บทที่ 1

บทนำ

ความเป็นมาและมูลเหตุจูงใจในการวิจัย

นาโนเทคโนโลยีเป็นเทคโนโลยีที่ทั่วโลกให้ความสำคัญสูง ซึ่งเป็นเทคโนโลยีที่มีบทบาทมากขึ้นสำหรับภาคธุรกิจ และภาคอุตสาหกรรม เป็นปัจจัยสำคัญอย่างหนึ่งที่ส่งผลให้เกิดการเปลี่ยนแปลงอย่างรวดเร็วทั้งด้านเศรษฐกิจและสังคม ดังนั้น การพัฒนาขีดความสามารถของประเทศไทยเพื่อการพัฒนาคุณภาพชีวิตที่ดีของประชาชนเพื่อผลักดันอุตสาหกรรมไทยให้สามารถแข่งขันได้ในเวทีโลกได้อย่างยั่งยืนโดยใช้นาโนเทคโนโลยีจึงเป็นเรื่องสำคัญ และต้องอาศัยศักยภาพของบุคลากร การสนับสนุนการวิจัย การบริหารระบบวิจัยแบบมุ่งเป้าและครบวงจร ถ่ายทอดเทคโนโลยี การบริหารทรัพย์สินทางปัญญา การสร้างความตระหนักและความเข้าใจแก่สาธารณะ การจัดการด้านความปลอดภัย จริยธรรมและความเสี่ยง ตลอดจนการเชื่อมโยงระหว่างภาคการวิจัยพัฒนาภาคอุตสาหกรรมและสังคม (ศูนย์นาโนเทคโนโลยีแห่งชาติ. 2555) เทคโนโลยีนาโน (Nanotechnology) เป็นวิทยาศาสตร์สาขาหนึ่งที่ศึกษาโครงสร้างของวัสดุ ที่มีโครงสร้างสามมิติ มีขนาดด้านใดด้านหนึ่งอยู่ระหว่าง 1.0-100 นาโน-เมตรรวมถึงการออกแบบหรือการใช้เครื่องมือสร้างวัสดุที่อยู่ในระดับที่เล็กมากหรือการจัดเรียงอะตอมหรือโมเลกุลในตำแหน่งที่ต้องการได้อย่างแม่นยำและถูกต้องทำให้โครงสร้างของวัสดุหรือสสารมีคุณสมบัติพิเศษไม่ว่าทางด้านฟิสิกส์เคมีหรือชีวภาพเกิดประโยชน์ต่อผู้ใช้สอยปัจจุบันนาโนเทคโนโลยีถูกนำมาใช้ประโยชน์ในด้านการแพทย์ด้านชีวภาพ ด้านอิเล็กทรอนิกส์ ด้านนาโนเซนเซอร์และยังมีการศึกษาเพื่อเพิ่มมูลค่าให้กับผลิตภัณฑ์ที่มีอยู่เดิมให้มีประสิทธิภาพที่ดีขึ้น และสร้างนวัตกรรมใหม่ ๆ เพื่อตอบสนองต่อความต้องการของในมนุษย์

ในการศึกษาวิธีการเพิ่มประสิทธิภาพของท่อนาโนคาร์บอนเป็นการศึกษาที่เกี่ยวกับการจำลองโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนโดยใช้เทคนิคการคำนวณทางเคมีเพื่อออกแบบหรือทำนายสมบัติของโครงสร้างในระดับนาโนเมตรที่มนุษย์มองด้วยตาเปล่าไม่เห็น ซึ่งพบว่าเมื่อมีการนำท่อนาโนคาร์บอนมาศึกษาการเติมโลหะแทรนซิชันหมู่ VIIIB ทำให้สมบัติทางด้านพลังงานการยึดจับเป็น -240.66 kcal/mol เมื่อนำท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมเหล็กไปดูดซับ

แก๊สไฮโดรเจนพบว่าท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมเหล็กสามารถดูดซับแก๊สไฮโดรเจนได้ดีกว่าท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ (ณาณุกรณ์ ทับทิมใส. 2556) เมื่อนำท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะโคบอลต์ โรเดียมและอิริเดียม โครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนที่เติมโลหะอิริเดียมจะมีความเสถียรมากกว่า โรเดียมและโคบอลต์ตามลำดับ การดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะโคบอลต์ โรเดียมและอิริเดียม ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโคบอลต์สามารถดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ได้ดีที่สุดและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะอิริเดียมดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์ได้ดีที่สุด เมื่อนำท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแพลเลเดียมและทองคำสามารถดูดซับแก๊สซัลเฟอร์ไดออกไซด์ได้ (Mehdi Yoosefian. 2015)

ดังนั้นงานวิจัยนี้จึงมุ่งเน้นการศึกษาผลของการเติมโลหะสแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียมโครเมียมแมงกานีสอิตเทรียมเซอร์โคเนียมไนโอเบียมโมลิบดีนัมและเทคนีเชียมลงบนท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังเดี่ยวขนาด (5,5) ชนิดอาร์มแชร์ เพื่อศึกษาคุณสมบัติทางโครงสร้างสมบัติทางพลังงานและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ ศึกษาผลของการดูดซับแอมโมเนียฟอสฟีนและอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะสแกนเดียมไทเทเนียม วาเนเดียมและโครเมียมโดยศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง ทางพลังงานการดูดซับ และสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์

วัตถุประสงค์

1. เพื่อศึกษาโครงสร้างที่เสถียรสมบัติทางโครงสร้าง พลังงานการยึดจับและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

2. เพื่อศึกษาโครงสร้างที่เสถียรสมบัติทางโครงสร้าง พลังงานการดูดซับและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับแอมโมเนียฟอสฟีนและอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ขอบเขตการวิจัย

1. ท่อนาโนคาร์บอนที่ใช้ในการทำวิจัย คือ ท่อนาโนคาร์บอนแบบอาร์มแชร์ผนังเดี่ยวขนาด (5,5) ประกอบไปด้วยคาร์บอน 90 อะตอม และไฮโดรเจน 20 อะตอม

2. โลหะที่ใช้ศึกษาในการเติมโลหะแทรนซิชันบนท่อนาโนคาร์บอน คือ

สแกนเดียมไทเทเนียม วาเนเดียมโครเมียมแมงกานีสอิตเทรียมเซอร์โคเนียมไนโอเบียม โมลิบดีนัมและเทคนีเชียม

3. แก๊สที่ใช้ศึกษาการดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน คือ แอมโมเนียฟอสฟีนและอาร์ซีน

4. ทฤษฎีที่ใช้ในการคำนวณ คือ ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นที่ระดับB3LYP/ lanl2dz ของทฤษฎีโดยคำนวณด้วยโปรแกรม Guassian 09

5. สมบัติที่ได้จากการคำนวณ คือ สมบัติทางโครงสร้างประกอบด้วยมุมพันธะและความยาวพันธะ สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ประกอบด้วยการถ่ายโอนประจุ แถบพลังงาน การพล๊อตตำแหน่งของอิเล็กตรอน ความหนาแน่นสถานะสมบัติทางพลังงานประกอบด้วย พลังงานการยึดจับและพลังงานการดูดซับ

นิยามศัพท์เฉพาะ

เคมีเชิงคอมพิวเตอร์ (Computational chemistry) หมายถึง วิชาเคมีแขนงหนึ่งที่มีการนำเอาคอมพิวเตอร์สมรรถนะสูงมาใช้ในการศึกษาทางทฤษฎี ซึ่งเป็นการคำนวณโครงสร้างและสมบัติต่าง ๆ ของโมเลกุลโดยอาศัยหลักการที่ว่าสมบัติที่คำนวณได้นี้ขึ้นกับโครงสร้าง 3 มิติของโมเลกุลการศึกษานี้เรียกอีกอย่างหนึ่งว่าแบบจำลองเชิงโมเลกุล (Molecular modeling) ผลการคำนวณที่ได้จากการศึกษาทางเคมีเชิงคอมพิวเตอร์นี้ จะใช้ในการอธิบายผลการทดลองในห้องปฏิบัติการซึ่งเป็นการอธิบายในระดับโมเลกุล รวมถึงการทำนายผลการทดลองที่ไม่สามารถทำได้หรือทำได้ยากในห้องปฏิบัติการนอกจากนี้ผลการคำนวณทางทฤษฎียังใช้เป็นข้อมูลพื้นฐานที่ช่วยลดขอบเขตการทดลองในห้องปฏิบัติการ

ท่อนาโนคาร์บอน (Carbon nanotubes) หมายถึง ท่อเปิดรูปทรงกระบอกเหมือนการม้วนพับของแผ่นแกรไฟต์ประกอบด้วยคาร์บอน 90 อะตอม และไฮโดรเจน 20 อะตอม โดยมีความกว้าง หรือเส้นผ่าศูนย์กลางของท่อซึ่งเล็กมาก ผนังท่อมีเพียงชั้นเดียว (Single-walled)

การเติมโลหะ(Metal doping) หมายถึง การแทนที่คาร์บอนอะตอมบนท่อนาโนคาร์บอนผนังเดี่ยวชนิดอาร์แชร์

การดูดซับแก๊ส(Gas adsorption) หมายถึง การดูดซับแอมโมเนียฟอสฟีน และอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

พลังงานของปฏิกิริยา (Reaction energy) หมายถึง พลังงานที่คำนวณจากพลังงานรวมของสารผลิตภัณฑ์ลบด้วยพลังงานรวมของสารตั้งต้น โดยถ้าค่าพลังงานรวมของปฏิกิริยามีค่าเป็นลบแสดงว่าเป็นปฏิกิริยาแบบคายพลังงานและพลังงานรวมของปฏิกิริยามีค่าเป็นบวกแสดงว่าเป็นปฏิกิริยาแบบดูดพลังงาน

แถบพลังงาน (Energy gap) หมายถึง ผลต่างของพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่

ความหนาแน่นสถานะ (Density of state) หมายถึง ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนของโมเลกุลที่ตำแหน่งอะตอมต่างๆ ที่จะนำไปสู่การหาแถบพลังงาน (Band gap) ของสารได้

โครงสร้างที่เสถียร (Optimized structure) หมายถึง โครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนที่มีพลังงานต่ำที่สุด

ทฤษฎีความหนาแน่นสถานะ หมายถึง ทฤษฎีทางควอนตัมที่ใช้ในการคำนวณหาโครงสร้างเชิงอิเล็กทรอนิกส์ของระบบหลายอนุภาคโดยเฉพาะในอะตอมและโมเลกุล

Basis set หมายถึง ระดับทางทฤษฎีที่ใช้ในการคำนวณฟังก์ชันนัลความหนาแน่นของอิเล็กตรอน

ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับจากการวิจัย

1. ได้โครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

2. ได้พลังงานการยึดจับ สมบัติทางโครงสร้างและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนาโนที่มีการเติมโลหะสแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียมโครเมียมแมงกานีสอิตเทรียม เซอร์โคเนียมไนโอเบียมโมลิบดีนัมและเทคนีเชียม

3. ได้โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สแอมโมเนีย ฟอสฟีน และ อาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติและแบบที่มีการเติมโลหะสแกนเดียมไทเทเนียม วาเนเดียมและโครเมียม

4. ทำให้ทราบความสามารถในการดูดซับแอมโมเนียฟอสฟีนและอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะสแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียมและโครเมียม ทราบสมบัติทางโครงสร้างและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะ

5. เป็นแนวทางในการออกแบบท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะเพื่อใช้ในการดูดซับแอมโมเนียฟอสฟีนและอาร์ซีน