

ชื่อเรื่อง	การทำนายสมบัติเทอร์โมอิเล็กทริกของ CaMnO_3 เติมห่อนานาโนคาร์บอน ด้วยวิธีประยุกต์โมเลกุล
ผู้วิจัย	นายมีนา ฤทธิธรรม
ที่ปรึกษา	รองศาสตราจารย์ ดร. ทศวรรษ สีตะวัน
ปริญญา	วท.ม. (ฟิสิกส์)
สถาบัน	มหาวิทยาลัยราชภัฏสกลนคร
ปีที่พิมพ์	2559

บทคัดย่อ

แคลเซียมแมงกานีสออกไซด์มีสัมประสิทธิ์ซีเบกสูง สภาพนำความร้อนและสภาพนำไฟฟ้าต่ำ งานวิจัยนี้ศึกษาในเชิงคำนวณเพื่อเพิ่มสภาพนำไฟฟ้าของแคลเซียมแมงกานีสออกไซด์โดยการเติมห่อนานาโนคาร์บอน ด้วยวิธีโมเลกุล ซึ่งแบ่งออกเป็น 2 กรณีคือ แคลเซียมแมงกานีสออกไซด์เติมห่อนานาโนคาร์บอน และแทนที่แคลเซียมด้วยคาร์บอน การคำนวณประกอบด้วย โครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ สมบัติเชิงความร้อน และสมบัติเทอร์โมอิเล็กทริก

ผลการวิจัยพบว่า แคลเซียมแมงกานีสออกไซด์เติมห่อนานาโนคาร์บอนมีค่าสภาพนำไฟฟ้า ตัวแปรกำลัง และไดเมนชันเลสฟิสิกเกอร์ออฟเมอริส (ZT) เพิ่มขึ้นเป็น 86% 73% และ 33% ตามลำดับ ในขณะที่เดียวกัน สภาพนำความร้อนและสัมประสิทธิ์ซีเบกมีค่าลดลงเป็น 40 และ 50% ตามลำดับ กรณีแทนที่แคลเซียมด้วยคาร์บอนมีค่าสภาพนำไฟฟ้า และตัวแปรกำลังเพิ่มขึ้นเป็น 70% และ 75% ตามลำดับ ในขณะที่เดียวกันสภาพนำความร้อนและสัมประสิทธิ์ซีเบกมีค่าลดลงเป็น 41% และ 41% ตามลำดับ และมี $ZT \pm 33\%$ ดังนั้นห่อนานาโนคาร์บอนสามารถปรับปรุงสมบัติเทอร์โมอิเล็กทริกของแคลเซียมแมงกานีสออกไซด์ได้

คำสำคัญ แคลเซียมแมงกานีสออกไซด์เติมห่อนานาโนคาร์บอน วัสดุเทอร์โมอิเล็กทริก โครงสร้างอิเล็กทรอนิกส์ สมบัติเชิงความร้อน สมบัติเทอร์โมอิเล็กทริก

TITLE Prediction on thermoelectric properties of CNTs-added CaMnO_3
by applied molecular method

AUTHOR Mr. Meena Rittirum

ADVISOR Assoc. Prof. Dr. Tosawat Seetawan

DEGREE M.Sc. (Physics)

INSTITUTION Sakon Nakhon Rajabhat University

YEAR 2016

ABSTRACT

According to CaMnO_3 (CMO) properties have been high Seebeck coefficient, low thermal conductivity and low electrical conductivity. Therefore, this work studies enhanced electrical conductivity of carbon nanotubes (CNTs)-added CMO by molecular simulation method. The study was composed two cases including CNTs-added CMO and C-substitute Ca. Electronic structure, thermal properties, and thermoelectric properties were determined.

The results in first case show that the electrical conductivity, power factor, and dimensionless figure of merit (ZT) of CNTs-added CMO have been an increase of 86%, 73%, and 33%, respectively, while the thermal conductivity and Seebeck coefficient have been a decrease of 40% and 50%. Another important finding was that the electrical conductivity and power factor of C-substitute Ca have been an increase of 70% and 75%, respectively, while the thermal conductivity and Seebeck coefficient have been a decrease of 41%. The most interesting finding was that ZT was exhibited $\pm 33\%$. Therefore, the CNTs can be improved TE properties of CMO.

Keywords Carbon nanotubes-added CaMnO_3 , Thermoelectric materials,
Electronic structure, Thermal properties, Thermoelectric properties