



รายงานการวิจัย

การอธิบายสมบัติของวัสดุที่มีการขยายตัวเชิงอุณหภูมิเป็นลบเชิงอะตอม

ATOMISTIC DESCRIPTION OF PROPERTIES OF NEGATIVE  
THERMAL EXPANSION (NTE) MATERIALS



ได้รับทุนอุดหนุนการวิจัยจาก  
มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

ผลงานวิจัยเป็นความรับผิดชอบของหัวหน้าโครงการวิจัยแต่เพียงผู้เดียว



รายงานการวิจัย

การอธิบายสมบัติของวัสดุที่มีการขยายตัวเชิงอุณหภาพเป็นลบเชิงอะตอม  
ATOMISTIC DESCRIPTION OF PROPERTIES OF NEGATIVE  
THERMAL EXPANSION (NTE) MATERIALS

คณะผู้วิจัย

หัวหน้าโครงการ

รองศาสตราจารย์ สิริโชค จิ่งถาวรรม

สาขาวิชาฟิสิกส์

สำนักวิชาวิทยาศาสตร์

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

ผู้ร่วมวิจัย

นางสาวยุวดี สุวรรณ

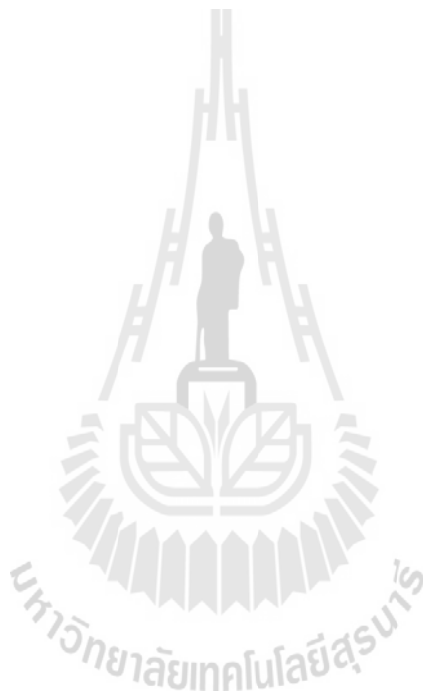
ได้รับทุนอุดหนุนการวิจัยจากมหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี ปีงบประมาณ พ.ศ. 2555

ผลงานวิจัยเป็นความรับผิดชอบของหัวหน้าโครงการวิจัยแต่เพียงผู้เดียว

สิงหาคม 2558

## กิตติกรรมประกาศ

คณะผู้วิจัยขอขอบคุณ ศาสตราจารย์ ดร.ชูกิจ ลิมปิจำนงค์ ที่ให้คำปรึกษา และ  
แนะนำข้อมูลที่เป็นประโยชน์ต่อการวิจัยนี้ด้วยดีเสมอมา การวิจัยครั้งนี้ได้รับทุนอุดหนุนการวิจัยจาก  
มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี ปีงบประมาณ 2555



## บทคัดย่อภาษาไทย

พื้นฐานสำคัญในการศึกษาการขยายตัวเชิงอุณหภูมิ เกี่ยวข้องกับการทำความเข้าใจ พฤติกรรมการผิดรูปของวัสดุเนื่องจากการสั่นของโครงผลึก งานวิจัยนี้ได้ทำการศึกษาการเปลี่ยน โครงสร้างของชั้นโบรอนไนไตรด์ แกรไฟีน และซิลิซีน ภายใต้เงื่อนไขความเค้นต่าง ๆ (ในช่วง -0.2 ถึง 0.2) โดยทฤษฎีฟังก์ชันนัลของความหนาแน่นแบบเฟอร์สพรีนซิเพิล ข้อมูลของการผ่อนคลายโครงสร้าง ภายใต้ความเค้นในแนวต่าง ๆ สามารถหาได้จากพื้นผิวของพลังงานความเค้น ผลลัพธ์ที่ได้ทำให้ทราบ คุณสมบัติเชิงกลของแผ่นเยื่อ เช่น อัตราส่วนปัวซอง ความทนแตกหัก และ ความยืดหยุ่นเชิงระนาบ ข้อมูลที่ได้สามารถเปรียบเทียบได้กับการทดสอบแบบโดมความดัน พฤติกรรมการผิดรูปของแผ่นเยื่อ อธิบายได้โดยผลเฉลยของเฮงกี ผลเฉลยนี้ให้รูปแบบของแผ่นเยื่อภายใต้ความดันและให้ความสัมพันธ์ ระหว่างความดันและความสูงของโดม ซึ่งสามารถประมาณค่าความเค้นของแผ่นเยื่อได้โดยตรง รวมทั้ง พลังงานการยืดหดระหว่างแผ่นเยื่อกับซัสเตรตในการวัดจริง



## 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.

## สารบัญ

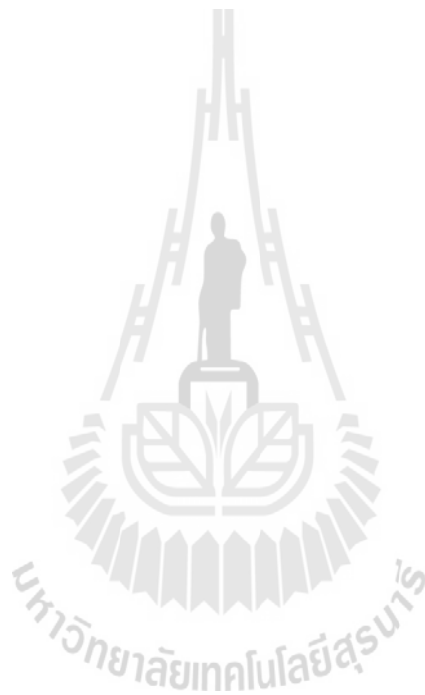
	หน้า
กิตติกรรมประกาศ .....	ก
บทคัดย่อภาษาไทย .....	ข
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ .....	ค
สารบัญ.....	ง
สารบัญตาราง.....	ฉ
สารบัญภาพ .....	ช
คำอธิบายสัญลักษณ์.....	ฌ
บทที่ 1 บทนำ.....	1
ความสำคัญและที่มาของปัญหาการวิจัย .....	1
วัตถุประสงค์ของการวิจัย .....	2
ขอบเขตของการวิจัย .....	2
วิธีดำเนินการวิจัย .....	2
ประโยชน์ที่ได้รับจากการวิจัย.....	4
บทที่ 2 วิธีดำเนินการวิจัย.....	5
ทฤษฎีและวิธีการคำนวณคุณสมบัติความยืดหยุ่นของแผ่นเยื่อ .....	5
ทฤษฎีและวิธีการคำนวณรูปแบบการผิดรูปของแผ่นเยื่อภายใต้ความดัน .....	7
การคำนวณความเค้นที่เกิดขึ้นที่แต่ละตำแหน่งของแผ่นเยื่อภายใต้ความดัน .....	8
บทที่ 3 ผลการคำนวณ .....	11
ผลการคำนวณคุณสมบัติความยืดหยุ่นของ ชั้นโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรฟีน (C) และซิลิซีน (Si)	11
.....	11
ลักษณะการผิดรูปของ ชั้นโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรฟีน (C) และซิลิซีน (Si) ภายใต้ความดัน ....	13
ความเครียดที่เกิดขึ้นใน ชั้นโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรฟีน (C) และซิลิซีน (Si) ภายใต้ความดัน ..	15
ความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นและความดัน ของแผ่นเยื่อโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรฟีน (C) และซิลิซีน (Si).....	17
.....	17
บทที่ 4 บทสรุป .....	21
สรุปผลการวิจัย .....	21
.....	21
บรรณานุกรม.....	23
ภาคผนวก ก.....	27

ภาคผนวก ข.....	31
ประวัติผู้วิจัย.....	33
หัวหน้าโครงการ .....	33
ผู้ร่วมวิจัย.....	34



## สารบัญตาราง

	หน้า
ตารางที่ 3.1 .....	11
แสดงค่าคงตัวของโครงผลึก อัตราส่วนปัวซอง และความยืดหยุ่นเชิงระนาบสำหรับแกรไฟิน โบรอนไนไตรด์ และ ซิลิซีน	

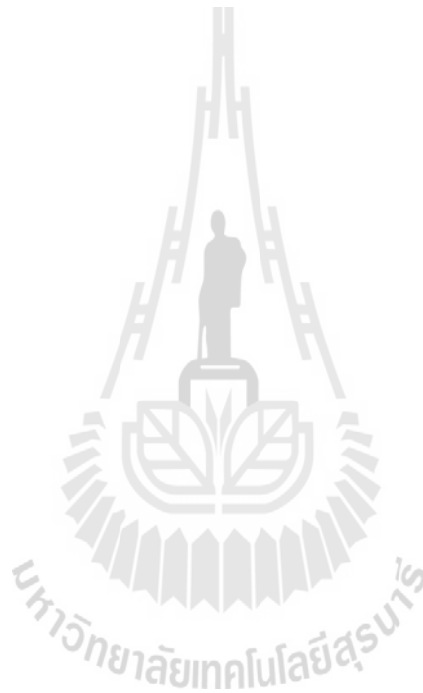




## สารบัญภาพ

	หน้า
รูปที่ 1.1.....	3
แสดงการผิดรูปของโครงสร้างแผ่นเยื่อสองมิติภายใต้ความดันที่แตกต่างกันระหว่างด้าน	
รูปที่ 2.1.....	5
แสดงโครงสร้างผลึกและเซลล์หน่วยของระบบผลึกแบบหกเหลี่ยม	
รูปที่ 2.2.....	6
ตัวอย่างกราฟพื้นผิวของพลังงานความเค้น โดยค่าของพลังงานมีหน่วยเป็น eV	
รูปที่ 3.1.....	12
พื้นผิวของพลังงานความเค้นของ (a) แกรไฟีน (b) โบรอนไนไตรด์ และ (c) ซิลิซีน	
รูปที่ 3.2.....	13
รูปแบบโครงสร้างของ (a) ซิลิซีนปกติ (b) โครงสร้างที่ให้ความเค้นดึงตามแกนเดียว $\epsilon_x$ หรือ $\epsilon_y$ มีค่าประมาณ 0.15 (c) โครงสร้างที่ให้ความเค้นอัดในช่วงที่ $\epsilon_x$ และ $\epsilon_y$ มีค่าน้อยกว่า -0.15	
รูปที่ 3.3.....	14
แสดงลักษณะการผิดรูปของแผ่นเยื่อแกรไฟีน $\nu = 0.19$ ที่ค่า $q$ ต่าง ๆ และรูปแบบของแผ่นเยื่อที่ค่า $q = 0.10$	
รูปที่ 3.4.....	15
แสดงลักษณะการผิดรูปของแผ่นเยื่อที่มีค่าอัตราส่วนปัวซอง $\nu = 0.19$ 0.22 และ 0.30 ที่ค่า $q = 0.01$ และ 0.10	
รูปที่ 3.5.....	16
แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $N/Eh$ และค่า $\rho$ ของแผ่นเยื่อแกรไฟีน $\nu = 0.19$ ที่ค่า $q$ ต่าง ๆ	
รูปที่ 3.6.....	16
แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $N/Eh$ และค่า $\rho$ ของแผ่นเยื่อที่มีค่าอัตราส่วนปัวซอง $\nu = 0.19$ 0.22 และ 0.30 ที่ค่า $q = 0.01$ และ 0.10	
รูปที่ 3.7.....	17
แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นและความดันที่กระทำกับแผ่นเยื่อโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรไฟีน (C) และซิลิซีน (Si) ที่มีช่องเปิดเป็นวงกลมรัศมีขนาด $1 \mu\text{m}$	

รูปที่ 3.8.....	18
แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นและความดันที่กระทำกับแผ่นเยื่อโบรอนไนไตรด์ (BN)	
แกรไฟิน (C) และซิลิซีน (Si) ที่มีช่องเปิดเป็นวงกลมรัศมีขนาด 2 $\mu\text{m}$	
รูปที่ 3.9.....	18
แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นและความดันที่กระทำกับแผ่นเยื่อโบรอนไนไตรด์ (BN)	
แกรไฟิน (C) และซิลิซีน (Si) ที่มีช่องเปิดเป็นวงกลมรัศมีขนาด 4 $\mu\text{m}$	
รูปที่ 3.10.....	19
แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นและความดันที่กระทำกับแผ่นเยื่อโบรอนไนไตรด์ (BN)	
แกรไฟิน (C) และซิลิซีน (Si) ที่มีช่องเปิดเป็นวงกลมรัศมีขนาด 10 $\mu\text{m}$	



## คำอธิบายสัญลักษณ์

BN	โบรอนไนไตรด์
C	แกรไฟิน
Si	ซิลิซีน
NTE	negative thermal expansion
$\varepsilon$	ความเค้นตามแกนเดียว
$E_S$	พลังงานความเค้น
$\nu$	อัตราส่วนปัวซอง
$Eh$	ความยืดหยุ่นเชิงระนาบ
$p$	ความดัน
$a$	รัศมีของแผ่นเยื่อ
$E$	มอดุลัสของสภาพยืดหยุ่น
$h$	ความหนาของแผ่นเยื่อ
$\rho = r/a$	พิกัดในแนวรัศมีที่ไม่มีหน่วย
$W = z/a$	ความสูงของแผ่นเยื่อในแนวตั้งที่ไม่มีหน่วย
$q = pa/Eh$	ภาระต่อแผ่นเยื่อ
$N(\rho) \equiv N$	ความเครียดที่ไม่มีหน่วย

# บทที่ 1

## บทนำ

### ความสำคัญและที่มาของปัญหาการวิจัย

วัสดุโดยทั่วไปจะขยายตัวเมื่อทำให้อุณหภูมิของวัสดุสูงขึ้น ซึ่งพบได้ทั่วไปและในโลหะต่าง ๆ การขยายตัวของวัสดุมีผลอย่างมากในเชิงวิศวกรรมโครงสร้าง ตลอดจนโครงสร้างวัสดุระดับนาโน การอธิบายความสามารถในการขยายตัวของวัสดุบอกด้วยค่าสัมประสิทธิ์การขยายตัวเชิงอุณหภูมิ (thermal expansion coefficient) ซึ่งวัสดุแต่ละชนิดจะมีค่าไม่เท่ากัน การประยุกต์ที่สำคัญอย่างหนึ่งคืออุปกรณ์ควบคุมอุณหภูมิเชิงกล (thermostat) ที่ใช้ทั่วไปในเตารีดไฟฟ้า และเครื่องควบคุมอุณหภูมิเครื่องปรับอากาศ ซึ่งประกอบด้วยโลหะสองชนิดที่ขยายตัวไม่เท่ากันทำให้เกิดการบิดตัวของชิ้นงานเพื่อตัดต่อวงจรไฟฟ้าตามอุณหภูมิที่กำหนด

การขยายตัวของวัสดุเนื่องจากความร้อน สามารถอธิบายได้จากการสั่นของโครงผลึกซึ่งในชั้นวัสดุประกอบขึ้นจากอะตอมที่เป็นหน่วยย่อยในเนื้อวัสดุ มีการจัดเรียงตัวเป็นโครงสร้างและมีพันธะเคมียึดเหนี่ยวกันไว้ (คล้ายกับสปริง) โดยอาจจินตนาการได้ว่าวัสดุประกอบขึ้นจากอะตอมที่เสมือนเป็นทรงกลมหลายอันที่ยึดติดกันด้วยสปริง เมื่อวัสดุได้รับพลังงานจากความร้อน ความแรงในการสั่นของแต่ละอะตอมขึ้นกับอุณหภูมิของวัสดุ เมื่ออะตอมสั่นจะทำให้อะตอมแยกตัวออก ยังผลให้ขนาดของวัสดุขยายตัวเมื่อวัสดุร้อนขึ้น แต่ในสารบางชนิด เช่น เซอร์โคเนียม ทังสเตต (zirconium tungstate,  $ZrW_2O_8$ ) กลับมีการหดตัวเมื่อให้ความร้อน [1] นักวิทยาศาสตร์ได้เริ่มศึกษาคูณสมบัติดังกล่าวเพื่ออธิบายปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้น

จนเมื่อปี ค.ศ. 2010 นักวิทยาศาสตร์ [2, 3] พบว่าสารสแกนเดียม ไตรฟลูออไรด์ (Scandium trifluoride,  $ScF_3$ ) เป็นหนึ่งในสารที่มีการขยายตัวเชิงอุณหภูมิต่ำ (negative thermal expansion, NTE) และมีการหดตัวอย่างมากเมื่อให้ความร้อน [4, 5] การศึกษาเชิงทฤษฎีเสนอว่า กลไกการหดตัวของสารน่าจะเกิดจากลักษณะพิเศษในการสั่นของอะตอมของสาร  $ScF_3$  ที่มีโครงสร้างแบบ  $DO_9$  โดยมีโครงผลึกที่มีลักษณะเป็นรูปลูกบาศก์ ประกอบด้วยอะตอม Sc อยู่ที่มุมทั้ง 8 ของกล่องและอะตอม F อยู่ที่เส้นตรงที่เชื่อมระหว่างขอบของกล่อง เมื่อให้ความร้อนกับวัสดุ อะตอม F จะสั่นในแนวตั้งฉากกับพันธะที่ยึดกับ Sc ทำให้เกิดการดึงให้อะตอมของ Sc แต่ละตัวเข้าใกล้กันมากขึ้น และยังผลให้ขนาดของวัสดุลดลง [4, 6, 7] แนวคิดดังกล่าวใช้อธิบายผลการทดลองได้ดี [8] แต่ทั้งนี้ยังไม่มีการศึกษาในเชิงลึกว่าเหตุใดอะตอม F จึงมีการสั่นในลักษณะพิเศษ เงื่อนไขของการสั่นเป็นอย่างไรขึ้นกับอัตราส่วนมวลของธาตุที่ประกอบเป็นวัสดุหรือไม่ และลักษณะการสั่นขึ้นกับปัจจัยใดบ้าง

ทั้งนี้ มีสารอื่นที่มีโครงสร้างเช่นเดียวกับ  $ScF_3$  ได้แก่  $ReO_3$   $Cu_3N$   $O_3W$   $O_3U$  แต่ยังไม่มีการศึกษาถึงสมบัติดังกล่าวอย่างลึกซึ้ง ซึ่งสารในโครงสร้างแบบเดียวกันอาจจะไม่มีคุณสมบัติการ

ขยายตัวเชิงคุณภาพเป็นลบก็ได้ ความเข้าใจถึงกระบวนการพื้นฐานของปรากฏการณ์ดังกล่าวจะช่วยให้เกิดความรู้ ความเข้าใจ ปัจจัยและผลกระทบ ซึ่งเป็นรากฐานสำคัญในการออกแบบวัสดุและสารผสมที่สามารถควบคุมขนาดของวัสดุที่อุณหภูมิต่าง ๆ โดยพื้นฐานสำคัญในการศึกษาลักษณะการสั่นของโครงสร้างผลึก คือการเข้าใจถึงคุณสมบัติเชิงกลของวัสดุเมื่อมีปัจจัยภายนอกมากระทำต่อระบบ เช่น ความเค้น ความเครียด ความดัน ซึ่งมีผลต่อการผิดรูปของโครงสร้างผลึก ความสัมพันธ์ของคุณสมบัติเชิงกลของวัสดุที่เกิดจากปัจจัยภายนอกจึงเป็นข้อมูลสำคัญเพื่อสร้างพื้นฐานในการศึกษาวัสดุ NTE โดยวัสดุ NTE สามารถนำไปผสมกับวัสดุทั่วไปเพื่อปรับปรุงคุณสมบัติที่ขึ้นกับอุณหภูมิ เช่น การผสมกับวัสดุอุดฟันเพื่อลดความรู้สึกเมื่อรับประทานอาหารที่เปลี่ยนอุณหภูมิฉับพลัน การฉาบผิวกระจกของกล้องโทรทรรศน์ เข็มของเครื่องมือวัดที่ต้องการความเที่ยงตรง เสถียรภาพในโครงสร้างของวัสดุในระดับนาโน

### วัตถุประสงค์ของการวิจัย

ศึกษาความสัมพันธ์ของคุณสมบัติเชิงกลของวัสดุที่เกิดจากปัจจัยภายนอก เช่น ความเค้น ความเครียด ความดัน ที่มีผลต่อการผิดรูปของโครงสร้างผลึก

ศึกษาลักษณะการผิดรูปของโครงสร้างผลึกที่เกิดจากปัจจัยเชิงกลภายนอกในโครงสร้างระดับนาโนเชิงทฤษฎี

หาความสัมพันธ์ระหว่างการเปลี่ยนแปลงของโครงสร้างผลึกกับเงื่อนไขและปัจจัยที่ทำให้เกิดการผิดรูป

สร้างต้นแบบเชิงทฤษฎี และแบบแผนการวิเคราะห์เพื่อใช้ศึกษาในสารที่มีโครงสร้างอื่น ๆ เพื่อพัฒนาสมบัติของวัสดุจริง

### ขอบเขตของการวิจัย

โครงการนี้เน้นศึกษาวัสดุที่มีโครงสร้างระดับนาโนและโครงสร้างหรือระบบอื่นที่มีความน่าสนใจ โดยศึกษาคุณสมบัติเชิงกลที่เกี่ยวข้องกับการผิดรูปของโครงสร้างเนื่องจากความเค้นและความดันจากภายนอก ซึ่งสามารถจำลองและเปรียบเทียบกับปริมาณที่วัดได้จากการทดลอง สารตัวอย่างที่จะทำการศึกษาได้แก่ ชั้นโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรฟีน (C) และซิลิซีน (Si)

### วิธีดำเนินการวิจัย

การศึกษาสมบัติเชิงกลในโครงสร้างผลึก เริ่มจากการศึกษาโครงสร้างปกติของโครงสร้างผลึกที่อยู่ในสถานะพื้น ขั้นถัดไปคือการศึกษาลักษณะการเปลี่ยนแปลงของตำแหน่งอะตอมแต่ละตัวในโครงสร้างผลึกเมื่อทำการเปลี่ยนแปลงรูปทรงของโครงสร้างผลึกเพื่อจำลองความเค้นในทิศทางต่าง ๆ โดยทำการคำนวณพลังงานของระบบที่มีการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างผลึกเทียบกับโครงสร้างที่อยู่ในสถานะพื้น

ข้อมูลที่ได้จะให้ความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานของระบบที่เปลี่ยนแปลงเนื่องจากความเค้นรูปแบบต่าง ๆ เมื่อทราบถึงการตอบสนองต่อความเค้นที่เกิดขึ้นในโครงสร้างผลึก ว่าอะตอมแต่ละตัวมีการเคลื่อนที่ในลักษณะใดได้บ้าง พลังงานของระบบเป็นอย่างไร สามารถแปรผลเพื่อวิเคราะห์เป็นคุณสมบัติความยืดหยุ่นของวัสดุได้ สามารถคำนวณหาความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นกับการผิดรูปของโครงสร้างผลึกที่เปลี่ยนไป เข้าใจพฤติกรรมการผิดรูปของวัสดุ ข้อมูลของการผ่อนคลายโครงสร้างภายใต้ความเค้นในแนวต่าง ๆ สามารถหาได้จากพื้นผิวของพลังงานความเค้น ผลลัพธ์ที่ได้ทำให้ทราบคุณสมบัติเชิงกลของแผ่นเยื่อ เช่น อัตราส่วนปัวซอง ความทนแตกหัก และ ความยืดหยุ่นเชิงระนาบ ข้อมูลที่ได้สามารถเปรียบเทียบได้กับการทดสอบแบบโดมความดัน [9] ขั้นตอนการคำนวณสรุปได้ ดังนี้

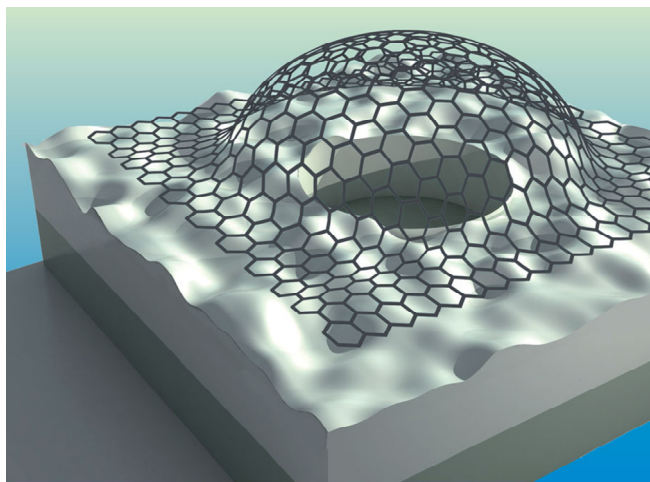
ใช้ทฤษฎีฟังก์ชันนัลของความหนาแน่น (density functional theory) เพื่อแก้ปัญหาเชิงควอนตัมในวัสดุจริง และพัฒนาระเบียบวิธีที่เหมาะสมเพื่อใช้คำนวณการผิดรูปของวัสดุ

เขียนคำสั่งหรือโปรแกรมเพื่อทำการวิเคราะห์การเปลี่ยนโครงสร้างผลึกต่อความเค้นที่เกิดขึ้นในโครงสร้างผลึก วิเคราะห์รูปแบบการเคลื่อนตัวของแต่ละอะตอมในผลึกในขนาดเซลล์หน่วยที่กำหนด

ทำการคำนวณพลังงานของระบบ และคำนวณโครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์เพื่อใช้ในการวิเคราะห์ผลเชิงลึก

วิเคราะห์ปัจจัยที่มีผลต่อการผิดรูป เช่น อัตราส่วนปัวซอง ความยืดหยุ่นเชิงระนาบ พันธะที่ยึดเหนี่ยวระหว่างอะตอมในผลึก เพื่อไปใช้เปรียบเทียบกับสารที่มีโครงสร้างเดียวกันแต่ต่างชนิดกัน

จำลองคุณสมบัติของวัสดุเพื่อเปรียบเทียบกับค่าที่วัดได้จากการทดลอง จากแบบแผนต้นแบบ สามารถศึกษาในเชิงลึกเกี่ยวกับการเชื่อมโยงระหว่างคุณสมบัติของสารกับรูปแบบของโครงสร้างผลึก เงื่อนไขต่าง ๆ ซึ่งสามารถขยายผลไปสู่การศึกษาในสารอื่นได้



รูปที่ 1.1 แสดงการผิดรูปของโครงสร้างแผ่นเยื่อสองมิติภายใต้ความดันที่แตกต่างกันระหว่างด้าน [9]

## ประโยชน์ที่ได้รับจากการวิจัย

การศึกษาเชิงทฤษฎีในวัสดุยังขาดแคลนในประเทศไทย โครงการนี้จึงมุ่งเน้นการพัฒนาบุคลากรและนักศึกษาให้มีความเชี่ยวชาญ ศักยภาพและความรู้เพื่อการวิจัยที่เกี่ยวข้อง และสร้างองค์ความรู้ใหม่เพื่อเสริมศักยภาพในการวิจัยของประเทศ นักศึกษาระดับบัณฑิตศึกษาอย่างน้อย 1 คนจะได้เข้าร่วมวิจัยและได้รับการสนับสนุนงบประมาณจากโครงการนี้ เป็นการพัฒนาการศึกษาในระดับบัณฑิตศึกษาในด้านวิทยาศาสตร์ซึ่งเป็นสาขาวิชาขาดแคลน ข้อสำคัญของการศึกษาเชิงทฤษฎีคือลดการสิ้นเปลืองทรัพยากร ผลการวิจัยสามารถใช้เป็นแนวทางให้กับนักทดลองในการสังเคราะห์สารได้ เครื่องมือสำคัญที่ใช้ในการคำนวณคือคอมพิวเตอร์ซึ่งมีศักยภาพทัดเทียมกับต่างประเทศ ทำให้นักวิจัยไทยสามารถแข่งขันกับนานาชาติได้ การพัฒนาบุคลากรด้านการคำนวณในวัสดุจะช่วยให้การพัฒนาประเทศเป็นไปอย่างก้าวกระโดด

องค์ความรู้ที่ได้สามารถใช้ร่วมมือกับภาคการผลิตเพื่อสร้างมูลค่าเพิ่มในวัสดุสำหรับการใช้งานระดับนาโนขั้นสูง ซึ่งมีส่วนช่วยพัฒนาเทคโนโลยีการประยุกต์ใช้แผ่นเยื่อระดับนาโนกระบวนการในการผลิตเชิงพาณิชย์และเพิ่มประสิทธิภาพของผลิตภัณฑ์ในภาคการผลิต



## บทที่ 2

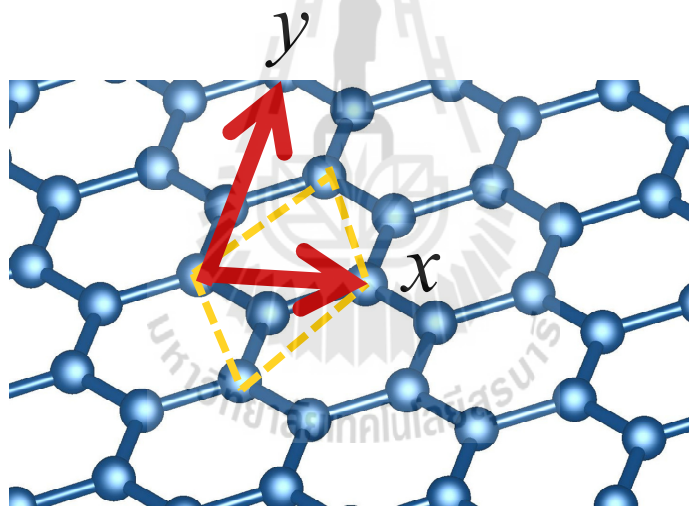
### วิธีดำเนินการวิจัย

#### ทฤษฎีและวิธีการคำนวณคุณสมบัติความยืดหยุ่นของแผ่นเยื่อ

งานวิจัยนี้ได้ทำการศึกษาเพื่อทำความเข้าใจและสร้างระเบียบวิธีที่ใช้อธิบายพฤติกรรมการผิดรูปของวัสดุโครงสร้างแบบ 2 มิติ โดยศึกษาการเปลี่ยนแปลงของโครงสร้างผลึกของชั้นโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรฟีน (C) และซิลิซีน (Si) ภายใต้เงื่อนไขความเค้นตามแกนเดียว (uniaxial strain)  $\varepsilon$  ค่าต่าง ๆ (ในช่วง -0.2 ถึง 0.2) โดยนิยามของความเค้นเป็น ดังนี้

$$\varepsilon_i = \frac{\Delta L_i}{L_i} = \frac{l_i - L_i}{L_i} \quad (2.1)$$

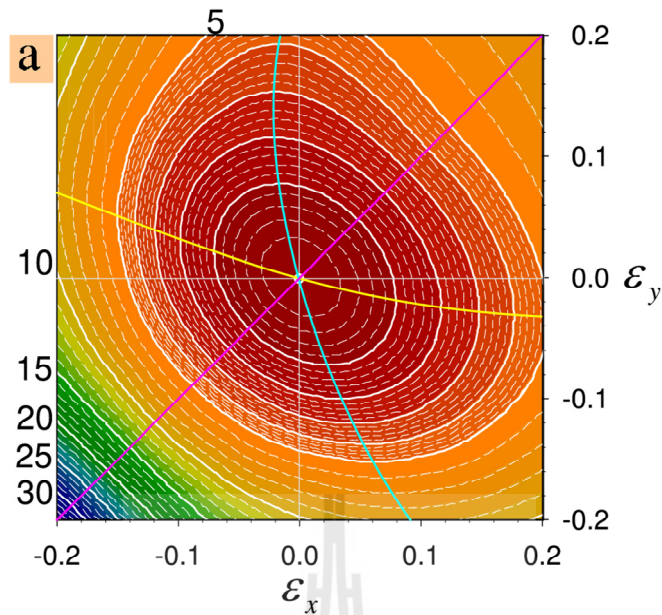
โดยที่  $i = x, y$  แทนแกน  $x$  และ  $y$  ในระบบพิกัดฉาก  $l_i$  คือ ความยาวของระบบที่ถูกยืดออกหรืออัดเข้า  $L_i$  คือ ความยาวตั้งต้นของระบบ โดยโครงสร้างผลึกและเซลล์หน่วยของ BN, C, และ Si แสดงดังรูปที่ 2.1



รูปที่ 2.1 แสดงโครงสร้างผลึกและเซลล์หน่วยของระบบผลึกแบบหกเหลี่ยม

การคำนวณคุณสมบัติเชิงกลทำโดยใช้ทฤษฎีฟังก์ชันนัลของความหนาแน่น (density functional theory) ทำการคำนวณแบบเฟิร์สพริ้นซิเพิล (first principles calculations) ด้วยโปรแกรม VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) [10, 11, 12] ซึ่งให้ข้อมูลของการผ่อนคลายโครงสร้างและตำแหน่งอะตอมและพลังงานของระบบ เมื่อกำหนดความเค้นในแนวต่าง ๆ แล้วนำข้อมูลที่ได้อมาวิเคราะห์ด้วยกราฟ 2 มิติ หาความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นในแนวแกน  $x$  และ  $y$  กับพลังงานของระบบ  $E_S$  จะได้กราฟแสดงพื้นผิวของพลังงานความเค้น (strain energy surface) ดังแสดงในรูปที่ 2.2





รูปที่ 2.2 ตัวอย่างกราฟพื้นผิวของพลังงานความเค้น [13] โดยค่าของพลังงานมีหน่วยเป็น eV

จากกราฟแสดงพื้นผิวของพลังงานความเค้นจะทราบถึงการผ่อนคลายของโครงสร้างเมื่อได้รับความเค้นตามแกนเดียว คือเมื่อโครงสร้างได้รับความเค้นตามแกน  $x$  หรือ  $y$  จะมีการผ่อนคลายของโครงสร้างตามแกน  $y$  หรือ  $x$  ดังแสดงโดยเส้นกราฟบนพื้นผิวของพลังงานความเค้นในรูปที่ 2.2 โดยวัสดุแต่ละชนิดจะมีรูปแบบและลักษณะของการผ่อนคลายโครงสร้างที่แตกต่างกันออกไป ความสัมพันธ์ระหว่าง  $\varepsilon_x$  และ  $\varepsilon_y$  ที่ได้จะสามารถคำนวณเป็นอัตราส่วนปัวซองเมื่อให้ความเค้นตามแกน  $x$  ( $\nu_x$ ) หรือแกน  $y$  ( $\nu_y$ ) ได้ดังนี้

$$\nu_x = -\frac{d\varepsilon_y}{d\varepsilon_x} \text{ และ } \nu_y = -\frac{d\varepsilon_x}{d\varepsilon_y} \quad (2.2)$$

สามารถหาค่าอัตราส่วนปัวซองเฉลี่ยเชิงเรขาคณิตได้เป็น

$$\nu = \sqrt{\nu_x \nu_y} \quad (2.3)$$

และสามารถคำนวณความยืดหยุ่นเชิงระนาบ [14] ได้โดยการประมาณพื้นผิวของพลังงานความเค้นด้วยความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นในแนวแกน  $x$  และ  $y$  กับพลังงานของระบบ  $E_S$  [14] ดังนี้

$$E_S = a_1 \varepsilon_x^2 + a_2 \varepsilon_y^2 + a_3 \varepsilon_x \varepsilon_y \quad (2.4)$$

โดย  $a_1 = a_2$  และ  $a_3$  เป็นตัวปรับค่า และสามารถคำนวณความยืดหยุ่นเชิงระนาบ  $Eh$  ได้จาก [14]

$$Eh = \left( 2a_1 - \frac{a_3^2}{2a_1} \right) / A_0 \quad (2.5)$$

ผลลัพธ์ที่ได้จากการคำนวณข้างต้นทำให้ทราบคุณสมบัติเชิงกลของแผ่นเยื่อ ได้แก่ อัตราส่วนปัวซอง และ ความยืดหยุ่นเชิงระนาบ ข้อมูลที่ได้สามารถนำไปใช้คำนวณเพื่อวิเคราะห์การผิด

รูปของแผ่นเยื่อเมื่อให้ความดันที่แตกต่างกันระหว่างด้านทั้งสองของแผ่นเยื่อภายใต้การทดสอบแบบโดมความดัน โดยช่องเปิดมีลักษณะเป็นวงกลม จึงสามารถศึกษาการผิดรูปของแผ่นเยื่อโดยพิจารณาว่าเป็นแผ่นเยื่อวงกลมที่ขอบยึดติดกับช่องเปิดวงกลม สามารถเปรียบเทียบผลการคำนวณได้กับการทดสอบแบบโดมความดันซึ่งเป็นการให้ความดันที่แตกต่างกันระหว่างด้านทั้งสองของแผ่นเยื่อวงกลม ทำให้แผ่นเยื่อวงกลมเกิดการเปลี่ยนรูปร่างจากระนาบวงกลมเป็นรูปโดม พฤติกรรมการผิดรูปของแผ่นเยื่ออธิบายได้โดยผลเฉลยของเฮงกี ผลเฉลยนี้ให้รูปแบบของแผ่นเยื่อภายใต้ความดันและให้ความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความสูงของโดม ซึ่งสามารถประมาณค่าความเค้นของแผ่นเยื่อได้โดยตรง รวมทั้งพลังงานการยึดติดระหว่างแผ่นเยื่อกับซับสเตรตในการวัดจริง

### ทฤษฎีและวิธีการคำนวณรูปแบบการผิดรูปของแผ่นเยื่อภายใต้ความดัน

ลักษณะการผิดรูปของแผ่นเยื่อวงกลมภายใต้ความดันที่ต่างกันระหว่างด้านทั้งสอง อธิบายได้จากผลเฉลยของเฮงกี (Hencky's solution) [15] โดย Fichter [16] เสนอรูปแบบของสมการเชิงอนุพันธ์ที่อธิบายโครงสร้างกรณีแผ่นเยื่อได้รับความดันที่สม่ำเสมอทั่วทั้งแผ่น ตำแหน่งของแต่ละจุดบนแผ่นเยื่ออธิบายโดยตัวแปรรัศมี มุม และความสูง ( $r, \theta, z$ ) ตามลำดับ ชุดตัวแปรที่เป็นภาระต่อแผ่นเยื่อประกอบด้วย ความดัน  $p$  รัศมีของแผ่นเยื่อ  $a$  โมดูลัสของสภาพยืดหยุ่น  $E$  และความหนาของแผ่นเยื่อ  $h$  ทั้งนี้ผลคูณระหว่าง  $Eh$  คือความยืดหยุ่นเชิงระนาบ [14, 17] เพื่อความสะดวกในการแก้สมการเพื่อหาผลเฉลยนั้น จะกำหนดตัวแปรที่ไม่มีหน่วย โดยให้ระยะต่าง ๆ เป็นระยะที่เทียบกับรัศมีของแผ่นเยื่อ กำหนดให้พิกัดในแนวรัศมีเป็น  $\rho = r/a$  และความสูงของแผ่นเยื่อในแนวตั้ง  $W = z/a$  และ ตัวแปรที่เป็นภาระต่อแผ่นเยื่อเป็น  $q = pa/Eh$

ระบบแผ่นเยื่อวงกลมภายใต้ความดันสามารถอธิบายด้วยตัวแปรความเครียดที่ไม่มีหน่วย  $N(\rho) \equiv N$  ตัวแปรที่เป็นภาระต่อแผ่นเยื่อเป็น  $q$  และอัตราส่วนปัวซอง  $\nu$  ของแผ่นเยื่อ ซึ่งมีความสัมพันธ์ตามสมการหลัก [16] ที่อธิบายปัญหาได้ ดังนี้

$$N^2 \left( \rho^2 \frac{d^2 N}{d\rho^2} + 3\rho \frac{dN}{d\rho} \right) - \frac{\rho^3}{2} \frac{dN}{d\rho} + \frac{(3 + \nu)}{2} \rho^2 N + \frac{\rho^2}{8q} = 0 \quad (2.6)$$

โดยสมการข้างต้นต้องสอดคล้องกับสมการที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความสูงของแผ่นเยื่อในแนวตั้งกับตัวแปรความเครียด ดังนี้

$$\frac{dW}{d\rho} = -\frac{\rho}{2N} \quad (2.7)$$

และเงื่อนไขขอบของความชันของแผ่นเยื่อที่ตำแหน่งรัศมี  $\rho = 1$

$$\left[ \frac{dW}{d\rho} \right]_{\rho=1} = \frac{d}{d\rho} (\rho N) - \nu N \quad (2.8)$$

งานวิจัยนี้ได้พัฒนาขั้นตอนเพื่อแก้ปัญหาและหาผลเฉลยของเฮงก็ภายใต้ความดันสม่ำเสมอทั้งแผ่นเยื่อภายใต้ค่าของ  $q$  และ  $\nu$  ที่กำหนด โดยวิธีเชิงตัวเลขแบบผลต่างอันดับนี้

1) เริ่มจากการเดาค่าของตัวแปรความเครียดที่ตำแหน่งรัศมี  $\rho = 1$  (ค่าของ  $N(\rho = 1)$ ) และที่ตำแหน่งรัศมีอื่น ๆ สำหรับทุกค่า  $\rho$  ที่จะทำการคำนวณด้วยวิธีผลต่างอันดับ

2) แก้สมการที่ (2.6) ด้วยวิธีทำซ้ำ เพื่อหาค่า  $N$  ที่ดีขึ้นเรื่อยๆ จนผลเฉลยที่ได้ลู่อู่เข้าถึงความคลาดเคลื่อนที่ยอมรับที่กำหนด โดยงานวิจัยนี้ใช้ความคลาดเคลื่อนที่ยอมรับระดับ  $10^{-8}$

3) เมื่อได้ค่า  $N$  สำหรับทุกค่า  $\rho$  แล้วจะสามารถแก้สมการที่ (2.7) เพื่อหาค่า  $W(\rho) \equiv W$  ที่ทุกค่า  $\rho$  ได้

4) ใช้เงื่อนไขขอบ ในสมการที่ (2.8) เพื่อหาค่า  $N(\rho = 1)$  ที่ดีขึ้นโดยวิธีผลต่างอันดับ

5) ทำขั้นตอนที่ 2) ถึง 4) ไปเรื่อยๆ จนกว่าค่าของ  $N(\rho = 1)$  จะลู่อู่เข้าถึงความคลาดเคลื่อนที่ยอมรับที่กำหนด โดยงานวิจัยนี้ใช้ความคลาดเคลื่อนที่ยอมรับระดับ  $10^{-8}$

ขั้นตอนการหาผลเฉลยของเฮงก็ภายใต้ความดันสม่ำเสมอทั้งแผ่นเยื่อนี้ได้เขียนเป็นชุดคำสั่งไพธอนสคริปต์ (Python script) ในภาคผนวก ก

### การคำนวณความเค้นที่เกิดขึ้นที่แต่ละตำแหน่งของแผ่นเยื่อภายใต้ความดัน

จากค่าของ  $N$  และ  $W$  จะคำนวณความเค้นที่เกิดขึ้นในแนวรัศมี  $\varepsilon_r(\rho) \equiv \varepsilon_r$  และแนวที่ตั้งฉากกับรัศมี  $\varepsilon_\theta(\rho) \equiv \varepsilon_\theta$  ได้จาก

$$\varepsilon_r = qN + \nu \left[ q\rho \frac{dW}{d\rho} - q \frac{d}{d\rho}(\rho N) \right] \quad (2.9)$$

และ

$$\varepsilon_\theta = q \frac{d}{d\rho}(\rho N) - q\rho \frac{dW}{d\rho} - \nu qN \quad (2.10)$$

ตามลำดับ โดยสามารถคำนวณค่าเฉลี่ยของความเค้น  $\varepsilon$  ที่เกิดขึ้นทั่วทั้งแผ่นเยื่อจากค่า  $q$  และ  $\nu$  ที่กำหนดได้จาก

$$\varepsilon \equiv \langle \varepsilon_{\text{avg}}(\rho) \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{\rho=0}^1 2\pi\rho \varepsilon_{\text{avg}}(\rho) d\rho \quad (2.11)$$

เมื่อ  $\varepsilon_{\text{avg}}(\rho) = \sqrt{\varepsilon_r \varepsilon_\theta}$  เป็นค่าเฉลี่ยเชิงเรขาคณิตของความเค้นในทั้งสองทิศทาง ทั้งนี้ขั้นตอนการคำนวณค่าเฉลี่ยของความเค้นนี้ได้เขียนเป็นชุดคำสั่งไพธอนสคริปต์ (Python script) ในภาคผนวก ข

ในการทดลองสามารถใช้ขั้นตอนข้างต้นเพื่อคำนวณความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นและภาวะที่เกิดขึ้นบนแผ่นเยื่อได้เช่นกัน ถ้าทราบค่าที่เป็นคุณลักษณะของแผ่นเยื่อ ได้แก่ ความยืดหยุ่น

เชิงระนาบ และอัตราส่วนปัวซอง ดังนั้นความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นและภาระที่เกิดขึ้นบนแผ่นเยื่อที่  
ได้จากการคำนวณจึงสามารถเปรียบเทียบควบคู่ไปกับการทดลอง



### บทที่ 3 ผลการคำนวณ

#### ผลการคำนวณคุณสมบัติความยืดหยุ่นของ ชั้นโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรฟีน (C) และซิลิซีน (Si)

จากการคำนวณจะทราบถึงค่าคงตัวของโครงผลึกของแผ่นเยื่อที่ยังไม่มีความเค้น ดังแสดงในตารางที่ 3.1 และเมื่อให้ความเค้นตามแกนเดี่ยวค่าต่าง ๆ แล้วคำนวณพลังงานที่เปลี่ยนไปของระบบจะได้ผลเป็นกราฟแสดงพื้นผิวของพลังงานความเค้น ที่ทำให้ทราบถึงการผ่อนคลายของโครงสร้างของวัสดุทั้งสามชนิดเมื่อได้รับความเค้นตามแกนเดียว คือเมื่อโครงสร้างได้รับความเค้นตามแกน  $x$  หรือ  $y$  จะมีการผ่อนคลายของโครงสร้างตามแกน  $y$  หรือ  $x$  ดังแสดงโดยเส้นกราฟบนพื้นผิวของพลังงานความเค้นในรูปที่ 3.1 สำหรับวัสดุทั้งสามชนิด ความสัมพันธ์ระหว่าง  $\epsilon_x$  และ  $\epsilon_y$  ที่ได้จะสามารถคำนวณเป็นอัตราส่วนปัวซองเมื่อให้ความเค้นตามแกน  $x$  ( $\nu_x$ ) หรือแกน  $y$  ( $\nu_y$ ) ได้ อีกทั้งรูปแบบของการเปลี่ยนแปลงพื้นผิวของพลังงานความเค้นในบริเวณที่ความเค้นไม่มากนักจะสามารถประมาณค่าความยืดหยุ่นเชิงระนาบได้ ผลการคำนวณที่ได้สรุปในตารางที่ 3.1

**ตารางที่ 3.1** แสดงค่าคงตัวของโครงผลึก อัตราส่วนปัวซอง และความยืดหยุ่นเชิงระนาบสำหรับแกรฟีน โบรอนไนไตรด์ และ ซิลิซีน

	แกรฟีน	โบรอนไนไตรด์	ซิลิซีน
ค่าคงตัวของโครงผลึก (Å)	2.4685	2.5127	3.8679
ระยะเหลือมจากระนาบ (Å)	0	0	0.4471
อัตราส่วนปัวซอง	0.19 (0.16 <sup>a</sup> )	0.22	0.30
ความยืดหยุ่นเชิงระนาบ (N/m)	330 (335 <sup>b</sup> , 340 <sup>c</sup> )	280 (267 <sup>d</sup> )	60 (62 <sup>d</sup> )

a) [18]

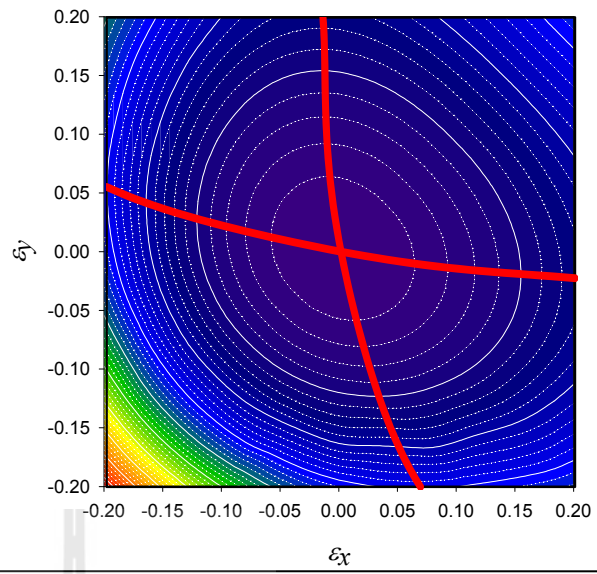
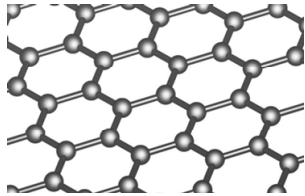
b) [14]

c) [17]

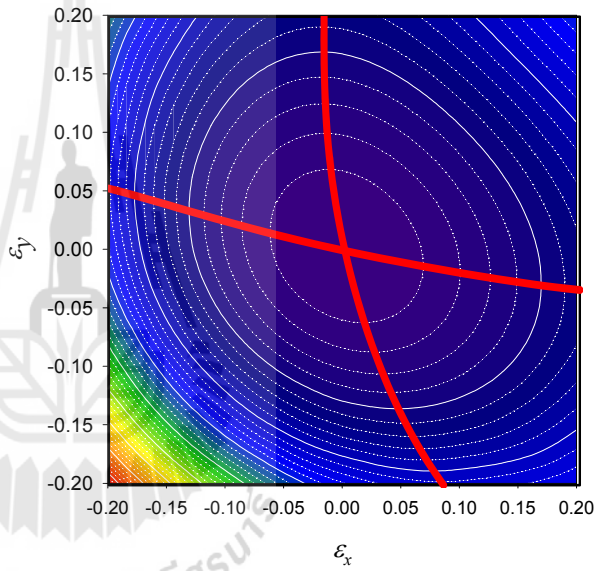
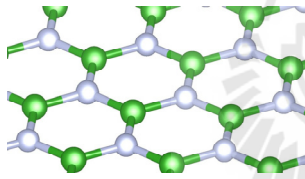
d) [19]

จากผลการคำนวณพบว่าแกรฟีนเป็นวัสดุที่ผิดรูปยากเนื่องจากมีความแข็งแรงเชิงโครงสร้างมาก จะเห็นได้จากค่าความยืดหยุ่นเชิงระนาบที่สูงและค่าอัตราส่วนปัวซองที่น้อย ในทางกลับกันซิลิซีนจะผิดรูปได้ง่ายที่สุดเนื่องจากมีความยืดหยุ่นเชิงระนาบต่ำ อีกทั้งค่าอัตราส่วนปัวซองที่สูงแสดงถึงการผ่อนคลายในแกนที่ตั้งฉากกับทิศทางของความเค้นตามแกนเดียวที่มาก วัสดุทั้งสามมี

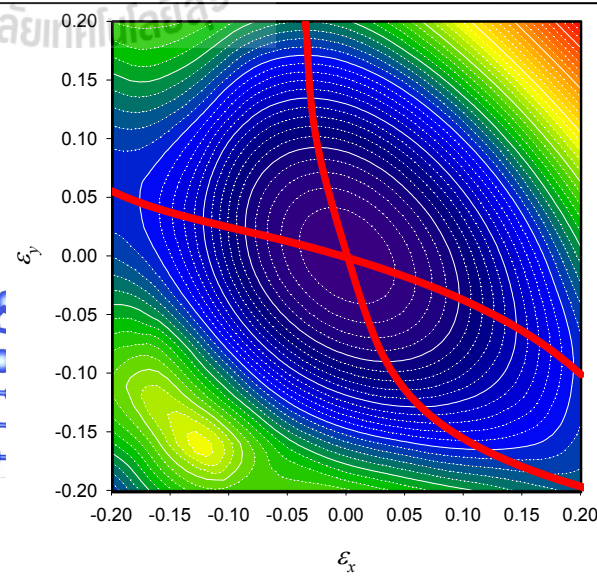
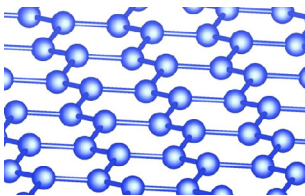
(a)



(b)



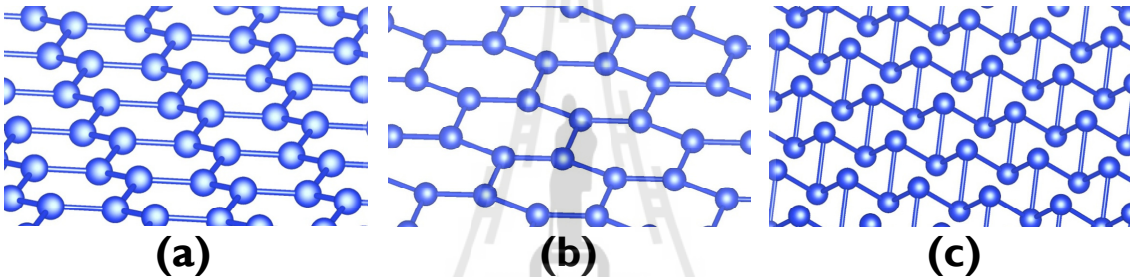
(c)



รูปที่ 3.1 พื้นผิวของพลังงานความเค้นของ (a) แกรฟีน (b) โบรอนไนไตรด์ และ (c) ซิลิซีน

อัตราส่วนปัวซองและความยืดหยุ่นเชิงระนาบที่แตกต่างกันออกไป จึงสามารถประยุกต์ใช้คุณสมบัติเชิงกลของวัสดุให้เหมาะสมกับการใช้งานภายใต้ความดันที่แตกต่างกันได้

จากพื้นผิวของพลังงานความเค้น จะเห็นว่าแกรฟีนและโบรอนไนไตรด์ยังคงรูปแบบของโครงสร้างพันธะที่เป็นระนาบในสองมิติตลอดช่วงของความเค้นที่ศึกษา แต่ซิลิซีนจะมีการเปลี่ยนแปลงรูปแบบของโครงสร้างจากที่มีการเชื่อมกันดังรูปที่ 3.2 (a) กลายเป็นระนาบสมบูรณ์ในสองมิติดังรูปที่ 3.2 (b) ที่ความเค้นดึงตามแกน  $x$  หรือ  $y$  ที่  $\varepsilon_x$  หรือ  $\varepsilon_y$  มีค่าประมาณ 0.15 และมีการเปลี่ยนแปลงของโครงสร้างที่ความเค้นอัดในช่วงที่  $\varepsilon_x$  และ  $\varepsilon_y$  มีค่าน้อยกว่า -0.15 ซึ่งเห็นได้จากการลดลงของพลังงานบนพื้นผิวของพลังงานความเค้นในรูปที่ 3.1 (c) โดยพบว่าโครงสร้างของซิลิซีนเกิดการเปลี่ยนแปลงรูปแบบของโครงสร้างเป็นระนาบแบบชั้นคู่ของซิลิคอน ดังรูปที่ 3.2 (c) ทำให้พลังงานของระบบลดลงเนื่องจากการสร้างพันธะใหม่ระหว่างอะตอมซิลิคอนที่มาอยู่ในระนาบเดียวกัน



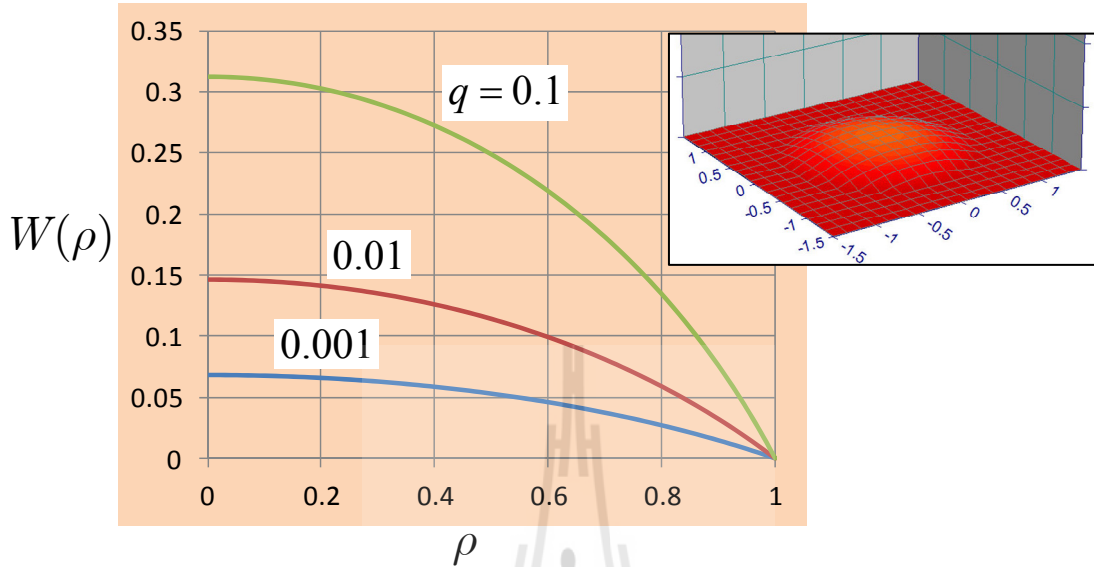
รูปที่ 3.2 รูปแบบโครงสร้างของ (a) ซิลิซีนปกติ (b) โครงสร้างที่ให้ความเค้นดึงตามแกนเดียว  $\varepsilon_x$  หรือ  $\varepsilon_y$  มีค่าประมาณ 0.15 (c) โครงสร้างที่ให้ความเค้นอัดในช่วงที่  $\varepsilon_x$  และ  $\varepsilon_y$  มีค่าน้อยกว่า -0.15

ผลลัพธ์จากการคำนวณอัตราส่วนปัวซอง และ ความยืดหยุ่นเชิงระนาบที่ได้ สามารถนำไปใช้คำนวณเพื่อวิเคราะห์การผิดรูปของแผ่นเยื่อเมื่อให้ความดันที่แตกต่างกันระหว่างด้านทั้งสองของแผ่นเยื่อภายใต้การทดสอบแบบโดมความดันต่อไป

### ลักษณะการผิดรูปของ ชั้นโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรฟีน (C) และซิลิซีน (Si) ภายใต้ความดัน

จากอัตราส่วนปัวซอง และความยืดหยุ่นเชิงระนาบ สามารถคำนวณลักษณะการผิดรูปของแผ่นเยื่อได้ตามสมการที่ (2.6) ถึง (2.8) ในบทที่ 2 ลักษณะการผิดรูปของแผ่นเยื่อแกรฟีนที่ค่า  $q$  ต่าง ๆ แสดงในรูปที่ 3.3 จะเห็นแนวโน้มของการผิดรูปเมื่อให้ภาระต่อแผ่นเยื่อสูงขึ้น (ความดันที่แตกต่างกันระหว่างสองด้านของแผ่นเยื่อมากขึ้น) โดยสามารถประมาณค่าของความดันที่กระทำกับแผ่นเยื่อได้จาก  $p = qEh/a$  โดยถ้าช่องเปิดมีขนาด  $a = 10 \mu\text{m}$  ที่ค่า  $q = 0.10$  จะสอดคล้องกับความดัน  $p = 3.3 \text{ MPa}$  ซึ่งให้รูปแบบของแผ่นเยื่อดังภาพประกอบในรูปที่ 3.3 ในการทดลองสามารถวัดลักษณะการผิดรูปของแผ่นเยื่อได้จากกล้องจุลทรรศน์แรงอะตอม (atomic force

microscope) เพื่อเปรียบเทียบกับผลการผิดรูปที่อธิบายโดยผลเฉลยของเฮงกีซึ่งสามารถอธิบายความเค้นและความเครียดที่เกิดขึ้นบนแผ่นเยื่อได้ทุกจุด

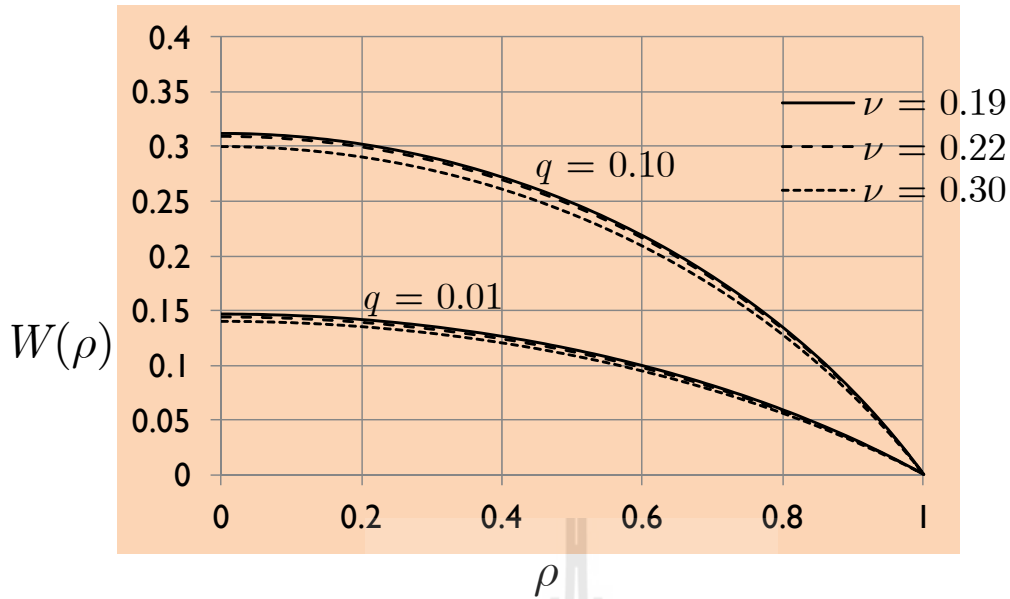


รูปที่ 3.3 แสดงลักษณะการผิดรูปของแผ่นเยื่อแกรไฟีน  $\nu = 0.19$  ที่ค่า  $q$  ต่าง ๆ และรูปแบบของแผ่นเยื่อที่ค่า  $q = 0.10$

เมื่อเปรียบเทียบลักษณะการผิดรูปของวัสดุที่มีค่าอัตราส่วนปัวซอง  $\nu = 0.19$  0.22 และ 0.30 ที่ค่า  $q = 0.01$  และ 0.10 ดังรูปที่ 3.4 พบว่าวัสดุที่มีอัตราส่วนปัวซองมากจะมีค่า  $W(\rho)$  ต่ำ โดยความแตกต่างระหว่างค่า  $W(\rho)$  จะมากขึ้นตามค่า  $q$  ทั้งนี้วัสดุที่มีค่าอัตราส่วนปัวซองมากคือวัสดุที่มีการผ่อนคลายตัวมากเมื่อมีการให้ความเค้นตามแกนเดียว โดยผลที่ได้ดังรูปที่ 3.4 ไม่ได้หมายความว่าวัสดุที่มีค่าอัตราส่วนปัวซองมากคือวัสดุที่ผิดรูปยากกว่าแต่อย่างใด เพราะผลที่ได้แสดงในรูปของปริมาณที่ไม่มีหน่วยซึ่งเมื่อนำไปใช้กับวัสดุจริงยังคงต้องคำนึงถึงความยืดหยุ่นเชิงระนาบ ( $Eh$ ) ของวัสดุด้วย

จากผลเฉลยที่ได้จากสมการของเฮงกี นอกจากจะทราบถึงลักษณะการผิดรูปของแผ่นเยื่อภายใต้ความดันแล้ว ยังทราบถึงความเครียดที่เกิดขึ้นบนแต่ละจุดของแผ่นเยื่อซึ่งสามารถทำการวิเคราะห์ลักษณะเชิงกลของแผ่นเยื่อได้ในหัวข้อต่อไป





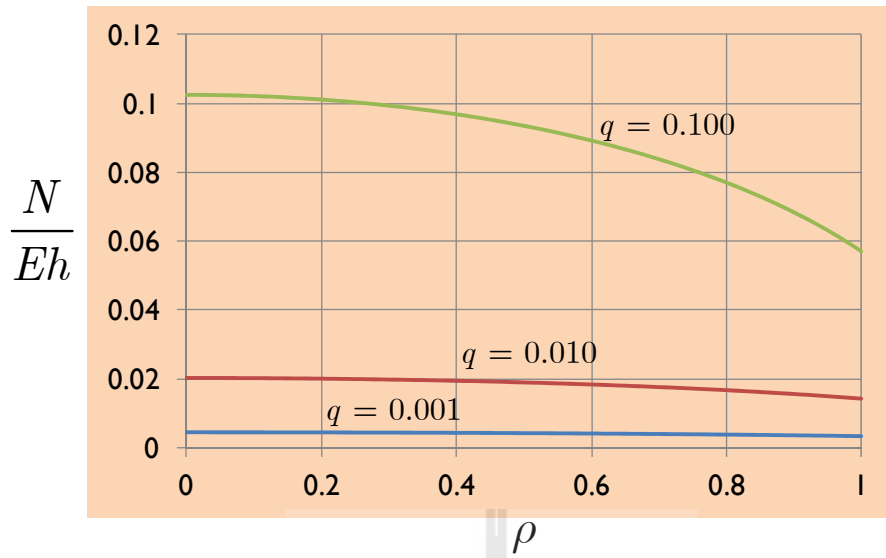
รูปที่ 3.4 แสดงลักษณะการผิดรูปของแผ่นเยื่อที่มีค่าอัตราส่วนปัวซอง  $\nu = 0.19$  0.22 และ 0.30 ที่ค่า  $q = 0.01$  และ 0.10

#### ความเครียดที่เกิดขึ้นใน ชั้นโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรฟีน (C) และซิลิซีน (Si) ภายใต้ความดัน

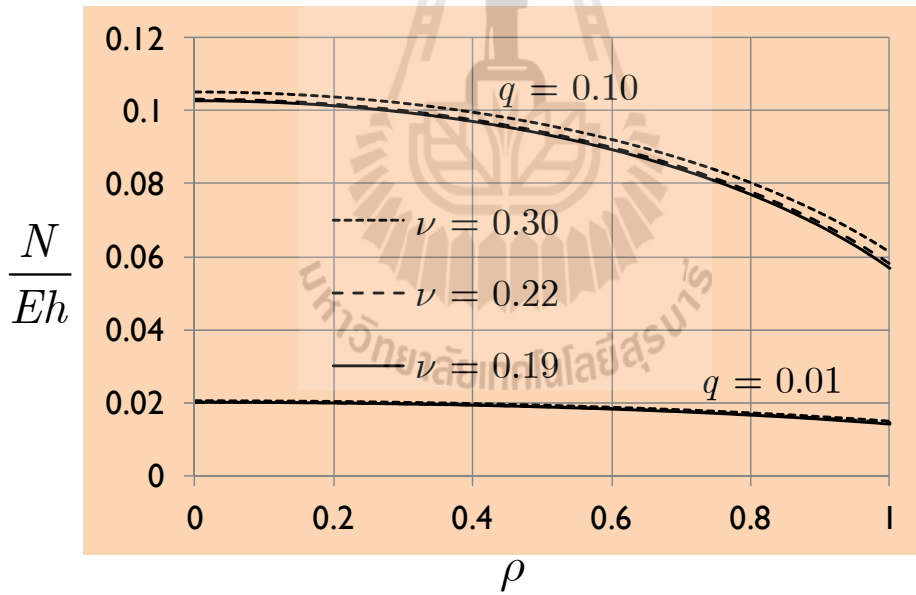
ปริมาณที่สำคัญที่ได้จากผลเฉลยจากสมการของเฮงก็คือการกระจายความเครียดบนแต่ละจุดของแผ่นเยื่อ ซึ่งเป็นปริมาณที่ไม่สามารถวัดได้โดยตรงจากการทดลอง การศึกษาเชิงทฤษฎีจึงมีส่วนสำคัญในการเพิ่มเติมข้อมูลเชิงลึกในการวิเคราะห์คุณสมบัติของแผ่นเยื่อนี้ในระดับอะตอมและระดับนาโน ผลเฉลยที่ได้จากการแก้ชุดสมการที่ (2.6) ถึง (2.8) ในบทที่ 2 ประกอบด้วยลักษณะการผิดรูปของแผ่นเยื่อ และการกระจายความเค้น  $N(\rho)$  ภายใต้การเปลี่ยนแปลงของค่า  $q$  ต่าง ๆ กัน โดยค่าของ  $N/Eh$  ที่ค่า  $q$  ต่าง ๆ แสดงดังรูปที่ 3.5 จะเห็นได้ว่าความเครียดจะมีค่าสูงสุดที่จุดศูนย์กลางของโดม ( $\rho = 0$ ) และลดลงเมื่อเข้าสู่ขอบของรอยต่อที่ ( $\rho = 1$ )

เมื่อเปรียบเทียบความเครียดของวัสดุที่มีอัตราส่วนปัวซอง  $\nu = 0.19$  0.22 และ 0.30 ที่ค่า  $q = 0.01$  และ 0.10 ดังรูปที่ 3.6 พบว่าวัสดุที่มีอัตราส่วนปัวซองมากจะเกิดความเครียดในวัสดุสูงกว่า ทั้งนี้ความแตกต่างระหว่างค่าความเครียดในวัสดุจะยิ่งชัดเจนเมื่อค่า  $q$  เพิ่มขึ้น เนื่องจากวัสดุที่มีอัตราส่วนปัวซองมากคือวัสดุที่มีการผ่อนคลายตัวได้ง่ายเมื่อมีการให้ความเค้นตามแกนเดียว ทั้งผลที่ได้ดังรูปที่ 3.6 เป็นค่าความเครียด  $N/Eh$  ถ้าทราบค่าความยืดหยุ่นเชิงระนาบ ( $Eh$ ) ของวัสดุ จะทำให้เข้าใจผลลัพธ์ที่เกิดขึ้นกับแผ่นเยื่อได้ชัดเจนมากขึ้น ทั้งนี้ค่าความยืดหยุ่นเชิงระนาบสามารถวัดได้จากการทดลองหรือโดยวิธีการคำนวณในบทที่ 2

จากค่าของ  $N$  และ  $W$  สามารถคำนวณความเค้นที่เกิดขึ้นที่แต่ละจุดบนแผ่นเยื่อได้ต่อไป



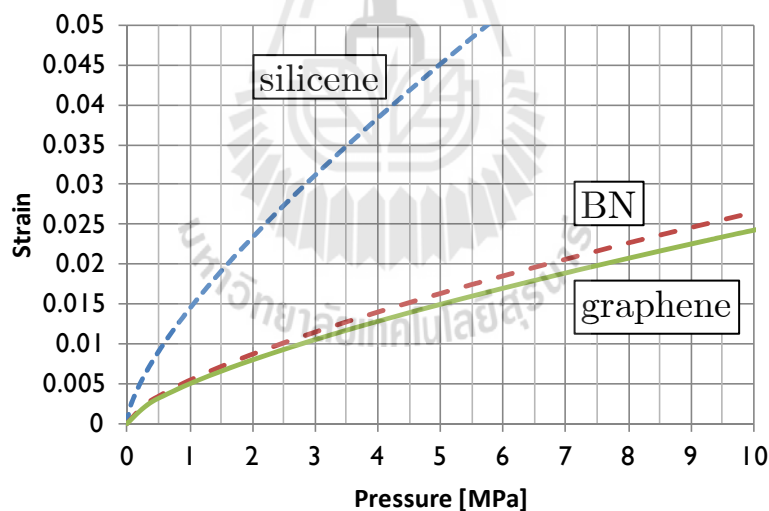
รูปที่ 3.5 แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง  $N/Eh$  และค่า  $\rho$  ของแผ่นเยื่อแกรไฟีน  $\nu = 0.19$  ที่ค่า  $q$  ต่าง ๆ



รูปที่ 3.6 แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง  $N/Eh$  และค่า  $\rho$  ของแผ่นเยื่อที่มีค่าอัตราส่วนปัวซอง  $\nu = 0.19$  0.22 และ 0.30 ที่ค่า  $q = 0.01$  และ 0.10

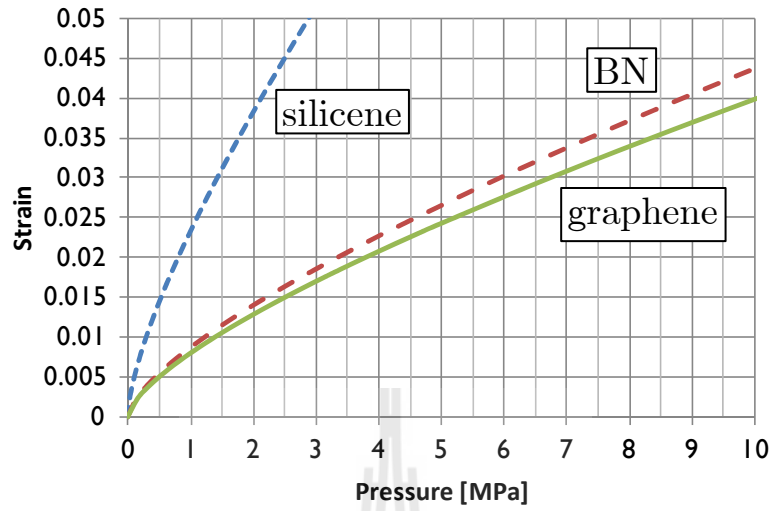
### ความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นและความดัน ของแผ่นเยื่อโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรฟีน (C) และซิลิซีน (Si)

จากผลเฉลยของเฮงกี เมื่อแทนค่าคุณสมบัติของวัสดุจริงที่คำนวณได้ตามตารางที่ 3.1 ได้แก่ อัตราส่วนปัวซอง และความยืดหยุ่นเชิงระนาบ สามารถคำนวณความเค้นในแผ่นเยื่อได้ตามสมการที่ (2.9) ถึง (2.11) ในบทที่ 2 โดยความเค้นในแผ่นเยื่อและความดันที่กระทำสัมพันธ์กัน ดังแสดงในรูปที่ 3.7 สำหรับช่องเปิดวงกลมรัศมี ขนาด  $1 \mu\text{m}$  จะเห็นซิลิซีนจะมีการเพิ่มขึ้นของความเค้นตามความดันอย่างรวดเร็วเมื่อเทียบกับแกรฟีน ในภาพรวมนั้นแนวโน้มของความเค้นจะเพิ่มขึ้นเมื่อให้ความดันสูงขึ้น และความสัมพันธ์ค่อนข้างเป็นแบบเชิงเส้นในช่วงความดันสูง โดยซิลิซีนจะผิดรูปได้ง่ายกว่าโบรอนไนไตรด์และแกรฟีน เช่นที่ความดันประมาณ  $5 \text{ MPa}$  ความเค้นในซิลิซีนมีค่า  $0.045$  แสดงว่าแผ่นเยื่อมีการขยายตัวกว่าโครงสร้างปกติไปประมาณ  $4.5\%$  ซึ่งโบรอนไนไตรด์และแกรฟีนเกิดความเค้นเพียงประมาณ  $0.015$  หรือ มีการขยายตัวไปเพียง  $1.5\%$  ดังนั้นซิลิซีนจึงมีความไวต่อความดันสูงกว่าสารอีกสองชนิด เหมาะนำไปใช้งานในย่านความดันต่ำ ส่วนโบรอนไนไตรด์และแกรฟีนจะเหมาะกับการใช้งานที่ย่านความดันสูง

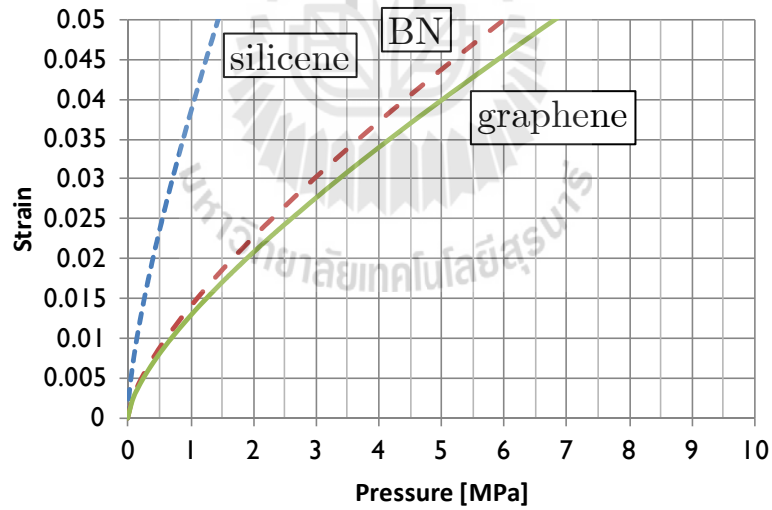


รูปที่ 3.7 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นและความดันที่กระทำกับแผ่นเยื่อโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรฟีน (C) และซิลิซีน (Si) ที่มีช่องเปิดเป็นวงกลมรัศมีขนาด  $1 \mu\text{m}$

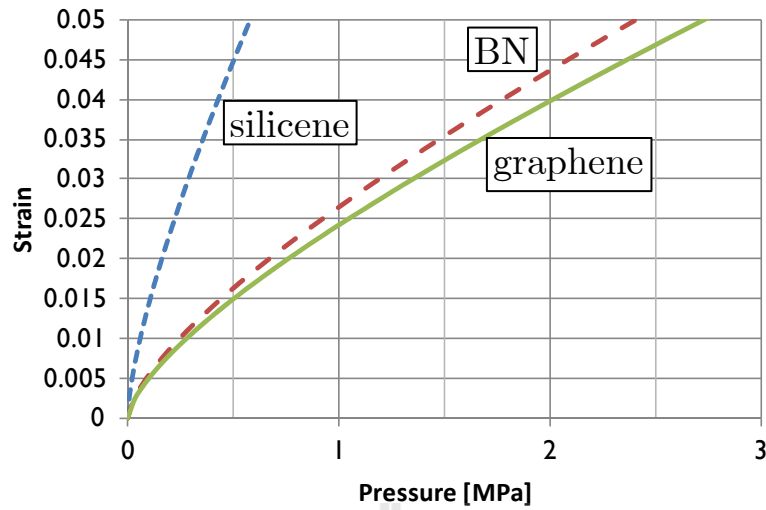
เมื่อศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นและความดันที่ขนาดของช่องเปิดต่าง ๆ ดังรูปที่ 3.8 ถึง 3.10 พบว่าเมื่อช่องเปิดมีขนาดใหญ่มากขึ้น แผ่นเยื่อทั้งสามชนิดจะสามารถผิดรูปได้ง่ายขึ้น โดยความเค้นจะเพิ่มขึ้นตามความดันง่ายขึ้นทำให้ความดันที่ต้องใช้ในการกระทำกับแผ่นเยื่อน้อยลงได้



รูปที่ 3.8 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นและความดันที่กระทำกับแผ่นเยื่อโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรฟีน (C) และซิลิซีน (Si) ที่มีช่องเปิดเป็นวงกลมรัศมีขนาด 2  $\mu\text{m}$



รูปที่ 3.9 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นและความดันที่กระทำกับแผ่นเยื่อโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรฟีน (C) และซิลิซีน (Si) ที่มีช่องเปิดเป็นวงกลมรัศมีขนาด 4  $\mu\text{m}$



รูปที่ 3.10 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นและความดันที่กระทำกับแผ่นเยื่อโบรอนไนไตรด์ (BN) แกรฟีน (C) และซิลิซีน (Si) ที่มีช่องเปิดเป็นวงกลมรัศมีขนาด  $10 \mu\text{m}$

ความสัมพันธ์ที่ได้นี้สามารถใช้ประมาณความเค้นที่เกิดขึ้นเมื่อให้ความดันกับแผ่นเยื่อ ทั้งนี้การวัดความเค้นในวัสดุนั้นอาจจะไม่ตรงไปตรงมานักเนื่องจากเป็นปริมาณที่ไม่สามารถวัดได้โดยตรงจากเครื่องมือ แต่สามารถยืนยันความถูกต้องของระเบียบวิธีการคำนวณนี้ได้จากการเปรียบเทียบลักษณะการผิดรูปของแผ่นเยื่อที่ได้จากการคำนวณเทียบกับลักษณะที่ได้จากกล้องจุลทรรศน์แรงอะตอม ผลการคำนวณนี้สามารถใช้อธิบายลักษณะของช่องเปิดของแผ่นเยื่อที่ขยายขึ้นเมื่อให้ความดัน และเป็นพื้นฐานสำคัญหนึ่งในการศึกษาเรื่องของการขยายตัวเชิงอุณหภาพในวัสดุ 2 มิติ

## บทที่ 4

### บทสรุป

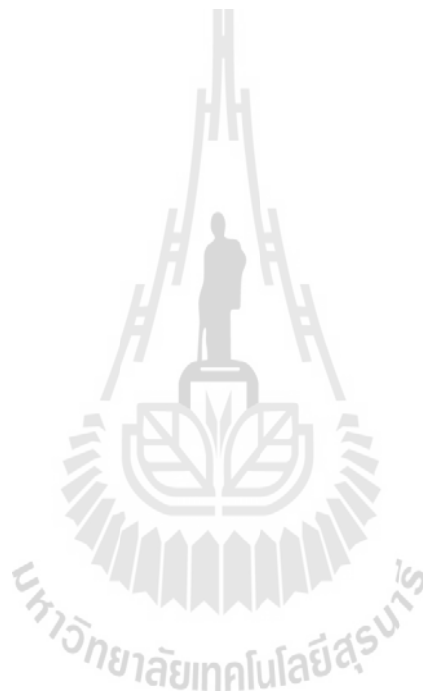
#### สรุปผลการวิจัย

งานวิจัยนี้ได้ทำการศึกษาคุณสมบัติความยืดหยุ่นของแผ่นเยื่อที่มีโครงสร้างเชิงอะตอมแบบ 2 มิติ 3 ชนิด ได้แก่ โครงสร้างของชั้นโบรอนไนไตรด์ แกรฟีน และซิลิซีน ภายใต้เงื่อนไขความเค้นต่าง ๆ (ในช่วง  $-0.2$  ถึง  $0.2$ ) โดยทฤษฎีฟังก์ชันนัลของความหนาแน่นแบบเพิร์สพรีนซิเพิล ซึ่งให้ข้อมูลของการผ่อนคลายโครงสร้างและตำแหน่งอะตอมและพลังงานของระบบ เมื่อกำหนดความเค้นในแนวต่าง ๆ แล้วนำข้อมูลที่ได้อามาวิเคราะห์ด้วยกราฟ 2 มิติ หาความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นในแนวแกน  $x$  และ  $y$  กับพลังงานของระบบ  $E_S$  จะได้กราฟแสดงพื้นผิวของพลังงานความเค้น ทำให้ทราบถึงการผ่อนคลายของโครงสร้างเมื่อได้รับความเค้นตามแกนเดียว คือเมื่อโครงสร้างได้รับความเค้นตามแกน  $x$  หรือ  $y$  จะมีการผ่อนคลายของโครงสร้างตามแกน  $y$  หรือ  $x$  ซึ่งเป็นข้อมูลในการคำนวณค่าอัตราส่วนปัวซองของวัสดุ 2 มิติ และความยืดหยุ่นเชิงระนาบของแผ่นเยื่อ ข้อมูลที่ได้สามารถเปรียบเทียบได้กับการทดสอบแบบโดมความดัน และสามารถนำไปใช้คำนวณเพื่อวิเคราะห์การผิดรูปของแผ่นเยื่อเมื่อให้ความดันที่แตกต่างกันระหว่างด้านทั้งสองของแผ่นเยื่อภายใต้การทดสอบแบบโดมความดัน พฤติกรรมการผิดรูปของแผ่นเยื่ออธิบายได้โดยผลเฉลยของเฮงกี ผลเฉลยนี้ให้รูปแบบของแผ่นเยื่อภายใต้ความดันและให้ความสัมพันธ์ระหว่างความดันและความสูงของโดม ซึ่งสามารถประมาณค่าความเค้นของแผ่นเยื่อได้โดยตรง

งานวิจัยนี้ได้สร้างระเบียบวิธีต้นแบบในการใช้เทคนิคเชิงคำนวณเพื่อหาค่าของคุณสมบัติเชิงกลของวัสดุจริง ควบคู่กับทฤษฎีที่อธิบายการผิดรูปของวัสดุในระดับมหภาคโดยการแก้สมการเพื่อหาผลเฉลยของเฮงกี ดังแสดงในภาคผนวก ก และ ภาคผนวก ข โดยการคำนวณเชิงตัวเลขซึ่งให้ความสัมพันธ์ระหว่างความเค้นและความดัน ของแผ่นเยื่อโบรอนไนไตรด์ แกรฟีน และซิลิซีน โดยซิลิซีนจะมีการเพิ่มขึ้นของความเค้นตามความดันอย่างรวดเร็วเมื่อเทียบกับแกรฟีน ในภาพรวมนั้นแนวโน้มของความเค้นจะเพิ่มขึ้นเมื่อให้ความดันสูงขึ้น และความสัมพันธ์ค่อนข้างเป็นแบบเชิงเส้นในช่วงความดันสูง โดยซิลิซีนจะผิดรูปได้ง่ายกว่าโบรอนไนไตรด์และแกรฟีน ซิลิซีนจึงมีความไวต่อความดันสูงกว่าสารอีกสองชนิด เหมาะนำไปใช้งานในย่านความดันต่ำ ส่วนโบรอนไนไตรด์และแกรฟีนจะเหมาะกับการใช้งานที่ย่านความดันสูง และยังพบว่าเมื่อช่องเปิดมีขนาดใหญ่ขึ้น แผ่นเยื่อทั้งสามชนิดจะสามารถผิดรูปได้ง่ายขึ้น โดยความเค้นจะเพิ่มขึ้นตามความดันง่ายขึ้นทำให้ความดันที่ต้องใช้ในการกระทำกับแผ่นเยื่อน้อยลงได้

ผลลัพธ์ของงานวิจัยนี้สามารถใช้ประมาณความเค้นที่เกิดขึ้นเมื่อให้ความดันกับแผ่นเยื่อ ทั้งนี้การวัดความเค้นในวัสดุนั้นอาจจะไม่ตรงไปตรงมา เนื่องจากความเค้นเป็นปริมาณที่ไม่สามารถ

วัดได้โดยตรงจากเครื่องมือ แต่สามารถยืนยันความถูกต้องของระเบียบวิธีการคำนวณนี้ได้จากการเปรียบเทียบลักษณะการผิดรูปของแผ่นเยื่อที่ได้จากการคำนวณเทียบกับลักษณะที่ได้จากกล้องจุลทรรศน์แรงอะตอม ผลการคำนวณนี้สามารถใช้อธิบายลักษณะของช่องเปิดของแผ่นเยื่อที่ขยายขึ้นเมื่อให้ความดัน และเป็นพื้นฐานสำคัญหนึ่งในการศึกษาเรื่องของการขยายตัวเชิงอุณหภาพในวัสดุ 2 มิติ



## บรรณานุกรม

- [1] Lindley, D. (2004). "Bake, Shake, and Shrink." Physical Review Focus เล่มที่ 14(ฉบับที่: หน้า 21).
- [2] Greve, B. K., K. L. Martin, P. L. Lee, et al. (2010). "Pronounced Negative Thermal Expansion from a Simple Structure: Cubic ScF<sub>3</sub>." Journal of the American Chemical Society เล่มที่ 132(ฉบับที่ 44): หน้า 15496-15498.
- [3] Greve, B. K., K. L. Martin, P. L. Lee, et al. (2011). "ChemInform Abstract: Pronounced Negative Thermal Expansion from a Simple Structure: Cubic ScF<sub>3</sub>." ChemInform เล่มที่ 42(ฉบับที่ 10): หน้า no-no.
- [4] Attfield, J. P. (2011). "Condensed-matter physics: A fresh twist on shrinking materials." Nature เล่มที่ 480(ฉบับที่ 7378): หน้า 465-466.
- [5] Schirber, M. (2011). "New Vibration in Material That Shrinks When Heated." Physics เล่มที่ 4(ฉบับที่: หน้า 90).
- [6] Li, C. W., X. Tang, J. A. Muñoz, et al. (2011). "Structural Relationship between Negative Thermal Expansion and Quartic Anharmonicity of Cubic ScF<sub>3</sub>." Physical Review Letters เล่มที่ 107(ฉบับที่ 19): หน้า 195504.
- [7] Lim, T.-C. (2012). "Negative thermal expansion structures constructed from positive thermal expansion trusses." Journal of Materials Science เล่มที่ 47(ฉบับที่ 1): หน้า 368-373.
- [8] Sadoc, A., M. Body, C. Legein, et al. (2011). "NMR parameters in alkali, alkaline earth and rare earth fluorides from first principle calculations." Physical Chemistry Chemical Physics เล่มที่ 13(ฉบับที่ 41): หน้า.



- [9] Huang, R. (2011). "Graphene: Show of adhesive strength." Nat Nano เล่มที่ 6(ฉบับที่ 9): หน้า 537-538.
- [10] Kresse, G. and J. Furthmüller (1996). "Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set." Computational Materials Science เล่มที่ 6(ฉบับที่ 1): หน้า 15-50.
- [11] Kresse, G. and J. Furthmüller (1996). "Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set." Physical Review B เล่มที่ 54(ฉบับที่ 16): หน้า 11169.
- [12] Kresse, G. and J. Hafner (1994). "Norm-conserving and ultrasoft pseudopotentials for first-row and transition elements." Journal of Physics: Condensed Matter เล่มที่ 6(ฉบับที่ 40): หน้า 8245.
- [13] Jungthawan, S., P. Reunchan and S. Limpijumngong (2013). "Theoretical study of strained porous graphene structures and their gas separation properties." Carbon เล่มที่ 54(ฉบับที่: หน้า 359-364.
- [14] Şahin, H., S. Cahangirov, M. Topsakal, et al. (2009). "Monolayer honeycomb structures of group-IV elements and III-V binary compounds: First-principles calculations." Physical Review B เล่มที่ 80(ฉบับที่ 15): หน้า 155453.
- [15] Hencky, H. (1915). Z. fur Mathematik und Physik เล่มที่ 63(ฉบับที่: หน้า 311.
- [16] Fichter, W. B. (1997). "Some Solutions for the Large Deflections of Uniformly Loaded Circular Membranes." NASA Technical Paper เล่มที่ (ฉบับที่: หน้า 3658.
- [17] Lee, C., X. Wei, J. W. Kysar and J. Hone (2008). "Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene." Science เล่มที่ 321(ฉบับที่ 5887): หน้า 385-388.

[18] Koenig, S. P., N. G. Boddeti, M. L. Dunn and J. S. Bunch (2011). "Ultrastrong adhesion of graphene membranes." Nat Nano เล่มที่ 6(ฉบับที่ 9): หน้า 543-546.

[19] Topsakal, M., S. Cahangirov and S. Ciraci (2010). "The response of mechanical and electronic properties of graphene to the elastic strain." Applied Physics Letters เล่มที่ 96(ฉบับที่ 9): หน้า 091912-091913.



## ภาคผนวก ก

ชุดคำสั่งไพธอนสคริปต์ (Python script) แสดงขั้นตอนการหาผลเฉลยของเฮงกี ภายใต้วามดันสม่ำเสมอ ดังสมการที่ (2.6) ถึง (2.8) ในบทที่ 2

```
#!/usr/bin/python
# Sirichok Jungthawan
# Sch of Phys, Suranaree Univ of Tech
# sirichok@gmail.com for bug report or special request
# uniform pressure hencky's solution by finite difference method
# Apr23,2015
import sys, os

def henckyN(h, N1, N2, r, a):

    s1 = 3*h*(N1 - N2) - 2*(N1 + N2)*r
    s2 = (1 + complex(0,1)*3**.5)*q**2*(-12*h*(N1**2 - N2**2)*r + 4*(N1 +
N2)**2*r**2 + 3*h**2*(3*N1**2 - 6*N1*N2 + 3*N2**2 + 8*a*r**2))
    s3 = 27*h**3*N1**3*q**3 - 81*h**3*N1**2*N2*q**3 + 81*h**3*N1*N2**2*q**3 -
27*h**3*N2**3*q**3 - 54*h**2*N1**3*q**3*r + 54*h**2*N1**2*N2*q**3*r
    s4 = 54*h**2*N1*N2**2*q**3*r - 54*h**2*N2**3*q**3*r +
108*a*h**3*N1*q**3*r**2 + 36*h*N1**3*q**3*r**2 - 108*a*h**3*N2*q**3*r**2 +
36*h*N1**2*N2*q**3*r**2
    s5 = -36*h*N1*N2**2*q**3*r**2 - 36*h*N2**3*q**3*r**2 - 54*h**2*q**2*r**3 -
72*a*h**2*N1*q**3*r**3 - 8*N1**3*q**3*r**3 - 72*a*h**2*N2*q**3*r**3
    s6 = -24*N1**2*N2*q**3*r**3 - 24*N1*N2**2*q**3*r**3 - 8*N2**3*q**3*r**3 -
108*h*N1*q**3*r**4 + 108*h*N2*q**3*r**4
    s7 = -q**2*(24*a*h**2*r**2 + (s1)**2)**3
    s8 = 8*(N1 + N2)**3*q*r**3 - 36*h*(N1 - N2)*q*r**2*(N1**2 + 2*N1*N2 +
N2**2 - 3*r**2) - 27*h**3*(N1 - N2)*q*(N1**2 - 2*N1*N2 + N2**2 + 4*a*r**2)
    s9 = 18*h**2*r*(3*N1**3*q - 3*N1**2*N2*q - 3*N1*N2**2*q + 3*N2**3*q +
3*r**2 + 4*a*N1*q*r**2 + 4*a*N2*q*r**2)
    s10 = complex(q**4*(s7 + (s8 + s9)**2),0)
    s10 = s3 + s4 + s5 + s6 + s10**.5
    s10 = s10**(1./3.)

    henckyN = 1/(24*q*r)*(-2*q*s1 + s2/s10 + (1 - complex(0,1)*3**.5)*s10)
    '''
    print s1
    print s2
    print s3
    print s4
    print s5
    print s6
    print s7
    print s8
    print s9
    print s10
    '''
    return henckyN

#####
if len(sys.argv) < 9:
    print """
vasp2x.py (Jun01,2011)
Usage: hencky.py <u> <q> <N0> <h> <tolerance> <NSW> <N output> <W output>

1 <u> = Poisson's ratio
2 <q> = dimensionless q
3 <N0> = N at r = 0 (default = 0 will get the value from N0.dat)
4 <h> = step size
5 <tolerance> = in iterative method for finding N(r)
6 <NSW> = number of iteration
7 <N output> = filename for N
    """
```

```

8 <W output> = filename for W

    """
    sys.exit()
u    = float(sys.argv[1])
q    = float(sys.argv[2])
Nn   = float(sys.argv[3])
h    = float(sys.argv[4])
tol  = float(sys.argv[5])
nsw  = int(sys.argv[6])

N    = int(1/h)
a    = (3+u)/2
r    = []
N0   = []
N1   = []
err  = []
W    = []

#print 'Number of division is %s' %N

infile=open('N0.dat','r')
for i in range(N+1):
    r.append(i*h)
    line = infile.readline().split()
    N0.append(float(line[1]))
    N1.append(0)
    err.append(0)
    W.append(0)
infile.close()
Nold = N0[N]
if Nn > 0:
    Nn = Nn/N0[0]
    for i in range(N+1):
        N0[i] = N0[i]*Nn
for i in range(N+1):
    N1[i] = N0[i]
#####

errmax = 10
j = 1
while errmax > tol:
    for i in range(N-1,-1,-1):
        if i > 0:
            N1[i]=henckyN(h, N0[i-1], N1[i+1], r[i], a).real
        else:
            N1[0]=(18*N1[1]-9*N1[2]+2*N1[3])/11
            err[i]=abs(N1[i]-N0[i])
    #    print i, N1[i], err[i]
    for i in range(N+1):
        N0[i] = N1[i]
    errmax = max(err)
    j = j + 1
    print j

k = 0
Ndiff = 1.
while ((k < nsw) and (Ndiff > tol)):
    k = k+1
    # compute W[0]
    #for i in range(N+1)
    W[0] = 0.
    for j in range(1,N):
        if j%2 == 1:
            W[0]=W[0]+4*r[j]/(2*N1[j])
        else:
            W[0]=W[0]+2*r[j]/(2*N1[j])
    W[0]=(h/3.)*(1/(2*N1[N])+W[0])

    for j in range(N):

```

```

    f0=r[j]/(2*N1[j])
    f1=(r[j]+r[j+1])/(2*(N1[j]+N1[j+1]))
    f2=r[j+1]/(2*N1[j+1])
    W[j+1]=W[j]-(f0+4*f1+f2)*h/6
#   print '%i W[0] = ' %(k+1), W[0], ' and W[N] = ', W[N]
    W[N] = 0
    N1[N] = -18*W[N-1]+9*W[N-2]-2*W[N-3]
    N1[N] = N1[N] + 18*r[N-1]*N1[N-1]-9*r[N-2]*N1[N-2]+2*r[N-3]*N1[N-3]
    N1[N] = N1[N]/(11-6*u*h)
    Ndiff = abs(N1[N]-Nold)
#   print 'N[N] old = ', Nold, ', new = ', N1[N], ', diff = ', N1[N]-Nold
    print '%4i N[0] = %2.8f, N[N] = %2.8f, diff = %2.8E' %(k, N1[0], N1[N],
Ndiff)

    if nsw > 1:
        for j in range(N+1):
            N0[j] = N1[j]
        Nold = N0[N]
        errmax = 10
        j = 1
        while errmax > tol:

            for i in range(N-1,-1,-1):
                if i > 0:
                    N1[i]=henckyN(h, N0[i-1], N1[i+1], r[i], a).real
                else:
                    N1[0]=(18*N1[1]-9*N1[2]+2*N1[3])/11
                    err[i]=abs(N1[i]-N0[i])
            #   print i, N1[i], err[i]
            for i in range(N+1):
                N0[i] = N1[i]
            errmax = max(err)
            j = j + 1
#   print j

#####

Nfile=open('%s' %sys.argv[7],'w')
Wfile=open('%s' %sys.argv[8],'w')
for i in range(N+1):
    Nfile.write('%21.16f %21.16f\n' %(r[i], N1[i]))
    Wfile.write('%21.16f %21.16f\n' %(r[i], W[i]))
Nfile.close()
Wfile.close()

#print '>>> DONE'
sys.exit()

```

## ภาคผนวก ข

ชุดคำสั่งไพธอนสคริปต์ (Python script) แสดงขั้นตอนการคำนวณความเค้นของแผ่นเยื่อ ดังสมการที่ (2.9) ถึง (2.11) ที่มีรูปแบบของการผิดรูปที่ได้จากผลเฉลยของเฮงกีภายใต้ความดันสม่ำเสมอ ดังสมการที่ (2.6) ถึง (2.8) ในบทที่ 2

```
#!/usr/bin/python
# Sirichok Jungthawan
# Sch of Phys, Suranaree Univ of Tech
# sirichok@gmail.com for bug report or special request
# uniform pressure hencky's solution by finite difference method
# Apr23,2015
import sys, os

#####
if len(sys.argv) < 4:
    print """
vasp2x.py (Jun01,2011)
Usage: strain.py <u> <q> <h>

1 <u> = Poisson's ratio
2 <q> = dimensionless q
3 <h> = step size

"""
    sys.exit()
u = float(sys.argv[1])
q = float(sys.argv[2])
h = float(sys.argv[3])

N = int(1/h)
a = (3+u)/2
r = []
N0 = []
W0 = []
Np = []
Wp = []
Nt = []
Nr = []
e = []
#print 'Number of division is %s' %N

Nfile=open('N.dat','r')
Wfile=open('W.dat','r')

for i in range(N+1):
    r.append(i*h)
    Nline = Nfile.readline().split()
    N0.append(float(Nline[1]))
    Wline = Wfile.readline().split()
    W0.append(float(Wline[1]))
    Np.append(.0)
    Wp.append(.0)
    Nt.append(.0)
    Nr.append(.0)
    e.append(.0)
Nfile.close()
Wfile.close()

Wp[0] = .0
for i in range(N+1):
    Nr[i] = q*N0[i]
```

```

for i in range(N+1):
    N0[i] = r[i]*N0[i]

for i in range(N+1):
    if i == 0:
#         Wp[i]=(-W0[i+2]+4*W0[i+1]-3*W0[i])/(2*h)
#         Np[i]=(2*N0[i+3]-9*N0[i+2]+18*N0[i+1]-11*N0[i])/(6*h)
#         Wp[i]=(2*W0[i+3]-9*W0[i+2]+18*W0[i+1]-11*W0[i])/(6*h)
    elif i == N:
#         Np[i]=(3*N0[i]-4*N0[i-1]+N0[i-2])/(2*h)
#         Wp[i]=(3*W0[i]-4*W0[i-1]+W0[i-2])/(2*h)
#         Np[i]=(11*N0[i]-18*N0[i-1]+9*N0[i-2]-2*N0[i-3])/(6*h)
#         Wp[i]=(11*W0[i]-18*W0[i-1]+9*W0[i-2]-2*W0[i-3])/(6*h)
    else:
#         Np[i]=(N0[i+1]-N0[i-1])/(2*h)
#         Wp[i]=(W0[i+1]-W0[i-1])/(2*h)

for i in range(N+1):
    Nt[i] = q*(Np[i] - r[i]*Wp[i])
for i in range(N):
    e[i] = abs((1+u**2)*Nt[i]*Nr[i] - u*(Nt[i]**2 + Nr[i]**2))**.5
Ntfile=open('Nt.dat','w')
Nrfile=open('Nr.dat','w')
efile=open('strain.dat', 'w')
for i in range(N+1):
    Ntfile.write('%21.16f %21.16f\n' %(r[i], Nt[i]))
    Nrfile.write('%21.16f %21.16f\n' %(r[i], Nr[i]))
    efile.write('%21.16f %21.16f\n' %(r[i], e[i]))
Ntfile.close()
Nrfile.close()
efile.close()
###average by 2 pi r weight
for i in range(N):
    e[i] = e[i]*r[i]

ea = .0
for i in range(1,N):
    if i%2 == 1:
        ea = ea + 4*e[i]
    else:
        ea = ea + 2*e[i]
ea = 2* (ea + e[0] + e[N])*h/3

print ' %3.8f %3.8f average strain = %3.12f'%(u, q, ea)

#print '>>> DONE'
sys.exit()

```

## ประวัติผู้วิจัย

### หัวหน้าโครงการ

รองศาสตราจารย์ ดร.ศิริโชค จิ่งถาวรธรณ

Assoc. Prof. Dr. Sirichok Jungthawan

สาขาวิชาฟิสิกส์ สำนักวิชาวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

111 ถนนมหาวิทยาลัย อำเภอเมือง จังหวัดนครราชสีมา 30000

โทรศัพท์ 044224319 E-mail: sirichok@sut.ac.th

### ประวัติการศึกษา

Ph.D (Physics) Suranaree University of Technology, Thailand (2551)

วท.บ. (ฟิสิกส์) มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ ประสานมิตร (2544)

### สาขาวิชาการที่มีความชำนาญพิเศษ

ฟิสิกส์สสารควบแน่น

### การเผยแพร่ผลงานวิจัย

T. Eknapakul, P. D. C. King\*, M. Asakawa, P. Buaphet, R.-H. He, S.-K. Mo, H. Takagi, K. M. Shen, F. Baumberger, T. Sasagawa, S. Jungthawan, and W. Meevasana\*, Electronic structure of a quasi-freestanding MoS<sub>2</sub> monolayer, *Nano Letters* 14, 1312-1316 (2014)

Sirichok Jungthawan\*, Pakpoom Reunchan, and Sukit Limpijumnong, Theoretical study of strained porous graphene structures and their gas separation properties, *Carbon* 54, 359-364 (2013)

Sirichok Jungthawan\*, Sukit Limpijumnong, and Jer-Lai Kuo, Electronic structures of graphene/boron nitride sheet superlattices, *Phys. Rev. B* 84, 235424 (2011)

Sirichok Jungthawan\*, Kwiseon Kim, and Sukit Limpijumnong, The effects of unit cell size on the bandgap range in the direct enumeration study of AlGaInP alloys, *Comp. Mater. Sci.* 49, S114 (2010)

Sirichok Jungthawan, Sukit Limpijumnong\*, Reuben Collins, Kwiseon Kim, Peter Graf, and John Turner, Direct enumeration studies of band-gap properties of alloys, *J. Appl. Phys.* 105, 123531 (2009).



**ผู้ร่วมวิจัย**

นางสาวยุวดี สุวรรณ

Ms. Yuwadee Suwan

สาขาวิชาฟิสิกส์ สำนักวิชาวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

111 ถนนมหาวิทยาลัย อำเภอเมือง จังหวัดนครราชสีมา 30000

โทรศัพท์ 044224319 E-mail: y.suwan09@gmail.com

**ประวัติการศึกษา**

ปัจจุบันกำลังศึกษาระดับปริญญาโท สาขาวิชาฟิสิกส์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

วท.บ. (ฟิสิกส์) มหาวิทยาลัยอุบลราชธานี (2553)

สาขาวิชาการที่มีความชำนาญพิเศษ

ฟิสิกส์สสารควบแน่น

