การพัฒนาสมบัติเชิงไฟฟ้าและสมบัติเชิงกลของวัสดุต้นแบบเซลล์แสงอาทิตย์อุบัติใหม่และวัสดุกักเก็บไฮโดรเจนโดยเทคนิคสภาวะรุนแรง

หัวหน้าโครงการ รองศาสตราจารย์ ดร.ธิติ บวรรัตนารักษ์[1]
เบอร์โทรศัพท์: 0-2218-5113
โทรสาร: 0-2253-1150
E-mail: thiti.b@chula.ac.th

คณะนักวิจัย รองศาสตราจารย์ ดร.อุดมศิลป์ ปิ่นสุข[1]
รองศาสตราจารย์ ดร. นคร ไพศาลกิตติสกุล[1]
ดร.อรรณพ เอกราราวงศ์[1]
ดร.คมศิลป์ โคตมูล[2]

[1]ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
[2]วิทยาลัยนวัตกรรมการผลิตขั้นสูง สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

งบประมาณ

2,721,000 บาทถ้วน

ระยะเวลาดำเนินการวิจัย

3 ปี นับตั้งแต่ 1 มี.ค. 2560 – 29 ก.พ. 2563

เป้าหมายโครงการ

ศึกษาเปรียบเทียบการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างผลึกของวัสดุพลังงานภายใต้เงื่อนไขสภาวะรุนแรงและเสนอแนะแนวทางในการประยุกต์ใช้วัสดุพลังงานเหล่านั้น

ประสิทธิผล

นิสิตปริญญาเอก (สำเร็จแล้ว 3 คน)	6 units
นักวิจัยหลังปริญญาเอก	2
บทความตีพิมพ์ในวารสารนานาชาติ	19 units
สิทธิบัตร	1

ผลกระทบ

ได้รับการตีพิมพ์ในวารสารที่มี impact factor สูง และได้รับการอ้างอิงอย่างรวดเร็ว รวมทั้งมีผลงานวิจัยที่เป็นสิทธิบัตรการประดิษฐ์ที่สามารถนำไปประยุกต์ใช้ได้

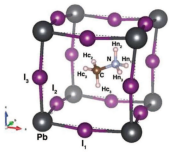
ความยั่งยืน

เป็นการพัฒนาวัสดุพลังงานเพื่อศึกษาแนวโน้ม และสมบัติที่ต้องการในการประยุกต์ใช้งานด้านการแปลง และการกักเก็บพลังงาน ซึ่งสร้างความยั่งยืนทางพลังงานให้กับประเทศ

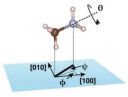
ความสอดคล้อง

ได้ดำเนินการตามแผนกิจกรรมที่วางไว้ และมีการเพิ่มเติมการคำนวณและการพัฒนาอุปกรณ์ตามทิศทางของงานวิจัยที่คาดว่าจะส่งผลให้การวิจัยมีผลกระทบที่สูงขึ้น

ผลการดำเนินงาน

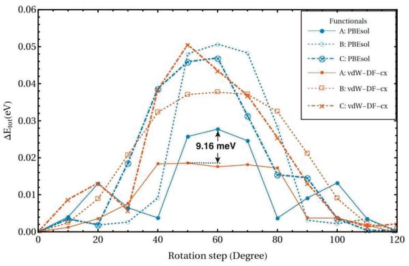


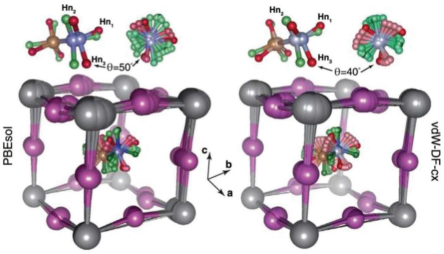
$CH_3NH_3PbI_3$ (MAPI)

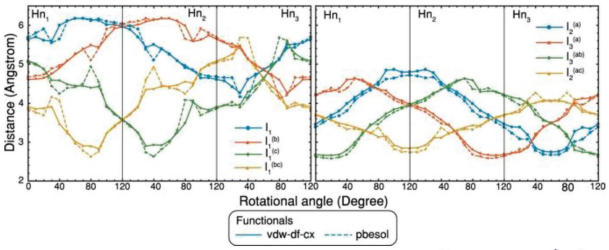


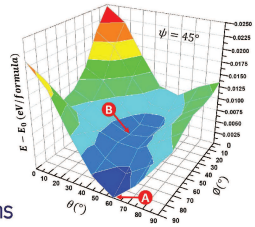
[1] ผลกระทบของโมเลกุล MA ผ่านแรงแวนเดอร์วาลส์ที่มีต่อโครงสร้าง MAPI โดยวิธีการคำนวณแบบ DFT

Energy barriers ที่เกิดจากการหมุนโมเลกุล MA ถูกนำมาศึกษาถึงความสามารถเชิงพลังงานในการพลิกตัวผ่านฟังก์ชันนัลที่เป็นที่รู้จักอย่าง PBEsol และรวมถึง vdW-DF-cx



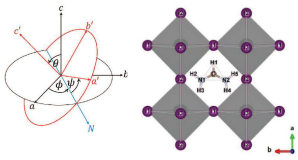




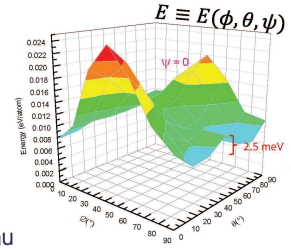


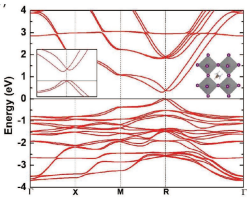
[2] การวางตัวของโมเลกุล FA ที่ทำให้เกิดพลังงานสัมพัทธ์ต่ำสุดในภูมิภาพเชิงพลังงาน ซึ่งได้รับการยืนยันโดยการพ่อนคลายทางโครงสร้าง การเรียงตัวนี้บ่งบอกถึงสภาวะปกติของทิศทางการวางตัวของ FA ที่อุณหภูมิต่ำของระบบนี้

[2] การประยุกต์นำมุมของออยเลอร์มาใช้ในการหมุนโมเลกุล FA เพื่อคำนวณหาภูมิภาพเชิงพลังงานของ FAPI โดยมีการคำนึงถึงผลที่ของสปินออร์บิกด้วย



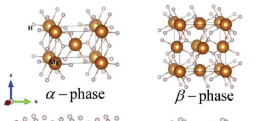
$CH(NH_2)_2PbI_3$ (FAPI)

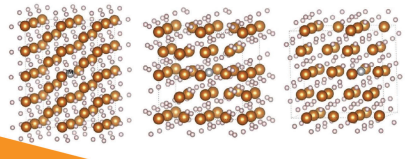


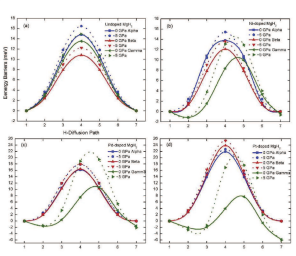


[2] โครงสร้างแถบพลังงานของการเรียงตัวที่ให้พลังงานสัมพัทธ์ต่ำสุดได้แสดงถึงปรากฏการณ์ที่แยกออกของกึ่งพลังงานในปริภูมิของโมเมนตัมที่เรียกว่า Rashba effect

[3]พัฒนาการของวัสดุกักเก็บไฮโดรเจนเพื่อใช้เป็นพลังงานทางเลือกได้ถูกเสนอขึ้นด้วยการเจือโลหะทรานซิชันในโครงสร้าง MgH_2 โดยงานวิจัยนี้ได้ศึกษาโดยละเอียดถึงสมบัติการเปลี่ยนเฟสภายใต้ความดันของทั้งสามโครงสร้างผลึก







[3] เฟสแกมม่าเสถียรกว่าที่ความดันปกติ เส้นทางเชิงพลังงานของ H ใน MgH_2 ที่ถูกเจือด้วยโลหะทรานซิชันต่างๆได้ถูกอธิบายผ่าน Energy barriers

[1] Klinkla, Rakchat, et al. "The crucial role of density functional nonlocality and on-axis CH 3 NH 3 rotation induced I 2 formation in hybrid organic–inorganic CH 3 NH 3 PbI 3 cubic perovskite." *Scientific reports* 8.1 (2018): 1-9.
[2] Sukmas, Wiwittawin, et al. "Organic Molecule Orientations and Rashba-Dresselhaus Effect in α-Formamidinium Lead Iodide." *The Journal of Physical Chemistry C* 123.27 (2019): 16508-16515.
[3] Pluengphon, Prayoonsak, et al. "High-pressure phases induce H-vacancy diffusion kinetics in TM-doped MgH2: Ab initio study for hydrogen storage improvement." *International Journal of Hydrogen Energy* 44.39 (2019): 21948-21954.

โปสเตอร์สรุปโครงการวิจัย 2560
การประชุมศูนย์ความเป็นเลิศด้านฟิสิกส์ ประจำปี 2563
ณ โรงแรม เดอะ สุโกศล กรุงเทพมหานคร วันที่ 28 สิงหาคม พ.ศ. 2563

ThEP
http://thep-center.org/