**ชื่อเรื่อง** : การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอฟทีของการดูดซับแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีน

 บนท่อนาโนคาร์บอนผนังเดี่ยวที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

**ผู้วิจัย :** ประยุทธ บัวแสง **ปริญญา :** วท.ม. (เคมีศึกษา)

**อาจารย์ที่ปรึกษา** : ผศ.ดร.ฌาณุกรณ์ ทับทิมใส อาจารย์ที่ปรึกษาหลัก

 ดร.วันดี รักไร่ อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

**มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม 2559**

**บทคัดย่อ**

ได้ทำการศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงานและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันและการดูดซับแอมโมเนีย ฟอสฟีนและ อาร์ชีน โดยใช้ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ ของทฤษฎี ผลการคำนวณพบว่า ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียมมีความเสถียรมากกว่าโมลิบดีนัม เทคนีเชียม ไนโอเบียม เซอร์โคเนียม ไทเทเนียม วาเนเดียม แมงกานิส สแกนเดียมและอิตเทรียม ตามลำดับ ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียมสามารถดูดซับแอมโมเนียได้ดีกว่าไทเทเนียม วาเนเดียมและสแกนเดียม ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมวาเนเดียมสามารถ ดูดซับฟอสฟีนและอาร์ซีนได้ดีกว่าโครเมียม ไทเทเนียมและสแกนเดียม ตามลำดับ ดังนั้น ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน จึงมีความเหมาะสมที่จะนำไปใช้ในการตรวจจับหรือดูดซับแอมโมเนีย ฟอสฟีนและอาร์ซีน

**TITLE** : A DFT investigation of NH3, PH3 and AsH3 adsorptions on transition metal doped on single-walled carbon nanotubes.

**AUTHOR** : Prayut Buasaeng **DEGREE** : M.Sc. (Chemistry Education)

**ADVISORS** : Asst. Prof. Dr. Chanukorn Tabtimsai Major Advisor

Dr.Wandee Rakrai Co-Advisor

**RAJABHAT MAHA SARAKHAM UNIVERSITY, 2016**

**ABSTRACT**

 Structural, energetic, and electronic properties of transition metals doped carbon nanotube and their NH3, PH3 and AsH3 adsorptions were investigated using the density functional theory method at B3LYP/LanL2DZ level of theory. The calculation results indicated that Cr displays stronger interaction with carbon nanotube than Mo, Tc, Nb, Zr, Ti, V, Mn, Sc, and Y, respectively. The adsorption abilities of Cr-doped carbon nanotube displays stronger interaction with NH3 than Ti, Sc, and V, respectively. The adsorption abilities of PH3 and AsH3 on V-doped SWCNT were stronger than Cr, Ti, and Sc-dope SWCNT respectively. Therefore transition metal-doped carbon nanotube can be used for detections or adsorptions NH3, PH3 and AsH3.