

## สารบัญ

หัวเรื่อง	หน้า
บทคัดย่อ .....	ง
ABSTRACT .....	จ
กิตติกรรมประกาศ .....	ฉ
สารบัญตาราง .....	ฅ
สารบัญภาพ .....	ญ
สารบัญตารางภาคผนวก .....	๗
สารบัญภาพภาคผนวก .....	๘
บทที่ 1 บทนำ .....	1
ความเป็นมาและมูลเหตุจูงใจในการวิจัย .....	1
วัตถุประสงค์ .....	2
ขอบเขตการวิจัย .....	2
นิยามศัพท์เฉพาะ .....	3
ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับการวิจัย .....	4
บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง .....	5
นาโนเทคโนโลยี .....	5
โลหะทรานซิชัน .....	12
แก๊ส .....	16
กระบวนการดูดซับ (Adsorption process) .....	18
เคมีคำนวณ ( Computational chemistry) .....	19
โครงสร้างโมเลกุลและพลังงานโมเลกุล (Molecular structure and molecular energy) .....	24
พลังงาน HOMO, LUMO, ค่าผลต่างพลังงานและค่าเคมีคอลอินเดกซ์ (Cheical index) .....	25
ความหนาแน่นของสถานะ (Density of state) .....	26
งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง .....	27
บทที่ 3 วิธีดำเนินการวิจัย .....	38
เครื่องมือที่ใช้ในการคำนวณ .....	38

หัวเรื่อง	หน้า
โปรแกรมที่ใช้ในการคำนวณ .....	38
แบบจำลองโมเลกุลที่ใช้ในการศึกษา .....	39
ขั้นตอนการคำนวณ .....	41
บทที่ 4 ผลและอภิปรายผล .....	44
สมบัติทางโครงสร้าง พลังงานการยึดจับและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ ของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	44
สมบัติทางโครงสร้าง พลังงานการดูดซับและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ ของการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	53
บทที่ 5 สรุปผลการดำเนินการวิจัย .....	64
สมบัติทางโครงสร้าง พลังงานการยึดจับและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	64
สมบัติทางโครงสร้าง พลังงานการดูดซับและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	65
ข้อเสนอแนะ .....	66
บรรณานุกรม .....	67
ภาคผนวก ก การวิเคราะห์ข้อมูล .....	71
ภาคผนวก ข โครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนและประจุ Natural bond orbital (NBO) .....	74
ประวัติผู้วิจัย .....	96

## สารบัญตาราง

ตารางที่		หน้า
1	สมบัติทางโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	47
2	พลังงานการยึดจับ พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุด ที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงานและผลต่างของแถบพลังงาน .....	48
3	ประจุ NBO ของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	49
4	ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอน แบบปกติและที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	55
5	พลังงานการดูดซับพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่พลังงานต่ำสุดที่ไม่มี อิเล็กตรอนบรรจุอยู่แถบพลังงานและค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วน .....	58

## สารบัญญภาพ

ภาพที่		หน้า
1	โครงสร้างแกรไฟต์ .....	7
2	โครงสร้างเพชร .....	8
3	บัลล์บอลลหรือบัคมิไนสเตอร์ฟูลเลอร์รีน .....	9
4	โครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนผนังเดี่ยวชนิดต่าง ๆ .....	10
5	โครงสร้างท่อนาโนคาร์บอนแบบต่าง ๆ .....	11
6	ความหนาแน่นของสถานะของท่อนาโนคาร์บอน .....	27
7	การเติมโลหะแทรนซิชันหมู่ VIII บนท่อนาโนคาร์บอนผนังเดี่ยว .....	28
8	การดูดซับไฮโดรเจนบนท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติและแบบผิดปกติ .....	29
9	การดูดซับไฮโดรเจนบนท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติและแบบผิดปกติ ที่มีการเติมเหล็ก .....	30
10	การเติมโลหะโคบอลต์โรเดียมและอิริเดียมบนท่อนาโนคาร์บอนผนังเดี่ยว .....	31
11	การดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนผนังเดี่ยวที่มี การเติมโลหะ 1/21/12 โคบอลต์โรเดียมและอิริเดียม .....	32
12	การดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนผนังเดี่ยวที่มี การเติมโลหะโคบอลต์โรเดียมและอิริเดียม .....	33
13	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับซัลเฟอร์ไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอน ที่มีการเติมแพลเลเดียมและทองคำ .....	34
14	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับซัลเฟอร์ไดออกไซด์ 2 โมเลกุลบนท่อนาโน คาร์บอนที่มีการเติมแพลเลเดียมและทองคำ .....	34
15	โครงสร้างที่ใช้ในการศึกษา (a) โครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ (b) โครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแพลเลเดียม (c), (d), (e), (f) และ (g) เป็นโครงสร้างของการดูดซับ SO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> S, SOF <sub>2</sub> , SO <sub>2</sub> F <sub>2</sub> และ CH <sub>4</sub> .....	35
16	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊ส SO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> S, SOF <sub>2</sub> , SO <sub>2</sub> F <sub>2</sub> และ CH <sub>4</sub> บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแพลเลเดียม .....	35

ภาพที่	หน้า
17 การเติมแพลเลเดียมลงตำแหน่งว่างบนท่อนาโนคาร์บอนชนิดผนังเดี่ยว .....	36
18 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนบนท่อนาโนคาร์บอน ที่มีการเติมแพลเลเดียมบนตำแหน่งว่าง .....	36
19 แสดงโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติม Al/N โดย (a) ท่อนาโนคาร์บอน ปกติ, (b) ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติม Al, (c) ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติม N และ (d) ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติม Al/N .....	37
20 แบบจำลองทางโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอน .....	39
21 แบบจำลองทางโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน .....	40
22 แบบจำลองทางโครงสร้างการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอน (a) แบบปกติ, (b) สแกนเดียม, (c) ไทเทเนียม, (d) วาเนเดียมและ (e) โครเมียม .....	41
23 แบบจำลองทางโครงสร้างการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนาโนคาร์บอน (a) แบบปกติ, (b) สแกนเดียม, (c) ไทเทเนียม, (d) วาเนเดียมและ (e) โครเมียม .....	41
24 แบบจำลองทางโครงสร้างการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอน (a) แบบปกติ, (b) สแกนเดียม, (c) ไทเทเนียม, (d) วาเนเดียมและ (e) โครเมียม .....	41
25 โปรแกรม Gaussview ที่ใช้ในการเตรียมโครงสร้างท่อนาโนคาร์บอนและ ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะ .....	42
26 โครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ .....	45
27 แสดงโครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน (a) สแกนเดียม, (b) อิตเทรียม, (c) ไทเทเนียม, (d) เซอร์โคเนียม, (e) วาเนเดียม, (f) ไนโอเบียม, (g) โครเมียม, (h) โมลิบดีนัม, (i) แมงกานีสและ (j) เทกนีสียม .....	46
28 การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งออร์บิทัลที่ไม่มี อิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ .....	50
29 การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่ง ออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติม โลหะทรานซิชัน. (a) Sc-SWCNT, (b) Y-SWCNT, (c) Ti-SWCNT, (d) Zr-SWCNT, (e) V-SWCNT, (f) Nb-SWCNT, (g) Cr-SWCNT, (h) Mo-SWCNT, (i) Mn-SWCNT และ (j) Tc-SWCNT .....	51

ภาพที่	หน้า
30 ความหนาแน่นสถานะ (a) SWCNT, (b) Sc-SWCNT, (c)Y-SWCNT, (d)Ti-SWCNT, (e)Zr-SWCNT, (f) V-SWCNT, (g) Nb-SWCNT, (h) Cr-SWCNT, (i) Mo-SWCNT, (j) Mn-SWCNT และ (k) Tc-SWCNT .....	52
31 โครงสร้างการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอน (a) NH <sub>3</sub> /SWCNT, (b) NH <sub>3</sub> /Sc-SWCNT, (c) NH <sub>3</sub> /Ti-SWCNT,(d) NH <sub>3</sub> /V-SWCNT และ (e) NH <sub>3</sub> /Cr-SWCNT .....	54
32 โครงสร้างการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนาโนคาร์บอน(a) PH <sub>3</sub> /SWCNT, (b) PH <sub>3</sub> /Sc-SWCNT, (c) PH <sub>3</sub> /Ti-SWCNT, (d) PH <sub>3</sub> /V-SWCNT และ (e) PH <sub>3</sub> /Cr-SWCNT .....	54
33 โครงสร้างการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอน (a) AsH <sub>3</sub> /SWCNT, (b) AsH <sub>3</sub> /Sc-SWCNT, (c) AsH <sub>3</sub> /Ti-SWCNT,(d) AsH <sub>3</sub> /V-SWCNT และ (e) AsH <sub>3</sub> /Cr-SWCNT .....	54
34 การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน(a) NH <sub>3</sub> /SWCNT, (b) NH <sub>3</sub> /Sc-SWCNT,(c) NH <sub>3</sub> /Ti-SWCNT,(d) NH <sub>3</sub> /V-SWCNT และ (e) NH <sub>3</sub> /Cr-SWCNT .....	59
35 การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะ (a) PH <sub>3</sub> /SWCNT, (b) PH <sub>3</sub> /Sc-SWCNT, (c) PH <sub>3</sub> /Ti-SWCNT,(d) PH <sub>3</sub> /V-SWCNT และ (e) PH <sub>3</sub> /Cr-SWCNT .....	60
36 การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะ (a)AsH <sub>3</sub> /SWCNT, (b) AsH <sub>3</sub> /Sc-SWCNT, (c) AsH <sub>3</sub> /Ti-SWCNT, (d) AsH <sub>3</sub> /V-SWCNT (e)และ AsH <sub>3</sub> /Cr-SWCNT .....	61
37 ความหนาแน่นสถานะ (DOS) (a) NH <sub>3</sub> /SWCNT, (b) NH <sub>3</sub> /Sc-SWCNT, (c) NH <sub>3</sub> /Ti-SWCNT, (d) NH <sub>3</sub> /V-SWCNT และ (e) NH <sub>3</sub> /Cr-SWCNT .....	62

ภาพที่	หน้า
38 ความหนาแน่นสถานะ (a) $\text{PH}_3/\text{SWCNT}$ , (b) $\text{PH}_3/\text{Sc-SWCNT}$ , (c) $\text{PH}_3/\text{Ti-SWCNT}$ , (d) $\text{PH}_3/\text{V-SWCNT}$ และ (e) $\text{PH}_3/\text{Cr-SWCNT}$ .....	63
39 ความหนาแน่นสถานะ (a) $\text{AsH}_3/\text{SWCNT}$ , (b) $\text{AsH}_3/\text{Sc-SWCNT}$ , (c) $\text{AsH}_3/\text{Ti-SWCNT}$ , (d) $\text{AsH}_3/\text{V-SWCNT}$ และ (e) $\text{AsH}_3/\text{Cr-SWCNT}$ .....	63

## สารบัญตารางภาคผนวก

ตารางภาคผนวกที่

หน้า

- |   |  |    |
|---|--|----|
| 1 | คำนวณพลังงานการยึดจับและพลังงานการดูดซับ ..... | 72 |
| 2 | คำนวณแถบพลังงาน .....                          | 73 |



## สารบัญภาพภาคผนวก

ภาพภาคผนวกที่	หน้า
1 โครงสร้างของท่อนานโนคาร์บอนที่ตัดอะตอมของคาร์บอนในตำแหน่งที่จะทำการเติมโลหะแทรนซิชันออก .....	75
2 ประจุ NBOของท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม .....	75
3 ประจุ NBOของท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมไทเทเนียม .....	76
4 ประจุ NBOของท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมวานาเดียม .....	76
5 ประจุ NBO ของท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียม .....	77
6 ประจุ NBOของท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมแมงกานีส .....	77
7 ประจุ NBO ของท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมอิตเทรียม .....	78
8 ประจุ NBO ของท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมเซอร์โคเนียม .....	78
9 ประจุ NBO ของท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมไนโอเบียม .....	79
10 ประจุ NBO ของท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมโมลิบดีนัม .....	79
11 ประจุ NBO ของท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมเทคนีเทียมเซียม .....	80
12 ประจุ NBO ของการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนานโนคาร์บอนแบบปกติ .....	81
13 ประจุ NBO ของการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม .....	82
14 ประจุ NBOของการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมไทเทเนียม .....	83
15 ประจุ NBO ของการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมวานาเดียม .....	84
16 ประจุ NBOของการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียม .....	85
17 ประจุ NBOของการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนานโนคาร์บอนแบบปกติ .....	86
18 ประจุ NBO ของการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม .....	87
19 ประจุ NBO ของการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมไทเทเนียม .....	88

ภาพภาคผนวกที่	หน้า
20 ประจุ NBO ของการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติม วานาเดียม .....	89
21 ประจุ NBO ของการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติม โครเมียม .....	90
22 ประจุ NBO ของการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ .....	91
23 ประจุ NBO ของการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติม สแกนเดียม .....	92
24 ประจุ NBO ของการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติม ไทเทเนียม .....	93
25 ประจุ NBO ของการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติม วานาเดียม .....	94
26 ประจุ NBO ของการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียม .....	95