บทที่ 5

สรุปผลการดำเนินการวิจัย

ในงานวิจัยนี้ได้ผลการศึกษาโครงสร้างที่เสถียรสมบัติทางโครงสร้าง พลังงานการยึดจับสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันและศึกษาโครงสร้างที่เสถียรพลังงานการดูดซับ สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ ของการดูดซับแอมโมเนียฟอสฟีน และอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ ของทฤษฎี จากผลการคำนวณสามารถสรุปได้ ดังนี้

สมบัติทางโครงสร้าง พลังงานการยึดจับ สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ในการศึกษาสมบัติทางโครงสร้างที่เสถียร สมบัติทางโครงสร้าง พลังงานการยึดจับและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พบว่าความยาวพันธะและมุมพันธะของท่อนาโนคาร์บอนตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันเปลี่ยนแปลงไปจากเดิมโดยความยาวพันธะเพิ่มขึ้นและมุมพันธะแคบลง ทั้งนี้เนื่องจากขนาดอะตอมของโลหะแทรนซิชันที่เติมลงบนท่อนาโนคาร์บอนมีขนาดใหญ่กว่าอะตอมของคาร์บอนจึงไม่เหมาะกับขนาดของโพรงที่มีอยู่จึงทำให้อะตอมของโลหะแทรนซิชันจะยกตัวขึ้นจากผิวของท่อนาโนคาร์บอนทำให้ความยาวพันธะเพิ่มขึ้นและมุมพันธะลดลงทำให้เกิดลักษณะคล้ายพีระมิดตรงตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันจึงทำให้โครงสร้างท่อนาโนคาร์บอนที่เติมโลหะมีความเหมาะสมที่จะใช้ในการดูดซับแก๊สเนื่องจากมีพื้นที่ผิวสัมผัสสูงขึ้น ด้านพลังงานการยึดจับพบว่าโลหะแทรนซิชันสามารถยึดจับกับท่อนาโนคาร์บอนได้โดยการเติมโครเมียมสามารถยึดจับกับท่อนาโนคาร์บอนได้ดีกว่าโมลิบดีนัมเทคนีเชียม ไนโอเบียม เซอร์โคเนียม ไทเทเนียมวาเนเดียมแมงกานีส สแกนเดียม และอิตเทรียม ตามลำดับเมื่อเปรียบเทียบแถบพลังงานของท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติกับแถบพลังงานของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันแถบพลังงานเปลี่ยนแปลงเล็กน้อย สมบัติทางการถ่ายโอนประจุ พบว่าโลหะแทรนซิชันมีการถ่ายโอนประจุไปยังอะตอมคาร์บอนรอบ ๆ

ตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันทำให้โลหะแทรนซิชันที่เติมลงไปในท่อนาโนคาร์บอนแสดงประจุเป็นบวกและคาร์บอนอะตอมรอบๆ ตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีประจุเป็นลบการกระจายตัวของอิเล็กตรอนในโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนจะกระจายตัวอยู่รอบๆ ตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันและกระจายบนท่อนาโนคาร์บอนจึงเป็นบริเวณที่มีความเหมาะสมในการเกิดอันตรกิริยากับแก๊สหรือสารที่เหมาะสม ความหนาแน่นสถานะของการเติมโลหะแทรนซิชันบนท่อนาโนคาร์บอนมีการเปลี่ยนแปลงจากท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติเล็กน้อยซึ่งอธิบายได้ว่า โลหะแทรนซิชันที่เติมลงไปมีผลต่อความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอน จากผลการศึกษาคุณสมบัติทางโครงสร้าง พลังงานการยึดจับ สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ สามารถสรุปได้ว่าการเติมโลหะแทรนซิชันบนท่อนาโนคาร์บอนเป็นโครงสร้างที่เสถียรและเป็นการปรับปรุงท่อนาโนคาร์บอนให้ดีขึ้นสามารถนำไปพัฒนาเป็นวัสดุในการตรวจสอบแก๊สหรือสารที่มีความเหมาะสมได้

สมบัติทางโครงสร้าง พลังงานการดูดซับ สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ ของการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ในการศึกษาโครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันในครั้งนี้มีแก๊สทั้งหมด 3 ชนิด ได้แก่ แอมโมเนีย ฟอสฟีน และอาร์ซีนโลหะที่เติมบนท่อนาโนคาร์บอนได้แก่ สแกนเดียม ไทเทเนียม วาเนเดียม และโครเมียมโดยผลการศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง พลังงานการดูดซับและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ พบว่าในการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พลังงานการดูดซับเรียงจากมากไปน้อย ดังนี้ NH_3/Cr-SWCNT> NH_3/Ti-SWCNT> NH_3/V-SWCNT> NH_3/Sc-SWCNT> NH_3/SWCNTหมายความว่าท่อนาโนคาร์บอนที่เติมโลหะแทรนซิชันสามารถดูดซับแอมโมเนียได้ดีกว่าท่อนาโนคาร์บอนปกติโดยท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียมสามารถดูดซับแอมโมเนียได้ดีที่สุด การดูดซับฟอสฟีนบนท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีพลังงานการดูดซับเรียงลำดับจากมากไปน้อย ดังนี้ PH_3/Cr-SWCNT> PH_3/V-SWCNT> PH_3/Ti-SWCNT> PH_3/Sc-SWCNT> PH_3/SWCNTหมายความว่าการท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันสามารถดูดซับฟอสฟีนได้ดีกว่าท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติโดยท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมเวเนเดียมสามารถดูดซับฟอสฟีนได้ดีที่สุด การดูดซับอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

มีพลังงานการดูดซับเรียงจากมากไปน้อยดังนี้ AsH_3/V-SWCNT> AsH_3/Cr-SWCNT> AsH_3/Ti-SWCNT> AsH_3/Sc-SWCNT>AsH_3/SWCNTหมายความว่าการดูดซับอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันได้ดีกว่าท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ โดยท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมวาเนดียมสามารถดูดซับอาร์ซีนได้ดีที่สุด สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ในการดูดซับแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีนบนท่อนาโนคาร์บอนที่เติมโลหะแทรนซิชันเปรียบเทียบกับท่อนาโนคาร์บอนปกติมีการเปลี่ยนแปลงจากเดิมเล็กน้อยการพล๊อตตำแหน่งออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่กับตำแหน่งออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พบว่าอิเล็กตรอนจะกระจายในตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันและรอบๆ ท่อนาโนคาร์บอน ในการศึกษาความหนาแน่นสถานะพบว่าความหนาแน่นสถานะของการเติมโลหะแทรนซิชันบนท่อนาโนคาร์บอนมีการเปลี่ยนแปลงจากปกติแสดงว่าโลหะแทรนซิชันที่เติมลงไปมีผลต่อความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอน

จากผลการทดลองชี้ให้เห็นว่าโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์เปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจน และค่าพลังงานการดูดซับชี้ให้เห็นว่าท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันสามารถดูดซับ แอมโมเนีย ฟอสฟีน และอาร์ซีนได้ดีกว่าท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ โดยท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียมสามารถดูดซับแอมโมเนียได้ดีที่สุด และท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมวาเนเดียมสามารถดูดซับ ฟอสฟีนและอาร์ซีนได้ดีที่สุด

ข้อเสนอแนะ

1. ควรนำท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันไปศึกษาการดูดซับแก๊สหรือสารชนิดอื่น เพื่อเปรียบเทียบกับการดูดซับแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีน

2. ควรศึกษาการดูดซับแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีน บนวัสดุนาโนคาร์บอนชนิดอื่น เพื่อเปรียบเทียบกับท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน