หัวข้อวิจัย การดูดซับแอมโมเนีย ไนโตรเจนไดออกไซด์ คาร์บอนไดออกไซด์ คาร์บอนิลซัลไฟด์ ไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์ บนท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังเดี่ยวที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน: การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอฟที

ผู้ดำเนินการวิจัย ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ณาณุกรณ์ ทับทิมใส

หน่วยงาน สาขาวิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม

ปี พ.ศ. 2561

บทคัดย่อ

ได้ศึกษาการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนแบบผนังเดี่ยวที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นเพื่อประยุกต์ใช้สำหรับเป็นวัสดุกักเก็บและตรวจจับแก๊ส โดยศึกษาการดูดซับแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียม โมลิบดินัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนิเชียมและเรเนียม การดูดซับคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและและแมงกานีส และการศึกษาการดูดซับไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดินัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนิเชียมและเรเนียม จากค่าพลังงานการดูดซับแสดงให้เห็นว่าการเติมโลหะแทรนซิชันจะสามารถปรับปรุงความสามารถในการดูดซับแก๊สของท่อนาโนคาร์บอนได้ โดยการดูดซับแอมโมเนียมดีกว่าไนโตรเจนไดออกไซด์ การดูดซับคาร์บอนิลซัลไฟด์ดีกว่าคาร์บอนไดออกไซด์และความสามารถในการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์ขึ้นอยู่กับโลหะแทรนซิชันที่เติมลงไป เมื่อเปรียบเทียบการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม พบว่าท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันจะเกิดการถ่ายโอนอิเล็กตรอนและเกิดการไฮบริดของออร์บิทัลระหว่างแก๊สกับท่อที่ดีกว่า ดังนั้น งานวิจัยนี้จึงสามารถสรุปได้ว่าท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันจะเกิดการเปลี่ยนแปลงสัญญาณทางไฟฟ้าอันเนื่องมาจากการดูดซับแก๊ส ซึ่งจะสามารถพัฒนาเป็นวัสดุสำหรับตรวจจับแก๊สได้

Research title Adsorption of NH_3, NO_2, CO_2, COS, HCN, and ClCN on transition metal-doped single wall carbon naotubes; A DFT study
Researcher Asst. Prof. Dr.Chanukorn Tabtimsai
Organization Department of Chemistry, Faculty of Science and Technology, Rajabhat Maha Sarakham University
Year 2018

ABSTRACT

Density functional theory calculation is carried out to investigate the adsorption characteristics of gas on transition metal-doped single-walled carbon nanotube (TM-SWCNT) to elaborate their potentials as gas storages and sensors. To study the adsorption of ammonia (NH_3) and nitrogen dioxide (NO_2) on Cr-, Mo-, W-, Mn-, Tc-, and Re-doped SWCNTs, adsorption of carbon dioxide (CO_2) and carbonyl sulfide (COS) on Sc-, Ti-, Cr-, and Mn-doped SWCNTs and adsorption of hydrogen cyanide (HCN) and cyanogens chloride (ClCN) on V-, Nb-, Ta-, Cr-, Mo-, W-, Mn-, Tc-, and Re-doped SWCNTs. The adsorption energies are showed that the adsorption ability of gas adsorption on SWCNT is improved by TM doping in which adsorption ability of NH_3 is higher than NO_2, adsorption ability of CO_2 is higher than COS and adsorption ability of COS and CO_2 is depended on TM doping. Compared with gas molecules adsorption on pristine SWCNT, there exist higher charge transfer and higher orbital hybridization upon adsorption on TM-doped SWCNT. Consequently, the TM-doped SWCNT can transform the existence of gas molecules into electrical signal and they could potentially be used as ideal sensors for detection of gas in ambient situation.