# ภาคผนวก

**ตารางที่ ก-1** การคำนวณพลังงานการดูดซับ ($E_{ads}$) ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

| ระบบ | พลังงานของท่อนาโนคาร์บอน | พลังงานของแก๊ส | พลังงานของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการดูดซับแก๊ส | $E_{ads}$ (amu.) | $E_{ads}$ (kcal/mol) |
|---|---|---|---|---|---|
| $NH_3$/SWCNT | -3441.15665 | -56.54827978 | -3497.705241 | -0.000311146 | -0.195247101 |
| $NH_3$/Cr-SWCNT | -3489.207392 | -56.54827978 | -3545.814895 | -0.0592225 | -37.16271461 |
| $NH_3$/Mo-SWCNT | -3470.462157 | -56.54827978 | -3527.060696 | -0.0502599 | -31.53858094 |
| $NH_3$/W-SWCNT | -3470.740801 | -56.54827978 | -3527.349832 | -0.060751 | -38.12188247 |
| $NH_3$/Mn-SWCNT | -3506.855673 | -56.54827978 | -3563.45237 | -0.0484168 | -30.38201726 |
| $H_2$/Tc-SWCNT | -3483.037301 | -56.54827978 | -3539.634267 | -0.0486865 | -30.55129436 |
| $NH_3$/Re-SWCNT | -3482.049607 | -56.54827978 | -3538.657333 | -0.0594462 | -37.30305723 |
| $NO_2$/SWCNT | -3441.15665 | -204.9899174 | -3646.199577 | -0.053009907 | -33.26424674 |
| $NO_2$/Cr-SWCNT | -3489.207392 | -204.9899174 | -3694.331334 | -0.1340237 | -84.10124148 |
| $NO_2$/Mo-SWCNT | -3470.462157 | -204.9899174 | -3675.616536 | -0.1644617 | -103.2013658 |
| $NO_2$/W-SWCNT | -3470.740801 | -204.9899174 | -3675.9218467 | -0.191128097 | -119.9347921 |
| $NO_2$/Mn-SWCNT | -3506.855673 | -204.9899174 | -3711.960184 | -0.1145932 | -71.90835195 |
| $NO_2$/Tc-SWCNT | -3483.037301 | -204.9899174 | -3688.150756 | -0.1235381 | -77.52138497 |
| $NO_2$/Re-SWCNT | -3482.049607 | -204.9899174 | -3687.191494 | -0.1519689 | -95.36200256 |

**ตารางที่ ก-2** การคำนวณพลังงานการดูดซับของการดูดซับคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

| ระบบ | พลังงานของท่อนาโนคาร์บอน | พลังงานของแก๊ส | พลังงานของท่อนาโนคาร์บอนที่มีการดูดซับแก๊ส | $E_{ads}$ (amu.) | $E_{ads}$ (kcal/mol) |
|---|---|---|---|---|---|
| $CO_2$/SWCNT | -3629.697463 | -3441.156650 | -188.5274391 | -0.013374416 | -8.392579784 |
| $CO_2$/Sc-SWCNT | -3637.994174 | -3449.432446 | -188.5401192 | -0.021608842 | -13.55976444 |
| $CO_2$/Ti-SWCNT | -3649.614278 | -3461.048954 | -188.5401192 | -0.025205012 | -15.81639708 |
| $CO_2$/Cr-SWCNT | -3677.771733 | -3489.207392 | -188.5401192 | -0.024221122 | -15.19899627 |
| $CO_2$/Mn-SWCNT | -3695.417897 | -3506.846694 | -188.5274391 | -0.043763896 | -27.46228238 |
| COS/SWCNT | -3612.643066 | -3489.199277 | -123.4107739 | -0.033015402 | -20.71749491 |
| COS/Sc-SWCNT | -3630.288261 | -3506.846694 | -123.4107739 | -0.030793042 | -19.32294179 |
| COS/Ti-SWCNT | -3584.510032 | -3461.048954 | -123.4107739 | -0.050304442 | -31.56654040 |
| COS/Cr-SWCNT | -3612.640662 | -3489.199277 | -123.4107739 | -0.030611202 | -19.20883537 |
| COS/Mn-SWCNT | -3630.291208 | -3506.846694 | -123.4107739 | -0.033740422 | -21.17245221 |
| COS/SWCNT | -3564.574603 | -3441.156650 | -123.4107739 | -0.007179012 | -4.504901820 |
| COS/Sc-SWCNT | -3572.843552 | -3449.327565 | -123.4107739 | -0.105213562 | -66.02256229 |
| COS/Ti-SWCNT | -3584.495682 | -3461.048954 | -123.4187856 | -0.027943033 | -17.53453264 |
| COS/Cr-SWCNT | -3564.575241 | -3441.156650 | -123.4107739 | -0.007816672 | -4.905039847 |
| COS/Mn-SWCNT | -3572.858416 | -3449.327565 | -123.4107739 | -0.120077302 | -75.34970778 |

**ตารางที่ ก-3** การคำนวณพลังงานการดูดซับของการดูดซับไฮโดรเจนไซยาไนด์และไซยาโนเจนคลอไรด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและท่อนาโนคาร์บอนที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

| ระบบ | พลังงานของท่อนาโนคาร์บอน | พลังงานของแก๊ส | พลังงานของท่อนาโนซิคาร์บอนที่มีการดูดซับแก๊ส | $E_{ads}$ (amu.) | $E_{ads}$ (kcal/mol) |
|---|---|---|---|---|---|
| HCN/SWCNT | -3441.156949 | -93.40137458 | -3534.559125 | -0.000801293 | -0.502819433 |
| HCN/V-SWCNT | -3474.276835 | -93.40137458 | -3567.734705 | -0.056496033 | -35.45182573 |
| HCN/Cr-SWCNT | -3489.207392 | -93.40137458 | -3582.662121 | -0.053354113 | -33.48023951 |
| HCN/Mn-SWCNT | -3506.855673 | -93.40137458 | -3600.306958 | -0.049909473 | -31.31869347 |
| HCN/Nb-SiCNT | -3459.267232 | -93.40137458 | -3552.713356 | -0.044749543 | -28.08078579 |
| HCN/Mo-SWCNT | -3470.462157 | -93.40137458 | -3563.911783 | -0.048251953 | -30.27858309 |
| HCN/Tc-SWCNT | -3483.037301 | -93.40137458 | -3576.482992 | -0.044316313 | -27.80892963 |
| HCN/Ta-SWCNT | -3460.750181 | -93.40137458 | -3554.222628 | -0.071072843 | -44.59891977 |
| HCN/W-SiCNT | -3470.740801 | -93.40137458 | -3564.206688 | -0.064512133 | -40.48200864 |
| HCN/Re-SWCNT | -3482.049606 | -93.40137458 | -3575.507868 | -0.056887303 | -35.69735157 |
| ClCN/SWCNT | -3441.1569 | -107.722 | -3548.879302 | -0.000753 | -0.472329287 |
| ClCN/V-SWCNT | -3474.2768 | -107.722 | -3582.051033 | -0.052597 | -33.00545346 |
| ClCN/Cr-SWCNT | -3489.2074 | -107.722 | -3596.977914 | -0.048921 | -30.69838157 |
| ClCN/Mn-SWCNT | -3506.8557 | -107.722 | -3614.623165 | -0.045892 | -28.79743415 |
| ClCN/Nb-SiCNT | -3459.2672 | -107.722 | -3567.041431 | -0.052598 | -33.00595547 |
| ClCN/Mo-SWCNT | -3470.4622 | -107.722 | -3578.233784 | -0.050027 | -31.39248293 |
| ClCN/Tc-SWCNT | -3483.0373 | -107.722 | -3590.798793 | -0.039892 | -25.03239925 |
| ClCN/Ta-SWCNT | -3460.7502 | -107.722 | -3568.566508 | -0.094727 | -59.4421109 |
| ClCN/W-SiCNT | -3470.7408 | -107.722 | -3578.541271 | -0.07887 | -49.49158443 |
| ClCN/Re-SWCNT | -3482.0496 | -107.722 | -3589.830743 | -0.059536 | -37.35955082 |

**ตารางที่ ก-4** การคำนวณพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ($E_{HOMO}$) พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ($E_{LUMO}$) แถบพลังงาน ($E_{gap}$) ของการดูดซับของแก๊สแอมโมเนียและไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

| ระบบ | $E_{HOMO}$ (a.u.) | $E_{LUMO}$ (a.u.) | $E_{HOMO}$ (eV) | $E_{LUMO}$ (eV) | $E_{gap}$ (eV) |
|---|---|---|---|---|---|
| SWCNT | -0.162 | -0.121 | -4.408340 | -3.292650 | 1.115692 |
| Cr-SWCNT | -0.160 | -0.118 | -4.353920 | -3.211039 | 1.142880 |
| Mo-SWCNT | -0.158 | -0.124 | -4.299501 | -3.374290 | 0.925208 |
| W-SWCNT | -0.158 | -0.123 | -4.299496 | -3.347076 | 0.952420 |
| Mn-SWCNT | -0.174 | -0.121 | -4.734890 | -3.292650 | 1.442236 |
| | -0.155 | -0.104 | -4.217860 | -2.830048 | 1.387812 |
| Tc-SWCNT | -0.164 | -0.116 | -4.462768 | -3.156592 | 1.306176 |
| | -0.159 | -0.119 | -4.326708 | -3.238228 | 1.088480 |
| Re-SWCNT | -0.162 | -0.116 | -4.408344 | -3.156592 | 1.251752 |
| | -0.160 | -0.120 | -4.353920 | -3.265440 | 1.088480 |
| $NH_3$/SWCNT | -0.161 | -0.120 | -4.381132 | -3.26544 | 1.115692 |
| $NH_3$/Cr-SWCNT | -0.151 | -0.111 | -4.109012 | -3.020532 | 1.088480 |
| $NH_3$/Mo-SWCNT | -0.149 | -0.114 | -4.054588 | -3.102168 | 0.952420 |
| $NH_3$/W-SWCNT | -0.149 | -0.113 | -4.054590 | -3.074960 | 0.979632 |
| $NH_3$/Mn-SWCNT | -0.161 | -0.108 | -4.381132 | -2.938896 | 1.442236 |
| | -0.146 | -0.103 | -3.972952 | -2.802836 | 1.170116 |
| $NH_3$/Tc-SWCNT | -0.152 | -0.106 | -4.136224 | -2.884472 | 1.251752 |
| | -0.152 | -0.110 | -4.136224 | -2.993320 | 1.142904 |
| $NH_3$/Re-SWCNT | -0.150 | -0.104 | -4.081801 | -2.830048 | 1.251752 |
| | -0.152 | -0.110 | -4.136224 | -2.993320 | 1.142904 |
| $NO_2$/SWCNT | -0.166 | -0.127 | -4.517192 | -3.455924 | 1.061268 |
| | -0.167 | -0.139 | -4.544404 | -3.782468 | 0.761936 |
| $NO_2$/Cr-SWCNT | -0.201 | -0.150 | -5.469612 | -4.081801 | 1.387812 |
| | -0.162 | -0.124 | -4.408344 | -3.374288 | 1.034056 |
| $NO_2$/Mo-SWCNT | -0.191 | -0.141 | -5.197492 | -3.836892 | 1.360601 |
| | -0.165 | -0.126 | -4.474965 | -3.428712 | 1.046253 |
| $NO_2$/W-SWCNT | -0.192 | -0.137 | -5.224704 | -3.728044 | 1.496660 |
| | -0.186 | -0.136 | -5.061432 | -3.700832 | 1.360601 |
| $NO_2$/Mn-SWCNT | -0.185 | -0.134 | -5.03422 | -3.646408 | 1.387812 |
| $NO_2$/Tc-SWCNT | -0.175 | -0.137 | -4.7621 | -3.728044 | 1.034056 |
| $NO_2$/Re-SWCNT | -0.171 | -0.137 | -4.653252 | -3.728044 | 0.925208 |

หมายเหตุ เปลี่ยนหน่วยเป็นอิเล็กตรอนโวลต์ (eV) คูณ 27.212

**ตารางที่ ก-5** การคำนวณ $E_{HOMO}$, $E_{LUMO}$, $E_{gap}$ ของการดูดซับของแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และคาร์บอนิลซัลไฟด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

| ระบบ | $E_{HOMO}$ | $E_{HOMO}$ | $E_{LUMO}$ | $E_{LUMO}$ | $E_{gap}$ (a.u.) |
|---|---|---|---|---|---|
| $CO_2$/SWCNT | -0.161 | -0.120 | -4.381 | -3.265 | 1.116 |
| $CO_2$/Sc-SWCNT | -0.143 | -0.100 | -3.891(***α***-spin) | -2.721(***α***-spin) | 1.170 |
| | -0.173 | -0.111 | -4.707(***β***-spin) | -3.020(***β***-spin) | 1.687 |
| $CO_2$/Ti-SWCNT | -0.148 | -0.108 | -4.027 | -2.938 | 1.088 |
| $CO_2$/Cr-SWCNT | -0.157 | -0.114 | -4.272 | -3.102 | 1.170 |
| $CO_2$/Mn-SWCNT | -0.168 | -0.114 | -4.572(***α***-spin) | -3.102(***α***-spin) | 1.469 |
| | -0.153 | -0.109 | -4.163(***β***-spin) | -2.966(***β***-spin) | 1.973 |
| COS/SWCNT | -0.161 | -0.119 | -4.381 | -3.238 | 1.143 |
| COS/Sc-SWCNT | -0.143 | -0.115 | -3.891(***α***-spin) | -3.129(***α***-spin) | 0.761 |
| | -0.173 | -0.114 | -4.708(***β***-spin) | -3.102(***β***-spin) | 1.605 |
| COS/Ti-SWCNT | -0.148 | -0.114 | -4.027 | -3.102 | 0.925 |
| COS/Cr-SWCNT | -0.157 | -0.115 | -4.272 | -3.129 | 1.143 |
| COS/Mn-SWCNT | -0.167 | -0.113 | -4.544(***α***-spin) | -3.074(***α***-spin) | 1.469 |
| | -0.152 | -0.109 | -4.136(***β***-spin) | -2.966(***β***-spin) | 1.170 |
| COS/SWCNT | -0.162 | -0.121 | -4.408 | -3.293 | 1.116 |
| COS/Sc-SWCNT | -0.146 | -0.104 | -3.973(***α***-spin) | -2.830(***α***-spin) | 1.143 |
| | -0.177 | -0.114 | -4.817(***β***-spin) | -3.102(***β***-spin) | 1.714 |
| COS/Ti-SWCNT | -0.184 | -0.134 | -5.007 | -3.646 | 1.360 |
| COS/Cr-SWCNT | -0.172 | -0.132 | -4.680 | -3.592 | 1.088 |
| COS/Mn-SWCNT | -0.170 | -0.166 | -4.626(***α***-spin) | -4.517(***α***-spin) | 0.108 |
| | -0.155 | -0.111 | -4.218(***β***-spin) | -3.021(***β***-spin) | 1.197 |

**ตารางที่ ก-6** การคำนวณค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วน (PCT) ของการดูดซับแก๊สแอมโมเนียบนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

| ระบบ | $NH_3$ | | | | PCT |
|---|---|---|---|---|---|
| | H1 | H2 | H3 | N | (e) |
| $NH_3$/SWCNT | 0.397 | 0.397 | 0.397 | 0.185 | 1.006 |
| $NH_3$/Cr-SWCNT | 0.429 | 0.429 | 0.441 | -1.053 | 0.246 |
| $NH_3$/Mo-SWCNT | 0.438 | 0.426 | 0.426 | -0.077 | 1.213 |
| $NH_3$/W-SWCNT | 0.43 | 0.446 | 0.43 | -1.075 | 0.231 |
| $NH_3$/Mn-SWCNT | 0.431 | 0.431 | 0.442 | -1.091 | 0.213 |
| $NH_3$/Tc-SWCNT | 0.428 | 0.428 | 0.438 | -1.077 | 0.217 |
| $NH_3$/Re-SWCNT | 0.446 | 0.435 | 0.435 | -1.071 | 0.245 |

**ตารางที่ ก-7** การคำนวณค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

| ระบบ | $NO_2$ | | | PCT |
|---|---|---|---|---|
| | O1 | O2 | N | (e) |
| $NO_2$/SWCNT | -0.314 | -0.316 | 0.401 | -0.229 |
| $NO_2$/Cr-SWCNT | -0.308 | -0.436 | 0.315 | -0.429 |
| $NO_2$/Mo-SWCNT | -0.378 | -0.387 | 0.297 | -0.468 |
| $NO_2$/W-SWCNT | -0.250 | -0.503 | 0.010 | -0.743 |
| $NO_2$/Mn-SWCNT | -0.401 | -0.360 | 0.380 | -0.381 |
| $NO_2$/Tc-SWCNT | -0.383 | -0.392 | 0.335 | -0.440 |
| $NO_2$/Re-SWCNT | -0.290 | -0.406 | 0.311 | -0.385 |

**ตารางที่ ก-8** การคำนวณค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับแก๊สไนโตรเจนไดออกไซด์บนท่อนาโนคาร์บอนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

| ระบบ | อะตอม | | | PCT |
|---|---|---|---|---|
| | H หรือ Cl | C | N | (e) |
| HCN/SWCNT | 0.104 | 0.234 | -0.335 | 0.001 |
| HCN/V-SWCNT | 0.246 | 0.322 | -0.385 | 0.183 |
| HCN/Cr-SWCNT | 0.237 | 0.264 | -0.344 | 0.157 |
| HCN/Mn-SWCNT | 0.237 | 0.273 | -0.372 | 0.138 |
| HCN/Nb-SWCNT | 0.241 | 0.272 | -0.435 | 0.078 |
| HCN/Mo-SWCNT | 0.237 | 0.250 | -0.402 | 0.085 |
| HCN/Tc-SWCNT | 0.237 | 0.260 | -0.390 | 0.107 |
| HCN/Ta-SWCNT | 0.239 | 0.251 | -0.49 | 0.000 |
| HCN/W-SWCNT | 0.237 | 0.23 | -0.45 | 0.017 |
| HCN/Re-SWCNT | 0.239 | 0.257 | -0.41 | 0.086 |
| ClCN/SWCNT | 0.104 | 0.234 | -0.336 | 0.002 |
| ClCN/V-SWCNT | 0.175 | 0.387 | -0.386 | 0.176 |
| ClCN/Cr-SWCNT | 0.151 | 0.353 | -0.346 | 0.158 |
| ClCN/Mn-SWCNT | 0.152 | 0.359 | -0.371 | 0.140 |
| ClCN/Nb-SWCNT | -0.280 | 0.275 | -0.273 | -0.278 |
| ClCN/Mo-SWCNT | -0.114 | 0.274 | -0.563 | -0.403 |
| ClCN/Tc-SWCNT | 0.146 | 0.351 | -0.389 | 0.108 |
| ClCN/Ta-SWCNT | -0.157 | 0.386 | -0.746 | -0.517 |
| ClCN/W-SWCNT | -0.179 | 0.275 | -0.659 | -0.563 |
| ClCN/Re-SWCNT | -0.144 | 0.274 | -0.594 | -0.464 |