บทที่ 5
สรุปผลการดำเนินวิจัย

ในงานวิจัยนี้ได้ศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงานและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนีย ไนโตรเจนไดออกไซด์ คาร์บอนไดออกไซด์ คาร์บอนิลซัลไฟด์ ไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ ของทฤษฎี จากผลการคำนวณสามารถสรุปข้อๆ ได้ดังนี้

5.1 สมบัติทางโครงสร้าง

จากการศึกษาสมบัติทางโครงสร้างในเทอมของความยาวพันธะและมุมพันธะของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งที่มีการดูดซับแก๊ส พบว่าการดูดซับแก๊สทำให้ความยาวพันธะตรงตำแหน่งที่มีการดูดซับแก๊สยาวขึ้นและมุมพันธะตรงตำแหน่งที่มีการดูดซับแก๊สจะแคบลง เนื่องจากเกิดอันตรกิริยาระหว่างแก๊สและท่อนาโนคาร์บอน จากการศึกษาระยะดูดซับระหว่างแก๊สและท่อนาโนคาร์บอน พบว่าการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมระยะดูดซับจะมีค่ามากกว่า 3 อังสตรอม ในขณะที่ระยะดูดซับของการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันจะอยู่ในช่วง 1-3 อังสตรอม แสดงให้เห็นว่าการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันเกิดอันตรกิริยาที่แข็งแรงกว่าการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม ซึ่งระยะดูดซับอยู่ในช่วงนี้ถือว่าเป็นการดูดซับด้วยแรงแวนเดอร์วาล์ว และการศึกษาสมบัติทางโครงสร้างในเทอมขอความยาวพันธะระหว่างอะตอมของแก๊สที่ดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอน พบว่าความยาวพันธะระหว่างอะตอมของโมเลกุลแก๊สอยู่ในระยะที่เหมาะสม แก๊สไม่มีการแตกตัวกลายเป็นอะตอม

5.2 สมบัติทางพลังงานและความสามารถในการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอน

จากการศึกษาสมบัติทางพลังงานของการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมเปรียบเทียบกับท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พบว่าการเติมโลหะแทรนซิชันช่วยปรับปรุงความสามารถในการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนอย่างชัดเจน จากการศึกษาความสามารถในการดูดซับแก๊สแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโครเมียม โมลิบดินัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนิเชียมและเรเนียม พบว่าแก๊สไนโตรเจนออกไซด์ดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันได้ดีกว่าแก๊สแอมโมเนีย โดยท่อที่มีการเติมทังสเตนสามารถดูดซับไนโตรเจนไดออกไซด์ได้ดีที่สุด มีค่าพลังงานการดูดซับเท่ากับ -119.93 กิโลแคลอรีต่อโมล จากการศึกษาการดูดซับคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะสแกนเดียม ไทเทเนียม โครเมียมและแมงกานีส พบว่าแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์ดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนได้ดีกว่าแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ ยกเว้นการดูดซับบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแมงกานีส นอกจากนี้ยังพบว่าการดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์โดยชี้อะตอมของซัลเฟอร์เข้าหาท่อความสามารถในการดูดซับจะสูงกว่าการชี้อะตอมของออกซิเจนเข้าหาท่อ โดยท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติม

สแกนเดียมจะสามารถดูดซับแก๊สคาร์บอนิลซัลไฟด์ได้ดีที่สุด มีค่าพลังงานการดูดซับเท่ากับ -75.35 กิโลแคลอรี และการศึกษาการดูดซับไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะวาเนดียม โครเมียม แมงกานีส ไนโอเบียม โมลิบดินัม เทคนิเชียม แทนทาลัม ทังสเตนและเรเนียม พบว่าความสามารถในการดูดซับแก๊สขึ้นอยู่กับชนิดของแก๊สและโลหะที่เติมบนท่อนาโนคาร์บอน โดยพบว่าท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมแทนทาลัมดูดซับแก๊สทั้งสองชนิดได้ดีที่สุด

5.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์

ได้ทำการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันที่มีการดูดซับแก๊สในเทอมของพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุ การพล็อตการกระจายตัวของออร์บิทัลที่มีพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และการกระจายตัวของออร์บิทัลที่มีพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และความหนาแน่นสถานะ พบว่าการดูดซับแก๊สทำให้พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนาโนคาร์บอนเกิดการเลื่อนจากตำแหน่ง การดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันทำให้แถบพลังงานของท่อนาโนคาร์บอนเปลี่ยนแปลงจากเดิมและชัดเจนกว่าท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม การวิเคราะห์การถ่ายโอนประจุพบว่าเกิดการถ่ายโอนประจุระหว่างแก๊สและท่อนาโนคาร์บอน โดยท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันจะเกิดแลกเปลี่ยนประจุกับแก๊สมากกว่าท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิม การศึกษาการกระจายตัวของออร์บิทัลที่มีพลังงานสูงที่สุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และการกระจายของออร์บิทัลที่มีพลังงานต่ำที่สุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่พบว่าการดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ อิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่รอบๆ ท่อนาโนคาร์บอน ไม่มีการเคลื่อนที่ไปยังแก๊ส ในขณะที่การดูดซับแก๊สบนท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันพบว่าอิเล็กตรอนส่วนใหญ่เคลื่อนที่ตรงบริเวณที่มีการเติมโลหะและบริเวณแก๊ส การศึกษาแถบพลังงานพบว่าการดูดซับแก๊สทำให้แถบพลังงานของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันเกิดการเลื่อนตำแหน่งและเลื่อนชัดเจนกว่าท่อนาโนคาร์บอนแบบปกติ

จากการศึกษาสมบัติทางโครงสร้างอธิบายได้ว่าการเติมโลหะแทรนซิชันทำให้เกิดโครงสร้างที่เหมาะสมเนื่องจากโครงสร้างจะมีลักษณะนูนขึ้น ซึ่งเป็นการเพิ่มพื้นที่ผิวในการดูดซับและเกิดการดูดซับในระยะที่เหมาะสมโดยเป็นการดูดซับด้วยแรงแวนเดอร์วาล์ว สมบัติทางพลังงานแสดงให้เห็นว่าการเติมโลหะแทรนซิชันช่วยปรับปรุงความสามารถในการดูดซับแก๊สอย่างชัดเจนและเป็นการดูดซับแบบคายพลังงาน สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์แสดงให้เห็นการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอน การเกิดอันตรกิริยาระหว่างแก๊สและท่อนาโนคาร์บอน รวมถึงการปรับเปลี่ยนสมบัติทางไฟฟ้าของท่อนาโนคาร์บอน ดังนั้นงานวิจัยชิ้นนี้จึงสามารถสรุปได้ว่าท่อนาโนคาร์บอนเหมาะสำหรับการพัฒนาเป็นวัสดุสำหรับกักเก็บและตรวจจับแก๊สทั้ง 6 ชนิดได้

5.4 ข้อเสนอแนะ

ควรศึกษาการดูดซับแก๊สบนวัสดุชนิดอื่นเพื่อเปรียบเทียบความสามารถในการดูดซับและเติมอะตอมของธาตุชนิดอื่นบนท่อนาโนคาร์บอนเพื่อเปรียบเทียบความสามารถในการดูดซับแก๊ส