

สารบัญ

เรื่อง	หน้า
กิตติกรรมประกาศ	ก
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ	ข
บทคัดย่อภาษาไทย	ค
สารบัญ	ง
สารบัญตาราง	ช
สารบัญรูปภาพ	ญ
บทที่ 1 บทนำ	1
1.1 ความเป็นมาและมูลเหตุจูงใจในการวิจัย	1
1.2 วัตถุประสงค์ของโครงการ	2
1.3 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับการวิจัย	2
1.4 ขอบเขตของการวิจัย	3
บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	4
2.1 นาโนเทคโนโลยี	4
2.2 วัสดุนาโน	5
2.2.1 ชนิดของวัสดุนาโน	6
2.3 ท่อนาโนคาร์บอน	8
2.3.1 ชนิดของท่อนาโนคาร์บอน	8
2.3.2 ประโยชน์ของท่อนาโนคาร์บอน	10
2.3.3 สมบัติของท่อนาโนคาร์บอน	11
2.3.4 การสังเคราะห์ท่อนาโนคาร์บอน	11
2.4 แก๊สพิษ	13
2.5 ตัวตรวจจับแก๊ส	14
2.5.1 คุณสมบัติของตัวตรวจจับแก๊ส	15
2.5.2 ประเภทของตัวตรวจวัดแก๊ส	16
2.6 เคมีคำนวณหรือการศึกษาเชิงทฤษฎี	17
2.6.1 วิธีกลศาสตร์ควอนตัม (quantum mechanics, QM)	17
2.6.2 ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น	20
2.6.3 เบซิสเซต ฟังก์ชัน (basis set function)	22
2.7 สมบัติของโมเลกุล	24
2.7.1 สมบัติทางโครงสร้างและพลังงาน (geometric and energetic properties)	24
2.7.2 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ (electronic theory)	24

สารบัญ (ต่อ)

เรื่อง	หน้า
2.7.3 ค่าเคมีคอลฮาร์ดเนสส์ (chemical hardness value)	25
2.7.4 ค่าอิเล็กทรอนิกส์โพเทนเชียล (electronic componential value)	25
2.7.5 ค่ามัลลิแกนอิเล็กทรอนิกส์ (Milliken electronegativity)	25
2.7.6 ความหนาแน่นสถานะ (density of state)	25
2.8 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง (related works)	26
บทที่ 3 วิธีดำเนินการวิจัย	
3.1 เครื่องมือและโปรแกรมที่ใช้ในการทำวิจัย	32
3.2 แบบจำลองโมเลกุลที่ใช้ในการทำวิจัย	32
3.3 ขั้นตอนการคำนวณ	34
บทที่ 4 ผลและอภิปรายผล	38
4.1 การดูดซับแก๊สแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอน ...	38
4.1.1 สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอน	38
4.1.2 สมบัติทางพลังงานของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอน	43
4.1.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอน	44
4.2 การดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอน	55
4.2.1 สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอน	55
4.2.2 สมบัติทางพลังงานของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอน	63
4.2.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอน	
4.3 การดูดซับไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอน	77
4.3.1 สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอน	77
4.3.2 สมบัติทางพลังงานของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอน	83
4.3.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอน	84

สารบัญ (ต่อ)

เรื่อง	หน้า
บทที่ 5 สรุปผลการดำเนินวิจัย	91
5.1 สมบัติทางโครงสร้าง	91
5.2 สมบัติทางพลังงานและความสามารถในการดูดซับ	91
5.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์	92
5.4 ข้อเสนอแนะ	92
บรรณานุกรม	93
ภาคผนวก	95
ประวัติผู้วิจัย	102