ชื่อเรื่อง : การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอฟทีของการดูดซับแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีน บนท่อนาโนคาร์บอนผนังเดี่ยวที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ผู้วิจัย : ประยุทธ บัวแสง **ปริญญา :** วท.ม. (เคมีศึกษา)

อาจารย์ที่ปรึกษา : ผศ.ดร.ฌาณุกรณ์ ทับทิมใส อาจารย์ที่ปรึกษาหลัก

ดร.วันดี รักไร่ อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม 2559

บทคัดย่อ

ได้ทำการศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงานและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันและการดูดซับแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีน โดยใช้ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ ของทฤษฎี ผลการคำนวณพบว่า ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียมมีความเสถียรมากกว่าโมลิบดีนัม เทคนีเชียม ไนโอเบียม เซอร์โคเนียม ไทเทเนียม วาเนเดียม แมงกานิส สแกนเดียมและอิตเทรียม ตามลำดับ ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียมสามารถดูดซับแอมโมเนียได้ดีกว่าไทเทเนียม วาเนเดียมและสแกนเดียม ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมวาเนเดียมสามารถดูดซับฟอสฟีนและอาร์ซีนได้ดีกว่าโครเมียม ไทเทเนียมและสแกนเดียม ตามลำดับ ดังนั้น ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน จึงมีความเหมาะสมที่จะนำไปใช้ในการตรวจจับหรือดูดซับแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีน

TITLE : A DFT investigation of NH_3, PH_3 and AsH_3 adsorptions on transition metal doped on single-walled carbon nanotubes.

AUTHOR : Prayut Buasaeng **DEGREE** : M.Sc. (Chemistry Education)

ADVISORS : Asst. Prof. Dr. Chanukorn Tabtimsai Major Advisor

Dr.Wandee Rakrai Co-Advisor

RAJABHAT MAHA SARAKHAM UNIVERSITY, 2016

ABSTRACT

Structural, energetic, and electronic properties of transition metals doped carbon nanotube and their NH_3, PH_3 and AsH_3 adsorptions were investigated using the density functional theory method at B3LYP/LanL2DZ level of theory. The calculation results indicated that Cr displays stronger interaction with carbon nanotube than Mo, Tc, Nb, Zr, Ti, V, Mn, Sc, and Y, respectively. The adsorption abilities of Cr-doped carbon nanotube displays stronger interaction with NH_3 than Ti, Sc, and V, respectively. The adsorption abilities of PH_3 and AsH_3 on V-doped SWCNT were stronger than Cr, Ti, and Sc-dope SWCNT respectively. Therefore transition metal-doped carbon nanotube can be used for detections or adsorptions NH_3, PH_3 and AsH_3.