

## สารบัญตาราง

ตารางที่		หน้า
4.1	ความยาวพันธะ มุมพันธะ ระยะเวลาดูดซับของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันและความยาวพันธะระหว่างไนโตรเจนกับไฮโดรเจนของแก๊สแอมโมเนีย .....	40
4.2	ความยาวพันธะ มุมพันธะ ระยะเวลาจับของแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันและความยาวพันธะระหว่างไนโตรเจนกับออกซิเจนของแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์ .....	41
4.3	พลังงานการดูดซับ ( $E_{ads}$ ) ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเชียมและรีเนียม .....	45
4.4	พลังงานของออร์บิทัลที่มีพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{HOMO}$ ) พลังงานของออร์บิทัลที่มีพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{LUMO}$ ) แลปพลังงาน ( $E_{gap}$ ) การเปลี่ยนแลปพลังงาน ( $\Delta E_{gap}$ ) การถ่ายโอนประจุบางส่วน (PCT) และประจุของโลหะที่เติม (TM) ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	46
4.5	พลังงานของออร์บิทัลที่มีพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานของออร์บิทัลที่มีพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แลปพลังงาน การเปลี่ยนแลปพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วน และประจุของโลหะที่เติมของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ...	47
4.6	ความยาวพันธะ มุมพันธะ ระยะเวลาจับและความยาวพันธะระหว่างคาร์บอนกับออกซิเจนของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	59
4.7	ความยาวพันธะ มุมพันธะ ระยะเวลาดูดซับและความยาวพันธะระหว่างคาร์บอนกับออกซิเจนและคาร์บอนกับกำมะถันของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	60
4.8	พลังงานดูดซับ ( $E_{ads}$ ) ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน	64

สารบัญตาราง (ต่อ)

ตารางที่		หน้า
4.9	ความยาวพันธะ มุมพันธะ ระยะดูดซับของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจน ไซตียาไนต์บนท่อนานาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติม โลหะแพลทินัม ..... โลหะแพลทินัม	79
4.10	ความยาวพันธะ มุมพันธะ ระยะดูดซับของการดูดซับแก๊สไฮยาโนเจน คลอไรด์บนท่อนานาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติม โลหะแพลทินัม ..... โลหะแพลทินัม	80
4.11	พลังงานการดูดซับ ( $E_{ads}$ ) ของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนต์และ ไฮยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนานาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการ เติมโลหะแพลทินัม ..... เติมโลหะแพลทินัม	84
4.12	พลังงานของออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานของ ออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยน แถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วนและประจุของโลหะของการ ดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนต์และไฮยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนานา โนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัม .....	85