สารบัญภาพ

ภาพที่		หน้า
2.1	โครงสร้างท่อนาโนคาร์บอน (a) แบบปลายปิด และ (b) แบบปลายเปิด	8
2.2	ท่อนาโนคาร์บอนชนิดผนังเดี่ยว (a) zigzag, (b) armchair และ (c) chiral	9
2.3	ท่อนาโนผนังท่อหลายชั้น (Multi-walled)	9
2.4	ระบบตรวจจับแก๊ส	13
2.5	การทำงานของระบบตรวจจับแก๊ส	13
2.6	แผนภาพการหาคำตอบของสมการโคห์น-ชามด้วยโปรแกรมคอมพิวเตอร์	21
2.7	การดูดซับแก๊ส (ก) ไนโตรเจนไดออกไซด์ (ข) แอมโมเนีย (ค) น้ำ (ง) คาร์บอนไดออกไซด์และ (จ) ไฮโดรเจนบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแพลลาเดียม.....	27
2.8	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดอกไซด์และแอมโมเนียบนท่อนาโนแกลเลี่ยมไนไทรด์	27
2.9	โครงสร้างของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และสถานะความหนาแน่น	28
2.10	แบบจำลองการดูดซับคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะ 1 และ 2 อะตอม	29
2.11	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไซยาโนเจนคลอไรด์ท่อนาโนโบรอนไนไทรด์ที่มีการเติมอะตอมอะลูมิเนียม	29
2.12	โครงสร้างของการดูดซับฟอร์มาลดีไฮด์บนแผ่นกราฟีนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน	30
2.13	โครงสร้างของการดูดซับไฮโดรเจนไซยาไนด์บนแผ่นกราฟีนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน	30
3.1	แบบจำลองทางโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอน	33
3.2	แบบจำลองทางโครงสร้างของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน	34
3.3	แบบจำลองทางโครงสร้างของการดูดซับ (a) คาร์บอนไดออกไซด์ (b) คาร์บอนิลซัลไฟด์ (c) แอมโมเนีย (d) ไนโตรเจนไดออกไซด์ (e) ไฮโดรเจนไซยาไนด์และ (f) ไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน	34
3.4	การเตรียมโครงสร้างโดยใช้โปรแกรม Gaussview	35
3.5	การเลือกทฤษฎีที่ใช้ในการคำนวณ	35

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
3.6	หน้าต่างโปรแกรม SSH สำหรับการสั่งคำนวณงาน	36
4.1	โครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม (a) ด้านข้างของท่อนาโนคาร์บอนและ (b) ด้านหน้าของท่อนาโนคาร์บอน	38
4.2	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม ความยาวพันธะหน่วยเป็นอังสตรอม	41
4.3	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอน (a) NH_3/Cr-SWCNT, (b) NH_3/Mo-SWCNT, (c) NH_3/W-SWCNT, (d) NH_3/Mn-SWCNT, (e) NH_3/Tc-SWCNT และ (f) NH_3/Re-SWCNT ความยาวพันธะหน่วยเป็นอังสตรอม	42
4.4	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอน (a) NO_2/Cr-SWCNT, (b) NO_2/Mo-SWCNT, (c) NO_2/W-SWCNT, (d) NO_2/Mn-SWCNT, (e) NO_2/Tc-SWCNT และ (f) NO_2/Re-SWCNT ความยาวพันธะหน่วยเป็นอังสตรอม	43
4.5	การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม	48
4.6	การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอน (a) NH_3/Cr-SWCNT, (b) NH_3/Mo-SWCNT และ (c) NH_3/W-SWCNT	48
4.7	การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล SOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอน (a) NH_3/Mn-SWCNT, (b) NH_3/Tc-SWCNT และ (c) NH_3/Re-SWCNT	49
4.8	การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล SOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม	50
4.9	การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล SOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) NO_2/Cr-SWCNT, (b) NO_2/Mo-SWCNT และ (c) NO_2/W-SWCNT	51
4.10	การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน (a) NO_2/Mn-SWCNT, (b) NO_2/Tc-SWCNT และ (c) NO_2/Re-SWCNT	52

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
4.11	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม	53
4.12	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) NH_3/Cr-SWCNT, (b) NH_3/Mo-SWCNT, (c) NH_3/W-SWCNT, (d) NH_3/Mn-SWCNT, (e) NH_3/Tc-SWCNT และ (f) NH_3/Re-SWCNT	53
4.13	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม	54
4.14	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) NO_2/Cr-SWCNT, (b) NO_2/Mo-SWCNT, (c) NO_2/W-SWCNT, (d) NO_2/Mn-SWCNT, (e) NO_2/Tc-SWCNT และ (f) NO_2/Re-SWCNT	55
4.15	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม (a) CO_2/SWCNT, (b) C<u>O</u>S/SWCNT และ (c) CO<u>S</u>/SWCNT	61
4.16	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) CO_2/Sc-SWCNT, (b) CO_2/Ti-SWCNT, (c) CO_2/Cr-SWCNT และ (d) CO_2/Mn-SWCNT	61
4.17	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) C<u>O</u>S/Sc-SWCNT, (b) C<u>O</u>S/Ti-SWCNT), (c) C<u>O</u>S/Cr-SWCNT และ (d) C<u>O</u>S/Mn-SWCNT	62
4.18	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) CO<u>S</u>/Sc-SWCNT, (b) CO<u>S</u>/Ti-SWCNT, (c) CO<u>S</u>/Cr-SWCNT และ (d) CO<u>S</u>/Mn-SWCNT	63
4.19	การพล็อตการกระจายตัวของ HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม	67
4.20	การพล็อตการกระจายตัวของ HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอน (a) CO_2/Ti–SWCNT และ (b) CO_2/Cr–SWCNT	68

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
4.21	การพล็อตการกระจายตัวของ SOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอน (a) CO_2/Sc–SWCNT และ (b) CO_2/Mn–SWCN	68
4.22	การพล็อตการกระจายตัวของ HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม (COS/SWCNT)	69
4.23	การพล็อตการกระจายตัวของ HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอน (a) COS/Ti–SWCNT และ (b) COS/Cr–SWCNT	70
4.24	การพล็อตการกระจายตัวของ SOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอน (a) COS/Sc–SWCNT และ (b) COS/Mn–SWCNT	71
4.25	การพล็อตการกระจายตัวของ HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม (COS/SWCNT)	72
4.26	การพล็อตการกระจายตัวของ HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอน (a) COS/Ti–SWCNT และ (b) COS/Cr–SWCNT	72
4.27	การพล็อตการกระจายตัวของ SOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอน (a) COS/Sc–SWCNT และ (b) COS/Mn–SWCNT	73
4.28	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม	74
4.29	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) CO_2/Sc-SWCNT, (b) CO_2/Ti-SWCNT, (c) CO_2/Cr-SWCNT และ (d) CO_2/Mn-SWCNT	74
4.30	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม	75
4.31	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) COS/Sc-SWCNT, (b) COS/Ti-SWCNT, (c) COS/Cr-SWCNT และ (d) COS/Mn-SWCNT	76

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
4.32	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม (COS/SWCNT)	76
4.33	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) COS/Sc-SWCNT, (b) COS/Ti-SWCNT, (c) COS/Cr-SWCNT และ (d) COS/Mn-SWCNT	77
4.34	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์ (A) และไซยาโนเจนคลอไรด์ (B) บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม ความยาวพันธะหน่วยเป็นอังสตรอม	81
4.35	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์บนท่อนาโนคาร์บอน (a) HCN/V-SWCNT, (b) HCN/Cr-SWCNT, (c) HCN/Mn-SWCNT, (d) HCN/Nb-SWCNT, (e) HCN/Mo-SWCNT, (f) HCN/Tc-SWCNT, (g) HCN/Ta-SWCNT, (h) HCN/W-SWCNT และ (i) HCN/Re-SWCNT ความยาวพันธะหน่วยเป็นอังสตรอม	81
4.36	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอน (a) ClCN/V-SWCNT, (b) ClCN/Cr-SWCNT, (c) ClCN/Mn-SWCNT, (d) ClCN/Nb-SWCNT, (e) ClCN/Mo-SWCNT, (f) ClCN/Tc-SWCNT, (g) ClCN/Ta-SWCNT, (h) ClCN/W-SWCNT และ (i) ClCN/Re-SWCNT ความยาวพันธะหน่วยเป็นอังสตรอม	82
4.37	การพล๊อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม	86
4.38	การพล๊อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์บนท่อนาโนคาร์บอน (a) HCN/V-SWCNT, (b) HCN/Cr-SWCNT, (c) HCN/Mn-SWCNT, (d) HCN/Nb-SWCNT, (e) HCN/Mo-SWCNT, (f) HCN/Tc-SWCNT, (g) HCN/Nb-SWCNT, (h) HCN/Mo-SWCNT และ (i) HCN/Tc-SWCNT	87
4.39	การพล๊อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอน (a) ClCN/V-SWCNT, (b) ClCN/Cr-SWCNT, (c) ClCN/Mn-SWCNT, (d) ClCN/Nb-SWCNT, (e) ClCN/Mo-SWCNT, (f) ClCN/Tc-SWCNT, (g) ClCN/Nb-SWCNT, (h) ClCN/Mo-SWCNT และ (i) ClCN/Tc-SWCNT	88

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
4.40	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม	89
4.41	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) HCN/V-SWCNT, (b) HCN/Cr-SWCNT, (c) HCN/Mn-SWCNT, (d) HCN/Nb-SWCNT, (e) HCN/Mo-SWCNT , (f) HCN/Tc-SWCNT, (g) HCN/Ta-SWCNT, (h) HCN/W-SWCNT และ (f) HCN/Re-SWCNT	89
4.42	ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) ClCN/V-SWCNT, (b) ClCN/Cr-SWCNT, (c) ClCN/Mn-SWCNT, (d) ClCN/Nb-SWCNT, (e) ClCN/Mo-SWCNT , (f) ClCN/Tc-SWCNT, (g) ClCN/Ta-SWCNT, (h) ClCN/W-SWCNT และ (f) ClCN/Re-SWCNT	90