

บทที่ 4

ผลและอภิปรายผล

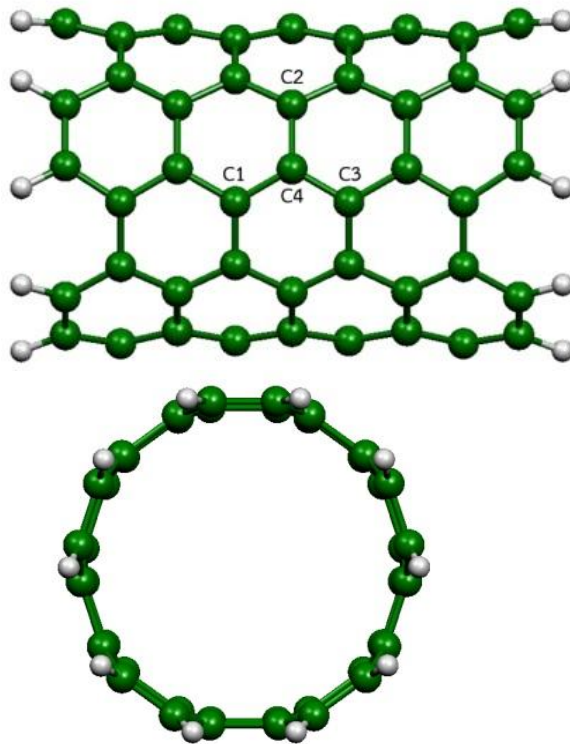
ในงานวิจัยนี้ได้ศึกษาโครงสร้างที่เสถียรสมบัติทางโครงสร้างพลังงานการยึดจับ และสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน และศึกษาโครงสร้างที่เสถียรสมบัติทางโครงสร้างพลังงานการดูดซับสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับแอมโมเนียฟอสฟีนและอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น (Density Functional Theory : DFT) ที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ ของทฤษฎี ซึ่งได้ผลการคำนวณ ดังนี้

สมบัติทางโครงสร้าง พลังงานการยึดจับ สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ ของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

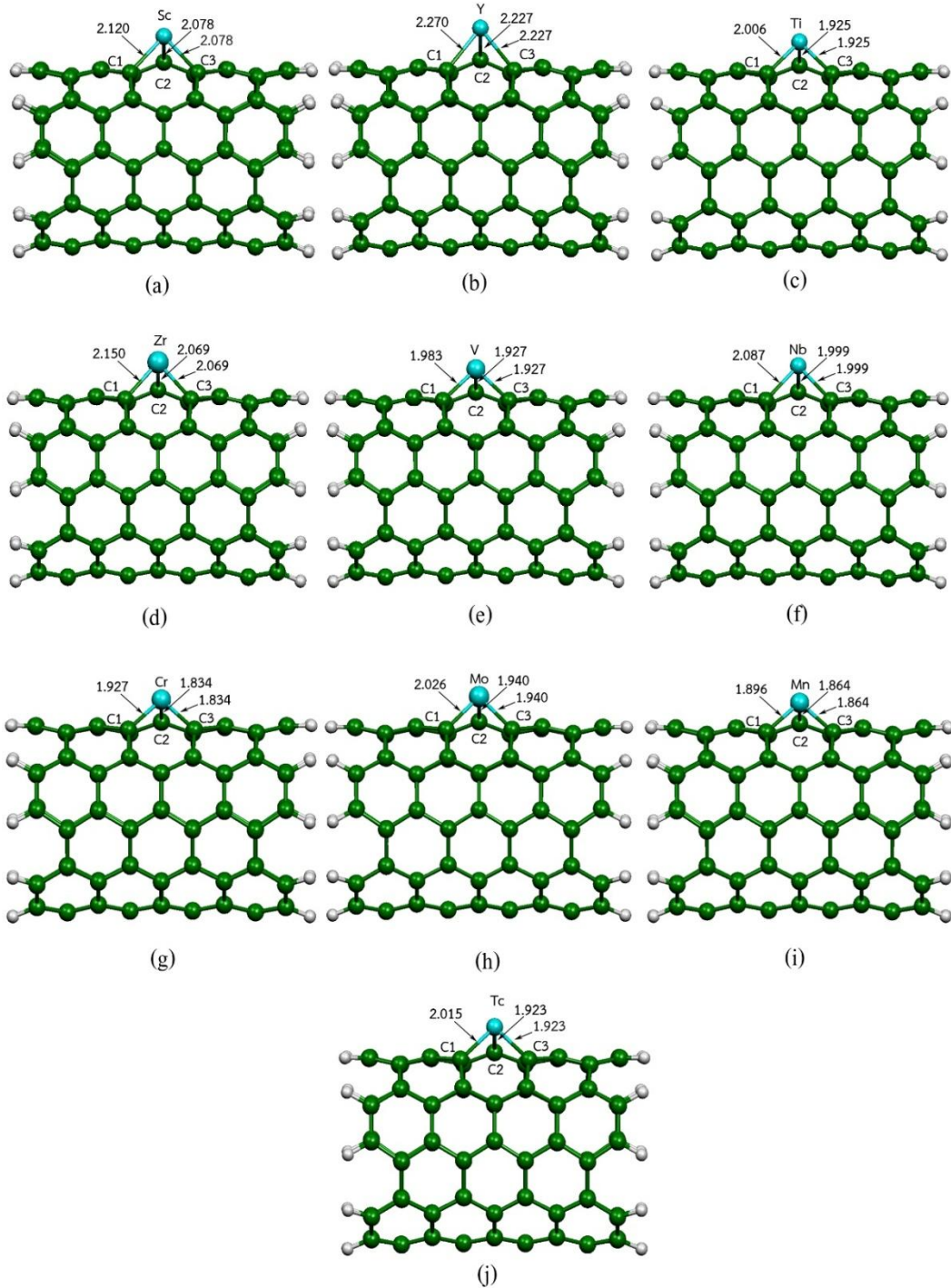
1. สมบัติทางโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

โครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ ดังภาพที่ 26 พบว่า ความยาวพันธะของท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ C1-C4, C2-C4 และ C3-C4 มีความยาวพันธะเท่ากับ 1.455, 1.426 และ 1.426Å และมุมพันธะตำแหน่ง C1-C4-C2, C2-C4-C3 และ C3-C4-C1 เท่ากับ 118.3, 119.5 และ 118.3° หลังจากเติมโลหะแทรนซิชันแทนที่คาร์บอนอะตอมตำแหน่ง C4 บนท่อนาโนคาร์บอน พบว่าความยาวพันธะตำแหน่ง M-C1, M-C2 และ M-C3 มีความยาวพันธะเพิ่มขึ้นและมุมพันธะตำแหน่ง C1-M-C2, C2-M-C3 และ C3-M-C1 มีมุมที่แคบลง ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะสแกนเดียม มีความยาวพันธะตำแหน่ง M-C1, M-C2 และ M-C3 เท่ากับ 2.120, 2.078 และ 2.078Å และมีมุมพันธะตำแหน่ง C1-M-C2, C2-M-C3 และ C3-M-C1 แคบที่สุดเท่ากับ 85.3, 83.0 และ 85.3° และจากผลการคำนวณพบว่าท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะ ไทเทเนียม วาเนเดียม โครเมียม แมงกานีส อิตเทรียม เซอร์โคเนียม ไนโอเบียม โมลิบดีนัม และเทคโนโลยีเนียม มีความยาวพันธะที่เพิ่มขึ้นและมุมพันธะแคบลง สอดคล้องกันกับผลของการเติมสแกนเดียมลงบนท่อนาโนคาร์บอน ทั้งนี้เนื่องจากขนาดอะตอมของโลหะแทรนซิชันที่เติมลงบนท่อนาโนคาร์บอนมีขนาดใหญ่กว่าอะตอมของคาร์บอน จึงไม่เหมาะสมกับขนาดของโครงที่มีอยู่จึงส่งผลให้โครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนเกิดการยกตัว

ของอะตอมโลหะแทรนซิชันออกมาจากผิวของท่อนาโนคาร์บอนทำให้มีลักษณะคล้ายพีระมิดตรงตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันจึงทำให้โครงสร้างท่อนาโนคาร์บอนที่เติมโลหะมีความเหมาะสมที่จะใช้ในการดูดซับแก๊สเนื่องจากมีพื้นที่ผิวสัมผัสสูงชันซึ่งผลจากการคำนวณสอดคล้องกับผลการศึกษาคาร์บอนเติมเหล็ก รูทีเดียม และออสเมียมบนท่อนาโนคาร์บอน (ฉาณกรณ์ ทับทิมใส. 2557) การเติมโลหะแทรนซิชันหมู่ VIII B บนท่อนาโนคาร์บอนผนังเดี่ยว (Tabtimsai, Ruangpornvisuti & Wannoo. 2013)



ภาพที่ 26 โครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ



ภาพที่ 27 แสดงโครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน

- (a) สแกนเดียม, (b) อิตเทรียม, (c) ไทเทเนียม, (d) เซอร์โคเนียม, (e) วานเดียม,
 (f) นีโอบียม, (g) โครเมียม, (h) โมลิบดีนัม, (i) แมงกานีสและ (j) เทคนีเชียม

ตารางที่ 1 สมบัติทางโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	ความยาวพันธะ (Å)			มุมพันธะ (°)		
	C1-M	C2-M	C3-M	C1-M-C2	C2-M-C3	C3-M-C1
SWCNT	1.455	1.426	1.426	118.3	119.5	118.3
Sc-SWCNT	2.120	2.078	2.078	85.3	83.0	85.3
Y-SWCNT	2.270	2.227	2.227	79.5	77.2	79.5
Ti-SWCNT	2.006	1.925	1.925	90.2	87.6	90.2
Zr-SWCNT	2.150	2.069	2.069	85.0	81.9	85.0
V-SWCNT	1.983	1.927	1.927	89.6	90.0	89.6
Nb-SWCNT	2.087	1.999	1.999	87.4	83.8	87.4
Cr-SWCNT	1.927	1.834	1.834	91.9	90.9	91.9
Mo-SWCNT	2.026	1.940	1.940	89.5	85.9	89.5
Mn-SWCNT	1.896	1.864	1.864	93.2	92.4	93.2
Tc-SWCNT	2.015	1.923	1.923	88.6	90.3	88.6

2. พลังงานการยึดจับสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์และแถบพลังงาน

พลังงานการยึดจับ (Binding Energy, $\Delta E_{\text{binding}}$) พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (E_{HOMO}) และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (E_{LUMO}) แถบพลังงาน (ΔE_{gap}) และผลต่างของแถบพลังงานระหว่างท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติกับท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ($\Delta \Delta E_{\text{gap}}$) ดังตารางที่ 2 จากการศึกษาพลังงานการยึดจับของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติม สแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียม โครเมียม แมงกานีส อิตเทรียม เซอร์โคเนียม ไนโอเบียม โมลิบดีนัมและเทคนีเชียมแทนที่คาร์บอนอะตอมมีพลังงานยึดจับเท่ากับ -163.38, -208.06, -194.40, -365.87, -184.73, -157.92, -216.48, -222.19, -253.45 และ -246.76 kcal/mol ตามลำดับจากข้อมูลคำนวณพลังงานการยึดจับแสดงให้เห็นว่าการเติมโลหะแทรนซิชันเป็นการปรับปรุงโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนให้ดีขึ้น

จากการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติมีค่าเท่ากับ -4.408 และ -3.292 eV ตามลำดับและมีค่าแถบพลังงานเท่ากับ 1.116 eV และพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนาโนคาร์บอนที่เติม สแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียม

โครเมียม แมงกานีส อิตเทรียม เซอร์โคเนียม ไนโอเบียม โมลิบดีนัมและเทคนีเชียมแทนที่คาร์บอนอะตอมมีค่าเท่ากับ -4.000, -4.136, -4.517, -4.354, -3.946, -3.946, -4.055, -4.191, -4.230 และ -4.463 eV ตามลำดับ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่มีค่าเท่ากับ -2.830, -3.048, -3.184, -3.211, -2.776, -2.776, -2.993, -3.320, -3.374, และ -3.157 eV ตามลำดับ มีค่าแถบพลังงานเท่ากับ 1.170, 1.088, 1.333, 1.143, 1.170, 1.170, 1.061, 0.871, 0.925 และ 1.306 eV ตามลำดับ ผลต่างของแถบพลังงานของท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติกับท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีค่าเท่ากับ -0.054, 0.027, -0.218, -0.027, -0.054, -0.054, 0.054, 0.245, 0.190 และ -0.190 eV โดยท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมไนโอเบียมมีแถบพลังงานต่างจากท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติมากที่สุด

ตารางที่ 2 พลังงานการยึดจับพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงานและผลต่างของแถบพลังงาน

	$\Delta E_{\text{binding}}$ (kcal/mol)	E_{HOMO} (eV)	E_{LUMO} (eV)	ΔE_{gap} (eV)	$\Delta \Delta E_{\text{gap}}$ (eV)
SWCNT	-	-4.408	-3.293	1.116	-
Sc-SWCNT	-163.38	-4.000	-2.830	1.170	-0.054
Ti-SWCNT	-208.06	-4.136	-3.048	1.088	0.027
V-SWCNT	-194.40	-4.517	-3.184	1.333	-0.218
Cr-SWCNT	-365.87	-4.354	-3.211	1.143	-0.027
Mn-SWCNT	-184.73	-3.946	-2.776	1.170	-0.054
Y-SWCNT	-157.92	-3.946	-2.776	1.170	-0.054
Zr-SWCNT	-216.48	-4.055	-2.993	1.061	0.054
Nb-SWCNT	-222.19	-4.191	-3.320	0.871	0.245
Mo-SWCNT	-253.45	-4.230	-3.374	0.925	0.190
Tc-SWCNT	-246.76	-4.463	-3.157	1.306	-0.190

3. การถ่ายโอนประจุบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

จากการศึกษาทางการถ่ายโอนประจุสามารถคำนวณได้จาก Natural bond orbital (NBO) ซึ่งได้ผลการคำนวณดังตารางที่ 3 พบว่าประจุของโลหะสแกนเดียม ไทเทเนียม

วานเดียมโครเมียมแมงกานีสอดิเทียมเซอร์โคเนียมไนโอเบียมโมลิบดีนัมและเทคนิคเชื่อม
แทนที่คาร์บอนอะตอมพบว่าโลหะแทรนซิชันมีประจุเป็น 1.558, 1.232, 0.956, 0.628, 0.694,
1.766, 1.627, 1.153, 0.815 และ 0.593e ตามลำดับสามารถอธิบายได้ว่าการถ่ายโอนประจุ
ระหว่างโลหะแทรนซิชันกับท่อนาโนคาร์บอน โดยเกิดการถ่ายโอนประจุจากโลหะแทรนซิชัน
ไปยังท่อนาโนคาร์บอนจึงทำให้คาร์บอนอะตอมรอบๆ ตำแหน่งที่เติมโลหะแทรนซิชัน
แสดงประจุเป็นลบโลหะแทรนซิชันที่เติมลงไปแสดงประจุเป็นบวก ดังนั้น ตำแหน่งที่มี
การเติมโลหะแทรนซิชันจึงมีความเหมาะสมที่จะนำไปศึกษาการเกิดอันตรกิริยากับแก๊ส
หรือสารที่มีความเหมาะสม

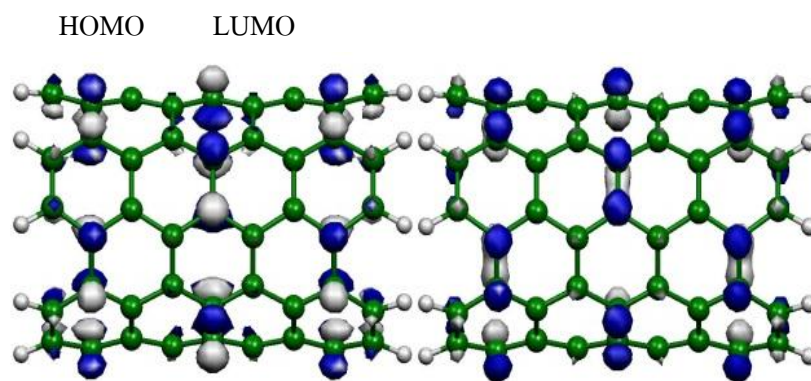
ตารางที่ 3 ประจุ NBO ของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	ประจุ NBO (e)			
	โลหะ	C1	C2	C3
Sc-SWCNT	1.558	-0.418	-0.393	-0.393
Ti-SWCNT	1.232	-0.310	-0.304	-0.304
V-SWCNT	0.956	-0.248	-0.200	-0.200
Cr-SWCNT	0.628	-0.183	-0.061	-0.061
Mn-SWCNT	0.694	-0.163	-0.083	-0.083
Y-SWCNT	1.766	-0.452	-0.432	-0.432
Zr-SWCNT	1.627	-0.384	-0.406	-0.406
Nb-SWCNT	1.153	-0.266	-0.263	-0.263
Mo-SWCNT	0.815	-0.183	-0.103	-0.103
Tc-SWCNT	0.598	-0.108	-0.036	-0.036

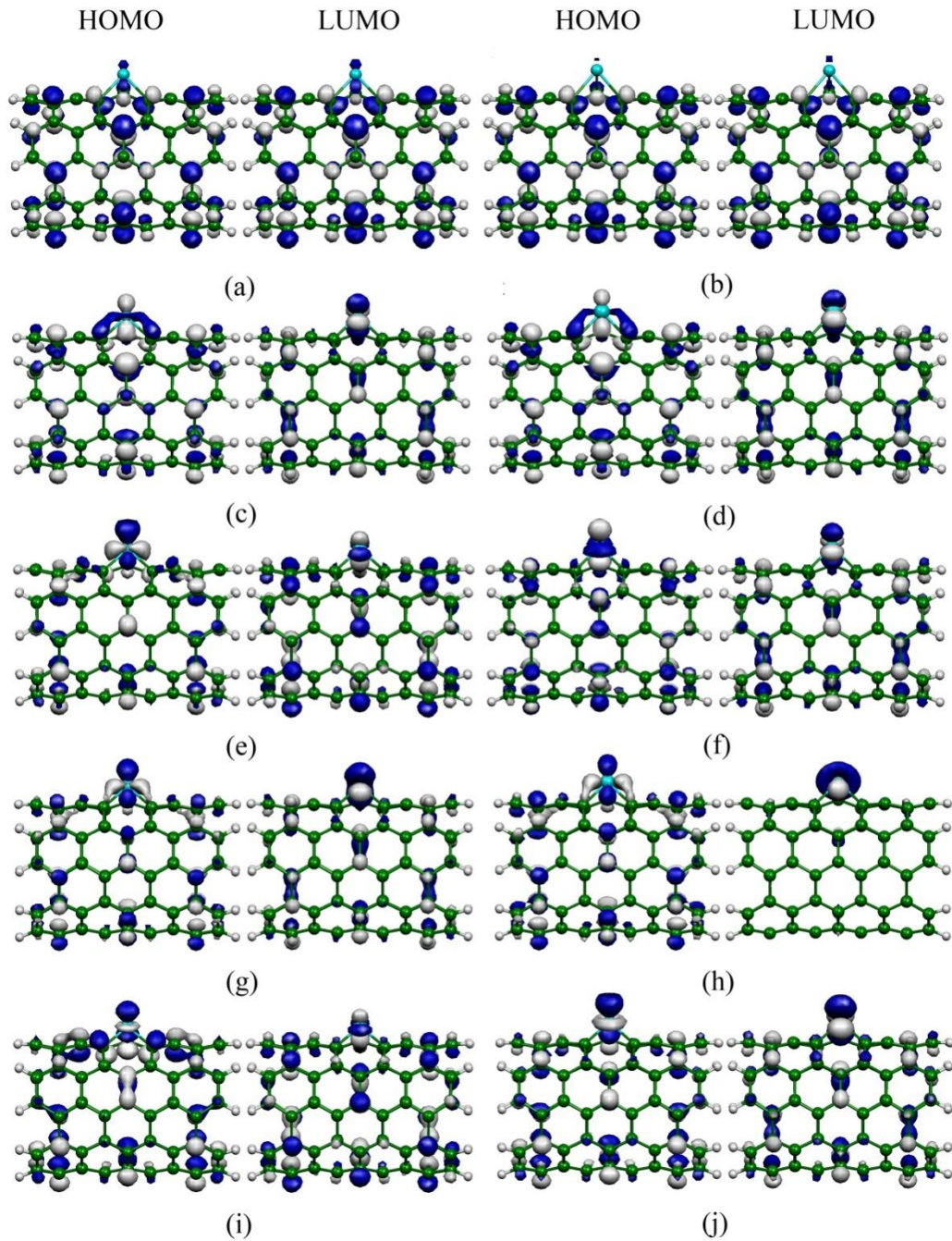
4. การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งออร์บิทัล ต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่

การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งออร์บิทัล
ต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติดังภาพที่ 28 จากภาพอธิบาย
ได้ว่า ตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มี

อเล็กตรอนบรรจุอยู่จะกระจายอยู่รอบ ๆ ท่อนานาโนคาร์บอน การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนานาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันดังภาพที่ 29 จากภาพอธิบายว่าอเล็กตรอนจะกระจายอยู่ในตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอเล็กตรอนบรรจุ ดังนั้นบริเวณดังกล่าวจึงเป็นบริเวณที่มีความเหมาะสมที่จะทำการดูดซับแก๊สเนื่องจากเป็นบริเวณที่มีการเคลื่อนที่ของอเล็กตรอนอยู่รอบๆ



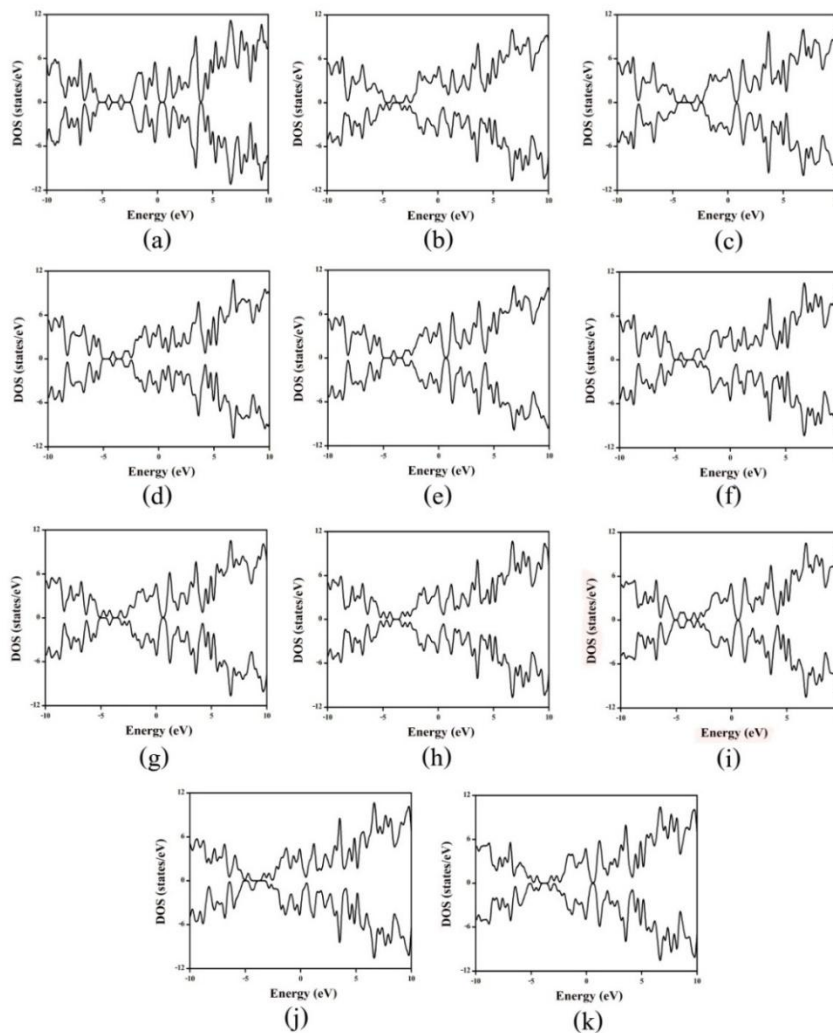
ภาพที่ 28 การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนานาโนคาร์บอนแบบปกติ



ภาพที่ 29 การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน (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

5. สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ความหนาแน่นสถานะ

การศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในทอมความหนาแน่นสถานะ (Density of state : DOS) สำหรับการเติมโลหะแทรนซิชันบนท่อนาโนคาร์บอน ดังแสดงในภาพที่ 30 จากภาพแสดงให้เห็นว่าความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีการเปลี่ยนแปลงจากปกติเล็กน้อยอธิบายได้ว่าโลหะแทรนซิชันที่เติมลงไป มีผลต่อความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอน หมายความว่า ท่อนาโนคาร์บอนสามารถยึดจับโลหะแทรนซิชันที่เติมลงไปได้



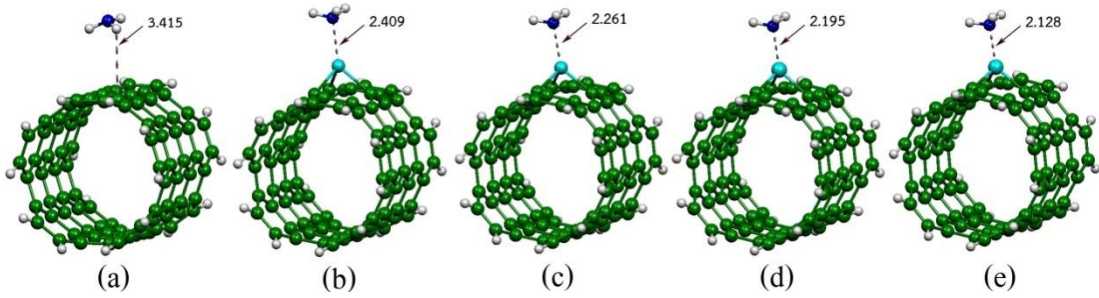
ภาพที่ 30 ความหนาแน่นสถานะ (DOS) (a) SWCNT, (b) Sc-SWCNT, (c)Y-SWCNT, (d)Ti-SWCNT, (e)Zr-SWCNT, (f) V-SWCNT, (g) Nb-SWCNT, (h) Cr-SWCNT, (i) Mo-SWCNT, (j)Mn-SWCNT และ (k) Tc-SWCNT

สมบัติทางโครงสร้าง พลังงานการดูดซับ สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับ แก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแพลนทินัม

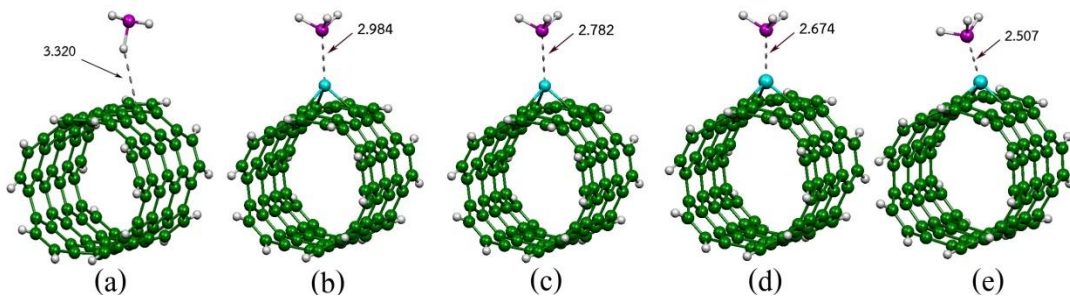
การศึกษาโครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแพลนทินัมในครั้งนี้มีแก๊สทั้งหมด 3 ชนิด ได้แก่ แอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีน โลหะที่เติมบนท่อนาโนคาร์บอน ได้แก่ สแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียม และโครเมียม โดยจะศึกษาโครงสร้างที่เสถียร สมบัติทางโครงสร้างพลังงานการดูดซับ สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ ได้แก่ แถบพลังงานความหนาแน่นสถานะ (Density of State : DOS) การถ่ายโอนประจุ (Natural Bond Orbital : NBO) ซึ่งได้ผลการคำนวณ ดังนี้

1. สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแพลนทินัม

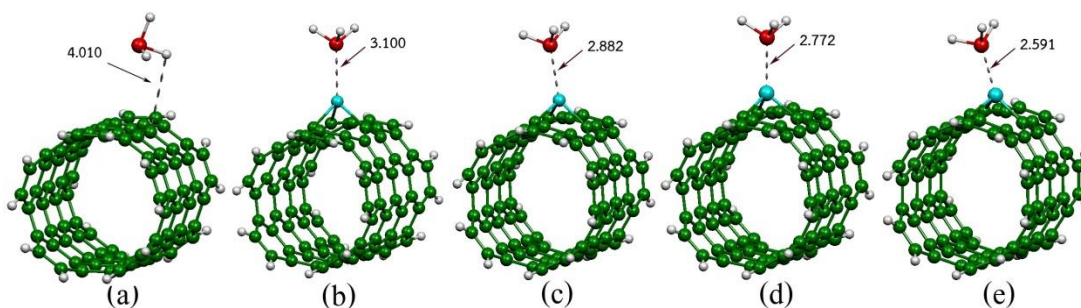
โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ และท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแพลนทินัมดังภาพที่ 31 จากภาพ พบว่าระยะดูดซับแอมโมเนียกับท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติมีค่าเท่ากับ 3.415 Å และระยะดูดซับแอมโมเนียกับท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียมและโครเมียมมีค่าเท่ากับ 2.409, 2.261, 2.195 และ 2.128 Å ตามลำดับ โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแพลนทินัม ดังภาพที่ 32 จากภาพ พบว่า ระยะการดูดซับฟอสฟีนกับท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติมีค่าเท่ากับ 3.320 Å และระยะการดูดซับฟอสฟีนกับท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียมและโครเมียมมีค่าเท่ากับ 2.984, 2.782, 2.674 และ 2.507 Å ตามลำดับ โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแพลนทินัม ดังภาพที่ 33 พบว่าระยะดูดซับอาร์ซีนกับท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ มีค่าเท่ากับ 4.010 Å และระยะดูดซับอาร์ซีนกับท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียมและโครเมียมมีค่าเท่ากับ 3.100, 2.882, 2.772 และ 2.591 Å ตามลำดับ อธิบายได้ว่าท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแพลนทินัมสามารถเกิดอันตรกิริยากับแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีนได้ดีกว่าท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ



ภาพที่ 31 โครงสร้างการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอน (a) NH_3/SWCNT , (b) $\text{NH}_3/\text{Sc-SWCNT}$, (c) $\text{NH}_3/\text{Ti-SWCNT}$, (d) $\text{NH}_3/\text{V-SWCNT}$, และ (e) $\text{NH}_3/\text{Cr-SWCNT}$



ภาพที่ 32 โครงสร้างการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนาโนคาร์บอน (a) PH_3/SWCNT , (b) $\text{PH}_3/\text{Sc-SWCNT}$, (c) $\text{PH}_3/\text{Ti-SWCNT}$, (d) $\text{PH}_3/\text{V-SWCNT}$, และ (e) $\text{PH}_3/\text{Cr-SWCNT}$



ภาพที่ 33 โครงสร้างการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอน (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) $\text{AsH}_3/\text{Cr-SWCNT}$

ตารางที่ 4 ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะการดูดซับของการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติและที่มีการเติม โลหะแทรนซิชัน

ระบบ	ความยาวพันธะ (Å)			มุมพันธะ (°)			ระยะดูดซับ (Å)
	C1-M	C2-M	C3-M	C1-M-C2	C2-M-C3	C3-M-C1	
NH ₃ /SWCNT	1.455	1.426	1.426	118.3	119.5	118.3	3.415
NH ₃ /Sc-SWCNT	2.138	2.095	2.095	85.4	82.6	85.4	2.409
NH ₃ /Ti-SWCNT	2.017	1.934	1.934	90.4	87.0	90.4	2.261
NH ₃ /V-SWCNT	1.995	1.892	1.893	88.0	90.2	88.0	2.195
NH ₃ /Cr-SWCNT	1.936	1.834	1.834	91.8	89.6	91.8	2.128
PH ₃ /SWCNT	1.456	1.426	1.426	118.3	119.5	118.3	3.320
PH ₃ /Sc-SWCNT	2.131	2.090	2.090	84.9	84.5	84.9	2.984
PH ₃ /Ti-SWCNT	2.061	1.931	1.932	89.9	87.2	89.9	2.782
PH ₃ /V-SWCNT	1.989	1.936	1.936	89.7	89.9	89.7	2.674
PH ₃ /Cr-SWCNT	1.937	1.834	1.834	92.2	90.3	92.2	2.507
AsH ₃ /SWCNT	1.456	1.427	1.427	118.3	119.5	118.3	4.010
AsH ₃ /Sc-SWCNT	2.129	2.088	2.088	84.9	82.5	84.9	3.100
AsH ₃ /Ti-SWCNT	2.016	1.931	1.931	89.9	87.3	89.9	2.882
AsH ₃ /V-SWCNT	1.989	1.935	1.935	89.8	90.0	89.8	2.772
AsH ₃ /Cr-SWCNT	1.936	1.834	1.834	92.2	90.3	92.2	2.591

2. สมบัติทางพลังงานการดูดซับ สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ ในทอมของพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน และค่าการถ่ายโอนประจุ

การศึกษาสมบัติสมบัติด้านพลังงานการดูดซับ (ΔE_{ads}) สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ ในทอมของพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (E_{HOMO}) พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (E_{LUMO}) แถบพลังงาน (ΔE_{gap}) และการถ่ายโอนประจุบางส่วน (PCT) ของการดูดซับ แอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติม โลหะแทรนซิชัน ดังแสดงในตารางที่ 5 จากตารางพบว่าพลังงานการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติมีค่าเท่ากับ -0.72 kcal/mol และพลังงานการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียมและ โครเมียมค่าเท่ากับ -37.16 , -36.24 ,

-34.14 และ -29.81 kcal/mol พลังงานการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนานโนคาร์บอนแบบปกติมีค่าเท่ากับ -0.51kcal/mol และพลังงานการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียมไทเทเนียม วาเนเดียมและโครเมียมค่าเท่ากับ -22.56, -24.16, -18.63 และ -14.47kcal/mol พลังงานการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนานโนคาร์บอนแบบปกติมีค่าเท่ากับ-0.34kcal/mol และพลังงานการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียมและโครเมียมค่าเท่ากับ -59.75, -58.29,-54.19 และ -50.32kcal/mol จากข้อมูลทางพลังงานการดูดซับสามารถสรุปได้ว่าการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียมและโครเมียมเป็นการปรับปรุงความสามารถในการดูดซับแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีน โดยท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียมสามารถดูดซับแอมโมเนียได้ดีที่สุดและท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมวาเนเดียมสามารถดูดซับฟอสฟีนและอาร์ซีนได้ดีที่สุด

จากการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในทอมพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ของการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนานโนคาร์บอนแบบปกติมีค่าเท่ากับ -4.436 และ -3.320 eV ตามลำดับ และมีแถบพลังงานเท่ากับ 1.116 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในทอมพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียมและโครเมียมมีค่าเท่ากับ -4.109, -3.810, -3.919 และ -3.973 eV ตามลำดับ พลังงานต่ำสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่มีค่าเท่ากับ -2.993, -2.640, -2.830 และ -2.940 eVตามลำดับและมีแถบพลังงาน เท่ากับ 1.116, 1.170, 1.088 และ 1.034 ตามลำดับ สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในทอมพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ของการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนานโนคาร์บอนแบบปกติมีค่าเท่ากับ -4.436 และ-3.320eV ตามลำดับและมีแถบพลังงานเท่ากับ1.116eV สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในทอมพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียมและโครเมียมมีค่าเท่ากับ -4.245, -3.864, -3.973 และ -3.973eV ตามลำดับ พลังงานต่ำสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่มีค่าเท่ากับ -3.075, -2.694, -2.885 และ -2.830eV ตามลำดับ และมีแถบพลังงานเท่ากับ 1.170, 1.170, 1.088 และ 1.143eV ตามลำดับ สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในทอมพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับ อาร์ซีนบนท่อนานโนคาร์บอนแบบปกติมีค่าเท่ากับ -4.408 และ -3.265eV ตามลำดับและมีแถบพลังงานเท่ากับ1.143 eV สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในทอมพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนานโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม

ไทเทเนียม วานาเดียมและโครเมียมมีค่าเท่ากับ -4.272, 3.891, -4.000 และ -4.000 eV ตามลำดับ พลังงานต่ำสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่มีค่าเท่ากับ -3.102, -2.694, -2.912 และ -2.857 eV ตามลำดับ และมีแถบพลังงานเท่ากับ 1.170, 1.197, 1.088 และ 1.143 eV ตามลำดับ เมื่อเปรียบเทียบแถบพลังงานของทอานาโนคาร์บอนแบบปกติกับทอานาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม วานาเดียมและโครเมียมค่าแถบพลังงานมีการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อย

การศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของการถ่ายโอนประจุบางส่วน (Partial charge transfer : PCT) สามารถคำนวณได้โดยใช้ Natural bond orbital (NBO) โดยผลรวมประจุของแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีนก่อนทำการคำนวณมีค่าเป็นศูนย์ หลังจากคำนวณโครงสร้างและ NBO พบว่าการถ่ายโอนประจุบางส่วนสำหรับการดูดซับแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีนบนทอานาโนคาร์บอนแบบปกติมีค่าเท่ากับ 0.005, 0.001 และ 0.000 e ตามลำดับสอดคล้องกับค่าพลังงานการดูดซับที่แสดงให้เห็นว่าอันตรกิริยาระหว่างท่อกับแก๊สทั้ง 3 มีน้อยมาก สำหรับทอานาโนคาร์บอนที่มีการเติมที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม วานาเดียมและโครเมียมเมื่อนำไปดูดซับแอมโมเนียมีค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วนเท่ากับ 0.103, 0.163, 0.176 และ 0.195 eV ตามลำดับ เมื่อนำไปดูดซับฟอสฟีนมีค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วนเท่ากับ 0.143, 0.193, 0.180 และ 0.215 eV ตามลำดับ เมื่อนำไปดูดซับอาร์ซีนมีค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วนเท่ากับ 0.148, 0.195, 0.176 และ 0.212 eV ตามลำดับ จากค่าการถ่ายโอนประจุแสดงให้เห็นว่าเกิดอันตรกิริยาระหว่างแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีนกับทอานาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม วานาเดียมและโครเมียม

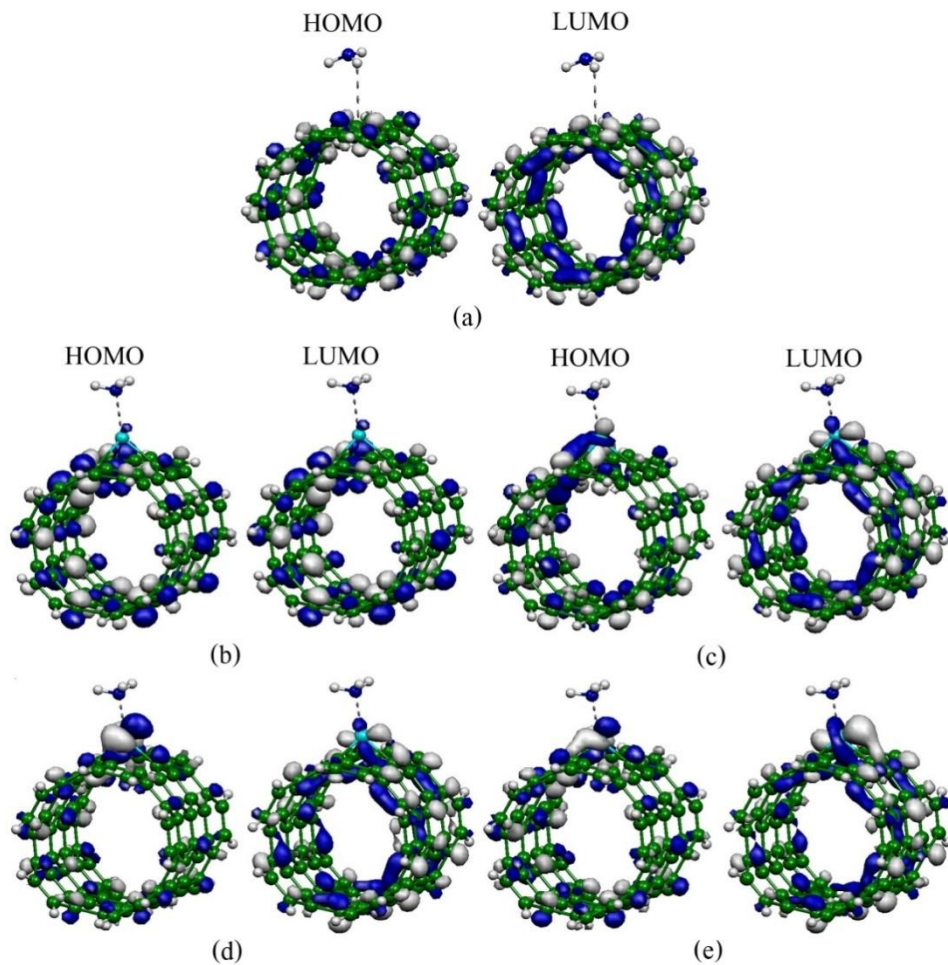
ตารางที่ 5 พลังงานการดูดซับแก๊สพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน ผลต่างของแถบพลังงาน และค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วน

ระบบ	ΔE_{ads} (kcal/mol)	E_{HOMO} (eV)	E_{LUMO} (eV)	ΔE_{gap} (eV)	$\Delta\Delta E_{\text{gap}}$ (eV)	PCT (e ⁻)
NH ₃ /SWCNT	-0.72	-4.436	-3.320	1.116	-	0.005
NH ₃ /Sc-SWCNT	-29.81	-4.109	-2.993	1.116	0.000	0.103
NH ₃ /Ti-SWCNT	-36.24	-3.810	-2.640	1.170	-0.054	0.163
NH ₃ /V-SWCNT	-34.14	-3.919	-2.830	1.088	0.027	0.176
NH ₃ /Cr-SWCNT	-37.16	-3.973	-2.940	1.034	0.082	0.195
PH ₃ /SWCNT	-0.51	-4.436	-3.320	1.116	-	0.001
PH ₃ / Sc-SWCNT	-14.47	-4.245	-3.075	1.170	-0.054	0.143
PH ₃ /Ti-SWCNT	-18.63	-3.864	-2.694	1.170	-0.054	0.193
PH ₃ /V-SWCNT	-24.16	-3.973	-2.885	1.088	0.027	0.180
PH ₃ /Cr-SWCNT	-22.56	-3.973	-2.830	1.143	-0.027	0.215
AsH ₃ /SWCNT	-0.34	-4.408	-3.265	1.143	-	0.000
AsH ₃ / Sc-SWCNT	-50.32	-4.272	-3.102	1.170	-0.027	0.148
AsH ₃ /Ti-SWCNT	-54.19	-3.891	-2.694	1.197	-0.054	0.195
AsH ₃ /V-SWCNT	-59.75	-4.000	-2.912	1.088	0.054	0.176
AsH ₃ /Cr-SWCNT	-58.29	-4.000	-2.857	1.143	0.000	0.212

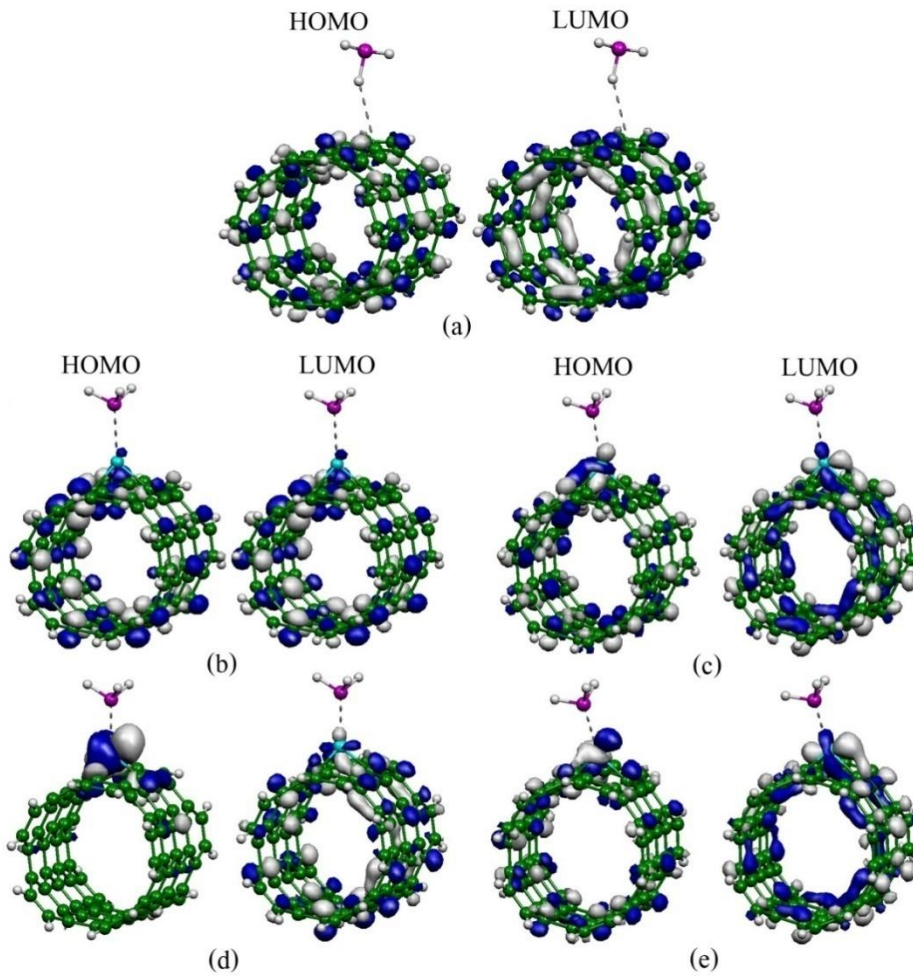
3. การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่กับตำแหน่งออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่กับตำแหน่งออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนีย ฟอสซีน และอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียมและโครเมียมแสดงดังภาพที่ 34 การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ภาพที่ 35 การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่ง

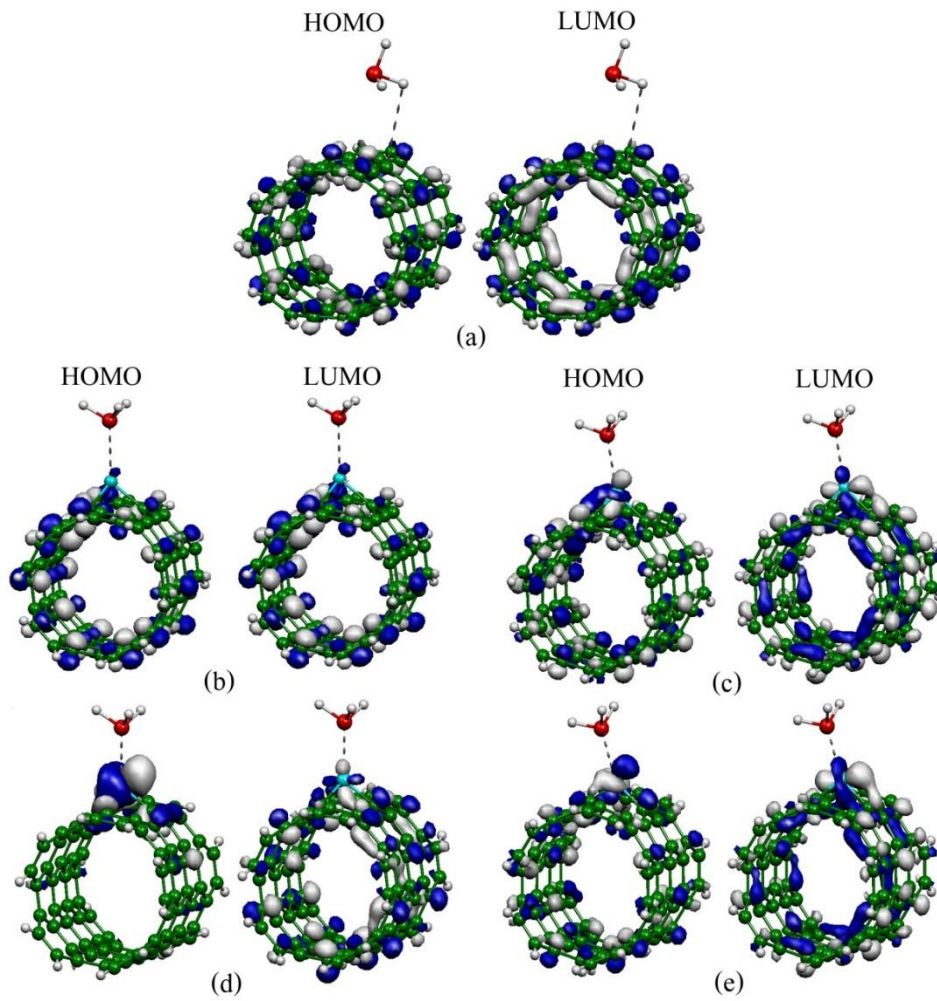
ออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ภาพที่ 36 การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะ พบว่าอิเล็กตรอนจะกระจายอยู่ในรอบๆ ท่อนาโนคาร์บอนและตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน



ภาพที่ 34 การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) NH_3/SWCNT , (b) $\text{NH}_3/\text{Sc-SWCNT}$, (c) $\text{NH}_3/\text{Ti-SWCNT}$, (d) $\text{NH}_3/\text{V-SWCNT}$ และ (e) $\text{NH}_3/\text{Cr-SWCNT}$

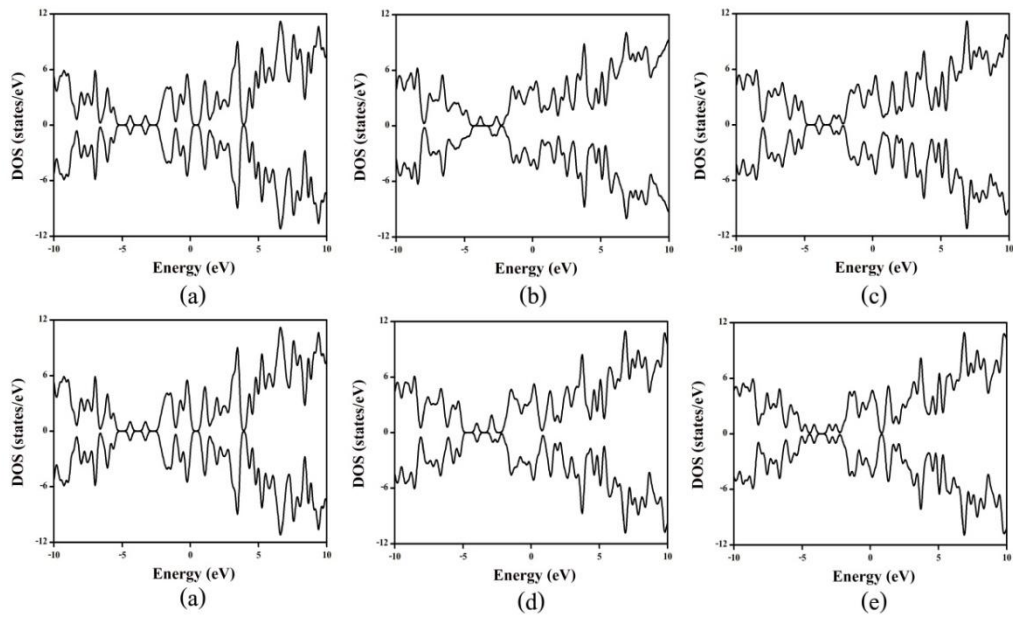


ภาพที่ 35 การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับฟอสฟีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน (a) PH_3/SWCNT , (b) $\text{PH}_3/\text{Sc-SWCNT}$, (c) $\text{PH}_3/\text{Ti-SWCNT}$, (d) $\text{PH}_3/\text{V-SWCNT}$ และ (e) $\text{PH}_3/\text{Cr-SWCNT}$

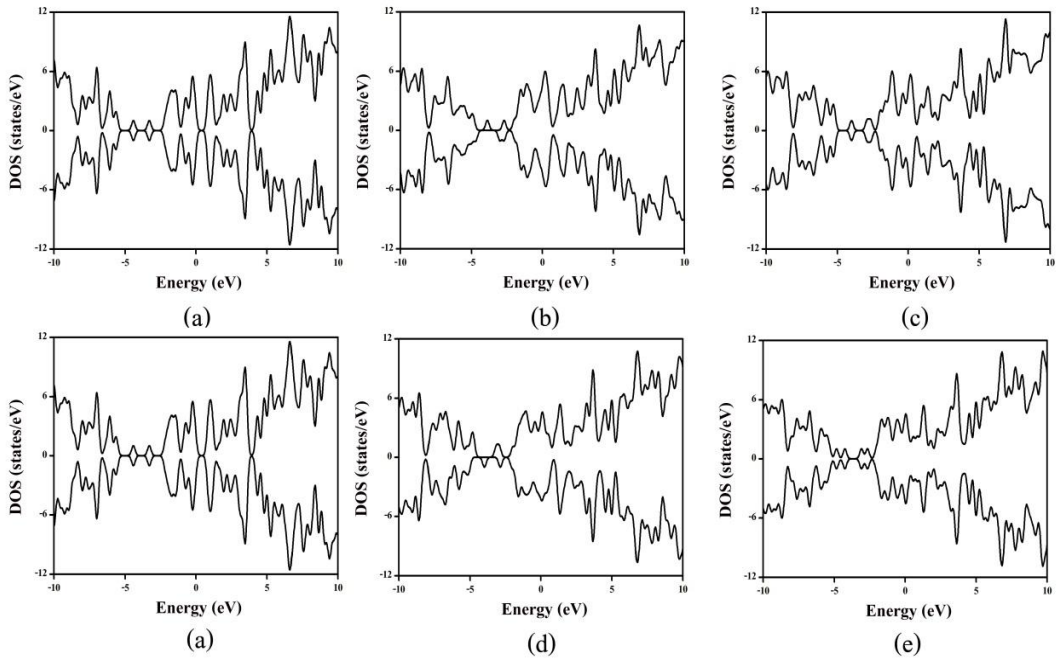


ภาพที่ 36 การพล็อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน (a) $\text{AsH}_3/\text{SWCNT}$, (b) $\text{AsH}_3/\text{Sc-SWCNT}$, (c) $\text{AsH}_3/\text{Ti-SWCNT}$, (d) $\text{AsH}_3/\text{V-SWCNT}$ และ (e) $\text{AsH}_3/\text{Cr-SWCNT}$

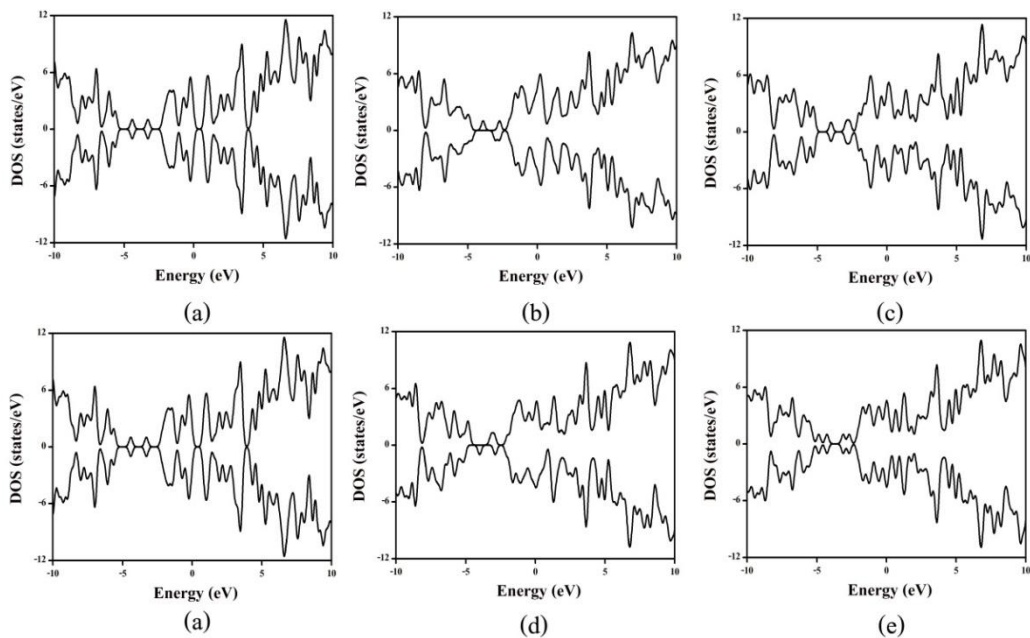
การศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในทอมความหนาแน่นสถานะสำหรับ การดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนที่เติมโลหะทรานซิชันดังแสดงในภาพที่ 37-39 พบว่า ความหนาแน่นสถานะของการเติมโลหะทรานซิชันบนท่อนาโนคาร์บอนมีการเปลี่ยนแปลง จากปกติอธิบายได้ว่าโลหะทรานซิชันที่เติมลงไปมีผลต่อความหนาแน่นสถานะของท่อ นาโนคาร์บอน ซึ่งหมายความว่าท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะทรานซิชันสามารถดูดซับ ก๊าซได้



ภาพที่ 37 ความหนาแน่นสถานะ (DOS) (a) NH_3/SWCNT , (b) $\text{NH}_3/\text{Sc-SWCNT}$, (c) $\text{NH}_3/\text{Ti-SWCNT}$, (d) $\text{NH}_3/\text{V-SWCNT}$ และ (e) $\text{NH}_3/\text{Cr-SWCNT}$



ภาพที่ 38 ความหนาแน่นสถานะ (DOS) (a) PH_3/SWCNT , (b) $\text{PH}_3/\text{Sc-SWCNT}$, (c) $\text{PH}_3/\text{Ti-SWCNT}$, (d) $\text{PH}_3/\text{V-SWCNT}$ และ (e) $\text{PH}_3/\text{Cr-SWCNT}$



ภาพที่ 39 ความหนาแน่นสถานะ (DOS) (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) $\text{AsH}_3/\text{Cr-SWCNT}$