THE GEOMETRY AND ELECTRONIC STRUCTURE OF NANOTUBES AND THEIR APPLICATION AS CHARGE STORAGE AND TRANSPORT DEVICES

ANURAK UDOMVECH

A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT
OF THE REQUIREMENTS FOR
THE DEGREE OF MASTER OF SCIENCE (PHYSICS)
FACULTY OF GRADUATE STUDIES
MAHIDOL UNIVERSITY
2003

ISBN 974-04-3321-9

COPYRIGHT OF MAHIDOL UNIVERSITY

โครงสร้างเชิงเรขาคณิตและเชิงอิเล็กตรอนของท่อนาโนของคาร์บอนกับการใช้งานเพื่อกักเก็บและขนส่งประจุ (THE GEOMETRY AND ELECTRONIC STRUCTURE OF NANOTUBES AND THEIR APPLICATION AS CHARGE STORAGE AND TRANSPORT DEVICES).

อนุรักษ์ อุดมเวช 4137694 SCPY/M

วท.ม. (ฟิสิกส์)

คณะกรรมการควบคุมวิทยานิพนธ์ : ธีรเกียรติ์ เกิดเจริญ, Ph.D. (PHYSICAL CHEMISTRY), วุฒิชัย พาราสุข, Ph.D. (PHYSICAL CHEMISTRY)

บทคัดย่อ

ท่อนาโนของคาร์บอนเกิดจากจากการม้วนแผ่นคาร์บอนเป็นท่อแบบไม่มีรอยตะเข็บและมีเส้นผ่าศูนย์กลางระดับนาโนเมตร การศึกษานี้จะพิจารณาเฉพาะการม้วนแผ่นคาร์บอน 1 แผ่นเป็นท่อนาโนของคาร์บอนแบบผนังเดี่ยวซึ่งมีโครงสร้างแบบ zigzag เพื่อศึกษาลักษณะโครงสร้างเชิงเรขาคณิตและโครงสร้างเชิงอิเล็คตรอนของท่อนาโนของคาร์บอน โดยใช้ระเบียบวิธีกลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์เชิงโมเลกุล จากการศึกษาพบว่าโครงสร้างเชิงเรขาคณิตของท่อนาโนของคาร์บอนแบบผนังเดี่ยวได้รับผลกระทบจากการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างโดยการปิดหัวท้ายท่อนาโนของคาร์บอนแบบผนังเดี่ยวที่แตกต่างกัน การเพิ่มขนาดความยาวของท่อนาโนของคาร์บอนทั้งแบบปลายเปิดและแบบปลายปิดทำให้สมบัติการนำไฟฟ้าของท่อนาโนของคาร์บอนดีขึ้นและมีการสะสมของประจุอิเล็คตรอนบริเวณหมวกทั้งสองข้างของท่อนาโนของคาร์บอนแบบปลายปิด

ได้ศึกษาถึงอันตรกิริยาเมื่อเคลื่อนย้ายลิเธียมไอออน (Li^+) ผ่านผนังเดี่ยวของท่อนาโนของคาร์บอนเข้าสู่ภายในท่อกลวงทำให้ทราบว่ารูปร่างของพลังงานศักย์มีลักษณะเป็นบ่อศักย์ 2 บ่อ และทำให้ทราบว่าพลังงานศักย์ที่บริเวณผนังของท่อนาโนมีค่าสูงซึ่งไม่ยอมให้ลิเธียมไอออนเคลื่อนผ่านได้ และเกิดการถ่ายเทอิเล็คตรอนจากท่อนาโนของคาร์บอนแบบผนังเดี่ยวไปสู่อะตอมของลิเธียมไอออน

75 หน้า. ISBN 974-04-3321-9

THE GEOMETRY AND ELECTRONIC STRUCTURE OF NANOTUBES AND THEIR APPLICATION AS CHARGE STORAGE AND TRANSPORT DEVICES.

ANURAK UDOMVECH 4137694 SCPY/M

M.Sc. (PHYSICS)

THESIS ADVISORS : TEERAKIAT KERDCHAROEN, Ph.D. (PHYSICAL CHEMISTRY), VUDHICHAI PARASUK, Ph.D. (PHYSICAL CHEMISTRY)

ABSTRACT

Carbon nanotubes are a seamlessly rolled-up single shell of graphene sheet that have a diameter of a few nanometers. This research focused on single-wall carbon nanotubes (SWNTs) that have a zigzag shape. The geometry and electronic structure of open- and closed-end (9,0) zigzag nanotubes was studied. The dependence of geometrical parameters, the HOMO-LUMO gaps and charge distribution on the SWNTs length were investigated using molecular mechanics, several ab-initio and semi-empirical quantum computational techniques. It was found that the geometry of SWNTs is effected by varying tubule length and if the tube ends are open and capped. The results of energy gap suggest that both open- and closed–end finite–sized SWNTs are a semiconductor, and capping also strongly effects the electronic structure of SWNTs. It was found that the electronic charge density slightly accumulates at the two ends of closed SWNTs.

Li ion penetration through the side wall of SWNTs was studued by density functional methods. Li ion interaction potential inside the SWNTs had a double-well shape. It was found that a Li ion should not simply pass through a nanotube wall due to a high potential barrier at the wall. Thus, Li ion would penetrate through the hexagon rather than bonding topology due to a very large difference of potenial barriers. Charge transfer from SWNT to Li ion was observed.

KEY WORDS : CARBON NANOTUBES / NANOTUBES / SWNT / NANOTECHNOLOGY / QUANTUM CALCULATION / SEMI–EMPIRICAL / DENSITY FUNCTIONAL

75 p. ISBN 974-04-3321-9