_2 is a function of the diffusion barrier and can be estimated by using Arrhenius equation. The diffusion barriers for each molecule were calculated at different strain configurations. The diffusion barriers for H_2, O_2, and CO_2 at zero strain are 0.41, 0.95 and 1.61 eV, respectively. The pressure

can effectively increase strain and deform the membrane. In the pressure range of 0-3 MPa, the diffusion rate of H_2, O_2 and CO_2 gas molecule can be increased by up to 4, 8, and 12 orders of magnitude, respectively. The selectivity of H_2, O_2, and CO_2 gas molecules is defined as the diffusion rates of gas molecules at Δp = 3 MPa relative to CO_2 diffusion rate at Δp = 0 MPa with the membrane radius of 5 μm. The selectivity of H_2 and O_2 over CO_2 at 3 MPa are 10^{12} and 10^7, respectively, indicating an extremely high selectivity. Our results provide the first theoretical framework to study the diffusion of gas molecules passing through membrane subjected to a pressure difference. The results suggest that the gas separation properties of PG membrane are controllable by applying a pressure difference across the membrane.

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

School of Physics

Academic Year 2015

Student's Signature_____

Advisor's Signature_____

Co-advisor's Signature_____