บทที่ 3

วิธีดำเนินการวิจัย

ในงานวิจัยนี้เป็นการวิจัยเชิงทฤษฎีโดยการคำนวณทางคอมพิวเตอร์ซึ่งใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์สำเร็จรูปในการจำลองโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนและคำนวณคุณสมบัติทางโครงสร้าง คุณสมบัติทางพลังงาน และคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์โดยมีวิธีดำเนินการวิจัย ดังนี้

เครื่องมือที่ใช้ในการคำนวณ

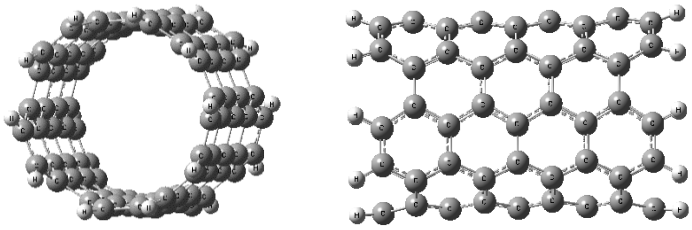
การค้นหาโครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันและทำการค้นหาโครงสร้างที่เสถียรของดูดซับแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะ สแกนเดียมไทเทเนียมวาเนเดียมและโครเมียม โดยการศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงานและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ โดยใช้เครื่องคอมพิวเตอร์ส่วนบุคคลระบบ Window XP และ Server ระบบ Linux

โปรแกรมที่ใช้ในการคำนวณ

เตรียมโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันและโครงสร้างของดูดซับแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะ สแกนเดียมไทเทเนียมวาเนเดียมและโครเมียมโดยโปรแกรม Gauss View 3.0 เมื่อเตรียมโครงสร้างเสร็จป้อนทฤษฎีเพื่อคำนวณโครงสร้างด้วยโปรแกรม Gaussian 09 (Frisch. 2008) ซึ่งเปลี่ยนระบบ DOS ให้เป็น Unit ด้วยโปรแกรม Ultra Edit 32 เพื่อส่งเข้าคำนวณโดยระบบปฏิบัติการ Linux โดยส่งผ่านโปรแกรม Secure shell (SSH) หลังจากคำนวณเสร็จนำข้อมูลที่ได้มาจับโครงสร้างและวิเคราะห์ความหนาแน่นของสถานะด้วยโปรแกรม GaussSum 2.1.4 (O'Boyle, Tenderholt และ Langner. 2008)

แบบจำลองโมเลกุลที่ใช้ในการศึกษา

ในการวิจัยครั้งนี้ผู้วิจัยได้ใช้สร้างแบบจำลองโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนผนังเดี่ยวขนาด (5,5) ในการศึกษาโดยใช้โปรแกรมสำเร็จรูป Gauss View 3.0 ในการเขียนโครงสร้าง

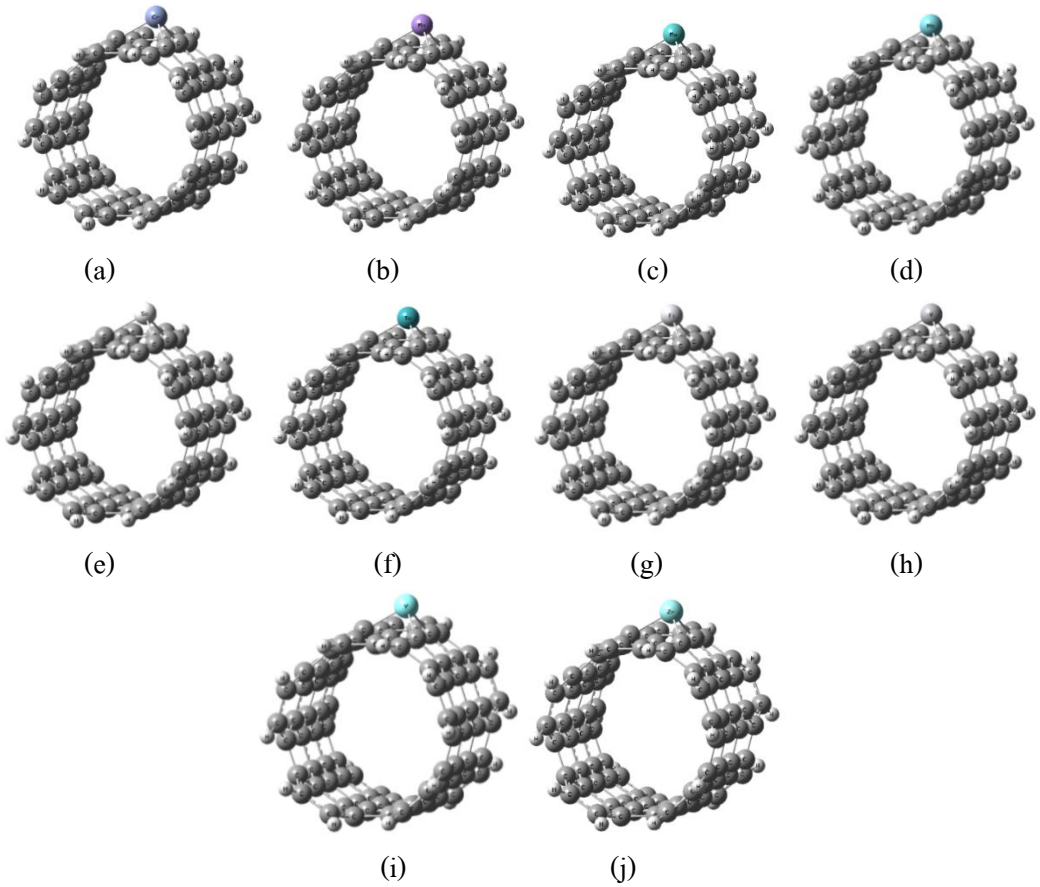


(a) (b)

ภาพที่ 20 แบบจำลองโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอน (a) ด้านหน้าและ (b) ด้านข้าง

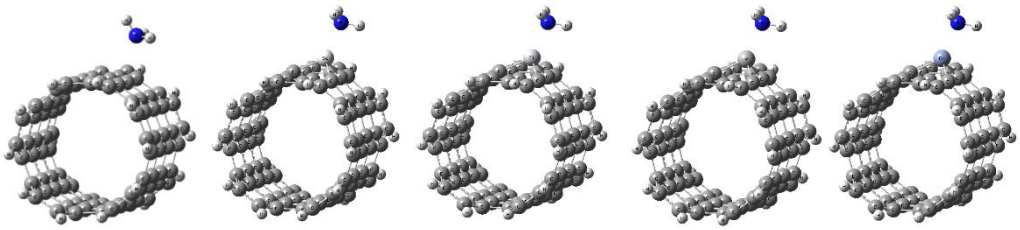
การสร้างแบบจำลองโมเลกุลในการศึกษาครั้งนี้ใช้โปรแกรม Gauss View 3.0 ในการเขียนโครงสร้าง ซึ่งได้แก่

1. การค้นหาโครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนคาร์บอนที่เติมโลหะแทรนซิชัน ดังภาพที่ 21



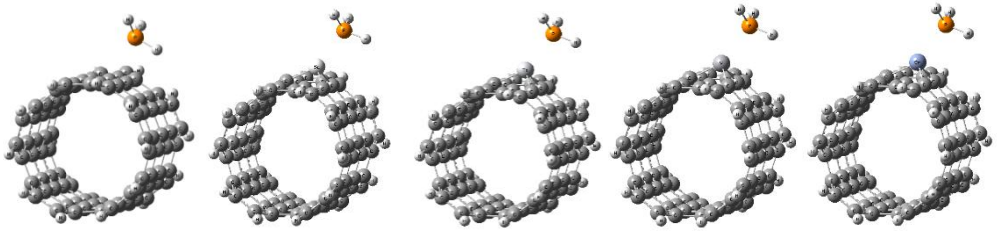
ภาพที่ 21 แบบจำลองทางโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) สแกนเดียม (b) ไทเทเนียม (c) วาเนเดียม (d) โครเมียม (e) แมงกานีส (f) อิตเทรียม (g) เซอร์โคเนียม (h) ไนโอเบียม (i) โมลิบดีนัม และ (j) เทคนีเชียม

1) การค้นหาโครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่เติมโลหะแทรนซิชัน ดังภาพที่ 22 ถึง 24



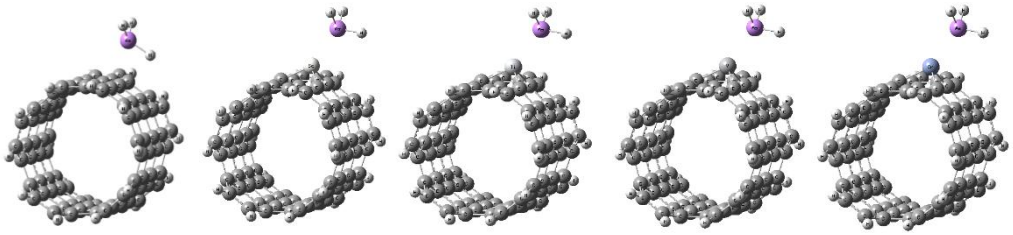
(a) (b) (c) (d) (e)

ภาพที่ 22 แบบจำลองทางโครงสร้างการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอน (a) แบบปกติ, (b) สแกนเดียมม, (c) ไทเทเนียม, (d) วาเนเดียมและ (e) โครเมียม



(a) (b) (c) (d) (e)

ภาพที่ 23 แบบจำลองทางโครงสร้างการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนาโนคาร์บอน (a) แบบปกติ, (b) สแกนเดียม, (c) ไทเทเนียม, (d) วาเนเดียม และ (e) โครเมียม

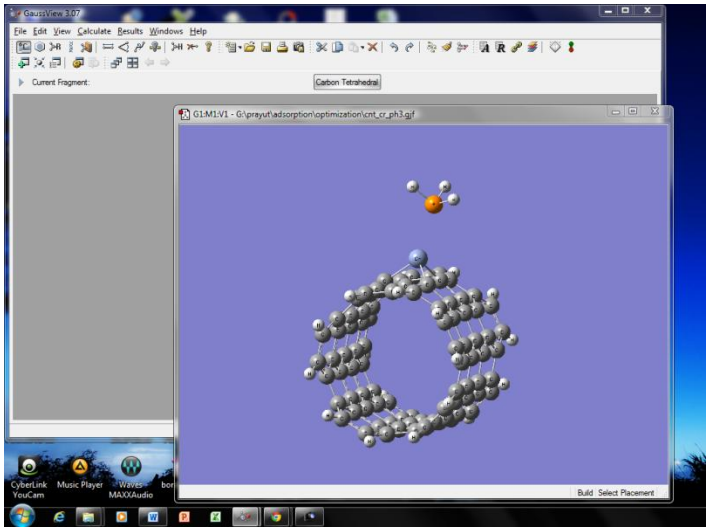


(a) (b) (c) (d) (e)

ภาพที่ 24 แบบจำลองทางโครงสร้างการดูดซับอาร์บนท่อนาโนคาร์บอน (a) แบบปกติ, (b) สแกนเดียม, (c) ไทเทเนียม, (d) วาเนเดียม และ (e) โครเมียม

ขั้นตอนการคำนวณ

ใช้โปรแกรม Gauss View 3.0 ในการสร้างโครงสร้างโมเลกุลเบื้องต้นของสารประกอบที่ต้องการศึกษา พร้อมทั้งกำหนดวิธีในการคำนวณ ด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น(DFT) (Lewars. 2003 ; Leszczynski. 2001) ที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ (Becke. 1988 ; Becke. 1993 ; Lee, Yang & Parr. 1988 ; Hay & Wadt.1985 ; Wadt & Hay. 1985 ; Hay & Wadt. 1985) ดังแสดงในภาพที่ 25



ภาพที่ 25 โปรแกรม Gaussview ที่ใช้ในการเตรียมโครงสร้างท่อนาโนคาร์บอนและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ค้นหาโครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนคาร์บอนและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะและหาโครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีน บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะ โดยคำนวณด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น ที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ ใช้โปรแกรม Ultra Edit 32 เพื่อเปลี่ยนข้อมูลจาก DOS ไปเป็น UNIX เพื่อที่จะนำไปคำนวณในโปรแกรม Gaussian 09 ระบบ Linux ได้นำไฟล์ที่เตรียมได้ มาเข้าโปรแกรม SSH เพื่อทำการถ่ายโอนไฟล์ไปสู่ระบบ Linux เพื่อคำนวณค่าพลังงานของโครงสร้างนำผลที่ได้จากการคำนวณมาแสดงในโปรแกรม Ultra Edit 32 เพื่อตรวจสอบว่ามีความผิดพลาดเกิดขึ้นหรือไม่คำนวณค่าพลังงานการดูดซับ (ΔE_{ads}) ที่ได้จากการคำนวณด้วยวิธีการทางทฤษฎี คำนวณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ (Electronic property) ได้แก่ E_{HOMO}, E_{LUMO}

และ $\Delta E_{HOMO-LUMO}$ ใช้โปรแกรม GaussSum-2.1.4 ในการคำนวณหา Density of state (DOS) คำนวณประจุ NBO ด้วยโปรแกรม NBO 5.0 ที่ติดตั้งอยู่ในโปรแกรม GAUSSIAN 09 สร้างภาพกราฟิกต่าง ๆ จากข้อมูลที่ได้จากการคำนวณด้วยโปรแกรมสำเร็จรูป Gaussian 09 โดยโปรแกรม MOLEKEL 4.3 คำนวณการเปลี่ยนแปลงทางพลังงานการยึดจับ ($\Delta E_{binding}$) และพลังงานการดูดซับ (ΔE_{ads}) ของการดูดซับแอมโมเนีย ฟอสฟีน และอาร์ซีน บนท่อนาโนคาร์บอนผนังเดี่ยว

$$\Delta E_{binding} = E\,(\text{TM-SWCNT}) - E\,(\text{SWCNT}) - E\,(\text{TM})$$

โดยที่ $\Delta E_{binding}$ แทน พลังงานการยึดจับ

E (TM-CNT) แทน พลังงานทั้งหมดของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

E (SWCNT) แทน พลังงานทั้งหมดของท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ

E (TM) แทน พลังงานทั้งหมดของโลหะแทรนซิชัน

$$\Delta E_{ads} = E\,(\text{gas/TM-SWCNT}) - E\,(\text{SWCNT}) - E\,(\text{gas})$$

โดยที่ ΔE_{ads} แทน พลังงานการดูดซับ

E (gas/TM-CNT) แทน พลังงานทั้งหมดของแอมโมเนีย ฟอสฟีน และอาร์ซีนที่ดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติและที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

E (SWCNT) แทน พลังงานทั้งหมดของท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติและที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

E (gas) แทน พลังงานทั้งหมดของแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีน