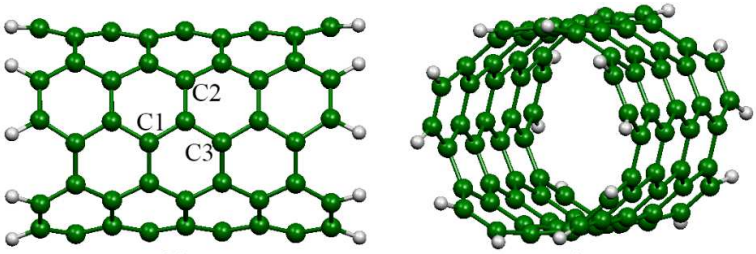
บทที่ 4
ผลและอภิปรายผล

การศึกษาเชิงทฤษฎีของการดูดซับโมเลกุลแก๊สบนวัสดุระดับนาโนจำเป็นต้องเข้าใจถึงการเปลี่ยนแปลงทางโครงสร้าง ความสามารถในการดูดซับและการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ เพื่อให้เข้าใจถึงอันตรกิริยาที่เกิดขึ้น ดังนั้นในบทที่ 4 จะกล่าวถึงสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงานและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับโมเลกุลแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน มีรายละเอียดดังนี้

4.1 การดูดซับแก๊สแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอน

4.1.1 สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอน

โครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม แสดงดังภาพที่ 4.1 พบว่าท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม (SWCNT) มีความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-C1, C-C2 และ C-C3 มีค่าเท่ากับ 1.443, 1.445 และ 1.426 อังสตรอม และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-C-C2, C2-C-C3 และ C3-C-C1 มีค่าเท่ากับ 119.9, 118.3 และ 118.2 องศา



ภาพที่ 4.1 โครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม (a) ด้านข้างของท่อนาโนคาร์บอน และ (b) ด้านหน้าของท่อนาโนคาร์บอน

ศึกษาอันตรกิริยาระหว่างแก๊สแอมโมเนียกับท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมโดยสังเกตจากการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางโครงสร้าง โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน แสดงดังภาพที่ 4.2 และ 4.3 ตามลำดับ ความยาวพันธะ มุมพันธะ ระยะดูดซับและความยาวพันธะระหว่างอะตอมไนโตรเจนและไฮโดรเจนของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน แสดงดังตารางที่ 4.1 จากภาพและตาราง พบว่าการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม (NH_3/SWCNT) มีความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-C1, C-C2 และ C-C3 มีค่าเท่ากับ 1.424, 1.453 และ 1.424 อังสตรอม และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-C-C2, C2-C-C3 และ C3-C-C1 มีค่าเท่ากับ 118.4, 118.6 และ 119.4 องศา การดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง TM-C1, TM-C2 และ TM-C3 มีค่าอยู่ระหว่าง

1.834-1.940, 1.935-2.047 และ 1.834-1.940 อังสตรอม และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-TM-C2, C2-TM-C3 และ C3-TM-C1 มีค่าอยู่ระหว่าง 86.9-91.8, 86.9-91.8 และ 85.6-93.4 องศา เมื่อเปรียบเทียบโครงสร้างก่อนและหลังการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พบว่าความยาวพันธะและมุมพันธะของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมแตกต่างจากเดิมเล็กน้อย ในขณะที่ความยาวพันธะและมุมพันธะของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันเกิดการเปลี่ยนแปลงทางโครงสร้างอย่างชัดเจนคือ ความยาวพันธะตรงตำแหน่งดูดซับมีค่ามากขึ้นหรือยาวขึ้นและมุมพันธะมีค่าน้อยลงหรือแคบลง เนื่องจากแก๊สแอมโมเนียเกิดอันตรกิริยาที่แรงกับท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันนั่นเอง จากการศึกษาระยะดูดซับที่ใกล้ที่สุดระหว่างแก๊สแอมโมเนียและท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ 3.673 อังสตรอม และแบบที่มีการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนีเชียมและรีเนียม พบว่ามีค่าเท่ากับ 2.128, 2.337, 2.295, 2.126, 2.293 และ 2.253 อังสตรอม ตามลำดับ โดยระบบที่มีระยะดูดซับที่สั้นที่สุดคือการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแมงกานีส และการศึกษาความยาวพันธะระหว่างไนโตรเจนและไฮโดรเจนของแก๊สแอมโมเนีย มีค่าอยู่ในช่วง 1.006 – 1.025 อังสตรอม

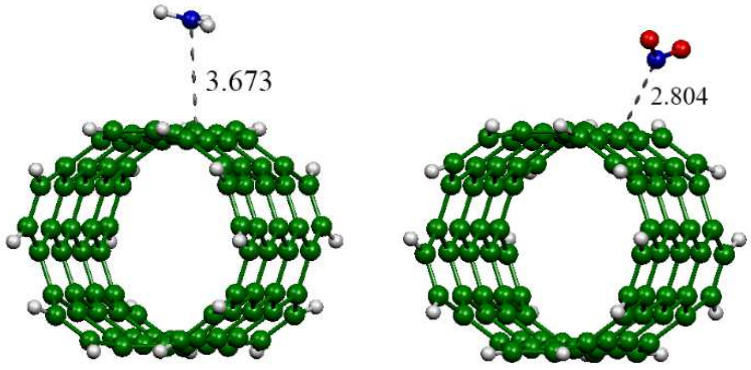
โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน แสดงดังภาพที่ 4.2 และ 4.4 ความยาวพันธะ มุมพันธะ ระยะยึดจับและความยาวพันธะระหว่างอะตอมไนโตรเจนและออกซิเจนของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน แสดงดังตารางที่ 4.2 จากรูปและตาราง พบว่า การดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม (NO_2/SWCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-C1, C-C2 และ C-C3 มีค่าเท่ากับ 1.430, 1.454 และ 1.430 อังสตรอม และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-C-C2, C2-C-C3 และ C3-C-C1 มีค่าเท่ากับ 117.9, 117.9 และ 119.3 องศา การศึกษาโครงสร้างของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันพบว่าความยาวพันธะระหว่างอะตอมของโลหะแทรนซิชันและอะตอมคาร์บอนอยู่ในช่วง 1.825 – 2.079 อังสตรอม และมุมพันธะมีค่าอยู่ในช่วง 84.9 – 96.1 องศา นอกจากนี้ยังพบว่าการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมทังสเตนทำให้โมเลกุลของแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์แตกพันธะออกกลายเป็นไนโตรเจนมอนนอกไซด์และอะตอมออกซิเจน จากการศึกษาระยะยึดจับที่ใกล้ที่สุดระหว่างแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์และท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ 2.804 อังสตรอม แบบที่มีการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนีเชียมและรีเนียม พบว่ามีค่าเท่ากับ 2.087, 2.167, 2.510, 1.895, 2.057 และ 2.031 อังสตรอม ตามลำดับ โดยระบบที่มีระยะยึดจับที่สั้นที่สุดคือการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแมงกานีสและระบบที่มีระยะยึดจับที่ยาวที่สุดคือการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมทังสเตน และการศึกษาความยาวพันธะระหว่างไนโตรเจนและไฮโดรเจนของแก๊สแอมโมเนีย มีค่าอยู่ในช่วง 1.246 – 1.488 อังสตรอม

ตารางที่ 4.1 ความยาวพันธะ มุมพันธะ ระยะดูดซับของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันและความยาวพันธะระหว่างไนโตรเจนกับไฮโดรเจนของแก๊สแอมโมเนีย

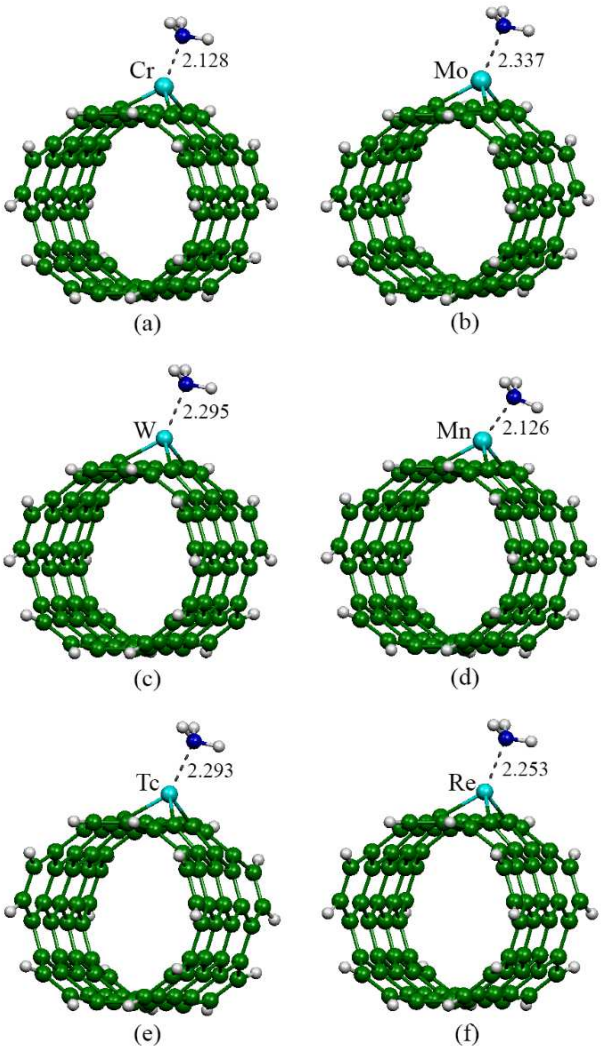
ระบบ	ความยาวพันธะ	ความยาวพันธะ (อังสตรอม)	มุมพันธะ	มุมพันธะ (องศา)	ระยะยึดจับ (อังสตรอม)	ความยาวพันธะ N-H (อังสตรอม)
NH_3/SWCNT	C-C1	1.424	C1-C-C2	118.6	3.673	N-H1=1.007
	C-C2	1.453	C2-C-C3	118.4		N-H2=1.008
	C-C3	1.424	C3-C-C1	119.4		N-H3=1.006
NH_3/Cr-SWCNT	Cr-C1	1.834	C1-Cr-C2	91.8	2.128	N-H1=1.024
	Cr-C2	1.935	C2-Cr-C3	91.8		N-H2=1.023
	Cr-C3	1.834	C3-Cr-C1	89.6		N-H3=1.024
NH_3/Mo-SWCNT	Mo-C1	1.940	C1-Mo-C2	89.0	2.337	N-H1=1.023
	Mo-C2	2.047	C2-Mo-C3	89.0		N-H2=1.024
	Mo-C3	1.940	C3-Mo-C1	85.6		N-H3=1.023
NH_3/W-SWCNT	W-C1	1.925	C1-W-C2	90.1	2.295	N-H1=1.025
	W-C2	2.044	C2-W-C3	90.1		N-H2=1.025
	W-C3	1.925	C3-W-C1	88.0		N-H3=1.025
NH_3/Mn-SWCNT	Mn-C1	1.860	C1-Mn-C2	89.1	2.126	N-H1=1.023
	Mn-C2	1.936	C2-Mn-C3	89.1		N-H2=1.024
	Mn-C3	1.860	C3-Mn-C1	93.4		N-H3=1.023
NH_3/Tc-SWCNT	Tc-C1	1.917	C1-Tc-C2	86.9	2.293	N-H1=1.023
	Tc-C2	2.038	C2-Tc-C3	86.9		N-H2=1.023
	Tc-C3	1.917	C3-Tc-C1	89.7		N-H3=1.023
NH_3/Re-SWCNT	Re-C1	1.910	C1-Re-C2	87.8	2.253	N-H1=1.025
	Re-C2	2.031	C2-Re-C3	87.7		N-H2=1.025
	Re-C3	1.910	C3-Re-C1	91.1		N-H3=1.025

ตารางที่ 4.2 ความยาวพันธะ มุมพันธะ ระยะยึดจับของแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันและความยาวพันธะระหว่างไนโตรเจนกับออกซิเจนของแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์

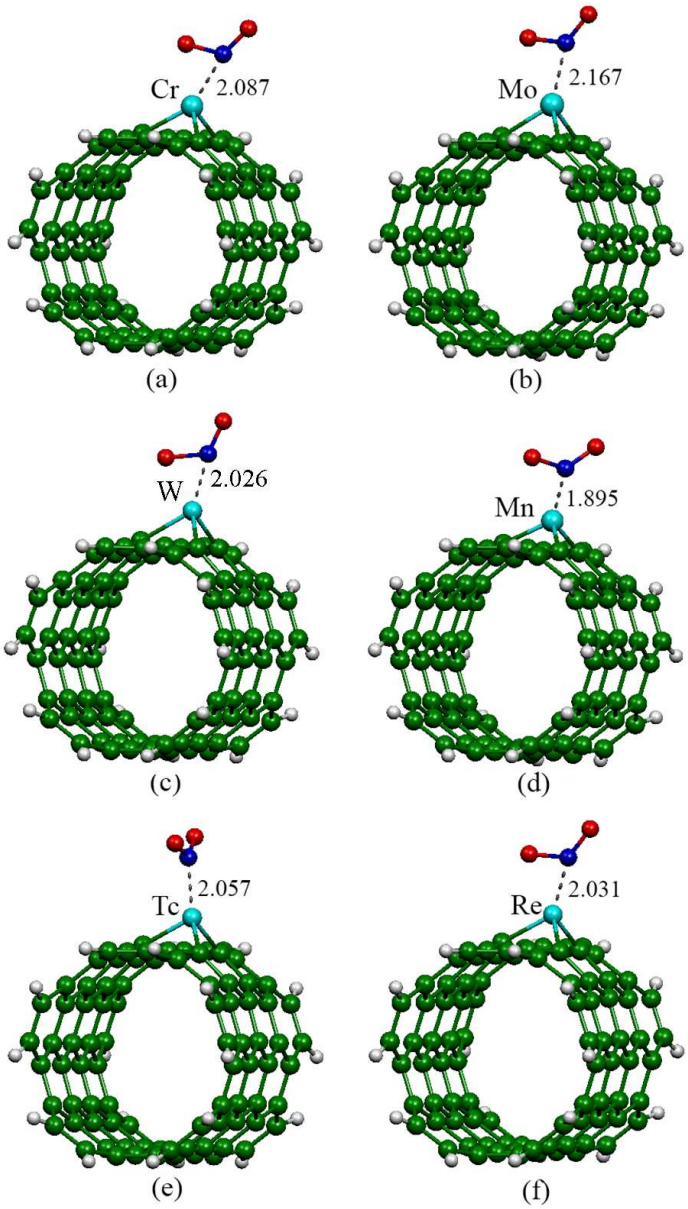
ระบบ	ความยาวพันธะ	ความยาวพันธะ (อังสตรอม)	มุมพันธะ	มุมพันธะ (องศา)	ระยะยึดจับ (อังสตรอม)	ความยาวพันธะ N-O (อังสตรอม)
NO_2/SWCNT	C1-C	1.430	C1-C-C2	117.9	2.804	N-O1=1.262
	C2-C	1.454	C2-C-C3	117.9		N-O2=1.263
	C3-C	1.430	C3-C-C1	119.3		
NO_2/Cr-SWCNT	Cr-C1	1.905	C1-Cr-C2	88.4	2.087	N-O1=1.360
	Cr-C2	1.974	C2-Cr-C3	88.4		N-O2=1.247
	Cr-C3	1.905	C2-Cr-C1	88.6		
NO_2/Mo-SWCNT	Mo-C1	1.999	C1-Mo-C2	85.2	2.167	N-O1=1.306
	Mo-C2	2.079	C2-Mo-C3	85.2		N-O2=1.268
	Mo-C3	1.999	C3-Mo-C1	84.9		
NO_2/W-SWCNT	W-C1	1.971	C1-W-C2	87.2	2.510	N-O1=1.250
	W-C2	2.074	C2-W-C3	87.2		N-O2=1.488
	W-C3	1.978	C3-W-C1	90.6		
NO_2/Mn-SWCNT	Mn-C1	1.829	C1-Mn-C2	92.9	1.895	N-O1=1.268
	Mn-C2	1.892	C2-Mn-C3	93.6		N-O2=1.306
	Mn-C3	1.825	C3-Mn-C1	96.1		
NO_2/Tc-SWCNT	Tc-C1	1.945	C1-Tc-C2	89.2	2.057	N-O1=1.291
	Tc-C2	1.967	C2-Tc-C3	89.1		N-O2=1.282
	Tc-C3	1.944	C3-Tc-C1	89.6		
NO_2/Re-SWCNT	Re-C1	1.926	C1-Re-C2	88.7	2.031	N-O1=1.384
	Re-C2	2.029	C2-Re-C3	88.7		N-O2=1.246
	Re-C3	1.926	C3-Re-C1	88.7		



ภาพที่ 4.2 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม ความยาวพันธะหน่วยเป็นอังสตรอม



ภาพที่ 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



ภาพที่ 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

4.1.2 สมบัติทางพลังงานของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอน

พลังงานดูดซับ (adsorption energies, E_{ads}) แสดงดังตารางที่ 4.3 จากการศึกษาพลังงานการดูดซับของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมพบว่ามีค่าเท่ากับ -0.19 กิโลแคลอรีต่อโมลและแบบที่มีการเติมอะตอมโครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเตน แมงกานีส

เทคนีเชียมและรีเนียม มีค่าเท่ากับ -37.16, -31.54, -38.12, -30.38, -30.55 และ -37.30 กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ ดังนั้นจึงสรุปได้ว่า การเติมโลหะแทรนซิชันจะช่วยเพิ่มความสามารถในการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนให้สูงขึ้นอย่างเห็นชัด โดยท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะทังสเตนมีค่าพลังงานการดูดซับดีที่สุด

พลังงานการดูดซับของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนีเชียมและรีเนียม แสดงดังตารางที่ 4.5 พบว่าการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ -33.26 กิโลแคลอรีต่อโมล และแบบที่มีการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนีเชียมและรีเนียมมีค่าเท่ากับ -84.10, -103.20, -119.93. -71.91, -77.52 และ -95.36 กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ ดังนั้นจึงสรุปได้ว่าการเติมโลหะแทรนซิชันทำให้ความสามารถในการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนได้ดีขึ้นอย่างเห็นได้ชัด โดยท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะทังสเตนมีค่าพลังงานการดูดซับดีที่สุด

4.1.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอน

พลังงานของออร์บิทัลที่มีพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (E_{HOMO}) และพลังงานของออร์บิทัลที่มีพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (E_{LUMO}) แถบพลังงาน (E_{gap}) และการถ่ายโอนประจุบางส่วน (partial charge transfers, PCT) ของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน แสดงดังตารางที่ 4.4 จากการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของ E_{HOMO} และ E_{LUMO} พบว่า E_{HOMO} และ E_{LUMO} ของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมที่มีการดูดซับแก๊สแอมโมเนียมีค่าเท่ากับ -4.381 และ -3.265 อิเล็กตรอนโวลต์ ตามลำดับ พบว่าแถบพลังงานมีค่าเท่ากับ 1.115 อิเล็กตรอนโวลต์ เมื่อเปรียบเทียบแถบพลังงานของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมก่อนและหลังดูดซับแก๊สแอมโมเนียพบว่าไม่มีการเปลี่ยนแปลง แสดงให้เห็นว่าท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมไม่มีการเปลี่ยนแปลงความสามารถในการนำไฟฟ้า จึงไม่เหมาะที่จะพัฒนาเป็นตัวตรวจจับแก๊สแอมโมเนีย ในขณะที่การดูดซับแก๊สแอมโมเนียทำให้ E_{HOMO}, E_{LUMO} และแถบพลังงานของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันเกิดการเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจน ดังนั้นจึงสามารถสรุปได้ว่าท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีความเหมาะสมที่จะพัฒนาเป็นตัวตรวจจับแก๊สแอมโมเนีย

ตารางที่ 4.3 พลังงานการดูดซับ (E_{ads}) ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	E_{ads} (กิโลแคลอรีต่อโมล)
NH_3/SWCNT	-0.19
NH_3/Cr-SWCNT	-37.16
NH_3/Mo-SWCNT	-31.54
NH_3/W-SWCNT	-38.12
NH_3/Mn-SWCNT	-30.38
NH_3/Tc-SWCNT	-30.55
NH_3/Re-SWCNT	-37.30
NO_2/SWCNT	-33.26
NO_2/Cr-SWCNT	-84.10
NO_2/Mo-SWCNT	-103.20
NO_2/W-SWCNT	-146.86
NO_2/Mn-SWCNT	-71.91
NO_2/Tc-SWCNT	-77.52
NO_2/Re-SWCNT	-95.36

การศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของการถ่ายโอนประจุบางส่วน (PCT) สามารถหาได้จากการคำนวณ natural bond orbital (NBO) ซึ่งการถ่ายโอนประจุบางส่วนระหว่างแก๊สและท่อนาโนคาร์บอนแสดงให้เห็นถึงการเกิดอันตรกิริยาต่อกันนั่นเอง ค่า PCT แสดงในตารางที่ 4.4 พบว่า การถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ 1.006 อิเล็กตรอน การถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนีเชียมและรีเนียมมีค่าเท่ากับ 0.246, 1.213, 0.231, 0.213, 0.217 และ 0.245 อิเล็กตรอน ตามลำดับ การศึกษาการถ่ายโอนประจุของการดูดซับแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนพบว่าเกิดการถ่ายโอนประจุจากแก๊สแอมโมเนียไปยังท่อนาโนคาร์บอน โดยการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมทังสเตนเกิดการถ่ายโอนประจุมากที่สุด

การศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของ E_{HOMO}, E_{LUMO} และการถ่ายโอนประจุ พบว่าการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์ทำให้ E_{HOMO} และ E_{LUMO} ของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันเกิดการเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจน ดังแสดงในตารางที่ 4.5 การถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ -0.229 อิเล็กตรอน การถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนีเชียมและรีเนียมมีค่าเท่ากับ -0.429, -0.468, -0.743, -0.381, -0.440 และ -0.385 อิเล็กตรอน ตามลำดับ ซึ่งเป็นการถ่ายโอนประจุจากท่อนาโนคาร์บอนไปยังแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์

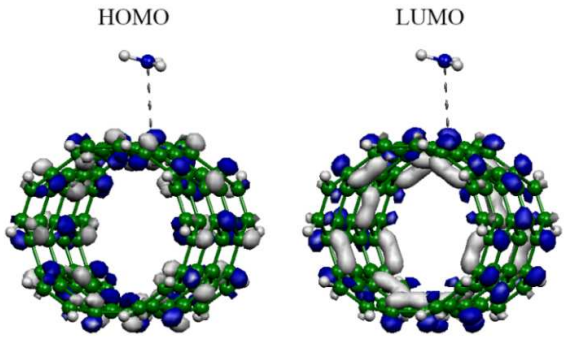
ตารางที่ 4.4 พลังงานของออร์บิทัลที่มีพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (E_{HOMO}) พลังงานของออร์บิทัลที่มีพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (E_{LUMO}) แถบพลังงาน (E_{gap}) การเปลี่ยนแถบพลังงาน (ΔE_{gap}) การถ่ายโอนประจุบางส่วน (PCT) และประจุของโลหะที่เติม (TM) ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	E_{HOMO} (อิเล็กตรอนโวลต์)	E_{LUMO} (อิเล็กตรอนโวลต์)	E_{gap} (อิเล็กตรอนโวลต์)	ΔE_{gap}	PCT (อิเล็กตรอน)	ประจุ TM
NH_3/SWCNT	-4.381	-3.265	1.115	0.000	1.006	-
	(-4.408)	(-3.292)	(1.115)			
NH_3/Cr-SWCNT	-4.109	-3.020	1.088	0.054	0.246	0.298
	(-4.353)	(-3.211)	(1.142)			
NH_3/Mo-SWCNT	-4.054	-3.102	0.952	0.027	1.213	0.574
	(-4.299)	(-3.374)	(0.925)			
NH_3/W-SWCNT	-4.054	-3.074	0.979	0.027	0.231	0.816
	(-4.299)	(-3.374)	(0.952)			
NH_3/Mn-SWCNT	-4.381 (α-spin)	-2.938 (α-spin)	1.442	0.000,	0.213	0.418
	-3.972 (β-spin)	-2.802 (β-spin)	1.170	0.217		
	(-4.734 (α-spin),	(-3.292 (α-spin),	(1.442,			
	-4.217 (β-spin))	-2.830 (β-spin))	1.387)			
NH_3/Tc-SWCNT	-4.136 (α-spin)	-2.884 (α-spin)	1.251	0.054,	0.217	0.387
	-4.136 (β-spin)	-2.993 (β-spin)	1.142	0.054		
	(-4.462 (α-spin),	(-3.156 (α-spin),	(1.306,			
	-4.326 (β-spin))	-3.238 (β-spin))	1.088)			
NH_3/Re-SWCNT	-4.081 (α-spin)	-2.830 (α-spin)	1.251	0.000,	0.245	0.518
	-4.136 (β-spin)	-2.993 (β-spin)	1.142	0.054		
	(-4.408 (α-spin),	(-3.156 (α-spin),	(1.252,			
	-4.353 (β-spin))	-3.265 (β-spin))	1.088)			

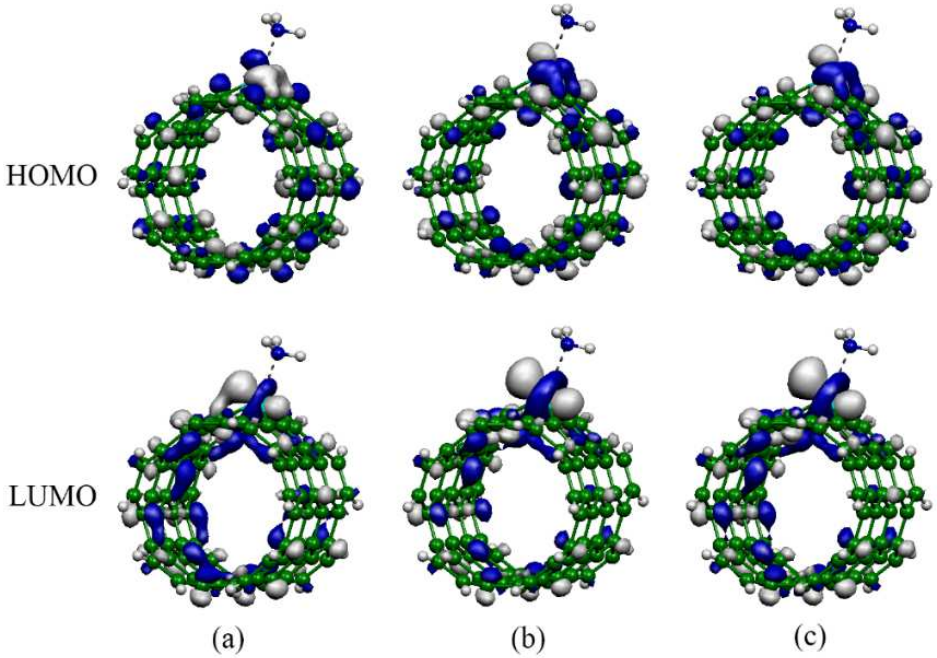
ตารางที่ 4.5 พลังงานของออร์บิทัลที่มีพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานของออร์บิทัลที่มีพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วนและประจุของโลหะที่เติมของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	E_{HOMO} (อิเล็กตรอนโวลต์)	E_{LUMO} (อิเล็กตรอนโวลต์)	E_{gap} (อิเล็กตรอนโวลต์)	ΔE_{gap}	PCT (อิเล็กตรอน)	ประจุ TM
NO_2/SWCNT	-4.517 (α-spin)	-3.455 (α-spin)	1.061	0.544	-0.229	-
	-4.544 (β-spin)	-3.782 (β-spin)	0.761	0.353		
NO_2/Cr-SWCNT	-5.469 (α-spin)	-4.081 (α-spin)	1.387	0.244	-0.429	0.427
	-4.408 (β -spin)	-3.374 (β-spin)	1.034	0.108		
NO_2/Mo-SWCNT	-5.197 (α-spin)	-3.836 (α-spin)	1.360	0.435	-0.468	0.696
	-4.474 (β-spin)	-3.428 (β-spin)	1.046	0.121		
NO_2/W-SWCNT	-5.224 (α-spin)	-3.728 (α-spin)	1.496	0.544	-0.743	0.825
	-5.061 (β-spin)	-3.700 (β-spin)	1.360	0.408		
NO_2/Mn-SWCNT	-5.034	-3.646	1.387	0.000	-0.381	0.135
NO_2/Tc-SWCNT	-4.762	-3.728	1.034	0.054	-0.440	0.317
NO_2/Re-SWCNT	-4.653	-3.728	0.925	0.163	-0.385	0.553

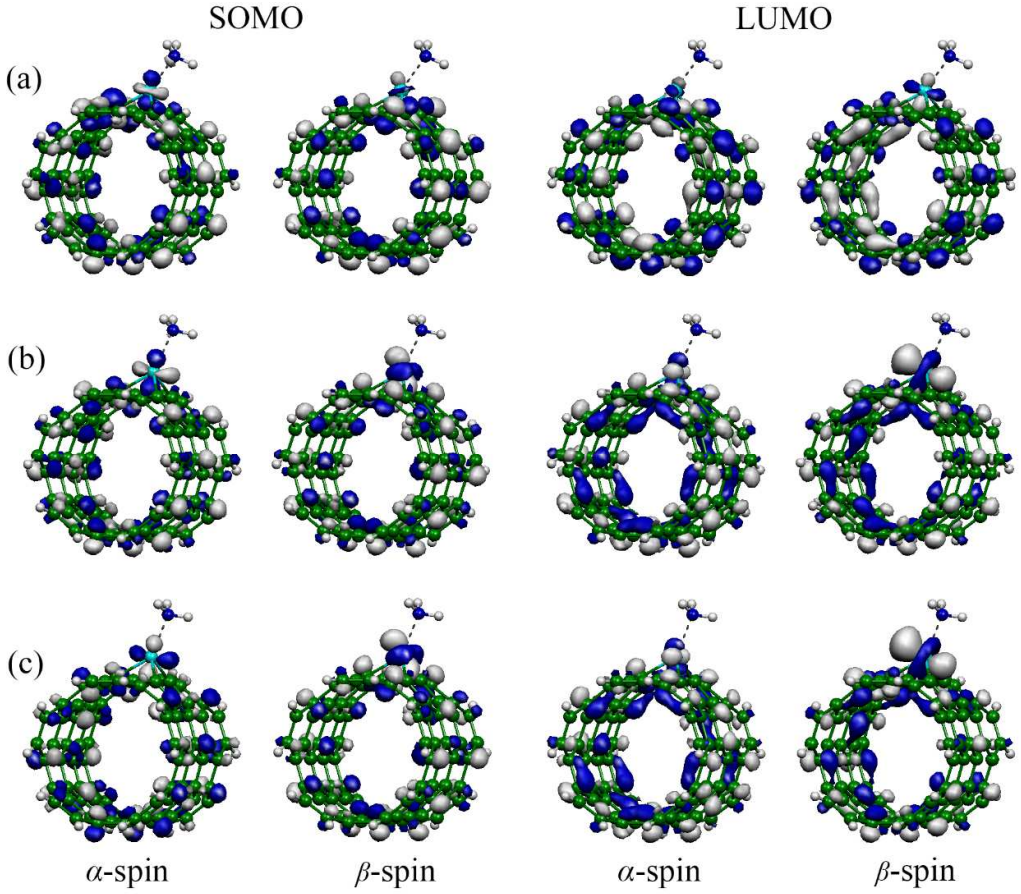
การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมแสดงดังภาพที่ 4.5 จากรูปอธิบายได้ว่า อิเล็กตรอนจะกระจายตัวอยู่รอบๆ ท่อนาโนคาร์บอน เนื่องจากท่อนาโนคาร์บอนประกอบด้วยอะตอมคาร์บอนเพียงอย่างเดียวและสร้างพันธะแบบโคออร์ดิเนตโคเวเลนต์ อิเล็กตรอนจึงเคลื่อนที่อยู่รอบๆ อะตอมทุกอะตอม การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม และทังสเตนแสดงดังภาพที่ 4.6 และการพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ SOMO ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแมงกานีส เทคนีเชียมและรีเนียม แสดงดังภาพที่ 4.7 จากภาพอธิบายได้ว่าอิเล็กตรอนกระจายตัวอยู่รอบๆ ตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันและแก๊ส เนื่องจากตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีความเสถียรทางโครงสร้างต่ำ จึงเกิดการเคลื่อนของอิเล็กตรอนตรงบริเวณนั้น ส่วนการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนตรงบริเวณแก๊สเนื่องจากเกิดการถ่ายโอนประจุระหว่างแก๊สแอมโมเนียและท่อนาโนคาร์บอนนั่นเอง



ภาพที่ 4.5 การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม



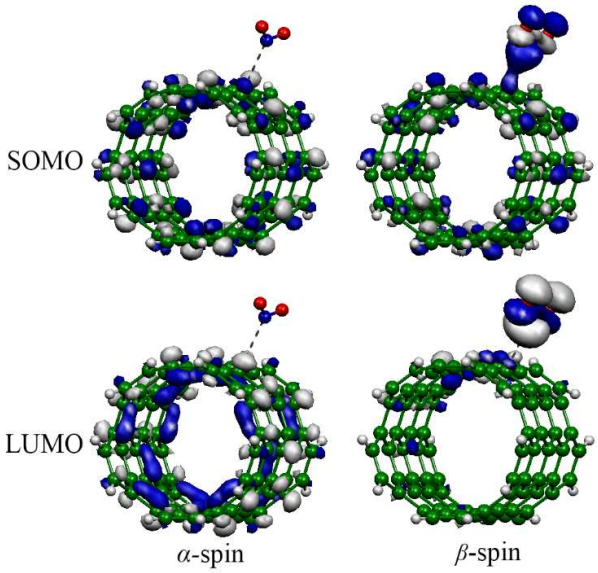
ภาพที่ 4.6 การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอน (a) NH_3/Cr-SWCNT, (b) NH_3/Mo-SWCNT และ (c) NH_3/W-SWCNT



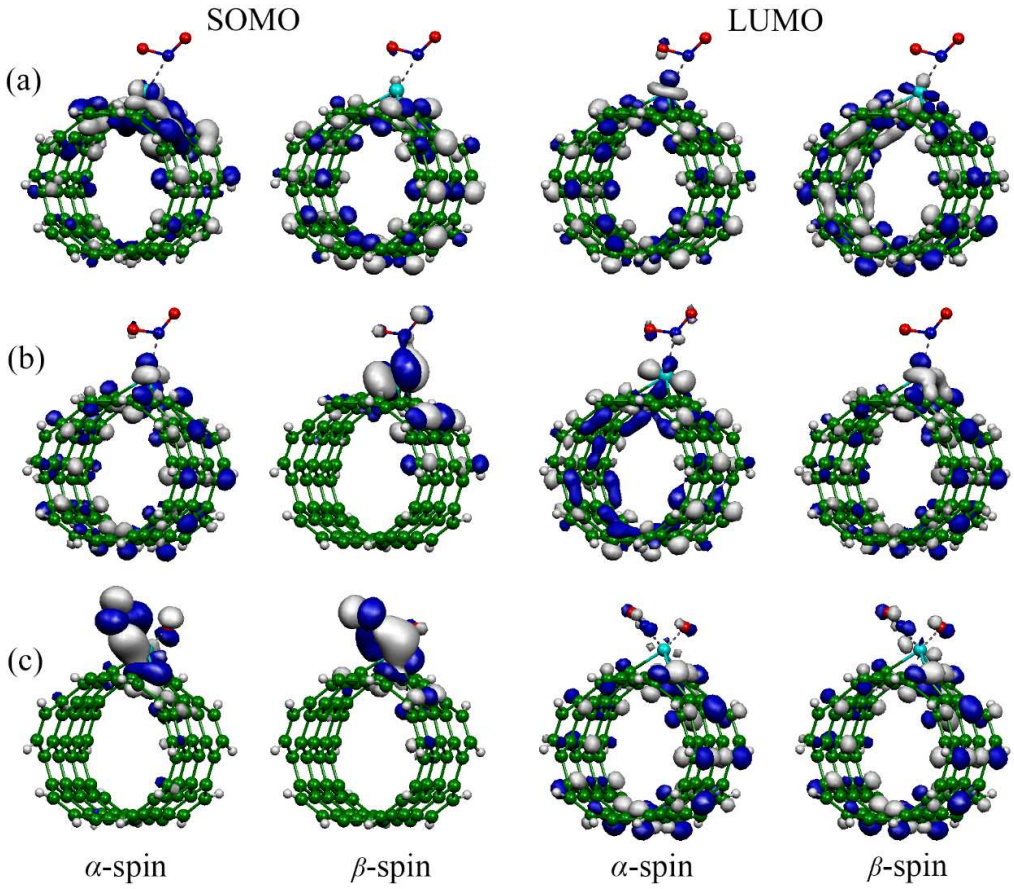
ภาพที่ 4.7 การพล๊อตการกระจายตัวออร์บิทัล SOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอน (a) NH_3/Mn-SWCNT, (b) NH_3/Tc-SWCNT และ (c) NH_3/Re-SWCNT

การพล๊อตการกระจายตัวออร์บิทัล SOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมแสดงดังภาพที่ 4.8 จากรูปอธิบายได้ว่าออร์บิทัล SOMO และ LUMO (β spin) อิเล็กตรอนจะกระจายตัวอยู่รอบๆ ท่อนาโนคาร์บอนและออร์บิทัล SOMO และ LUMO (αspin) อิเล็กตรอนจะกระจายตัวตรงตำแหน่งที่มีการดูดซับแก๊ส

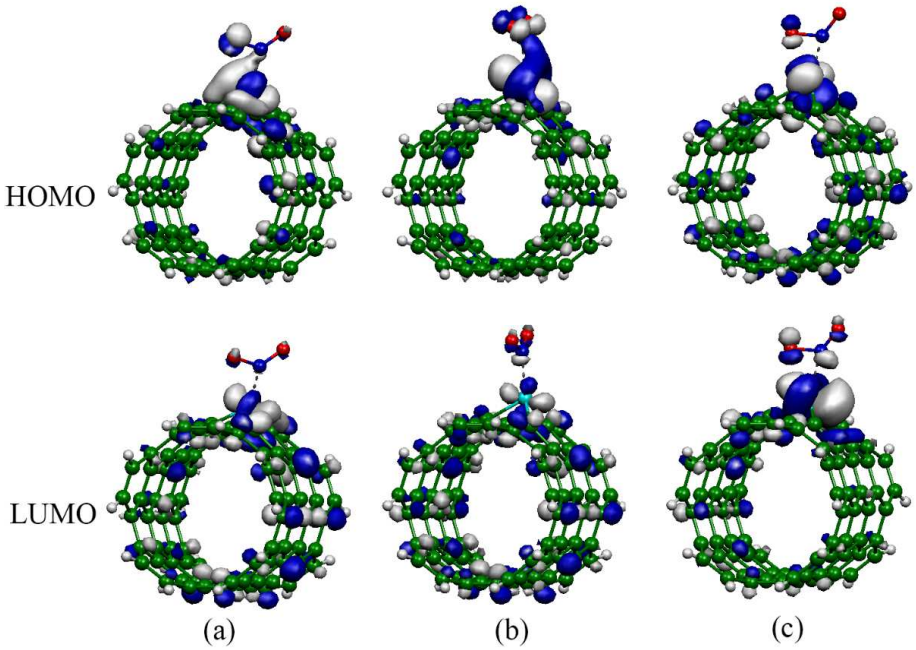
การพล๊อตการกระจายตัวออร์บิทัล SOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม และทังสเตนแสดงดังภาพที่ 4.9 และการพล๊อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และออร์บิทัล LUMO การดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแมงกานีส เทคนีเชียมและรีเนียม แสดงดังภาพที่ 4.10 จากภาพอธิบายได้ว่าการพล๊อตการกระจายตัวออร์บิทัล SOMO หรือ HOMO และออร์บิทัล LUMO อิเล็กตรอนจะกระจายตัวอยู่รอบ ๆ ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนีเชียมและรีเนียมและตำแหน่งโมเลกุลแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์



ภาพที่ 4.8 การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล SOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม

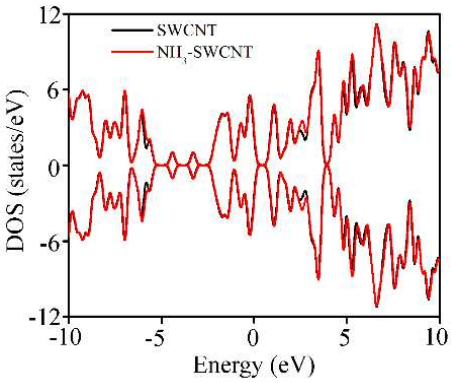


ภาพที่ 4.9 การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล SOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) NO_2/Cr-SWCNT, (b) NO_2/Mo-SWCNT และ (c) NO_2/W-SWCNT

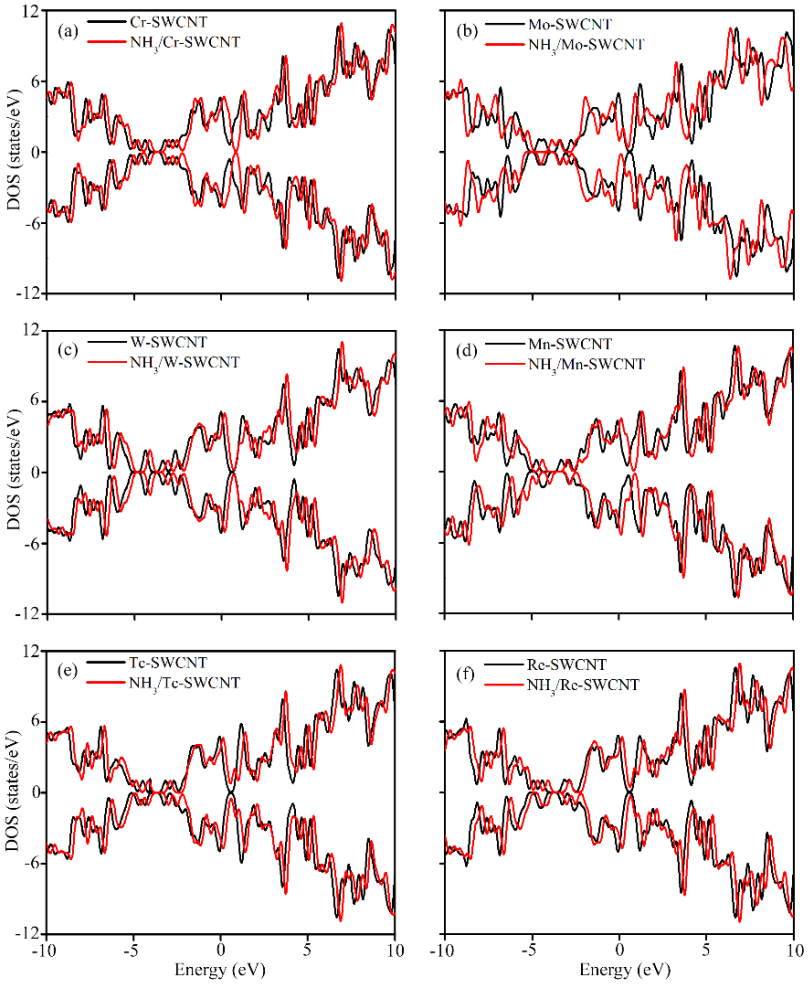


ภาพที่ 4.10 การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) NO_2/Mn-SWCNT, (b) NO_2/Tc-SWCNT และ (c) NO_2/Re-SWCNT

ได้ทำการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของความหนาแน่นสถานะ (density of state, DOS) ของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนีเชียมและรีเนียมที่มีการการดูดซับแก๊สแอมโมเนีย เมื่อเปรียบเทียบความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมก่อนและหลังการดูดซับแก๊สแอมโมเนีย พบว่าความหนาแน่นสถานะเกิดการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อยในช่วงพลังงาน -6 ถึง -5 อิเล็กตรอนโวลต์ ดังภาพที่ 4.11 และเปรียบเทียบความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอนแบบที่มีการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนีเชียมและรีเนียมก่อนและหลังดูดซับแก๊สแอมโมเนียจะเห็นว่าหลังดูดซับแก๊ส ความหนาแน่นสถานะจะเลื่อนจากตำแหน่งของก่อนการดูดซับแก๊สอย่างชัดเจนทุกช่วงพลังงาน ดังภาพที่ 4.12 ดังนั้นจึงสามารถอธิบายได้ว่าการดูดซับแก๊สแอมโมเนียมีผลต่อความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ซึ่งสอดคล้องกับการศึกษาการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน ดังนั้นจึงสามารถสรุปได้ว่าท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันสามารถพัฒนาเป็นตัวตรวจจับแก๊สได้

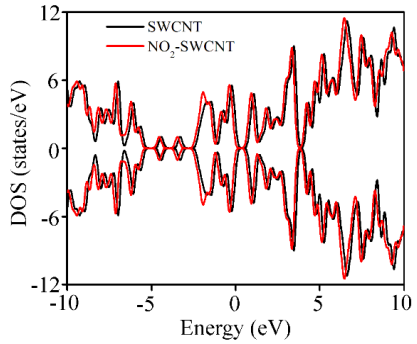


ภาพที่ 4.11 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม

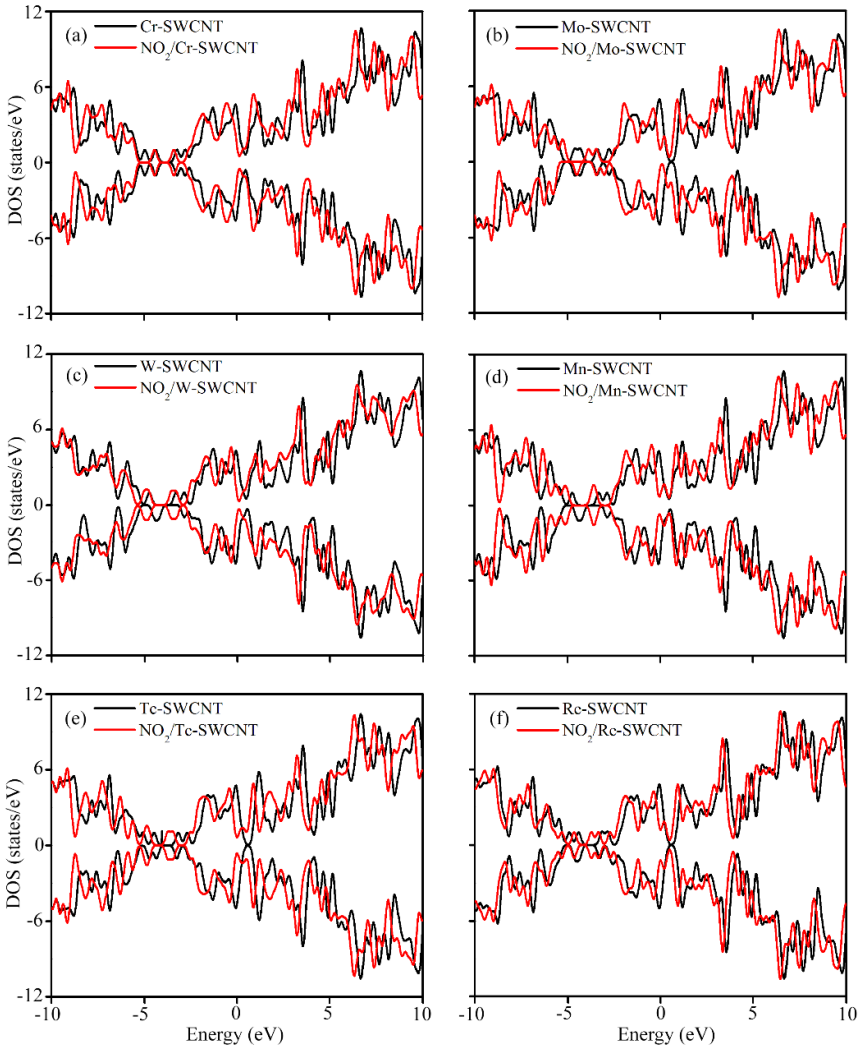


ภาพที่ 4.12 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) NH_3/Cr-SWCNT, (b) NH_3/Mo-SWCNT, (c) NH_3/W-SWCNT, (d) NH_3/Mn-SWCNT, (e) NH_3/Tc-SWCNT และ (f) NH_3/Re-SWCNT

ได้ทำการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พบว่าการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์ทำให้ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมเลื่อนจากตำแหน่งเดิมก่อนเล็กน้อยแสดงดังภาพที่ 4.13 และการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์ทำให้ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันเกิดการเลื่อนจากตำแหน่งของก่อนการดูดซับแก๊สอย่างชัดเจน แสดงดังภาพที่ 4.14 ดังนั้นจึงสามารถอธิบายได้ว่าการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์มีผลต่อความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอน



ภาพที่ 4.13 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม



ภาพที่ 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

4.2 การดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอน

4.2.1 สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอน

โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม แสดงดังภาพที่ 4.15 และแบบที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียม และแมงกานีส แสดงดังภาพที่ 4.16-4.18 ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะดูดซับของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีสและความยาวพันธะระหว่างอะตอมคาร์บอนและออกซิเจนของแก๊ส

คาร์บอนไดออกไซด์ แสดงดังตารางที่ 4.6 จากภาพและตารางพบว่าโครงสร้างการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมพบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-C1, C-C2 และ C-C3 มีค่าอยู่ในช่วง 1.426-1.454 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-C-C2, C2-C-C3 และ C3-C-C1 มีค่าอยู่ในช่วง 118.3-119.5 องศา ระยะยึดจับระหว่างแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์กับท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมมีค่า 3.265 อังสตรอม และความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-O1 และ C-O2 มีค่า 1.192 และ 1.193 อังสตรอม ตามลำดับ การดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง TM-C มีค่าอยู่ในช่วง 1.834-2.128 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-TM-C2, C2-TM-C3 และ C3-TM-C1 มีค่าอยู่ในช่วง 82.7-85.1 องศา ระยะยึดจับระหว่างแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์กับท่อนาโนคาร์บอนแบบที่มีการเติมสแกนเดียมมีค่าอยู่ในช่วง 2.103-2.342 อังสตรอม และความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-O1 และ C-O2 มีค่าอยู่ในช่วง 1.182-1.198 อังสตรอม จากการที่ความยาวพันธะและมุมพันธะมีการเปลี่ยนแปลงไปจากเดิมเกิดขึ้นเนื่องจากอันตรกิริยาที่แรงระหว่างท่อนาโนคาร์บอนและแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ จากการศึกษาระยะยึดจับที่ใกล้ที่สุดระหว่างแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และท่อนาโนคาร์บอนพบว่าระบบที่มีระยะยึดจับที่สั้นที่สุดคือการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียมมีค่าเท่ากับ 2.103 อังสตรอม

โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม แสดงดังภาพที่ 4.15 และแบบที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีส แสดงดังภาพที่ 4.17 ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะยึดจับของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีส และความยาวพันธะระหว่างอะตอมคาร์บอน ออกซิเจนและซัลเฟอร์ของแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์ แสดงดังตารางที่ 4.6 จากภาพและตารางพบว่าการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมพบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-C1, C-C2 และ C-C3 มีค่าอยู่ในช่วง 1.426-1.454 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-C-C2, C2-C-C3 และ C3-C-C1 มีค่าอยู่ในช่วง 118.3-119.5 องศา ระยะยึดจับระหว่างแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมมีค่า 3.336 อังสตรอม และความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-O และ C-S มีค่า 1.188และ 1.612 อังสตรอม ตามลำดับ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียมพบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Sc-C1, Sc-C2 และ Sc-C3 มีค่าอยู่ในช่วง 2.091-2.133 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Sc-C2, C2-Sc-C3 และ C3-Sc-C1 มีค่าอยู่ในช่วง 82.6-84.8 องศา ระยะยึดจับระหว่างแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบที่มีการเติมสแกนเดียมมีค่า 2.291 อังสตรอม และความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-O และ C-S มีค่า 1.202 และ 1.593 อังสตรอม ตามลำดับ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมไทเทเนียมพบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Ti-C1, Ti-C2 และ Ti-C3 มีค่าอยู่ในช่วง 1.935-2.018 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Ti-C2, C2-Ti-C3 และ C3-Ti-C1 มีค่าอยู่ในช่วง 87.4-89.8 องศา ระยะยึดจับระหว่างแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบที่มีการเติมไทเทเนียมมีค่า 2.127 อังสตรอม และความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-O และ C-S มีค่า

1.207 และ 1.596 อังสตรอม ตามลำดับ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มี การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียมพบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Cr-C1, Cr-C2 และ Cr-C3 มีค่าอยู่ในช่วง 1.837-1.936 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Cr-C2, C2-Cr-C3 และ C3-Cr-C1 มีค่าอยู่ในช่วง 90.7-91.5 องศา ระยะยึดจับระหว่างแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบที่มีการเติมโครเมียมมีค่า 2.032 อังสตรอม และความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-O และ C-S มีค่า 1.201 และ 1.602 อังสตรอม ตามลำดับ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแมงกานีสพบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mn-C1, Mn-C2 และ Mn-C3 มีค่าอยู่ในช่วง 1.850-1.923 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Mn-C2, C2-Mn-C3 และ C3-Mn-C1 มีค่าอยู่ในช่วง 91.0-93.0 องศา ระยะยึดจับระหว่างแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบที่มีการเติมแมงกานีสมีค่า 2.097 อังสตรอม และความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-O และ C-S มีค่า 1.198 และ 1.599 อังสตรอม ตามลำดับ จากการที่ความยาวพันธะและมุมพันธะมีการเปลี่ยนแปลงไปจากเดิมเนื่องจากอันตรกิริยาที่แรงระหว่างท่อนาโนคาร์บอนและคาร์บอนิลซัลไฟด์ จากการศึกษาระยะยึดจับที่ใกล้ที่สุดระหว่างคาร์บอนิลซัลไฟด์และท่อนาโนคาร์บอน พบว่าระบบที่มีระยะยึดจับที่สั้นที่สุดคือการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียมมีค่าเท่ากับ 2.032 อังสตรอม และระบบที่มีระยะยึดจับที่ยาวที่สุดคือการดูดซับคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนโดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียมมีค่าเท่ากับ 2.291 อังสตรอม

โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม แสดงดังภาพที่ 4.15 และแบบที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียม และแมงกานีส แสดงดังภาพที่ 4.18 ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะยึดจับของ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมของซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีส และความยาวพันธะระหว่างอะตอมคาร์บอน ออกซิเจนและซัลเฟอร์ของแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์ แสดงดังตารางที่ 4.7 จากภาพและตารางพบว่าการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมพบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-C1, C-C2 และ C-C3 มีค่าอยู่ในช่วง 1.426-1.455 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-C-C2, C2-C-C3 และ C3-C-C1 มีค่าอยู่ในช่วง 118.3-119.5 องศา ระยะยึดจับระหว่างแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมมีค่า 4.673 อังสตรอมและความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-S และ C-O ของแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์มีค่า 1.611 และ 1.190 อังสตรอม ตามลำดับ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียมพบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Sc-C1, Sc-C2 และ Sc-C3 มีค่าอยู่ในช่วง 2.083-2.125 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Sc-C2, C2-Sc-C3 และ C3-Sc-C1 มีค่าอยู่ในช่วง 82.9-85.4 องศา ระยะยึดจับระหว่างแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบที่มีการเติมสแกนเดียมมีค่า 3.064 อังสตรอม และความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-S และ C-O มีค่า 1.632 และ 1.596 อังสตรอม ตามลำดับ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหา

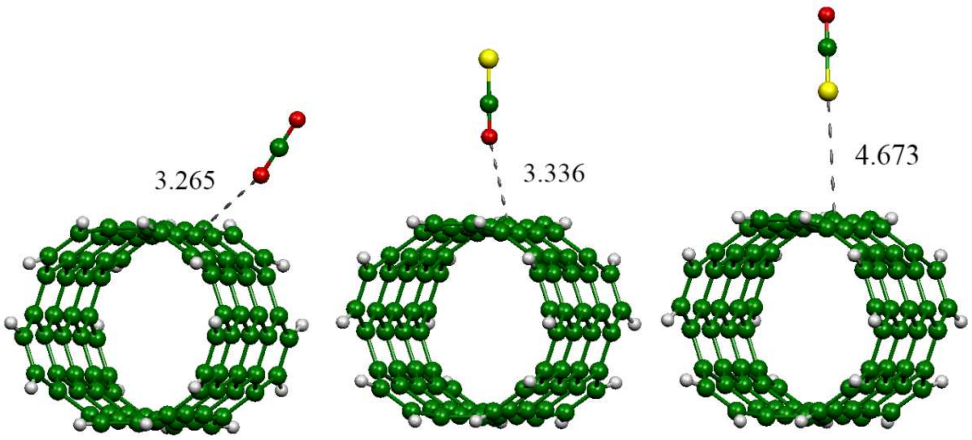
ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมไทเทเนียมพบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Ti-C1, Ti-C2 และ Ti-C3 มีค่าอยู่ในช่วง 2.059-2.075 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Ti-C2, C2-Ti-C3 และ C3-Ti-C1 มีค่าอยู่ในช่วง 81.6-85.7 องศา ระยะยึดจับระหว่างแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบที่มีการเติมไทเทเนียมมีค่า 2.264 อังสตรอม และความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-S และ C-O มีค่า 1.198 และ 1.182 ตามลำดับ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียมพบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Cr-C1, Cr-C2 และ Cr-C3 มีค่าอยู่ในช่วง 1.824-1.935 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Cr-C2, C2-Cr-C3 และ C3-Cr-C1 มีค่าอยู่ในช่วง 87.4-92.6 องศา ระยะยึดจับระหว่างแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบที่มีการเติมโครเมียมมีค่า 2.103 อังสตรอม และความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-S และ C-O มีค่า 1.195 และ 1.187 อังสตรอม ตามลำดับ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแมงกานีสพบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mn-C1, Mn-C2 และ Mn-C3 มีค่าอยู่ในช่วง 1.850-1.923 อังสตรอม มุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Mn-C2, C2-Mn-C3 และ C3-Mn-C1 มีค่าอยู่ในช่วง 91.0-92.6 องศา ระยะยึดจับระหว่างแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบที่มีการเติมแมงกานีสมีค่า 2.097 อังสตรอม และความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-S และ C-O มีค่า 1.599 และ 1.198 อังสตรอม ตามลำดับ จากการที่ความยาวพันธะและมุมพันธะมีการเปลี่ยนแปลงไปจากเดิมเนื่องจากอันตรกิริยาที่แรงระหว่างท่อนาโนคาร์บอนและคาร์บอนิลซัลไฟด์ จากการศึกษาระยะยึดจับที่ใกล้ที่สุดระหว่างคาร์บอนิลซัลไฟด์และท่อนาโนคาร์บอน พบว่าระบบที่มีระยะยึดจับที่สั้นที่สุดคือการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแมงกานีสมีค่าเท่ากับ 2.097 อังสตรอม และระบบที่มีระยะยึดจับที่ยาวที่สุดคือการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนโดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียมมีค่าเท่ากับ 3.064 อังสตรอม

ตารางที่ 4.6 ความยาวพันธะ มุมพันธะ ระยะดูดซับและความยาวพันธะระหว่างคาร์บอนกับออกซิเจนของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

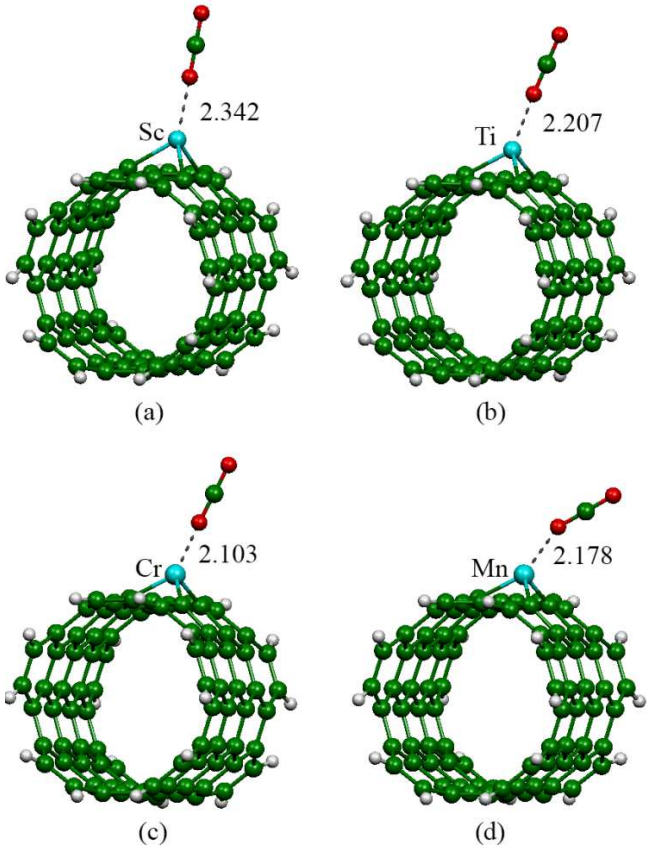
ระบบ	ความยาวพันธะ	ความยาวพันธะ (อังสตรอม)	มุมพันธะ	มุมพันธะ (องศา)	ระยะยึดจับ (อังสตรอม)	ความยาวพันธะ (อังสตรอม)
CO_2/SWCNT	C-C1	1.426 (1.426)	C1-C-C2	118.3 (118.3)	3.265	C-O1=1.192
	C-C2	1.454 (1.455)	C2-C-C3	118.3 (118.3)		C-O2=1.193
	C-C3	1.426 (1.426)	C3-C-C1	119.5 (119.5)		
CO_2/Sc-SWCNT	Sc-C1	2.087 (2.078)	C1-Sc-C2	85.1 (83.0)	2.342	C-O1=1.198
	Sc-C2	2.128 (2.120)	C2-Sc-C3	85.1 (85.3)		C-O2=1.182
	Sc-C3	2.087 (2.078)	C3-Sc-C1	82.7 (85.3)		
CO_2/Ti-SWCNT	Ti-C1	1.929 (1.925)	C1-Ti-C2	89.9 (90.2)	2.207	C-O1=1.198
	Ti-C2	2.014 (2.005)	C2-Ti-C3	89.9 (90.2)		C-O2=1.182
	Ti-C3	1.930 (1.925)	C3-Ti-C1	87.2 (87.6)		
CO_2/Cr-SWCNT	Cr-C1	1.834 (1.834)	C1-Cr-C2	91.5 (90.1)	2.103	C-O1=1.195
	Cr-C2	1.935 (1.926)	C2-Cr-C3	91.5 (90.1)		C-O2=1.187
	Cr-C3	1.834 (1.834)	C3-Cr-C1	90.5 (92.2)		
CO_2/Mn-SWCNT	Mn-C1	1.849 (1.864)	C1-Mn-C2	91.3 (93.2)	2.178	C-O1=1.196
	Mn-C2	1.921 (1.896)	C2-Mn-C3	91.3 (93.2)		C-O2=1.185
	Mn-C3	1.849 (1.864)	C3-Mn-C1	92.7 (92.4)		
COS/SWCNT	C-C1	1.426	C1-C-C2	118.3	3.336	C-O=1.188
	C-C2	1.454	C2-C-C3	118.3		C-S=1.612
	C-C3	1.426	C3-C-C1	119.5		
COS/Sc-SWCNT	Sc-C1	2.091	C1-Sc-C2	84.8	2.291	C-O=1.202
	Sc-C2	2.133	C2-Sc-C3	84.7		C-S=1.593
	Sc-C3	2.092	C3-Sc-C1	82.6		
COS/Ti-SWCNT	Ti-C1	1.935	C1-Ti-C2	89.8	2.127	C-O=1.207
	Ti-C2	2.018	C2-Ti-C3	89.7		C-S=1.596
	Ti-C3	1.935	C3-Ti-C1	87.4		
COS/Cr-SWCNT	Cr-C1	1.837	C1-Cr-C2	91.5	2.032	C-O=1.201
	Cr-C2	1.936	C2-Cr-C3	91.5		C-S=1.602
	Cr-C3	1.837	C3-Cr-C1	90.7		
COS/Mn-SWCNT	Mn-C1	1.850	C1-Mn-C2	91.0	2.097	C-O=1.198
	Mn-C2	1.923	C2-Mn-C3	91.0		C-S=1.599
	Mn-C3	1.850	C3-Mn-C1	93.0		

ตารางที่ 4.7 ความยาวพันธะ มุมพันธะ ระยะดูดซับและความยาวพันธะระหว่างคาร์บอนกับออกซิเจนและคาร์บอนกับกำมะถันของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

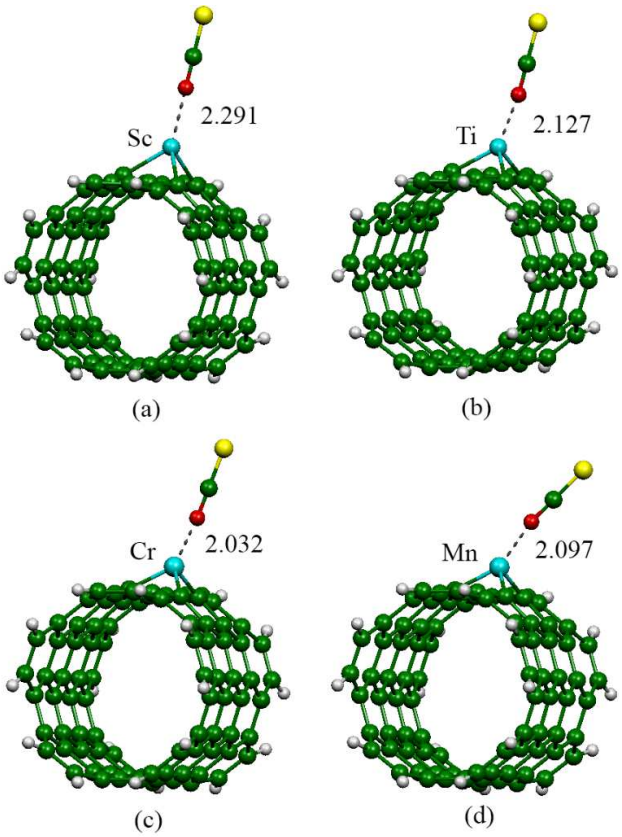
ระบบ	ความยาวพันธะ	ความยาวพันธะ (อังสตรอม)	มุมพันธะ	มุมพันธะ (องศา)	ระยะดูดซับ (อังสตรอม)	ความยาวพันธะ (อังสตรอม)
COS/SWCNT	C-C1	1.426	C1-C-C2	118.3	4.673	C-S=1.611
	C-C2	1.455	C2-C-C3	118.3		C-O=1.190
	C-C3	1.426	C3-C-C1	119.5		
COS/Sc-SWCNT	Sc-C1	2.084	C1-Sc-C2	85.2	3.064	C-S=1.631
	Sc-C2	2.125	C2-Sc-C3	85.4		C-O=1.179
	Sc-C3	2.083	C3-Sc-C1	82.9		
COS/Ti-SWCNT	Ti-C1	2.075	C1-Ti-C2	85.7	2.264	C-S=2.464
	Ti-C2	2.070	C2-Ti-C3	83.7		C-O=1.182
	Ti-C3	2.059	C3-Ti-C1	81.6		
COS/Cr-SWCNT	Cr-C1	1.935	C1-Cr-C2	87.4	2.352	C-S=1.826
	Cr-C2	1.925	C2-Cr-C3	92.6		C-O=1.214
	Cr-C3	1.824	C3-Cr-C1	88.8		
COS/Mn-SWCNT	Mn-C1	1.850	C1-Mn-C2	91.0	2.097	C-S=1.599
	Mn-C2	1.923	C2-Mn-C3	91.0		C-O=1.198
	Mn-C3	1.850	C3-Mn-C1	92.6		



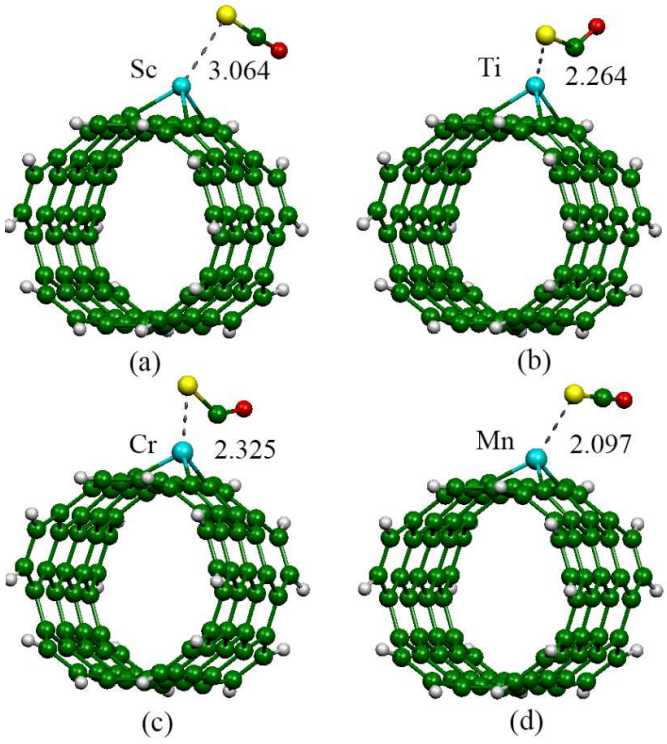
ภาพที่ 4.15 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม (a) CO_2/SWCNT, (b) COS/SWCNT และ (c) COS/SWCNT



ภาพที่ 4.16 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) CO_2/Sc-SWCNT, (b) CO_2/Ti-SWCNT, (c) CO_2/Cr-SWCNT และ (d) CO_2/Mn-SWCNT



ภาพที่ 4.17 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) COS/Sc-SWCNT, (b) COS/Ti-SWCNT), (c) COS/Cr-SWCNT และ (d) COS/Mn-SWCNT



ภาพที่ 4.18 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) COS/Sc-SWCNT, (b) COS/Ti-SWCNT, (c) COS/Cr-SWCNT และ (d) COS/Mn-SWCNT

4.2.2 สมบัติทางพลังงานของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอน

พลังงานดูดซับของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีส แสดงดังตารางที่ 4.8 พลังงานการดูดซับของแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมพบว่ามีค่าเท่ากับ -8.39 กิโลแคลอรีต่อโมล และพลังงานการดูดซับของแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีส มีค่าเท่ากับ -13.55, -15.81, -15.19 และ -27.46 กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ จากข้อมูลด้านพลังงานสามารถสรุปได้ว่าการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีส ช่วยในการปรับปรุงความสามารถในการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ให้ดีขึ้นอย่างชัดเจน โดยท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแมงกานีสจะดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ได้ดีที่สุด

จากการศึกษาพลังงานการดูดซับของแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ แก๊สคาร์บอนไดซัลไฟด์และแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์ โดยแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้ทั้งอะตอมออกซิเจนและอะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมพบว่ามีค่าเท่ากับ -8.39, -1.46, -4.50 และ -4.90 กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ แสดงให้เห็นว่าแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์สามารถดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมได้ดีที่สุด

จากการศึกษาพลังงานการดูดซับของแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีส พบว่าระบบที่มีการชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อสำหรับ COS/Sc–SWCNT, COS/Ti–SWCNT, COS/Cr–SWCNT และ COS/Mn–SWCNT มีค่าเท่ากับ -66.02, -17.53, -20.72 และ -19.32 กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ แสดงว่าถ้าชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียมจะเกิดการดูดซับได้ดีที่สุด และการศึกษาพลังงานการดูดซับของแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีสพบว่าระบบที่มีการชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อสำหรับ COS/Sc–SWCNT, COS/Ti–SWCNT, COS/Cr–SWCNT และ COS/Mn–SWCNT มีค่าเท่ากับ -75.35, -31.57, -19.21 และ -21.17 กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ แสดงว่าถ้าชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียมจะเกิดการดูดซับได้ดีที่สุด

จากข้อมูลด้านพลังงานสามารถสรุปได้ว่าการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีส ช่วยในการปรับปรุงความสามารถในการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ แก๊สคาร์บอนไดซัลไฟด์และแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์ให้ดีขึ้นอย่างชัดเจน โดยการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียมมีการดูดซับได้ดีที่สุด

ตารางที่ 4.8 พลังงานดูดซับ (E_{ads}) ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	E_{ads} (กิโลแคลอรีต่อโมล)
CO_2/SWCNT	-8.39
CO_2/Sc-SWCNT	-13.55
CO_2/Ti-SWCNT	-15.81
CO_2/Cr-SWCNT	-15.19
CO_2/Mn-SWCNT	-27.46
COS/SWCNT	-4.50
COS/SWCNT	-4.90
COS/Sc-SWCNT	-66.02
COS/Ti-SWCNT	-17.53
COS/Cr-SWCNT	-20.72
COS/Mn-SWCNT	-19.32
COS/Sc-SWCNT	-75.35
COS/Ti-SWCNT	-31.57
COS/Cr-SWCNT	-19.21
COS/Mn-SWCNT	-21.17

4.2.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอน

สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนแสดงดังตารางที่ 4.9 จากการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของพลังงานของ E_{HOMO} และ E_{LUMO} เมื่อนำค่ามาหาผลต่างจะได้ออกมาเป็นค่าแถบพลังงานซึ่งก่อนการดูดซับของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ 1.116 อิเล็กตรอนโวลต์ และแบบที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีสมีค่า เท่ากับ 1.170(***α***-spin), 1.088, 1.143 และ 1.388(***β***-spin) อิเล็กตรอนโวลต์ ตามลำดับ จากการศึกษาแถบพลังงานพบว่าท่อนาโนคาร์บอนเมื่อมีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีส มีค่าแถบพลังงานเปลี่ยนแปลงไปจากท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม จากการศึกษาการเปลี่ยนแถบพลังงานของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมที่มีการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ แก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนและอะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อมีค่าเปลี่ยนไปเป็น 1.116, , 1.143 และ 1.116 อิเล็กตรอนโวลต์ ตามลำดับ จากการศึกษาการเปลี่ยนแถบพลังงานของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีสมีค่าเปลี่ยนไปเป็น 1.170(***α***-spin), 1.088, 1.170 และ 1.973(***β***-spin) อิเล็กตรอนโวลต์ ตามลำดับ จากการศึกษาการเปลี่ยนแถบพลังงานของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีสมีค่าเปลี่ยนไปเป็น 0.761(***α***-spin), 0.925, 1.143 และ 1.170(***β***-spin) อิเล็กตรอนโวลต์ ตามลำดับ และจากการศึกษาการเปลี่ยนแถบพลังงานของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีสมีค่าเปลี่ยนไปเป็น 1.143(***α***-spin), 1.360, 1.088 และ 0.108(***α***-spin) อิเล็กตรอนโวลต์ ตามลำดับ

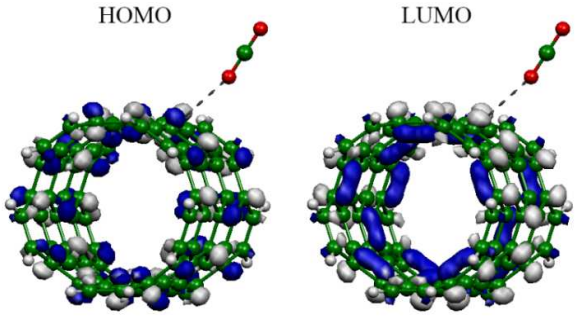
การศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของการถ่ายโอนประจุบางส่วน พบว่าการถ่ายโอนประจุบางส่วนของระบบที่มีการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์มีค่าเท่ากับ 0.003 อิเล็กตรอน การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อมีค่าเท่ากับ 0.003 อิเล็กตรอน และแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อมีค่าเท่ากับ -0.056 อิเล็กตรอน การถ่ายโอนประจุบางส่วนของระบบที่มีการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีสมีค่าเท่ากับ 0.104, 0.136, 0.487 และ 0.104 อิเล็กตรอน ตามลำดับ โดยค่าการถ่ายโอนประจุที่เป็นบวกจะถ่ายโอนจากแก๊สไปยังท่อและค่าการถ่ายโอนประจุที่เป็นลบจะถ่ายโอนประจุจากท่อไปยังแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีสมีค่าเท่ากับ 0.083, 0.079, 0.089 และ 0.125 อิเล็กตรอน ตามลำดับ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีสมีค่าเท่ากับ 0.154, 0.009, -0.056 และ 0.166 อิเล็กตรอน ตามลำดับ โดยค่าการถ่ายโอนประจุที่เป็นบวกจะถ่ายโอนจากแก๊สไปยังท่อและค่าการถ่ายโอนประจุที่เป็นลบจะถ่ายโอนประจุจากท่อไปยังแก๊ส

ตารางที่ 4.9 พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (E_{HOMO}) พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (E_{LUMO}) แถบพลังงาน (E_{gap}) และการถ่ายโอนประจุบางส่วน (PCT) ของการดูดซับคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอน

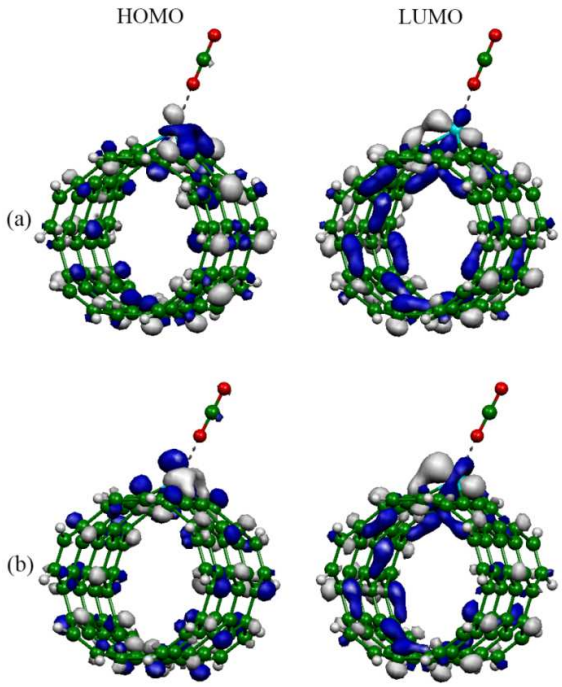
ระบบ	E_{HOMO} (อิเล็กตรอนโวลต์)	E_{LUMO} (อิเล็กตรอนโวลต์)	E_{gap} (อิเล็กตรอนโวลต์)	ประจุ TM	PCT (อิเล็กตรอน)
Sc-SWCNT	-4.000(***α***-spin)	-2.830(***α***-spin)	1.170	1.558	-
	-4.844(***β***-spin)	-3.129(***β***-spin)	1.714		
Ti-SWCNT	-4.136	-3.048	1.088	1.232	-
Cr-SWCNT	-4.354	-3.211	1.143	0.628	-
Mn-SWCNT	-4.735(***α***-spin)	-3.293(***α***-spin)	1.442	0.694	-
	-4.218(***β***-spin)	-2.830(***β***-spin)	1.388		
CO_2/SWCNT	-4.381	-3.265	1.116	-	0.003
CO_2/Sc-SWCNT	-3.891(***α***-spin)	-2.721(***α***-spin)	1.170	1.419	0.104
	-4.707(***β***-spin)	-3.020(***β***-spin)	1.687		
CO_2/Ti-SWCNT	-4.027	-2.938	1.088	0.966	0.136
CO_2/Cr-SWCNT	-4.272	-3.102	1.170	0.326	0.487
CO_2/Mn-SWCNT	-4.572(***α***-spin)	-3.102(***α***-spin)	1.469	0.463	0.104
	-4.163(***β***-spin)	-2.966(***β***-spin)	1.973		
COS/SWCNT	-4.381	-3.238	1.143	-	0.003
COS/SWCNT	-4.408	-3.293	1.116	-	-0.056
COS/Sc-SWCNT	-3.891(***α***-spin)	-3.129(***α***-spin)	0.761	1.420	0.083
	-4.708(***β***-spin)	-3.102(***β***-spin)	1.605		
COS /Ti-SWCNT	-4.027	-3.102	0.925	0.976	0.079
COS/Cr-SWCNT	-4.272	-3.129	1.143	0.313	0.089
COS/Mn-SWCNT	-4.544(***α***-spin)	-3.074(***α***-spin)	1.469	0.434	0.125
	-4.136(***β***-spin)	-2.966(***β***-spin)	1.170		
COS/Sc-SWCNT	-3.973(***α***-spin)	-2.830(***α***-spin)	1.143	1.314	0.154
	-4.817(***β***-spin)	-3.102(***β***-spin)	1.714		
COS/Ti-SWCNT	-5.007	-3.646	1.360	0.110	0.009
COS/Cr-SWCNT	-4.680	-3.592	1.088	-0.211	-0.056
COS/Mn-SWCNT	-4.626(***α***-spin)	-4.517(***α***-spin)	0.108	0.328	0.166
	-4.218(***β***-spin)	-3.021(***β***-spin)	1.197		

การพล๊อตการกระจายตัวของออร์บิทัลที่มีพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และการพล๊อตการกระจายตัวของออร์บิทัลที่มีพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ที่บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีสแสดงดังภาพที่ 4.19-4.21 จากภาพอธิบายได้ว่าการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมอิเล็กตรอนจะกระจายตัวอยู่ตรงบริเวณการพล๊อตการกระจายตัวของ HOMO จะอยู่ตรงบริเวณท่อ การดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมพบว่าการพล๊อตการกระจายตัวของ LUMO จะอยู่ตรงบริเวณท่อ การดูดซับ

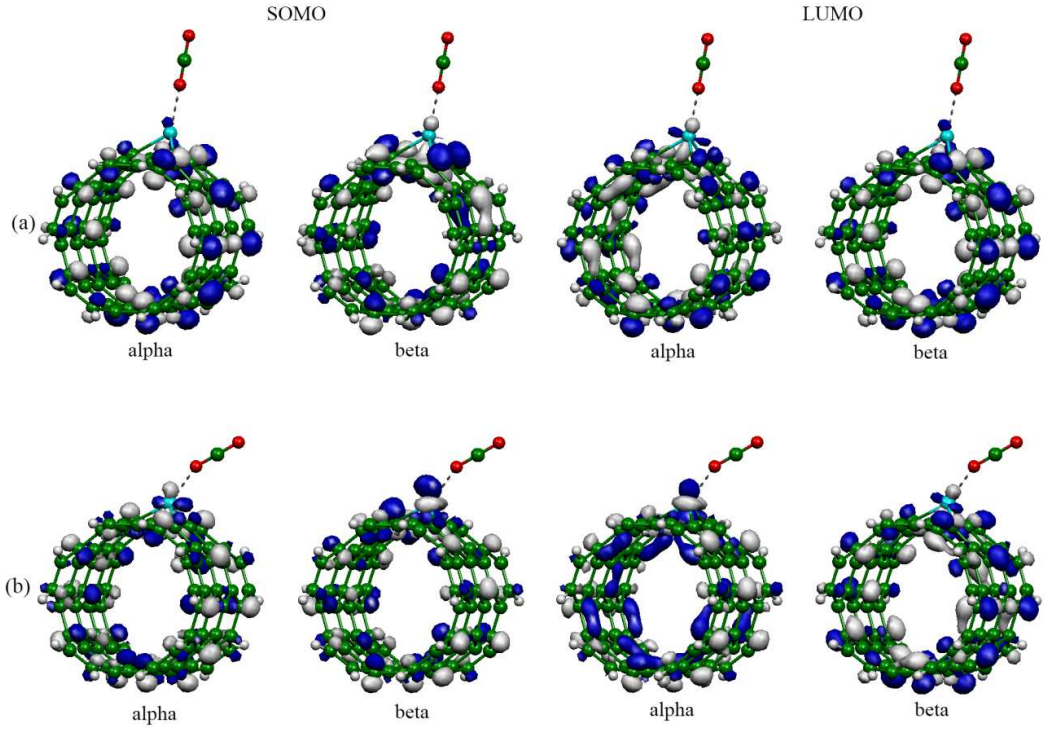
แก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมไทเทเนียมและโครเมียมอิเล็กตรอนจะกระจายตัวอยู่ตรงบริเวณการพล๊อตการกระจายตัวของ HOMO จะอยู่ตรงบริเวณท่อ การดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมไทเทเนียมและโครเมียมพบว่าการพล๊อตการกระจายตัวของ LUMO จะอยู่ตรงบริเวณท่อ การดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียมและแมงกานีสอิเล็กตรอนจะกระจายตัวอยู่ตรงบริเวณการพล๊อตการกระจายตัวของ HOMO จะอยู่ตรงบริเวณท่อ การดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียมและแมงกานีสพบว่าการพล๊อตการกระจายตัวของ LUMO จะอยู่ตรงบริเวณท่อ ดังนั้นบริเวณดังกล่าวจึงเหมาะที่จะทำการดูดซับแก๊สเนื่องจากเป็นบริเวณที่มีการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนอยู่รอบ



ภาพที่ 4.19 การพล๊อตการกระจายตัวของ HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม

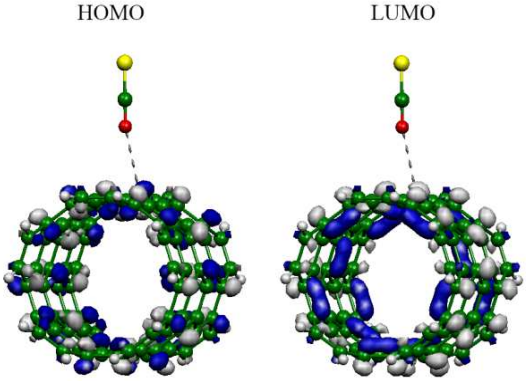


ภาพที่ 4.20 การพล็อตการกระจายตัวของ HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอน (a) CO_2/Ti–SWCNT และ (b) CO_2/Cr–SWCNT

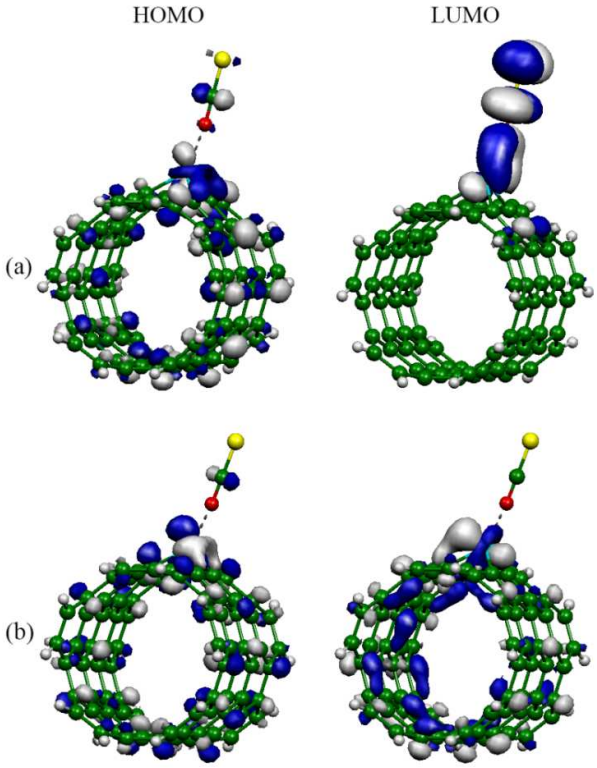


ภาพที่ 4.21 การพล็อตการกระจายตัวของ SOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอน (a) CO_2/Sc–SWCNT และ (b) CO_2/Mn–SWCN

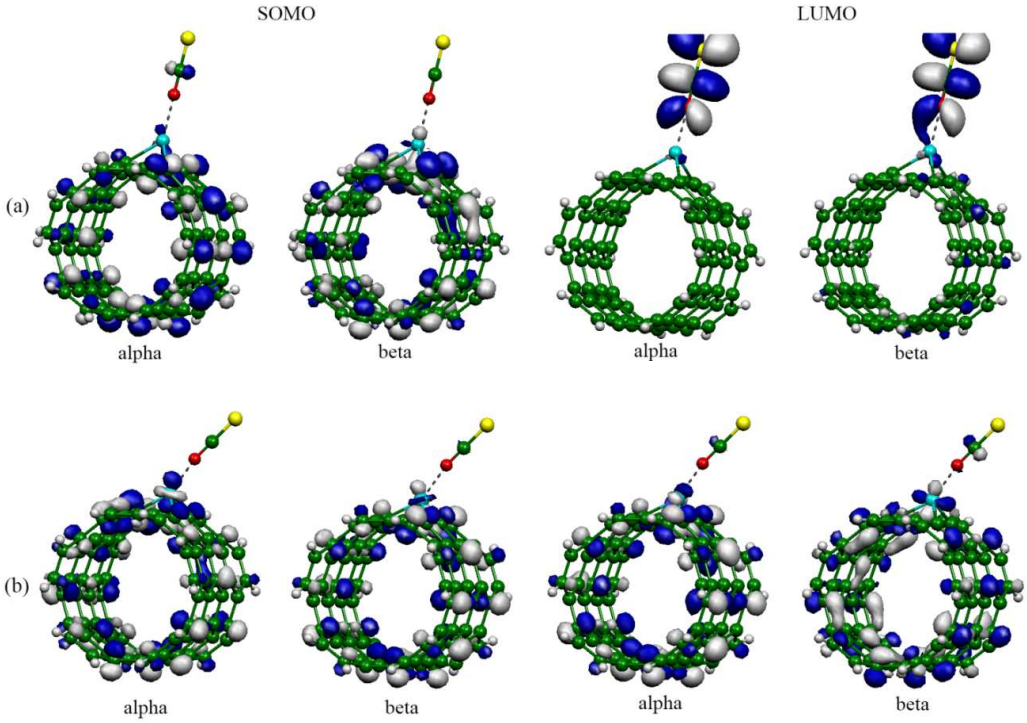
จากการศึกษาการพล็อตการกระจายตัวของ HOMO หรือ SOMO และการพล็อตการกระจายตัวของ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์ที่ชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีสแสดงดังภาพที่ 4.22-4.23 จากภาพอธิบายได้ว่าการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมอิเล็กตรอนจะกระจายตัวอยู่ตรงบริเวณการพล็อตการกระจายตัวของ HOMO จะอยู่ตรงบริเวณท่อ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมพบว่าการพล็อตการกระจายตัวของ LUMO จะอยู่ตรงบริเวณท่อ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมไทเทเนียมและโครเมียมอิเล็กตรอนจะกระจายตัวอยู่ตรงบริเวณการพล็อตการกระจายตัวของ HOMO หรือ SOMO จะตรงบริเวณท่อ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมไทเทเนียมพบว่าการพล็อตการกระจายตัวของ LUMO จะอยู่ตรงบริเวณแก๊ส สำหรับการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียมพบว่าการพล็อตการกระจายตัวของ LUMO จะอยู่ตรงบริเวณท่อ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียมและแมงกานีสอิเล็กตรอนจะกระจายตัวอยู่ตรงบริเวณการพล็อตการกระจายตัวของ SOMO จะอยู่ตรงบริเวณท่อ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียมพบว่าการพล็อตการกระจายตัวของ LUMO จะอยู่ตรงบริเวณแก๊ส สำหรับการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแมงกานีสพบว่าการพล็อตการกระจายตัวของ LUMO จะอยู่ตรงบริเวณท่อ ดังนั้นบริเวณดังกล่าวจึงเหมาะที่จะทำการดูดซับแก๊สเนื่องจากเป็นบริเวณที่มีการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนอยู่รอบ



ภาพที่ 4.22 การพล็อตการกระจายตัวของ HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม (COS/SWCNT)



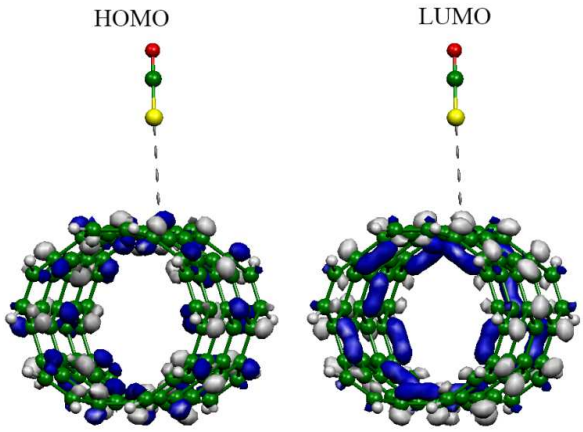
ภาพที่ 4.23 การพล็อตการกระจายตัวของ HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยซี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอน (a) COS/Ti–SWCNT และ (b) COS/Cr–SWCNT



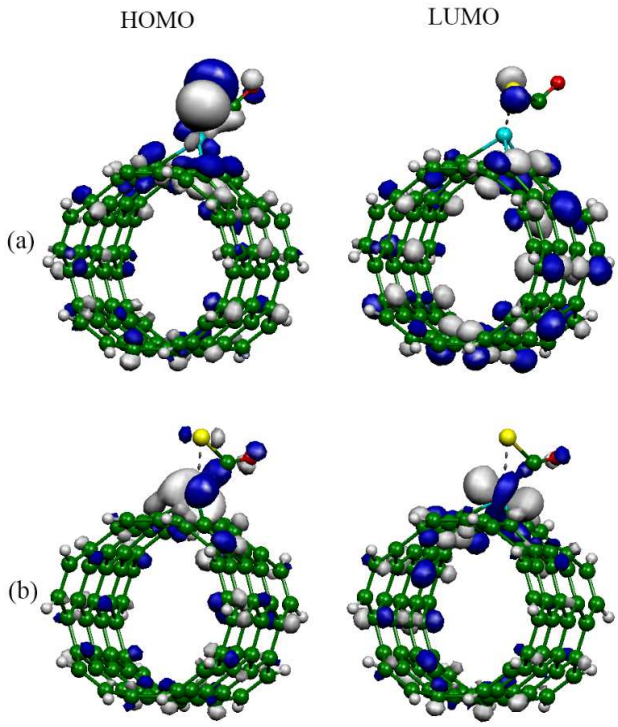
ภาพที่ 4.24 การพล็อตการกระจายตัวของ SOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอน (a) COS/Sc–SWCNT และ (b) COS/Mn–SWCNT

จากการศึกษาการพล็อตการกระจายตัวของ HOMO และการพล็อตการกระจายตัวของ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์ที่ชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีสแสดงดังภาพที่ 4.25-4.27 จากภาพอธิบายได้ว่าการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม อิเล็กตรอนจะกระจายตัวอยู่ตรงบริเวณการพล็อตการกระจายตัวของ HOMO จะอยู่ตรงบริเวณท่อ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมพบว่าการพล็อตการกระจายตัวของ LUMO จะะอยู่ตรงบริเวณท่อ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมไทเทเนียมและโครเมียมอิเล็กตรอนจะกระจายตัวอยู่ตรงบริเวณการพล็อตการกระจายตัวของ HOMO จะอยู่ตรงบริเวณแก๊ส การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมไทเทเนียมและโครเมียมอิเล็กตรอนจะกระจายตัวอยู่ตรงบริเวณการพล็อตการกระจายตัวของ LUMO จะอยู่ตรงบริเวณแก๊ส การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียมและแมงกานีสอิเล็กตรอนจะกระจายตัวอยู่ตรงบริเวณการพล็อตการกระจายตัวของ HOMO จะอยู่ตรงบริเวณท่อ การดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียมพบว่าการพล็อตการกระจายตัวของ LUMOจะอยู่ตรงบริเวณแก๊ส สำหรับการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแมงกานีสพบว่าการพล็อต

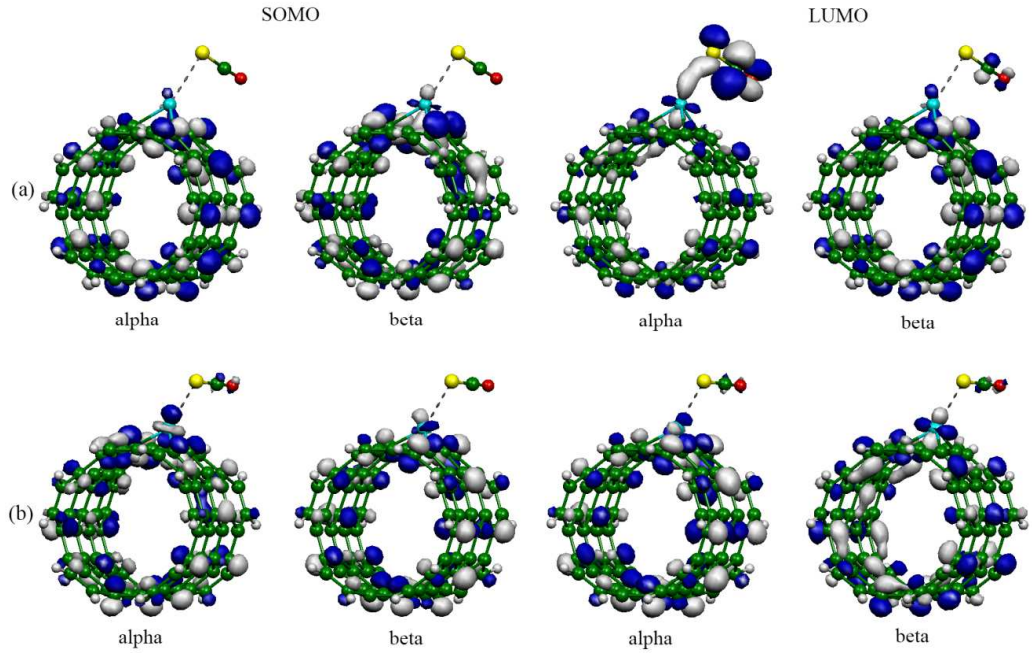
การกระจายตัวของ LUMO จะอยู่ตรงบริเวณท่อ ดังนั้นบริเวณดังกล่าวจึงเหมาะที่จะทำการดูดซับแก๊สเนื่องจากเป็นบริเวณที่มีการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนอยู่รอบ



ภาพที่ 4.25 การพล็อตการกระจายตัวของ HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม (COS/SWCNT)

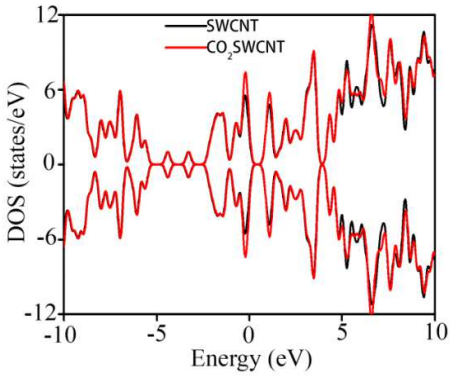


ภาพที่ 4.26 การพล็อตการกระจายตัวของ HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอน (a) COS/Ti–SWCNT และ (b) COS/Cr–SWCNT

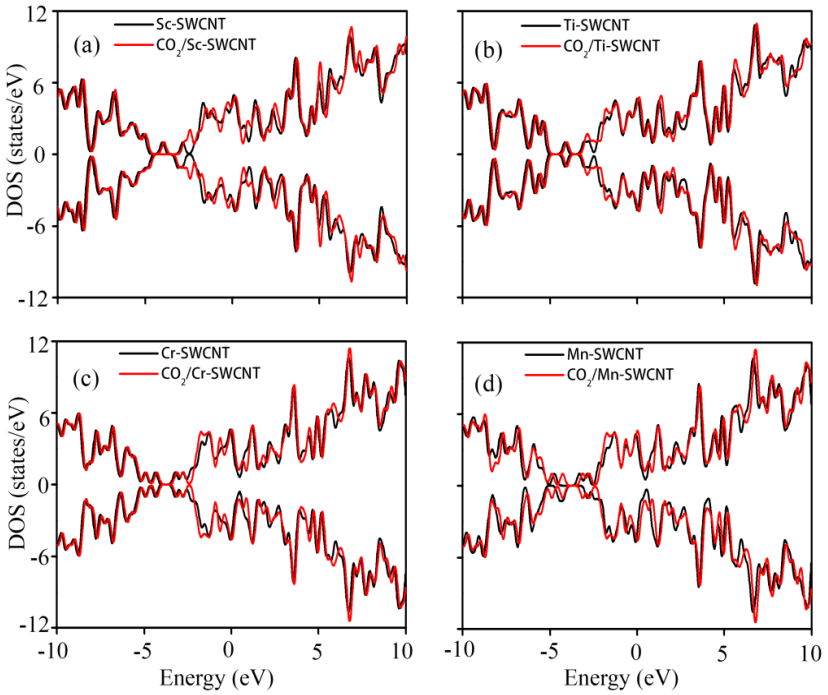


ภาพที่ 4.27 การพล็อตการกระจายตัวของ SOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอน (a) COS/Sc–SWCNT และ (b) COS/Mn–SWCNT

ได้ทำการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีส (ภาพที่ 4.28-4.29) จากภาพพบว่าการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ทำให้ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมเปลี่ยนแปลงจากเดิมเล็กน้อยและการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีส พบว่าหลังดูดซับแก๊สเส้นความหนาแน่นสถานะเลื่อนจากตำแหน่งเดิมอย่างชัดเจน ดังนั้นจึงสามารถอธิบายได้ว่าการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์มีผลต่อความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมากกว่าท่อแบบดั้งเดิม



ภาพที่ 4.28 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม

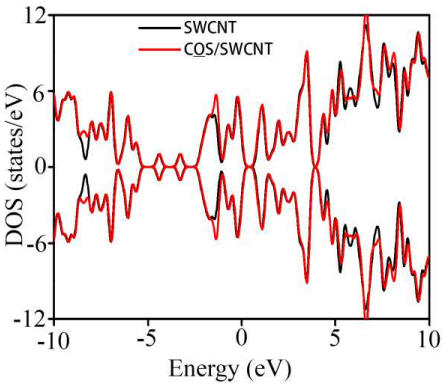


ภาพที่ 4.29 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) CO_2/Sc-SWCNT, (b) CO_2/Ti-SWCNT, (c) CO_2/Cr-SWCNT และ (d) CO_2/Mn-SWCNT

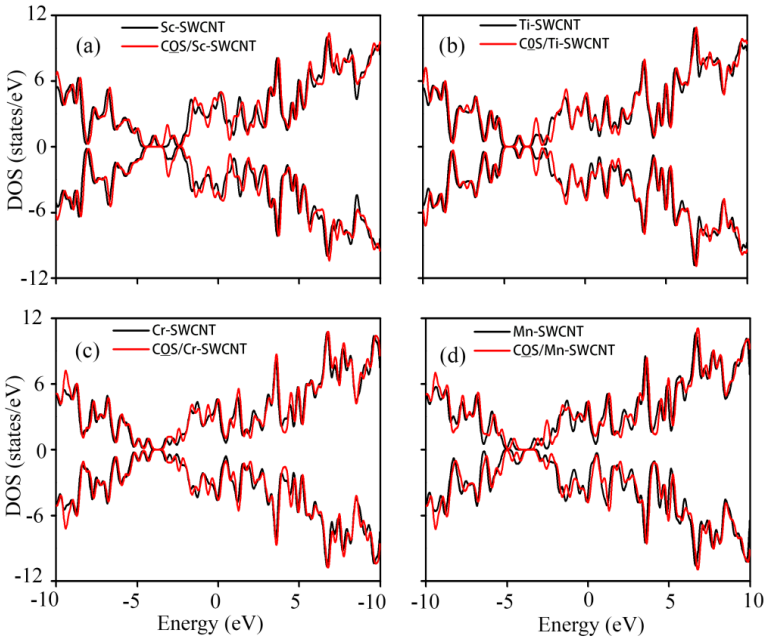
ได้ทำการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของความหนาแน่นสถานะ (Density of state, DOS) ของการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีส แสดงดังภาพที่ 4.21-4.22 จากภาพพบว่าความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม

โครเมียมและแมงกานีสก่อนและหลังการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์จะเห็นว่าหลังดูดซับแก๊สเส้นความหนาแน่นสถานะเลื่อนจากตำแหน่งของก่อนการดูดซับเพียงเล็กน้อย ดังนั้นจึงสามารถอธิบายได้ว่าการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์มีผลต่อความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอน

ได้ทำการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีส แสดงดังภาพที่ 4.30-4.31 จากภาพพบว่าความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีสก่อนและหลังการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนจะเห็นว่าหลังดูดซับแก๊สเส้นความหนาแน่นสถานะเลื่อนจากตำแหน่งของก่อนการดูดซับเพียงเล็กน้อย ดังนั้นจึงสามารถอธิบายได้ว่าการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์มีผลต่อความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอน

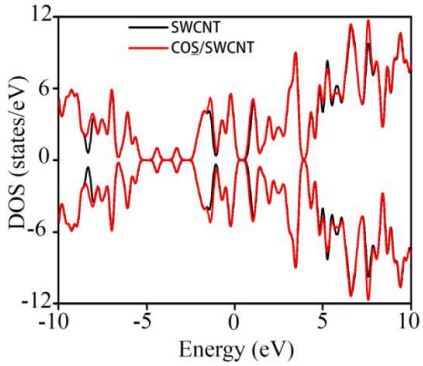


ภาพที่ 4.30 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม (COS/SWCNT)

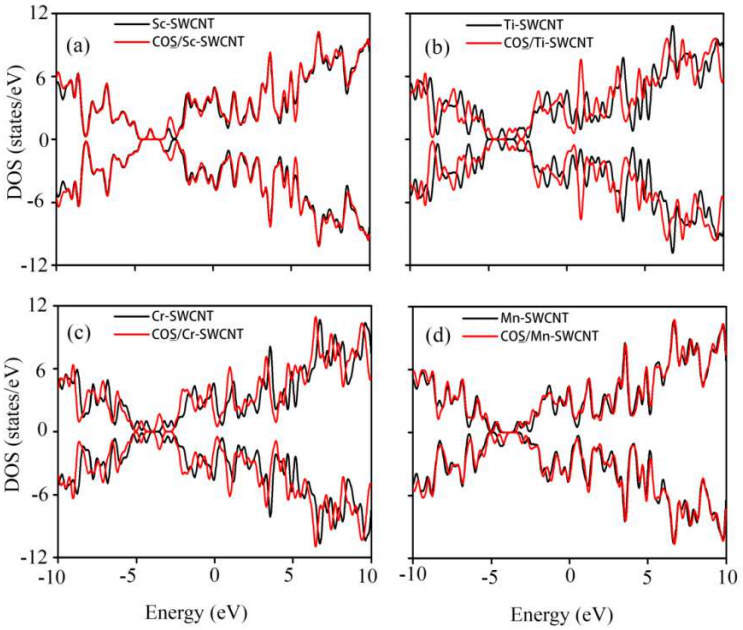


ภาพที่ 4.31 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมออกซิเจนเข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) COS/Sc-SWCNT, (b) COS/Ti-SWCNT, (c) COS/Cr-SWCNT และ (d) COS/Mn-SWCNT

จากการศึกษาความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีส แสดงดังภาพที่ 4.32-4.33 จากภาพพบว่าความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีสก่อนและหลังการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนจะเห็นว่าหลังดูดซับแก๊สเส้นความหนาแน่นสถานะเลื่อนจากตำแหน่งของก่อนการดูดซับเพียงเล็กน้อย ดังนั้นจึงสามารถอธิบายได้ว่าการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์มีผลต่อความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอน



ภาพที่ 4.32 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม (COS/SWCNT)



ภาพที่ 4.33 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมซัลเฟอร์เข้าหาท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) COS/Sc-SWCNT, (b) COS/Ti-SWCNT, (c) COS/Cr-SWCNT และ (d) COS/Mn-SWCNT

4.3 การดูดซับไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอน

4.3.1 สมบัติทางโครงสร้างการดูดซับไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอน

ศึกษาอันตรกิริยาระหว่างแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์กับท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมเปรียบเทียบกับท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน แสดงดังภาพที่ 4.34-4.36 ตามลำดับ ความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะดูดซับของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน แสดงดังตารางที่ 4.9-4.10 จากภาพและตาราง พบว่าการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม (HCN/SWCNT) มีความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C-C1, C-C2 และ C-C3 มีค่าเท่ากับ 1.426, 1.453 และ 1.426 อังสตรอม และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-C-C2, C2-C-C3 และ C3-C-C1 มีค่าเท่ากับ 118.3, 118.3 และ 119.5 องศา การดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง TM-C1, TM-C2 และ TM-C3 มีค่าอยู่ระหว่าง 1.837-2.004, 1.945-2.118 และ 1.837-2.004 อังสตรอม และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-TM-C2, C2-TM-C3 และ C3-TM-C1 มีค่าอยู่ระหว่าง 87.0-92.0, 87.0-92.0 และ 83.8-92.3 องศา การดูดซับแก๊สไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พบว่าความยาวพันธะ

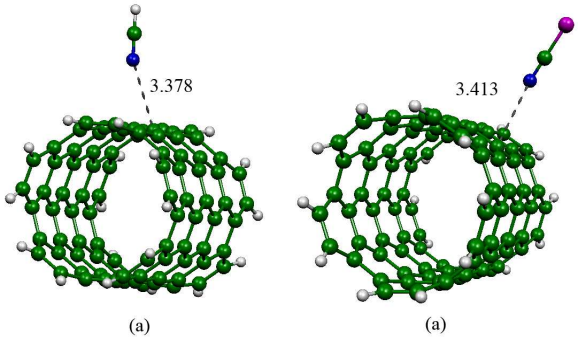
ตรงตำแหน่ง TM-C1, TM-C2 และ TM-C3 มีค่าอยู่ระหว่าง 1.837-2.029, 1.935-2.114 และ 1.837-2.059 อังสตรอม และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-TM-C2, C2-TM-C3 และ C3-TM-C1 มีค่าอยู่ระหว่าง 87.0-91.9, 87.0-93.7 และ 83.8-92.3 องศา เมื่อเปรียบเทียบโครงสร้างก่อนและหลังการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พบว่าความยาวพันธะและมุมพันธะของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมเปลี่ยนแปลงเล็กน้อย ในขณะที่ความยาวพันธะและมุมพันธะของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันเกิดการเปลี่ยนแปลงทางโครงสร้างอย่างชัดเจนคือความยาวพันธะตรงตำแหน่งดูดซับมีค่ามากขึ้นหรือยาวขึ้นและมุมพันธะมีค่าน้อยลงหรือแคบลง เนื่องจากแก๊สทั้งสองชนิดเกิดอันตรกิริยาที่แรงกับท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันนั่นเอง จากการศึกษาระยะดูดซับที่ใกล้ที่สุดระหว่างแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์และท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ 3.378 และ 3.1413 อังสตรอม ตามลำดับ ระยะดูดซับระหว่างแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พบว่ามีค่าอยู่ในช่วง 1.966-2.256 อังสตรอม ในขณะที่ระยะดูดซับระหว่างแก๊สไซยาโนเจนคลอไรด์และท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พบว่ามีค่าอยู่ในช่วง 1.921-2.138 อังสตรอม ซึ่งพบว่าระยะดูดซับแก๊สทั้งสองบนท่อนาโนคาร์บอนมีค่าใกล้เคียงกัน

ตารางที่ 4.9 ความยาวพันธะ มุมพันธะ ระยะดูดซับของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซด์ยาไนด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

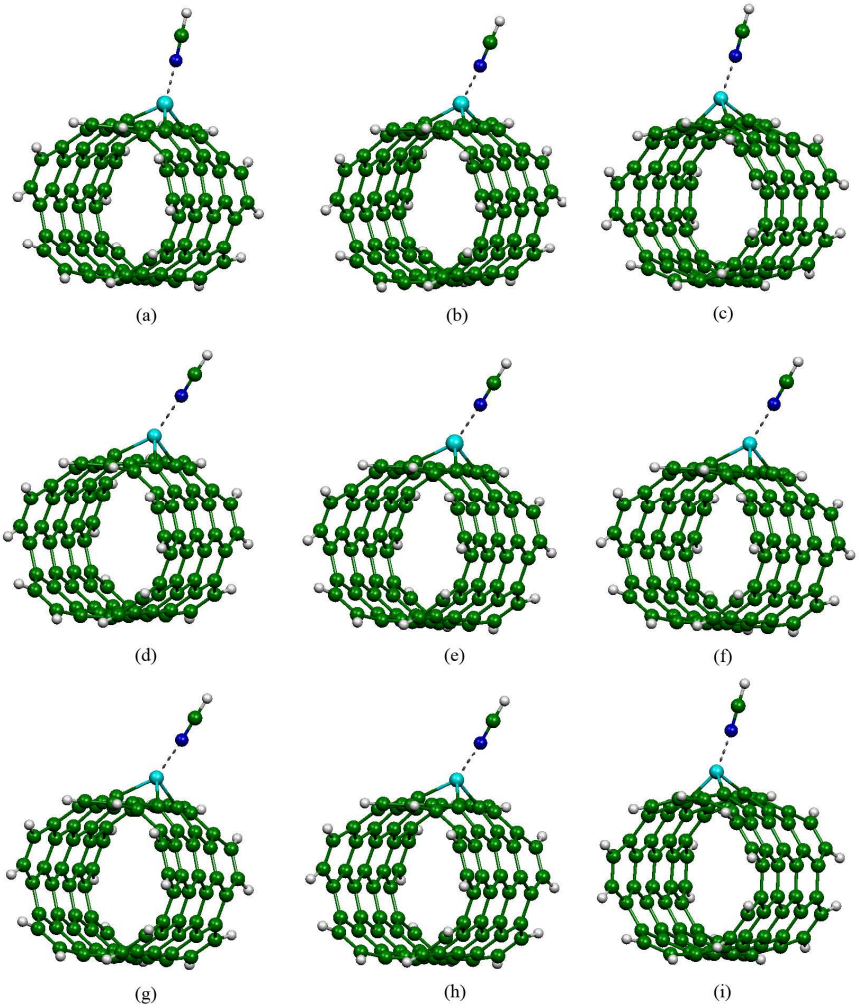
ระบบ	ความยาวพันธะ	ความยาวพันธะ (อังสตรอม)	มุมพันธะ	มุมพันธะ (องศา)	ระยะดูดซับ (อังสตรอม)
HCN/SWCNT	C-C1	1.426	C1-C-C2	118.3	3.378
	C-C2	1.453	C2-C-C3	118.3	
	C-C3	1.426	C3-C-C1	119.5	
HCN/V-SWCNT	V-C1	1.936	C1-V-C2	89.9	2.065
	V-C2	1.988	C2-V-C3	89.9	
	V-C3	1.936	C3-V-C1	90.0	
HCN/Nb-SWCNT	Nb-C1	2.004	C1-Nb-C2	87.3	2.256
	Nb-C2	2.118	C2-Nb-C3	87.3	
	Nb-C3	2.004	C3-Nb-C1	83.8	
HCN/Ta-SWCNT	Ta-C1	1.985	C1-Ta-C2	88.8	2.147
	Ta-C2	2.103	C2-Ta-C3	88.8	
	Ta-C3	1.985	C3-Ta-C1	86.1	
HCN/Cr-SWCNT	Cr-C1	1.837	C1-Cr-C2	92.0	1.966
	Cr-C2	1.945	C2-Cr-C3	92.0	
	Cr-C3	1.837	C3-Cr-C1	90.7	
HCN/Mo-SWCNT	Mo-C1	1.945	C1-Mo-C2	89.7	2.145
	Mo-C2	2.056	C2-Mo-C3	89.7	
	Mo-C3	1.945	C3-Mo-C1	86.3	
HCN/W-SWCNT	W-C1	1.934	C1-W-C2	91.0	2.073
	W-C2	2.053	C2-W-C3	91.0	
	W-C3	1.934	C3-W-C1	88.5	
HCN/Mn-SWCNT	Mn-C1	1.847	C1-Mn-C2	90.5	1.975
	Mn-C2	1.935	C2-Mn-C3	90.5	
	Mn-C3	1.847	C3-Mn-C1	92.3	
HCN/Tc-SWCNT	Tc-C1	1.924	C1-Tc-C2	87.0	2.133
	Tc-C2	2.052	C2-Tc-C3	87.0	
	Tc-C3	1.923	C3-Tc-C1	90.1	
HCN/Re-SWCNT	Re-C1	1.918	C1-Re-C2	88.0	2.062
	Re-C2	2.045	C2-Re-C3	88.0	
	Re-C3	1.918	C3-Re-C1	91.6	

ตารางที่ 4.10 ความยาวพันธะ มุมพันธะ ระยะดูดซับของการดูดซับแก๊สไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

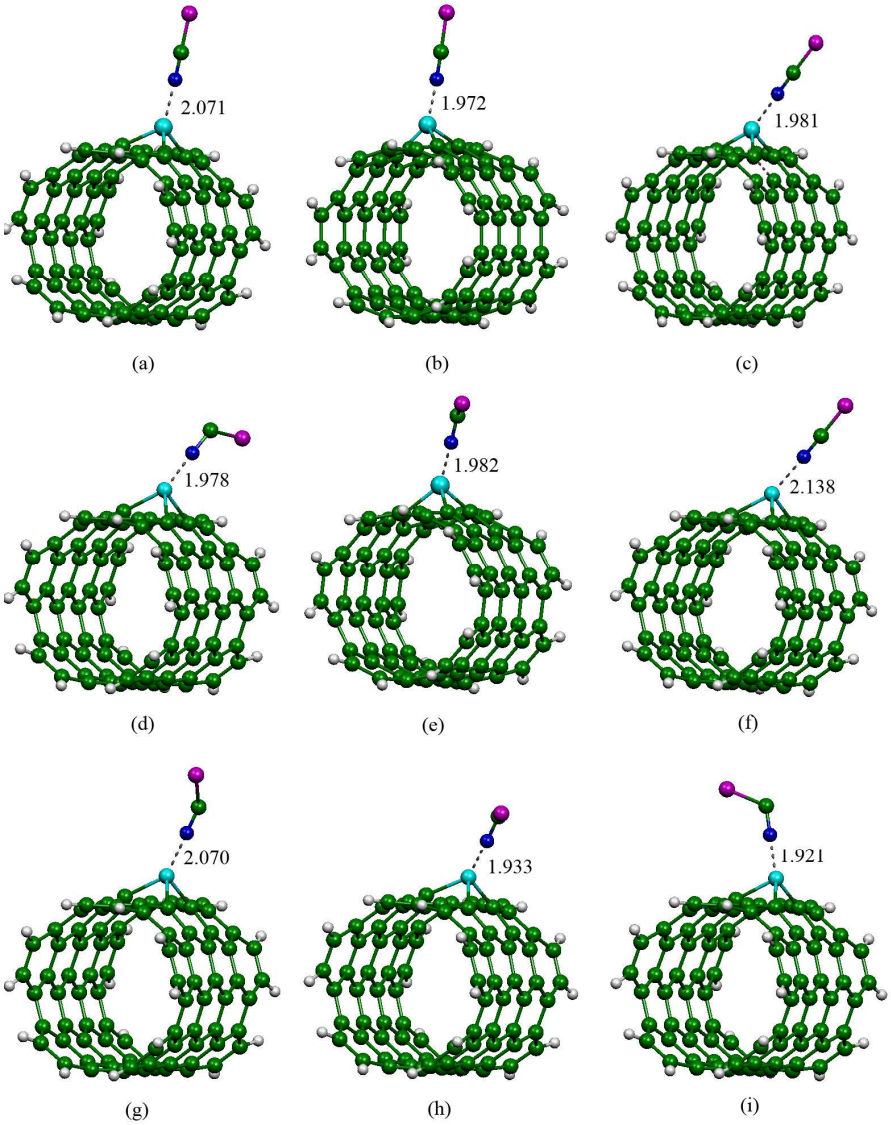
ระบบ	ความยาวพันธะ	ความยาวพันธะ (อังสตรอม)	มุมพันธะ	มุมพันธะ (องศา)	ระยะดูดซับ (อังสตรอม)
ClCN/SWCNT	C-C1	1.426	C1-C-C2	118.3	3.413
	C-C2	1.453	C2-C-C3	118.3	
	C-C3	1.426	C3-C-C1	119.5	
ClCN/V-SWCNT	V-C1	1.936	C1-V-C2	89.8	2.071
	V-C2	1.988	C2-V-C3	89.8	
	V-C3	1.936	C3-V-C1	90.0	
ClCN/Nb-SWCNT	Nb-C1	2.029	C1-Nb-C2	90.8	1.978
	Nb-C2	2.114	C2-Nb-C3	85.4	
	Nb-C3	2.059	C3-Nb-C1	82.1	
ClCN/Ta-SWCNT	Ta-C1	1.986	C1-Ta-C2	89.1	2.070
	Ta-C2	2.086	C2-Ta-C3	89.1	
	Ta-C3	1.988	C3-Ta-C1	85.6	
ClCN/Cr-SWCNT	Cr-C1	1.837	C1-Cr-C2	91.9	1.972
	Cr-C2	1.944	C2-Cr-C3	91.9	
	Cr-C3	1.837	C3-Cr-C1	90.7	
ClCN/Mo-SWCNT	Mo-C1	1.992	C1-Mo-C2	87.8	1.982
	Mo-C2	2.048	C2-Mo-C3	92.2	
	Mo-C3	1.936	C3-Mo-C1	87.1	
ClCN/W-SWCNT	W-C1	1.984	C1-W-C2	88.8	1.933
	W-C2	2.041	C2-W-C3	93.7	
	W-C3	1.931	C3-W-C1	87.7	
ClCN/Mn-SWCNT	Mn-C1	1.847	C1-Mn-C2	90.5	1.981
	Mn-C2	1.935	C2-Mn-C3	90.5	
	Mn-C3	1.847	C3-Mn-C1	92.3	
ClCN/Tc-SWCNT	Tc-C1	1.923	C1-Tc-C2	87.0	2.138
	Tc-C2	2.052	C2-Tc-C3	87.0	
	Tc-C3	1.923	C3-Tc-C1	90.2	
ClCN/Re-SWCNT	Re-C1	1.925	C1-Re-C2	87.4	1.921
	Re-C2	2.031	C2-Re-C3	87.4	
	Re-C3	1.925	C3-Re-C1	92.6	



ภาพที่ 4.34 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์ (A) และไซยาโนเจนคลอไรด์ (B) บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม ความยาวพันธะหน่วยเป็นอังสตรอม



ภาพที่ 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



ภาพที่ 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

4.3.2 สมบัติทางพลังงานของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอน

พลังงานดูดซับของการดูดซับไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอน แสดงดังตารางที่ 4.11 พบว่าพลังงานการดูดซับของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ -0.50 และ -0.47 กิโลแคลอรีต่อโมล พลังงานการดูดซับของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมอะตอมวาเนเดียม โครเมียม แมงกานีส ไนโอเบียม โมลิบดีนัม เทคนีเชียม แทนทาลัม ทังสเตนและรีเนียม มีค่าเท่ากับ -35.45, -33.48, -31.32, -28.08, -30.28, -27.81, -44.56, -40.48 และ -35.70 กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ และพลังงานการดูดซับของการดูดซับแก๊สไซยาโนเจนคลอร์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมอะตอมวาเนเดียม โครเมียม แมงกานีส ไนโอเบียม โมลิบดีนัม เทคนีเชียม แทนทาลัม ทังสเตนและรีเนียม มีค่าเท่ากับ -33.01, -30.70, -28.80, -33.01, -31.39, -25.03, -59.44, -49.49 และ -37.36 กิโลแคลอรีต่อโมล ตามลำดับ ดังนั้นจึงสรุปได้ว่า ท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันสามารถดูดซับแก๊สทั้งสองชนิดได้ดีกว่าท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมอย่างเห็นได้ชัด โดยท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทนทาลัมจะสามารถดูดซับแก๊สทั้งสองชนิดได้ดีที่สุด

ตารางที่ 4.11 พลังงานการดูดซับ (E_{ads}) ของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	E_{ads} (กิโลแคลอรีต่อโมล)
HCN/SWCNT	-0.50
HCN/V-SWCNT	-35.45
HCN/Cr-SWCNT	-33.48
HCN/Mn-SWCNT	-31.32
HCN/Nb-SWCNT	-28.08
HCN/Mo-SWCNT	-30.28
HCN/Tc-SWCNT	-27.81
HCN/Ta-SWCNT	-44.56
HCN/W-SWCNT	-40.48
HCN/Re-SWCNT	-35.70
ClCN/SWCNT	-0.47
ClCN/V-SWCNT	-33.01
ClCN/Cr-SWCNT	-30.70
ClCN/Mn-SWCNT	-28.80
ClCN/Nb-SWCNT	-33.01
ClCN/Mo-SWCNT	-31.39
ClCN/Tc-SWCNT	-25.03
ClCN/Ta-SWCNT	-59.44
ClCN/W-SWCNT	-49.49
ClCN/Re-SWCNT	-37.36

4.3.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอน

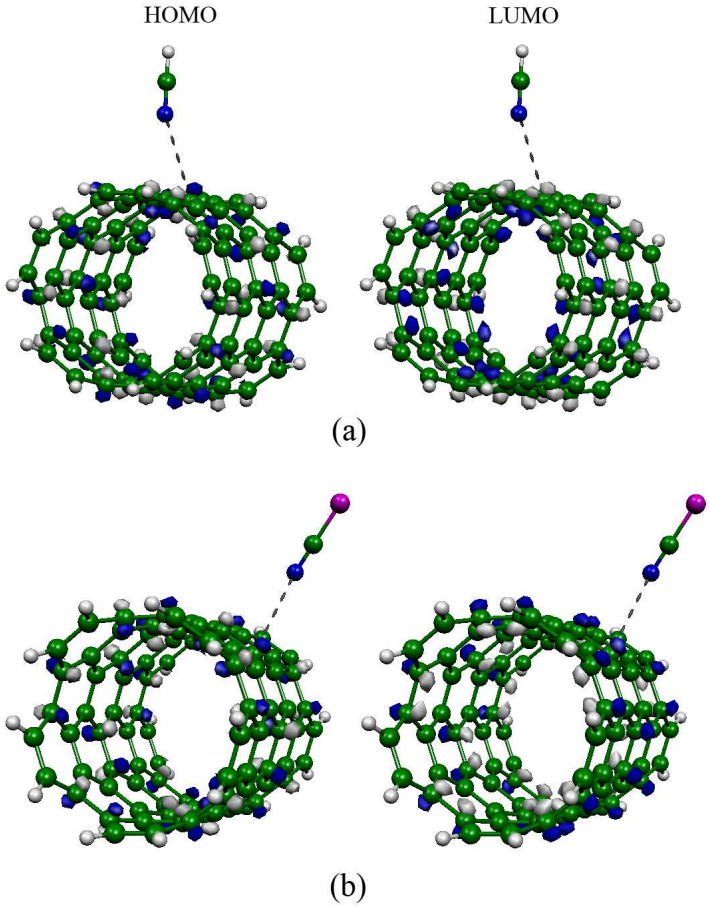
พลังงานของออร์บิทัลที่มีพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานของออร์บิทัลที่มีพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงานและการถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน แสดงดังตารางที่ 4.12 จากการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของ E_{HOMO} และ E_{LUMO} พบว่า E_{HOMO} และ E_{LUMO} ของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมที่มีการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์มีค่าเท่ากับ -4.272 และ -3.157 อิเล็กตรอนโวลต์ ตามลำดับ พบว่าแถบพลังงานมีค่าเท่ากับ 1.116 อิเล็กตรอนโวลต์ ในขณะที่ E_{HOMO} และ E_{LUMO} ของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมที่มีการดูดซับแก๊สไซยาโนเจนคลอไรด์มีค่าเท่ากับ -4.299 และ -3.184 อิเล็กตรอนโวลต์ ตามลำดับ พบว่าแถบพลังงานมีค่าเท่ากับ 1.116 อิเล็กตรอนโวลต์ เมื่อเปรียบเทียบกับท่อก่อนดูดซับแก๊สพบว่า

แถบพลังงานไม่มีการเปลี่ยนแปลง ดังนั้นท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมจึงไม่เหมาะที่จะพัฒนาเป็นตัวตรวจจับแก๊สทั้งสองชนิด ในขณะที่การดูดซับแก๊สทั้งสองชนิดทำให้ E_{HOMO}, E_{LUMO} และแถบพลังงานของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันเกิดการเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจน โดยพบว่ามีค่าการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานอยู่ในช่วง 0.028-0.462 อิเล็กตรอนโวลต์ ยกเว้นการดูดซับไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโมลิบดินัมและแทนทาลัม พบว่าแถบพลังงานไม่มีการเปลี่ยนแปลง ดังนั้นจึงสามารถสรุปได้ว่าท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีความเหมาะสมที่จะพัฒนาเป็นตัวตรวจจับแก๊สทั้งสองชนิด การศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของการถ่ายโอนประจุบางส่วน แสดงในตารางที่ 4.12 พบว่ามีการถ่ายโอนประจุบางส่วนระหว่างแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์และท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมเพียง 0.001 และ 0.002 อิเล็กตรอน ในขณะที่การถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์และท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันพบว่ามีค่าอยู่ในช่วง 0.017-0.563 อิเล็กตรอน ตามลำดับ แสดงให้เห็นถึงการถ่ายโอนอิเล็กตรอนระหว่างแก๊สและท่ออย่างชัดเจน

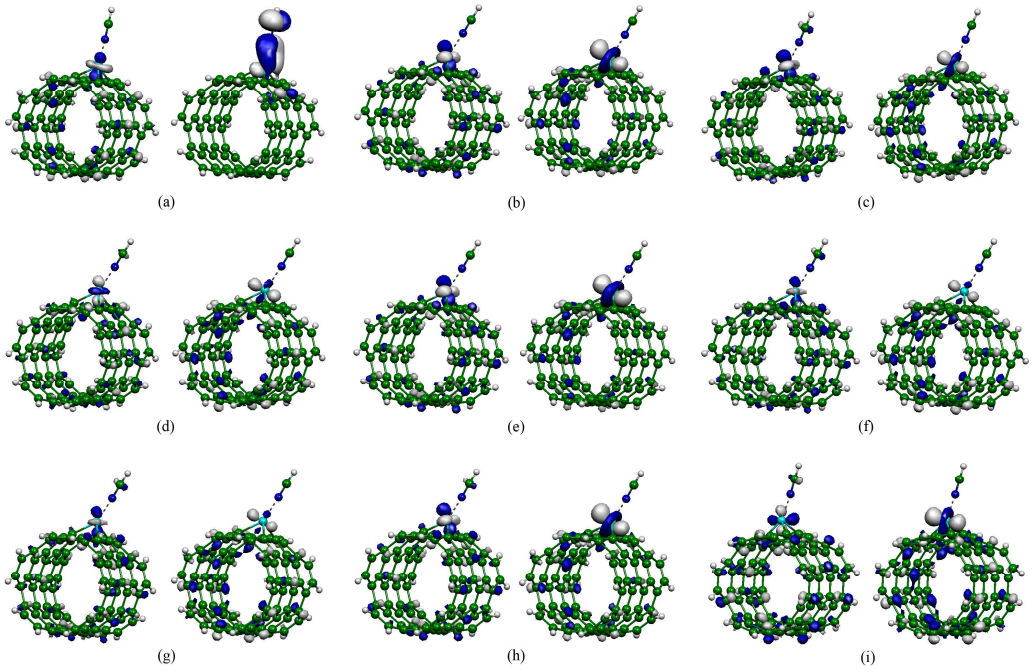
ตารางที่ 4.12 พลังงานของออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานของออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วนและประจุของโลหะของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	E_{HOMO} (อิเล็กตรอนโวลต์)	E_{LUMO} (อิเล็กตรอนโวลต์)	E_{gap} (อิเล็กตรอนโวลต์)	ΔE_{gap}	PCT (อิเล็กตรอน)	ประจุ TM
HCN/SWCNT	-4.272	-3.157	1.116	0.000	0.001	-
HCN/V-SWCNT	-3.946	-3.102	0.844	0.190	0.183	0.576
HCN/Cr-SWCNT	-4.218	-3.048	1.170	-0.028	0.157	0.230
HCN/Mn-SWCNT	-4.109	-2.912	1.197	-0.272	0.138	0.337
HCN/Nb-SWCNT	-4.055	-2.993	1.061	0.054	0.078	0.989
HCN/Mo-SWCNT	-4.191	-3.184	1.007	-0.082	0.085	0.563
HCN/Tc-SWCNT	-4.218	-3.048	1.170	-0.082	0.107	0.366
HCN/Ta-SWCNT	-4.082	-2.993	1.088	-0.218	0.000	1.260
HCN/W-SWCNT	-4.218	-3.157	1.061	-0.109	0.017	0.853
HCN/Re-SWCNT	-4.218	-3.075	1.143	-0.055	0.086	0.529
ClCN/SWCNT	-4.299	-3.184	1.116	0.000	0.002	-
ClCN/V-SWCNT	-3.946	-3.102	0.844	0.190	0.176	0.586
ClCN/Cr-SWCNT	-4.218	-3.048	1.170	-0.028	0.158	0.229
ClCN/Mn-SWCNT	-4.109	-3.021	1.088	-0.163	0.140	0.339
ClCN/Nb-SWCNT	-4.599	-3.810	0.789	0.327	-0.278	1.196
ClCN/Mo-SWCNT	-4.572	-3.646	0.925	0.000	-0.403	0.681
ClCN/Tc-SWCNT	-4.218	-3.048	1.170	-0.082	0.108	0.365
ClCN/Ta-SWCNT	-4.490	-3.619	0.871	0.000	-0.517	1.503
ClCN/W-SWCNT	-4.653	-3.674	0.980	-0.028	-0.563	1.036
ClCN/Re-SWCNT	-4.517	-3.891	0.626	0.462	-0.464	0.613

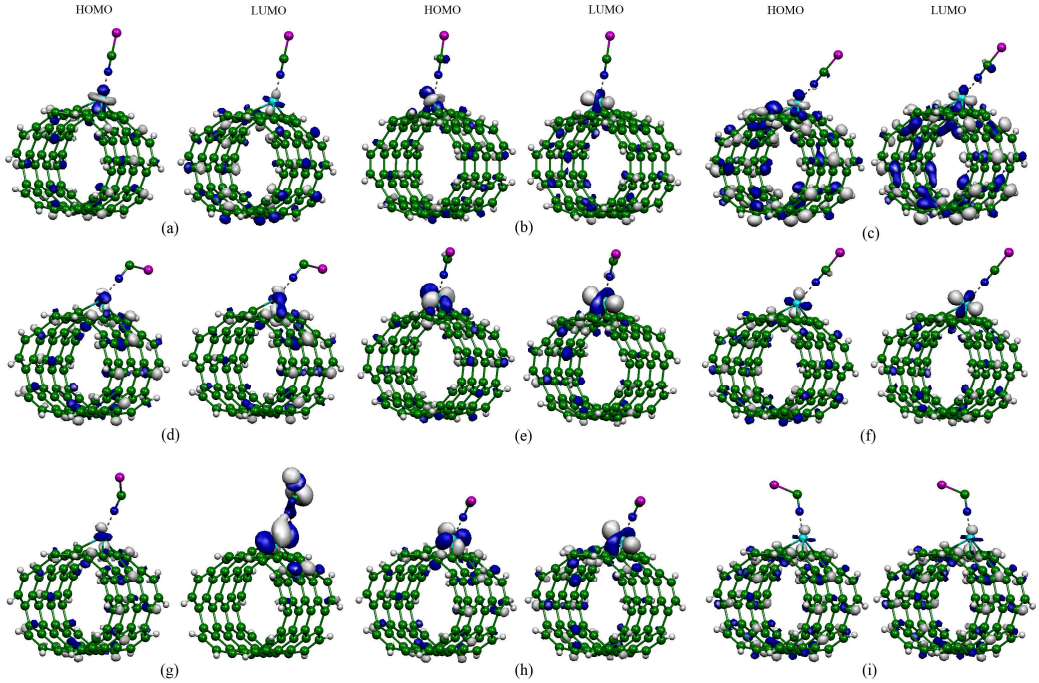
การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมแสดงดังภาพที่ 4.37 จากรูปอธิบายได้ว่า อิเล็กตรอนจะกระจายตัวอยู่รอบๆ ท่อนาโนคาร์บอน เนื่องจากท่อนาโนคาร์บอนประกอบด้วยอะตอมคาร์บอนเพียงอย่างเดียวและสร้างพันธะแบบโคออร์ดิเนตโคเวเลนต์ อิเล็กตรอนจึงเคลื่อนที่อยู่รอบๆ อะตอมคาร์บอนทุกอะตอม ไม่มีการเคลื่อนของอิเล็กตรอนระหว่างแก๊สและท่อ การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนนซิชันแสดงดังภาพที่ 4.38 และ 4.39 จากภาพอธิบายได้ว่าอิเล็กตรอนกระจายตัวอยู่รอบๆ ตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันและแก๊ส เนื่องจากตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีความเสถียรทางโครงสร้างต่ำ จึงเกิดการเคลื่อนของอิเล็กตรอนตรงบริเวณนั้น ส่วนการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนตรงบริเวณแก๊สเนื่องจากเกิดการถ่ายโอนประจุระหว่างแก๊สและท่อนาโนคาร์บอนนั่นเอง ซึ่งแสดงถึงการเกิดอันตรกิริยาระหว่างแก๊สและท่อ



ภาพที่ 4.37 การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และออร์บิทัล LUMO ของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม

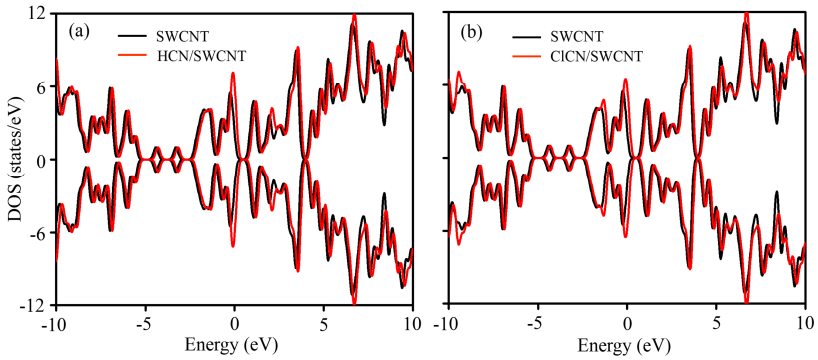


ภาพที่ 4.38 การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และอ LUMO ของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์บนท่อนาโนคาร์บอน (a) HCN/V-SWCNT, (b) HCN/Cr-SWCNT, (c) HCN/Mn-SWCNT, (d) HCN/Nb-SWCNT, (e) HCN/Mo-SWCNT, (f) HCN/Tc-SWCNT, (g) HCN/Nb-SWCNT, (h) HCN/Mo-SWCNT และ (i) HCN/Tc-SWCNT

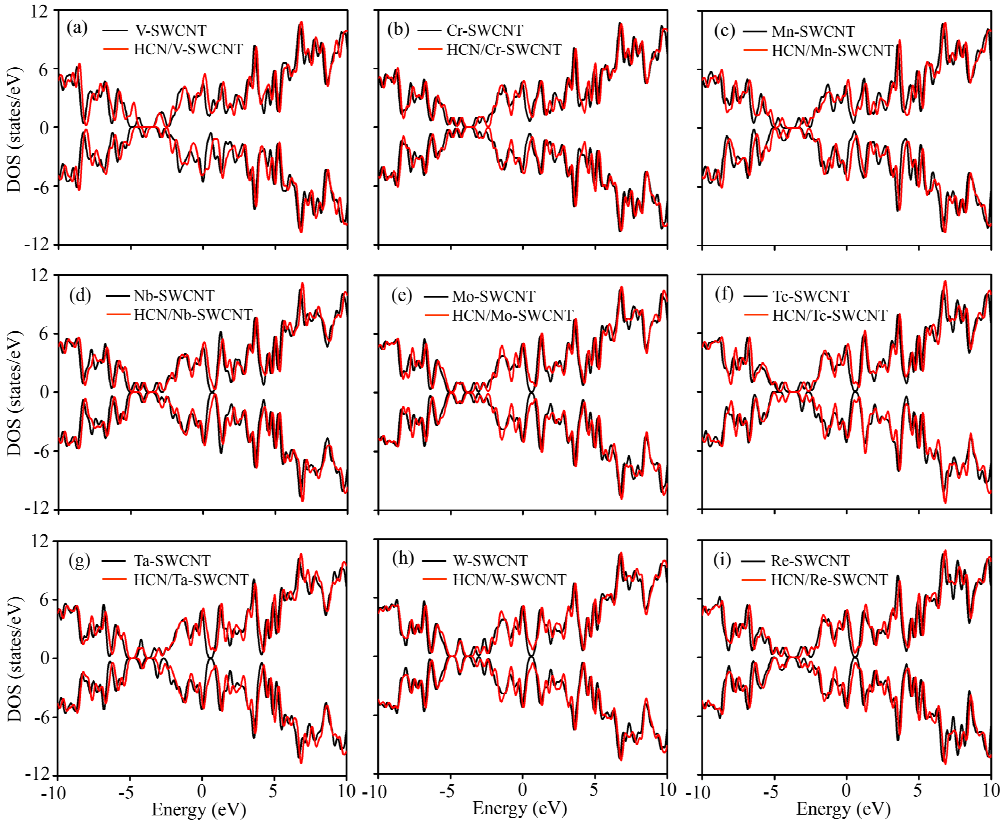


ภาพที่ 4.39 การพล็อตการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของการดูดซับแก๊สไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอน (a) HCN/V-SWCNT, (b) HCN/Cr-SWCNT, (c) HCN/Mn-SWCNT, (d) HCN/Nb-SWCNT, (e) HCN/Mo-SWCNT, (f) HCN/Tc-SWCNT, (g) HCN/Nb-SWCNT, (h) HCN/Mo-SWCNT และ (i) HCN/Tc-SWCNT

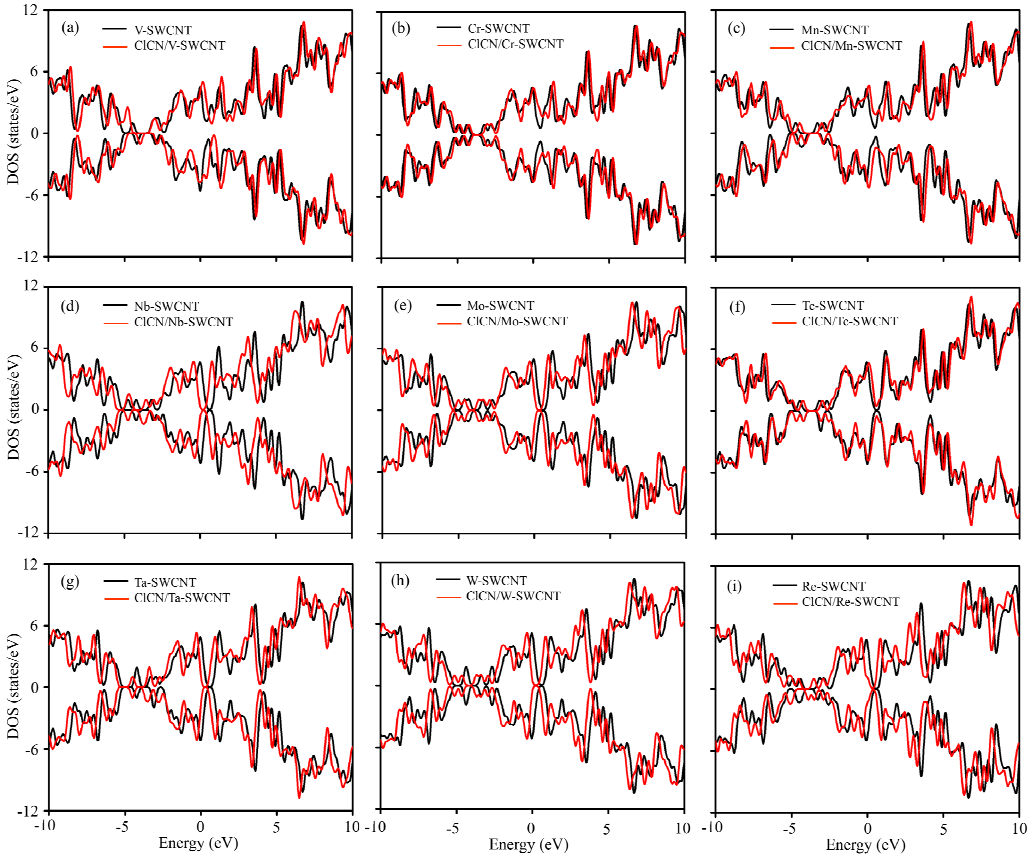
ได้ทำการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของความหนาแน่นสถานะของโครงสร้างก่อนและหลังดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ดังภาพที่ 4.40-4.42 จากภาพ แสดงให้เห็นว่าการดูดซับแก๊สทั้งสองชนิดทำให้ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมเกิดการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อย ในขณะที่การดูวับแก๊สทั้งสองชนิดบนท่อนาโนคาร์บอนแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันพบว่าความหนาแน่นสถานะจะเลื่อนจากตำแหน่งเดิมอย่างชัดเจนทุกช่วงพลังงาน ดังนั้นจึงสามารถอธิบายได้ว่าการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์มีผลต่อความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ซึ่งสอดคล้องกับการศึกษาการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน ดังนั้นจึงสามารถสรุปได้ว่าท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันสามารถพัฒนาเป็นตัวตรวจจับแก๊สได้



ภาพที่ 4.40 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม



ภาพที่ 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



ภาพที่ 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