บทที่ 1
บทนำ

1.1 ความเป็นมาและมูลเหตุจูงใจในการวิจัย

สาเหตุหนึ่งของการเกิดมลภาวะทางอากาศคือมีโมเลกุลของแก๊สพิษลอยในอากาศในปริมาณมากและความเข้มข้นสูง โดยแก๊สพิษส่วนหนึ่งเกิดจากการเผาไหม้ในยานยนต์ออกสู่สิ่งแวดล้อม การคมนาคมที่มีมากขึ้นทั้งในส่วนของการเดินทางและการขนส่ง การปล่อยแก๊สจากโรงงานอุตสาหกรรมที่กำลังเกิดขึ้นจำนวนมากที่ขาดการดูแลและควบคุม ก่อให้เกิดผลเสียต่างๆ ตามมาคือมีปริมาณแก๊สพิษปนเปื้อนในอากาศสูง ส่งผลกระทบโดยตรงต่อการดำรงชีวิตของมนุษย์และก่อให้ปัญหาทางด้านสุขภาพอนามัย ดังนั้นการติดตามและเฝ้าระวังมลภาวะทางอากาศจึงมีความสำคัญและจำเป็นอย่างยิ่ง ตัวอย่างแก๊สพิษส่วนใหญ่ที่ปล่อยตามโรงงานอุตสาหกรรม เช่น แก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ แก๊สคาร์บอนมอนนอกไซด์ แก๊สคาร์บอนไดซัลไฟด์ แก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์ แก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์ แก๊สไนโตรเจนมอนนอกไซด์ แก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และแก๊สไซยาโนเจนคลอไรด์ เป็นต้น และแก๊สที่พบตามท้องถนนทั่วไปที่ปล่อยออกมาจากการเผาไหม้ของยานยนต์ เช่น แก๊สคาร์บอนไดดอกไซด์ แก๊สคาร์บอนมอนนอกไซด์ แก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์และซัลเฟอร์ออกไซด์ เป็นต้น หากแก๊สพิษที่ถูกปล่อยออกมามีความเข้มข้นสูงหรือเกินกว่ามาตรฐานที่มนุษย์จะรับได้ จะก่อให้เกิดอันตรายต่อร่างกายได้ โดยส่วนมากแก๊สพิษเมื่อรวมตัวกับน้ำในอากาศจะมีฤทธิ์เป็นกรด หากสัมผัสทางการหายใจ มีผลทำให้ระคายเคืองอย่างรุนแรงต่อระบบทางเดินหายใจ รวมทั้งระคายเคืองต่อตาและคอ และเป็นอันตรายถึงตายได้ ฯลฯ เพื่อเป็นการเฝ้าระวังและป้องกันอันตรายที่อาจจะเกิดขึ้น จึงจำเป็นจะต้องมีวัสดุหรืออุปกรณ์ที่สามารถดูดซับหรือกักเก็บหรือใช้ตัวตรวจวัดแก๊สในสถานที่ต่างๆ เพื่อให้สามารถดูดซับได้ในปริมาณมากหรือเพื่อให้ทราบปริมาณหรือความเข้มข้นของแก๊สดังกล่าว การศึกษาและพัฒนาวัสดุที่นำมาใช้ผลิตเป็นวัสดุกักเก็บ (storage) และตัวตรวจจับหรือแก๊สเซ็นเซอร์ (gas sensor) จึงมีความจำเป็นในยุคปัจจุบันเป็นอย่างยิ่ง วัสดุกักเก็บแก๊สที่ดีควรสามารถกักเก็บแก๊สได้ปริมาณมากและไม่เกิดการรั่วไหล ส่วนตัวตรวจจับแก๊สที่ดีควรมีขนาดเล็ก มีความว่องไว การตอบสนองและความจำเพาะที่สูง สามารถเชื่อถือได้ และที่สำคัญควรมีราคาไม่แพง จากผลการวิจัยด้านนาโนเทคโนโลยีพบว่ามีการพัฒนาวัสดุระดับนาโนเพื่อนำมาใช้ในระบบเฝ้าระวังมลพิษทางอากาศและมีรายงานการวิจัยหลายชิ้นที่พิสูจน์ให้เห็นว่าวัสดุระดับนาโนนี้สามารถทำงานได้อย่างมีประสิทธิภาพ

วัสดุที่นักนาโนเทคโนโลยีสนใจที่จะศึกษาเพื่อพัฒนาเป็นตัวตรวจจับแก๊สคือท่อนาโนคาร์บอน (carbon nanotube) เนื่องจากมีสมบัติพิเศษต่างๆ อาทิเช่น มีสมบัติเชิงกล สมบัติทางความร้อนและสมบัติอิเล็กทรอนิกส์ที่ดี จากสมบัติดังกล่าวจึงได้มีการนำท่อนาโนคาร์บอนไปประยุกต์ใช้ประโยชน์ในงานด้านต่างๆ อย่างกว้างขวาง ยกตัวอย่างเช่นการนำท่อนาโนคาร์บอนไปประยุกต์ใช้เป็นวัสดุผสมพอลิเมอร์สำหรับกักเก็บแก๊สหรือใช้เป็นตัวตรวจจับแก๊ส นอกจากนี้ยังพบว่าท่อนาโนคาร์บอนมีพื้นผิวที่สูงสามารถดูดซับโมเลกุลของแก๊ส มีความไวและการตอบสนองทางไฟฟ้าที่ดีและสามารถทำงานได้ดีที่อุณหภูมิห้องและที่ช่วงอุณหภูมิสูง ผลการวิจัยก่อนหน้าที่ผู้วิจัยได้ศึกษาและได้รับการตีพิมพ์ในวารสารระดับนานาชาติพบว่าท่อนาโนคาร์บอนสามารถดูดซับโมเลกุลแก๊สที่มีขนาดเล็กได้ เช่น แก๊ส

ไฮโดรเจน แก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์ แก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ แอมโมเนียและน้ำ โดยพบว่าการเติมโลหะแทรนซิชันบนท่อนาโนคาร์บอนจะสามารถปรับปรุงความสามารถในการดูดซับและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติได้ อย่างไรก็ตามการศึกษาในหัวข้อที่เกี่ยวกับการดูดซับแก๊สท่อนาโนคาร์บอนที่ผู้วิจัยเคยทำมาก่อนหน้าเลือกศึกษาท่อนาโนคาร์บอนที่มีขนาดเล็กในอนาคตผู้วิจัยต้องศึกษาท่อนาโนคาร์บอนที่มีขนาดใหญ่ขึ้น อีกทั้งมีโลหะแทรนซิชันและแก๊สอีกหลายชนิดที่ผู้วิจัยต้องศึกษาเพิ่มเติมเพื่อให้เกิดองค์ความรู้ใหม่เพิ่มยิ่งขึ้น

การศึกษาเชิงทฤษฎี (theoretical study) หรือเคมีการคำนวณ (computational chemistry) เป็นสาขาหนึ่งของเคมีเชิงทฤษฎี (theoretical chemistry) ที่ได้รับความนิยมและนำมาใช้การศึกษาความสามารถในการเป็นตัวตรวจจับแก๊สของท่อนาโนคาร์บอน เนื่องจากมีความถูกต้องสูงเทียบเท่าการทดลองจริงในห้องปฏิบัติการ โดยการศึกษาเชิงทฤษฎีเป็นการใช้แนวคิดทฤษฎีเคมีควอนตัมที่พิสูจน์ได้ โดยการใช้ศาสตร์ทางฟิสิกส์ เคมี คณิตศาสตร์และคอมพิวเตอร์มาออกแบบหรือสร้างระบบจำลองโมเลกุลได้อย่างมีประสิทธิภาพ ยกตัวอย่างเช่น ระบบจำลองดีเอ็นเอ ระบบจำลองโปรตีน ระบบจำลองโครงสร้างระดับนาโน เป็นต้น ซึ่งสมการทางคณิตศาสตร์ในวิชาเคมีควอนตัมมีความซับซ้อนและความยุ่งยากจึงต้องใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ในการคำนวณ ซึ่งคอมพิวเตอร์สมรรถนะสูงนี้เองที่เป็นเครื่องมือที่ช่วยให้นักเคมีคำนวณ เพื่อช่วยลดระยะเวลาในการค้นหาโครงสร้างหรือสมบัติต่างๆ ของโมเลกุลและลดการใช้สารเคมีในห้องปฏิบัติการก่อนทำการทดลองจริง

1.2 วัตถุประสงค์ของโครงการ

1) เพื่อศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์และสมบัติทางพลังงานของการดูดซับแก๊สแอมโมเนีย (NH_3) และไนโตรเจนไดออกไซด์ (NO_2) บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียม โมลิปดินัม (Mo) ทังสเตน (W) แมงกานีส เทคนิเชียม (Tc) และเรเนียม (Re)

2) เพื่อศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์และสมบัติทางพลังงานของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (CO_2) และคาร์บอนิลซัลไฟด์ (COS) บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม (Sc) ไทเทเนียม (Ti) โครเมียม (Cr) และแมงกานีส (Mn)

3) เพื่อศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์และสมบัติทางพลังงานของการดูดซับไฮโดรเจนไซยาไนด์ (HCN) และไซยาโนเจนคลอไรด์ (ClCN) บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมวาเนเดียม (V) ไนโอเบียน (Nb) แทนทาลัม (Ta) โครเมียม โมลิปดินัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนิเชียมและเรเนียม

1.3 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับจากการวิจัย

มีความรู้ความเข้าใจเกี่ยวกับสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์และสมบัติทางพลังงานของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียม โมลิปดินัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนิเชียมและเรเนียม การดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม

วาเนเดียม โครเมียมและแมงกานีส และการดูดซับไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียน แทนทาลัม ทังสเตน โครเมียม โมลิปดินัม แมงกานีส เทคนิเชียมและเรเนียม เพื่อเป็นแนวทางในการพัฒนาวัสดุระดับนาโนสำหรับเป็นตัวตรวจจับแก๊สพิษหรือใช้ในการกักเก็บแก๊สพิษได้

1.4 ขอบเขตของการวิจัย

ค้นหาโครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม ขนาด (5,5) ชนิดอาร์มแชร์ (armchair (5,5) pristine carbon nanotube) ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันและการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไททาเนียม วานาเดียม โครเมียมและแมงกานีส การดูดซับแก๊สแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียม โมลิปดินัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนิเชียม และเรเนียม และการดูดซับไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียน แทนทาลัม โครเมียม โมลิปดินัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนิเชียมและรีเนียม ศึกษาสมบัติทางโครงสร้างในเทอมของมุมพันธะ ความยาวพันธะ ระยะในการดูดซับ ศึกษาสมบัติทางพลังงานของการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของพลังงานสูงที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การพล็อตการกระจายตัวของออร์บิทัลที่มีพลังงานสูงที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และการกระจายตัวของออร์บิทัลที่มีพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ การถ่ายโอนประจุและความหนาแน่นสถานะ เพื่อศึกษาการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางโครงสร้างและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนาโนคาร์บอนก่อนและหลังการดูดซับแก๊ส โดยการคำนวณทั้งหมดใช้ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น (density functional theory, DFT) ที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ ซึ่งเป็นทฤษฎีที่เหมาะสมในการคำนวณโครงสร้างในกลุ่มวัสดุระดับนาโนที่มีการดูดซับแก๊สที่มีขนาดเล็ก (small gas molecule)