

Mr. 126344

การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอฟทีของการดูดซับอนุพันธ์ของเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแตรนซิชัน



นายภาสกร แสงนิกุล

มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร  
ปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาเคมีศึกษา  
มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
พ.ศ. 2563

สงวนลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม





ใบอนุญาตวิทยานิพนธ์  
มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม

เรื่อง : การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอพีของการดูดซับอนุพันธ์ของเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์  
และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ผู้วิจัย : นายภาสกร แสงนิกุล


ได้รับอนุมัติเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร ปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต  
สาขาวิชาเคมีศึกษา

  
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.มานิตย์ อัญญะโพธิ์)  
คณบดีคณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี

  
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ไพศาล วรรณคำ)  
คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย


คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

  
ประธานกรรมการ  
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.บรรจบ วันโน)

  
กรรมการ  
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.พิชราภรณ์ พิมพ์จันทร์)

  
กรรมการ  
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ไพศาล วรรณคำ)

  
กรรมการ  
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.มานุกรณ์ ทับทิมใส)

  
กรรมการ  
(อาจารย์ ดร.วันดี รักไร่)

ชื่อเรื่อง : การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอฟท์ของการดูดซับอนุพันธ์ของเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ผู้วิจัย : นายภาสกร แสงนิกุล

ปริญญา : วิทยาศาสตร์มหาบัณฑิต (สาขาวิชาเคมีศึกษา)  
มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม

อาจารย์ที่ปรึกษา : ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ภาณุกรณ์ ทับทิมใส  
อาจารย์ ดร. วันดี รักไร่

ปีการศึกษา : 2562

### บทคัดย่อ

การคำนวณโดยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ ถูกนำมาใช้ในการศึกษาพฤติกรรมการดูดซับอนุพันธ์ของเบนซีน (ไนโตรเบนซีน โทลูอินและอนิซีน) บนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (SiCNS) ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (SiCNT) และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (วานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสแตน แมงกานีส เทกนีสเซียม และรีเนียม) ตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน โดยศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงาน และสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ เพื่อใช้อธิบายพฤติกรรมการดูดซับของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน จากการศึกษาพบว่าโครงสร้างที่เสถียรของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีการเปลี่ยนแปลงหลังการดูดซับอนุพันธ์เบนซีนทั้งสามชนิด จากค่าพลังงานการดูดซับพบว่าแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีความว่องไวต่อโมเลกุลอนุพันธ์ของเบนซีนทั้งสามที่ต่ำและไม่เหมาะสมต่อการนำมาดูดซับ ในทางตรงกันข้ามการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแทนทาลัมตรงตำแหน่งคาร์บอนแสดงถึงค่าพลังงานดูดซับได้ดีที่สุด การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมทังสแตนตรงตำแหน่งคาร์บอนแสดงถึงค่าพลังงานดูดซับได้ดีที่สุด แสดงให้เห็นว่าการเติมโลหะแทรนซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์สามารถปรับปรุงความสามารถในการดูดซับ

อนุพันธ์เบนซีนได้ นอกจากนี้พบว่าหลังจากการดูดซับอนุพันธ์เบนซีนเกิดการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันจึงเหมาะที่จะนำไปใช้ประยุกต์และเป็นแนวทางในการพัฒนาเซนเซอร์ในการตรวจจับหรือกักเก็บสารอนุพันธ์ของเบนซีนได้

คำสำคัญ : การเติมโลหะแทรนซิชัน ดีเอฟที ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ อนุพันธ์ของเบนซีน



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก

**Title** : DFT investigation of benzene derivative adsorptions on silicon carbide nanosheet and silicon carbide nanotube doping with transition metals

**Author** : Mr. Pasakorn Sangnikul

**Degree** : M.Sc. (Chemistry Education)  
Rajabhat Maha Sarakham University

**Advisors** : Assistance Professor Dr. Chanukorn Tabtimsai  
Dr. Wandee Rakrai

**Year** : 2019

## ABSTRACT

The calculation by using DFT at B3LYP/LanL2dZ level of theory was investigated for benzene derivative (nitrobenzene, toluene, and aniline) adsorptions on silicon carbide nanosheet (SiCNS) and silicon carbide nanotube (SiCNT) doping with transition metals (V, Nb, Ta, Cr, Mo, W, Mn, Tc, and Re). Additionally, the transition metals were doped on C and Si sites. The geometric, energetic, and electronic properties were analyzed for the explanation of benzene derivative adsorption behaviors on SiCNS and SiCNT. The results reveal that, the geometrical structures of pristine SiCNS, pristine SiCNT, TM-doped SiCNS, and TM-doped SiCNT were changed after the adsorptions. Obviously, the adsorption abilities of pristine SiCNS and SiCNT display low sensibility to benzene derivative molecules. In contrast, the adsorption energies of nitrobenzene/Ta<sub>C</sub>-SiCNS, nitrobenzene/Ta<sub>C</sub>-SiCNT, toluene/W<sub>C</sub>-SiCNS, and aniline/W<sub>C</sub>-SiCNT indicate that the adsorption abilities of TM-doped SiCNS and SiCNT are the most suitable and improved for benzene derivative adsorption. Moreover, the changes of electronic properties of TM-doped SiCNS and

SiCNT after adsorptions show highly sensibility to benzene derivative molecules. All of results indicate that the introducing of TM doping on SiCNS and SiCNT significantly improves the sensitivity toward benzene derivative molecules. Therefore, the results of our work may be useful in developing and designing new types of storage and sensor materials.

**Keywords :** Benzene Derivative, DFT, Silicon Carbide Nanosheet, Silicon Carbide Nanotube, Transition Metal Doping



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

A handwritten signature in black ink, consisting of several vertical and diagonal strokes, positioned above a horizontal line.

Major Advisor

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้ ได้รับทุนสถาบันส่งเสริมการสอนวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี (สสวท.)  
ที่ให้การสนับสนุนทุนวิจัย



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

## กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จสมบูรณ์ด้วยความกรุณาจาก ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ณาณุกร์ณ์ ทับทิมใส และอาจารย์ ดร. วันดี รักไร่ อาจารย์ผู้ควบคุมวิทยานิพนธ์ ซึ่งกรุณาให้คำปรึกษา คำแนะนำ ช่วยเหลือ และข้อคิดเห็นต่าง ๆ ตลอดจนแนวทางในการดำเนินวิจัย ด้วยดีตลอดมา ขอกราบพระคุณ เป็นอย่างสูง

ขอขอบพระคุณ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.บรรจบ วันโน อาจารย์ประจำภาคเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม ที่ให้ความเอื้อเฟื้อในส่วนหนึ่งของเครื่องมือที่ใช้ในงานวิจัย ติดตามความก้าวหน้าและข้อเสนอแนะ ทำให้วิทยานิพนธ์สมบูรณ์ยิ่งขึ้น

ขอขอบคุณสถาบันส่งเสริมการสอนวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี (สสวท.) ที่ให้สนับสนุนทุนวิจัย ขอขอบคุณคณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม ที่ให้การสนับสนุนการทำงานในทุก ๆ ด้าน โดยเฉพาะอย่างยิ่งอำนวยความสะดวกในการใช้เครื่องมือทดลองและวิเคราะห์ งานวิจัยนี้สามารถสำเร็จลุล่วงด้วยดี ขอขอบคุณผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. เนตรชนก จันทร์สว่าง อาจารย์ ดร. ธนชาติ อิ่มสมบัติ อาจารย์ ดร. ปณิตดา แทนสุโพธิ์ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. พัทธราภรณ์ พิมพ์จันทร์ ที่คอยถามไถ่และช่วยกระตุ้นให้ผู้วิจัยรักการทำงาน

ขอขอบคุณ นางสาวพรพรรณ ทานะ เพื่อนร่วมสาขาเพียงคนเดียวของข้าพเจ้า ที่คอยให้ กำลังใจ และแลกเปลี่ยนความคิดเห็นด้วยดีเสมอ

สุดท้ายนี้ขอขอบพระคุณ คุณพ่อทินกร แสงนิกุล คุณแม่มิ่งขวัญ แสงนิกุล ที่เป็นกำลังใจหลักของข้าพเจ้า และขอขอบคุณครอบครัวญาติพี่น้อง เพื่อน ๆ ที่คอยให้กำลังใจในการศึกษามาตลอด

นายภาสกร แสงนิกุล



## สารบัญ

หัวเรื่อง	หน้า
บทคัดย่อ.....	ค
ABSTRACT.....	จ
กิตติกรรมประกาศ.....	ช
สารบัญ.....	ฉ
สารบัญตาราง.....	ฎ
สารบัญภาพ.....	ฐ
บทที่ 1 บทนำ.....	1
1.1 ที่มาและความสำคัญของปัญหา .....	1
1.2 วัตถุประสงค์การวิจัย .....	3
1.3 ขอบเขตงานวิจัย .....	3
1.4 นิยามศัพท์เฉพาะ.....	4
1.5 ประโยชน์ที่ได้รับจากวิจัย .....	5
บทที่ 2 การทบทวนวรรณกรรม .....	6
2.1 กระบวนการดูดซับ .....	6
2.2 นาโนเทคโนโลยี.....	8
2.3 วัสดุนาโน.....	11
2.4 โลหะแทรนซิชัน.....	20
2.5 อนุพันธ์ของเบนซีน.....	22
2.6 เคมีคำนวณ (Computational chemistry).....	24
2.7 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง .....	28
บทที่ 3 วิธีดำเนินการวิจัย.....	40
3.1 เครื่องมือและโปรแกรมที่ใช้ในการทำวิจัย .....	40
3.2 แบบจำลองโมเลกุล .....	40
3.3 ขั้นตอนการคำนวณ .....	50
บทที่ 4 ผลและอภิปรายผล.....	54
4.1 สมบัติทางโครงสร้างของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน และหลังการการดูดซับไนโตรเบนซีน โพลูอิน และอนิลีน .....	54

หัวเรื่อง	หน้า
4.2 สมบัติทางพลังงานและความสามารถในการดูดซับไนโตรเจนซิน โทลูอิน และ อนิลีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ดั้งเดิม และที่มีการการเติมโลหะแทรนซิชัน.....	91
4.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับไนโตรเจนซิน โทลูอิน และอนิลีน.....	101
บทที่ 5 สรุปและข้อเสนอแนะ .....	148
5.1 สมบัติทางโครงสร้าง .....	148
5.2 สมบัติทางพลังงานและความสามารถในการดูดซับ.....	149
5.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์.....	151
5.4 ข้อเสนอแนะ.....	154
บรรณานุกรม .....	155
ภาคผนวก .....	161
ภาคผนวก ก การคำนวณพลังงาน.....	162
ภาคผนวก ข ตัวอย่างการใช้โปรแกรม และการอ่านผลที่ได้จากการคำนวณ สมบัติต่าง ๆ.....	167
ภาคผนวก ค ภาพการนำเสนอผลงาน .....	171
ประวัติผู้วิจัย .....	174

## สารบัญตาราง

ตารางที่		หน้า
2.1	การดูดซับทางกายภาพและทางเคมี.....	8
2.2	การพัฒนาการของนาโนเทคโนโลยีจากอดีตถึงปัจจุบัน.....	10
2.3	สมบัติทั่วไปของซิลิกอนคาร์ไบด์.....	14
2.4	การเปรียบเทียบคุณสมบัติของวัสดุท่อนาโน.....	19
4.1	ความยาวพันธะ และมุมพันธะ ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน.....	59
4.2	ความยาวพันธะ และมุมพันธะ ของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน.....	55
4.3	ความยาวพันธะ และมุมพันธะ ของการดูดซับไนโตรเจนขึ้นบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน.....	71
4.4	ความยาวพันธะ และมุมพันธะ ของการดูดซับไนโตรเจนขึ้นบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน.....	78
4.5	ความยาวพันธะ และมุมพันธะ ของการดูดซับโพลีอินขึ้นบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน.....	34
4.6	ความยาวพันธะ และมุมพันธะ ของการดูดซับอนิซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน.....	90
4.7	พลังงานการยึดจับ ระหว่างอะตอมโลหะแทรนซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์.....	92
4.8	พลังงานดูดซับของการดูดซับไนโตรเจนขึ้นบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่เติมโลหะแทรนซิชันบนตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน.....	94
4.9	พลังงานดูดซับของการดูดซับไนโตรเจนขึ้นบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่เติมโลหะแทรนซิชันบนตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน.....	96
4.10	พลังงานดูดซับของการดูดซับโพลีอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่เติมโลหะแทรนซิชันบนตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน.....	98
4.11	พลังงานดูดซับ ของการดูดซับอนิซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่เติมโลหะแทรนซิชันบนตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน.....	100

ตารางที่	หน้า
4.12 พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงานและประจุโลหะแทรนซิชันของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	103
4.13 พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน และประจุโลหะแทรนซิชันของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	106
4.14 พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วนและประจุโลหะแทรนซิชันของการดูดซับไนโตรเจนขึ้นบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	111
4.15 พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วนและประจุโลหะแทรนซิชันของการดูดซับไนโตรเจนขึ้นบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	112
4.16 พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงานการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วนและประจุโลหะของการดูดซับโกลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	116
4.17 พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วนและประจุโลหะของการดูดซับอนินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน .....	119

## สารบัญภาพ

ภาพที่	หน้า
2.1	กระบวนการแยกชั้นแกรฟีนจากแกรไฟต์..... 11
2.2	โครงสร้างซิลิกอนคาร์ไบด์..... 12
2.3	ชนิดของท่อนาโนคาร์บอน..... 15
2.4	ชนิดของท่อนาโนคาร์บอนในรูปแบบสามมิติ..... 16
2.5	ท่อนาโนคาร์บอนแบบหลายชั้น..... 17
2.6	การเปรียบเทียบความหนาของท่อนาโนคาร์บอน..... 17
2.7	การจัดเรียงโครงสร้างของแกรฟีนและซิลิกอนคาร์ไบด์..... 18
2.8	ชนิดของการจัดเรียงของซิลิกอนคาร์ไบด์..... 19
2.9	โครงสร้างของไนโตรเบนซีน..... 22
2.10	โครงสร้างของโทลูอีน..... 23
2.11	โครงสร้างของอนิลีน..... 23
2.12	การคำนวณประมาณค่าแถบพลังงานจาก HOMO - LUMO..... 26
2.13	ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมที่มีการดูดซับไฮโดรเจน... 27
2.14	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สฟอร์มัลดีไฮด์ทั้งสองทิศทาง แบบขนาน และแบบแนวตั้ง บนแผ่นโมลิบดีนัมซัลไฟด์ที่มีการเติมโลหะแทนที่ซิลิคอน..... 28
2.15	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์บนแผ่นแกรฟีน..... 29
2.16	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สออกซิเจนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน..... 30
2.17	โครงสร้างการดูดซับอะตอมของออกซิเจนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม..... 31
2.18	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สออกซิเจนบนท่อซิลิกอนคาร์ไบด์..... 32
2.19	ค่าความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์..... 32
2.20	การกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO ของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์..... 33
2.21	ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะออกซิเจน ก่อนและหลังการดูดซับออกซิเจน..... 34
2.22	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนบนท่อซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการต่ออะตอมโลหะ..... 35
2.23	โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับสารประกอบอินทรีย์ระเหยง่ายบนแผ่นแกรฟีนแบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัมแบบกลุ่มก้อน..... 36

ภาพที่	หน้า
2.24 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สพาราไนโตรฟินอลบนแผ่นแกรฟีนแบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัมแบบกลุ่มก้อน.....	37
2.25 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สทีซีดีเอฟบนแผ่นแกรฟีน.....	38
2.26 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สฟอร์มัลดีไฮด์ ไฮโดรเจนซัลไฟด์และไฮโดรเจนไซยาไนด์บนแผ่นนาโนแกรฟีนแบบที่มีการเติมด้วยโลหะแทรนซิชัน.....	39
3.1 แบบจำลองโครงสร้างของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม.....	41
3.2 แบบจำลองโครงสร้างการเติมโลหะแทรนซันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งคาร์บอน.....	41
3.3 แบบจำลองโครงสร้างการเติมโลหะแทรนซันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งซิลิกอน.....	42
3.4 แบบจำลองโครงสร้างของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม.....	43
3.5 แบบจำลองโครงสร้างการเติมโลหะแทรนซันบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งคาร์บอน.....	43
3.6 แบบจำลองโครงสร้างการเติมโลหะแทรนซันบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งซิลิกอน.....	43
3.7 แบบจำลองทางโครงสร้างของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม.....	44
3.8 แบบจำลองทางโครงสร้างของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม.....	45
3.9 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน.....	45
3.10 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน.....	46
3.11 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน.....	46
3.12 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน.....	47
3.13 แบบจำลองทางโครงสร้างของการดูดซับโพลีอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม.....	47

ภาพที่	หน้า
3.14 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะ แทรนซิซันตรงตำแหน่งคาร์บอน.....	48
3.15 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะ แทรนซิซันตรงตำแหน่งซิลิกอน.....	48
3.16 แบบจำลองทางโครงสร้างของการดูดซับอนิซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม...	49
3.17 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับโทลูอินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะ แทรนซิซันตรงตำแหน่งคาร์บอน.....	49
3.18 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับอนิซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะ แทรนซิซันตรงตำแหน่งซิลิกอนของวานาเดียม .....	50
4.1 โครงสร้างที่เสถียรของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม .....	57
4.2 โครงสร้างที่เสถียรของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิซันตรง ตำแหน่งคาร์บอน .....	57
4.3 โครงสร้างที่เสถียรของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิซันตรง ตำแหน่งซิลิกอน .....	58
4.4 โครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม .....	63
4.5 โครงสร้างที่เสถียรของแผ่นท่อนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิซันตรง ตำแหน่งคาร์บอน .....	63
4.6 โครงสร้างที่เสถียรของแผ่นท่อนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิซันตรง ตำแหน่งซิลิกอน .....	64
4.7 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม..	69
4.8 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติม โลหะแทรนซิซันตรงตำแหน่งคาร์บอน .....	69
4.9 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติม โลหะแทรนซิซันตรงตำแหน่งซิลิกอน .....	70
4.10 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ...	75
4.11 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติม โลหะแทรนซิซันตรงตำแหน่งคาร์บอน .....	76
4.12 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติม โลหะแทรนซิซันตรงตำแหน่งซิลิกอน .....	77







ภาพที่	หน้า
4.36 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับอนิสันบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน .....	136
4.37 ความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ก่อนและหลังดูดซับไนโตรเบนซีน.....	138
4.38 ความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน ก่อนและหลังดูดซับไนโตรเบนซีน.....	138
4.39 ความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน ก่อนและหลังดูดซับไนโตรเบนซีน.....	139
4.40 ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน ก่อนและหลังดูดซับไนโตรเบนซีน.....	140
4.41 ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน ก่อนและหลังดูดซับไนโตรเบนซีน.....	141
4.42 ความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ก่อนและหลังดูดซับโทลูอิน .....	142
4.43 ความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน ก่อนและหลังดูดซับโทลูอิน .....	143
4.44 ความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน ก่อนและหลังดูดซับโทลูอิน .....	144
4.45 ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ก่อนและหลังดูดซับอนิสัน.....	145
4.46 ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน ก่อนและหลังดูดซับอนิสัน.....	146
4.47 ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน ก่อนและหลังดูดซับอนิสัน.....	147

# บทที่ 1

## บทนำ

### 1.1 ที่มาและความสำคัญของปัญหา

อุตสาหกรรมเป็นตัวแปรหลักในการเคลื่อนเศรษฐกิจทั่วโลก ตั้งแต่อดีตจนถึงปัจจุบันได้มีอุตสาหกรรมหลากหลายด้านได้เกิดขึ้นและเติบโตอย่างรวดเร็ว การเติบโตของด้านอุตสาหกรรมได้มีการใช้สารเคมีภัณฑ์เป็นฐานในการสร้างเป็นผลิตภัณฑ์ บรรจุภัณฑ์ วัสดุอื่น ๆ ซึ่งสารอนุพันธ์เบนซีนก็ถือว่าเป็นสารประกอบประเภทหนึ่งที่ได้นำมาเป็นสารที่ใช้อย่างแพร่หลายในอุตสาหกรรมต่าง ๆ อาทิ อุตสาหกรรมซักฟอก สี สีย้อมผ้า หมึกพิมพ์ ยาฆ่าแมลง เชื้อเพลิง พลาสติก เป็นต้น สารอนุพันธ์ของวงเบนซีนถือได้ว่าเป็นสารอินทรีย์ประเภทหนึ่ง อาทิเช่น

ไนโตรเบนซีน อนิลีน โทลูอิน แนฟทาลีน ไซลีน สารประกอบเหล่านี้ถือว่าเป็นสารที่ให้โทษต่อร่างกายมนุษย์ หากได้รับเข้าสู่ร่างกายเกินกว่าค่ามาตรฐานที่กำหนดอาจทำให้เกิดแก๊งชีวิตหรือโรคร้ายต่าง ๆ ตามมา สารอนุพันธ์ของเบนซีนถือว่าเป็นสารที่มีความอันตรายอย่างมาก ประเทศไทยจึงได้จัดให้สารอนุพันธ์เบนซีนเป็นวัตถุอันตรายประเภทที่ 2 และ 3 ตามพระราชบัญญัติ

พ.ศ. 2535 เพื่อออกกฎหมายควบคุมสารประกอบเหล่านี้ อย่างไรก็ตามการควบคุมสารประกอบเหล่านี้ยังเป็นเรื่องที่ยากและยังมีการใช้โดยทั่วไปในครัวเรือน ดังนั้นหากมีเทคโนโลยีใหม่ ๆ ที่สามารถนำมาดูดซับ หรือเป็นเซนเซอร์ตรวจจับก็จะสามารถแก้ไขปัญหาการสัมผัสรับเข้าสู่ร่างกายของมนุษย์ได้เบื้องต้น เพื่อหลบหลีกและป้องกันได้ทันเวลา

ในปัจจุบันนาโนเทคโนโลยี (Nanotechnology) มีการพัฒนาและเติบโตอย่างรวดเร็วก่อให้เกิดการเปลี่ยนทางนวัตกรรมใหม่ ๆ เกิดประโยชน์อย่างมหาศาลต่อมวลมนุษยชาติ ในปี ค.ศ 1959 นักฟิสิกส์ ริชาร์ด ไฟน์แมน (Richard P. Feynman) ได้กล่าวถึงศักยภาพของสิ่งที่เล็กลงไปในวิชาฟิสิกส์ สิ่งที่จะก่อให้เกิดการปฏิวัติทางอุตสาหกรรม ปฏิวัติทางวิทยาศาสตร์ และความเป็นไปได้ต่าง ๆ ที่เกิดจากฟิสิกส์ในระดับเล็กมาก ๆ หลังจากนั้นอีก 22 ปีให้หลัง นักวิทยาศาสตร์ได้ประดิษฐ์กล้องจุลทรรศน์แบบส่องกราดทะลุผ่าน (Scanning Tunneling Microscope; STM) ซึ่งถูกเรียกว่านาโนเทคโนโลยีในปัจจุบัน (สวทช, 2015) นาโนเทคโนโลยีมีบทบาทสำคัญอย่างมากในด้านต่าง ๆ อาทิ เช่น ด้านอุตสาหกรรม ด้านการแพทย์ ด้านวิทยาศาสตร์ ด้านวิศวกรรมศาสตร์ ตัวอย่างการนำนาโนเทคโนโลยีมาประยุกต์ เช่น ด้านการแพทย์ ได้นำนาโนเทคโนโลยีมาพัฒนาเซนเซอร์การตรวจจับโรคไข้มาลาเรียโดยใช้ ฟลูออเรสเซนต์ควันตัมดอท (Fluorescent Quantum Dots) ในการวิเคราะห์

เซลล์เม็ดเลือดแดงในเนื้อเยื่อ เพื่อวินิจฉัยผู้ป่วยจากเชื้อมาลาเรียได้อย่างรวดเร็ว (Priya Shett, 2010) ด้านอุตสาหกรรมคอมพิวเตอร์ ที่มีการผลิตชิปประมวลผลขนาดนาโนเล็กถึง 7 นาโนเมตรที่มีประสิทธิภาพสูงและประหยัดพลังงาน (Etienne Sicard, 2017) ด้านวัสดุศาสตร์ เช่น วัสดุท่อคาร์บอน (Carbon nanotubes) ที่ใช้เป็นส่วนประกอบในเครื่องบินเพื่อลดน้ำหนักและเสริมความแข็งแรงทนทาน (ปิยนันท์ บุญประเสริฐ, 2011) อีกทั้งสามารถนำไปประยุกต์กับด้านอื่น ๆ ได้อีกมากมาย ไม่ว่าจะเป็นด้านวิศวกรรม ด้านวัสดุชีวภาพ หรือการพัฒนาเป็นเซนเซอร์ตรวจจับระดับนาโน เป็นต้น

มีรายงานการวิจัยและการศึกษาเชิงทฤษฎีมากมายที่ได้ศึกษา การดูดซับ อนุพันธ์ของเบนซีนหรือแก๊สอื่น ๆ บนวัสดุระดับนาโน เพื่อใช้เป็นเซนเซอร์ตรวจจับระดับนาโนหรือใช้ในการกักเก็บแก๊ส เช่น การดูดซับแก๊สไนโตรเจนบนแผ่นแกรฟีน (Dai & Zhao, 2014) การดูดซับสารอินทรีย์ระเหยบนแผ่นแกรฟีนที่เติมโลหะแทรนซิชัน (Kunaseth *et al.*, 2016) การดูดซับสารอินทรีย์ระเหยบนแผ่นแกรฟีนออกไซด์ (Yu & Wang, 2017) การศึกษาการดูดซับแก๊สโบรมีนบนวัสดุนาโน นิกเกิลไนไตรด์ โบรอนไนไตรด์ ท่อคาร์บอน และท่อซิลิกอนคาร์ไบด์ (Mohammadi & Hamzehloo, 2018) นอกเหนือจากการศึกษาการดูดซับแก๊สต่าง ๆ บนวัสดุนาโนแล้ว ยังมีงานวิจัยและการศึกษาชี้ให้เห็นว่าการเติมโลหะลงไปวัสดุดูดซับระดับ

นาโนสามารถเพิ่มประสิทธิภาพในการดูดซับแก๊สได้ (Yang *et al.*, 2019; Bakhshi & Farhadian, 2017; Amaya-Roncancio *et al.*, 2018; Sun & Hu, 2018) มีรายงานวิจัยเพิ่มเติมที่ได้ศึกษาวัสดุระดับนาโนแบบแผ่นและท่อที่ประกอบด้วยซิลิกอนและคาร์บอนเป็นองค์ประกอบที่เรียกว่าซิลิกอนคาร์ไบด์ (Silicon Carbide) เนื่องจากมีคุณสมบัติในการนำความร้อน ทนอุณหภูมิที่สูง เป็นสารกึ่งตัวนำไฟฟ้าและสามารถดูดซับแก๊สได้ดี (Hurst, 2014) คุณสมบัติที่โดดเด่นเหล่านี้ซิลิกอนคาร์ไบด์จึงถูกนำมาศึกษาการดูดซับแก๊สต่าง ๆ อาทิ การศึกษาเชิงคำนวณของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจน ซัลเฟอร์ไดออกไซด์และไนโตรเจนไดออกไซด์บนพื้นผิววัสดุแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ (Silicon Carbide Nanosheet; SiCNS) และแบบที่เติมด้วยเหล็ก (Farmanzadeh & Ardehjeni, 2018) จากการศึกษาพบว่าแผ่นซิลิกอนคาร์ไบด์ที่เติมโลหะเหล็กมีคุณสมบัติดูดซับแก๊สทั้งสามได้ดีกว่าแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม รวมถึงงานวิจัยการทดลองการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนบนวัสดุนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ (Silicon Carbide Nanotube; SiCNT) ที่เติมด้วยโลหะโพแทสเซียมและไททานเนียม (Barghi *et al.*, 2015) จากการศึกษาพบว่าวัสดุซิลิกอนคาร์ไบด์ที่เติมด้วยโลหะโพแทสเซียมและไททานเนียมสามารถดูดซับแก๊สไฮโดรเจนได้ดีกว่าท่อคาร์บอนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมเนื่องจากการเติมโลหะจะเพิ่มพื้นที่ผิวบนวัสดุ จากการรายงานวิจัยและการศึกษาที่กล่าวมาข้างต้น ผู้วิจัยจึงเกิดความสนใจและเลือกที่จะนำวัสดุนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อคาร์บอนซิลิกอนคาร์ไบด์นำมาศึกษา โดยมี การเติมโลหะแทรนซิชันและแก๊สที่เป็นสารอนุพันธ์ของเบนซีนที่ผู้วิจัยอยากนำมาศึกษาเพิ่มเติมเพื่อให้

เกิดองค์ความรู้ใหม่เพิ่มขึ้น การศึกษาเชิงทฤษฎี (Theoretical Study) หรือเคมีคำนวณ (Computational Chemistry) เป็นวิธีรูปแบบการศึกษาหนึ่งที่ได้รับค่านิยมและประหยัดต้นทุนในการทดลอง อีกทั้งในการศึกษาเชิงทฤษฎีนั้นมีความถูกต้องและแม่นยำสูงเทียบเท่ากับการทดลองจริงในห้องปฏิบัติการ โดยการศึกษาเชิงทฤษฎีนั้นใช้ทฤษฎีเคมีควันตัม เคมีฟิสิกส์ คณิตศาสตร์และคอมพิวเตอร์มาออกแบบในการทดลองหรือสร้างระบบจำลอง (Simulation) เพื่อได้ผลการทดลองให้ใกล้เคียงการทดลองในห้องปฏิบัติการให้มากที่สุด ดังนั้นงานวิจัยนี้มุ่งจะศึกษาสมบัติโครงสร้าง (Structural Properties) สมบัติทางพลังงานการดูดซับ (Adsorption Properties) และสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ (Electronic Properties) โดยศึกษาคุณสมบัติต่าง ๆ ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่เติมด้วยโลหะทรานซิชัน 9 ชนิด ได้แก่ วาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสแตน แมงกานีส เทคนีเชียม และรีเนียม และนำมาดูดซับอนุพันธ์ของเบนซีน ได้แก่ ไนโตรเบนซีน โทลูอีน และอนิลีน ด้วยวิธีการศึกษาเชิงทฤษฎี

## 1.2 วัตถุประสงค์การวิจัย

1.2.1 เพื่อศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงานและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน ได้แก่ วาเนเดียม (V) ไนโอเบียม (Nb) แทนทาลัม (Ta) โครเมียม (Cr) โมลิบดีนัม (Mo) ทังสแตน (W) แมงกานีส (Mn) เทคนีเชียม (Tc) และรีเนียม (Re) แทนตำแหน่งอะตอมของคาร์บอนและตำแหน่งอะตอมของซิลิกอน

1.2.2 เพื่อศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงานและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับไนโตรเบนซีน (Nitrobenzene) บนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน การดูดซับโทลูอีน (Toluene) บนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน และการดูดซับอนิลีน (Aniline) บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน

## 1.3 ขอบเขตการวิจัย

1.3.1 แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่นำมาวิจัย จำนวน 1 ยูนิท ประกอบไปด้วยอะตอมของคาร์บอน 39 อะตอม ซิลิกอน 39 อะตอม และไฮโดรเจน 24 อะตอม

1.3.2 ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่นำมาวิจัย จำนวน 1 ยูนิท ประกอบไปด้วยอะตอมของคาร์บอน 45 อะตอม ซิลิกอน 45 อะตอม และไฮโดรเจน 20 อะตอม

1.3.3 อะตอมของธาตุโลหะทรานซิชันที่ใช้ศึกษา ในการแทนที่ตำแหน่งอะตอมของคาร์บอน และตำแหน่งอะตอมของซิลิกอน วาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสแตน แมงกานีส เทคนีเชียม และรีเนียม

1.3.4 อนุพันธ์ของเบนซีนที่ใช้ศึกษาประกอบด้วย 1) ไนโตรเบนซีน ใช้ในการดูดซับบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ 2) โทลูอิน ใช้ในการดูดซับบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ 3) อนิลีน ใช้ในการดูดซับบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์

1.3.5 ทฤษฎีที่ใช้ในการคำนวณ คือ ทฤษฎีดีเอฟที (Density Functional Theory; DFT) ที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ โดยคำนวณด้วยโปรแกรมเกาส์เซียน 09 (Gaussian 09)

1.3.6 สมบัติที่ได้จากการคำนวณคือ สมบัติทางโครงสร้าง ประกอบด้วยความยาวพันธะ มุมพันธะ ระยะดูดซับ สมบัติทางพลังงาน ประกอบด้วยพลังงานการยึดจับ พลังการดูดซับ สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ประกอบด้วยการถ่ายโอนประจุของอะตอม แลပ်พลังงาน การเปลี่ยนแปลงแลပ်พลังงาน การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุ และความหนาแน่นของสถานะ (Density of State; DOS)

## 1.4 นิยามศัพท์เฉพาะ

“เคมีเชิงคอมพิวเตอร์” หมายถึง วิชาเคมีแขนงหนึ่งที่มีการนำเอาคอมพิวเตอร์สมรรถนะสูงมาใช้ในการศึกษาทางทฤษฎี ซึ่งเป็นการคำนวณโครงสร้างและสมบัติต่าง ๆ ของโมเลกุลโดยอาศัยหลักการที่ว่าสมบัตินี้ขึ้นกับโครงสร้างและสมบัติต่าง ๆ ของโมเลกุล

“แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์” หมายถึง แผ่นที่มีการสร้างพันธะระหว่างอะตอมคาร์บอนและซิลิกอน โดยประกอบด้วยอะตอมคาร์บอน 39 อะตอม ซิลิกอน 39 อะตอม ไฮโดรเจน 24 อะตอม

“ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์” หมายถึง ท่อที่มีอะตอมคาร์บอนและซิลิกอนสร้างพันธะกันเป็นโครงสร้างแบบท่อ โดยประกอบด้วยอะตอมคาร์บอน 45 อะตอม ซิลิกอน 45 อะตอม และไฮโดรเจน 20 อะตอม

“การเติมอะตอมของธาตุ (Doping Metal)” หมายถึง การแทนที่อะตอมของโลหะบนตำแหน่งตรงกลางของคาร์บอน (C) หรือตำแหน่งของซิลิกอน (Si) บนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์

“การดูดซับอนุพันธ์ของเบนซีน (Benzene Derivative Adsorption)” หมายถึง การดูดซับของโมเลกุลของอนุพันธ์ของเบนซีน ได้แก่ ไนโตรเบนซีน โทลูอินและอนิลีน บนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่เติมโลหะทรานซิชัน

“พลังงานของดูดซับ (Adsorption Energy)” หมายถึง พลังงานที่คำนวณจากพลังงานรวมของสารผลิตภัณฑ์ลบด้วยพลังงานรวมของสารตั้งต้น โดยพลังงานรวมของปฏิกิริยามีค่าเป็นลบแสดงว่าเป็นปฏิกิริยาแบบคายพลังงาน และพลังงานรวมของปฏิกิริยามีค่าเป็นบวกแสดงว่าเป็นปฏิกิริยาแบบดูดพลังงาน

“ความหนาแน่นของสถานะ (Density of States)” หมายถึง ความหนาแน่นของอิเล็กตรอนของโมเลกุลที่ตำแหน่งอะตอมต่าง ๆ บนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์หรือท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่เติมด้วยโลหะแทรนซิชัน ซึ่งจะนำไปสู่การหาแถบพลังงาน (Band Gap) ของสารได้

“LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital Energy)” หมายถึง ออร์บิทัลของโมเลกุลที่มีพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่

“HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital Energy)” หมายถึง ออร์บิทัลของโมเลกุลที่มีพลังงานสูงที่สุดในบรรดาออร์บิทัลที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่

## 1.5 ประโยชน์ที่ได้รับจากการวิจัย

1.5.1 เข้าใจถึงสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ และสมบัติทางพลังงานการดูดซับของไนโตรเบนซีน โทลูอินและอนิซีน บนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน วาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม เข้าไปแทนตำแหน่งอะตอมของคาร์บอนและตำแหน่งอะตอมของซิลิกอน

1.5.2 เข้าใจถึงความสามารถในการดูดซับไนโตรเบนซีน โทลูอิน อนิซีน บนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ได้แก่ วาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม เข้าไปแทนตำแหน่งอะตอมของคาร์บอนและตำแหน่งอะตอมของซิลิกอน

1.5.3 เป็นแนวทางในการพัฒนาวัสดุระดับนาโน สามารถนำไปประยุกต์ในเชิงพาณิชย์ ขยายความรู้เพิ่มเติมในเชิงทฤษฎีเพื่อนำไปพัฒนาเป็นนวัตกรรม หรือเป็นแนวทางในการพัฒนาวัสดุนาโนเพื่อใช้ดูดซับแก๊สที่เป็นอนุพันธ์ของเบนซีนหรือกักเก็บกับเก็บอนุพันธ์ของเบนซีนได้

## บทที่ 2

### การทบทวนวรรณกรรม

#### 2.1 กระบวนการดูดซับ

การดูดซับ (Adsorption) หมายถึง กระบวนการที่เกี่ยวข้องกับการสะสมตัวของสาร หรือความเข้มข้นของสารที่บริเวณพื้นผิวหรือระหว่างผิวหน้า (Interface) กระบวนการนี้สามารถเกิดที่บริเวณผิวสัมผัสระหว่าง 2 สภาวะใด ๆ เช่น ของเหลวกับของเหลว แก๊สของเหลว แก๊สกับของแข็ง หรือของเหลวกับของแข็ง โดยโมเลกุลหรือคอลลอยด์ที่ถูกดูดซับเรียกว่า สารถูกดูดซับ (Adsorbate) ส่วนสารที่ทำหน้าที่ดูดซับเรียกว่า สารดูดซับ (Adsorbent)

##### 2.1.1 กลไกของกระบวนการดูดซับ

การดูดซับ (Adsorption Surface Area) เป็นกระบวนการที่พวกสารละลายหรือสารแขวนลอยขนาดเล็กซึ่งละลายอยู่ในน้ำให้อยู่บนผิวของสารอีกชนิดหนึ่ง โดยที่สารละลายหรือสารแขวนลอย ขนาดเล็กนี้เรียกว่าสารถูกดูดซับ ส่วนของแข็งที่มีผิวเป็นที่เกาะจับของสารที่ถูกดูดซับ เรียกว่าสารดูดซับ การดูดซับนี้จะเป็นการดูดซับแบบระหว่างสถานะ (Phase) ต่าง ๆ ทั้งสามสถานะ คือ ของเหลว (Liquid) แก๊ส (Gas) และ ของแข็ง (Solid) ซึ่งมีได้ทั้งแบบ ของเหลว-ของเหลว แก๊ส-ของเหลว แก๊ส-ของแข็ง และ ของเหลว-ของแข็ง โดยในที่นี้จะพิจารณา ของการดูดซับ โมเลกุลของสารละลายหรือสารแขวนลอยจะถูกกำจัดออกจากน้ำและไปเกาะติดอยู่บนตัวดูดซับ โมเลกุลของสารส่วนใหญ่จะเกาะอยู่กับผิวภายในโพรงของตัวดูดซับและมีเพียงส่วนน้อยเท่านั้นที่เกาะอยู่ที่ผิวภายนอก การถ่ายเทโมเลกุลจากน้ำไปหาตัวดูดซับเกิดขึ้นได้จนถึงสมดุลจึงหยุด ณ จุดสมดุล ความเข้มข้นของโมเลกุลในน้ำจะเหลือน้อยเพราะโมเลกุลส่วนใหญ่เคลื่อนที่ไปเกาะจับอยู่กับตัวดูดซับ โดยในการเกาะติดจะมีอยู่ 2 แบบ คือ การดูดซับทางกายภาพ และการดูดซับทางเคมี (ปรารถนา โป่งฟ้า, 2551)

##### 2.1.2 การดูดซับทางกายภาพ

การดูดซับทางกายภาพ (Physical Adsorption หรือ Physisorption) อาศัยแรงดึงดูดทางไฟฟ้าอย่างอ่อนๆ เรียกว่าแรงแวนเดอร์วาลส์ (Van der Waals) หรือพันธะไฮโดรเจน (Hydrogen bond) ซึ่งเกิดจากการรวมแรงสองชนิด คือ แรงกระจาย (London Dispersion Force) และแรงไฟฟ้าสถิต (Electrostatic Force) ตัวอย่างการดูดซับระหว่างสถานะของเหลว แรงดึงดูดระหว่างสารที่อยู่ในของเหลวกับสารดูดซับมีมากกว่าแรงดึงดูดระหว่างสารในของเหลวกับของเหลว ทำให้สารที่อยู่



ในของเหลวเข้าติดอยู่ที่สารดูดซับแทน ซึ่งการดูดซับทางกายภาพไม่มีแรงกระตุ้น (Activation Energy) มาเกี่ยวข้อง ความร้อนของการดูดซับมีค่าน้อย โดยต่ำกว่า 20 กิโลจูลต่อโมล และสามารถเกิดการผันกลับของกระบวนการได้ง่าย ซึ่งเป็นข้อดี เพราะสามารถฟื้นฟูสภาพของตัวดูดซับได้ง่าย ด้วยและการดูดซับเกิดซ้อนกันได้หลายชั้น (Multilayer) หรือในแต่ละชั้นของโมเลกุลสารถูกดูดซับจะติดอยู่กับชั้นของโมเลกุลของสารถูกดูดซับในชั้นก่อนหน้านี้ โดยจำนวนชั้นจะเป็นสัดส่วนกับความเข้มข้นของสารถูกดูดซับ และจะเพิ่มมากขึ้นตามความเข้มข้นที่สูงขึ้นของตัวถูกละลายในสารละลาย

### 2.1.3 การดูดซับทางเคมี

การดูดซับทางเคมี (Chemical Adsorption หรือ Chemisorption) เกิดขึ้นเมื่อตัวถูกดูดซับทำปฏิกิริยาเคมีกัน ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงทางเคมีจากตัวถูกดูดซับเดิม คือ มีการทำลายแรงยึดเหนี่ยวระหว่างอะตอมและกลุ่มอะตอมเดิม แล้วมีการจัดเรียงอะตอมขึ้นใหม่โดยมีพันธะเคมีที่แข็งแรงแรงที่ใช้ดูดซับเป็นพันธะโคเวเลนต์ มักเกิดขึ้นเมื่ออุณหภูมิสูงกว่าอุณหภูมิวิกฤตของสารที่ถูกดูดซับ มีพลังงานกระตุ้น (Activation Energy) เข้ามาเกี่ยวข้อง ความร้อนของการดูดซับมีค่าสูง ค่าความร้อนของการดูดซับมีค่าประมาณ 50-400 กิโลจูลต่อโมล หมายความว่า การกำจัดตัวถูกดูดซับออกจากผิวตัวดูดซับจะทำได้ยาก คือไม่สามารถเกิดปฏิกิริยาผันกลับได้ (Irreversible) และการดูดซับประเภทนี้จะเป็นการดูดซับแบบชั้นเดียว (Monolayer) เท่านั้น ซึ่งการดูดซับทางกายภาพและทางเคมีมีข้อแตกต่างกันหลายอย่าง (ปรารภนา โปรงฟ้า, 2551) ดังตารางที่ 2.1

## ตารางที่ 2.1

### สมบัติการดูดซับทางกายภาพและทางเคมี

ตัวแปร	การดูดซับทางกายภาพ	การดูดซับทางเคมี
1.ค่าความร้อนของการดูดซับ	น้อยกว่า 20 กิโลจูลต่อโมล	50-400 กิโลจูลต่อโมล
2.อุณหภูมิที่เกิดการดูดซับ	ต่ำ	สูง
3.แรงดึงดูดระหว่างโมเลกุล	แรงแวนเดอร์วาลส์	พันธะเคมี
4.การผันกลับของปฏิกิริยา	ผันกลับได้	ส่วนใหญ่ผันกลับไม่ได้
5.การดูดซับบนแก๊ส-ของแข็ง	เกิดได้เกือบทุกชนิด	เกิดเฉพาะบางระบบ
6.พลังงานก่อกัมมันต์ในกระบวนการเกิด	ไม่เกี่ยวข้อง	เกี่ยวข้อง
7.รูปแบบชั้นของการดูดซับ	ผนังชั้นเดียว และ หลายชั้น	ผนังชั้นเดียว

(ปรารธนา โปร่งฟ้า, 2549)

## 2.2 นาโนเทคโนโลยี

นาโนเทคโนโลยีเกี่ยวข้องกับโครงสร้างที่หลากหลายของสสารที่มีมิติในสัดส่วนหนึ่งในหนึ่งพันล้านส่วน โดยนิยมใช้หน่วยความยาวเป็นเมตร คำว่า “นาโน” (Nano) เป็นภาษากรีกหมายถึงสิ่งมีชีวิตที่มีขนาดเล็กกว่าปกติหรือคนแคระ (Dwarf) หรือหมายถึงหนึ่งส่วนพันล้านส่วนโดยมีสัญลักษณ์ เป็น “n” ดังนั้น 1 นาโนเมตร (nm) จะเท่ากับหนึ่ง ส่วนพันล้านเมตร ( $1 \text{ nm} = 1 \times 10^{-9} \text{ m}$ ) นาโนเทคโนโลยี หมายถึง ศาสตร์ที่เกี่ยวกับโครงสร้างของสสารในมิติที่มีขนาดเป็นหนึ่งส่วนพันล้านเมตร โดยมีมาตราอยู่ในช่วงประมาณ 1 - 100 นาโนเมตร สสารที่อยู่ในช่วงนี้จะมีคุณสมบัติแตกต่างจากคุณสมบัติขนาดใหญ่ที่เคยศึกษาอยู่แต่เดิม ดังนั้นนาโนเทคโนโลยีจึงเป็นการศึกษาสสารขนาดเล็กในระดับอะตอมและโมเลกุล

National Nanotechnology Initiative (NNI) ได้กล่าวถึงนาโนเทคโนโลยีไว้ว่า นาโนเทคโนโลยีเป็นศาสตร์ที่เกี่ยวข้องกับการพัฒนาการวิจัยทางเทคโนโลยีในระดับอะตอม โมเลกุล หรือโมเลกุลขนาดใหญ่ที่มีมาตราความยาวประมาณ 1 – 100 นาโนเมตร การสร้างและการใช้โครงสร้างอุปกรณ์และระบบที่มีคุณสมบัติใหม่และมีหน้าที่แบบใหม่ทั้งนี้เพราะมีขนาดเล็ก และ ความสามารถในการควบคุมสสารในระดับอะตอมหรือโมเลกุล

ในปี ค.ศ.1908 ริชาร์ด ไฟน์แมน (Richard Feynman) นักฟิสิกส์รางวัลโนเบลในปี ค.ศ. 1965 ที่ศึกษาค้นคว้าเรื่องไฟฟ้าพลศาสตร์เชิงควอนตัม (Quantum Electrodynamics) ได้จุดประกายความคิดทางด้านนาโนเทคโนโลยีเพิ่มขึ้นจากการแสดงปาฐกถาพิเศษในการประชุมของ สมาคมฟิสิกส์

อเมริกันในหัวข้อเรื่อง “There is Plenty of Room at the Bottom” ซึ่งบ่งบอกถึง ความเป็นไปได้ และศักยภาพของวัสดุนาโน มุมมองที่น่าสนใจประการหนึ่งที่สามารถ อธิบายได้คือการกัดเป็น ร่องในแนวเส้นตรงที่มีความกว้างเท่าขนาดของอะตอมโดยใช้ลำ อิเล็กตรอนซึ่งริชาร์ด ไฟน์แมน ได้ ทำนายการทำลิโธกราฟีโดยใช้ลำอิเล็กตรอน (Electron-Beam Lithography) ปัจจุบันได้ใช้เทคนิค นี้มาทำชิ้นส่วนซิลิกอน นอกจากนี้ ริชาร์ด ไฟน์แมน ได้เสนอการควบคุมอะตอมเดี่ยว ๆ เพื่อทำ โครงสร้างขนาดเล็กแบบใหม่ที่มีคุณสมบัติแตกต่างกัน มากมาย วิธีการเหล่านี้ปัจจุบันได้ประสบ ผลสำเร็จโดยการใช้กล้องจุลทรรศน์แบบอุโมงค์แบบส่องกราด มุมมองที่เหนือไปกว่านั้นคือการสร้าง แผงวงจรไฟฟ้าที่มีขนาดเล็กระดับนาโนและสามารถนำมาใช้อย่างมีประสิทธิภาพกับคอมพิวเตอร์ เช่นเดียวกับการศึกษาค้นคว้า นาโนเทคโนโลยีในปัจจุบันซึ่งสอดคล้องกับมุมมองของริชาร์ด ไฟน์แมน ในการสร้างโครงสร้างแบบนาโนในระบบทางชีวภาพ และในปัจจุบันนี้มุมมองของริชาร์ด ไฟน์แมน กลายเป็นความจริง (ศรัญญา พรหมโคตร์, 2554)

ราล์ฟ แลนดาเออร์ (Ralph Landauer) นักฟิสิกส์เชิง ทฤษฎีทำงานให้กับบริษัทไอบีเอ็ม (IBM) ในปี ค.ศ.1957 ราล์ฟ แลนดาเออร์มีความคิดเกี่ยวกับการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของ โมเลกุลระดับนาโนที่สามารถจับต้องได้และมีความสำคัญต่อกลศาสตร์เชิงควอนตัมซึ่งสามารถนำมาใช้ ได้กับเครื่องมือชนิดอื่น ๆ ถึงแม้ว่า ริชาร์ด ไฟน์แมน จะเสนอมุมมอง ทางนาโนเทคโนโลยีในปี ค.ศ.1960 แต่ความพยายามในการทดลองศาสตร์ด้านนี้เริ่มต้นตั้งแต่ปี ค.ศ.1950 จนกระทั่งถึงปี ค.ศ.1960 เป็นต้นมาก็ยังมีการศึกษาค้นคว้าในเรื่องของวัสดุโลหะที่มี ขนาดเล็ก ซึ่งขณะนั้นยังไม่ เรียกว่านาโนเทคโนโลยี อุห์ลี (Uhlir) ได้รายงานถึงการสังเกตเห็นซิลิกอนที่มีรูพรุนเป็นครั้งแรกในปี ค.ศ.1956 แต่ทว่ายังไม่มีการยืนยันที่แน่ชัด จนกระทั่งปี ค.ศ.1990 สามารถสร้างห้องที่ควบคุม อุณหภูมิแสงฟลูออเรสเซนซ์ได้ ซึ่งห้องนี้ใช้ในการสังเกตการเติบโตของวัตถุที่น่าสนใจได้ดี นอกจากนี้ ยังมีการศึกษาวิจัยในยุคปัจจุบันที่เกี่ยวข้องกับการผลิต วัสดุนาโนแบบโลหะอัลคาไลน์โดยใช้วิธีการ กลายเป็นไอของโลหะโซเดียมหรือโพแทสเซียมแล้ว ควบแน่นไอโลหะเหล่านี้ให้เย็นตัวบนวัตถุที่ เรียกว่าซับเตรต (Substrate) นอกจากนี้ยังมีพัฒนาการด้านนาโนเทคโนโลยีเติบโตอย่างรวดเร็วซึ่ง สามารถสรุปได้ในตารางที่ 2.2 ดังนี้

## ตารางที่ 2.2

### การพัฒนาการของนาโนเทคโนโลยีจากอดีตถึงปัจจุบัน

ปี ค.ศ.	ความก้าวหน้าของนาโนเทคโนโลยี
1661	โรเบิร์ต บอยล์ (Robert Boyle) เสนอแนวคิดที่ว่าสสารเกิดจากอนุภาคขนาดเล็กมารวมกัน ด้วยวิธีการต่าง ๆ กันเป็นรูปร่างใหม่
1857	ไมเคิล ฟาราเดย์ (Michael Faraday) ค้นพบคอลลอยด์ของทองคำ โดยทองคำขนาดนาโน ในสารละลายจะไม่ทำให้เกิดสี แต่ในบางสภาวะที่เกิดการกระเจิงแสงอาจทำให้เกิดสีต่าง ๆ ได้ เช่น สีแดง เขียว ม่วง หรือน้ำเงิน
1905	แอลเบิร์ต ไอน์สไตน์ (Albert Einstein) เสนอทฤษฎีการกระจายตัวของคอลลอยด์และการเคลื่อนที่ของคอลลอยด์ โดยเรียกการเคลื่อนที่นี้ว่า การเคลื่อนที่แบบบราวน์ (Brownian Motion)
1958	ริชาร์ด ไฟน์แมน (Richard Feynman) ได้ตั้งข้อสังเกตและแนะนำว่ายังมีความเป็นไปได้ที่จะควบคุมวัตถุในระดับอะตอมและโมเลกุล ในสุนทรพจน์ เรื่อง “There is Plenty of Room at the Bottom”
1974	โนริโอะ ทานิกูชิ (Norio Taniguchi) ได้ใช้คำว่า “Nanotechnology” เป็นครั้งแรก เพื่ออธิบายเทคโนโลยีการผลิตที่มีคุณภาพสูงในระดับมาตรานาโน
1981	เจอร์ราจ ไบน์นิง (Gerd K. Binnig) และ เฮนริช โรเยอร์ (Heinrich Rohrer) นักวิจัยของ IBM ประดิษฐ์กล้องจุลทรรศน์อิเล็กตรอนแบบ Scanning Tunneling Microscope (STM) กล้องจุลทรรศน์นี้ทำให้เห็นพื้นผิวของอะตอมใน 3 มิติ
1985	ริชาร์ด สมอลล์ (Richard Smalley), โรเบิร์ต เคิร์ล (Robert Curl) และ แฮโรลด์ โครโต (Harold Kroto) ได้ค้นพบคาร์บอนรูปแบบใหม่ที่เรียกว่าคาร์บอน-60 (C60)
1990	ดอน ไอเกลอร์ (Don Eigler) นักวิจัยของ IBM ได้แสดงการใช้อะตอมของธาตุซีซอน (Xe) 35 ตัวมาวางเรียงกันเป็นตัวอักษร IBM
1991	ซูมิโน อิจิมา (Sumino Iijima) ค้นพบวิธีการสังเคราะห์ท่อนาโนคาร์บอน
1993	เมอร์เรย์ (Murray), นอร์ริส (Norris) และบาเวนดิ (Bawendi) ได้สังเคราะห์จุดควอนตัม (Quantum Dots) ของ CdS, CdSe และ CdTe เป็นครั้งแรก
1997	บริษัทลูเซนต์เทคโนโลยี ได้สร้างนาโนทรานซิสเตอร์ได้สำเร็จ
2000	บริษัทลูเซนต์เทคโนโลยีและมหาวิทยาลัยออกฟอร์ด ได้สร้างมอเตอร์ดีเอ็นเอ (DNA motors) เป็นครั้งแรก
2001	บริษัท NEC ได้สร้างเซลล์เชื้อเพลิงต้นแบบ (Hydrogen-Based Fuel) ด้วยการใช้ท่อนาโน
2002	นับตั้งแต่ปี ค.ศ.2002 เป็นต้นมา การพัฒนาของนาโนเทคโนโลยีได้ก้าวหน้ามากขึ้นในหลายหน่วยงานและหลายสาขาพร้อม ๆ กัน

## 2.3 วัสดุนาโน (Nano Materials)

### 2.3.1 แผ่นแกรฟีน

แผ่นแกรฟีน ซึ่งเป็นหนึ่งในอัญรูปของคาร์บอนที่มีการค้นพบในปี ค.ศ. 2004 โดยศาสตราจารย์ ดร. อังเดร โก้ม (Andre Geim) และ ศาสตราจารย์ ดร. คอนสแตนติน โนโวเซลอฟ (Konstantin Novoselov) จากมหาวิทยาลัยแมนเชสเตอร์ สหราชอาณาจักร ซึ่งผลงานการค้นพบแกรฟีนทำให้ทั้งสองท่านได้รับรางวัลโนเบล สาขาฟิสิกส์ ในปี ค.ศ. 2010 (วิศนุสรณ์ ชาติอารยะวัตติ, 2556)

แผ่นแกรฟีน เกิดจากอะตอมของคาร์บอนที่เรียงตัวต่อกันเป็นโครงสร้างรูปหกเหลี่ยมหากนำแกรฟีนมาวางซ้อนกันหลายๆชั้นจะได้แกรไฟต์ที่รู้จักกันดี (ไส้ดินสอ นั่นเอง) เนื่องจากแกรฟีนมีความหนาเพียงแค่คาร์บอนอะตอมเดียวทำให้มีสมบัติเฉพาะตัวที่แตกต่างออกไปจากคาร์บอนอัญรูปอื่น ๆ กระบวนการแยกชั้นแกรฟีนจากแกรไฟต์แสดงดังภาพที่ 2.1



ภาพที่ 2.1 กระบวนการแยกชั้นแกรฟีนจากแกรไฟต์ (Edward & Coleman, 2013)

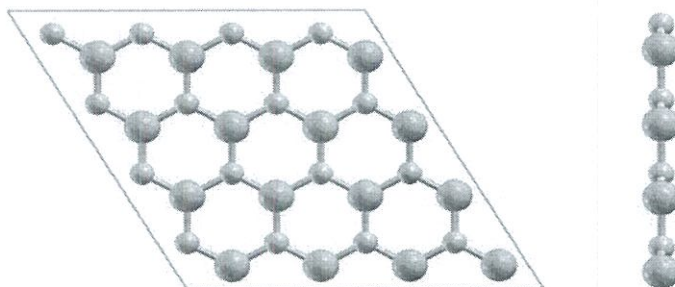
นักวิทยาศาสตร์พยายามคิดค้นวิธีการผลิตแกรฟีนให้มีขนาดที่ใหญ่ขึ้นและมีสมบัติที่ควบคุมได้จากการควบคุมโครงสร้างการสังเคราะห์แกรฟีนสำหรับอุตสาหกรรมมี 2 วิธีได้แก่ 1) การผลิตแกรฟีนโดยวิธี การตกเคลือบด้วยไอเคมี (Chemical Vapour Deposition; CVD) เป็นการจัดเรียงตัวของอะตอมคาร์บอนบนแผ่นโลหะโดยเริ่มต้นจากการปล่อยแก๊สมีเทนที่อุณหภูมิห้องเข้าไปในเตาเผา ที่มีแก๊สไฮโดรเจนอยู่ด้วยเล็กน้อยเมื่อแก๊สมีเทนสัมผัสกับโลหะเช่นทองแดงหรือนิกเกิลที่อุณหภูมิสูงประมาณ 1000°C จะเกิดการสลายตัวเหลือเพียงอะตอมของคาร์บอนเกาะอยู่บนแผ่นโลหะและจัดเรียงโครงสร้างเป็นแกรฟีนที่เหมาะสมแกรฟีนที่ผลิตขึ้นโดยเทคนิค CVD นี้เป็นแกรฟีนที่มี

คุณภาพสูงมีการนำไฟฟ้าที่ดีจึงเหมาะสมอย่างยิ่งกับการนำไปใช้ในงานด้านอิเล็กทรอนิกส์ และ 2) การผลิตแกรฟีนโดยกระบวนการทางเคมีเริ่มจากการออกซิไดซ์แกรไฟต์เพื่อให้เกิดหมู่ฟังก์ชันที่ไบก์กันระหว่างชั้นของแกรไฟต์ให้ห่าง ออกจากกัน (Exfoliation) และเรียกผลิตภัณฑ์ที่ได้ว่าแกรไฟต์ออกไซด์หรือแกรฟีนออกไซด์ขึ้นอยู่กับ ความหนาของวัสดุ(แกรฟีนออกไซด์ 1 ชั้นมีความหนาประมาณ 0.9 นาโนเมตรเท่านั้น จากนั้นทำปฏิกิริยารีดักชันเพื่อลดจำนวนหมู่ฟังก์ชันออกซิเจนลงและยังเพิ่มประสิทธิภาพการนำไฟฟ้าให้มากขึ้นด้วยซึ่งวิธีการนี้มีข้อดีคือสามารถผลิตแกรฟีนได้ในจำนวนมากและต้นทุนต่ำกว่าวิธีแรกมากแม้แกรฟีนที่ได้จะมีสมบัติหรือคุณภาพที่ด้อยกว่าก็ตาม แต่มีประโยชน์ต่อการประยุกต์ใช้ในด้านต่าง ๆ ได้เป็นอย่างดี

ประเทศไทยมีงานวิจัยเกี่ยวกับแกรฟีนอยู่พอสมควรเช่นการใช้แกรฟีนเป็นหมึกนำไฟฟ้า (Conductive ink) ซึ่งพัฒนาโดยเนคเทค (NECTEC) เป็นต้นการหาวัสดุชนิดใหม่มาทดแทนซิลิคอนในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์จึงเป็นการค้นคว้าวิจัยที่สำคัญมากในโลกยุคปัจจุบันและแกรฟีนเป็นหนึ่งในวัสดุที่มีความเป็นไปได้มากที่สุดแต่ทั้งนี้ซิลิคอนนั้นเป็นสารกึ่งตัวนำ (Semiconductor) ที่มีช่องว่างของแถบพลังงาน (Band Gap) ในขณะที่แกรฟีนบริสุทธิ์เป็นสารกึ่งตัวนำที่ไม่มีช่องว่างของแถบพลังงาน ดังนั้นแม้ว่าอิเล็กตรอนจะเคลื่อนที่ได้เร็วกว่าในสารกึ่งตัวนำทั่วไปถึง 100 เท่าแต่การที่ไม่มีช่องว่างของแถบพลังงานทำให้ไม่สามารถหยุดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนได้นั้นคือไม่สามารถสร้างสวิตช์เปิด/ปิดจากแกรฟีนได้ ดังนั้นการสร้างช่องว่างของแถบพลังงานให้แก่แกรฟีนจึงเป็นความท้าทายใหม่ที่ต้องทำการศึกษาวิจัยต่อไป (ศิริกาญจน์ วิเศษสุวรรณภูมิ, 2560)

### 2.3.2 แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์

ซิลิกอนคาร์ไบด์ (SiC) ผนังเดี่ยวเมื่อไม่นานมานี้ได้รับความสนใจเป็นอย่างมาก เนื่องจากมีคุณสมบัติโดดเด่นเช่น ความแข็งแรงทางกลสูง เป็นตัวขนส่งที่ดี มีเสถียรภาพทางความร้อนสูงและการนำความร้อนได้ดี สามารถนำมาประยุกต์ใช้ในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ได้ เมื่อเปรียบเทียบกับแกรฟีนแล้วพบว่าซิลิกอนคาร์ไบด์ผนังเดี่ยวมีปฏิกิริยาการดูดซับสารต่าง ๆ ได้ดีกว่าทำให้มีคุณสมบัติในการเป็นตัวเร่งที่ปราศจากโลหะ โครงสร้างซิลิกอนคาร์ไบด์แสดงดังภาพที่ 2.2 (Chabi *et al.*, 2015)



ภาพที่ 2.2 โครงสร้างซิลิกอนคาร์ไบด์

(Delavari & Jafari, 2018)

โครงสร้างผลึกของซิลิกอนคาร์ไบด์มีประมาณ 200 แบบ แต่ที่พบบ่อย ๆ มีเพียง 2-3 แบบเท่านั้น แต่ละแบบประกอบด้วยชั้นของเตตระฮีดรอลที่มีอะตอมของคาร์บอนและอะตอมของซิลิกอนมาเชื่อมต่อกัน เมื่อเรียงซ้อนกันเป็นชั้น ๆ แล้วเกิดการหมุนลำดับทิศทางในแต่ละชั้นจะต่างกันทำให้เกิดเป็นโครงสร้างต่าง ๆ ซึ่งสามารถแบ่งออกเป็น 2 ประเภท คือประเภทที่มีโครงสร้างผลึกแบบระบบคิวบิก (Cubic) เรียกว่าบีตา-ซิลิกอนคาร์ไบด์ ( $\beta$ -SiC) และประเภทที่มีโครงสร้างผลึกเป็นระบบนอนคิวบิก (Non-cubic) เรียกว่าแอลฟา-ซิลิกอนคาร์ไบด์ ( $\alpha$ -SiC) ซึ่งได้แก่ซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีโครงสร้างผลึกแบบหกเหลี่ยม (Hexagonal) และ romboidal (Rhombohedral)

สมบัติทั่วไปของซิลิกอนคาร์ไบด์ ซิลิกอนคาร์ไบด์เป็นสารประกอบที่มีพันธะระหว่างอะตอมเป็นพันธะโควาเลนต์ที่แข็งแรงมาก ทำให้มีค่าของยังมอดูลัสสูง (Young's Modulus) การสลายตัวให้เกิดแก๊สคาร์บอนจึงต้องใช้ต้องใช้อุณหภูมิสูงมากกว่า 2,200 องศาเซลเซียส ซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีความบริสุทธิ์มาก ๆ จะไม่มีสี แต่ถ้ามีธาตุไนโตรเจน อะลูมิเนียม เจือปนอยู่จะมีสีเขียวและฟ้าตามลำดับ และหากมีธาตุหลายชนิดปนอยู่จะมีสีดำ ซิลิกอนคาร์ไบด์ชนิดแอลฟามีความเสถียรภาพมากกว่าชนิดบีตา ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ที่ต่ำของทั้งคาร์บอนและซิลิกอนทำให้ยากต่อการสังเคราะห์ผงซิลิกอนคาร์ไบด์ให้ได้ความหนาแน่นสูง ๆ ดังนั้น ในการสังเคราะห์ซิลิกอนคาร์ไบด์จึงจำเป็นต้องใส่สารตัวเติม เช่น โบรอน คาร์บอน อะลูมินา อิตเทรียม เป็นต้น เพื่อช่วยให้การซินเทอร์เกิดขึ้นได้ง่าย นอกจากนี้ ซิลิกอนคาร์ไบด์ยังมีน้ำหนักเบาเมื่อเปรียบเทียบกับโลหะ นำความร้อนสูงและยังทนทานต่อการเปลี่ยนของอุณหภูมิอย่างฉับพลันได้ดีกว่า (วาสนา ฐ่องวงศ์, 2547) สมบัติทั่วไปของซิลิกอนคาร์ไบด์แสดงดังตารางที่ 2.3

## ตารางที่ 2.3

### สมบัติทั่วไปของซิลิกอนคาร์ไบด์

สมบัติ	แอลฟา-ซิลิกอนคาร์ไบด์ ( $\alpha$ -SiC)	บีตา-ซิลิกอนคาร์ไบด์ ( $\beta$ -SiC)
สมบัติทางระบบผลึก		
น้ำหนักโมเลกุล (M.W.)	40.10	40.10
ความหนาแน่นทางทฤษฎี (TD, g/cm <sup>3</sup> )	3.21	3.21
โครงสร้างทางผลึก (Crystal structure)	Hexagonal	Cubic
สมบัติทางเทอร์โมไดนามิกส์และความร้อน		
ความจุความร้อนที่ความดันคงที่ (C <sub>p</sub> , J/mol.K)	298-662 (เคลวิน) 662-3200 (เคลวิน)	98-678 (เคลวิน) 678-3200 (เคลวิน)
เอนทัลปี ( $\Delta_f H^\circ_{298}$ , kJ/mol)	-71.6	-73.2
พลังงานอิสระของกิบส์ ( $\Delta_f G^\circ_{298}$ , kJ/mol)	-69.1	-70.9
เอนโทรปี (S <sup>o</sup> <sub>298</sub> , J/mol.K)	16.5	16.6
จุดหลอมเหลว (T <sub>mp</sub> , K)	3103	-
สัมประสิทธิ์การขยายตัวทางความร้อน ( $\alpha$ , 10 <sup>-6</sup> /K)	5.12 (298-1273 เคลวิน) 5.48 (298-1773 เคลวิน) 5.77 (298-2273 เคลวิน) 5.94 (298-1773 เคลวิน)	3.8 (473 เคลวิน) 4.3 (673 เคลวิน) 4.8 (873 เคลวิน) 5.2 (1073 เคลวิน) 5.8 (1273 เคลวิน)
การนำความร้อน (K, W/m.K)	41.0 (293 เคลวิน) 33.5 (873 เคลวิน) 25.5 (1073 เคลวิน) 21.3 (1273 เคลวิน)	42.0 (300 เคลวิน) 19.0 (1000 เคลวิน) 13.0 (1500 เคลวิน) -
สมบัติทางกล (ที่อุณหภูมิ 293 เคลวิน)		
ยังมอดูลัส (E, GPa)	408	432
ความทนแรงดัดโค้ง ( $\sigma_{bend}$ , MPa)	350 + 40	560
สมบัติทางไฟฟ้า (อุณหภูมิ 293 เคลวิน)		
ความต้านทานไฟฟ้า ( $\rho \times 10^8$ , $\Omega \cdot m$ )	4x10 <sup>5</sup>	(0.17-1)x10 <sup>6</sup>

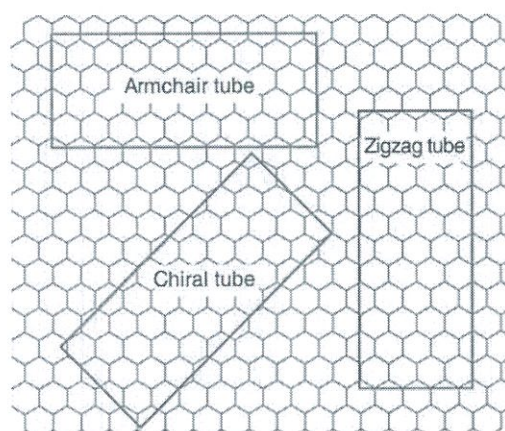
(วาสนา ษ์องวงศ์, 2547)



### 2.3.3 ท่อนาโนคาร์บอน (Carbon Nanotube)

ท่อนาโนคาร์บอนเป็นวัสดุที่มีความน่าทึ่ง มีสมบัติโดดเด่นหลายประการ เช่น มีค่าการนำไฟฟ้า และการนำความร้อนเป็นเลิศ เป็นได้ทั้งวัสดุตัวนำหรือกึ่งตัวนำ เมื่อนำแผ่นแกรฟีนมาม้วนให้มีรูปร่าง เป็นท่อจะได้ท่อนาโนคาร์บอนโดยเกิดการเปลี่ยนแปลงพันธะจากไฮบริดออร์บิทัลแบบ  $sp^2$  ของแผ่นแกรฟีนเป็นพันธะที่อยู่ระหว่าง  $sp^2$  และ  $sp^3$  ที่มีการโค้งงอ หรือม้วนงอที่ก่อกำเนิดในท่อนาโนคาร์บอน ซึ่งทำให้เกิดความเครียดของพันธะ (Bond Strain) มากขึ้น เพราะต้องมีการเหนี่ยวนำเพื่อให้มีการโค้งงอ ปริมาณของความเครียดพันธะขึ้นกับขนาดของเส้นผ่านศูนย์กลางของการม้วน ถ้าท่อนาโนคาร์บอนมีขนาดเล็กมากจะมีความเป็น  $sp^3$  มากกว่า มีความเครียดพันธะมากกว่า แต่ถ้าเส้นผ่านศูนย์กลางขนาดใหญ่ขึ้น พันธะก็ผ่อนคลายมากขึ้นมีความเครียดพันธะลดลง และมีความใกล้เคียงกับแผ่นแกรฟีนมากยิ่งขึ้นไปด้วย ซึ่งจะมีความเป็น  $sp^2$  มากกว่านั่นเอง

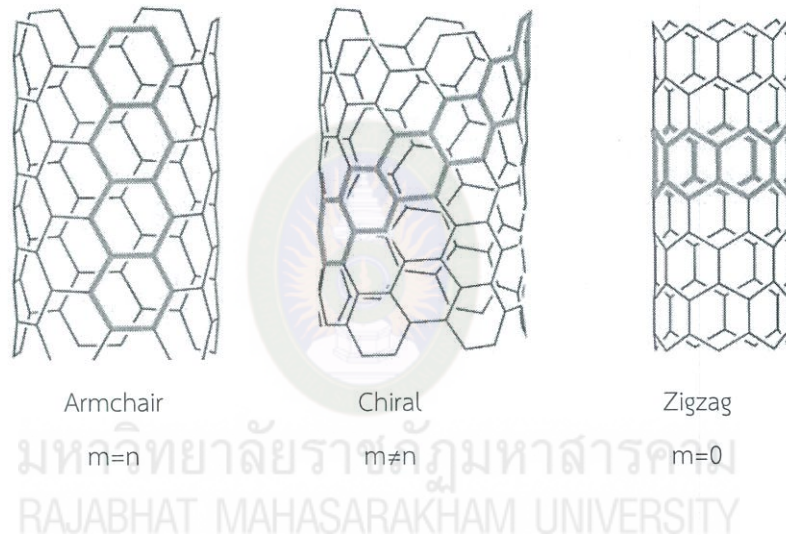
ท่อนาโนคาร์บอนเป็นวัสดุระดับนาโนที่มีความยาวโดดเด่นออกไปในหนึ่งมิติ (1D Nanomaterial) อะตอมในโครงสร้างอยู่ที่ผิวทั้งหมด ทำให้มีความสามารถในการเกิดปฏิกิริยาสูง เนื่องจากอะตอมที่ผิวสัมผัสกับสิ่งแวดล้อมรอบตัวได้ทุกอะตอม มีการจัดเรียงตัวหลายแบบขึ้นกับทิศทางของการม้วนแผ่นแกรฟีนซึ่งอธิบายด้วยแฟกเตอร์ของการเป็นเกลียว (Chiral factor : C) เกิดเป็นโครงสร้างที่แตกต่างกัน แบ่งออกได้เป็นท่อนาโนคาร์บอนแบบอาร์มแชร์ (Armchair) ไครอล (Chiral) และซิกแซก (Zigzag) แสดงดังภาพที่ 2.3 (Ijima, 1991, 1993) หลังจากการค้นพบท่อนาโนคาร์บอน ก็มีความพยายามที่สร้างท่อคาร์บอนอื่น ๆ ที่มีโครงสร้างคล้ายๆกันแบบท่อนาโนคาร์บอน เช่น ท่อนาโนโบรอนไนไตรด์ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ เป็นต้น (อภิชาติ ด้านวิทยากุล, 2553)



ภาพที่ 2.3 ชนิดของท่อนาโนคาร์บอน

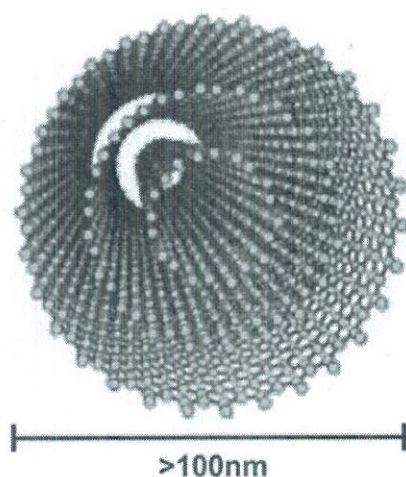
ที่มา : อภิชาติ ด้านวิทยากุล (2553)

โครงสร้างและสมบัติของท่อนาโนคาร์บอน ท่อนาโนคาร์บอนแบ่งเป็น 2 ชนิด ตามจำนวนชั้นของผนังท่อ มีรายละเอียดดังนี้ 1) ท่อนาโนคาร์บอนผนังชั้นเดียว โครงสร้างท่อนาโนคาร์บอนผนังชั้นเดียว เสมือนเกิดจากการม้วนแผ่นแกรไฟต์บาง ๆ เพียงชั้นเดียวให้เป็นทรงกระบอก ซึ่งการม้วนของแผ่นแกรไฟต์จะอยู่ในรูปของคู่อันดับเวกเตอร์  $(n,m)$  เรียกว่า ไครอลเวกเตอร์ (Chiral Vector) โดยจำนวน  $n$  และ  $m$  หมายถึงจำนวนของยูนิตเวกเตอร์ (unit Vector) สองทิศทางในโครงสร้างผลึกที่เป็นรังผึ้งของแกรไฟน์ ถ้า  $m=0$  ท่อนาโนจะเรียกว่า แบบซิกแซก ถ้า  $n=m$  ท่อนาโนจะเรียกว่า แบบอาร์มแชร์ และถ้าเป็นกรณีอื่น จะเรียกว่าไครอล ดังภาพที่ 2.4 สมบัติที่โดดเด่นของ ท่อนาโนคาร์บอนผนังชั้นเดียว คือความสามารถในการนำไฟฟ้าที่ดีมาก

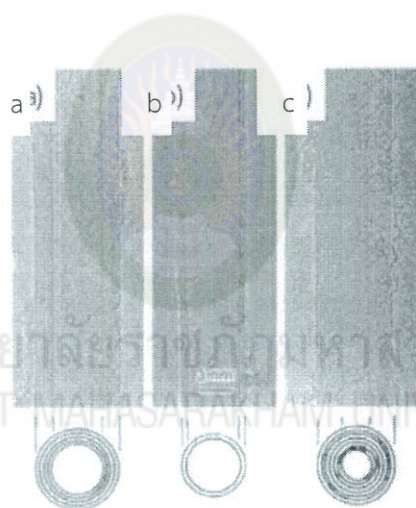


ภาพที่ 2.4 ชนิดของท่อนาโนคาร์บอนในรูปแบบสามมิติ (Sisto et al., 2016)

2) ท่อนาโนคาร์บอนผนังหลายชั้น ส่วนใหญ่ขนาดของท่อที่สังเคราะห์ได้พบว่ามีเส้นผ่านศูนย์กลางประมาณตั้งแต่ 2 นาโนเมตรไปถึงระดับไมโครเมตร ประกอบด้วยแผ่นแกรไฟต์หลายๆ แผ่นม้วนกันเป็นทรงกระบอกคล้ายกระดาษที่ม้วนอยู่ โดยมี 2 โมเดลที่ใช้ในการอธิบาย ท่อนาโนคาร์บอนผนังหลายชั้น คือ โมเดลตุ๊กตารัสเซีย (Russian Doll Model) อธิบายว่า แผ่นแกรไฟต์ม้วนตัวเป็นทรงกระบอก โดยมี  $n,m = (0,8)$  ท่อนาโนคาร์บอนผนังชั้นเดียวซ้อนอยู่ใน  $(0,10)$  ท่อนาโนคาร์บอนผนังเดียว และโมเดลกระดาษหนัง (Parchment Model) เกิดจากแผ่นแกรไฟต์เดี่ยวม้วนรอบ ๆ ตัวเอง และระยะห่างระหว่างแต่ละชั้นเท่ากับ  $0.33 - 0.34$  นาโนเมตร ซึ่งระยะนี้มีค่าประมาณระยะห่างระหว่างชั้นของแกรไฟต์ (บุญทวี เลิศปัญญาพรชัย, 2554) ท่อนาโนคาร์บอนแบบหลายชั้นดังภาพที่ 2.5 และระยะห่างระหว่างชั้นของแกรไฟต์แสดงดังภาพที่ 2.6



ภาพที่ 2.5 ท่อนาโนคาร์บอนแบบหลายชั้น (St. Clair, 2016)



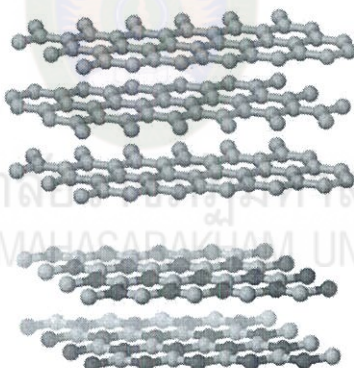
ภาพที่ 2.6 การเปรียบเทียบความหนาของท่อนาโนคาร์บอน  
(บุญทวี เลิศปัญญาพรชัย, 2554)

ประโยชน์ของท่อนาโนคาร์บอนสามารถนำไปประยุกต์ในหลายๆ ด้าน เช่น หัวจ่ายอิเล็กทรอนิกส์ วัสดุผสมพลาสติกให้นำไฟฟ้า ตัวกักเก็บเชื้อเพลิงไฮโดรเจน ตัวผสมกาวต่อเชื่อมชนิดนำไฟฟ้า อิเล็กทรอนิกส์ระดับโมเลกุล หัววัดแก๊ส หัววัดเอเอฟเอ็ม (AFM) ขั้วอิเล็กโทรดของแบตเตอรี่ชนิดลิเทียมไนโตรไซด์ที่มีมือถือ วัสดุถ่ายเทความร้อน วัสดุเสริมความแข็งแรงในนาโนคอมพอสิต เส้นใยและสิ่งทอ ตัวรองรับคะตะลิสต์และการประยุกต์ในทางชีวการแพทย์ (Biomedical) เป็นต้น (เกตุศิริ เกื้อเส้ง, 2546, ศิริกาญจนา ทองมี, 2556)

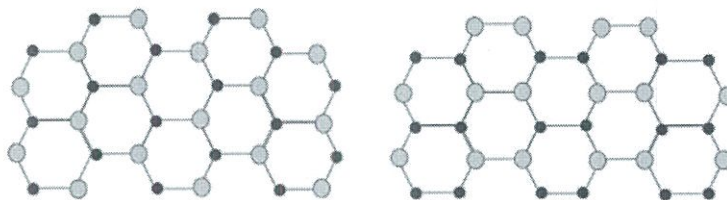
### 2.3.4 ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์

ตั้งแต่มีการค้นพบท่อนาโนคาร์บอนในปี ค.ศ. 1991 ก็ได้รับความสนใจมากมายจากนักวิจัยมากมายที่จะศึกษาการสังเคราะห์ท่อนาโนโดยใช้ธาตุอื่น ๆ หรือการเติมและต่อ(Decorated) เพื่อเพิ่มศักยภาพในการใช้งานด้วย หนึ่งในวัสดุที่สังเคราะห์เป็นวัสดุท่อนาโนที่เป็นที่นิยมคือท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์มีคุณสมบัติทนความร้อนและมีคุณสมบัติในการกักเก็บแก๊สที่ดี สามารถนำเคลือบผิววัสดุ หรือนำมาเป็นส่วนประกอบในเครื่องประดับได้ (Taguchi *et al.*, 2005; Janet Hurst, 2014)

เนื่องจากมีคุณสมบัติทนความร้อนและนำไฟฟ้าได้ดีจึงมีการนำมาประยุกต์ในด้านอิเล็กทรอนิกส์อย่างแพร่หลาย ซิลิกอนคาร์ไบด์มีแบ่งตามโครงสร้างสองแบบหลัก ๆ ได้แก่ แบบลูกบาศก์ (Cubic Silicon Carbide or  $\beta$ -SiC) และแบบหกเหลี่ยม (Hexagonal Silicon Carbide or Alpha  $\alpha$ -SiC) ท่อนาโนคาร์บอนที่จับกันแบบหกเหลี่ยมนั้นเมื่อนำมาสลับกันระหว่างอะตอมของคาร์บอนและซิลิกอนไปมากก็มีโครงสร้างที่คล้ายคลึงแผ่นแกรไฟต์ดังภาพที่ 2.7 นอกจากนี้ยังสามารถแบ่งรูปแบบโครงสร้างการจัดเรียงของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ได้ดังภาพที่ 2.8



ภาพที่ 2.7 การจัดเรียงโครงสร้างของแกรไฟต์และซิลิกอนคาร์ไบด์  
(Janet Hurst, 2014)



ภาพที่ 2.8 โครงสร้างการจัดเรียงของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์

(Janet Hurst, 2014)

เมื่อนำคุณสมบัติของท่อนาโนคาร์บอนและท่อนาโนโบรอนไนไตร์มาเปรียบเทียบกับท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์จะคุณสมบัติบางคุณสมบัติที่ใกล้เคียงกันและแตกต่างกันดังตารางที่ 2.4

#### ตารางที่ 2.4

การเปรียบเทียบคุณสมบัติของวัสดุท่อนาโน

วัสดุ	ท่อนาโนคาร์บอน (CNT)	ท่อนาโนโบรอน ไนไตรด์ (BNNT)	ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ (SiCNT)
1. โมดูลัสยืดหยุ่น	1.3 TPa	~1.3 Pa	~0.61 TPa
2. ค่าความแข็งแรง	11-150 GPa	33 Gpa	?
3. แลปพลังงาน	หลากหลายค่า ขึ้นอยู่ กับชนิดของท่อ	5 eV	3.4-3.6 eV  0.7-0.5 eV
3. ค่าสัมประสิทธิ์การ นำความร้อน (W/(m.k))	3000	350 การทดลอง (600 เซิงทฤษฎี)	<10
4. ค่าเสถียรภาพทาง ความร้อน	400-600°C	>1000°C	>800-1000°C

(Janet Hurst, 2014)

## 2.4 โลหะทรานซิชัน

2.4.1 วาเนเดียม (V) มีอะตอมเท่ากับ 23 เป็นธาตุที่จัดอยู่หมู่ VB ในตารางธาตุ มีรัศมีอะตอมเท่ากับ 134 พิโคเมตร เป็นธาตุที่หายาก อ่อนนุ่ม ตีเป็นแผ่นได้ ในธรรมชาติจะพบในรูปของสารประกอบของแร่ วาเนเดียมมีประโยชน์ในการทำโลหะผสม (Alloys) ส่วนมากใช้ผสมเหล็กเป็นโลหะเจือเพื่อเพิ่มสมบัติในการดึงเป็นเส้นได้ดีขึ้น ใช้ทำโลหะเจือกับอะลูมิเนียม (V-Al) ซึ่งใช้ในอุตสาหกรรมไทเทเนียม ใช้ทำปฏิกิริยาเคมีในอุตสาหกรรมโดยใช้เป็นตัวเร่ง เช่น เป็นตัวเร่งในการเตรียมกรดซัลฟิวริก เป็นตัวเร่งในกระบวนการโพลีเมอไรเซชันเพื่อเตรียมยางเอทิลีน-โพรพิลีน (ชัยวัฒน์ เจนวานิชย์, 2543)

2.4.2 ไนโอเบียม (Nb) มีอะตอมเท่ากับ 41 เป็นธาตุที่จัดอยู่หมู่ VB ในตารางธาตุ มีรัศมีอะตอมเท่ากับ 146 พิโคเมตร ไนโอเบียมเป็นโลหะทรานซิชัน มีสีเทาหายาก อ่อนนุ่ม ตีเป็นแผ่นได้ พบในแร่ไนโอไบต์ มีความแข็งและเหนียวใกล้เคียงกับทองแดง เป็นตัวนำความร้อนและไฟฟ้าที่ดี แปรรูปได้ง่าย จึงนำมาใช้ทำโลหะผสมที่มีสมบัติพิเศษ เช่น ทนแรงดัน มีความเหนียว ไม่เป็นสนิม ทนต่อการกัดกร่อนและนำไฟฟ้าได้ดีที่อุณหภูมิต่ำ นอกจากนี้ยังใช้ในอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ อุปกรณ์นิวเคลียร์ วัสดุเชื่อมข้อต่อ ส่วนประกอบของเครื่องบินและซีปนาวุธได้ (ชัยวัฒน์ เจนวานิชย์, 2543)

2.4.3 แทนทาลัม (Ta) มีอะตอมเท่ากับ 73 เป็นธาตุที่จัดอยู่หมู่ VB ในตารางธาตุ มีรัศมีอะตอมเท่ากับ 146 พิโคเมตร แทนทาลัมเป็นโลหะทนไฟ มีความแข็งและเหนียวใกล้เคียงกับเหล็กกล้า นำมาใช้ทำอุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ในเครื่องคอมพิวเตอร์ เครื่องมือสื่อสาร เครื่องส่งสัญญาณกันภัย เครื่องตั้งเวลาทำโลหะผสมที่ทนความร้อนสูงเพื่อใช้ทำบางส่วนของลำตัวเครื่องบิน ทำหัวของจรวดซีปนาวุธ อุปกรณ์ในเตาปฏิกรณ์ปรมาณู ใช้แทนทาลัมออกไซด์เคลือบเลนส์เพื่อให้มีสมบัติในการสะท้อนแสงได้ดี (ชัยวัฒน์ เจนวานิชย์, 2543)

2.4.4 โครเมียม (Cr) มีอะตอมเท่ากับ 24 เป็นธาตุที่จัดอยู่หมู่ VIB ในตารางธาตุ มีรัศมีอะตอมเท่ากับ 128 พิโคเมตร โดยที่สารโครเมียมนี้ นำมาผสมกับโลหะทำให้เกิดความแข็งแรงมีความเหนียว ทนทาน ทำให้โลหะไม่เป็นสนิมทนต่อการกัดกร่อน นำมาทำชิ้นส่วนรถยนต์หรือชิ้นส่วนแต่งมอเตอร์ไซด์ ใช้ในอุตสาหกรรมฟอกหนัง ใช้เป็นส่วนผสมของสารฆ่าเชื้อราและน้ำยารักษาเนื้อไม้ ใช้ในกระบวนการผลิตอิฐทนความร้อน ใช้เป็นตัวเร่งปฏิกิริยาเคมี หรือใช้ในทางการแพทย์ เช่น ไอโซโทปของโครเมียม (Chromium Isotope) (ชัยวัฒน์ เจนวานิชย์, 2543)

2.4.5 โมลิบดีนัม (Mo) มีอะตอมเท่ากับ 42 เป็นธาตุที่จัดอยู่หมู่ VIB ในตารางธาตุ มีรัศมีอะตอมเท่ากับ 139 พิโคเมตร นำไปใช้ในอุตสาหกรรมโลหะเจือที่มีเหล็กเป็นพื้นฐาน เช่น การผลิตเหล็กกล้า เหล็กปลอดสนิม (Stainless Steel) เหล็กกล้าใช้ทำเครื่องมือ และเหล็กหล่อ เพื่อให้

โลหะเจือที่ได้มีสมบัติดีขึ้น เช่น แข็งแกร่งขึ้น ต่อต้านการผุกร่อนและการขึ้นสนิมดีขึ้นและช่วยให้การหล่อทำได้ง่ายขึ้น (ชัยวัฒน์ เจนวานิชย์, 2543)

2.4.6 ทังสเทน (W) มีอะตอมเท่ากับ 74 เป็นธาตุที่จัดอยู่หมู่ VIB ในตารางธาตุ มีรัศมีอะตอมเท่ากับ 139 พิโคเมตร ทังสเทนเป็นธาตุโลหะทรานซิชันสีขาวเทาแข็งและหนัก พบมากในแร่หลายชนิดประกอบด้วยวูลแฟรมไต์ (Wolframite) และซีไรต์ (Scheelite) ทังสเทนในรูปบริสุทธิ์ใช้ในงานไฟฟ้าโดยเฉพาะไส้หลอดไฟฟ้า และการผลิตโลหะผสม ใช้ผสมเหล็กกล้าในการทำเครื่องมือหรืออุปกรณ์ที่ทนความร้อนสูง ทำเครื่องจักรกล หัวเจาะเกราะ ใบมีด ตะไบ ใบเลื่อย ไส้หลอดไฟฟ้า และหลอดวิทยุ นอกจากนี้ ยังใช้ในการทำอุตสาหกรรมเครื่องปั้นดินเผาและเครื่องแก้ว (ชัยวัฒน์ เจนวานิชย์, 2543)

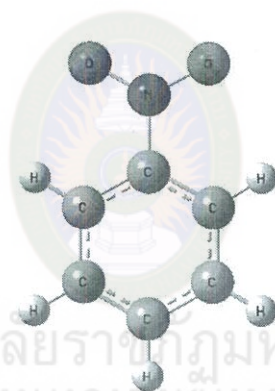
2.4.7 แมงกานีส (Mn) มีอะตอมเท่ากับ 25 เป็นธาตุที่จัดอยู่หมู่ VIIB ในตารางธาตุ มีรัศมีอะตอมเท่ากับ 127 พิโคเมตร ใช้ในอุตสาหกรรมเภสัชกรรม อาหาร เป็นตัวเร่งของปฏิกิริยาและในการวิเคราะห์ ใช้ในการควบคุมปริมาณกำมะถันในกระบวนการผลิตเหล็กกล้า และทำโลหะเจือทั้งที่มีเหล็กและไม่มีเหล็กเป็นองค์ประกอบ โลหะเจือระหว่างแมงกานีสและเหล็ก (และธาตุอื่น ๆ เล็กน้อย) เรียกว่าเฟอร์โรแมงกานีส (Ferromanganese) ซึ่งโลหะเจือของแมงกานีสมีสมบัติแข็งแรงและสามารถป้องกันการขึ้นสนิมได้เป็นอย่างดี (ชัยวัฒน์ เจนวานิชย์, 2543)

2.4.8 เทคนีเชียม (Tc) เลขอะตอมเท่ากับ 43 เป็นธาตุที่จัดอยู่หมู่ VIIB ในตารางธาตุ มีรัศมีอะตอมเท่ากับ 136 พิโคเมตร เทคนีเชียมสามารถใช้ในการด้านการแพทย์หรือรังสีวิทยา ตัวอย่าง นำรังสีของเทคนีเชียมเข้าสู่กระแสเลือดแล้วจะไปสู่ตับและสมอง และที่อื่น ๆ อีก ก็ทำให้สามารถสร้างแผนผังแสดงกายวิภาคและพยาธิ สภาพอย่างหายาบ ๆ ของอวัยวะต่าง ๆ เหล่านั้นได้ (ชัยวัฒน์ เจนวานิชย์, 2543)

2.4.9 รีเนียม เลขอะตอมเท่ากับ 75 เป็นธาตุที่จัดอยู่หมู่ VIIB ในตารางธาตุ มีรัศมีอะตอมเท่ากับ 137 พิโคเมตร รีเนียมเป็นธาตุโลหะทรานซิชันสีขาวเงิน รีเนียมมีสมบัติทางเคมีคล้ายแมงกานีส ใช้ประโยชน์ในการผลิตโลหะผสม เนื่องจากรีเนียมเป็นโลหะที่ค่อนข้างมีน้อยหรือหายาก และมีราคาแพง การใช้งานจึงใช้ในกรณีเฉพาะที่ต้องการการใช้ประโยชน์ สมบัติจุดหลอมเหลวสูงและความแข็งแรง ณ อุณหภูมิสูง ใช้เจือกับโลหะอื่น เช่น Re-N, Re-Mo, Re-Ir, Re-Pt เพื่อใช้ทำวัสดุเทอร์โมคอมเพล็กซ์ (Thermocomplex) , วัสดุหน้าสัมผัสไฟฟ้า(Electrical Contacts) และส่วนประกอบของหลอดไฟ ฯลฯ นอกจากนี้รีเนียมและสารประกอบบางสารใช้เป็นตัวเร่งของปฏิกิริยาบางชนิดได้ด้วย (ชัยวัฒน์ เจนวานิชย์, 2543)

## 2.5 อนุพันธ์ของเบนซีน

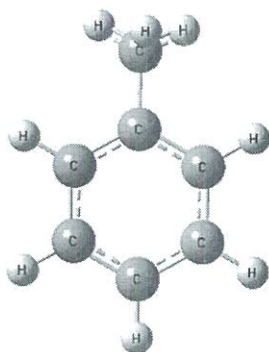
2.5.1 ไนโตรเบนซีน เป็นสารประกอบอินทรีย์ที่มีสูตรทางเคมี  $C_6H_5NO_2$  หากอยู่ในสถานะของเหลวจะออกสีเหลือง มีความมันไม่ละลายน้ำมีกลิ่นคล้ายอัลมอนด์ หากอยู่ในสถานะของแข็งจะออกสีเหลืองหรือสีเขียว ไนโตรเบนซีนใช้ในอุตสาหกรรมอย่างแพร่หลาย อาทิ ใช้เป็นสารตั้งต้นในการผลิตสารอื่น ใช้ในห้องปฏิบัติการ ใช้เป็นตัวทำละลาย ผลิตภัณฑ์น้ำมันหล่อลื่น ผลิตภัณฑ์ฆ่าแมลงและยาสังเคราะห์ เป็นต้น การสัมผัสกับแก๊สไนโตรเบนซีนจะทำให้ระคายเคืองต่ออวัยวะต่าง ๆ เช่น ผิวหนัง ตาและทางเดินหายใจ ทำลายอวัยวะภายใน ตับ ม้าม ไตและระบบประสาทส่วนกลาง หากได้รับเกินปริมาณอาจก่อให้เกิดโรค เมตเฮโมโกลบินนีเมีย และถึงแก่ชีวิตได้ (ศูนย์ความเป็นเลิศด้านการจัดการสารและของเสียอันตราย, 2546) โครงสร้างของไนโตรเบนซีนแสดงดังภาพที่ 2.9



ภาพที่ 2.9 โครงสร้างของไนโตรเบนซีน (ภาพโดยโปรแกรม Gaussview 3.0)

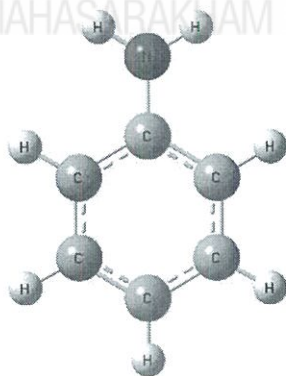
2.5.2 โทลูอิน โทลูอิน มีสูตรทางเคมี  $C_6H_5CH_3$  รู้จักกันในชื่อ เมทิลเบนซีน หรือ ฟีนิลมีเทน เป็นของเหลวที่ไม่ละลายในน้ำ กลิ่นคล้ายสีทาบ้าน เป็นสารประกอบอะโรมาติกที่นิยมใช้ในอุตสาหกรรมเป็นสารตั้งต้นและเป็นตัวทำละลาย เช่นเดียวกับตัวทำละลายอื่นๆ โทลูอินเป็นสารระเหยที่มีคนสูดดมและเกิดอาการเสพติดได้ ไม่ควรสูดดมไอระเหยของโทลูอินเพราะส่งผลต่อสุขภาพระดับต่ำถึงปานกลางทำให้เหนื่อย สับสน อ่อนเพลีย อาการคล้ายเมาเหล้า เสียความทรงจำ คลื่นเหียน เบื่ออาหาร สูญเสียการได้ยินและการมองเห็นสี อาการเหล่านี้จะหายไปเมื่อหยุดสัมผัส การหายใจเอาไอระเหยเข้าไปในระดับสูงในเวลาสั้น คลื่นเหียน ล้ม หรือหมดสติ อาจถึงตายได้ โทลูอินมีความเป็นพิษน้อยกว่าเบนซีน จึงถูกนำมาใช้แทนที่ในฐานะตัวทำละลายอะโรมาติกในการเตรียมสารเคมี ตัวอย่างเช่น เบนซีนเป็นสารก่อมะเร็ง แต่โทลูอินมีฤทธิ์เป็นสารก่อมะเร็งน้อยกว่า (กองโรคจากการประกอบอาชีพและสิ่งแวดล้อม, 2014) โครงสร้างของโทลูอินแสดงดังภาพที่ 2.10





ภาพที่ 2.10 โครงสร้างของโทลูอีน (ภาพโดยโปรแกรม Gaussview 3.0)

2.5.3 อนิลิน เป็นสารประกอบอินทรีย์มีสูตรทางเคมี  $C_6H_5NH_2$  ประกอบด้วยหมู่อะมิโนติดอยู่ต่ออยู่ที่ปลายวงเบนซีน ใช้ในอุตสาหกรรมอย่างแพร่หลาย เช่นเป็นสารตั้งต้นหลักให้โพลียูรีเทน เอมีน นั้นเป็นสารระเหยที่มีกลิ่นคล้ายกลิ่นสัตว์เน่า ติดไฟได้ง่ายมีคุณสมบัติให้ความร้อนเหมือนสารประกอบอะโรมาติก อนิลินนั้นเป็นสารที่เป็นพิษหากเข้าสู่ร่างกายผ่านการสูดดม หรือหากสัมผัสผ่านผิวหนังได้ อนิลินจัดเป็นสารอันตรายในกลุ่มที่ 3 ตามระดับความปลอดภัย IARC หากสูดดมเข้าไปจะทำให้เกิดอาการหายใจติดขัด คลื่นไส้ อาเจียน คอแห้ง วิงเวียน อ่อนเพลีย หัวใจเต้นช้า หัวใจเต้นผิดปกติ หรือในปริมาณที่กำหนดอาจทำให้เกิดอาการโคม่าและเสียชีวิตเนื่องจากหัวใจล้มเหลวได้ นอกจากนี้อนิลินยังเป็นสารที่ก่อให้เกิดมะเร็ง (ศูนย์ข้อมูลพิษวิทยา, 2544) โครงสร้างของอนิลินแสดงดังภาพที่ 2.11



ภาพที่ 2.11 โครงสร้างของอนิลิน (ภาพโดยโปรแกรม Gaussview 3.0)

## 2.6 เคมีคำนวณ (Computational Chemistry)

เคมีคำนวณ เป็นอีกสาขาหนึ่งในวิชาเคมีที่ใช้การจำลองด้วยระบบคอมพิวเตอร์ช่วยในการคำนวณและแก้ปัญหา เคมีคำนวณนั้นมีพื้นฐานมาจากทฤษฎีการคำนวณ รวมถึงทฤษฎีควอนตัม นำมารวมเข้ามามีใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อให้เกิดศักยภาพในการวิเคราะห์ ซึ่งเคมีคำนวณนี้สามารถคำนวณโครงสร้าง คุณสมบัติของโมเลกุล พลังงานโมเลกุล พลังงานการเกิดปฏิกิริยาได้ ในการคำนวณเหล่านี้เป็นเรื่องยากที่จะวัดด้วยวิธีปกติ แต่หากจะสะดวกและได้ผลลัพธ์ที่ดีมีความคลาดเคลื่อนต่ำเมื่อคำนวณในโปรแกรมคอมพิวเตอร์ ผลการคำนวณที่ได้นั้นมีค่าใกล้เคียงการทดลองในห้องปฏิบัติการและเสริมข้อมูลในการทดลองในห้องปฏิบัติการได้ อีกทั้งยังสามารถคาดการณ์ปรากฏการณ์ทางเคมีที่ยังไม่ได้มีการสังเกตมาก่อน ปัจจุบันนั้นมีการศึกษาเคมีคำนวณอย่างกว้างขวางในการออกแบบวัสดุศาสตร์หรือด้านเภสัชกรรมก่อนที่จะนำมาผลิตเป็นวัสดุจริง และงานด้านอื่น ๆ อีกมากมาย

ในการคำนวณหาโครงสร้างและสมบัติของโมเลกุลใด ๆ สามารถหาได้จากการแก้สมการทางคณิตศาสตร์วิธีดังกล่าวเรียกว่า การสร้างแบบจำลองโมเลกุล (Molecular modeling) วิธีสร้างแบบจำลองโมเลกุลจึงเป็นอรรถทางเลือกหนึ่งในการหาโครงสร้างของสาร ซึ่งวิธีใช้ในการสร้างแบบจำลองโมเลกุลแบ่งออกเป็น

1. กลศาสตร์โมเลกุล (Molecular Mechanics)
2. กลศาสตร์ควอนตัม (Quantum Mechanics)
3. วิธีเซมิ-เอมพิริคัล (Semi-Empirical Method)
4. วิธีแอบ-อินิซิโอ (Ab Initio)
5. ทฤษฎีฟังก์ชันัลความหนาแน่น

ในทางปฏิบัติการคำนวณอินทิกรัลใช้เวลานานมากซึ่งในกรณีที่โมเลกุลมีขนาดใหญ่มากการคำนวณดังกล่าวก็เป็นไปไม่ได้ (เข้าเกินไปสำหรับจะนำผลมาใช้) จึงจำเป็นต้องประมาณค่าอินทิกรัลแทนการคำนวณโดยตรงจริง ๆ การประมาณทำได้โดยนำผลการทดลอง เช่น ศักย์ไฟฟ้าไอออไนเซชัน (Ionization; IP) พลังงานสัมพรรคภาพอิเล็กตรอน (Electron Affinity; EA) มาใช้แทนค่าอินทิกรัลใช้สมมาตรของโมเลกุลและข้อสมมุติฐานมาช่วยในการคำนวณ เช่นอะตอมในโมเลกุลที่ไม่ติดกันจะไม่ซ้อนเหลื่อมกัน (Zero Differential Overlap; ZDO) เพื่อลดการคำนวณอินทิกรัล ดังนั้นจำนวนขั้นตอนอินทิกรัลที่ต้องคำนวณจึงเหลือน้อยลง ทำให้สามารถทำให้ประยุกต์ต่อการคำนวณกับโมเลกุลขนาดใหญ่ได้ วิธีที่ใช้การประมาณพลังงานดังกล่าวเรียกว่า วิธีเซมิ-เอมพิริคัล (แต่ถ้าหากคำนวณค่าอินทิกรัลโดยตรงไม่มีการประมาณก็จะเรียกว่าวิธีแอบอินิซิโอ)

วิธีเคมี-เอมพิริคัล มีการออกแบบเพื่อใช้อธิบายระบบที่แตกต่างกันบางวิธีและออกแบบมาสำหรับอธิบายสเปกตรัม (โดยการให้สอดคล้องกับข้อมูลทางสเปกโทรสโคปี) จึงนำมาใช้อธิบายหรือพยากรณ์สเปกตรัมได้ดี แต่อาจนำมาอธิบายเกี่ยวกับพลังงานและโครงสร้างไม่ค่อยแม่นยำ จากข้อมูลทางการทดลองที่นำมาคำนวณด้วยวิธีเคมี-เอมพิริคัลจึงไม่ค่อยมีความแม่นยำ ดังนั้นการเลือกใช้วิธีเหมาะสมสำหรับงานที่ต้องการศึกษา จึงมีควรเลือกรูปแบบ AM1 และ PM3 ที่เป็นวิธีที่พัฒนาใหม่ที่สุดและมีความน่าเชื่อถือสูงกว่าอื่น ๆ

วิธีแอบอินซิโอเป็นวิธีการคำนวณโดยอาศัยทฤษฎีที่ได้จากการแก้สมการชเรอดิงเงอร์ (Schrodinger's Equation) นับเป็นวิธีที่ให้ความแม่นยำสูงแต่ใช้เวลาในการคำนวณนานจึงไม่เหมาะที่จะนำมาใช้ศึกษาโมเลกุลขนาดใหญ่ในงานวิจัยนี้จึงได้ใช้ทฤษฎีฟังก์ชันัลความหนาแน่น (Density Functional Theory, DFT) ในการคำนวณหาโครงสร้างของสารและพลังงานของสารประกอบเพราะเป็นวิธีที่มาตรฐานใช้กันอยู่ทั่วไปและให้ผลการคำนวณที่แม่นยำ ซึ่งจะแตกต่างจากวิธีเคมี-เอมพิริคัลคือไม่ขึ้นอยู่กับข้อมูลของการทดลอง

### 2.6.1 ทฤษฎีฟังก์ชันัลความหนาแน่น

ในการศึกษาทางทฤษฎีเพื่อวัดสมบัติของสาร ทฤษฎีฟังก์ชันัลความหนาแน่น เป็นวิธีที่นิยมใช้ซึ่งเหมาะสมกับการคำนวณหาสมบัติต่าง ๆ ของโมเลกุล เช่น สมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงานหรือสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ด้วยโปรแกรมคอมพิวเตอร์ทฤษฎีฟังก์ชันัลความหนาแน่นเป็นหนึ่งในกระบวนการแอบอินซิโอ โดยเริ่มจากการใช้กฎเกณฑ์หรือทฤษฎีพื้นฐานในระบบอนุภาคและใช้การประมาณบางอย่างเพื่อที่จะทำนายสมบัติของสารทั้งก้อน โดยกระบวนการดังกล่าวไม่ได้พึ่งพาหรือนำผลการทดลองมาใช้ในการคำนวณ ดังนั้นกระบวนการแบบแอบอินซิโอจึงเป็นกระบวนการที่ประสบความสำเร็จในระดับหนึ่งในการนำทฤษฎีในระดับอนุภาคมาทำนายสมบัติทางสารก่อนใหญ่ได้ หลักการเบื้องต้นของทฤษฎีฟังก์ชันัลความหนาแน่นเริ่มจากทฤษฎีบทของโฮเฮนเบิร์กและโคห์น (Hohenberg-Kohn Theorems) (Hohenberg & Kohn, 1964) ซึ่งกล่าวโดยสรุปอย่างง่ายว่า ปริมาณต่าง ๆ ที่สามารถตรวจวัดได้เป็นฟังก์ชันชันนัลของความหนาแน่นของอิเล็กตรอน และกล่าวว่าจะมีความหนาแน่นของอิเล็กตรอนรูปแบบเดียวที่ทำให้เกิดระดับพลังงานต่ำสุดในสถานะพื้นของระบบ จากทฤษฎีบทดังกล่าวและการใช้วิธีวาริเอชันนัล (Variational Method) (Paar & Yang, 1994)

### 2.6.2 สมบัติทางโครงสร้างและพลังงาน (Geometric and Energetic Properties)

โครงสร้างโมเลกุล หมายถึง โครงสร้างทางเรขาคณิต ในการคำนวณทางโครงสร้างเรขาคณิตของโมเลกุลจะให้ผลลัพธ์เป็นรูปโครงสร้างที่ประกอบด้วย ความยาวพันธะ (Bond Length) มุมระหว่างพันธะ (Bond Angle) และมุมไดฮีดรอน (Dihedron Angle)

พลังงานโมเลกุล (Molecular Energy) หมายถึง พลังงานของการรวมของโมเลกุล (Total Energy) ที่เป็นผลรวมของพลังงานที่เกิดขึ้นระหว่างนิวเคลียส (Nucleus) แรงดูดระหว่างนิวเคลียสกับอิเล็กตรอนและแรงกระทำระหว่างอิเล็กตรอน ซึ่งพลังงานรวมของโมเลกุลสามารถคำนวณได้จากโครงสร้างโมเลกุล ในการคำนวณพลังงานโมเลกุลจะคำนวณไปพร้อมกับโครงสร้างโมเลกุล และพลังงานรวมของโมเลกุลที่มีโครงสร้างเสถียรจะมีค่าเป็นลบเสมอ และโมเลกุลชนิดเดียวกันพลังงานรวมที่มีค่าต่ำสุดย่อมเสถียรกว่าพลังงานรวมของโมเลกุลที่มีค่าสูงสุด ดังนั้นโครงสร้างที่คำนวณได้จะเรียกว่า “โครงสร้างโมเลกุลที่เหมาะสม” ซึ่งเป็นโครงสร้างที่เสถียรมากกว่าหนึ่งโครงสร้างเรียกว่า โครงรูป หรือ ไอโซเมอร์

### 2.6.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ (Electronic Theory)

ระดับพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ระดับพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงานและค่าเคมีคอลอินเด็กซ์ (Chemical Index)

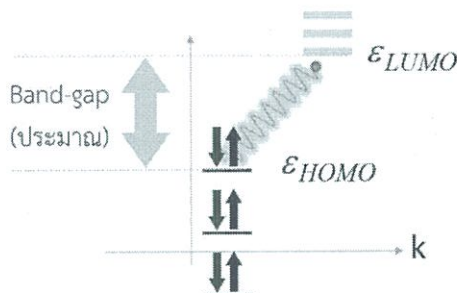
สามารถคำนวณแถบพลังงานสามารถหาได้จากผลต่างพลังงาน HOMO และ LUMO ดังสมการ

$$\Delta E_{\text{gap}} = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}} \quad (2.1)$$

โดย  $\Delta E_{\text{gap}}$  (Energy Gap) คือ ช่องว่างแถบพลังงานของที่ว่างระหว่างวงโคจรวาเลนซ์กับภายนอกอะตอม เนื่องจากอิเล็กตรอนนั้นจะเคลื่อนที่เป็นวงโคจร และอิเล็กตรอนต้องอยู่ ณ วงโคจรใด ๆ ดังนั้น อิเล็กตรอนใด ๆ จึงไม่สามารถเข้ามาอยู่ภายในแถบช่องว่างพลังงานได้

$E_{\text{LUMO}}$  (Lowest Occupied Molecular Orbitals) คือ ระดับพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนอยู่

$E_{\text{HOMO}}$  (Highest Occupied Molecular Orbitals) คือ ระดับพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (ทีปานีส ซาซियो, 2561) การคำนวณประมาณค่าแถบพลังงานจาก HOMO - LUMO ดังภาพที่ 2.13



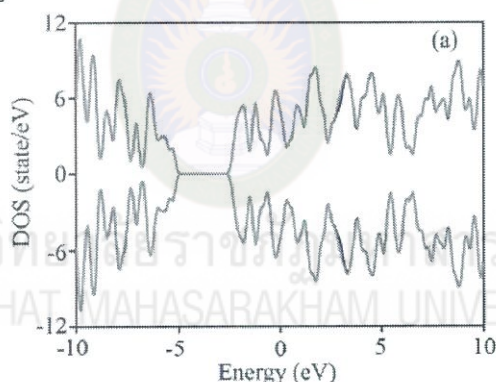
ภาพที่ 2.12 การคำนวณประมาณค่าแถบพลังงานจาก HOMO - LUMO

ที่มา : ทีปานีส ซาซियो, 2561

### 2.6.6 ความหนาแน่นสถานะ

ในระบบกลไกของระบบควอนตัมนั้น คลื่นหรืออนุภาคนั้นสามารถอยู่ในรูปแบบที่เป็นสถานะเป็นความยาวคลื่นและมีทิศทางกระจาย ในบางระบบอะตอมนั้นมีพื้นที่ว่างห่างจากกัน และประจุทำให้วัตถุนั้นแสดงความยาวคลื่นของอิเล็กตรอนออกมา บางระบบนั้นเป็นของแข็งผลึกวัตถุนั้นก็แสดงคลื่นนั้นออกมาในทิศทางเดียว ดังนั้นค่าความหนาแน่นที่จะแสดงออกมานั้นขึ้นอยู่กับประเภทของวัตถุนั้น ๆ

ความหนาแน่นสถานะของอิเล็กตรอนที่ขอบแถบระหว่างแถบเวเลนซ์และแถบการนำไฟฟ้าในวัตถุที่เป็นกึ่งนำไฟฟ้าในรูปที่ อิเล็กตรอนจะทำให้แถบการนำไฟฟ้านั้นจะสูงขึ้นทำให้ความหนาแน่นสถานะนั้นสูงขึ้นด้วย ความหนาแน่นสถานะในกราฟนั้นไม่ต่อเนื่องจึงแสดงแถบพลังงานที่ระดับพลังงานแฟร์มี (fermi level) ออกมา เนื่องจากอิเล็กตรอนนั้นสามารถเข้าไปในช่องว่างของวัสดุ นั้น ๆ ได้บางช่วง นั้นหมายความว่าอิเล็กตรอนที่ขอบแถบการนำไฟฟ้าจะต้องสูญเสียพลังงานวัสดุอย่างน้อยที่สุดให้เกิดเป็นแถบช่องว่างพลังงาน (Band gap) ความหนาแน่นสถานะที่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมที่มีการดูดซับไฮโดรเจน แสดงดังภาพที่ 2.14

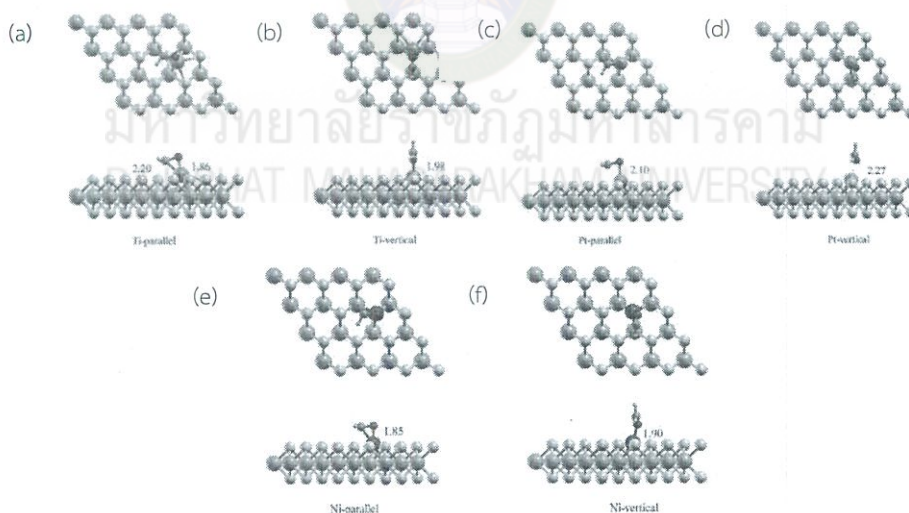


ภาพที่ 2.13 ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมที่มีการดูดซับไฮโดรเจน (Tabtimsai *et al.*, 2017)

## 2.7 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

### 2.7.1 การเติมโลหะแทรนซิชัน

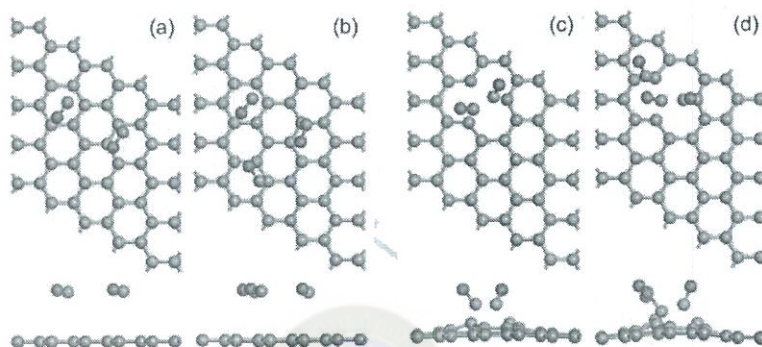
ในปี ค.ศ.2019 เต็ง และคณะ (Deng *et al.*, 2019) ได้รายงานวิจัยการศึกษาด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นของการดูดซับแก๊สฟอสฟอรัสไดไฮโดรเจนบนแผ่นโมลิบดีนัมซัลไฟด์ ( $\text{MoS}_2$ ) ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ในงานวิจัยนี้ได้ศึกษาการเติมโลหะแทรนซิชัน 4 ชนิดลงบนแผ่นโมลิบดีนัมซัลไฟด์ได้แก่ นิกเกิล แพลทินัม ไทเทเนียมและแพลลาเดียม การดูดซับแก๊สฟอสฟอรัสไดไฮโดรเจนบนแผ่นโมลิบดีนัมซัลไฟด์แบบดั้งเดิมมีค่าพลังงานการดูดซับที่ต่ำ (0.11 eV) ซึ่งให้เห็นว่าเกิดอันตรกิริยาที่ต่ำบนแผ่นโมลิบดีนัมซัลไฟด์ อย่างไรก็ตามเมื่อเติมโลหะแทรนซิชันบนแผ่นโมลิบดีนัมซัลไฟด์จะแสดงให้เห็นถึงค่าพลังงานการดูดซับเพิ่มขึ้นอย่างชัดเจน และการเติมโลหะแทรนซิชันทั้ง 4 ชนิดยังเพิ่มคุณสมบัติการดูดซับและการตรวจจับได้อย่างว่องไว ในงานวิจัยนี้ยังได้ศึกษากลไกการดูดซับสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ ความหนาแน่นสถานะและการถ่ายโอนประจุของแผ่นโมลิบดีนัมซัลไฟด์ที่เปลี่ยนแปลงหลังจากการดูดซับ ผลสรุปได้ว่าการเติมไทเทเนียมบนแผ่นโมลิบดีนัมซัลไฟด์จะเพิ่มคุณสมบัติการดูดซับได้ดีที่สุด และเหมาะสมที่จะนำมาใช้และพัฒนาเป็นเซ็นเซอร์ได้ดี โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สฟอสฟอรัสไดไฮโดรเจนแสดงดังภาพที่ 2.14



ภาพที่ 2.14 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สฟอสฟอรัสไดไฮโดรเจนทั้งสองทิศทาง แบบขนาน และแบบแนวตั้ง บนแผ่นโมลิบดีนัมซัลไฟด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน (a) Ti-Parallel (b) Ti-Vertical (c) Pt-Parallel (d) Pt-Vertical (e) Ni-Parallel (f) Ni-Vertical (Deng *et al.*, 2019)

ในปี ค.ศ.2018 หยาง และคณะ (Yang *et al.*, 2018) ได้รายงานงานวิจัยเรื่องการศึกษาด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นของการดูดซับแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์บนแผ่นแกรฟีนแบบดั้งเดิม แบบผิดปกติและแบบที่มีเติมโลหะแทรนซิชัน จากการศึกษาพบว่าแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์เกิด

การดูดซับทางกายภาพบนแผ่นแกรฟีนดั้งเดิม แบบผิวดรูปและแบบที่มีเติมโลหะแทรนซิชัน แผ่นแกรฟีนแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีความสามารถในการดูดซับแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์ที่ต่ำ ในทางตรงกันข้ามแผ่นแกรฟีนแบบผิวดรูปแสดงถึงการดูดซับที่เป็นการดูดซับทางเคมีและเกิดการอันตรกิริยาที่แข็งแรงและมีค่าพลังงานการดูดซับที่สูงเหมาะสมสำหรับนำมาผลิตเป็นเซนเซอร์ในการตรวจจับ โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์บนแผ่นแกรฟีนแบบดั้งเดิมและแบบผิวดรูปแสดงดังภาพที่ 2.15

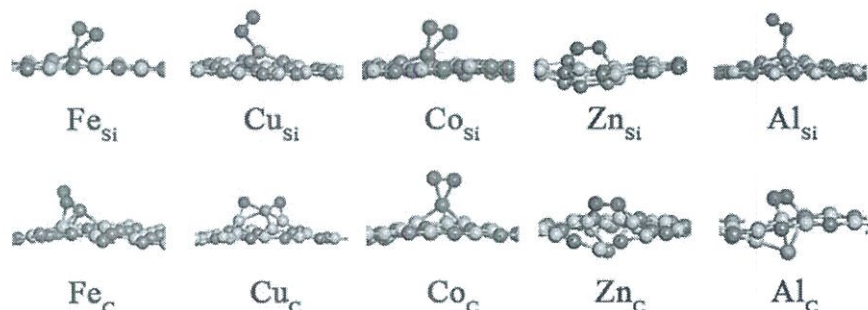


ภาพที่ 2.15 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สคาร์บอนมอนอกไซด์บนแผ่นแกรฟีน (a) แผ่นแบบดั้งเดิมที่ดูดซับแก๊ส 2 โมเลกุล (b) แผ่นแบบดั้งเดิมที่ดูดซับแก๊ส 3 โมเลกุล (c) แผ่นแบบผิวดรูปที่ดูดซับแก๊ส 2 โมเลกุล (d) แผ่นแบบผิวดรูปดูดซับแก๊ส 3 โมเลกุล (Shulin Yang *et al.*, 2018)

### 2.7.2 การดูดซับบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์

ในปี ค.ศ.2018 ซัน และ ฮู (Sun and Hu, 2018) ได้ศึกษาการดูดซับแก๊สออกซิเจนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะ 5 ชนิด ได้แก่ เหล็ก ทองแดง โคบอลต์ สังกะสีและอะลูมิเนียม จากการศึกษาด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นพบว่า แผ่นซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีเติมโลหะตรงตำแหน่งซิลิกอน มีโครงสร้างเสถียรกว่าแผ่นซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีเติมโลหะตรงตำแหน่งคาร์บอน เมื่อเปรียบเทียบความสามารถในการดูดซับแก๊สออกซิเจนของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมกับแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน พบว่าแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะตรงตำแหน่งคาร์บอนจะมีค่าพลังงานการดูดซับแก๊สออกซิเจนสูงที่สุด การเติมโลหะโคบอลต์และทองแดงตรงตำแหน่งคาร์บอนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แสดงถึงโครงสร้างที่เสถียรต่อการดูดซับแก๊สออกซิเจนได้ดีที่สุด ความหนาแน่นสถานะชี้ให้เห็นถึงการเปลี่ยนแปลงหลังการดูดซับ จากการศึกษาสรุปได้ว่าการเติมโลหะตรงตำแหน่งคาร์บอนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์เหมาะสมในการใช้ดูดซับแก๊สออกซิเจนที่สุดและสามารถนำมาผลิตเป็นเซนเซอร์ในการตรวจจับหรือกักเก็บแก๊สได้ โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สออกซิเจน

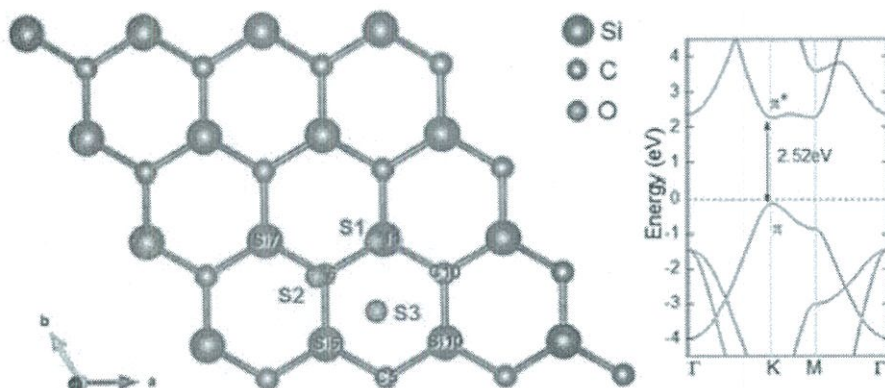
บนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนแสดงดังภาพที่ 2.16



ภาพที่ 2.16 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สออกซิเจนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน (Sun and Hu, 2018)

ในปี ค.ศ.2018 หลัว และคณะ (Luo *et al.*, 2018) ได้รายงานวิจัยเรื่องความเครียดไอโซโทโรปีคบนคุณสมบัติทางไฟฟ้าและคุณสมบัติทางแม่เหล็กของการดูดซับอะตอมออกซิเจนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ พบว่าอะตอมของออกซิเจนจะดูดซับได้ดีตรงตำแหน่งซิลิกอนมากกว่าคาร์บอน และมักดูดซับได้ดีตรงช่องกลางของหกเหลี่ยมของโครงสร้างซิลิกอนคาร์ไบด์ เมื่อศึกษาคุณสมบัติทางแม่เหล็กของการดูดซับอะตอมออกซิเจน สามารถสรุปได้ว่ามีความยืดหยุ่นไอโซโทโรปีคเกิดขึ้นในระบบจากการคำนวณทางแม่เหล็กยังพบว่าความเครียดของวัสดุเพิ่มขึ้น จากการวิเคราะห์กราฟ PDOS แสดงให้เห็นถึงการไฮบริดไดซ์ของของออร์บิทัล p-p ระหว่างออกซิเจนกับคาร์บอนและซิลิกอน อย่างไรก็ตามแสดงให้เห็นอีกว่าการดูดซับออกซิเจนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์มีการถ่ายเปลี่ยนจากความเป็นสารกึ่งโลหะไปเป็นโลหะ การดูดซับอะตอมออกซิเจนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แสดงให้เห็นถึงศักยภาพในการประยุกต์ใช้เครื่องมือในระดับนาโนได้ โครงสร้างการดูดซับอะตอมของออกซิเจนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมแสดงดังภาพที่ 2.17

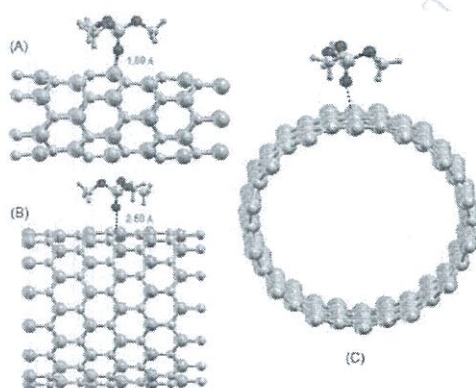




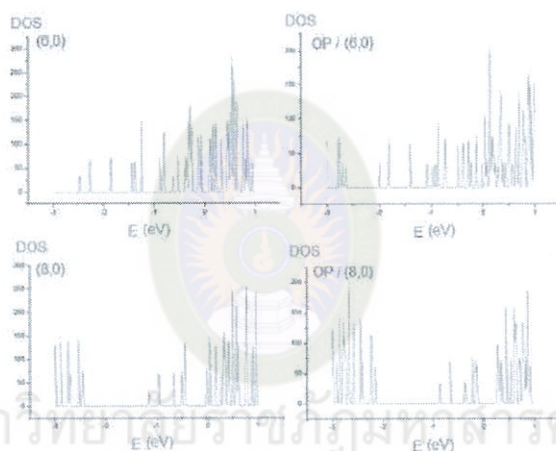
ภาพที่ 2.17 โครงสร้างการดูดซับอะตอมของออกซิเจนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (Luo *et al.*, 2018)

### 2.7.3 การดูดซับบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์

ในปี ค.ศ.2018 เออร์ซาน และคณะ (Ersan *et al.*, 2018) ได้รายงานการวิจัยเรื่องการศึกษาศักยภาพในการตรวจจับสารประกอบออร์กาโนฟอสเฟตของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ จากศึกษาพบว่าเกิดกระบวนการดูดซับของออร์กาโนฟอสเฟตขึ้น มีการถ่ายโอนประจุจากออร์กาโนฟอสเฟตไปยังท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ และเกิดการสร้างพันธะที่แข็งแรง (strong bond) ระหว่างออร์กาโนฟอสเฟตและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ ค่าแถบพลังงานของท่อมีการเปลี่ยนแปลงอย่างมีนัยสำคัญที่ 12% แสดงให้เห็นคุณสมบัติทางไฟฟ้าของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเปลี่ยนแปลงไปจากเดิม จากการศึกษาเพิ่มเติมโดยใช้ฟังก์ชันนอนอควิลีเบียมกรีน (The non-equilibrium Green) ซึ่งให้เห็นว่าท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์สามารถตรวจจับแก๊สชนิดนี้ได้อย่างรวดเร็ว ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ถือได้ว่าเป็นวัสดุชนิดหนึ่งในการใช้เป็นเซ็นเซอร์ตรวจจับแก๊สออร์กาโนฟอสเฟตได้ 16 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สออร์กาโนฟอสเฟตบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และค่าความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ แสดงดังภาพที่ 2.18 และ 2.19 ตามลำดับ



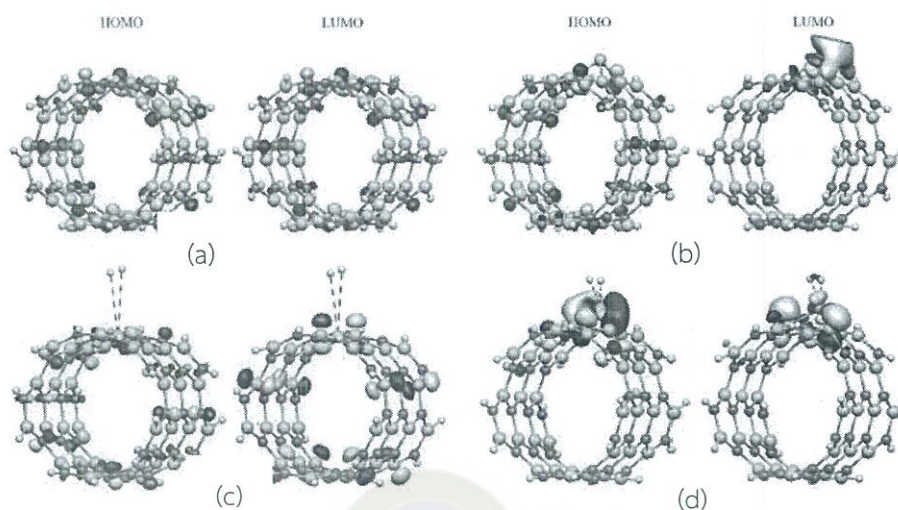
ภาพที่ 2.18 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ (Ersan *et al.*, 2018)



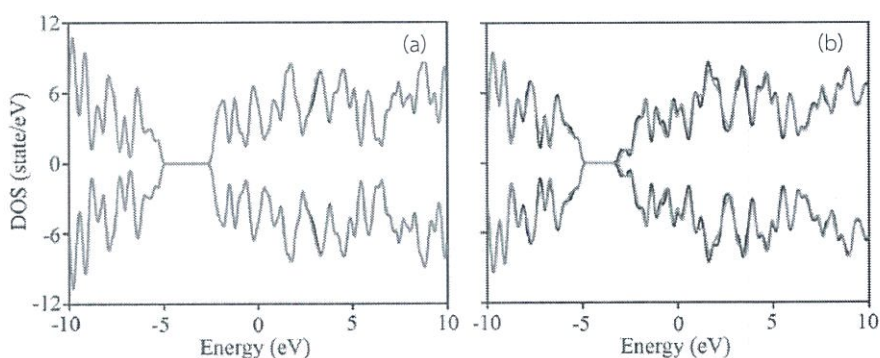
ภาพที่ 2.19 ค่าความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ (Ersan *et al.*, 2018)

ในปี 2017 ทับทิมใส และคณะ (Tabtimsai *et al.*, 2017) ได้รายงานการศึกษาการดูดซับและกักเก็บแก๊สไฮโดรเจนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมด้วยโลหะทรานซิชันหมู่ 8B จากการศึกษาด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ ผลการศึกษาพบว่า การเติมอะตอมธาตุออสเมียมมีการเกิดพันธะที่แข็งแรงที่สุด ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีความสามารถในการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนที่ต่ำ ในทางตรงกันข้ามท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันสามารถดูดซับแก๊สไฮโดรเจนได้ดี โดยเฉพาะการเติมออสเมียมบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่แสดงค่าพลังงานดูดซับแก๊สไฮโดรเจนที่ดีที่สุด นอกจากนี้ยังได้ศึกษาการกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์พบว่าการกระจายบริเวณที่มีการดูดซับและค่าความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนมีการเปลี่ยนแปลงไปจากเดิม จากการศึกษาสามารถสรุปได้ว่าการเติมโลหะทรานซิชันหมู่ 8B บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์สามารถเพิ่มความสามารถและผลิตเป็นวัสดุกักเก็บแก๊สไฮโดรเจนได้ การกระจายตัว

ออร์บิทัล HOMO และ LUMO แสดงดังภาพที่ 2.20 ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะอะตอมอะลูมิเนียม ก่อนและหลังการดูดซับไฮโดรเจน แสดงดังภาพที่ 2.21

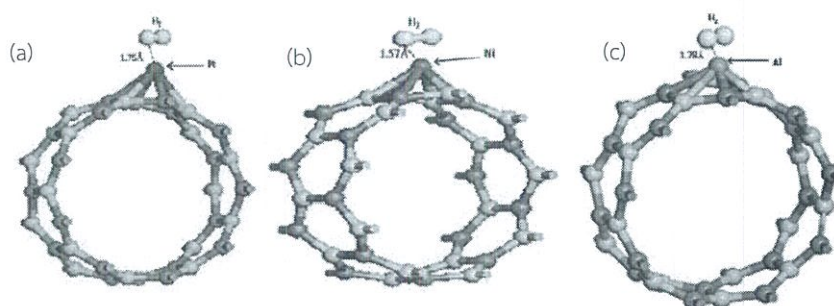


ภาพที่ 2.20 การกระจายตัวออร์บิทัล HOMO และ LUMO (a) ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (b) ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่เติมอะตอมธาตุอะลูมิเนียม (c) ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมที่ดูดซับแก๊สไฮโดรเจน 1 โมเลกุล (d) ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่เติมอะตอมธาตุอะลูมิเนียมที่ดูดซับแก๊สไฮโดรเจน 1 อะตอม (Tabtimsai *et al.*, 2017)



ภาพที่ 2.21 ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะ ออสเมียม ก่อนและหลังการดูดซับออกซิเจน (สีดำ) ก่อนดูดซับ (สีแดง) หลังดูดซับ (a) ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (b) ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะออสเมียม (Tabtimsai *et al.*, 2017)

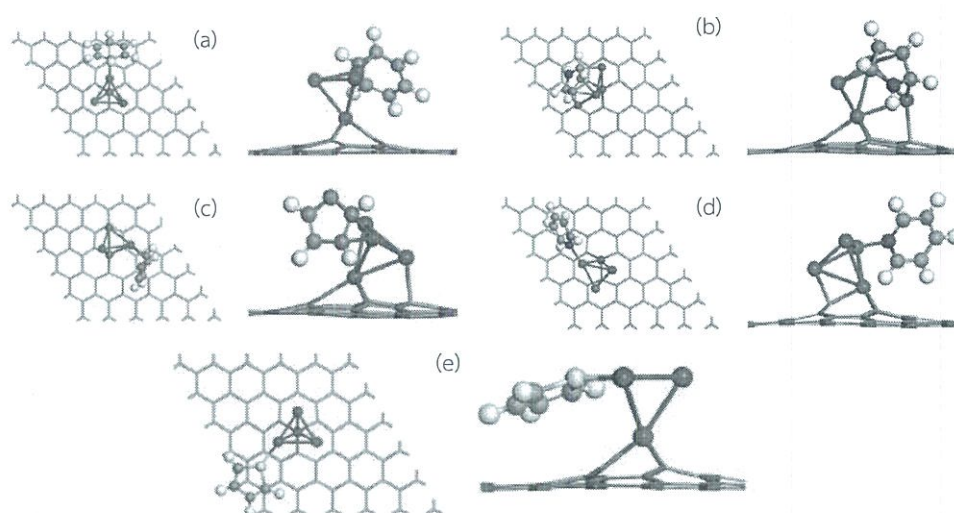
ในปี ค.ศ. 2016 ซิงห์ และ โซลันกี (Singh & Solanki, 2016) ได้รายงานการวิจัยการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการต่อ (Decorated) กับอะตอมโลหะ จากการศึกษาด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น อะตอมโลหะที่ใช้ในการต่อกับท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์มี 3 ชนิดได้แก่ แพลทินัม นิกเกิลและอะลูมิเนียม จากการศึกษาพบว่าค่าพลังงานการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการต่อกับอะตอมโลหะทั้ง 3 ชนิดมีค่าพลังงานที่เป็นการดูดซับแบบปฏิกิริยาคายความร้อน และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการต่อกับอะตอมโลหะทั้ง 3 ชนิด มีการเปลี่ยนแปลงของโครงสร้างทางอิเล็กทรอนิกส์ทั้งหมด จากการศึกษาการถ่ายโอนประจุอิเล็กตรอน (Mulliken) พบว่ามีการถ่ายโอนประจุจากแก๊สไฮโดรเจนไปยังท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการต่อกับอะตอมโลหะ และแสดงให้เห็นถึงเกิดกระบวนการดูดซับทางเคมี จากการศึกษาสามารถสรุปได้ว่าท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการต่อโลหะ 3 ชนิด สามารถนำมาพัฒนาเป็นวัสดุในการกักเก็บแก๊สไฮโดรเจนได้ โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนบนท่อซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการต่อโลหะแสดงดังภาพที่ 2.22



ภาพที่ 2.22 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนบนท่อซิกลิคอนคาร์ไบด์แบบที่มีการต่ออะตอมโลหะ (a) แพลทินัม (b) นิกเกิล (c) อะลูมิเนียม (Singh and Solanki, 2016)

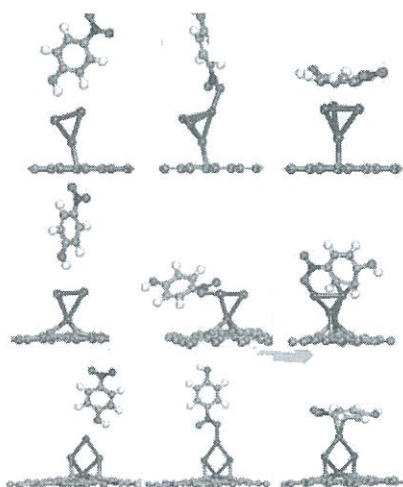
### 2.7.3 การดูดซับอนุพันธ์ของเบนซีนและสารอินทรีย์ระเหยง่าย

ในปี ค.ศ.2016 คุณาเศรษฐ และคณะ (Kunaseth *et al.*, 2016) ได้รายงานการวิจัยเรื่องการศึกษาด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นของการดูดซับสารประกอบอินทรีย์ระเหยง่ายบนแผ่นแกรฟีนแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันแบบกลุ่มก่อน 5 ชนิด แผ่นแกรฟีนแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันแบบกลุ่มก่อนถูกดูดซับสารประกอบอินทรีย์ระเหยง่ายจำนวน 5 ได้แก่ เบนซีน ฟูแรน ไพร์โรล ไพรีดีน และไทโอฟีน จากการศึกษาพบว่า การเติมโลหะแพลทินัมแบบกลุ่มก่อนชนิด Pt<sub>4</sub>-A มีพลังงานดูดซับที่ดีที่สุดและเหมาะสมการใช้ดูดซับสารประกอบอินทรีย์ระเหยง่ายที่ดี นอกจากนี้ในงานวิจัยยังศึกษาการเกิดอันตรกิริยาของสารประกอบอินทรีย์ระเหยง่ายที่ดูดซับบนแผ่นแกรฟีนแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันพบว่า เบนซีน ฟูแรนและไพร์โรล มีการไฮบริดไดซ์เซชัน (Hybridization) กับโลหะแบบ *p*-orbitals ส่วนไพรีดีนและไทโอฟีนมีการไฮบริดไดซ์เซชันกับโลหะแบบ *sp*<sup>2</sup>-orbitals โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับสารประกอบอินทรีย์ระเหยง่ายแสดงดังภาพที่ 2.23



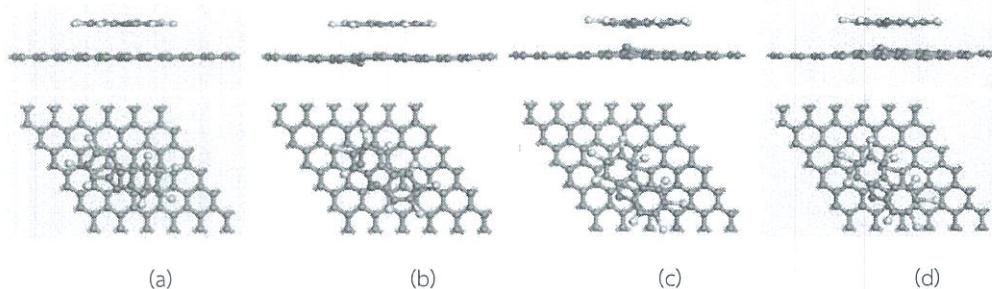
ภาพที่ 2.23 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับสารประกอบอินทรีย์ระเหยง่าย (a) เบนซีน (b) ฟลูแรน (c) ไพร์โรล (d) ไพริดีน (e) ไทโอฟิน บนแผ่นแกรฟีนแบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัมแบบกลุ่มก้อน (Kunaseh et al., 2016)

ในปี ค.ศ. 2018 แมนดีป และ ชาร์มา (Mandeep & Sharma, 2018) ได้รายงานการวิจัยเรื่องการศึกษาดัวยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นของการดูดซับพาราไนโตรฟินอลบนแผ่นแกรฟีนแบบผิดปกติและแบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัมแบบกลุ่มก้อน ในงานวิจัยนี้ทำการศึกษาดูดซับพาราไนโตรฟินอลแบบวางตั้งฉากและวางขนาน การดูดซับพาราไนโตรฟินอลบนแผ่นแกรฟีนแบบดั้งเดิมมีค่าพลังงานดูดซับที่ต่ำ แต่ในทางตรงกันข้ามแผ่นแกรฟีนแบบผิดปกติและแผ่นแกรฟีนแบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัมแบบกลุ่มก้อนมีค่าพลังงานการดูดซับที่สูงอย่างมีนัยสำคัญ การศึกษาคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ชี้ให้เห็นว่าแผ่นแกรฟีนที่เติมโลหะแพลทินัมแบบกลุ่มก้อนมีค่าแถบพลังงาน (Band gap energy) ลดลง และการศึกษาแสดงถึงการกระจายของความหนาแน่นอิเล็กตรอนทั่วแผ่นแกรฟีนจากการศึกษาสามารถสรุปได้ว่าแผ่นแกรฟีนแบบผิดปกติและแผ่นแกรฟีนแบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัมแบบกลุ่มก้อนสามารถนำมาพัฒนาเป็นวัสดุดูดซับหรือกักเก็บพาราไนโตรฟินอลได้ โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สพาราไนโตรฟินอลบนแผ่นแกรฟีนแบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัมแบบกลุ่มก้อนแสดงดังภาพที่ 2.24



ภาพที่ 2.24 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สพาราไนโตรฟีนอลบนแผ่นแกรฟีนแบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัมแบบกลุ่มก้อน (Mandeep and Sharma, 2018)

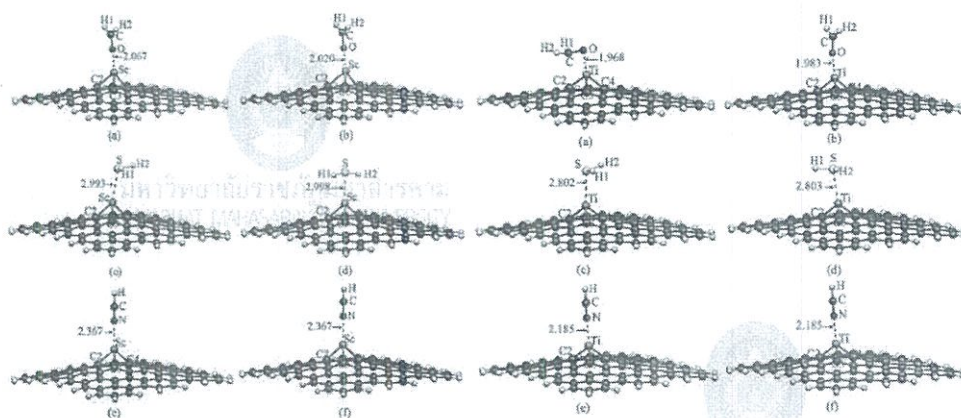
ในปี ค.ศ. 2017 โจว และคณะ (Zhou *et al.*, 2018) ได้รายงานวิจัยเรื่องการศึกษาด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นของการดูดซับแก๊สทีซีดีเอฟ (2, 3, 7, 8-tetrachlorodibenzofuran, TCDF) บนแผ่นแกรฟีนแบบผิดปกติที่มีการเติมด้วยโลหะแมงกานีสและเหล็ก จากการศึกษาพบว่า การเติมโลหะแมงกานีสและเหล็กบนแผ่นแกรฟีนแบบผิดปกติทำให้เกิดการดูดซับโมเลกุลแก๊สทีซีดีเอฟที่ว่องไว นอกจากนี้แผ่นแกรฟีนดั้งเดิมแบบผิดปกติแสดงให้เห็นว่ามีเกิดอันตรกิริยาที่รุนแรงกับโมเลกุลแก๊สทีซีดีเอฟเช่นกัน การศึกษาคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์พบว่าหลังการดูดซับแก๊สทีซีดีเอฟมีการเปลี่ยนแปลงพลังงานของแผ่นแกรฟีน แสดงให้เห็นคุณสมบัติทางไฟฟ้าที่ใช้ในการตรวจจับแก๊สทีซีดีเอฟ งานวิจัยนี้ชี้ให้เห็นว่าวัสดุแกรฟีนแบบผิดปกติที่มีการเติมโลหะแมงกานีสและเหล็กสามารถนำมาดูดซับแก๊สทีซีดีเอฟได้ดี โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สทีซีดีเอฟแสดงดังภาพที่ 2.25



ภาพที่ 2.25 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สที่ซิติโอฟ (a) บนแผ่นแกรฟีนแบบดั้งเดิม (b) แผ่นแกรฟีนแบบผิดปกติ (c) แผ่นแกรฟีนแบบผิดปกติแบบที่เติมแมงกานีส (d) แผ่นแกรฟีนแบบผิดปกติแบบที่มีการเติมเหล็ก (Zhou *et al.*, 2018)

ในปี ค.ศ.2016 ม๊อทองศรี และคณะ (Motongsri *et al.*, 2016) ได้รายงานการศึกษาด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นของการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนบนแผ่นนาโนแกรฟีนแบบที่มีเติมโบรอน อะลูมิเนียมและไนโตรเจน และศึกษาเพิ่มเติมการดูดซับแก๊สฟอรัมาลดีไฮด์ ไฮโดรเจนซัลไฟด์และไฮโดรเจนไซยาไนด์บนแผ่นนาโนแกรฟีนแบบที่มีเติมด้วยโลหะทรานซิชัน ด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ พบว่าการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนบนแผ่นแกรฟีนแบบที่มีเติมโบรอน อะลูมิเนียมและไนโตรเจน ธาตุทั้งสามชนิดมีค่าการดูดซับที่ดีกว่าแผ่นดั้งเดิม จากการศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของแผ่นแกรฟีนแบบที่มีการเติมโบรอน อะลูมิเนียมและไนโตรเจน มีการเปลี่ยนแปลงหลังการดูดซับไฮโดรเจน สามารถสรุปได้ว่าแผ่นแกรฟีนแบบที่มีการเติมโบรอน อะลูมิเนียมและไนโตรเจน สามารถเพิ่มคุณสมบัติในการกักเก็บแก๊สไฮโดรเจนได้ดี ส่วนการดูดซับแก๊สฟอรัมาลดีไฮด์ ไฮโดรเจนซัลไฟด์และไฮโดรเจนไซยาไนด์บนแผ่นแกรฟีนแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันแสดงถึงค่าพลังงานดูดซับที่สูงเหมาะสำหรับนำวัสดุมาใช้ในการตรวจจับแก๊สไฮโดรเจนซัลไฟด์และไฮโดรเจนไซยาไนด์ได้ โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สฟอรัมาลดีไฮด์ ไฮโดรเจนซัลไฟด์และไฮโดรเจนไซยาไนด์บนแผ่นนาโนแกรฟีนแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันแสดงดังภาพที่ 2.26





ภาพที่ 2.26 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับแก๊สฟอร์มัลดีไฮด์ ไฮโดรเจนซัลไฟด์และไฮโดรเจนไซยาไนด์บนแผ่นนาโนแกรไฟีนแบบที่มีการเติมด้วยโลหะแทรนซิชัน (Motongsri *et al.*, 2016)



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

## บทที่ 3

### วิธีดำเนินการวิจัย

การศึกษาเชิงทฤษฎีของโมเลกุลมีความจำเป็นต้องใช้ระบบปฏิบัติการคอมพิวเตอร์ โปรแกรมการคำนวณและการนำเสนอโครงสร้าง โดยในบทที่ 3 จะกล่าวถึงดำเนินการวิจัยซึ่งประกอบด้วยเครื่องมือและโปรแกรมที่ใช้ในการทำวิจัย แบบจำลองโมเลกุลที่ใช้ในการคำนวณและขั้นตอนในการคำนวณดังต่อไปนี้

#### 3.1 เครื่องมือและโปรแกรมที่ใช้ในการทำวิจัย

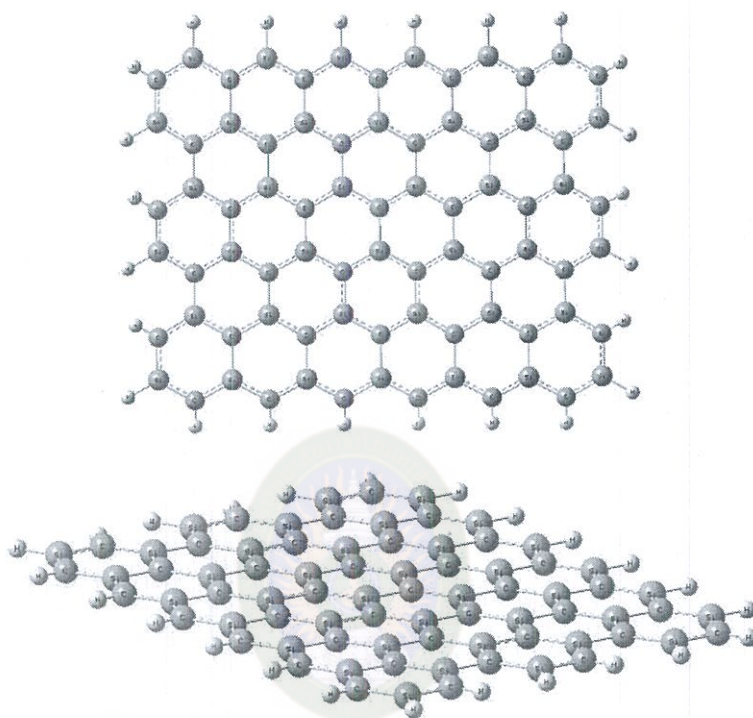
- 3.1.1 คอมพิวเตอร์ส่วนบุคคลและคอมพิวเตอร์เซิร์ฟเวอร์ระบบปฏิบัติการลินุกซ์ (Linux)
- 3.1.2 โปรแกรม เกาส์วิว 3.0 (GaussView 3.0)
- 3.1.3 โปรแกรม เกาส์เซียน 09 (Gaussian 09) (Frisch, 2008)
- 3.1.4 โปรแกรม อัลตราอีดิต 32 (Ultra Edit 32)
- 3.1.5 โปรแกรม เอเอสเอช (SSH)
- 3.1.6 โปรแกรม เกาส์ซัม 2.1.4 (Gaussum 2.1.4) (O'Boyle, Tenderholt & Lagmer, 2008)
- 3.1.7 โปรแกรม ออริจัน เวอร์ชัน 6.0 (Origin 6.0)
- 3.1.8 โปรแกรม โมเลคิว 4.0 (Molekel)
- 3.1.9 โปรแกรม อะโดบี โฟโตชอป ซีเอส 6 (Adobe Photoshop CS 6)

#### 3.2 แบบจำลองโมเลกุล

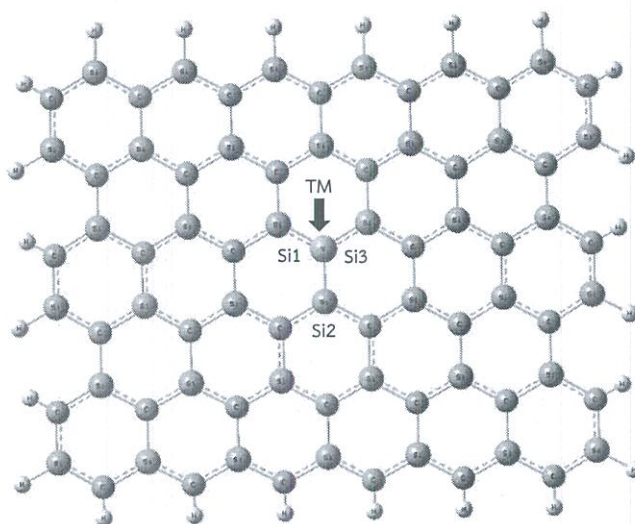
##### 3.2.1 แบบจำลองทางโครงสร้างแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์

แบบจำลองโครงสร้างของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (SiCNS) แสดงดังภาพที่ 3.1 โครงสร้างของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันลงบนตำแหน่งคาร์บอน ( $TM_C$ -SiCNS) ได้แก่ วาเนเดียม ( $V_C$ -SiCNS) ไนโอเบียม ( $Nb_C$ -SiCNS) แทนทาลัม ( $Ta_C$ -SiCNS) โครเมียม ( $Cr_C$ -SiCNS) โมลิบดีนัม ( $Mo_C$ -SiCNS) ทังสแตน ( $W_C$ -SiCNS) แมงกานีส ( $Mn_C$ -SiCNS) เทคนีเชียม ( $Tc_C$ -SiCNS) และ รีเนียม ( $Re_C$ -SiCNS) แสดงดังภาพที่ 3.2 โครงสร้างของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันลงบนตำแหน่งซิลิกอน ( $TM_S$ -SiCNS) ได้แก่ วาเนเดียม ( $V_S$ -SiCNS)

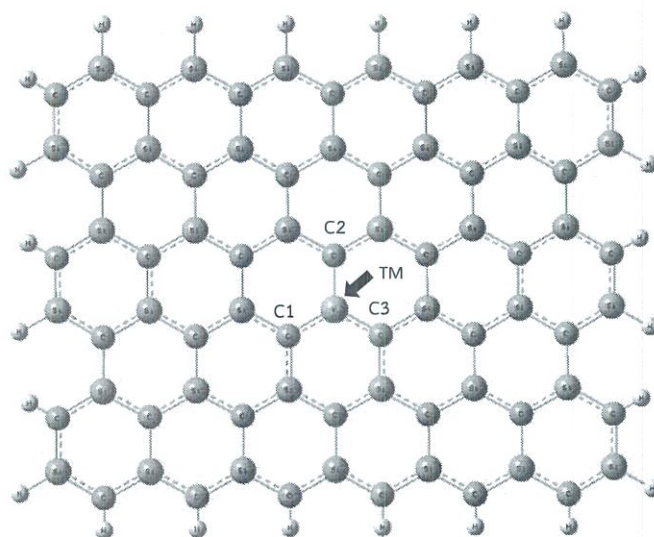
ไนโอเบียม ( $\text{Nb}_{\text{Si}}\text{-SiCNS}$ ) แทนทาลัม ( $\text{Ta}_{\text{Si}}\text{-SiCNS}$ ) โครเมียม ( $\text{Cr}_{\text{Si}}\text{-SiCNS}$ ) โมลิบดีนัม ( $\text{Mo}_{\text{Si}}\text{-SiCNS}$ ) ทังสแตน ( $\text{W}_{\text{Si}}\text{-SiCNS}$ ) แมงกานีส ( $\text{Mn}_{\text{Si}}\text{-SiCNS}$ ) เทคโนโลยีเนียม ( $\text{TC}_{\text{Si}}\text{-SiCNS}$ ) และ รีเนียม ( $\text{Re}_{\text{Si}}\text{-SiCNS}$ ) แสดงดังภาพที่ 3.3



ภาพที่ 3.1 แบบจำลองโครงสร้างของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (SiCNS) (ภาพโดยโปรแกรม เกาส์วิว 3.0)



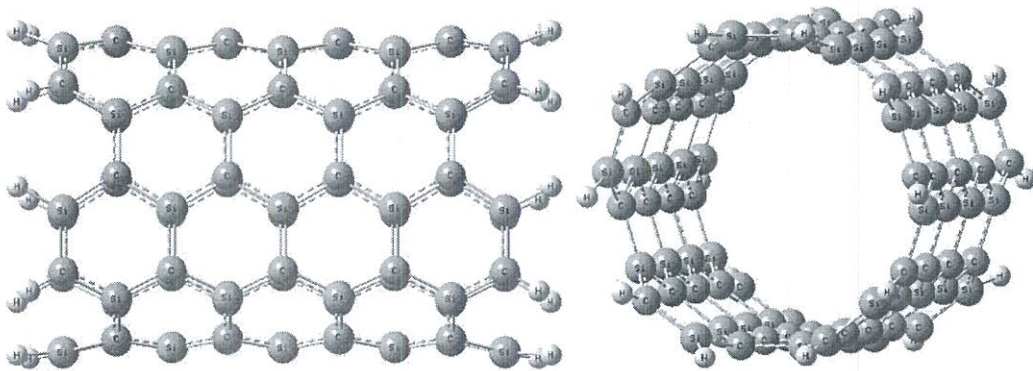
ภาพที่ 3.2 แบบจำลองโครงสร้างการเติมโลหะทรานซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $\text{TM}_{\text{C}}\text{-SiCNS}$ ) (ภาพโดยโปรแกรม เกาส์วิว 3.0)



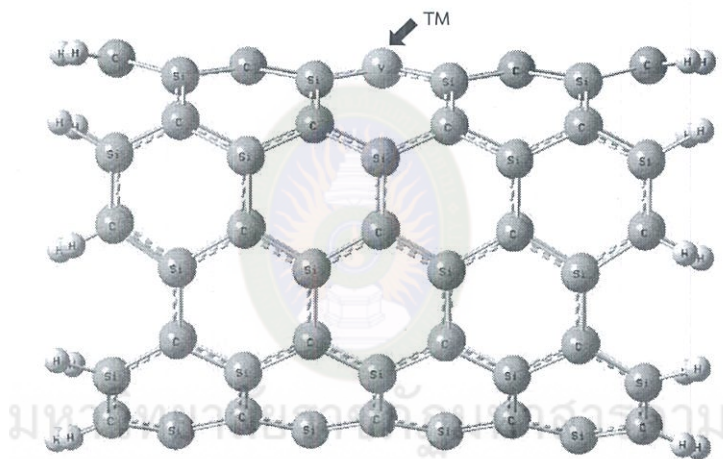
ภาพที่ 3.3 แบบจำลองโครงสร้างการเติมโลหะทรานซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $TM_{Si}$ -SiCNS) (ภาพโดยโปรแกรม เกาส์วิว 3.0)

### 3.2.2 แบบจำลองทางโครงสร้างท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์

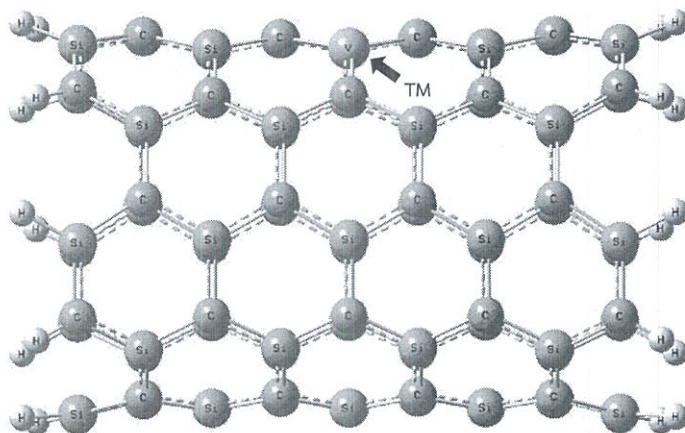
แบบจำลองโครงสร้างของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (SiCNT) แสดงดังภาพที่ 3.4 แบบจำลองโครงสร้างของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันลงบนตำแหน่งคาร์บอน ( $TM_C$ -SiCNT) ได้แก่ วาเนเดียม ( $V_C$ -SiCNT) ไนโอเบียม ( $Nb_C$ -SiCNT) แทนทาลัม ( $Ta_C$ -SiCNT) โครเมียม ( $Cr_C$ -SiCNT) โมลิบดีนัม ( $Mo_C$ -SiCNT) ทังสแตน ( $W_C$ -SiCNT) แมงกานีส ( $Mn_C$ -SiCNT) เทคนีเชียม ( $Tc_C$ -SiCNT) และ เรเนียม ( $Re_C$ -SiCNT) รีเนียม ( $Re_C$ -SiCNT) แสดงดังภาพที่ 3.5 แบบจำลองโครงสร้างของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันลงบนตำแหน่งซิลิกอน ( $TM_{Si}$ -SiCNT) ได้แก่ วาเนเดียม ( $V_{Si}$ -SiCNT) ไนโอเบียม ( $Nb_{Si}$ -SiCNT) แทนทาลัม ( $Ta_{Si}$ -SiCNT) โครเมียม ( $Cr_{Si}$ -SiCNT) โมลิบดีนัม ( $Mo_{Si}$ -SiCNT) ทังสแตน ( $W_{Si}$ -SiCNT) แมงกานีส ( $Mn_{Si}$ -SiCNT) เทคนีเชียม ( $Tc_{Si}$ -SiCNT) และ รีเนียม ( $Re_{Si}$ -SiCNT) แสดงดังในภาพที่ 3.6



ภาพที่ 3.4 แบบจำลองโครงสร้างของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (SiCNT) (ภาพโดยโปรแกรม เกลาส์วิว 3.0)



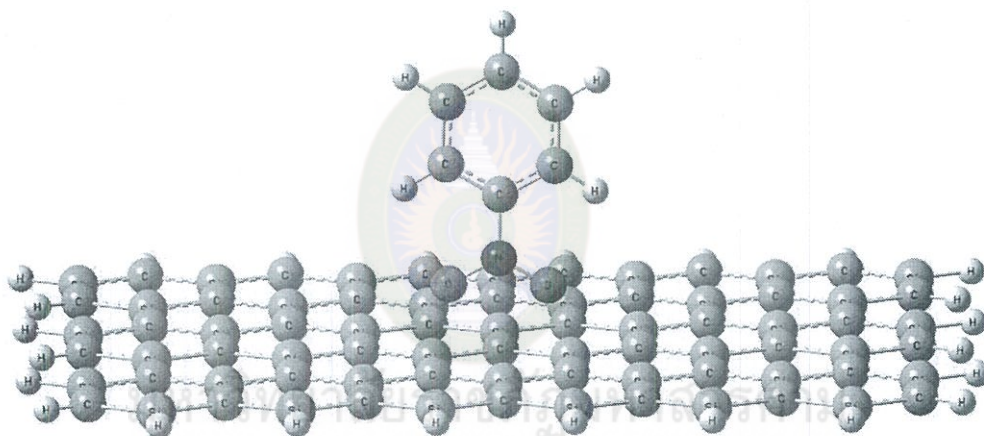
ภาพที่ 3.5 แบบจำลองโครงสร้างการเติมโลหะทรานซิชันบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งคาร์บอน (TM<sub>C</sub>-SiCNT) (ภาพโดยโปรแกรม เกลาส์วิว 3.0)



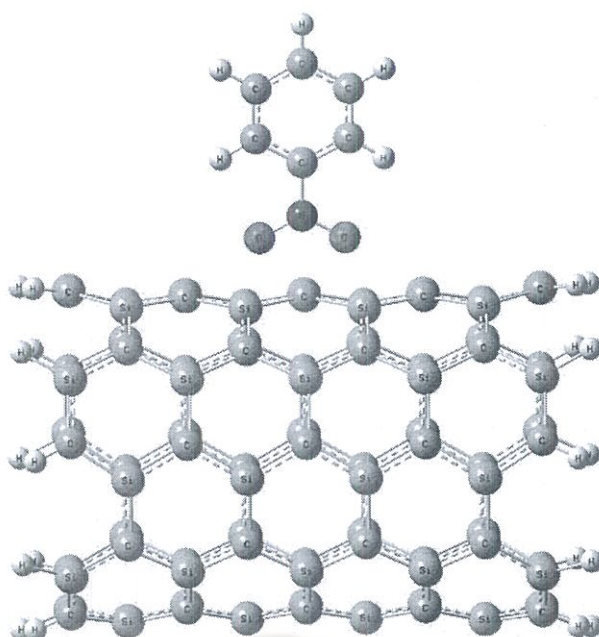
ภาพที่ 3.6 แบบจำลองโครงสร้างการเติมโลหะทรานซิชันบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งซิลิกอน (TM<sub>Si</sub>-SiCNT) (ภาพโดยโปรแกรม เกลาส์วิว 3.0)

### 3.2.3 แบบจำลองการดูดซับไนโตรเบนซีน

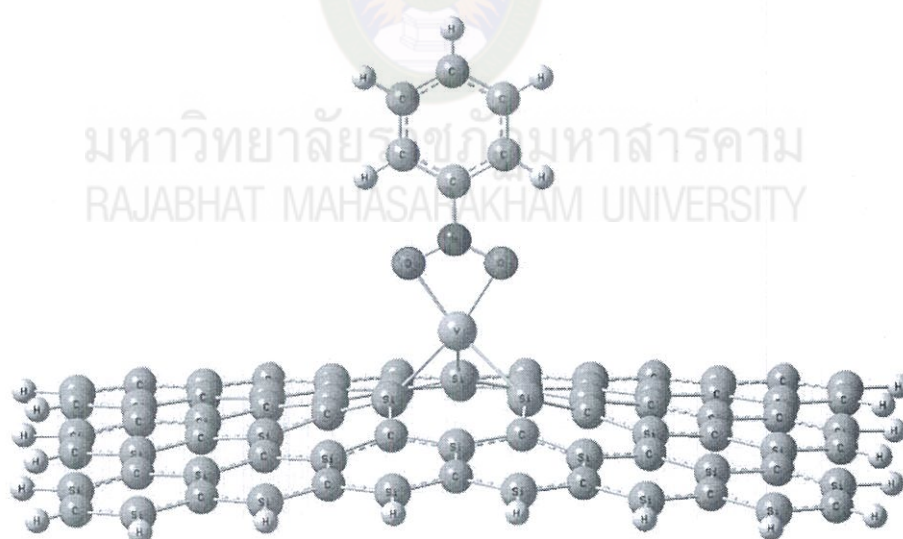
แบบจำลองทางโครงสร้างการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (nitrobenzene/SiCNS) และบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (nitrobenzene/SiCNT) แสดงดังภาพที่ 3.7 และ 3.8 ตามลำดับ แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทนที่ตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/TM<sub>C</sub>-SiCNS) และซิลิกอน (nitrobenzene/TM<sub>Si</sub>-SiCNS) แสดงดังภาพที่ 3.9 และ 3.10 ตามลำดับ แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับไนโตรเบนซีนบน-ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทนที่ตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/TM<sub>C</sub>-SiCNT) และซิลิกอน (nitrobenzene/TM<sub>Si</sub>-SiCNT) แสดงดังภาพที่ 3.11 และ 3.12 ตามลำดับ



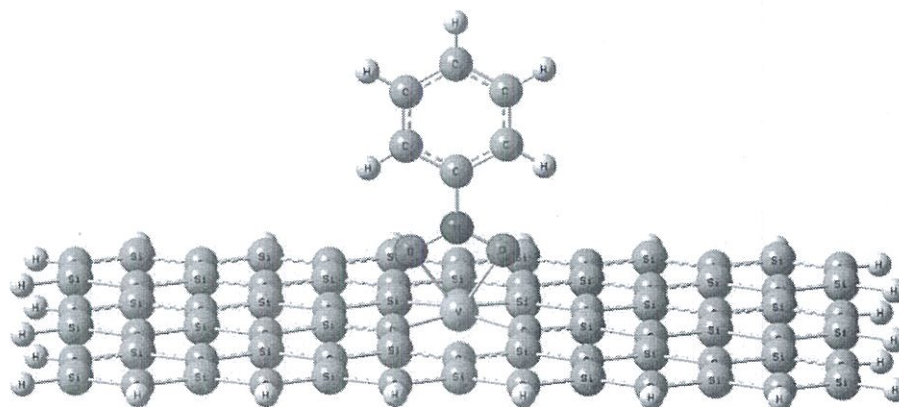
ภาพที่ 3.7 แบบจำลองทางโครงสร้างการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (Nitrobenzene/SiCNS) (ภาพโดยโปรแกรม เกาส์วิว 3.0)



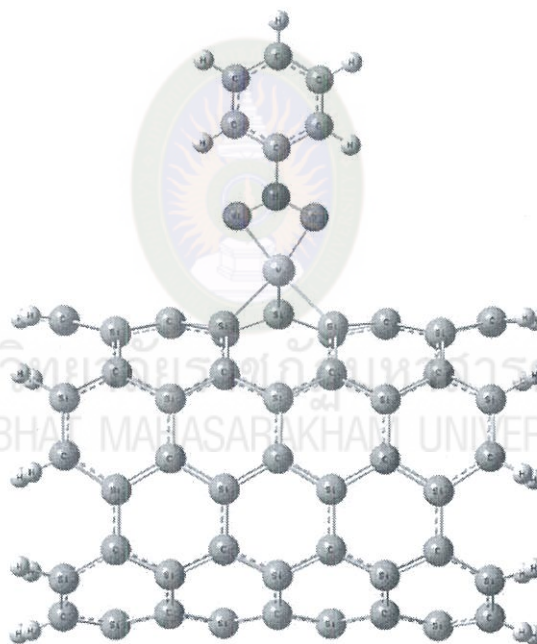
ภาพที่ 3.8 แบบจำลองทางโครงสร้างการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (nitrobenzene/SiCNT) (ภาพโดยโปรแกรม เกาส์วิว 3.0)



ภาพที่ 3.9 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/TM<sub>c</sub>-SiCNS) (ภาพโดยโปรแกรม เกาส์วิว 3)

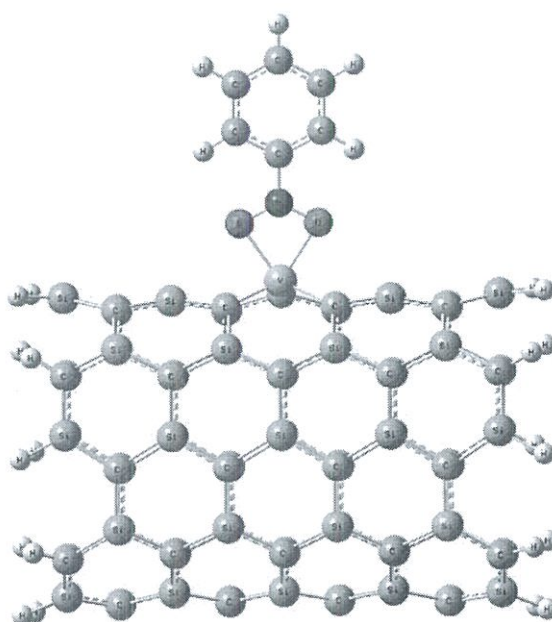


ภาพที่ 3.10 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/TM<sub>Si</sub>-SiCNS) (ภาพโดยโปรแกรม เกาส์วิว 3.0)



ภาพที่ 3.11 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/TM<sub>C</sub>-SiCNT) (ภาพโดยโปรแกรม เกาส์วิว 3.0)

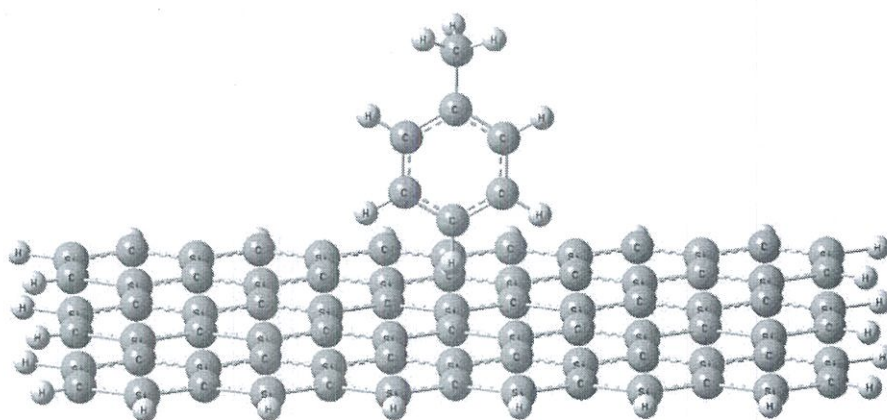




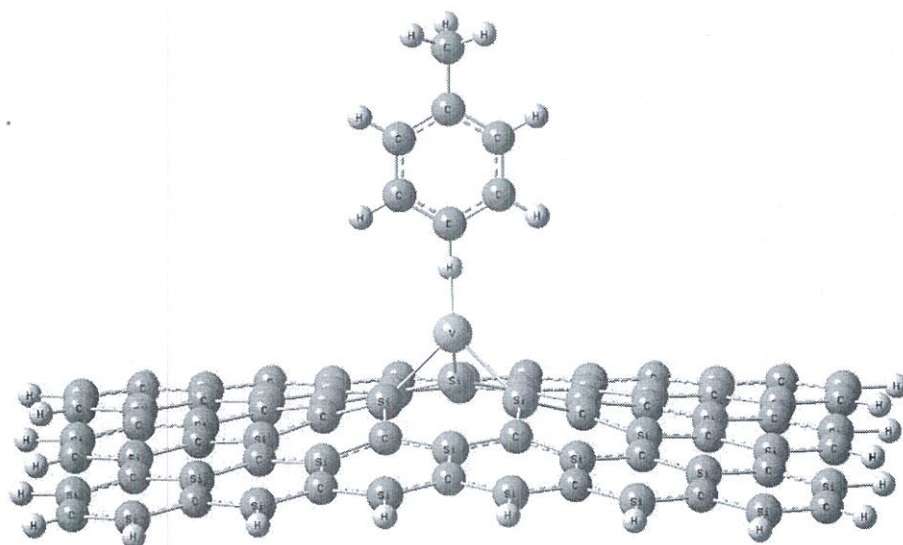
ภาพที่ 3.12 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/TM<sub>Si</sub>-SiCNT) (ภาพโดยโปรแกรม เกาส์วิว 3.0)

### 3.2.4 แบบจำลองการดูดซับโทลูอิน

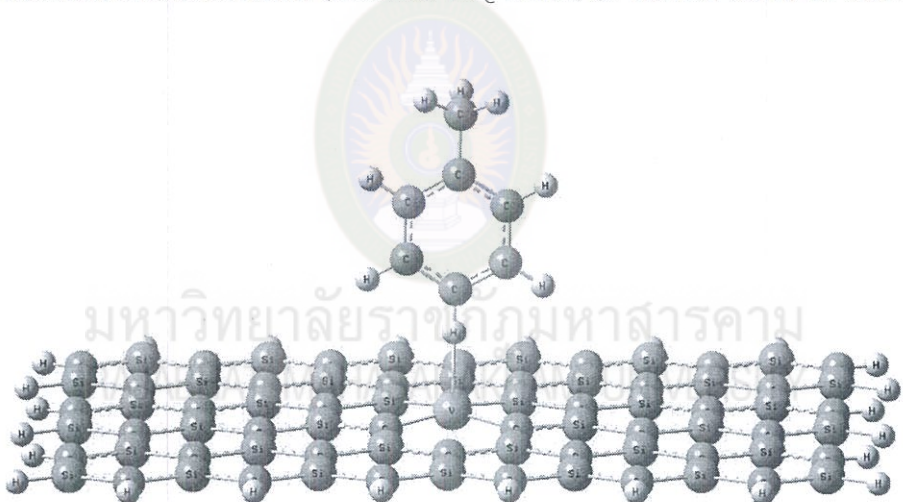
แบบจำลองทางโครงสร้างการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (toluene/SiCNS) แสดงดังภาพที่ 3.13 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน (toluene/TM<sub>C</sub>-SiCNS) และซิลิกอน (toluene/TM<sub>Si</sub>-SiCNS) แสดงดังภาพที่ 3.14 และ 3.15 ตามลำดับ



ภาพที่ 3.13 แบบจำลองทางโครงสร้างการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (toluene/SiCNS) (ภาพโดยโปรแกรม เกาส์วิว 3.0)



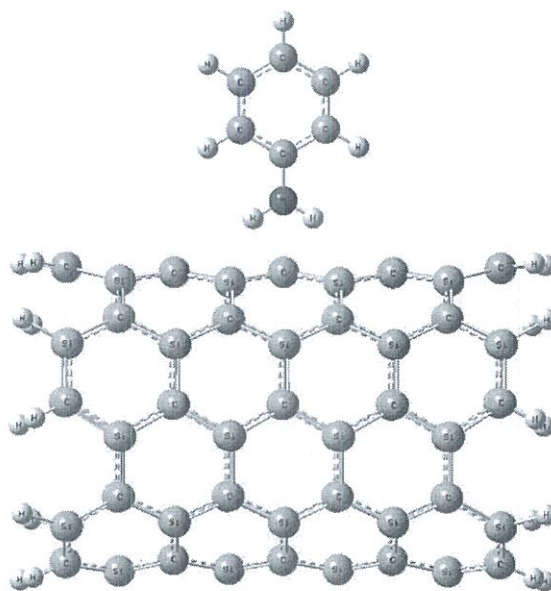
ภาพที่ 3.14 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน (toluene/TM<sub>C</sub>-SiCNS) (ภาพโดยโปรแกรม เกาส์วิว 3)



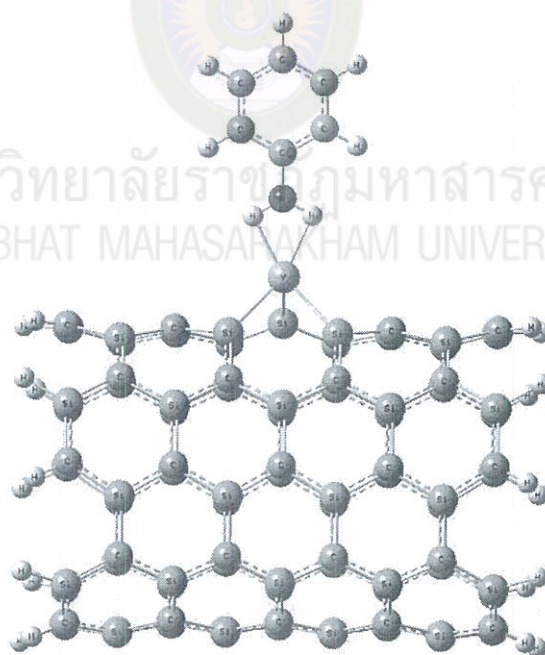
ภาพที่ 3.15 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน (toluene/TM<sub>Si</sub>-SiCNS) (ภาพโดยโปรแกรม เกาส์วิว 3.0)

### 3.2.5 แบบจำลองการดูดซับอนิซีน

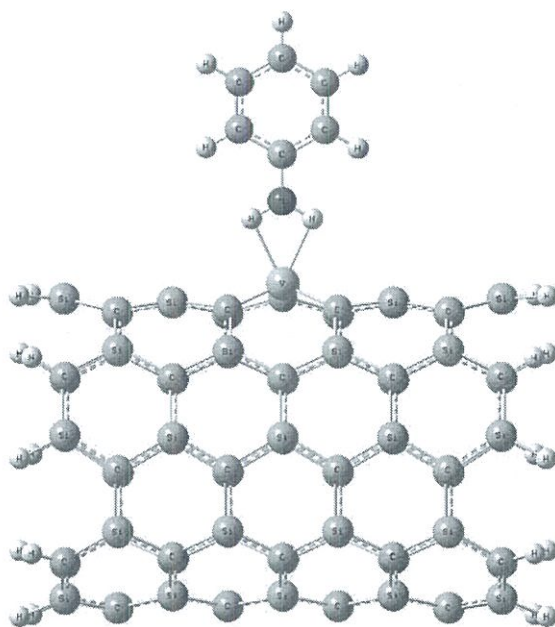
แบบจำลองทางโครงสร้างการดูดซับอนิซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (aniline/SiCNT) แสดงดังภาพที่ 3.16 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับอนิซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน (aniline/TM<sub>C</sub>-SiCNT) และซิลิกอน (aniline/TM<sub>Si</sub>-SiCNT) แสดงดังภาพที่ 3.17 และ 3.18 ตามลำดับ



ภาพที่ 3.16 แบบจำลองทางโครงสร้างการดูดซับอนิลินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (aniline/SiCNT) (ภาพโดยโปรแกรม เกลาส์วิว 3.0)



ภาพที่ 3.17 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับโทลูอินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทนซิซันตรงตำแหน่งคาร์บอน (toluene/TM<sub>c</sub>-SiCNT) (ภาพโดยโปรแกรม เกลาส์วิว 3.0)



ภาพที่ 3.18 แบบจำลองโครงสร้างการดูดซับอนินีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน (aniline/TM<sub>5</sub>-SiCNT) (ภาพโดยโปรแกรม เกาส์วิว 3.0)

### 3.3 ขั้นตอนการคำนวณ

ใช้โปรแกรมเกาส์วิว 3.0 ในการสร้างแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม จากนั้นเติมโลหะแทรนซิชัน 9 ชนิด (V, Nb, Ta, Cr, Mo, W, Mn, Tc, และ Re) ตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนที่อยู่ตรงกลางของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม สร้างโมเลกุลของอนุพันธ์ของเบนซีน (ไนโตรเบนซีน โทลูอินและอนินีน) จากนั้นนำโครงสร้างที่เสถียรของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันนำมาดูดซับด้วยโมเลกุลของไนโตรเบนซีน โทลูอินและอนินีน โดยวางโมเลกุลของอนุพันธ์เบนซีนให้อยู่ใกล้ตรงตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน คำนวณด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น ที่ระดับเบสิสเซต B3LYP/LanL2DZ ในการคำนวณ (Becke, 1988; A.D. Becke, 1993) ใช้โปรแกรมเกาส์เซียน 09 ในการคำนวณ (โครงสร้างที่เสถียร, ค่าพลังงานการยึดจับ, ค่าพลังงานการดูดซับ, ค่าพลังงาน HOMO และ LUMO, ประจุ NBO) ใช้โปรแกรมอัลตราอิดิท 32, และโปรแกรมเอสเอสเอส ในการคำนวณแปลงข้อมูลและอ่านข้อมูล ใช้โปรแกรม GaussSum-2.1.4 ในการคำนวณหาความหนาแน่นสถานะ สร้างภาพกราฟฟิคและภาพการพล็อตการกระจายตัวของ HOMO และ LUMO โดยโปรแกรมโมเลคิว 4.3

คำนวณพลังงานการยึดจับโลหะแทรนซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่เติมโลหะแทรนซิชัน ด้วยสมการ 3.1 แสดงดังสมการ

$$E_b = E_{TM-SiCN} - (E_{SiCN} + E_{TM}) \quad (3.1)$$

เมื่อ	$E_b$	แทน	พลังงานการยึดจับของโลหะแทรนซิชันของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์หรือท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่เติมโลหะแทรนซิชัน
	$E_{TM-SiCN}$	แทน	พลังงานทั้งหมดหลังการเติมโลหะแทรนซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์หรือท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์
	$E_{SiCN}$	แทน	พลังงานทั้งหมดของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมหรือท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม
	$E_{TM}$	แทน	พลังงานทั้งหมดของอะตอมโลหะแทรนซิชัน

พลังงานที่มีค่าติดลบมากยิ่งขึ้นแสดงถึงความเสถียรของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์หรือท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

คำนวณพลังงานการดูดซับอนุพันธ์เบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ด้วยสมการที่ 3.2

$$E_{ads} = E_{SiCNs \text{ or } SiCNT + Gas} - (E_{SiCNs \text{ or } SiCNT} + E_{Gas}) \quad (3.2)$$

เมื่อ	$E_{ads}$	แทน	พลังงานการดูดซับ
	$E_{SiCNs \text{ or } SiCNT + Gas}$	แทน	พลังงานทั้งหมดหลังการดูดซับอนุพันธ์เบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมหรือท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม
	$E_{SiCNs \text{ or } SiCNT}$	แทน	พลังงานทั้งหมดของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม
	$E_{Gas}$	แทน	พลังงานทั้งหมดของโมเลกุลอนุพันธ์ของเบนซีน

คำนวณพลังงานการดูดซับอนุพันธ์เบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันด้วยสมการที่ 3.3

$$E_{ads} = E_{TM-SiCNs \text{ or } TM-SiCNT + Gas} - (E_{TM-SiCNs \text{ or } SiCNT} + E_{Gas}) \quad (3.3)$$

เมื่อ	$E_{ads}$	แทน	พลังงานการดูดซับ
	$E_{TM-SiCNS \text{ or } TM-SiCNT + Gas}$	แทน	พลังงานทั้งหมดหลังการดูดซับ อนุพันธ์เบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอน คาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรน ซิชันหรือท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน
	$E_{TM-SiCNS \text{ or } TM-SiCNT}$	แทน	พลังงานทั้งหมดของแผ่นนาโนซิลิกอน คาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรน ซิชันและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน
	$E_{Gas}$	แทน	พลังงานทั้งหมดของโมเลกุลอนุพันธ์ ของเบนซีน

โดยพลังงานของปฏิกิริยามีค่าติดลบหมายความว่ากระบวนการดูดซับเป็นแบบคายพลังงาน (Exothermic Process) และค่าพลังงานเป็นบวกแสดงว่ากระบวนการดูดซับเป็นแบบดูดพลังงาน (Endothermic Process)

ในงานวิจัยนี้ได้ศึกษาคุณสมบัติทางโครงสร้างในเทอมของมุมพันธะและความยาวพันธะ ก่อนและหลังการดูดซับไนโตรเบนซีน โทลูอินและอนิสีน บนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน รวมถึงระยะยึดจับ หรือระยะที่ใกล้ที่สุดระหว่างโมเลกุลอนุพันธ์ของเบนซีนกับแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ ทั้งแบบดั้งเดิมและแบบที่เติมโลหะแทรนซิชัน เพื่อเปรียบเทียบลักษณะของโครงสร้างก่อนและหลังการเกิดอันตรกิริยาการดูดซับ ศึกษาสมบัติทางพลังงานจากการคำนวณค่าพลังงานการยึดจับของโลหะแทรนซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ดังสมการ 3.1 การคำนวณค่าพลังงานการดูดซับอนุพันธ์ของเบนซีนทั้ง 3 ชนิดบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนทั้งแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ดังสมการ 3.2 และ 3.3 ตามลำดับ โดยจะทำการวิเคราะห์ความสามารถในการดูดซับอนุพันธ์ของเบนซีนทั้งสามชนิดบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์หรือท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ ทั้งแบบดั้งเดิมและแบบที่เติมโลหะแทรนซิชัน และศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ และแถบพลังงานของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ โดยแถบพลังงานจะคำนวณจากผลต่างของระดับพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ และระดับพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุทั้งก่อนและหลังดูดซับอนุพันธ์ของเบนซีนทั้งสามชนิด อีกทั้งยังศึกษาการถ่ายโอนประจุโดยคำนวณประจุบางส่วน (Partial Charge Transfer, PCT) ก่อนและหลังดูดซับ

อนุพันธ์ของเบนซิน การพล็อตตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ และตำแหน่งต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่เพื่อระบุตำแหน่งของอิเล็กตรอนและศึกษาความหนาแน่นสถานะ เพื่ออธิบายอันตรกิริยาที่เกิดขึ้น พร้อมทั้งการเปลี่ยนสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ ซึ่งจะนำไปสู่การอธิบายความสามารถในการพัฒนาเป็นวัสดุสำหรับตรวจจับอนุพันธ์ของเบนซินต่อไป



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

## บทที่ 4

### ผลและอภิปรายผล

ในงานวิจัยนี้ได้ศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงาน และสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับไนโตรเจนบนคาร์บอน โทลูอีน และอนิสินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนิเชียม และรีเนียม ตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนเพื่อเป็นแนวทางในการพัฒนาวัสดุชนิดใหม่ที่สามารถนำไปประยุกต์ตรวจจับที่มีความไวและจำเพาะเจาะจง หรือใช้กักเก็บสารอนุพันธ์ของเบนซีน

#### 4.1 สมบัติทางโครงสร้าง

##### 4.1.1 สมบัติทางโครงสร้างของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทนทาลัม

โครงสร้างที่เสถียรของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (SiCNS) และแบบที่เติมโลหะแทนทาลัมตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน แสดงดังภาพที่ 4.1, 4.2 และ 4.3 ตามลำดับ สมบัติทางโครงสร้างในเทอมของความยาวพันธะและมุมพันธะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทนทาลัมแสดงดังตารางที่ 4.1 พบว่าแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C1-Si1, C1-Si2 และ C1-Si3 มีค่าเท่ากับ 1.797, 1.824 และ 1.797 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-C1-Si2, Si1-C1-Si3 และ Si2-C1-Si3 มีค่าเท่ากับ 119.4, 121.3 และ 119.4° ตามลำดับ ซึ่งพบว่าความยาวพันธะและมุมพันธะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมสอดคล้องกับงานวิจัยก่อนหน้านี้ของ Delavari & Jafari., (2018)

แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียมตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $V_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง V-Si1, V-Si2 และ V-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.423, 2.446 และ 2.423 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-V-Si2, Si1-V-Si3 และ Si2-V-Si3 มีค่าเท่ากับ 85.1, 86.3 และ 85.1° ตามลำดับ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมไนโอเบียมตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $Nb_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Nb-Si1, Nb-Si2 และ Nb-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.423, 2.446 และ 2.423 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Nb-Si2, Si1-Nb-Si3 และ Si2-Nb-Si3 มีค่าเท่ากับ 83.2, 84.6 และ 83.2° ตามลำดับ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติม

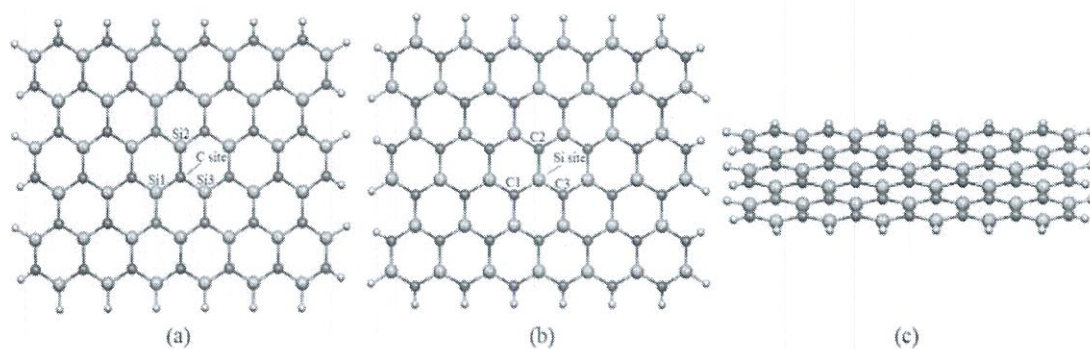


แทนทาลัมตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $Ta_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Ta-Si1, Ta-Si2 และ Ta-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.455, 2.486 และ 2.455 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Ta-Si2, Si1-Ta-Si3 และ Si2-Ta-Si3 มีค่าเท่ากับ 83.1, 84.5 และ 83.1° ตามลำดับ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียมตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $Cr_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Cr-Si1, Cr-Si2 และ Cr-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.312, 2.396 และ 2.312 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Cr-Si2, Si1-Cr-Si3 และ Si2-Cr-Si3 มีค่าเท่ากับ 85.0, 95.0 และ 85.0° ตามลำดับ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $Mo_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mo-Si1, Mo-Si2 และ Mo-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.353, 2.398 และ 2.353 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Mo-Si2, Si1-Mo-Si3 และ Si2-Mo-Si3 มีค่าเท่ากับ 85.8, 91.6 และ 85.8° ตามลำดับ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมทังสเตนตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $W_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง W-Si1, W-Si2 และ W-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.359, 2.368 และ 2.359 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-W-Si2, Si1-W-Si3 และ Si2-W-Si3 มีค่าเท่ากับ 88.1, 87.3 และ 88.1° ตามลำดับ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแมงกานีสตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $Mn_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mn-Si1, Mn-Si2 และ Mn-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.314, 2.328 และ 2.314 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Mn-Si2, Si1-Mn-Si3 และ Si2-Mn-Si3 มีค่าเท่ากับ 89.2, 90.4 และ 89.2° ตามลำดับ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมเทคนีเชียมตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $Tc_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Tc-Si1, Tc-Si2 และ Tc-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.315, 2.352 และ 2.315 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Tc-Si2, Si1-Tc-Si3 และ Si2-Tc-Si3 มีค่าเท่ากับ 88.8, 93.2 และ 88.8° ตามลำดับ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $Re_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Re-Si1, Re-Si2 และ Re-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.282, 2.312 และ 2.282 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Re-Si2, Si1-Re-Si3 และ Si2-Re-Si3 มีค่าเท่ากับ 91.1, 92.5 และ 91.1° ตามลำดับ

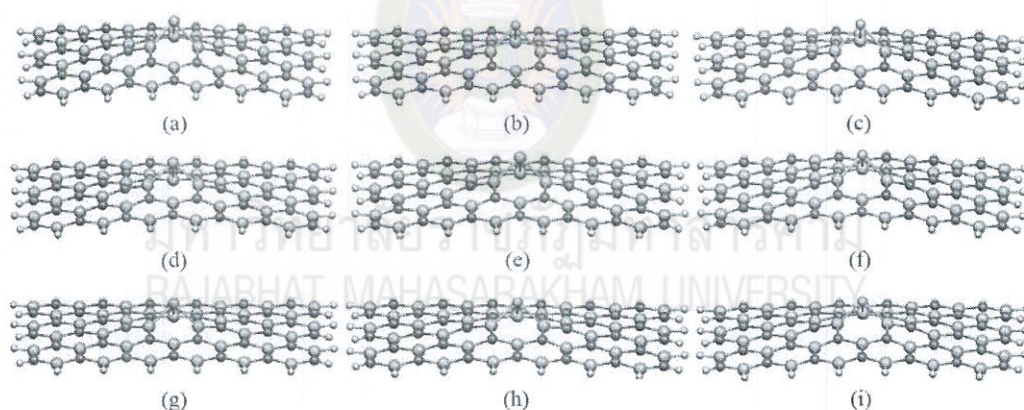
แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียมตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $V_{Si}$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง V-C1, V-C2 และ V-C3 มีค่าเท่ากับ 1.872, 1.909 และ 1.872 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-V-C2, C1-V-C3 และ C2-V-C3 มีค่าเท่ากับ 117.8, 118.8 และ 117.8° ตามลำดับ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมไนโอเบียมตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $Nb_{Si}$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Nb-C1, Nb-C2 และ Nb-C3 มีค่าเท่ากับ 2.006, 2.039 และ 2.006 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Nb-C2, C1-Nb-C3 และ C2-Nb-C3 มีค่าเท่ากับ 110.3, 111.1 และ 110.3° ตามลำดับ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแทนทาลัมตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $Ta_{Si}$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Ta-C1, Ta-C2 และ

Ta-C3 มีค่าเท่ากับ 1.998, 2.023 และ 2.006 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Ta-C2, C1-Ta-C3 และ C2-Ta-C3 มีค่าเท่ากับ 110.9, 111.4 และ 110.9° ตามลำดับ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียมตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $\text{Cr}_{\text{Si}}\text{-SiCNS}$ ) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Cr-C1, Cr-C2 และ Cr-C3 มีค่าเท่ากับ 1.826, 1.884 และ 1.826 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Cr-C2, C1-Cr-C3 และ C2-Cr-C3 มีค่าเท่ากับ 119.5, 121.1 และ 119.5° ตามลำดับ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $\text{Mo}_{\text{Si}}\text{-SiCNS}$ ) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mo-C1, Mo-C2 และ Mo-C3 มีค่าเท่ากับ 1.932, 1.983 และ 1.930 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Mo-C2, C1-Mo-C3 และ C2-Mo-C3 มีค่าเท่ากับ 113.0, 114.3 และ 112.8° ตามลำดับ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมทังสแตนตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $\text{W}_{\text{Si}}\text{-SiCNS}$ ) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง W-C1, W-C2 และ W-C3 มีค่าเท่ากับ 1.933, 1.963 และ 1.932 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-W-C2, C1-W-C3 และ C2-W-C3 มีค่าเท่ากับ 116.6, 116.4 และ 116.5° ตามลำดับ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมเทคนีเซียมตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $\text{Tc}_{\text{Si}}\text{-SiCNS}$ ) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Tc-C1, Tc-C2 และ Tc-C3 มีค่าเท่ากับ 1.951, 1.978 และ 1.951 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Tc-C2, C1-Tc-C3 และ C2-Tc-C3 มีค่าเท่ากับ 110.0, 111.6 และ 110.0° ตามลำดับ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $\text{Re}_{\text{Si}}\text{-SiCNS}$ ) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Re-C1, Re-C2 และ Re-C3 มีค่าเท่ากับ 2.282, 2.312 และ 2.282 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Re-C2, C1-Re-C3 และ C2-Re-C3 มีค่าเท่ากับ 91.1, 92.5 และ 91.1° ตามลำดับ

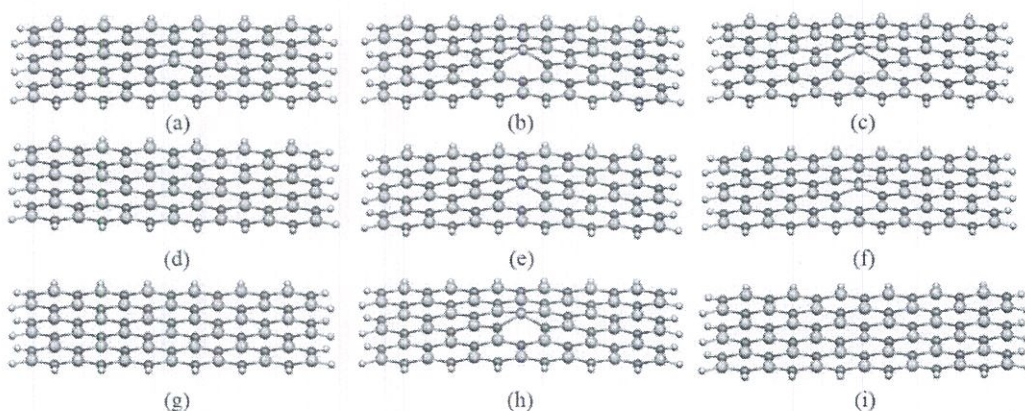
ความยาวพันธะและมุมพันธะของระบบที่เติมโลหะวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมที่มีขนาดอะตอมอะตอมใหญ่กว่าอะตอมของคาร์บอนและซิลิกอน อะตอมที่ใหญ่กว่าจึงไม่เหมาะกับขนาดของโครงโครงสร้างเดิมจึงส่งผลให้โครงสร้างแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์เปลี่ยนแปลงไปจากเดิม คือบริเวณที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน เกิดเป็นโครงสร้างคล้ายพีระมิด จึงทำให้ตำแหน่งที่มีการเติมโลหะมีพื้นผิวสูงขึ้น และเป็นบริเวณที่ไม่เสถียร มีการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอน (Active site) จึงเหมาะกับการดูดซับโมเลกุลแก๊สหรือสารอนุพันธ์ของเบนซีน นอกจากนี้แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนมีแนวโน้มความยาวพันธะยาวกว่าและแนวโน้มมุมพันธะแคบกว่าตรงตำแหน่งซิลิกอน



ภาพที่ 4.1 โครงสร้างที่เสถียรของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (a) ตำแหน่งคาร์บอนของ SiCNS (b) ตำแหน่งซิลิกอน SiCNS (c) และภาพมุมข้างของ SiCNS



ภาพที่ 4.2 โครงสร้างที่เสถียรของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน (a)  $V_C$ -SiCNS, (b)  $Nb_C$ -SiCNS, (c)  $Ta_C$ -SiCNS, (d)  $Cr_C$ -SiCNS, (e)  $Mo_C$ -SiCNS, (f)  $W_C$ -SiCNS, (g)  $Mn_C$ -SiCNS, (h)  $Tc_C$ -SiCNS และ (i)  $Re_C$ -SiCNS



ภาพที่ 4.3 โครงสร้างที่เสถียรของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน (a)  $V_{Si}$ -SiCNS, (b)  $Nb_{Si}$ -SiCNS, (c)  $Ta_{Si}$ -SiCNS, (d)  $Cr_{Si}$ -SiCNS, (e)  $Mo_{Si}$ -SiCNS, (f)  $W_{Si}$ -SiCNS, (g)  $Mn_{Si}$ -SiCNS, (h)  $Tc_{Si}$ -SiCNS และ (i)  $Re_{Si}$ -SiCNS



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

## ตารางที่ 4.1

ความยาวพันธะ (Å) และมุมพันธะ (°) ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน

ระบบ	Si1-TM or C1-TM (Å)	Si2-TM or C2-TM (Å)	Si3-TM or C3-TM (Å)	Si1-TM-Si2 or C1-TM- C2 (°)	Si1-TM-Si3 or C1-TM- C3 (°)	Si2-TM-Si3 or C2-TM-C3 (°)
SiCNS	1.797	1.824	1.797	119.4	121.3	119.4
V <sub>C</sub> -SiCNS	2.423	2.446	2.423	85.1	86.3	85.1
Nb <sub>C</sub> -SiCNS	2.493	2.497	2.493	83.2	84.6	83.2
Ta <sub>C</sub> -SiCNS	2.455	2.486	2.455	83.1	84.5	83.1
Cr <sub>C</sub> -SiCNS	2.312	2.396	2.312	85.0	95.0	85.0
Mo <sub>C</sub> -SiCNS	2.353	2.398	2.353	85.8	91.6	85.8
W <sub>C</sub> -SiCNS	2.359	2.368	2.359	88.1	87.3	88.1
Mn <sub>C</sub> -SiCNS	2.314	2.328	2.314	89.2	90.4	89.2
Tc <sub>C</sub> -SiCNS	2.315	2.352	2.315	88.8	93.2	88.8
Re <sub>C</sub> -SiCNS	2.282	2.312	2.282	91.1	92.5	91.1
V <sub>Si</sub> -SiCNS	1.872	1.909	1.872	117.8	118.8	117.8
Nb <sub>Si</sub> -SiCNS	2.006	2.039	2.006	110.3	111.1	110.3
Ta <sub>Si</sub> -SiCNS	1.998	2.023	1.998	110.9	111.4	110.9
Cr <sub>Si</sub> -SiCNS	1.826	1.884	1.826	119.5	121.1	119.5
Mo <sub>Si</sub> -SiCNS	1.932	1.983	1.930	113.0	114.3	112.8
W <sub>Si</sub> -SiCNS	1.933	1.963	1.932	116.6	116.4	116.5
Mn <sub>Si</sub> -SiCNS	1.822	1.891	1.822	119.6	120.7	119.6
Tc <sub>Si</sub> -SiCNS	1.951	1.978	1.951	110.0	111.6	110.0
Re <sub>Si</sub> -SiCNS	1.879	1.915	1.879	120.3	119.3	120.3

#### 4.1.2 สมบัติทางโครงสร้างของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

โครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (SiCNT) และแบบที่เติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน แสดงดังภาพที่ 4.4, 4.5 ภาพที่ 4.6 ตามลำดับ สมบัติทางโครงสร้างในเทอมของความยาวพันธะและมุมพันธะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันแสดงดังตารางที่ 4.2 พบว่าท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C1-Si1, C1-Si2 และ C1-Si3 มีค่าเท่ากับ 1.807, 1.806 และ 1.807 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-C1-Si2, Si1-C1-Si3 และ Si2-C1-Si3 มีค่าเท่ากับ 118.2, 120.2 และ 118.2° ตามลำดับ ซึ่งพบว่าความยาวพันธะและมุมพันธะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมสอดคล้องกับงานวิจัยก่อนหน้านี้ของ R.S. Singh & A. Solanki., (2016)

ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียมตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $V_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง V-Si1, V-Si2 และ V-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.435, 2.455 และ 2.435 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-V-Si2, Si1-V-Si3 และ Si2-V-Si3 มีค่าเท่ากับ 85.6, 82.0 และ 85.6° ตามลำดับ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมไนโอเบียมตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $Nb_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Nb-Si1, Nb-Si2 และ Nb-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.493, 2.520 และ 2.493 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Nb-Si2, Si1-Nb-Si3 และ Si2-Nb-Si3 มีค่าเท่ากับ 83.6, 80.7 และ 83.6° ตามลำดับ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแทนทาลัมตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $Ta_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Ta-Si1, Ta-Si2 และ Ta-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.473, 2.513 และ 2.473 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Ta-Si2, Si1-Ta-Si3 และ Si2-Ta-Si3 มีค่าเท่ากับ 82.7, 82.2 และ 82.7° ตามลำดับ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียมตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $Cr_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Cr-Si1, Cr-Si2 และ Cr-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.334, 2.345 และ 2.334 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Cr-Si2, Si1-Cr-Si3 และ Si2-Cr-Si3 มีค่าเท่ากับ 89.4, 82.0 และ 89.4° ตามลำดับ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $Mo_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mo-Si1, Mo-Si2 และ Mo-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.397, 2.393 และ 2.397 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Mo-Si2, Si1-Mo-Si3 และ Si2-Mo-Si3 มีค่าเท่ากับ 86.9, 81.2 และ 86.9° ตามลำดับ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมทังสเตนตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $W_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง W-Si1, W-Si2 และ W-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.389, 2.404 และ 2.389 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-W-Si2, Si1-W-Si3 และ Si2-W-Si3 มีค่าเท่ากับ 86.1, 85.0 และ 86.1° ตามลำดับ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแมงกานีสตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $Mn_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mn-Si1, Mn-

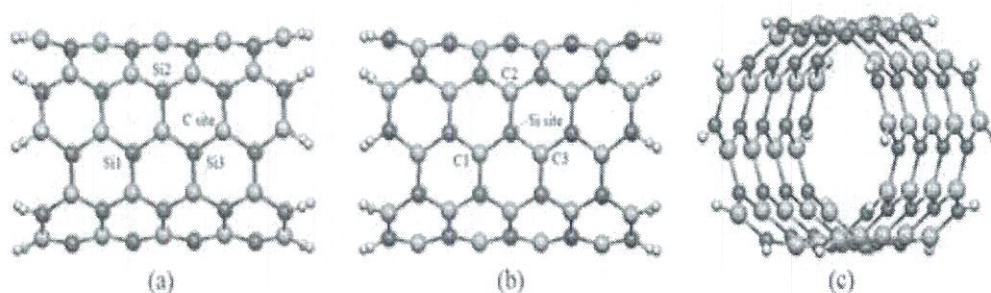
Si2 และ Mn-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.322, 2.354 และ 2.322 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Mn-Si2, Si1-Mn-Si3 และ Si2-Mn-Si3 มีค่าเท่ากับ 87.9, 90.2 และ 87.9° ตามลำดับ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมเทคนิคนี้เชื่อมตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $Tc_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Tc-Si1, Tc-Si2 และ Tc-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.347, 2.362 และ 2.347 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Tc-Si2, Si1-Tc-Si3 และ Si2-Tc-Si3 มีค่าเท่ากับ 87.6, 88.5 และ 87.6° ตามลำดับ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน ( $Re_C$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Re-Si1, Re-Si2 และ Re-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.342, 2.367 และ 2.342 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Re-Si2, Si1-Re-Si3 และ Si2-Re-Si3 มีค่าเท่ากับ 88.0, 90.6 และ 88.0° ตามลำดับ

ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียมตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $V_{Si}$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง V-C1, V-C2 และ V-C3 มีค่าเท่ากับ 1.921, 1.898 และ 1.921 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-V-C2, C1-V-C3 และ C2-V-C3 มีค่าเท่ากับ 111.0, 108.9 และ 111.0° ตามลำดับ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมไนโอเบียมตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $Nb_{Si}$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Nb-C1, Nb-C2 และ Nb-C3 มีค่าเท่ากับ 2.024, 2.040 และ 2.024 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Nb-C2, C1-Nb-C3 และ C2-Nb-C3 มีค่าเท่ากับ 107.1, 110.8 และ 107.1° ตามลำดับ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแทนทาลัมตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $Ta_{Si}$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Ta-C1, Ta-C2 และ Ta-C3 มีค่าเท่ากับ 2.011, 2.031 และ 2.011 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Ta-C2, C1-Ta-C3 และ C2-Ta-C3 มีค่าเท่ากับ 107.9, 111.2 และ 107.9° ตามลำดับ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียมตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $Cr_{Si}$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Cr-C1, Cr-C2 และ Cr-C3 มีค่าเท่ากับ 2.334, 2.345 และ 2.334 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Cr-C2, C1-Cr-C3 และ C2-Cr-C3 มีค่าเท่ากับ 89.4, 82.0 และ 89.4° ตามลำดับ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $Mo_{Si}$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mo-C1, Mo-C2 และ Mo-C3 มีค่าเท่ากับ 1.955, 1.966 และ 1.955 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Mo-C2, C1-Mo-C3 และ C2-Mo-C3 มีค่าเท่ากับ 108.6, 115.4 และ 108.6° ตามลำดับ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมทังสเตนตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $W_{Si}$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง W-C1, W-C2 และ W-C3 มีค่าเท่ากับ 1.951, 1.961 และ 1.951 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-W-C2, C1-W-C3 และ C2-W-C3 มีค่าเท่ากับ 111.6, 117.8 และ 111.6° ตามลำดับ ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแมงกานีสตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $Mn_{Si}$ -SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mn-C1, Mn-C2 และ Mn-C3 มีค่าเท่ากับ 2.322, 2.354 และ 2.322 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง

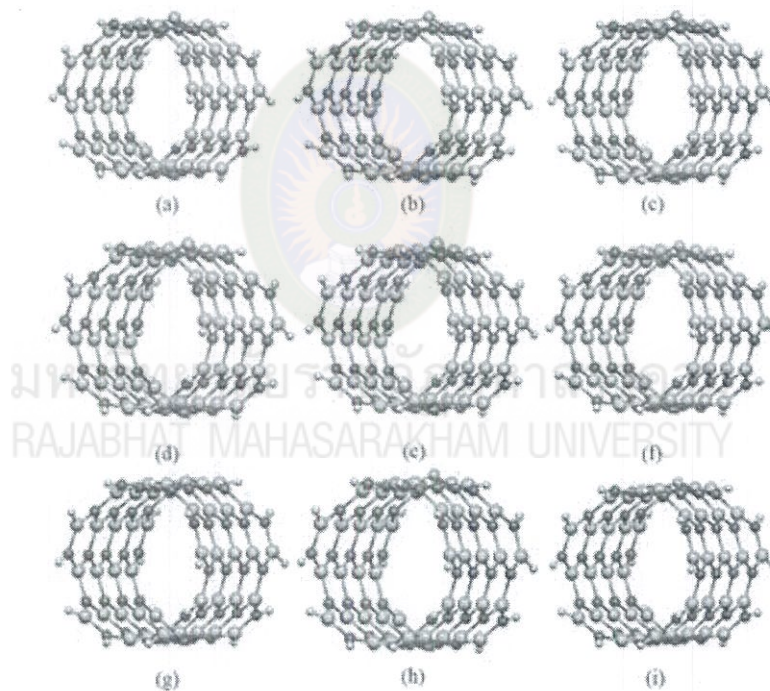
C1-Mn-C2, C1-Mn-C3 และ C2-Mn-C3 มีค่าเท่ากับ 87.9, 90.2 และ 87.9° ตามลำดับ ท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมเทคนิคนี้เชื่อมตรงตำแหน่งซิลิกอน (Tc<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Tc-C1, Tc-C2 และ Tc-C3 มีค่าเท่ากับ 1.951, 1.923 และ 1.951 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Tc-C2, C1-Tc-C3 และ C2-Tc-C3 มีค่าเท่ากับ 105.8, 112.0 และ 105.8° ตามลำดับ ท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (Re<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Re-C1, Re-C2 และ Re-C3 มีค่าเท่ากับ 1.932, 1.913 และ 1.932 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Re-C2, C1-Re-C3 และ C2-Re-C3 มีค่าเท่ากับ 109.1, 115.5 และ 109.1° ตามลำดับ

ความยาวพันธะและมุมพันธะของระบบที่เติมโลหะวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสแตน แมงกานีส เทคนิคนี้เชื่อม และรีเนียมมีขนาดอะตอมใหญ่กว่าอะตอมของคาร์บอนและซิลิกอน ขนาดอะตอมที่ใหญ่กว่าจึงไม่เหมาะสมกับขนาดของโครงโครงสร้างเดิมจึงส่งผลให้โครงสร้างท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์เปลี่ยนแปลงไปจากเดิม คือบริเวณที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน เกิดเป็นโครงสร้างคล้ายพีระมิด จึงทำให้ตำแหน่งที่มีการเติมโลหะมีพื้นผิวสูงขึ้น และเป็นบริเวณที่ไม่เสถียร มีการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอน จึงเหมาะกับการดูดซับโมเลกุลแก๊สหรืออนุพันธ์ของเบนซีน นอกจากนี้ท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนมีแนวโน้มความยาวพันธะยาวกว่าและแนวโน้มมุมพันธะแคบกว่าตรงตำแหน่งซิลิกอน เหมือนกับแผ่นานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งเดียวกัน

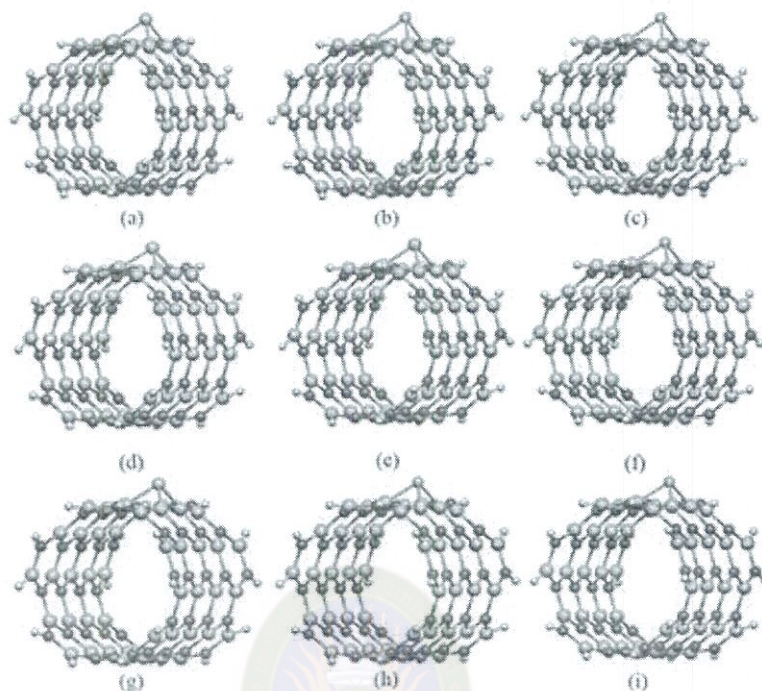




ภาพที่ 4.4 โครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (a) ตำแหน่งคาร์บอนของ SiCNS (b) ตำแหน่งซิลิกอน SiCNS (c) และภาพมุมข้างของ SiCNT



ภาพที่ 4.5 โครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน (a) V<sub>C</sub>-SiCNT, (b) Nb<sub>C</sub>-SiCNT, (c) Ta<sub>C</sub>-SiCNT, (d) Cr<sub>C</sub>-SiCNT, (e) Mo<sub>C</sub>-SiCNT, (f) W<sub>C</sub>-SiCNT, (g) Mn<sub>C</sub>-SiCNT, (h) Tc<sub>C</sub>-SiCNT และ (i) Re<sub>C</sub>-SiCNT



ภาพที่ 4.6 โครงสร้างที่เสถียรของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน (a)  $V_{Si}$ -SiCNT, (b)  $Nb_{Si}$ -SiCNT, (c)  $Ta_{Si}$ -SiCNT, (d)  $Cr_{Si}$ -SiCNT, (e)  $Mo_{Si}$ -SiCNT, (f)  $W_{Si}$ -SiCNT, (g)  $Mn_{Si}$ -SiCNT, (h)  $Tc_{Si}$ -SiCNT และ (i)  $Re_{Si}$ -SiCNT

## ตารางที่ 4.2

ความยาวพันธะ (Å) และมุมพันธะ (°) ของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน

ระบบ	Si1-TM or C1-TM (Å)	Si2-TM or C2-TM (Å)	Si3-TM or C3-TM (Å)	Si1-TM-Si2 or C1-TM-C2 (°)	Si1-TM-Si3 or C1-TM-C3 (°)	Si2-TM-Si3 or C2-TM-C3 (°)
SiCNT	1.807	1.806	1.807	118.2	120.2	118.2
V <sub>C</sub> -SiCNT	2.435	2.455	2.435	85.6	82.0	85.6
Nb <sub>C</sub> -SiCNT	2.493	2.520	2.493	83.6	80.7	83.6
Ta <sub>C</sub> -SiCNT	2.473	2.513	2.473	82.7	82.2	82.7
Cr <sub>C</sub> -SiCNT	2.334	2.345	2.334	89.4	82.0	89.4
Mo <sub>C</sub> -SiCNT	2.397	2.393	2.397	86.9	81.2	86.9
W <sub>C</sub> -SiCNT	2.389	2.404	2.389	86.1	85.0	86.1
Mn <sub>C</sub> -SiCNT	2.322	2.354	2.322	87.9	90.2	87.9
Tc <sub>C</sub> -SiCNT	2.347	2.362	2.347	87.6	88.5	87.6
Re <sub>C</sub> -SiCNT	2.342	2.367	2.342	88.0	90.6	88.0
V <sub>Si</sub> -SiCNT	1.921	1.898	1.921	111.0	108.9	111.0
Nb <sub>Si</sub> -SiCNT	2.024	2.040	2.024	107.1	110.8	107.1
Ta <sub>Si</sub> -SiCNT	2.011	2.031	2.011	107.9	111.2	107.9
Cr <sub>Si</sub> -SiCNT	2.334	2.345	2.334	89.4	82.0	89.4
Mo <sub>Si</sub> -SiCNT	1.955	1.966	1.955	108.6	115.4	108.6
W <sub>Si</sub> -SiCNT	1.951	1.961	1.951	111.6	117.8	111.6
Mn <sub>Si</sub> -SiCNT	2.322	2.354	2.322	87.9	90.2	87.9
Tc <sub>Si</sub> -SiCNT	1.951	1.923	1.951	105.8	112.0	105.8
Re <sub>Si</sub> -SiCNT	1.932	1.913	1.932	109.1	115.5	109.1

#### 4.1.3 สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับไนโตรเบนซีน

4.1.3.1 สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน แสดงดังภาพที่ 4.7, 4.8 และ 4.9 ตามลำดับ สมบัติทางโครงสร้างในเทอมของความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันแสดงดังตารางที่ 4.3 พบว่าการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (nitrobenzene/SiCNS) มีความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C1-Si1, C1-Si2 และ C1-Si3 มีค่าเท่ากับ 1.796, 1.824 และ 1.797 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-C1-Si2, Si1-C1-Si3 และ Si2-C1-Si3 มีค่าเท่ากับ 119.4, 121.4 และ 119.3° ตามลำดับ สามารถอธิบายได้ว่าเมื่อเปรียบเทียบกับก่อนและหลังดูดซับไนโตรเบนซีนพบว่าระยะพันธะและมุมพันธะแตกต่างจากเดิมเล็กน้อย ระยะดูดซับระหว่างไนโตรเบนซีนและแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ 3.578 Å แสดงให้เห็นถึงอันตรกิริยาแบบอ่อน ๆ (weak interaction) ระหว่างไนโตรเบนซีนกับแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ ซึ่งสอดคล้องกับพลังงานที่มีค่าต่ำ

การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (Nitrobenzene/V<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง V-Si1, V-Si2 และ V-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.454, 2.448 และ 2.453 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-V-Si2, Si1-V-Si3 และ Si2-V-Si3 มีค่าเท่ากับ 83.0, 84.0 และ 83.2° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมไนโอเบียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/Nb<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Nb-Si1, Nb-Si2 และ Nb-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.569, 2.526 และ 2.479 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Nb-Si2, Si1-Nb-Si3 และ Si2-Nb-Si3 มีค่าเท่ากับ 77.7, 81.2 และ 85.8° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแทนทาลัมตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene /Ta<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Ta-Si1, Ta-Si2 และ Ta-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.635, 2.525 และ 2.503 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Ta-Si2, Si1-Ta-Si3 และ Si2-Ta-Si3 มีค่าเท่ากับ 77.0, 78.8 และ 85.5° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/Cr<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Cr-Si1, Cr-Si2 และ Cr-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.364, 2.394 และ 2.381 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Cr-Si2, Si1-Cr-Si3 และ Si2-Cr-Si3 มีค่าเท่ากับ 84.0, 89.2 และ 85.5 ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งคาร์บอน

(nitrobenzene/Mo<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mo-Si1, Mo-Si2 และ Mo-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.536, 2.412 และ 2.393 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Mo-Si2, Si1-Mo-Si3 และ Si2-Mo-Si3 มีค่าเท่ากับ 78.2, 81.4 และ 91.9° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมทั้งสแตนตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/W<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง W-Si1, W-Si2 และ W-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.418, 2.429 และ 2.560 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-W-Si2, Si1-W-Si3 และ Si2-W-Si3 มีค่าเท่ากับ 91.0, 81.3 และ 78.8° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแมงกานีสตรงตำแหน่งคาร์บอน (Mn<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mn-Si1, Mn-Si2 และ Mn-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.372, 2.382 และ 2.372 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Mn-Si2, Si1-Mn-Si3 และ Si2-Mn-Si3 มีค่าเท่ากับ 87.0, 88.7 และ 87.0° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมเทคนีเซียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/Tc<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Tc-Si1, Tc-Si2 และ Tc-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.348, 2.350 และ 2.348 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Tc-Si2, Si1-Tc-Si3 และ Si2-Tc-Si3 มีค่าเท่ากับ 87.6, 88.7 และ 87.6 ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/Re<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Re-Si1, Re-Si2 และ Re-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.369, 2.377 และ 2.328 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Re-Si2, Si1-Re-Si3 และ Si2-Re-Si3 มีค่าเท่ากับ 88.1, 90.7 และ 84.8 ตามลำดับ

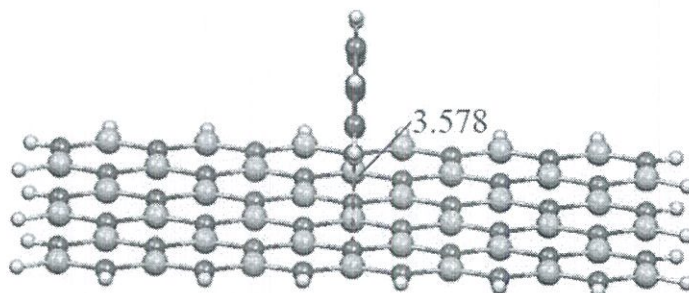
การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/V<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง V-C1, V-C2 และ V-C3 มีค่าเท่ากับ 1.866, 1.907 และ 1.862 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-V-C2, C1-V-C3 และ C2-V-C3 มีค่าเท่ากับ 111.7, 112.5 และ 111.5° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมไนโอเบียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/Nb<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Nb-C1, Nb-C2 และ Nb-C3 มีค่าเท่ากับ 2.022, 2.031 และ 2.022 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Nb-C2, C1-Nb-C3 และ C2-Nb-C3 มีค่าเท่ากับ 106.4, 105.3 และ 106.4° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแทนทาลัมตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/Ta<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Ta-C1, Ta-C2 และ Ta-C3 มีค่าเท่ากับ 2.001, 2.060 และ 2.022 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Ta-C2, C1-Ta-C3 และ C2-Ta-C3 มีค่าเท่ากับ 104.7, 107.8 และ 104.1° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/Cr<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Cr-C1, Cr-C2

และ Cr-C3 มีค่าเท่ากับ 1.829, 1.957 และ 1.829 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Cr-C2, C1-Cr-C3 และ C2-Cr-C3 มีค่าเท่ากับ 107.4, 113.2 และ 107.4° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/Mo<sub>5</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mo-C1, Mo-C2 และ Mo-C3 มีค่าเท่ากับ 1.960, 1.996 และ 1.960 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Mo-C2, C1-Mo-C3 และ C2-Mo-C3 มีค่าเท่ากับ 108.3, 108.3 และ 108.2° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมทังสเทนตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/W<sub>5</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง W-C1, W-C2 และ W-C3 มีค่าเท่ากับ 1.970, 1.987 และ 1.973 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-W-C2, C1-W-C3 และ C2-W-C3 มีค่าเท่ากับ 107.9, 106.1 และ 107.3° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมเทคนีเซียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/Tc<sub>5</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Tc-C1, Tc-C2 และ Tc-C3 มีค่าเท่ากับ 1.950, 1.978 และ 1.943 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Tc-C2, C1-Tc-C3 และ C2-Tc-C3 มีค่าเท่ากับ 106.1, 107.6 และ 107.7° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/Re<sub>5</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Re-C1, Re-C2 และ Re-C3 มีค่าเท่ากับ 1.949, 1.976 และ 1.953 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Re-C2, C1-Re-C3 และ C2-Re-C3 มีค่าเท่ากับ 107.2, 107.1 และ 105.9° ตามลำดับ เมื่อเปรียบเทียบความยาวพันธะและมุมพันธะก่อนและหลังดูดซับพบว่า ความยาวพันธะและมุมพันธะของระบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันมีการเปลี่ยนแปลง ความยาวพันธะมีทั้งยาวขึ้นและสั้นลง มุมพันธะมีทั้งเพิ่มขึ้นและลดลง เนื่องจากการเกิดอันตรกิริยาระหว่างไนโตรเบนซีนกับแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ทั้งแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน

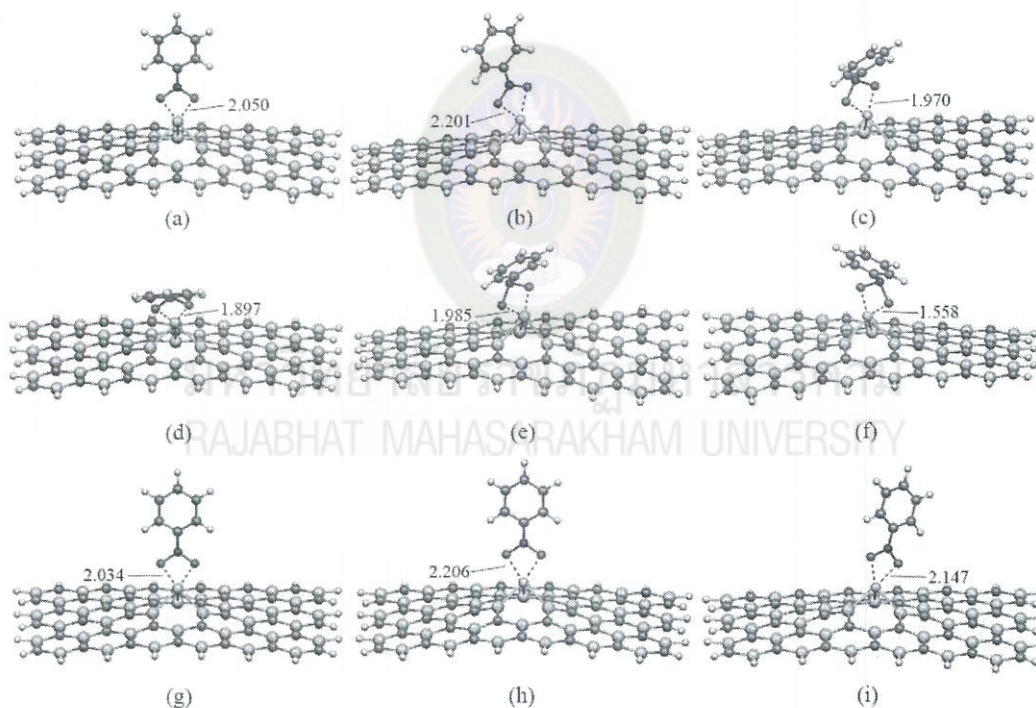
จากการศึกษาระยะดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ 3.578 Å ระยะดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ 2.050, 2.201, 1.970, 1.897, 1.985, 1.558, 2.034, 2.206 และ 2.147 Å ตามลำดับ

ระยะดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ 1.874, 2.289, 2.235, 2.110, 2.097, 2.058, 1.923, 2.036 และ 2.014 Å ตามลำดับ แสดงให้เห็นว่าระยะดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มี

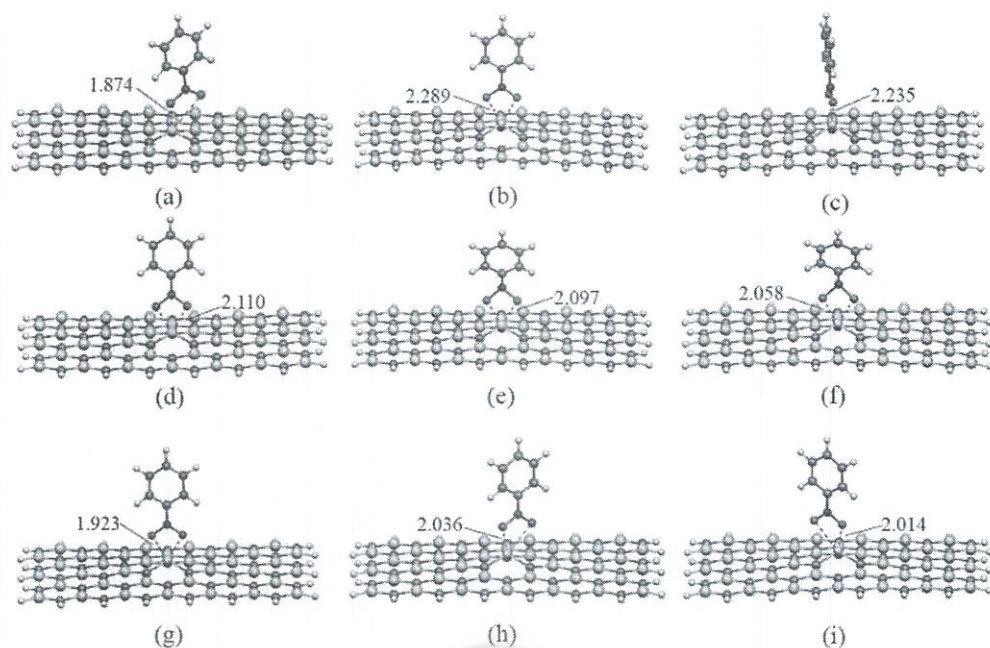
การเติมโลหะแทรนซิชันทั้งตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนมีระยะดูดซับสั้นกว่าการดูดซับบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และเป็นการดูดซับทางกายภาพ



ภาพที่ 4.7 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม



ภาพที่ 4.8 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน (a) nitrobenzene/ $V_C$ -SiCNS, (b) nitrobenzene/ $Nb_C$ -SiCNS, (c) nitrobenzene/ $Ta_C$ -SiCNS, (d) nitrobenzene/ $Cr_C$ -SiCNS, (e) nitrobenzene/ $Mo_C$ -SiCNS, (f) nitrobenzene/ $W_C$ -SiCNS, (g) nitrobenzene/ $Mn_C$ -SiCNS, (h) nitrobenzene/ $Tc_C$ -SiCNS และ (i) nitrobenzene/ $Re_C$ -SiCNS



ภาพที่ 4.9 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน (a) nitrobenzene/ $V_{Si}$ -SiCNS, (b) nitrobenzene/ $Nb_{Si}$ -SiCNS, (c) nitrobenzene/ $Ta_{Si}$ -SiCNS, (d) nitrobenzene/ $Cr_{Si}$ -SiCNS, (e) nitrobenzene/ $Mo_{Si}$ -SiCNS, (f) nitrobenzene/ $W_{Si}$ -SiCNS, (g) nitrobenzene/ $Mn_{Si}$ -SiCNS, (h) nitrobenzene/ $Tc_{Si}$ -SiCNS และ (i) nitrobenzene/ $Re_{Si}$ -SiCNS



### ตารางที่ 4.3

ความยาวพันธะ (Å) มุมพันธะ (°) และระยะดูดซับ (AD, Å) ของการดูดซับ

ไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	Si1-TM	Si2-TM	Si3-TM	Si1-TM-	Si1-TM-	Si2-TM-	AD
	or	or	or	Si2	or	Si3	
	C1-TM	C2-TM	C3-TM	C1-TM-	C1-TM-	C2-TM-	
	(Å)	(Å)	(Å)	C2 (°)	C3 (°)	C3 (°)	(Å)
nitrobenzene/SiCNS	1.796	1.820	1.797	119.3	121.4	119.3	3.578
nitrobenzene/V <sub>C</sub> -SiCNS	2.454	2.448	2.453	83.0	84.0	83.2	2.050
nitrobenzene/Nb <sub>C</sub> -SiCNS	2.569	2.526	2.479	77.7	81.2	85.8	2.201
nitrobenzene/Ta <sub>C</sub> -SiCNS	2.635	2.525	2.503	77.0	78.8	85.5	1.970
nitrobenzene/Cr <sub>C</sub> -SiCNS	2.364	2.394	2.381	84.0	89.2	84.0	1.897
nitrobenzene/Mo <sub>C</sub> -SiCNS	2.536	2.412	2.393	78.2	81.4	91.9	1.985
nitrobenzene/W <sub>C</sub> -SiCNS	2.418	2.429	2.560	91.0	81.3	78.8	1.558
nitrobenzene/Mn <sub>C</sub> -SiCNS	2.372	2.382	2.372	87.0	88.7	87.0	2.034
nitrobenzene/Tc <sub>C</sub> -SiCNS	2.348	2.350	2.348	87.6	88.7	87.6	2.206
nitrobenzene/Re <sub>C</sub> -SiCNS	2.369	2.377	2.328	88.1	90.7	84.8	2.147
nitrobenzene/V <sub>Si</sub> -SiCNS	1.866	1.907	1.862	111.7	112.5	111.5	1.874
nitrobenzene/Nb <sub>Si</sub> -SiCNS	2.022	2.031	2.022	106.4	105.3	106.4	2.239
nitrobenzene/Ta <sub>Si</sub> -SiCNS	2.001	2.060	2.009	104.7	107.8	104.1	2.235
nitrobenzene/Cr <sub>Si</sub> -SiCNS	1.829	1.957	1.829	107.4	113.2	107.4	2.110
nitrobenzene/Mo <sub>Si</sub> -SiCNS	1.960	1.996	1.960	108.3	108.3	108.2	2.097
nitrobenzene/W <sub>Si</sub> -SiCNS	1.970	1.987	1.973	107.9	106.1	107.3	2.058
nitrobenzene/Mn <sub>Si</sub> -SiCNS	1.923	1.924	1.923	106.5	106.7	106.5	1.923
nitrobenzene/Tc <sub>Si</sub> -SiCNS	1.950	1.978	1.943	106.1	107.6	107.7	2.036
nitrobenzene/Re <sub>Si</sub> -SiCNS	1.949	1.976	1.953	107.2	107.1	105.9	2.014

4.1.3.2 สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน แสดงดังภาพที่ 4.10, 4.11 และ 4.12 ตามลำดับ สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันแสดงดังตารางที่ 4.4 จากการศึกษาสมบัติทาง

โครงสร้างของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (nitrobenzene/SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C1-Si1, C1-Si2 และ C1-Si3 มีค่าเท่ากับ 1.834, 1.833 และ 1.830 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-C1-Si2, Si1-C1-Si3 และ Si2-C1-Si3 มีค่าเท่ากับ 118.8, 119.7 และ 119.3° ตามลำดับ สามารถอธิบายได้ว่า เมื่อเปรียบเทียบกับก่อนและหลังดูดซับไนโตรเบนซีนพบว่าระยะพันธะและมุมพันธะแตกต่างจากเดิมเล็กน้อย ระยะดูดซับระหว่างไนโตรเบนซีนและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ 3.082 Å แสดงให้เห็นถึงอันตรกิริยาแบบอ่อน ๆ (weak interaction) ระหว่างไนโตรเบนซีนกับท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ ซึ่งสอดคล้องกับพลังงานที่มีค่าต่ำ

การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/V<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง V-Si1, V-Si2 และ V-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.450, 2.485 และ 2.549 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-V-Si2, Si1-V-Si3 และ Si2-V-Si3 มีค่าเท่ากับ 85.7, 80.3 และ 82.9° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมไนโอเบียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/Nb<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Nb-Si1, Nb-Si2 และ Nb-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.582, 2.651 และ 2.582 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Nb-Si2, Si1-Nb-Si3 และ Si2-Nb-Si3 มีค่าเท่ากับ 80.4, 79.6 และ 80.5° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแทนทาลัมตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/Ta<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Ta-Si1, Ta-Si2 และ Ta-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.679, 2.606 และ 2.524 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Ta-Si2, Si1-Ta-Si3 และ Si2-Ta-Si3 มีค่าเท่ากับ 77.9, 78.6 และ 86.7° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/Cr<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Cr-Si1, Cr-Si2 และ Cr-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.391, 2.531 และ 2.377 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Cr-Si2, Si1-Cr-Si3 และ Si2-Cr-Si3 มีค่าเท่ากับ 83.3, 91.0 และ 80.9° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/Mo<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mo-Si1, Mo-Si2 และ Mo-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.475, 2.489 และ 2.476 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Mo-Si2, Si1-Mo-Si3 และ Si2-Mo-Si3 มีค่าเท่ากับ 86.4, 79.7 และ 86.4° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมทังสเตนตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/W<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง W-Si1, W-Si2 และ W-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.485, 2.502 และ 2.485 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-W-Si2, Si1-W-Si3 และ Si2-W-Si3 มีค่าเท่ากับ 85.3, 82.3 และ 85.3° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแมงกานีสตรง

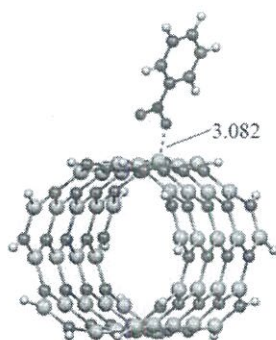
ตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/Mn<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mn-Si1, Mn-Si2 และ Mn-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.395, 2.401 และ 2.395 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Mn-Si2, Si1-Mn-Si3 และ Si2-Mn-Si3 มีค่าเท่ากับ 85.6, 87.0 และ 85.6° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมเทคโนโลยีโดยตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/Tc<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Tc-Si1, Tc-Si2 และ Tc-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.556, 2.428 และ 2.352 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Tc-Si2, Si1-Tc-Si3 และ Si2-Tc-Si3 มีค่าเท่ากับ 78.5, 78.9 และ 93.5° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (nitrobenzene/Re<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Re-Si1, Re-Si2 และ Re-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.546, 2.439 และ 2.363 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Re-Si2, Si1-Re-Si3 และ Si2-Re-Si3 มีค่าเท่ากับ 79.3, 79.9 และ 92.4° ตามลำดับ

การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/V<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง V-C1, V-C2 และ V-C3 มีค่าเท่ากับ 1.802, 1.896 และ 1.888 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-V-C2, C1-V-C3 และ C2-V-C3 มีค่าเท่ากับ 107.3, 112.7 และ 112.7° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมไนโอเบียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/Nb<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Nb-C1, Nb-C2 และ Nb-C3 มีค่าเท่ากับ 2.016, 2.085 และ 2.016 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Nb-C2, C1-Nb-C3 และ C2-Nb-C3 มีค่าเท่ากับ 101.1, 108.3 และ 101.1° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแทนทาลัมตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/Ta<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Ta-C1, Ta-C2 และ Ta-C3 มีค่าเท่ากับ 2.027, 2.031 และ 2.029 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Ta-C2, C1-Ta-C3 และ C2-Ta-C3 มีค่าเท่ากับ 103.6, 104.5 และ 103.4° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/Cr<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Cr-C1, Cr-C2 และ Cr-C3 มีค่าเท่ากับ 1.833, 1.937 และ 1.832 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Cr-C2, C1-Cr-C3 และ C2-Cr-C3 มีค่าเท่ากับ 102.6, 114.9 และ 102.6° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/Mo<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mo-C1, Mo-C2 และ Mo-C3 มีค่าเท่ากับ 1.884, 1.982 และ 1.970 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Mo-C2, C1-Mo-C3 และ C2-Mo-C3 มีค่าเท่ากับ 104.2, 112.7 และ 105.9° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมทังสแตนตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/W<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรง

ตำแหน่ง W-C1, W-C2 และ W-C3 มีค่าเท่ากับ 1.975, 1.992 และ 1.932 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-W-C2, C1-W-C3 และ C2-W-C3 มีค่าเท่ากับ 103.3, 104.8 และ 99.8° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแมงกานีสตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/Mn<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mn-C1, Mn-C2 และ Mn-C3 มีค่าเท่ากับ 2.584, 1.957 และ 1.942 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Mn-C2, C1-Mn-C3 และ C2-Mn-C3 มีค่าเท่ากับ 101.7, 104.1 และ 101.7° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมเทคนิคนี้เชื่อมตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/Tc<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Tc-C1, Tc-C2 และ Tc-C3 มีค่าเท่ากับ 1.958, 1.994 และ 1.940 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Tc-C2, C1-Tc-C3 และ C2-Tc-C3 มีค่าเท่ากับ 101.7, 107.2 และ 101.7° ตามลำดับ การดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (nitrobenzene/Re<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Re-C1, Re-C2 และ Re-C3 มีค่าเท่ากับ 1.957, 1.959 และ 1.957 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Re-C2, C1-Re-C3 และ C2-Re-C3 มีค่าเท่ากับ 103.2, 105.6 และ 103.1° ตามลำดับ เมื่อเปรียบเทียบความยาวพันธะและมุมพันธะก่อนและหลังดูดซับพบว่า ความยาวพันธะและมุมพันธะของท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีการเปลี่ยนแปลง ความยาวพันธะมีทั้งยาวขึ้นและสั้นลง มุมพันธะมีทั้งกว้างขึ้นและแคบลงเนื่องจากการเกิดอันตรกิริยา ระหว่างไนโตรเบนซีนกับท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน

ระยะดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ 3.082 Å ระยะดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนิคนี้เชื่อม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ 1.987, 2.031, 1.960, 1.855, 2.013, 2.050, 2.039, 1.967 และ 1.958 Å ตามลำดับ

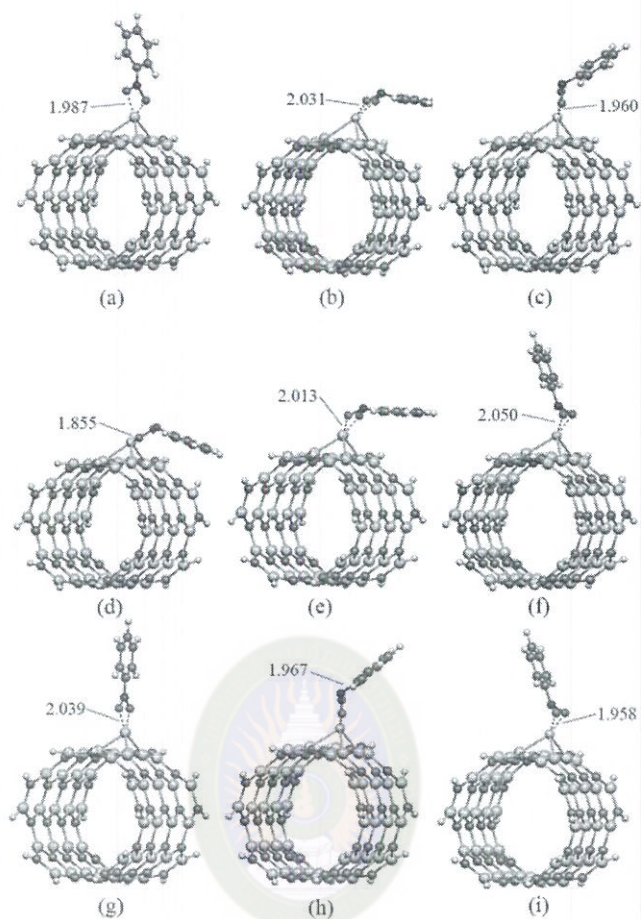
ระยะดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนิคนี้เชื่อม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ 1.929, 2.228, 2.237, 2.104, 1.913, 2.003, 2.112, 2.097 และ 2.045 Å ตามลำดับ แสดงให้เห็นว่าระยะดูดซับไนโตรเบนซีนของระบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันทั้งตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนมีระยะดูดซับสั้นกว่าการดูดซับบนท่อนานโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและเป็นการดูดซับทางกายภาพ



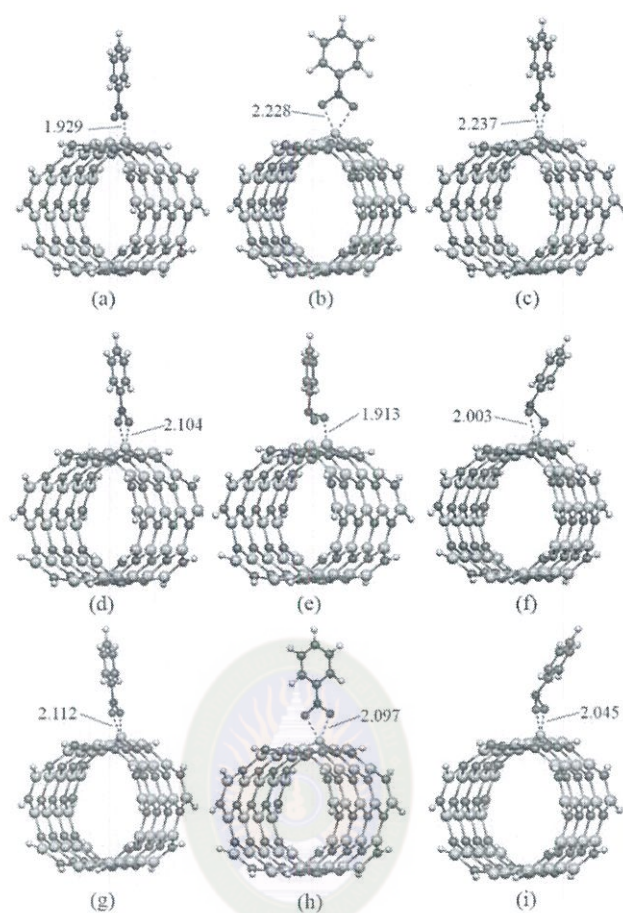
ภาพที่ 4.10 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไนโตรเจนขึ้นบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY



ภาพที่ 4.11 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน (a) nitrobenzene/ $V_C$ -SiCNS, (b) nitrobenzene/ $Nb_C$ -SiCNS, (c) nitrobenzene/ $Ta_C$ -SiCNS, (d) nitrobenzene/ $Cr_C$ -SiCNS, (e) nitrobenzene/ $Mo_C$ -SiCNS, (f) nitrobenzene/ $W_C$ -SiCNS, (g) nitrobenzene/ $Mn_C$ -SiCNS, (h) nitrobenzene/ $Tc_C$ -SiCNS และ (i) nitrobenzene/ $Re_C$ -SiCNS



ภาพที่ 4.12 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน (a) nitrobenzene/ $V_{Si}$ -SiCNT, (b) nitrobenzene/ $Nb_{Si}$ -SiCNT, (c) nitrobenzene/ $Ta_{Si}$ -SiCNT, (d) nitrobenzene/ $Cr_{Si}$ -SiCNT, (e) nitrobenzene/ $Mo_{Si}$ -SiCNT, (f) nitrobenzene/ $W_{Si}$ -SiCNT, (g) nitrobenzene/ $Mn_{Si}$ -SiCNT, (h) nitrobenzene/ $Tc_{Si}$ -SiCNT และ (i) nitrobenzene/ $Re_{Si}$ -SiCNT

#### ตารางที่ 4.4

ความยาวพันธะ (Å) มุมพันธะ (°) และระยะดูดซับ (AD, Å) ของการดูดซับ

ไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	Si1-TM	Si2-TM	Si3-TM	Si1-TM-	Si1-TM-	Si2-TM-	AD
	or	or	or	Si2 or	Si3 or	Si3 or	
	C1-TM	C2-TM	C3-TM	C1-TM-	C1-TM-	C2-TM-	
	(Å)	(Å)	(Å)	C2 (°)	C3 (°)	C3 (°)	(Å)
nitrobenzene/SiCNT	1.796	1.820	1.797	119.3	121.4	119.3	3.032
nitrobenzene/V <sub>C</sub> -SiCNT	2.454	2.448	2.453	83.0	84.0	83.2	1.937
nitrobenzene/Nb <sub>C</sub> -SiCNT	2.569	2.526	2.479	77.7	81.2	85.8	2.031
nitrobenzene/Ta <sub>C</sub> -SiCNT	2.635	2.525	2.503	77.0	78.8	85.5	1.960
nitrobenzene/Cr <sub>C</sub> -SiCNT	2.364	2.394	2.381	84.0	89.2	84.0	1.855
nitrobenzene/Mo <sub>C</sub> -SiCNT	2.536	2.412	2.393	78.2	81.4	91.9	2.013
nitrobenzene/W <sub>C</sub> -SiCNT	2.418	2.429	2.560	91.0	81.3	78.8	2.050
nitrobenzene/Mn <sub>C</sub> -SiCNT	2.372	2.382	2.372	87.0	88.7	87.0	2.039
nitrobenzene/Tc <sub>C</sub> -SiCNT	2.348	2.350	2.348	87.6	88.7	87.6	1.957
nitrobenzene/Re <sub>C</sub> -SiCNT	2.369	2.377	2.328	88.1	90.7	84.8	1.958
nitrobenzene/V <sub>Si</sub> -SiCNT	1.866	1.907	1.862	111.7	112.5	111.5	1.929
nitrobenzene/Nb <sub>Si</sub> -SiCNT	2.022	2.031	2.022	106.4	105.3	106.4	2.228
nitrobenzene/Ta <sub>Si</sub> -SiCNT	2.001	2.060	2.009	104.7	107.8	104.1	2.237
nitrobenzene/Cr <sub>Si</sub> -SiCNT	1.829	1.957	1.829	107.4	113.2	107.4	2.104
nitrobenzene/Mo <sub>Si</sub> -SiCNT	1.960	1.996	1.960	108.3	108.3	108.2	1.913
nitrobenzene/W <sub>Si</sub> -SiCNT	1.970	1.987	1.973	107.9	106.1	107.3	2.003
nitrobenzene/Mn <sub>Si</sub> -SiCNT	1.923	1.924	1.923	106.5	106.7	106.5	2.112
nitrobenzene/Tc <sub>Si</sub> -SiCNT	1.950	1.978	1.943	106.1	107.6	107.7	2.097
nitrobenzene/Re <sub>Si</sub> -SiCNT	1.949	1.976	1.953	107.2	107.1	105.9	2.045



#### 4.1.4 สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน แสดงดังภาพที่ 4.13, 4.14 และ 4.15 ตามลำดับ สมบัติทางโครงสร้างในเทอมของความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะพันธะของการดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะ

แทรนซิชันแสดงดังตารางที่ 4.5 สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (toluene/SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C1-Si1, C1-Si2 และ C1-Si3 มีค่าเท่ากับ 1.798, 1.824 และ 1.798 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-C1-Si2, Si1-C1-Si3 และ Si2-C1-Si3 มีค่าเท่ากับ 119.3, 121.2 และ 119.3° ตามลำดับ สามารถอธิบายได้ว่าเมื่อเปรียบเทียบกับก่อนและหลังดูดซับโพลูอินพบว่าระยะพันธะและมุมพันธะแตกต่างจากเดิมเล็กน้อย ระยะดูดซับระหว่างโพลูอินและแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ 3.490 Å แสดงให้เห็นถึงอันตรกิริยาแบบอ่อน ๆ ระหว่างโพลูอินกับแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ ซึ่งสอดคล้องกับพลังงานการดูดซับที่มีค่าต่ำ

การดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (toluene/V<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง V-Si1, V-Si2 และ V-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.464, 2.481 และ 2.465 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-V-Si2, Si1-V-Si3 และ Si2-V-Si3 มีค่าเท่ากับ 83.3, 86.1 และ 83.4° ตามลำดับ การดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมไนโอเบียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (toluene/Nb<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Nb-Si1, Nb-Si2 และ Nb-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.513, 2.546 และ 2.510 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Nb-Si2, Si1-Nb-Si3 และ Si2-Nb-Si3 มีค่าเท่ากับ 84.3, 85.0 และ 78.6° ตามลำดับ การดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแทนทาลัมตรงตำแหน่งคาร์บอน (toluene /Ta<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Ta-Si1, Ta-Si2 และ Ta-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.554, 2.534 และ 2.546 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Ta-Si2, Si1-Ta-Si3 และ Si2-Ta-Si3 มีค่าเท่ากับ 82.4, 81.5 และ 83.5° ตามลำดับ การดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (toluene/C<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Cr-Si1, Cr-Si2 และ Cr-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.415, 2.315 และ 2.311 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Cr-Si2, Si1-Cr-Si3 และ Si2-Cr-Si3 มีค่าเท่ากับ 80.9, 85.0 และ 96.4° ตามลำดับ การดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งคาร์บอน (toluene/Mo<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mo-Si1, Mo-Si2 และ Mo-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.398, 2.563 และ 2.393 Å ตามลำดับ และมุมพันธะ

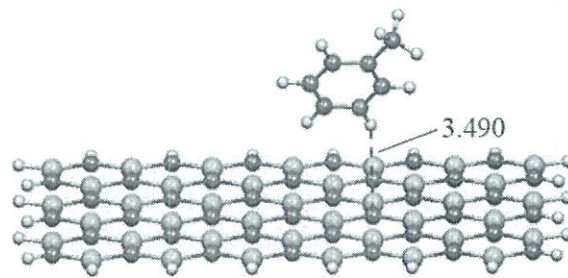
ตรงตำแหน่ง Si1-Mo-Si2, Si1-Mo-Si3 และ Si2-Mo-Si3 มีค่าเท่ากับ 80.6, 94.5 และ 79.9° ตามลำดับ การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมทั้งสแตนตรงตำแหน่งคาร์บอน (toluene/W<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง W-Si1, W-Si2 และ W-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.437, 2.479 และ 2.426 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-W-Si2, Si1-W-Si3 และ Si2-W-Si3 มีค่าเท่ากับ 81.5, 88.6 และ 86.4° ตามลำดับ การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแมงกานีสตรงตำแหน่งคาร์บอน (Mn<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mn-Si1, Mn-Si2 และ Mn-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.294, 2.310 และ 2.320 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Mn-Si2, Si1-Mn-Si3 และ Si2-Mn-Si3 มีค่าเท่ากับ 91.0, 87.9 และ 86.7° ตามลำดับ การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมเทคนิคนี้เชื่อมตรงตำแหน่งคาร์บอน (toluene/Tc<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Tc-Si1, Tc-Si2 และ Tc-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.355, 2.427 และ 2.353 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Tc-Si2, Si1-Tc-Si3 และ Si2-Tc-Si3 มีค่าเท่ากับ 85.2, 92.0 และ 85.2° ตามลำดับ การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (toluene/Re<sub>C</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Re-Si1, Re-Si2 และ Re-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.368, 2.427 และ 2.368 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Re-Si2, Si1-Re-Si3 และ Si2-Re-Si3 มีค่าเท่ากับ 85.5, 91.4 และ 85.5° ตามลำดับ

การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (toluene/V<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง V-C1, V-C2 และ V-C3 มีค่าเท่ากับ 1.891, 1.983 และ 1.884 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-V-C2, C1-V-C3 และ C2-V-C3 มีค่าเท่ากับ 109.2, 115.2 และ 109.6° ตามลำดับ การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมไนโอเบียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (toluene/Nb<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Nb-C1, Nb-C2 และ Nb-C3 มีค่าเท่ากับ 1.986, 2.035 และ 1.982 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Nb-C2, C1-Nb-C3 และ C2-Nb-C3 มีค่าเท่ากับ 107.6, 108.4 และ 107.5° ตามลำดับ การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแทนทาลัมตรงตำแหน่งซิลิกอน (toluene/Ta<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Ta-C1, Ta-C2 และ Ta-C3 มีค่าเท่ากับ 1.978, 2.023 และ 1.982 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Ta-C2, C1-Ta-C3 และ C2-Ta-C3 มีค่าเท่ากับ 107.5, 108.5 และ 107.6° ตามลำดับ การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (toluene/Cr<sub>Si</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Cr-C1, Cr-C2 และ Cr-C3 มีค่าเท่ากับ 1.825, 1.883 และ 1.825 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Cr-C2, C1-Cr-C3 และ C2-Cr-C3 มีค่าเท่ากับ 119.4, 121.0 และ 119.4° ตามลำดับ การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติม

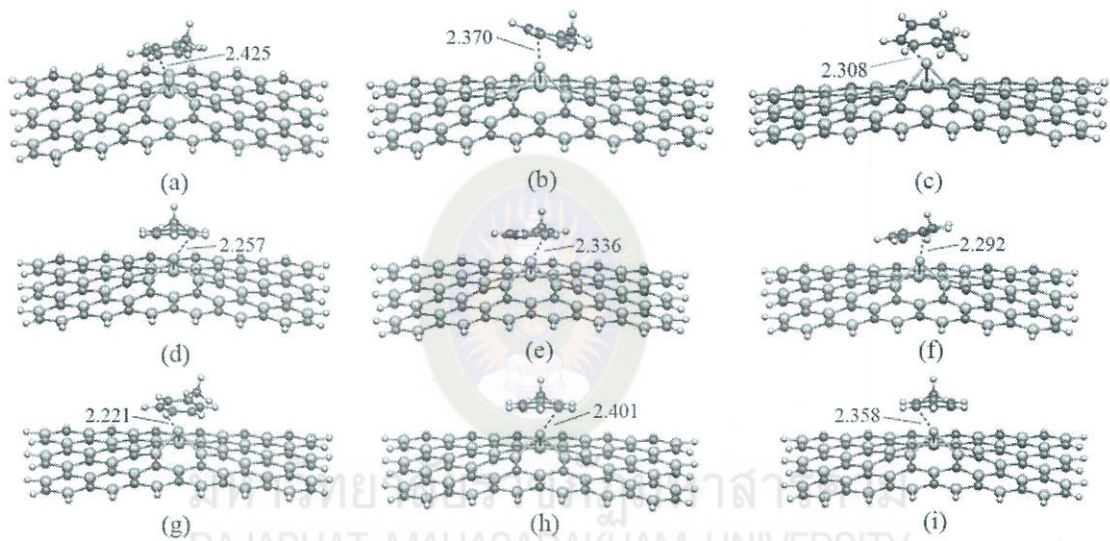
โมลิบดีนัมตรงตำแหน่งซิลิกอน (toluene/Mo<sub>5</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mo-C1, Mo-C2 และ Mo-C3 มีค่าเท่ากับ 1.932, 1.982 และ 1.930 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Mo-C2, C1-Mo-C3 และ C2-Mo-C3 มีค่าเท่ากับ 113.2, 114.5 และ 113.1° ตามลำดับ การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมทั้งสแตนตรงตำแหน่งซิลิกอน (toluene/W<sub>5</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง W-C1, W-C2 และ W-C3 มีค่าเท่ากับ 1.933, 1.964 และ 1.933 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-W-C2, C1-W-C3 และ C2-W-C3 มีค่าเท่ากับ 116.9, 116.9 และ 116.9° ตามลำดับ การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมเทคโนโลยีตรงตำแหน่งซิลิกอน (toluene/Tc<sub>5</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Tc-C1, Tc-C2 และ Tc-C3 มีค่าเท่ากับ 1.938, 1.972 และ 1.938 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Tc-C2, C1-Tc-C3 และ C2-Tc-C3 มีค่าเท่ากับ 109.2, 112.5 และ 109.4° ตามลำดับ การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (toluene/Re<sub>5</sub>-SiCNS) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Re-C1, Re-C2 และ Re-C3 มีค่าเท่ากับ 1.880, 1.914 และ 1.880 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Re-C2, C1-Re-C3 และ C2-Re-C3 มีค่าเท่ากับ 120.3, 119.3 และ 120.3° ตามลำดับ เมื่อเปรียบเทียบความยาวพันธะและมุมพันธะก่อนและหลังดูดซับโทลูอินพบว่า ความยาวพันธะและมุมพันธะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันมีการเปลี่ยนแปลง ความยาวพันธะมีทั้งยาวขึ้นและสั้นลง มุมพันธะมีทั้งเพิ่มขึ้นและลดลงเนื่องจากการเกิดอันตรกิริยา ระหว่างโทลูอินกับแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันทั้งตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน

ระยะดูดซับของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ 3.490 Å ระยะดูดซับของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคโนโลยีเนียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ 2.476, 2.370, 2.309, 2.234, 2.336, 2.292, 2.267, 2.473 และ 2.358 Å ตามลำดับ

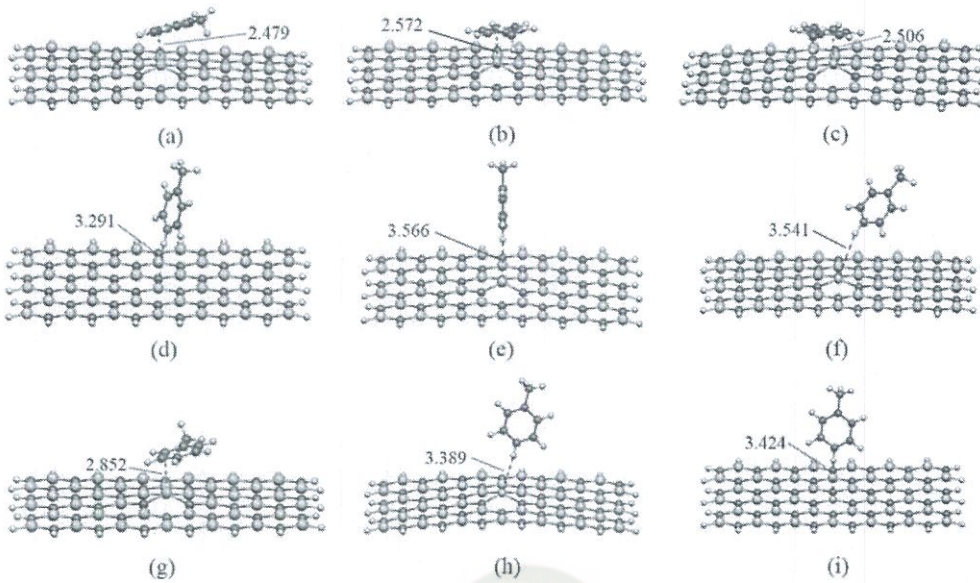
ระยะดูดซับของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคโนโลยีเนียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ 2.479, 2.572, 2.506, 3.291, 3.566, 3.541, 2.852, 3.389, 3.424 Å ตามลำดับ แสดงให้เห็นว่าระยะดูดซับโทลูอินของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะทรานซิชันทั้งตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนมีระยะดูดซับสั้นกว่าการดูดซับบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และเป็นการดูดซับทางกายภาพ



ภาพที่ 4.13 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (toluene/SiCNS)



ภาพที่ 4.14 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน (a) toluene/ $V_C$ -SiCNS, (b) toluene/ $Nb_C$ -SiCNS, (c) toluene/ $Ta_C$ -SiCNS, (d) toluene/ $Cr_C$ -SiCNS, (e) toluene/ $Mo_C$ -SiCNS, (f) toluene/ $W_C$ -SiCNS, (g) toluene/ $Mn_C$ -SiCNS, (h) toluene/ $Tc_C$ -SiCNS และ (i) toluene/ $Re_C$ -SiCNS



ภาพที่ 4.15 โครงสร้างเสถียรของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน (a) toluene/ $V_{Si}$ -SiCNS, (b) toluene/ $Nb_{Si}$ -SiCNS, (c) toluene/ $Ta_{Si}$ -SiCNS, (d) toluene/ $Cr_{Si}$ -SiCNS, (e) toluene/ $Mo_{Si}$ -SiCNS, (f) toluene/ $W_{Si}$ -SiCNS, (g) toluene/ $Mn_{Si}$ -SiCNS, (h) toluene/ $Tc_{Si}$ -SiCNS และ (i) toluene/ $Re_{Si}$ -SiCNS

### ตารางที่ 4.5

ความยาวพันธะ (Å) มุมพันธะ (°) และระยะดูดซับ (AD, Å) ของการดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	Si1-TM	Si2-TM	Si3-TM	Si1-TM-	Si1-TM-	Si2-TM-	AD
	or	or	or	Si2 or	Si3 or	Si3 or	
	C1-TM	C2-TM	C3-TM	C1-TM-	C1-TM-	C2-TM-	
	(Å)	(Å)	(Å)	C2 (°)	C3 (°)	C3 (°)	(Å)
toluene/SiCNS	1.798	1.824	1.798	119.3	121.2	119.3	3.490
toluene/V <sub>C</sub> -SiCNS	2.464	2.481	2.465	83.3	86.1	83.4	2.476
toluene/Nb <sub>C</sub> -SiCNS	2.513	2.546	2.510	84.3	85.0	78.5	2.370
toluene/Ta <sub>C</sub> -SiCNS	2.554	2.534	2.546	82.4	81.4	83.1	2.309
toluene/Cr <sub>C</sub> -SiCNS	2.415	2.315	2.311	80.9	85.0	96.4	2.234
toluene/Mo <sub>C</sub> -SiCNS	2.398	2.563	2.393	80.6	94.5	79.9	2.336
toluene/W <sub>C</sub> -SiCNS	2.437	2.479	2.426	81.5	88.6	86.4	2.292
toluene/Mn <sub>C</sub> -SiCNS	2.294	2.310	2.320	91.0	87.9	86.7	2.267
toluene/Tc <sub>C</sub> -SiCNS	2.355	2.427	2.353	85.2	92.0	85.2	2.473
toluene/Re <sub>C</sub> -SiCNS	2.368	2.427	2.368	85.5	91.4	85.5	2.358
toluene/V <sub>Si</sub> -SiCNS	1.891	1.983	1.884	109.2	115.2	109.6	2.479
toluene/Nb <sub>Si</sub> -SiCNS	1.986	2.035	1.982	107.6	108.3	107.5	2.572
toluene/Ta <sub>Si</sub> -SiCNS	1.978	2.023	1.982	107.5	108.5	107.6	2.506
toluene/Cr <sub>Si</sub> -SiCNS	1.825	1.883	1.825	119.4	121.0	119.4	3.291
toluene/Mo <sub>Si</sub> -SiCNS	1.932	1.982	1.930	113.2	114.5	113.1	3.566
toluene/W <sub>Si</sub> -SiCNS	1.933	1.964	1.933	116.9	116.9	116.9	3.541
toluene/Mn <sub>Si</sub> -SiCNS	1.938	1.972	1.938	109.2	112.5	109.4	2.852
toluene/Tc <sub>Si</sub> -SiCNS	1.938	1.972	1.938	110.2	111.2	110.3	3.389
toluene/Re <sub>Si</sub> -SiCNS	1.880	1.914	1.880	120.3	119.3	120.3	3.424

#### 4.1.5 สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน แสดงดังภาพที่ 4.16, 4.17 และ 4.18 ตามลำดับ สมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันแสดงดังตารางที่ 4.6 จากการศึกษาสมบัติทางโครงสร้างของการดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (aniline/SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง C1-Si1, C1-Si2 และ C1-Si3 มีค่าเท่ากับ 1.834, 1.849 และ 1.834 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-C1-Si2, Si1-C1-Si3 และ Si2-C1-Si3 มีค่าเท่ากับ 114.7, 117.9 และ 114.7° ตามลำดับ สามารถอธิบายได้ว่า เมื่อเปรียบเทียบกับก่อนและหลังดูดซับอนิไลน์พบว่าระยะพันธะและมุมพันธะแตกต่างจากเดิมเล็กน้อย ระยะดูดซับระหว่างอนิไลน์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ 2.079 Å แสดงให้เห็นถึงระยะดูดซับเหมาะสม

การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (aniline/V<sub>C</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง V-Si1, V-Si2 และ V-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.439, 2.483 และ 2.436 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-V-Si2, Si1-V-Si3 และ Si2-V-Si3 มีค่าเท่ากับ 85.7, 80.3 และ 82.9° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมไนโอเบียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (aniline/Nb<sub>C</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Nb-Si1, Nb-Si2 และ Nb-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.493, 2.566 และ 2.532 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Nb-Si2, Si1-Nb-Si3 และ Si2-Nb-Si3 มีค่าเท่ากับ 81.9, 82.5 และ 80.7° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแทนทาลัมตรงตำแหน่งคาร์บอน (aniline/Ta<sub>C</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Ta-Si1, Ta-Si2 และ Ta-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.484, 2.561 และ 2.510 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Ta-Si2, Si1-Ta-Si3 และ Si2-Ta-Si3 มีค่าเท่ากับ 82.2, 83.5 และ 80.8° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (aniline/Cr<sub>C</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Cr-Si1, Cr-Si2 และ Cr-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.319, 2.371 และ 2.342 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Cr-Si2, Si1-Cr-Si3 และ Si2-Cr-Si3 มีค่าเท่ากับ 84.9, 84.6 และ 85.8° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งคาร์บอน (aniline/Mo<sub>C</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mo-Si1, Mo-Si2 และ Mo-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.416, 2.455 และ 2.410 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Mo-Si2, Si1-Mo-Si3 และ Si2-Mo-Si3 มีค่าเท่ากับ 82.7, 87.2 และ 82.6° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมทังสเตนตรงตำแหน่งคาร์บอน (aniline/W<sub>C</sub>-SiCNT) พบว่า

ความยาวพันธะตรงตำแหน่ง W-Si1, W-Si2 และ W-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.440, 2.470 และ 2.395 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-W-Si2, Si1-W-Si3 และ Si2-W-Si3 มีค่าเท่ากับ 83.3, 86.1 และ 84.4° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแมงกานีสตรงตำแหน่งคาร์บอน (aniline/Mn<sub>C</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mn-Si1, Mn-Si2 และ Mn-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.286, 2.356 และ 2.291 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Mn-Si2, Si1-Mn-Si3 และ Si2-Mn-Si3 มีค่าเท่ากับ 87.1, 89.1 และ 87.2° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมเทคนิคีเซียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (aniline/Tc<sub>C</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Tc-Si1, Tc-Si2 และ Tc-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.339, 2.411 และ 2.338 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Tc-Si2, Si1-Tc-Si3 และ Si2-Tc-Si3 มีค่าเท่ากับ 86.0, 87.7 และ 86.1° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน (aniline/Re<sub>C</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Re-Si1, Re-Si2 และ Re-Si3 มีค่าเท่ากับ 2.361, 2.357 และ 2.357 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง Si1-Re-Si2, Si1-Re-Si3 และ Si2-Re-Si3 มีค่าเท่ากับ 86.6, 86.0 และ 86.7° ตามลำดับ

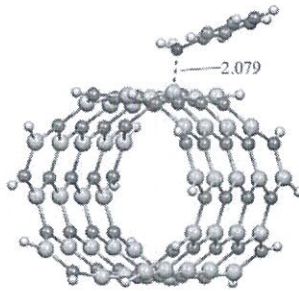
การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (aniline/V<sub>Si</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง V-C1, V-C2 และ V-C3 มีค่าเท่ากับ 1.911, 1.959 และ 1.909 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-V-C2, C1-V-C3 และ C2-V-C3 มีค่าเท่ากับ 107.2, 114.8 และ 107.6° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมไนโอเบียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (aniline/Nb<sub>Si</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Nb-C1, Nb-C2 และ Nb-C3 มีค่าเท่ากับ 2.032, 2.066 และ 2.030 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Nb-C2, C1-Nb-C3 และ C2-Nb-C3 มีค่าเท่ากับ 106.9, 105.2 และ 107.3° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแทนทาลัมตรงตำแหน่งซิลิกอน (aniline/Ta<sub>Si</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Ta-C1, Ta-C2 และ Ta-C3 มีค่าเท่ากับ 2.008, 2.044 และ 2.010 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Ta-C2, C1-Ta-C3 และ C2-Ta-C3 มีค่าเท่ากับ 107.6, 107.3 และ 107.2° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (aniline/Cr<sub>Si</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Cr-C1, Cr-C2 และ Cr-C3 มีค่าเท่ากับ 1.872, 1.925 และ 1.839 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Cr-C2, C1-Cr-C3 และ C2-Cr-C3 มีค่าเท่ากับ 105.5, 117.5 และ 107.2° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งซิลิกอน (aniline/Mo<sub>Si</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mo-C1, Mo-C2 และ Mo-C3 มีค่าเท่ากับ 1.949, 2.039 และ 1.954 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Mo-C2, C1-Mo-C3 และ C2-Mo-C3 มีค่าเท่ากับ 104.9, 117.4 และ 103.5° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บน



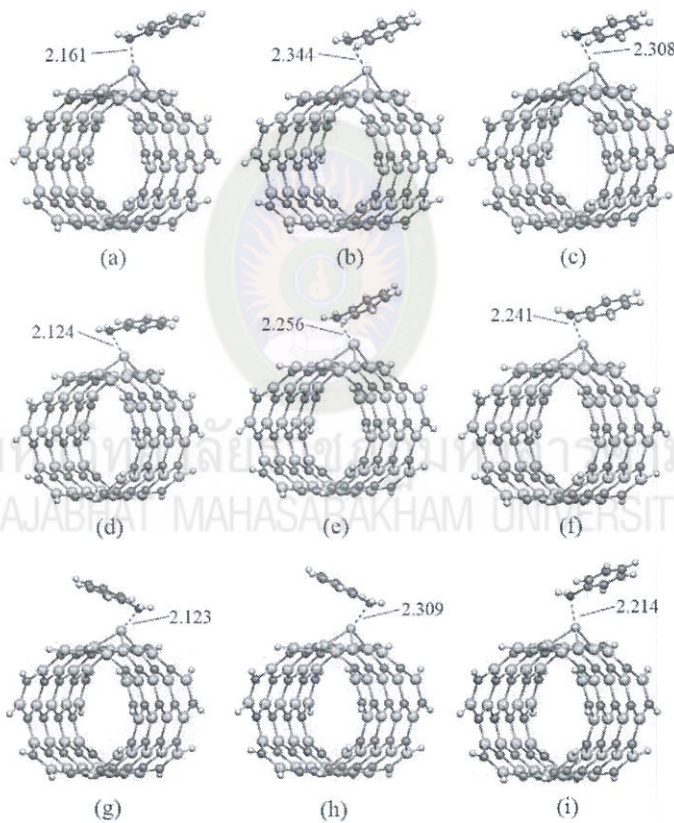
ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมทั้งสแตนตรงตำแหน่งซิลิกอน (aniline/W<sub>Si</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง W-C1, W-C2 และ W-C3 มีค่าเท่ากับ 1.945, 2.018 และ 1.945 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-W-C2, C1-W-C3 และ C2-W-C3 มีค่าเท่ากับ 104.8, 113.5 และ 104.8° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแมงกานีสตรงตำแหน่งซิลิกอน (aniline/Mn<sub>Si</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Mn-C1, Mn-C2 และ Mn-C3 มีค่าเท่ากับ 1.852, 2.018 และ 1.945 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Mn-C2, C1-Mn-C3 และ C2-Mn-C3 มีค่าเท่ากับ 108.8, 113.5 และ 104.8° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมเทคนิคนี้เชื่อมตรงตำแหน่งซิลิกอน (aniline/Tc<sub>Si</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Tc-C1, Tc-C2 และ Tc-C3 มีค่าเท่ากับ 1.946, 2.007 และ 1.943 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Tc-C2, C1-Tc-C3 และ C2-Tc-C3 มีค่าเท่ากับ 103.4, 113.2 และ 103.5° ตามลำดับ การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน (aniline/Re<sub>Si</sub>-SiCNT) พบว่าความยาวพันธะตรงตำแหน่ง Re-C1, Re-C2 และ Re-C3 มีค่าเท่ากับ 1.934, 1.994 และ 1.937 Å ตามลำดับ และมุมพันธะตรงตำแหน่ง C1-Re-C2, C1-Re-C3 และ C2-Re-C3 มีค่าเท่ากับ 103.5, 115.4 และ 103.5° ตามลำดับ เมื่อเปรียบเทียบความยาวพันธะและมุมพันธะก่อนและหลังดูดซับอนิไลน์พบว่า ความยาวพันธะและมุมพันธะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีการเปลี่ยนแปลง ความยาวพันธะมีทั้งยาวขึ้นและสั้นลง มุมพันธะมีทั้งเพิ่มขึ้นและลดลงเนื่องจากการเกิดอันตรกิริยา ระหว่างอนิไลน์กับท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน

ระยะดูดซับของการดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ 2.079 Å ระยะดูดซับของการดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนิคนี้เชื่อม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ 2.161, 2.344, 2.308, 2.124, 2.256, 2.241, 2.123, 2.309 และ 2.214 Å

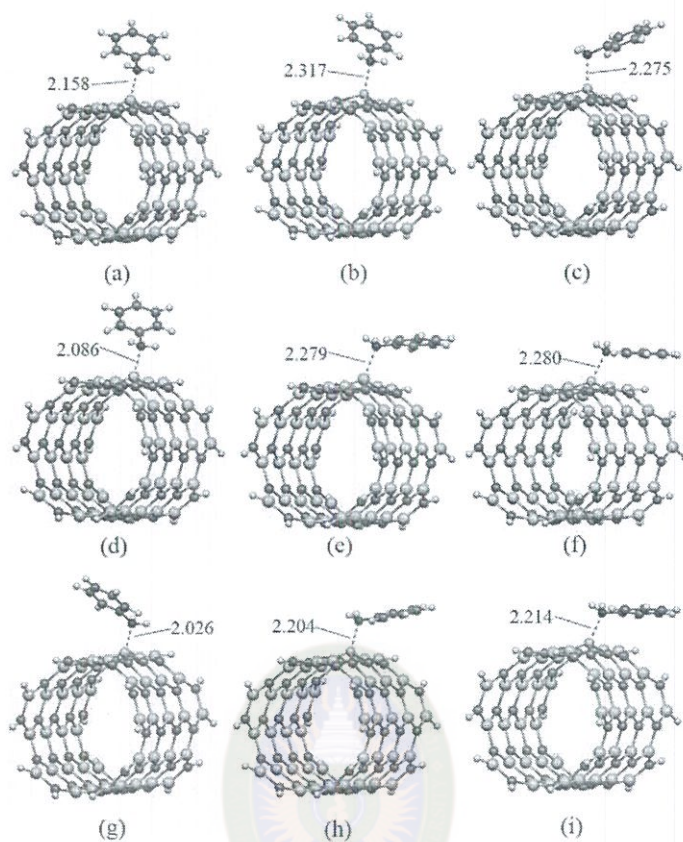
ระยะดูดซับของการดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนิคนี้เชื่อม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ 2.158, 2.317, 2.275, 2.086, 2.279, 2.280, 2.026, 2.204 และ 2.209 Å แสดงให้เห็นว่าระยะดูดซับอนิไลน์ของระบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันทั้งตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนมีระยะดูดซับใกล้เคียงกับการดูดซับบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม



ภาพที่ 4.16 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับอนิลีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (aniline/SiCNT)



ภาพที่ 4.17 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับอนิลีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอน (a) aniline/ $V_C$ -SiCNS, (b) aniline/ $Nb_C$ -SiCNS, (c) aniline/ $Ta_C$ -SiCNS, (d) aniline/ $Cr_C$ -SiCNS, (e) aniline/ $Mo_C$ -SiCNS, (f) aniline/ $W_C$ -SiCNS, (g) aniline/ $Mn_C$ -SiCNS, (h) aniline/ $Tc_C$ -SiCNS และ (i) aniline/ $Re_C$ -SiCNS



ภาพที่ 4.18 โครงสร้างที่เสถียรของการดูดซับอนิลีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน (a) aniline/ $V_{Si}$ -SiCNT, (b) aniline/ $Nb_{Si}$ -SiCNT, (c) aniline/ $Ta_{Si}$ -SiCNT, (d) aniline/ $Cr_{Si}$ -SiCNT, (e) aniline/ $Mo_{Si}$ -SiCNT, (f) aniline/ $W_{Si}$ -SiCNT, (g) aniline/ $Mn_{Si}$ -SiCNT, (h) aniline/ $Tc_{Si}$ -SiCNT และ (i) aniline/ $Re_{Si}$ -SiCNT

#### ตารางที่ 4.6

ความยาวพันธะ (Å) มุมพันธะ (°) และระยะดูดซับ (AD, Å) ของการดูดซับ  
อนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	Si1-TM	Si2-TM	Si3-TM	Si1-TM-	Si1-TM-	Si2-TM-	AD
	or	or	or	Si2	or	Si3	
	C1-TM	C2-TM	C3-TM	C1-TM-	C1-TM-	C2-TM-	
	(Å)	(Å)	(Å)	C2 (°)	C3 (°)	C3 (°)	(Å)
aniline/SiCNT	1.834	1.849	1.834	114.7	117.9	114.7	2.079
aniline/V <sub>C</sub> -SiCNT	2.439	2.483	2.436	85.6	82.9	85.6	2.161
aniline/Nb <sub>C</sub> -SiCNT	2.493	2.566	2.532	81.9	82.5	80.7	2.344
aniline/Ta <sub>C</sub> -SiCNT	2.484	2.561	2.510	82.2	83.5	80.8	2.308
aniline/Cr <sub>C</sub> -SiCNT	2.319	2.371	2.342	84.9	84.6	85.8	2.124
aniline/Mo <sub>C</sub> -SiCNT	2.416	2.455	2.410	82.7	87.2	82.6	2.256
aniline/W <sub>C</sub> -SiCNT	2.440	2.470	2.395	83.3	86.1	84.4	2.241
aniline/Mn <sub>C</sub> -SiCNT	2.286	2.356	2.291	87.1	89.1	87.2	2.123
aniline/Tc <sub>C</sub> -SiCNT	2.339	2.411	2.338	86.0	87.7	86.1	2.309
aniline/Re <sub>C</sub> -SiCNT	2.361	2.357	2.357	86.6	86.0	86.7	2.214
aniline/V <sub>Si</sub> -SiCNT	1.911	1.959	1.909	107.2	114.8	107.6	2.158
aniline/Nb <sub>Si</sub> -SiCNT	2.032	2.066	2.030	106.9	105.2	107.3	2.317
aniline/Ta <sub>Si</sub> -SiCNT	2.008	2.044	2.010	107.6	107.3	107.2	2.275
aniline/Cr <sub>Si</sub> -SiCNT	1.872	1.925	1.839	105.5	117.5	109.4	2.086
aniline/Mo <sub>Si</sub> -SiCNT	1.949	2.039	1.954	104.9	117.4	103.5	2.279
aniline/W <sub>Si</sub> -SiCNT	1.945	2.018	1.945	104.8	119.0	104.8	2.280
aniline/Mn <sub>Si</sub> -SiCNT	1.852	1.880	1.881	108.8	113.5	106.1	2.026
aniline/Tc <sub>Si</sub> -SiCNT	1.946	2.007	1.943	103.4	113.2	103.5	2.204
aniline/Re <sub>Si</sub> -SiCNT	1.934	1.994	1.937	103.5	115.4	103.5	2.209

## 4.2 สมบัติทางพลังงานและความสามารถในการดูดซับไนโตรเบนซีน โทลูอิน และอนิ ลีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

### 4.2.1 สมบัติทางพลังงานการยึดจับระหว่างอะตอมโลหะแทรนซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอน คาร์ไบด์ และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์

พลังงานยึดจับ (Binding energies,  $E_{\text{binding}}$ ) ระหว่างอะตอมโลหะแทรนซิชันบนแผ่น นาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน แสดงดังตารางที่ 4.7 พลังงานการยึดจับของอะตอมโลหะวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่า เท่ากับ -131.795, -146.695, -155.627, -117.991, -181.727, -171.649, -123.397, -177.98 และ -200.217 kcal/mol ตามลำดับ พลังงานการยึดจับของอะตอมโลหะวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมบนแผ่นนาโนซิลิกอน คาร์ไบด์ตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ -328.884, -355.841, -383.067, -307.200, -365.019, -380.396, -277.105, -333.275 และ -366.291 kcal/mol ตามลำดับ

พลังงานการยึดจับของอะตอมโลหะอะตอมโลหะวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่ง คาร์บอนมีค่าเท่ากับ -122.183, -152.200, -155.955, -130.944, -197.938, -184.009, -124.161, -180.281 และ -197.358 kcal/mol ตามลำดับ พลังงานการยึดจับของอะตอมโลหะวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมบนท่อนาโน ซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ -271.099, -313.182, -339.395, -272.580, -332.934, -346.364, -235.536, -279.033 และ -318.686 kcal/mol ตามลำดับ

โดยการยึดจับระหว่างแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และโลหะแทรนซิชัน ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ และโลหะแทรนซิชันเป็นการยึดจับทางเคมี จากค่าพลังงานการยึดจับของทั้งแผ่นและท่อนาโนซิลิกอน คาร์ไบด์พบว่า การเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอนสามารถแทนที่อะตอมตำแหน่งซิลิกอนได้ ดีกว่าการแทนตำแหน่งคาร์บอน โดยที่การเติมแทนทาลัมบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่ง ซิลิกอนและการเติมทั้งสแตนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งซิลิกอนสามารถแทนได้ดีที่สุด

#### ตารางที่ 4.7

พลังงานการยึดจับ ( $E_{\text{binding}}$ , kcal/mol) ระหว่างอะตอมโลหะทรานซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์

ระบบ	$E_{\text{binding}}$ (kcal/mol)	ระบบ	$E_{\text{binding}}$ (kcal/mol)
V + SiCNS $\rightarrow$ V <sub>C</sub> -SiCNS	-131.795	V + SiCNT $\rightarrow$ V <sub>C</sub> -SiCNT	-122.183
Nb + SiCNS $\rightarrow$ Nb <sub>C</sub> -SiCNS	-146.695	Nb + SiCNT $\rightarrow$ Nb <sub>C</sub> -SiCNT	-152.200
Ta + SiCNS $\rightarrow$ Ta <sub>C</sub> -SiCNS	-155.627	Ta + SiCNT $\rightarrow$ Ta <sub>C</sub> -SiCNT	-155.955
Cr + SiCNS $\rightarrow$ Cr <sub>C</sub> -SiCNS	-117.991	Cr + SiCNT $\rightarrow$ Cr <sub>C</sub> -SiCNT	-130.944
Mo + SiCNS $\rightarrow$ Mo <sub>C</sub> -SiCNS	-181.727	Mo + SiCNT $\rightarrow$ Mo <sub>C</sub> -SiCNT	-197.938
W + SiCNS $\rightarrow$ W <sub>C</sub> -SiCNS	-171.649	W + SiCNT $\rightarrow$ W <sub>C</sub> -SiCNT	-184.009
Mn + SiCNS $\rightarrow$ Mn <sub>C</sub> -SiCNS	-123.397	Mn + SiCNT $\rightarrow$ Mn <sub>C</sub> -SiCNT	-124.161
Tc + SiCNS $\rightarrow$ Tc <sub>C</sub> -SiCNS	-177.398	Tc + SiCNT $\rightarrow$ Tc <sub>C</sub> -SiCNT	-180.281
Re + SiCNS $\rightarrow$ Re <sub>C</sub> -SiCNS	-200.217	Re + SiCNT $\rightarrow$ Re <sub>C</sub> -SiCNT	-197.358
V + SiCNS $\rightarrow$ V <sub>Si</sub> -SiCNS	-328.884	V + SiCNT $\rightarrow$ V <sub>Si</sub> -SiCNT	-271.099
Nb + SiCNS $\rightarrow$ Nb <sub>Si</sub> -SiCNS	-355.841	Nb + SiCNT $\rightarrow$ Nb <sub>Si</sub> -SiCNT	-313.182
Ta + SiCNS $\rightarrow$ Ta <sub>Si</sub> -SiCNS	-383.067	Ta + SiCNT $\rightarrow$ Ta <sub>Si</sub> -SiCNT	-339.395
Cr + SiCNS $\rightarrow$ Cr <sub>Si</sub> -SiCNS	-307.200	Cr + SiCNT $\rightarrow$ Cr <sub>Si</sub> -SiCNT	-272.580
Mo + SiCNS $\rightarrow$ Mo <sub>Si</sub> -SiCNS	-365.019	Mo + SiCNT $\rightarrow$ Mo <sub>Si</sub> -SiCNT	-332.934
W + SiCNS $\rightarrow$ W <sub>Si</sub> -SiCNS	-380.396	W + SiCNT $\rightarrow$ W <sub>Si</sub> -SiCNT	-346.364
Mn + SiCNS $\rightarrow$ Mn <sub>Si</sub> -SiCNS	-277.105	Mn + SiCNT $\rightarrow$ Mn <sub>Si</sub> -SiCNT	-235.536
Tc + SiCNS $\rightarrow$ Tc <sub>Si</sub> -SiCNS	-333.275	Tc + SiCNT $\rightarrow$ Tc <sub>Si</sub> -SiCNT	-279.033
Re + SiCNS $\rightarrow$ Re <sub>Si</sub> -SiCNS	-366.291	Re + SiCNT $\rightarrow$ Re <sub>Si</sub> -SiCNT	-318.686

#### 4.2.2 สมบัติทางพลังงานและความสามารถในการดูดซับไนโตรเบนซีน

4.2.2.1 สมบัติทางพลังงานและความสามารถในการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน

พลังงานการดูดซับ ของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่เติมโลหะทรานซิชัน แสดงดังตารางที่ 4.8 พลังงานการดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม มีค่าเท่ากับ -3.587 kcal/mol พลังงานการดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสแตน แมงกานีส เทคนีเชียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มี

ค่าเท่ากับ -55.769, -66.186, -94.340, -62.978, -58.494, -79.437, -66.831, -44.680 และ -53.850 kcal/mol ตามลำดับ พลังงานการดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ -41.622, -61.026, -71.095, -22.086, -55.585, -71.161, -32.296, -37.257 และ -48.161 kcal/mol ตามลำดับ ความสามารถในการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันทั้งตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน เป็นดังนี้ nitrobenzene/Ta<sub>C</sub>-SiCNS > nitrobenzene/W<sub>C</sub>-SiCNS > nitrobenzene/W<sub>Si</sub>-SiCNS > nitrobenzene/Ta<sub>Si</sub>-SiCNS > nitrobenzene/Mn<sub>C</sub>-SiCNS > nitrobenzene/Nb<sub>C</sub>-SiCNS > nitrobenzene/Cr<sub>C</sub>-SiCNS > nitrobenzene/Nb<sub>Si</sub>-SiCNS > nitrobenzene/Mo<sub>C</sub>-SiCNS > nitrobenzene/V<sub>C</sub>-SiCNS > nitrobenzene/Mo<sub>Si</sub>-SiCNS > nitrobenzene/Re<sub>C</sub>-SiCNS > nitrobenzene/Re<sub>Si</sub>-SiCNS > nitrobenzene/Tc<sub>C</sub>-SiCNS > nitrobenzene/V<sub>Si</sub>-SiCNS > nitrobenzene/Tc<sub>Si</sub>-SiCNS > nitrobenzene/Mn<sub>Si</sub>-SiCNS > nitrobenzene/Cr<sub>Si</sub>-SiCNS จากข้อมูลข้างต้นพบว่าแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันสามารถดูดซับไนโตรเบนซีนได้ดีกว่าแบบดั้งเดิม โดยเฉพาะแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแทนทาลัมตรงตำแหน่งซิลิกอนสามารถดูดซับได้ดีที่สุด และสามารถสรุปได้ว่าการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมทั้งตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนสามารถปรับปรุงความสามารถในการดูดซับไนโตรเบนซีนได้ชัดเจน

#### ตารางที่ 4.8

พลังงานการดูดซับ ( $E_{ads}$ , kcal/mol) ของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่เติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	$E_{ads}$ (kcal/mol)
nitrobenzene + SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/SiCNS	-3.587
nitrobenzene + V <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/V <sub>C</sub> -SiCNS	-55.769
nitrobenzene + Nb <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/Nb <sub>C</sub> -SiCNS	-66.186
nitrobenzene + Ta <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/Ta <sub>C</sub> -SiCNS	-94.340
nitrobenzene + Cr <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/Cr <sub>C</sub> -SiCNS	-62.978
nitrobenzene + Mo <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/Mo <sub>C</sub> -SiCNS	-58.494
nitrobenzene + W <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/W <sub>C</sub> -SiCNS	-79.437
nitrobenzene + Mn <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/Mn <sub>C</sub> -SiCNS	-66.831
nitrobenzene + Tc <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/Tc <sub>C</sub> -SiCNS	-44.680
nitrobenzene + Re <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/Re <sub>C</sub> -SiCNS	-53.850
nitrobenzene + V <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/V <sub>Si</sub> -SiCNS	-41.622
nitrobenzene + Nb <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/Nb <sub>Si</sub> -SiCNS	-61.026
nitrobenzene + Ta <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/Ta <sub>Si</sub> -SiCNS	-71.095
nitrobenzene + Cr <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/Cr <sub>Si</sub> -SiCNS	-22.086
nitrobenzene + Mo <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/Mo <sub>Si</sub> -SiCNS	-55.585
nitrobenzene + W <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/W <sub>Si</sub> -SiCNS	-71.161
nitrobenzene + Mn <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/Mn <sub>Si</sub> -SiCNS	-32.296
nitrobenzene + Tc <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/Tc <sub>Si</sub> -SiCNS	-37.257
nitrobenzene + Re <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ nitrobenzene/Re <sub>Si</sub> -SiCNS	-48.161

4.2.2.2 สมบัติทางพลังงานและความสามารถในการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

พลังงานการดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่เติมโลหะแทรนซิชัน แสดงดังตารางที่ 4.9 จากการศึกษาพลังงานการดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม มีค่าเท่ากับ -6.227 kcal/mol พลังงานการดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ -63.868, -65.336, -89.877, -58.936, -48.436, -79.659, -64.705, -26.015 และ



-45.469 kcal/mol ตามลำดับ พลังงานการดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม ตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ -63.466, -62.761, -71.828, -23.621, -78.272, -76.178, -46.423, -35.765 และ -53.856 kcal/mol ตามลำดับ ความสามารถในการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันทั้งตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนเป็นดังนี้ nitrobenzene/Ta<sub>C</sub>-SiCNT > nitrobenzene/W<sub>C</sub>-SiCNT > nitrobenzene/Mo<sub>Si</sub>-SiCNT > nitrobenzene/W<sub>Si</sub>-SiCNT > nitrobenzene/Ta<sub>Si</sub>-SiCNT > nitrobenzene/Nb<sub>Si</sub>-SiCNT > nitrobenzene/Mn<sub>C</sub>-SiCNT > nitrobenzene/V<sub>C</sub>-SiCNT > nitrobenzene/V<sub>Si</sub>-SiCNT > nitrobenzene/Nb<sub>C</sub>-SiCNT > nitrobenzene/Cr<sub>Si</sub>-SiCNT > nitrobenzene/Re<sub>Si</sub>-SiCNT > nitrobenzene/Mo<sub>C</sub>-SiCNT > nitrobenzene/Mn<sub>Si</sub>-SiCNT > nitrobenzene/Re<sub>C</sub>-SiCNT > nitrobenzene/Tc<sub>Si</sub>-SiCNT > nitrobenzene/Tc<sub>C</sub>-SiCNT > nitrobenzene/Cr<sub>Si</sub>-SiCNT จากข้อมูลข้างต้นพบว่าท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันสามารถดูดซับไนโตรเบนซีนได้ดีกว่าแบบดั้งเดิม โดยเฉพาะท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแทนทาลัมตรงตำแหน่งคาร์บอนสามารถดูดซับได้ดีที่สุด และสามารถสรุปได้ว่าการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมสามารถปรับปรุงความสามารถในการดูดซับไนโตรเบนซีนได้ชัดเจน

ตารางที่ 4.9

พลังงานการดูดซับ ( $E_{ads}$ , kcal/mol) ของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่เติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	$E_{ads}$ (kcal/mol)
nitrobenzene + SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/SiCNT	-6.227
nitrobenzene + V <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/V <sub>C</sub> -SiCNT	-63.868
nitrobenzene + Nb <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/Nb <sub>C</sub> -SiCNT	-65.336
nitrobenzene + Ta <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/Ta <sub>C</sub> -SiCNT	-89.877
nitrobenzene + Cr <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/Cr <sub>C</sub> -SiCNT	-58.936
nitrobenzene + Mo <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/Mo <sub>C</sub> -SiCNT	-48.436
nitrobenzene + W <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/W <sub>C</sub> -SiCNT	-79.659
nitrobenzene + Mn <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/Mn <sub>C</sub> -SiCNT	-64.705
nitrobenzene + Tc <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/Tc <sub>C</sub> -SiCNT	-26.015
nitrobenzene + Re <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/Re <sub>C</sub> -SiCNT	-45.469
nitrobenzene + V <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/V <sub>Si</sub> -SiCNT	-63.466
nitrobenzene + Nb <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/Nb <sub>Si</sub> -SiCNT	-62.761
nitrobenzene + Ta <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/Ta <sub>Si</sub> -SiCNT	-71.828
nitrobenzene + Cr <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/Cr <sub>Si</sub> -SiCNT	-23.621
nitrobenzene + Mo <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/Mo <sub>Si</sub> -SiCNT	-78.272
nitrobenzene + W <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/W <sub>Si</sub> -SiCNT	-76.178
nitrobenzene + Mn <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/Mn <sub>Si</sub> -SiCNT	-46.423
nitrobenzene + Tc <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/Tc <sub>Si</sub> -SiCNT	-35.765
nitrobenzene + Re <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ nitrobenzene/Re <sub>Si</sub> -SiCNT	-53.856

#### 4.2.3 สมบัติทางพลังงานและความสามารถในการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

พลังงานการดูดซับของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน แสดงดังตารางที่ 4.10 จากการศึกษาพลังงานการดูดซับของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม มีค่าเท่ากับ  $-0.416$  kcal/mol พลังงานการดูดซับของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม ตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ  $-20.170$ ,  $-35.469$ ,  $-40.483$ ,  $-46.172$ ,  $-41.204$ ,  $-51.604$ ,  $-38.511$ ,  $-31.857$  และ  $-35.833$  kcal/mol ตามลำดับ พลังงานการดูดซับของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม ตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ  $-5.815$ ,  $-13.747$ ,  $-14.721$ ,  $-1.021$ ,  $-0.708$ ,  $-0.997$ ,  $-11.415$ ,  $7.531$ ,  $-1.060$  kcal/mol ตามลำดับ ความสามารถในการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนเป็นดังนี้  $\text{toluene/W}_C\text{-SiCNS} > \text{toluene/Cr}_C\text{-SiCNS} > \text{toluene/Mo}_C\text{-SiCNS} > \text{toluene/Ta}_C\text{-SiCNS} > \text{toluene/Mn}_C\text{-SiCNS} > \text{toluene/Re}_C\text{-SiCNS} > \text{toluene/Nb}_C\text{-SiCNS} > \text{toluene/Tc}_C\text{-SiCNS} > \text{toluene/V}_C\text{-SiCNS} > \text{toluene/Ta}_{Si}\text{-SiCNS} > \text{toluene/Nb}_{Si}\text{-SiCNS} > \text{toluene/Mn}_{Si}\text{-SiCNS} > \text{toluene/V}_{Si}\text{-SiCNS} > \text{toluene/Re}_{Si}\text{-SiCNS} > \text{toluene/Cr}_{Si}\text{-SiCNS} > \text{toluene/W}_{Si}\text{-SiCNS} > \text{toluene/Mo}_{Si}\text{-SiCNS}$  จากข้อมูลข้างต้นพบว่าแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันสามารถดูดซับโทลูอินได้ดีกว่าแบบดั้งเดิม โดยเฉพาะการเติมทังสเทนตรงตำแหน่งคาร์บอนสามารถดูดซับได้ดีที่สุด ยกเว้น การเติมรีเนียม โครเมียม ทังสเทน และโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งซิลิกอนที่มีพลังงานการดูดซับต่ำใกล้เคียงแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม นอกจากนี้จากค่าพลังงานการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมเทคนีเซียมตรงตำแหน่งซิลิกอน ( $\text{toluene/Tc}_{Si}\text{-SiCNS}$ ) ที่มีค่าเป็นบวกแสดงว่ากระบวนการดูดซับนี้เป็นปฏิกิริยาดูดความร้อน (Endothermic Reaction) ซึ่งไม่เหมาะสมที่จะนำมาปรับปรุงความสามารถในการดูดซับ สามารถสรุปได้ว่าการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนสามารถปรับปรุงความสามารถในการดูดซับโทลูอินได้ชัดเจน ส่วนการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอนได้แก่วาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม แมงกานีส ก็สามารถปรับปรุงความสามารถในการดูดซับโทลูอินได้เช่นกัน ยกเว้นการเติมรีเนียม โครเมียม ทังสเทน โมลิบดีนัมและเทคนีเซียมตรงตำแหน่งซิลิกอนที่ไม่เหมาะสมสำหรับนำมาปรับปรุงความสามารถในการดูดซับโทลูอิน

ตารางที่ 4.10

พลังงานการดูดซับ ( $E_{ads}$ , kcal/mol) ของการดูดซับโทลูอีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่เติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	$E_{ads}$ (kcal/mol)
toluene + SiCNS $\rightarrow$ toluene/SiCNS	-0.416
toluene + V <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/V <sub>C</sub> -SiCNS	-20.170
toluene + Nb <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/Nb <sub>C</sub> -SiCNS	-35.469
toluene + Ta <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/Ta <sub>C</sub> -SiCNS	-40.483
toluene + Cr <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/Cr <sub>C</sub> -SiCNS	-46.172
toluene + Mo <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/Mo <sub>C</sub> -SiCNS	-41.204
toluene + W <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/W <sub>C</sub> -SiCNS	-51.604
toluene + Mn <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/Mn <sub>C</sub> -SiCNS	-38.511
toluene + Tc <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/Tc <sub>C</sub> -SiCNS	-31.857
toluene + Re <sub>C</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/Re <sub>C</sub> -SiCNS	-35.833
toluene + V <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/V <sub>Si</sub> -SiCNS	-5.815
toluene + Nb <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/Nb <sub>Si</sub> -SiCNS	-13.747
toluene + Ta <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/Ta <sub>Si</sub> -SiCNS	-14.721
toluene + Cr <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/Cr <sub>Si</sub> -SiCNS	-1.021
toluene + Mo <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/Mo <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.708
toluene + W <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/W <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.997
toluene + Mn <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/Mn <sub>Si</sub> -SiCNS	-11.415
toluene + Tc <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/Tc <sub>Si</sub> -SiCNS	7.531
toluene + Re <sub>Si</sub> -SiCNS $\rightarrow$ toluene/Re <sub>Si</sub> -SiCNS	-1.060

#### 4.2.4 สมบัติทางพลังงานและความสามารถในการดูดซับอนิซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน

พลังงานการดูดซับของการดูดซับอนิซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน แสดงดังตารางที่ 4.11 จากการศึกษาพลังงานการดูดซับของการดูดซับอนิซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม มีค่าเท่ากับ 15.439 kcal/mol ซึ่งเป็นกระบวนการดูดซับแบบดูดความร้อน พลังงานการดูดซับของการดูดซับอนิซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม ตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่าเท่ากับ -35.869, -31.858, -39.053, -37.952, -31.588, -41.395, -33.226, -26.240 และ -32.432 kcal/mol ตามลำดับ พลังงานการดูดซับของการดูดซับอนิซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม ตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ -37.351, -21.496, -20.042, -22.138, -22.059, -19.224, -26.987, -26.580 และ -23.970 kcal/mol ตามลำดับ ความสามารถในการดูดซับอนิซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน เป็นดังนี้  $\text{aniline/W}_C\text{-SiCNT} > \text{aniline/Ta}_C\text{-SiCNT} > \text{aniline/Cr}_C\text{-SiCNT} > \text{aniline/V}_{Si}\text{-SiCNT} > \text{aniline/V}_C\text{-SiCNT} > \text{aniline/Mn}_C\text{-SiCNT} > \text{aniline/Re}_C\text{-SiCNT} > \text{aniline/Nb}_C\text{-SiCNT} > \text{aniline/Mo}_C\text{-SiCNT} > \text{aniline/Mn}_{Si}\text{-SiCNT} > \text{aniline/Tc}_{Si}\text{-SiCNT} > \text{aniline/Tc}_C\text{-SiCNT} > \text{aniline/Re}_{Si}\text{-SiCNT} > \text{aniline/Cr}_{Si}\text{-SiCNT} > \text{aniline/Mo}_{Si}\text{-SiCNT} > \text{aniline/Nb}_{Si}\text{-SiCNT} > \text{aniline/Ta}_{Si}\text{-SiCNT} > \text{aniline/W}_{Si}\text{-SiCNT}$  จากข้อมูลข้างต้นพบว่าท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันสามารถดูดซับอนิซีนได้ดีกว่าแบบดั้งเดิม โดยการเติมทังสเทนตรงตำแหน่งคาร์บอนสามารถดูดซับได้ดีที่สุด และสามารถสรุปได้ว่าการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม สามารถปรับปรุงความสามารถในการดูดซับอนิซีนได้ชัดเจน

## ตารางที่ 4.11

พลังงานการดูดซับ (กิโลแคลอรี/โมล) ของการดูดซับอนิลีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่เติมโลหะแทรนซิชันบนตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน

ระบบ	$E_{\text{ads}}$ (kcal/mol)
aniline + SiCNT $\rightarrow$ aniline/SiCNT	15.439
aniline + V <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/V <sub>C</sub> -SiCNT	-35.869
aniline + Nb <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/Nb <sub>C</sub> -SiCNT	-31.858
aniline + Ta <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/Ta <sub>C</sub> -SiCNT	-39.053
aniline + Cr <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/Cr <sub>C</sub> -SiCNT	-37.952
aniline + Mo <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/Mo <sub>C</sub> -SiCNT	-31.588
aniline + W <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/W <sub>C</sub> -SiCNT	-41.395
aniline + Mn <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/Mn <sub>C</sub> -SiCNT	-33.226
aniline + Tc <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/Tc <sub>C</sub> -SiCNT	-26.240
aniline + Re <sub>C</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/Re <sub>C</sub> -SiCNT	-32.432
aniline + V <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/V <sub>Si</sub> -SiCNT	-37.351
aniline + Nb <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/Nb <sub>Si</sub> -SiCNT	-21.496
aniline + Ta <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/Ta <sub>Si</sub> -SiCNT	-20.042
aniline + Cr <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/Cr <sub>Si</sub> -SiCNT	-22.138
aniline + Mo <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/Mo <sub>Si</sub> -SiCNT	-22.059
aniline + W <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/W <sub>Si</sub> -SiCNT	-19.224
aniline + Mn <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/Mn <sub>Si</sub> -SiCNT	-26.987
aniline + Tc <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/Tc <sub>Si</sub> -SiCNT	-26.580
aniline + Re <sub>Si</sub> -SiCNT $\rightarrow$ aniline/Re <sub>Si</sub> -SiCNT	-23.970

### 4.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับไนโตรเบนซีน โทลูอินและอนิลีน

4.3.1 พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วน และประจุโลหะแทรนซิชัน

4.3.1.1 พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงานและประจุโลหะแทรนซิชันของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{\text{HOMO}}$ ) พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{\text{LUMO}}$ ) แถบพลังงาน ( $E_{\text{gap}}$ ) ประจุโลหะแทรนซิชัน (TM Charge) ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน แสดงดังตารางที่ 4.12 พบว่าพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ  $-3.946$  และ  $-3.728$  eV ตามลำดับ แถบพลังงานมีค่าเท่ากับ  $0.218$  eV ค่าพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ  $-4.027, -4.082, -4.000, -3.891, -3.891, -4.055, -4.136, -4.082$  และ  $-4.000$  eV ตามลำดับ ค่าพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ  $-3.701, -3.619, -3.755, -3.701, -3.755, -3.728, -3.402, -3.592$  และ  $-3.810$  eV ตามลำดับ ค่าพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ  $-4.218, -4.218, -4.218, -3.973, -3.946, -3.973, -4.191, -4.299$  และ  $-4.027$  eV ตามลำดับ ค่าพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ  $-3.374, -3.374, -3.374, -3.755, -3.755, -3.755, -3.402, -3.374$  และ  $-3.510$  eV ตามลำดับ แถบพลังงานของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่าเท่ากับ  $0.327, 0.463, 0.245, 0.190, 0.136, 0.327, 0.735, 0.490$  และ  $0.190$  eV ตามลำดับ แถบพลังงานของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม

โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ 0.844, 0.844, 0.844, 0.218, 0.190, 0.218, 0.789, 0.925 และ 0.517 eV ตามลำดับ

แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีประจุเฉลี่ยของอะตอมคาร์บอนและซิลิกอนเท่ากับ -1.893 และ 1.891 e ตามลำดับ พบว่าสอดคล้องกับงานวิจัยของ Tabtimsai *et al.*, (2015) ที่พบว่าค่าประจุของอะตอมคาร์บอนและซิลิกอนใกล้เคียงกัน ประจุโลหะแทรนซิชันของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ -0.114, -0.089, -0.256, -0.212, -0.605, -0.617, -0.137, -0.598 และ -0.886 e ตามลำดับ และค่าประจุโลหะแทรนซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ 0.693, 0.998, 1.192, 0.465, 0.579, 0.764, 0.706, 0.616 และ 0.515 e ตามลำดับ

จากแถบพลังงานของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียม และแมงกานีสตรงตำแหน่งซิลิกอนพบว่าไม่มีการเปลี่ยนแปลงของแถบพลังงาน คุณสมบัติการนำไฟฟ้าจึงไม่มีการเปลี่ยนแปลง แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียมตรงตำแหน่งคาร์บอนและแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนพบว่าความกว้างของแถบพลังงานมีค่าเพิ่มขึ้นจึงส่งผลต่อคุณสมบัติของการนำไฟฟ้าที่ลดลง อย่างไรก็ตามแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนและแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งซิลิกอนพบว่าความกว้างของแถบพลังงานมีค่าลดลงจึงส่งผลต่อคุณสมบัติการนำไฟฟ้าที่เพิ่มขึ้น โดยเฉพาะแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งคาร์บอนพบว่าแถบพลังงานมีค่าลดลงมากที่สุดจึงส่งผลต่อคุณสมบัติไฟฟ้าเพิ่มขึ้นและดีที่สุด



## ตารางที่ 4.12

พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{\text{HOMO}}$ , eV) พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{\text{LUMO}}$ , eV) แถบพลังงาน ( $E_{\text{gap}}$ , eV) และประจุโลหะแทรนซิชัน (TM Charge, e) ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	$E_{\text{HOMO}}$ (eV)	$E_{\text{LUMO}}$ (eV)	$E_{\text{gap}}$ (eV)	TM Charge (e)
SiCNS	-3.946	-3.728	0.218	-1.893 (C) 1.891 (Si)
V <sub>C</sub> -SiCNS	-4.027	-3.701	0.327	-0.114
Nb <sub>C</sub> -SiCNS	-4.082	-3.619	0.463	-0.089
Ta <sub>C</sub> -SiCNS	-4.000	-3.755	0.245	-0.256
Cr <sub>C</sub> -SiCNS	-3.891	-3.701	0.190	-0.212
Mo <sub>C</sub> -SiCNS	-3.891	-3.755	0.136	-0.605
W <sub>C</sub> -SiCNS	-4.055	-3.728	0.327	-0.617
Mn <sub>C</sub> -SiCNS	-4.136	-3.402	0.735	-0.137
Tc <sub>C</sub> -SiCNS	-4.082	-3.592	0.490	-0.598
Re <sub>C</sub> -SiCNS	-4.000	-3.810	0.190	-0.886
V <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.218	-3.374	0.844	0.693
Nb <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.218	-3.374	0.844	0.998
Ta <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.218	-3.374	0.844	1.192
Cr <sub>Si</sub> -SiCNS	-3.973	-3.755	0.218	0.465
Mo <sub>Si</sub> -SiCNS	-3.946	-3.755	0.190	0.579
W <sub>Si</sub> -SiCNS	-3.973	-3.755	0.218	0.764
Mn <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.191	-3.402	0.789	0.706
Tc <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.299	-3.374	0.925	0.616
Re <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.027	-3.510	0.517	0.515

4.3.1.2 พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงานและประจุโลหะแทรนซิชันของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงานและประจุโลหะแทรนซิชันของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน แสดงดังตารางที่ 4.13 จากการศึกษาคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในทอมพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ  $-5.170$  และ  $-2.395$  eV ตามลำดับ แถบพลังงานมีค่าเท่ากับ  $2.776$  eV ค่าพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ  $-4.653$ ,  $-5.089$ ,  $-4.953$ ,  $-5.089$ ,  $-5.061$ ,  $-5.061$ ,  $-4.735$ ,  $-5.116$  และ  $-5.089$  eV ตามลำดับ ค่าพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ  $-3.374$ ,  $-2.966$ ,  $-3.483$ ,  $-3.129$ ,  $-3.674$ ,  $-3.782$ ,  $-3.402$ ,  $-3.374$  และ  $-2.966$  eV ตามลำดับ ค่าพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ  $-4.817$ ,  $-4.517$ ,  $-4.490$ ,  $-5.116$ ,  $-4.272$ ,  $-4.163$ ,  $-4.871$ ,  $-4.653$  และ  $-4.327$  eV ตามลำดับ ค่าพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ  $-3.320$ ,  $-2.748$ ,  $-2.612$ ,  $-2.912$ ,  $-2.939$ ,  $-2.776$ ,  $-4.109$ ,  $-3.347$  และ  $-3.129$  eV ตามลำดับ แถบพลังงานของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่าเท่ากับ  $1.279$ ,  $2.123$ ,  $1.469$ ,  $1.959$ ,  $1.388$ ,  $1.279$ ,  $1.333$ ,  $1.742$  และ  $2.123$  eV ตามลำดับ แถบพลังงานของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ  $1.497$ ,  $1.769$ ,  $1.878$ ,  $2.204$ ,  $1.333$ ,  $1.388$ ,  $0.762$ ,  $1.306$  และ  $1.197$  eV ตามลำดับ

ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีประจุเฉลี่ยของอะตอมคาร์บอนและซิลิกอนเท่ากับ  $-1.887$  และ  $1.885$  e พบว่าสอดคล้องกับงานวิจัยของ Tabtimsai *et al.*, (2018) ที่พบว่ามีค่าประจุของอะตอมคาร์บอนและซิลิกอนใกล้เคียงกัน ประจุโลหะแทรนซิชันของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม

และรีเนี่ยมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ -0.022, -0.072, -0.015, -0.224, -0.451, -0.367, -0.098, -0.514 และ -0.501 e ตามลำดับ ประจุโลหะแทรนซิชันแทรนซิชันของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนี่ยมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ 0.728, 1.047, 1.233, 0.438, 0.596, 0.759, 0.603, 0.516 และ 0.605 e ตามลำดับ

จากแถบพลังงานของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนี่ยมตรงตำแหน่งคาร์บอน และซิลิกอนพบว่ามีความกว้างของแถบพลังงานมีค่าลดลงจึงส่งผลต่อคุณสมบัติการนำไฟฟ้าที่เพิ่มขึ้น



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

### ตารางที่ 4.13

พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{\text{HOMO}}$ , eV) พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{\text{LUMO}}$ , eV) แแถบพลังงาน ( $E_{\text{gap}}$ , eV) และประจุโลหะแทรนซิชัน (TM Charge, e) ของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	$E_{\text{HOMO}}$ (eV)	$E_{\text{LUMO}}$ (eV)	$E_{\text{gap}}$ (eV)	TM-Charge (e)
SiCNT	-5.170	-2.395	2.776	-1.887 (C) 1.885 (Si)
V <sub>C</sub> -SiCNT	-4.653	-3.374	1.279	-0.022
Nb <sub>C</sub> -SiCNT	-5.089	-2.966	2.123	-0.072
Ta <sub>C</sub> -SiCNT	-4.953	-3.483	1.469	-0.015
Cr <sub>C</sub> -SiCNT	-5.089	-3.129	1.959	-0.224
Mo <sub>C</sub> -SiCNT	-5.061	-3.674	1.388	-0.451
W <sub>C</sub> -SiCNT	-5.061	-3.782	1.279	-0.367
Mn <sub>C</sub> -SiCNT	-4.735	-3.402	1.333	-0.098
Tc <sub>C</sub> -SiCNT	-5.116	-3.374	1.742	-0.514
Re <sub>C</sub> -SiCNT	-5.089	-2.966	2.123	-0.501
V <sub>Si</sub> -SiCNT	-4.817	-3.320	1.497	0.728
Nb <sub>Si</sub> -SiCNT	-4.517	-2.748	1.769	1.047
Ta <sub>Si</sub> -SiCNT	-4.490	-2.612	1.878	1.233
Cr <sub>Si</sub> -SiCNT	-5.116	-2.912	2.204	0.438
Mo <sub>Si</sub> -SiCNT	-4.272	-2.939	1.333	0.596
W <sub>Si</sub> -SiCNT	-4.163	-2.776	1.388	0.759
Mn <sub>Si</sub> -SiCNT	-4.871	-4.109	0.762	0.603
Tc <sub>Si</sub> -SiCNT	-4.653	-3.347	1.306	0.516
Re <sub>Si</sub> -SiCNT	-4.327	-3.129	1.197	0.605

4.3.1.3 พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วนและประจุโลหะทรานซิชันของการดูดซับไนโตรเจนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน

พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วนและประจุโลหะทรานซิชันของการดูดซับไนโตรเจนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน แสดงดังตารางที่ 4.14 จากการศึกษาคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับไนโตรเจนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ  $-3.919$  และ  $-3.728$  eV ตามลำดับ แถบพลังงานมีค่าเท่ากับ  $0.190$  eV การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานมีค่าเท่ากับ  $-0.027$  eV ค่าพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับไนโตรเจนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ  $-3.919$ ,  $-4.000$ ,  $-4.109$ ,  $-3.946$ ,  $-4.109$ ,  $-4.027$ ,  $-4.136$ ,  $-4.055$  และ  $-4.027$  eV ตามลำดับ ค่าพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับไนโตรเจนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ  $-3.674$ ,  $-3.755$ ,  $-3.864$ ,  $-3.755$ ,  $-3.837$ ,  $-3.810$ ,  $-3.456$ ,  $-3.837$  และ  $-3.810$  eV ตามลำดับ ค่าพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับไนโตรเจนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ  $-4.163$ ,  $-4.191$ ,  $-4.136$ ,  $-3.919$ ,  $-4.000$ ,  $-4.000$ ,  $-3.973$ ,  $-4.163$  และ  $-4.163$  eV ตามลำดับ ค่าพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับไนโตรเจนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ  $-3.402$ ,  $-3.320$ ,  $-3.347$ ,  $-3.728$ ,  $-3.810$ ,  $-3.810$ ,  $-3.755$ ,  $-3.402$  และ  $-3.374$  eV ตามลำดับ แถบพลังงานของการดูดซับไนโตรเจนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่าเท่ากับ  $0.245$ ,  $0.245$ ,  $0.245$ ,  $0.190$ ,  $0.272$ ,  $0.218$ ,  $0.680$ ,  $0.218$  และ  $0.218$  eV ตามลำดับ แถบพลังงานของการดูดซับไนโตรเจนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ  $0.762$ ,  $0.871$ ,  $0.789$ ,  $0.190$ ,  $0.190$ ,  $0.190$ ,  $0.218$ ,  $0.762$  และ

0.789 eV ตามลำดับ การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสเดน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่าเท่ากับ -0.082, -0.218, 0.000, 0.000, 0.136, -0.109, -0.054, -0.272 และ 0.027 eV ตามลำดับ การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสเดน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ -0.082, 0.027, -0.054, -0.027, 0.000, -0.027, -0.571, -0.163 และ 0.272 eV ตามลำดับ

พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วนและประจุโลหะของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน แสดงดังตารางที่ 4.15 พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ -4.980 และ -4.245 eV ตามลำดับ แถบพลังงานมีค่าเท่ากับ 0.735 eV การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานมีค่าเท่ากับ -2.041 eV ค่าพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสเดน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ -5.143, -5.225, -5.197, -5.225, -5.197, -5.143, -4.953, -5.279 และ -5.252 eV ตามลำดับ ค่าพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสเดน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ -3.510, -3.510, -4.055, -3.619, -3.782, -3.565, -3.728, -3.755 และ -3.755 eV ตามลำดับ ค่าพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสเดน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ -5.089, -5.089, -5.089, -4.735, -5.170, -5.143, -5.089, -4.653 และ -5.089 eV ตามลำดับ ค่าพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสเดน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่าเท่ากับ 1.633, 1.714, 1.143, 1.606, 1.415, 1.578, 1.225, 1.524 และ 1.497 eV ตามลำดับ แถบพลังงานของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม

ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ 1.469, 1.905, 1.714, 1.197, 1.905, 2.068, 0.952, 0.925 และ 1.687 eV ตามลำดับ การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานของการดูดซับไนโตรเบนซินบนท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่าเท่ากับ 0.354, -0.408, -0.327, -0.354, 0.027, 0.299, -0.109, -0.218 และ -0.626 eV ตามลำดับ การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานของการดูดซับไนโตรเบนซินบนท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ -0.027, 0.136, -0.163, -1.007, 0.571, 0.680, 0.190, -0.381 และ 0.490 eV ตามลำดับ

การศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในทอมของการถ่ายโอนประจุบางส่วน ในงานวิจัยนี้สามารถหาได้จากการคำนวณ Natural bond orbital (NBO) โดยผลรวมประจุของไนโตรเบนซิน โทลูอินและอนิลีน ก่อนการดูดซับมีค่าเป็นศูนย์ ซึ่งการถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับไนโตรเบนซิน โทลูอินและอนิลีนหาได้จากผลรวมของประจุทุกอะตอมหลังการคำนวณโครงสร้างและประจุ NBO นอกจากนี้ประจุของโลหะแทรนซิชันก่อนการดูดซับของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ได้แสดงในตารางที่ 4.12 และ 4.13 ตามลำดับ และการถ่ายโอนประจุบางส่วนและประจุโลหะ (TM charge) ของการดูดซับไนโตรเบนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันแสดงดังตารางที่ 4.14 และ 4.15 ตามลำดับ จากการศึกษาพบว่า การถ่ายโอนประจุบางส่วนสำหรับระบบที่มีการดูดซับไนโตรเบนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม มีค่าเท่ากับ 0.159 และ -0.067 e ตามลำดับ ซึ่งสอดคล้องกับค่าพลังงานการดูดซับที่ต่ำ แสดงให้เห็นถึงอันตรกิริยาระหว่างไนโตรเบนซินและแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมเป็นการดูดซับด้วยแรงอ่อน ๆ การถ่ายโอนประจุบางส่วนสำหรับระบบที่มีการดูดซับไนโตรเบนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม ตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่าเท่ากับ -0.403, -0.436, -0.858, -0.533, -0.706, -0.711, -0.390, -0.412 และ -0.333 e ตามลำดับ และการถ่ายโอนประจุบางส่วนของระบบที่มีการดูดซับไนโตรเบนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ -0.348, -0.391, -0.389, -0.161, -0.640, -0.750, -0.423, -0.389 และ -0.379 e ตามลำดับ การถ่ายโอนประจุบางส่วนสำหรับระบบที่มีการดูดซับไนโตรเบนซินบนท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม ตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่าเท่ากับ

-0.360, -0.692, -0.790, -0.699, -0.459, -0.440, -0.394, -0.570 และ -0.591 e ตามลำดับ และการถ่ายโอนประจุบางส่วนของระบบที่มีการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ -0.342, -0.361, -0.382, -0.161, -0.835, -0.835, -0.423, -0.283 และ -0.671 e ตามลำดับ

ประจุโลหะแทรนซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนที่มีการดูดซับไนโตรเบนซีน มีค่าเท่ากับ -0.363, -0.396, -0.065, -0.475, -0.607, -0.419, -0.207, -0.993 และ -0.958 e ตามลำดับ ประจุโลหะแทรนซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนที่มีการดูดซับไนโตรเบนซีน มีค่าเท่ากับ 0.379, 1.035, 1.338, 0.118, 0.626, 0.996, 0.615, 0.555 และ 0.772 e ตามลำดับ ประจุโลหะแทรนซิชันของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนที่มีการดูดซับไนโตรเบนซีน มีค่าเท่ากับ -0.190, 0.006, 0.160, -0.200, -0.510, -0.465, -0.165, -0.558 และ -0.490 e ตามลำดับ ประจุโลหะแทรนซิชันของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนที่มีการดูดซับไนโตรเบนซีน มีค่าเท่ากับ -0.027, 0.136, -0.163, -1.007, 0.571, 0.680, 0.190, -0.381 และ 0.490 e ตามลำดับ

จากข้อมูลข้างต้นจะเห็นได้ว่าการดูดซับไนโตรเบนซีนมีผลต่อสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ ในเทอมของพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน และการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน การเติมเทคนีเซียมบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งคาร์บอน และการเติมแมงกานีสบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งซิลิกอน การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานสูงสุดเท่ากับ -0.272 และ -0.571 eV ตามลำดับ ดังนั้นการเติมเทคนีเซียมบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งคาร์บอน และการเติมแมงกานีสบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งซิลิกอน จึงเหมาะที่จะนำไปพัฒนาเป็นวัสดุตรวจจับไนโตรเบนซีนได้ดีที่สุด นอกจากนี้ยังพบว่าแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแทนทาลัมและโครเมียมตรงตำแหน่งคาร์บอน และโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งซิลิกอน ที่ไม่มีการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานจึงไม่เหมาะที่จะนำไปพัฒนาเป็นวัสดุตรวจจับไนโตรเบนซีน จากค่าถ่ายโอนประจุบางส่วนสามารถอธิบายได้ว่าเมื่อมีการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม ตรงตำแหน่ง



คาร์บอนและซิลิกอนจะเกิดการถ่ายโอนประจุบางส่วนจากแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ไปยังโมเลกุลของไนโตรเบนซีน

#### ตารางที่ 4.14

พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{HOMO}$ , eV) พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{LUMO}$ , eV) แแถบพลังงาน ( $E_{gap}$ , eV) การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน ( $\Delta E_{gap}$ , eV) การถ่ายโอนประจุบางส่วน (PCT, e) และประจุโลหะทรานซิชัน (TM charge, e) ของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน

ระบบ	$E_{HOMO}$ (eV)	$E_{LUMO}$ (eV)	$E_{gap}$ (eV)	$\Delta E_{gap}$ (eV)	PCT (e)	TM charge (e)
nitrobenzene/SiCNS	-3.919	-3.728	0.190	-0.027	0.159	-
nitrobenzene/V <sub>C</sub> -SiCNS	-3.919	-3.674	0.245	-0.082	-0.403	-0.363
nitrobenzene/Nb <sub>C</sub> -SiCNS	-4.000	-3.755	0.245	-0.218	-0.436	-0.396
nitrobenzene/Ta <sub>C</sub> -SiCNS	-4.109	-3.864	0.245	0.000	-0.858	-0.065
nitrobenzene/Cr <sub>C</sub> -SiCNS	-3.946	-3.755	0.190	0.000	-0.533	-0.475
nitrobenzene/Mo <sub>C</sub> -SiCNS	-4.109	-3.837	0.272	0.136	-0.706	-0.607
nitrobenzene/W <sub>C</sub> -SiCNS	-4.027	-3.810	0.218	-0.109	-0.711	-0.419
nitrobenzene/Mn <sub>C</sub> -SiCNS	-4.136	-3.456	0.680	-0.054	-0.390	-0.207
nitrobenzene/Tc <sub>C</sub> -SiCNS	-4.055	-3.837	0.218	-0.272	-0.412	-0.993
nitrobenzene/Re <sub>C</sub> -SiCNS	-4.027	-3.810	0.218	0.027	-0.333	-0.958
nitrobenzene/V <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.163	-3.402	0.762	-0.082	-0.348	0.379
nitrobenzene/Nb <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.191	-3.320	0.871	0.027	-0.391	1.035
nitrobenzene/Ta <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.136	-3.347	0.789	-0.054	-0.389	1.338
nitrobenzene/Cr <sub>Si</sub> -SiCNS	-3.919	-3.728	0.190	-0.027	-0.161	0.118
nitrobenzene/Mo <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.000	-3.810	0.190	0.000	-0.640	0.626
nitrobenzene/W <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.000	-3.810	0.190	-0.027	-0.750	0.996
nitrobenzene/Mn <sub>Si</sub> -SiCNS	-3.973	-3.755	0.218	-0.571	-0.423	0.615
nitrobenzene/Tc <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.163	-3.402	0.762	-0.163	-0.389	0.555
nitrobenzene/Re <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.163	-3.374	0.789	0.272	-0.379	0.772

## ตารางที่ 4.15

พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{HOMO}$ , eV) พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{LUMO}$ , eV) แถบพลังงาน ( $E_{gap}$ , eV) การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน ( $\Delta E_{gap}$ , eV) การถ่ายโอนประจุบางส่วน (PCT, e) และประจุโลหะทรานซิชัน (TM charge, e) ของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน

ระบบ	$E_{HOMO}$ (eV)	$E_{LUMO}$ (eV)	$E_{gap}$ (eV)	$\Delta E_{gap}$ (eV)	PCT (e)	TM charge (e)
nitrobenzene/SiCNT	-4.980	-4.245	0.735	-2.041	-0.067	-
nitrobenzene/V <sub>C</sub> -SiCNT	-5.143	-3.510	1.633	0.354	-0.360	-0.190
nitrobenzene/Nb <sub>C</sub> -SiCNT	-5.225	-3.510	1.714	-0.408	-0.692	0.006
nitrobenzene/Ta <sub>C</sub> -SiCNT	-5.197	-4.055	1.143	-0.327	-0.790	0.160
nitrobenzene/Cr <sub>C</sub> -SiCNT	-5.225	-3.619	1.606	-0.354	-0.699	-0.200
nitrobenzene/Mo <sub>C</sub> -SiCNT	-5.197	-3.782	1.415	0.027	-0.459	-0.510
nitrobenzene/W <sub>C</sub> -SiCNT	-5.143	-3.565	1.578	0.299	-0.440	-0.465
nitrobenzene/Mn <sub>C</sub> -SiCNT	-4.953	-3.728	1.225	-0.109	-0.394	-0.165
nitrobenzene/Tc <sub>C</sub> -SiCNT	-5.279	-3.755	1.524	-0.218	-0.570	-0.558
nitrobenzene/Re <sub>C</sub> -SiCNT	-5.252	-3.755	1.497	-0.626	-0.591	-0.490
nitrobenzene/V <sub>Si</sub> -SiCNT	-5.089	-3.619	1.469	-0.027	-0.342	0.360
nitrobenzene/Nb <sub>Si</sub> -SiCNT	-5.089	-3.184	1.905	0.136	-0.361	1.079
nitrobenzene/Ta <sub>Si</sub> -SiCNT	-5.089	-3.374	1.714	-0.163	-0.382	1.383
nitrobenzene/Cr <sub>Si</sub> -SiCNT	-4.735	-3.538	1.197	-1.007	-0.161	0.118
nitrobenzene/Mo <sub>Si</sub> -SiCNT	-5.170	-3.265	1.905	0.571	-0.835	0.725
nitrobenzene/W <sub>Si</sub> -SiCNT	-5.143	-3.075	2.068	0.680	-0.835	1.016
nitrobenzene/Mn <sub>Si</sub> -SiCNT	-5.089	-4.136	0.952	0.190	-0.423	0.633
nitrobenzene/Tc <sub>Si</sub> -SiCNT	-4.653	-3.728	0.925	-0.381	-0.283	0.440
nitrobenzene/Re <sub>Si</sub> -SiCNT	-5.089	-3.402	1.687	0.490	-0.671	0.711

4.3.1.4 พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วนและประจุโลหะแทรนซิชันของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วนและประจุโลหะแทรนซิชันของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน แสดงดังตารางที่ 4.16 จากการศึกษาคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ -3.919 และ -3.728 eV ตามลำดับ แถบพลังงานมีค่าเท่ากับ 0.190 eV การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานมีค่าเท่ากับ -0.027 eV ค่าพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม ตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ -4.027, -3.973, -4.055, -3.837, -3.837, -3.864, -4.082, -4.055 และ -3.837 eV ตามลำดับ ค่าพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ -3.293, -3.728, -3.565, -3.646, -3.619, -3.646, -3.265, -3.456 และ -3.646 eV ตามลำดับ ค่าพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ -4.055 -3.782 -3.755 -3.973 -3.973 -3.973 -4.163 -4.163 และ -3.919 eV ตามลำดับ ค่าพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ -3.37, -3.402, -3.402, -3.755, -3.755, -3.755, -3.347, -3.402 และ -3.538 eV ตามลำดับ แถบพลังงานของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่าเท่ากับ 0.735, 0.245, 0.490, 0.190, 0.218, 0.218, 0.816 0.599 และ 0.190 eV ตามลำดับ แถบพลังงานของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ 0.680, 0.381, 0.354, 0.218, 0.218, 0.218, 0.816, 0.762 และ 0.381 eV ตามลำดับ การเปลี่ยนแปลง

แถบพลังงานของการดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเปียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่าเท่ากับ 0.408, -0.218, 0.245, 0.000, 0.082, -0.109, 0.082, 0.109 และ 0.000 eV ตามลำดับ การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานของการดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเปียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ -0.163, -0.463, -0.490, 0.000, 0.027, 0.000, 0.027, -0.163 และ -0.136 eV ตามลำดับ

การศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของการถ่ายโอนประจุบางส่วน ในงานวิจัยนี้สามารถหาได้จากการคำนวณ โดยผลรวมประจุของโพลูอิน ก่อนการดูดซับมีค่าเป็นศูนย์ ซึ่งการถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับ โพลูอินหาได้จากผลรวมของประจุทุกอะตอมหลังการคำนวณโครงสร้างและประจุ NBO จากการศึกษาพบว่า การถ่ายโอนประจุบางส่วนสำหรับระบบที่มีการดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม มีค่าเท่ากับ 0.007 e ซึ่งสอดคล้องกับค่าพลังงานการดูดซับที่ต่ำ แสดงให้เห็นถึงอันตรกิริยาระหว่างโพลูอินและแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมเป็นการดูดซับด้วยแรงอ่อน ๆ การถ่ายโอนประจุบางส่วนสำหรับระบบที่มีการดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเปียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม ตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่าเท่ากับ 0.341, 0.162, 0.052, 0.448, 0.437, 0.303, 0.414, 0.283 และ 0.204 e ตามลำดับ และการถ่ายโอนประจุบางส่วนของระบบที่มีการดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเปียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ 0.204, 0.212, 0.236, -0.092, -0.002, -0.002, 0.155, 0.003 และ 0.001 e ตามลำดับ

ประจุโลหะทรานซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเปียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนที่มีการดูดซับโพลูอิน มีค่าเท่ากับ -0.885, -1.223, -0.901, -1.267, -1.448, -1.428, -1.428, -1.741 และ -1.349 e ตามลำดับ ประจุโลหะทรานซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเปียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนที่มีการดูดซับโพลูอิน มีค่าเท่ากับ 0.520, 0.915, 1.184, 0.447, 0.563, 0.742, 0.880, 0.596 และ 0.504 e ตามลำดับ

จากข้อมูลข้างต้นจะเห็นได้ว่าการดูดซับโพลูอินมีผลต่อสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชัน ซึ่งการเติมแทนทาลัมบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งซิลิกอน การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานสูงสุดเท่ากับ -0.490 eV ดังนั้นการเติมแทนทาลัมบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งซิลิกอน จึงเหมาะที่จะนำไปพัฒนาเป็นวัสดุ

ตรวจจับโทลูอินได้ดีที่สุด นอกจากนี้ยังพบว่าแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียมตรงตำแหน่งคาร์บอน และการเติมโครเมียม และทังสเทนตรงตำแหน่งซิลิกอน ที่ไม่เหมาะกับการนำมาพัฒนาวัสดุตรวจจับเพราะไม่มีการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน จากค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วนสามารถอธิบายได้ว่าเมื่อมีการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม ตรงตำแหน่งคาร์บอน และแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม ตรงตำแหน่งซิลิกอนเกิดการถ่ายโอนประจุบางส่วนจากโทลูอินไปยังแผ่น ส่วนการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม และทังสเทนตรงตำแหน่งซิลิกอนจะเกิดการถ่ายโอนประจุบางส่วนจากแผ่นไปยังโทลูอิน นอกจากนี้ค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วนของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วนที่ต่ำซึ่งสอดคล้องกับค่าพลังงานการดูดซับที่ต่ำ



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

## ตารางที่ 4.16

พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{\text{HOMO}}$ , eV) พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{\text{LUMO}}$ , eV) แถบพลังงาน ( $E_{\text{gap}}$ , eV) การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน ( $\Delta E_{\text{gap}}$ , eV) การถ่ายโอนประจุบางส่วน (PCT, e) และประจุโลหะแทรนซิชัน (TM charge, e) ของการดูดซับโพลีอินเบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

ระบบ	$E_{\text{HOMO}}$ (eV)	$E_{\text{LUMO}}$ (eV)	$E_{\text{gap}}$ (eV)	$\Delta E_{\text{gap}}$ (eV)	PCT (e)	TM charge (e)
toluene/SiCNS	-3.919	-3.728	0.190	-0.027	0.007	-
toluene/V <sub>C</sub> -SiCNS	-4.027	-3.293	0.735	0.408	0.341	-0.885
toluene/Nb <sub>C</sub> -SiCNS	-3.973	-3.728	0.245	-0.218	0.162	-1.223
toluene/Ta <sub>C</sub> -SiCNS	-4.055	-3.565	0.490	0.245	0.052	-0.901
toluene/Cr <sub>C</sub> -SiCNS	-3.837	-3.646	0.190	0.000	0.448	-1.267
toluene/Mo <sub>C</sub> -SiCNS	-3.837	-3.619	0.218	0.082	0.437	-1.448
toluene/W <sub>C</sub> -SiCNS	-3.864	-3.646	0.218	-0.109	0.303	-1.428
toluene/Mn <sub>C</sub> -SiCNS	-4.082	-3.265	0.816	0.082	0.414	-1.428
toluene/Tc <sub>C</sub> -SiCNS	-4.055	-3.456	0.599	0.109	0.283	-1.741
toluene/Re <sub>C</sub> -SiCNS	-3.837	-3.646	0.190	0.000	0.204	-1.349
toluene/V <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.055	-3.374	0.680	-0.163	0.204	0.520
toluene/Nb <sub>Si</sub> -SiCNS	-3.782	-3.402	0.381	-0.463	0.212	0.915
toluene/Ta <sub>Si</sub> -SiCNS	-3.755	-3.402	0.354	-0.490	0.236	1.184
toluene/Cr <sub>Si</sub> -SiCNS	-3.973	-3.755	0.218	0.000	-0.092	0.447
toluene/Mo <sub>Si</sub> -SiCNS	-3.973	-3.755	0.218	0.027	-0.002	0.563
toluene/W <sub>Si</sub> -SiCNS	-3.973	-3.755	0.218	0.000	-0.002	0.742
toluene/Mn <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.163	-3.347	0.816	0.027	0.155	0.880
toluene/Tc <sub>Si</sub> -SiCNS	-4.163	-3.402	0.762	-0.163	0.003	0.596
toluene/Re <sub>Si</sub> -SiCNS	-3.919	-3.538	0.381	-0.136	0.001	0.504

4.3.1.5 พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วนและประจุโลหะของการดูดซับอนิสินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอน พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน และการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน ของการดูดซับอนิสินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน แสดงดังตารางที่ 4.17 จากการศึกษาคุณสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับอนิสินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีค่าเท่ากับ -5.007 และ -2.204 eV ตามลำดับ แถบพลังงานมีค่าเท่ากับ 2.803 eV การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานมีค่าเท่ากับ 0.027 eV ตามลำดับ

ค่าพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับอนิสินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ -5.034, -4.708, -4.735, -4.898, -4.898, -4.708, -4.925 และ -4.925 eV ตามลำดับ ค่าพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับอนิสินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน มีค่าเท่ากับ -3.293, -2.939, -2.803, -2.585, -3.102, -3.184, -2.694, -3.129 และ -3.211 eV ตามลำดับ ค่าพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับอนิสินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ -4.735, -3.782, -3.456, -4.544, -3.919, -3.837, -4.817, -4.544 และ -4.245 eV ตามลำดับ ค่าพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับอนิสินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน มีค่าเท่ากับ -2.834, -2.395, -2.231, -3.021, -2.857, -2.748, -2.558, -2.939 และ -2.286 eV ตามลำดับ แถบพลังงานของการดูดซับอนิสินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่าเท่ากับ 1.742, 1.769, 1.932, 2.313, 1.796, 1.714, 2.014, 1.796 และ 1.714 eV ตามลำดับ แถบพลังงานของการดูดซับอนิสินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ 1.850, 1.388, 1.225, 1.524, 1.061, 1.088, 2.259, 1.606 และ 1.959 eV ตามลำดับ การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานของการดูดซับอนิสินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม

ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่าเท่ากับ 0.463, -0.354, 0.463, 0.354, 0.408, 0.435, 0.680, 0.054 และ -0.408 eV ตามลำดับ การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานของการดูดซับอนิซีนบนท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ 0.354, -0.381, -0.653, -0.680, -0.272, -0.299, 1.497, 0.299 และ 0.762 ตามลำดับ

การศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของการถ่ายโอนประจุบางส่วน ในงานวิจัยนี้สามารถหาได้จากการคำนวณ (NBO) โดยผลรวมประจุของอนิซีน ก่อนการดูดซับมีค่าเป็นศูนย์ ซึ่งการถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับ อนิซีนหาได้จากผลรวมของประจุทุกอะตอมหลังการคำนวณโครงสร้างและประจุ NBO จากการศึกษาพบว่า การถ่ายโอนประจุบางส่วนสำหรับระบบที่มีการดูดซับอนิซีนบนท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม มีค่าเท่ากับ 0.007 e ตามลำดับ ซึ่งสอดคล้องกับค่าพลังงานการดูดซับที่ต่ำ แสดงให้เห็นถึงอันตรกิริยาระหว่างอนิซีนและท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมเป็นการดูดซับด้วยแรงอ่อน ๆ การถ่ายโอนประจุบางส่วนสำหรับระบบที่มีการดูดซับอนิซีนบนท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม ตรงตำแหน่งคาร์บอนมีค่าเท่ากับ 0.200, 0.223, 0.249, 0.221, 0.345, 0.327, 0.284, 0.668, 0.270 และ 0.235 e ตามลำดับ และการถ่ายโอนประจุบางส่วนของระบบที่มีการดูดซับอนิซีนบนท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าเท่ากับ 0.289, 0.246, 0.256, 0.319, 0.274, 0.270, 0.338, 0.304 และ 0.311 e ตามลำดับ

ประจุโลหะของท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนที่มีการดูดซับอนิซีน มีค่าเท่ากับ -0.294, -0.599, -0.561, -0.836, -0.942, -0.956, -0.752, -0.923 และ -0.801 e ตามลำดับ ประจุโลหะของท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนที่มีการดูดซับอนิซีน มีค่าเท่ากับ 0.533, 0.988, 1.244, 0.268, 0.524, 0.736, 0.369, 0.431 และ 0.566 e ตามลำดับ

จากข้อมูลข้างต้นจะเห็นได้ว่าการดูดซับอนิซีนมีผลต่อสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ซึ่งการเติมแมงกานีสบนท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งซิลิกอน การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานสูงสุดเท่ากับ 1.497 eV ดังนั้นการเติมแมงกานีสบนท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งซิลิกอน จึงเหมาะที่จะนำไปพัฒนาเป็นวัสดุ



ตรวจจับอนิซีนได้ดีที่สุด จากการศึกษาการถ่ายโอนประจุบางส่วนจากข้างต้นสามารถอธิบายได้ว่าเมื่อ ดูดซับอนิซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม ตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน เกิดการถ่ายโอนประจุบางส่วนจากอนิซีนไปยังท่อ

#### ตารางที่ 4.17

พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{HOMO}$ , eV) พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ( $E_{LUMO}$ , eV) แแถบพลังงาน ( $E_{gap}$ , eV) การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน ( $\Delta E_{gap}$ , eV) การถ่ายโอนประจุบางส่วน (PCT, e) และประจุโลหะแทนซิซัน (TM charge, e) ของการดูดซับอนิซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทนซิซัน

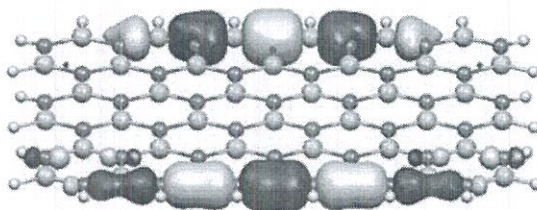
ระบบ	$E_{HOMO}$ (eV)	$E_{LUMO}$ (eV)	$E_{gap}$ (eV)	$\Delta E_{gap}$ (eV)	PCT (e)	TM charge (e)
aniline/SiCNT	-5.007	-2.204	2.803	0.027	0.200	-
aniline/V <sub>C</sub> -SiCNT	-5.034	-3.293	1.742	0.463	0.223	-0.294
aniline/Nb <sub>C</sub> -SiCNT	-4.708	-2.939	1.769	-0.354	0.249	-0.599
aniline/Ta <sub>C</sub> -SiCNT	-4.735	-2.803	1.932	0.463	0.221	-0.561
aniline/Cr <sub>C</sub> -SiCNT	-4.898	-2.585	2.313	0.354	0.345	-0.836
aniline/Mo <sub>C</sub> -SiCNT	-4.898	-3.102	1.796	0.408	0.327	-0.942
aniline/W <sub>C</sub> -SiCNT	-4.898	-3.184	1.714	0.435	0.284	-0.956
aniline/Mn <sub>C</sub> -SiCNT	-4.708	-2.694	2.014	0.680	0.668	-0.752
aniline/Tc <sub>C</sub> -SiCNT	-4.925	-3.129	1.796	0.054	0.270	-0.923
aniline/Re <sub>C</sub> -SiCNT	-4.925	-3.211	1.714	-0.408	0.235	-0.801
aniline/V <sub>Si</sub> -SiCNT	-4.735	-2.884	1.850	0.354	0.289	0.533
aniline/Nb <sub>Si</sub> -SiCNT	-3.782	-2.395	1.388	-0.381	0.246	0.988
aniline/Ta <sub>Si</sub> -SiCNT	-3.456	-2.231	1.225	-0.653	0.256	1.244
aniline/Cr <sub>Si</sub> -SiCNT	-4.544	-3.021	1.524	-0.680	0.319	0.268
aniline/Mo <sub>Si</sub> -SiCNT	-3.919	-2.857	1.061	-0.272	0.274	0.524
aniline/W <sub>Si</sub> -SiCNT	-3.837	-2.748	1.088	-0.299	0.270	0.736
aniline/Mn <sub>Si</sub> -SiCNT	-4.817	-2.558	2.259	1.497	0.338	0.369
aniline/Tc <sub>Si</sub> -SiCNT	-4.544	-2.939	1.606	0.299	0.304	0.431
aniline/Re <sub>Si</sub> -SiCNT	-4.245	-2.286	1.959	0.762	0.311	0.566

#### 4.3.2 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่

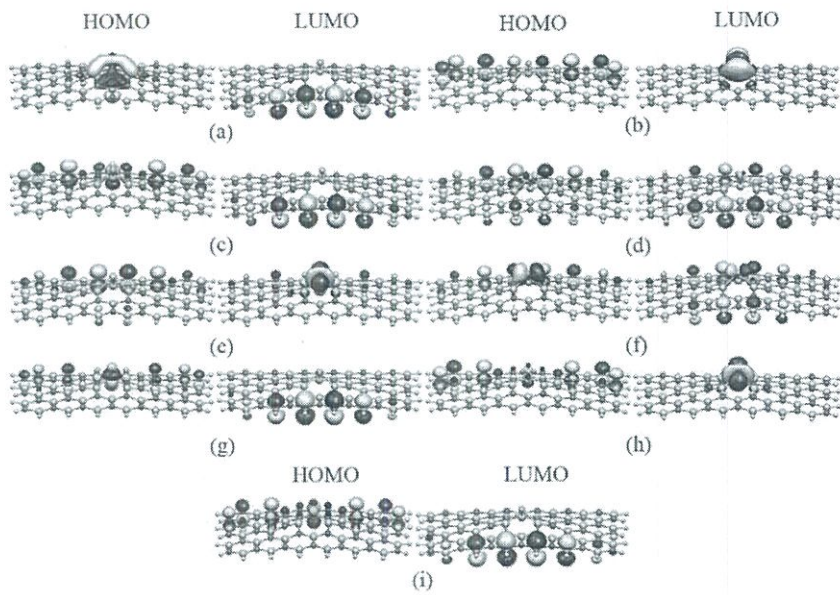
4.3.2.1 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมแสดงดังภาพที่ 4.19 จากภาพพบว่าออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่จะกระจายอยู่รอบ ๆ แผ่น ดังนั้นแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมจึงไม่เหมาะสำหรับการดูดซับสารอนุพันธ์ของเบนซีน เนื่องจากแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมไม่มีตำแหน่งที่แสดงถึงความว่องไวต่อการดูดซับได้ชัดเจน

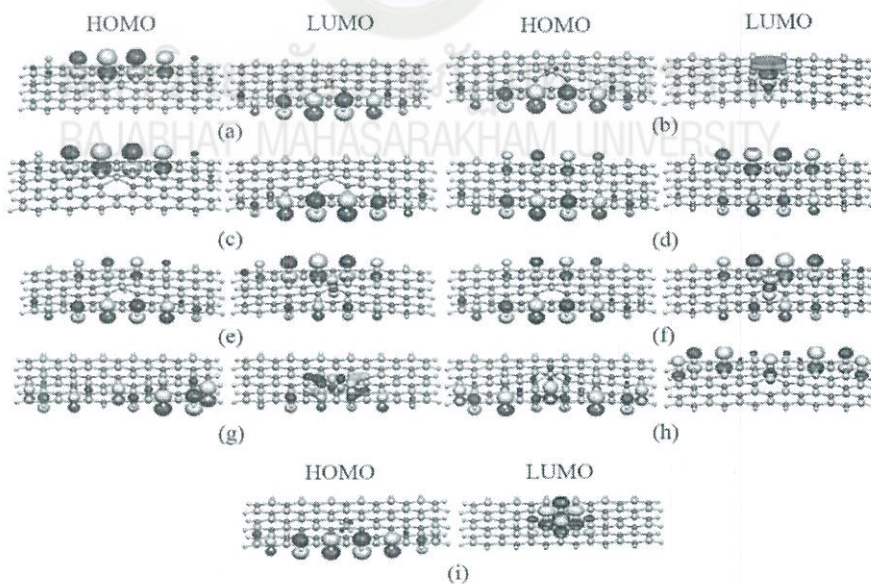
การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนแสดงดังภาพที่ 4.20 และ 4.21 ตามลำดับ จากภาพพบว่าออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนมีการกระจายตัวบริเวณที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน โดยเฉพาะแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม โมลิบดีนัม ทังสแตน แมงกานีส และเทคนีเชียมตรงตำแหน่งคาร์บอน ไนโอเบียม ทังสแตน แมงกานีส และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนที่มีการกระจายตัวอย่างชัดเจน ดังนั้นแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันทั้งตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนบนแผ่นเหมาะที่จะทำการดูดซับไนโตรเบนซีนและโทลูอิน เนื่องจากเป็นบริเวณที่มีการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนอยู่รอบ ๆ



ภาพที่ 4.19 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (SiCNS)



ภาพที่ 4.20 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) (a)  $V_C$ -SiCNS, (b)  $Nb_C$ -SiCNS, (c)  $Ta_C$ -SiCNS, (d)  $Cr_C$ -SiCNS, (e)  $Mo_C$ -SiCNS, (f)  $W_C$ -SiCNS, (g)  $Mn_C$ -SiCNS, (h)  $Tc_C$ -SiCNS และ (i)  $Re_C$ -SiCNS

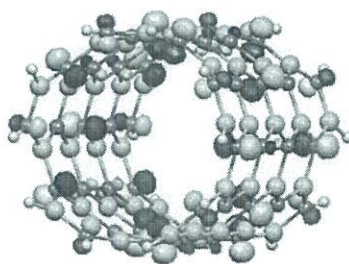


ภาพที่ 4.21 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) (a)  $V_{Si}$ -SiCNS, (b)  $Nb_{Si}$ -SiCNS, (c)  $Ta_{Si}$ -SiCNS, (d)  $Cr_{Si}$ -SiCNS, (e)  $Mo_{Si}$ -SiCNS, (f)  $W_{Si}$ -SiCNS, (g)  $Mn_{Si}$ -SiCNS, (h)  $Tc_{Si}$ -SiCNS และ (i)  $Re_{Si}$ -SiCNS

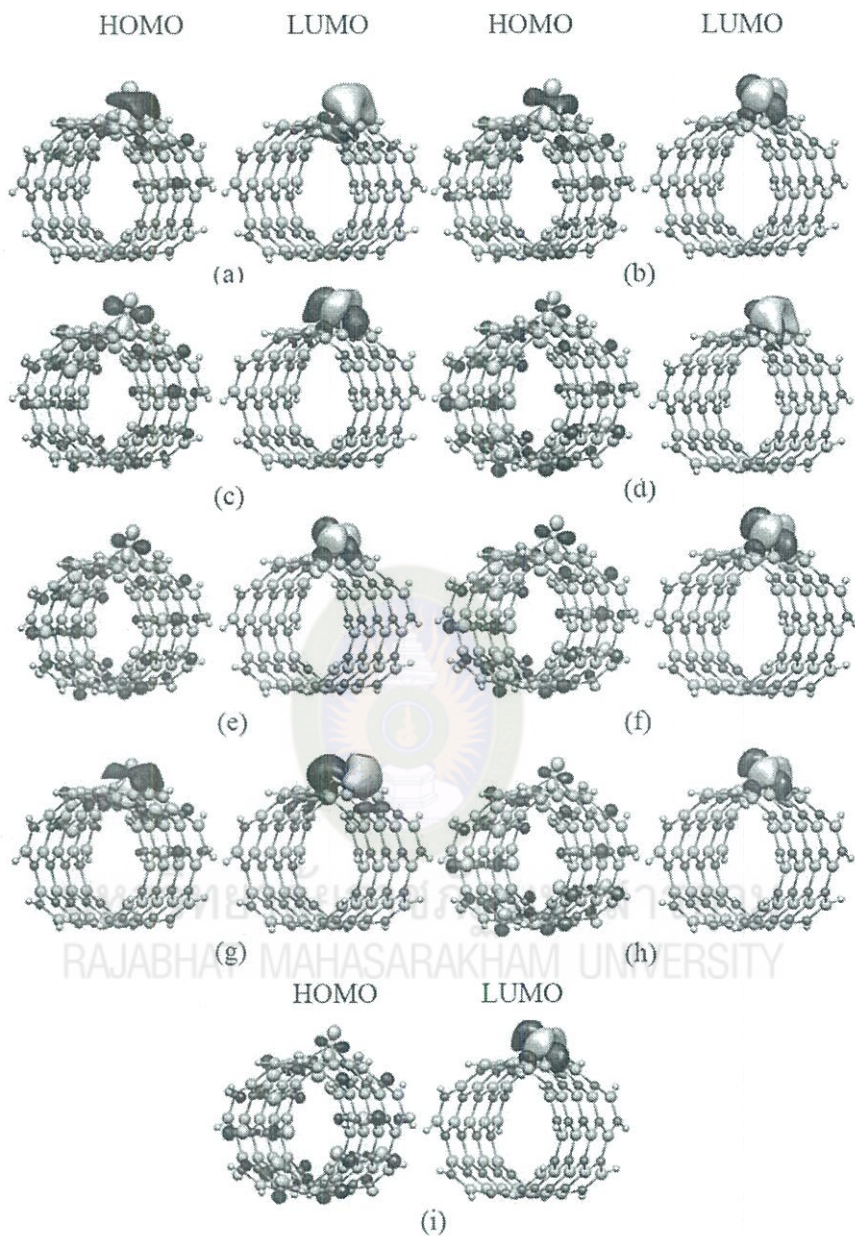
4.3.2.2 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมแสดงดังภาพที่ 4.22 จากภาพพบว่าออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่จะกระจายอยู่รอบ ๆ ท่อ ดังนั้นท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมจึงไม่เหมาะสำหรับการดูดซับสารอนุพันธ์ของเบนซีน เนื่องจากท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมไม่มีตำแหน่งที่แสดงถึงความว่องไวต่อการดูดซับได้ชัดเจน

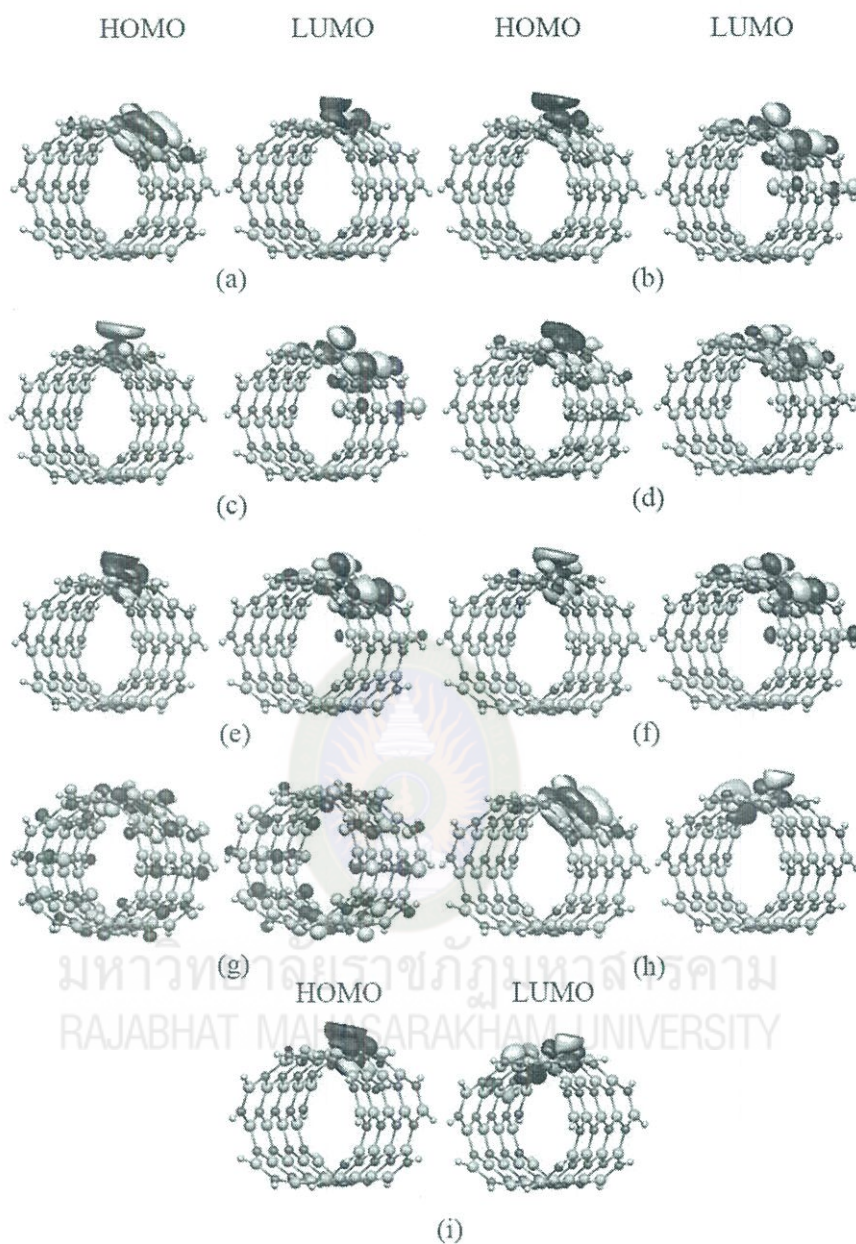
การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนแสดงดังภาพที่ 4.23 และ 4.24 ตามลำดับ จากภาพพบว่าออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนมีการกระจายตัวบริเวณที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน โดยเฉพาะการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตนแมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน วาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนที่มีการกระจายตัวอย่างเห็นได้ชัด ดังนั้นท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันทั้งตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนบนท่อเหมาะที่จะทำการดูดซับไนโตรเบนซีนและอนิลีน เนื่องจากเป็นบริเวณที่มีการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนอยู่รอบ ๆ



ภาพที่ 4.22 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (SiCNT)



ภาพที่ 4.23 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของ (a)  $V_C$ -SiCNT, (b)  $Nb_C$ -SiCNT, (c)  $Ta_C$ -SiCNT, (d)  $Cr_C$ -SiCNT, (e)  $Mo_C$ -SiCNT, (f)  $W_C$ -SiCNT, (g)  $Mn_C$ -SiCNT, (h)  $Tc_C$ -SiCNT และ (i)  $Re_C$ -SiCNT

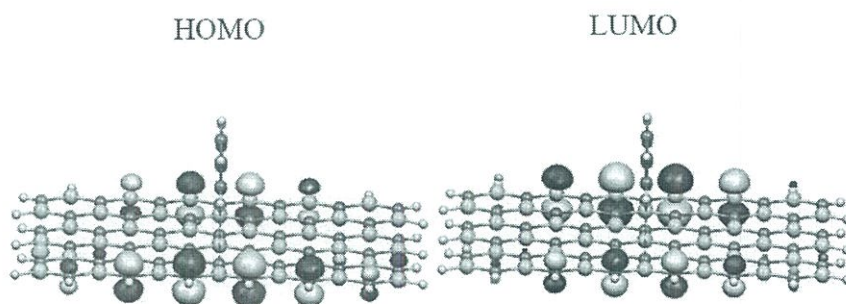


ภาพที่ 4.24 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของ (a)  $V_{Si}$ -SiCNT, (b)  $Nb_{Si}$ -SiCNT, (c)  $Ta_{Si}$ -SiCNT, (d)  $Cr_{Si}$ -SiCNT, (e)  $Mo_{Si}$ -SiCNT, (f)  $W_{Si}$ -SiCNT, (g)  $Mn_{Si}$ -SiCNT, (h)  $Tc_{Si}$ -SiCNT และ (i)  $Re_{Si}$ -SiCNT

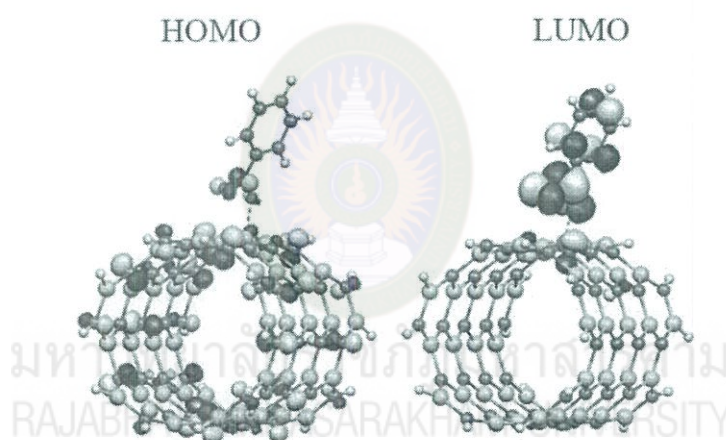
4.3.2.3 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับไนโตรเจนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับไนโตรเจนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมแสดงดังภาพที่ 4.25 และ 4.26 ตามลำดับ จากภาพพบว่าออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของวัสดุนาโนทั้งสองชนิดจะกระจายอยู่รอบ ๆ แผ่นและท่อ ไม่กระจายบริเวณที่เกิดการดูดซับไนโตรเจนซิน ดังนั้นการดูดซับไนโตรเจนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีผลต่อสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของการพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่เพียงเล็กน้อย ซึ่งสอดคล้องกับแถบพลังงานที่มีการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อยเช่นกัน

การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับไนโตรเจนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนแสดงดังภาพที่ 4.27 และ 4.28 ตามลำดับ พบว่าออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนมีการกระจายตัวบริเวณที่มีการดูดซับ (Adsorption site) ไนโตรเจนซิน โดยเฉพาะการดูดซับไนโตรเจนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม โมลิบดีนัม โมลิบดีนัม ทั้งสแตนแมงกานีสและเทคนีเซียมตรงตำแหน่งคาร์บอน และการดูดซับไนโตรเจนซินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมแมงกานีสและเทคนีเซียมตรงตำแหน่งซิลิกอน การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับไนโตรเจนซินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนแสดงดังภาพที่ 4.29 และ 4.30 ตามลำดับ พบว่าออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนมีการกระจายตัวตรงบริเวณที่มีการดูดซับไนโตรเจนซิน โดยเฉพาะการดูดซับไนโตรเจนซินบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตนแมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน และการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตนแมงกานีส เทคนีเซียมและรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน จะมีพบกระจายตัวของออร์บิทัลอย่างชัดเจน

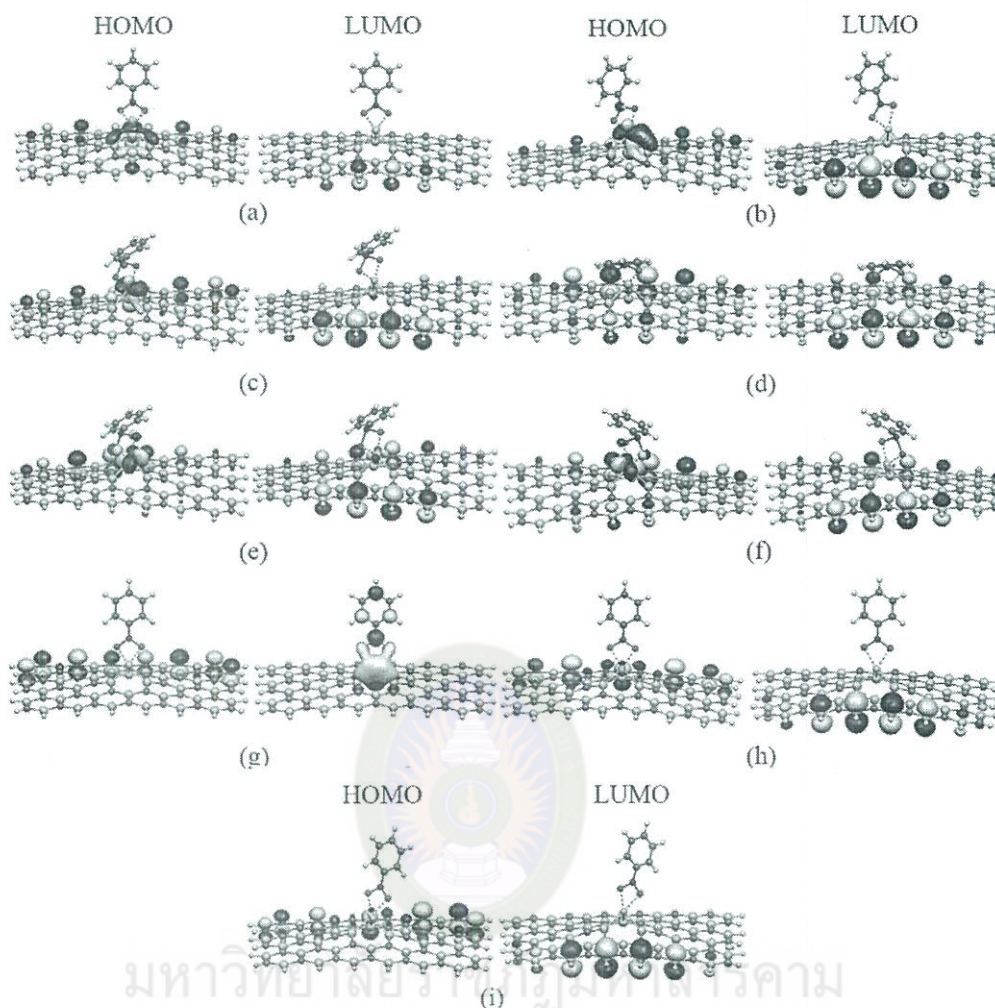


ภาพที่ 4.25 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (nitrobenzene/SiCNS)

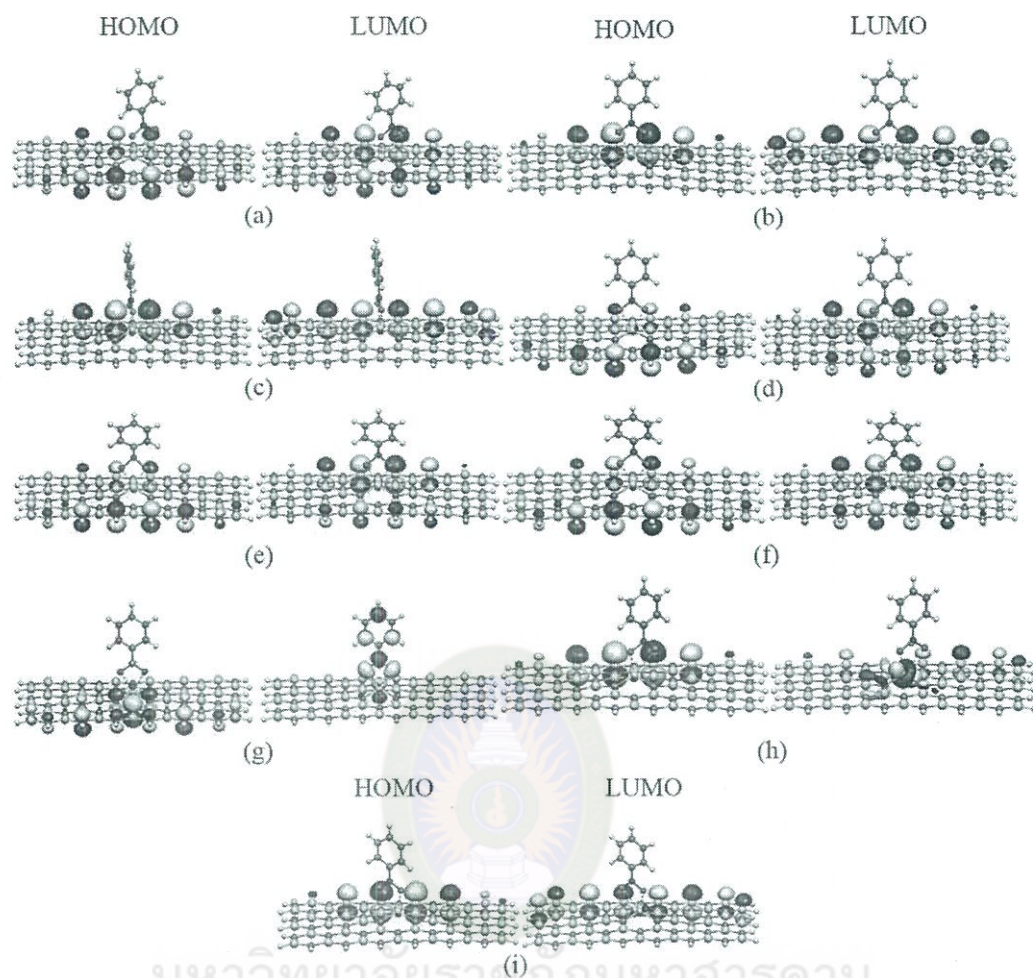


ภาพที่ 4.26 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (nitrobenzene/SiCNT)

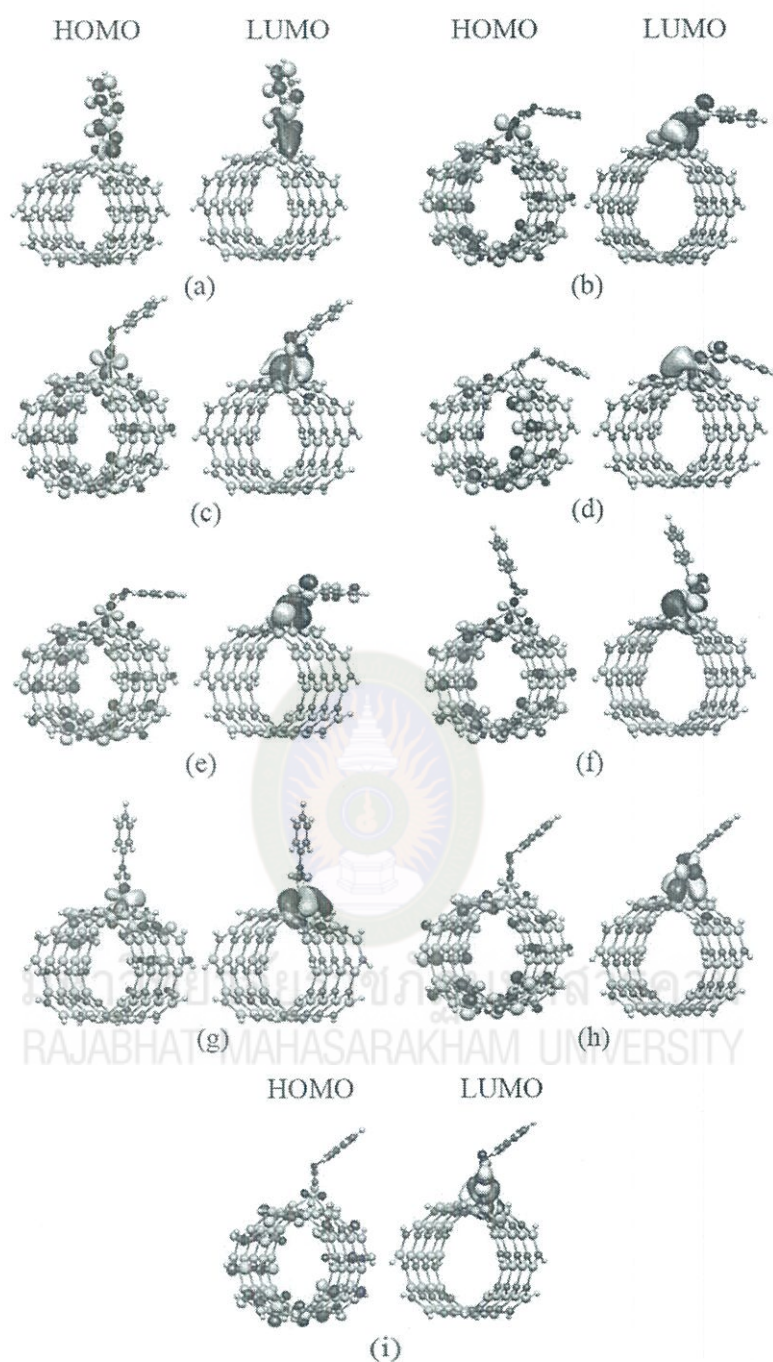




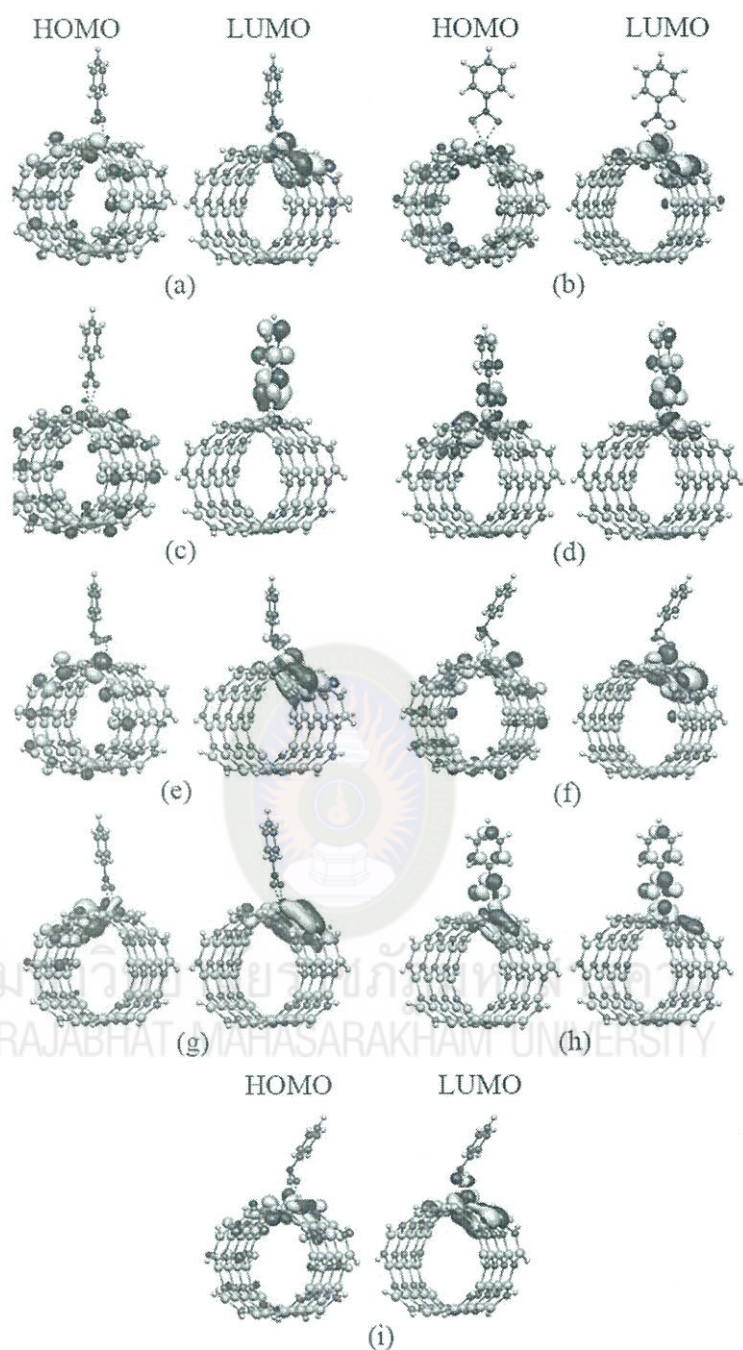
ภาพที่ 4.27 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของ (a) nitrobenzene/ $V_C$ -SiCNS, (b) nitrobenzene/ $Nb_C$ -SiCNS, (c) nitrobenzene/ $Ta_C$ -SiCNS, (d) nitrobenzene/ $Cr_C$ -SiCNS, (e) nitrobenzene/ $Mo_C$ -SiCNS, (f) nitrobenzene/ $W_C$ -SiCNS, (g) nitrobenzene/ $Mn_C$ -SiCNS, (h) nitrobenzene/ $Tc_C$ -SiCNS และ (i) nitrobenzene/ $Re_C$ -SiCNS



ภาพที่ 4.28 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของ (a) nitrobenzene/ $V_{Si}$ -SiCNS, (b) nitrobenzene/ $Nb_{Si}$ -SiCNS, (c) nitrobenzene/ $Ta_{Si}$ -SiCNS, (d) nitrobenzene/ $Cr_{Si}$ -SiCNS, (e) nitrobenzene/ $Mo_{Si}$ -SiCNS, (f) nitrobenzene/ $W_{Si}$ -SiCNS, (g) nitrobenzene/ $Mn_{Si}$ -SiCNS, (h) nitrobenzene/ $Tc_{Si}$ -SiCNS และ (i) nitrobenzene/ $Re_{Si}$ -SiCNS



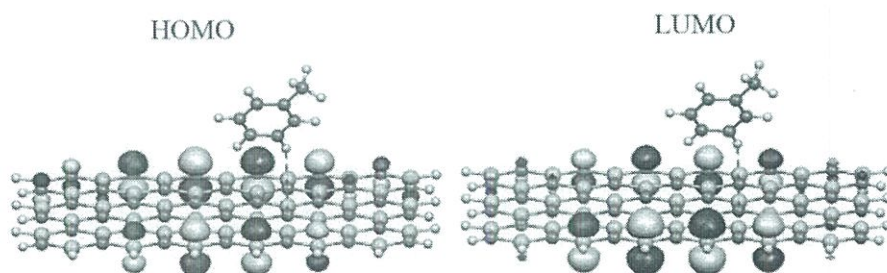
ภาพที่ 4.29 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของ (a) nitrobenzene/ $V_C$ -SiCNT, (b) nitrobenzene/ $Nb_C$ -SiCNT, (c) nitrobenzene/ $Ta_C$ -SiCNT, (d) nitrobenzene/ $Cr_C$ -SiCNT, (e) nitrobenzene/ $Mo_C$ -SiCNT, (f) nitrobenzene/ $W_C$ -SiCNT, (g) nitrobenzene/ $Mn_C$ -SiCNT, (h) nitrobenzene/ $Tc_C$ -SiCNT และ (i) nitrobenzene/ $Re_C$ -SiCNT



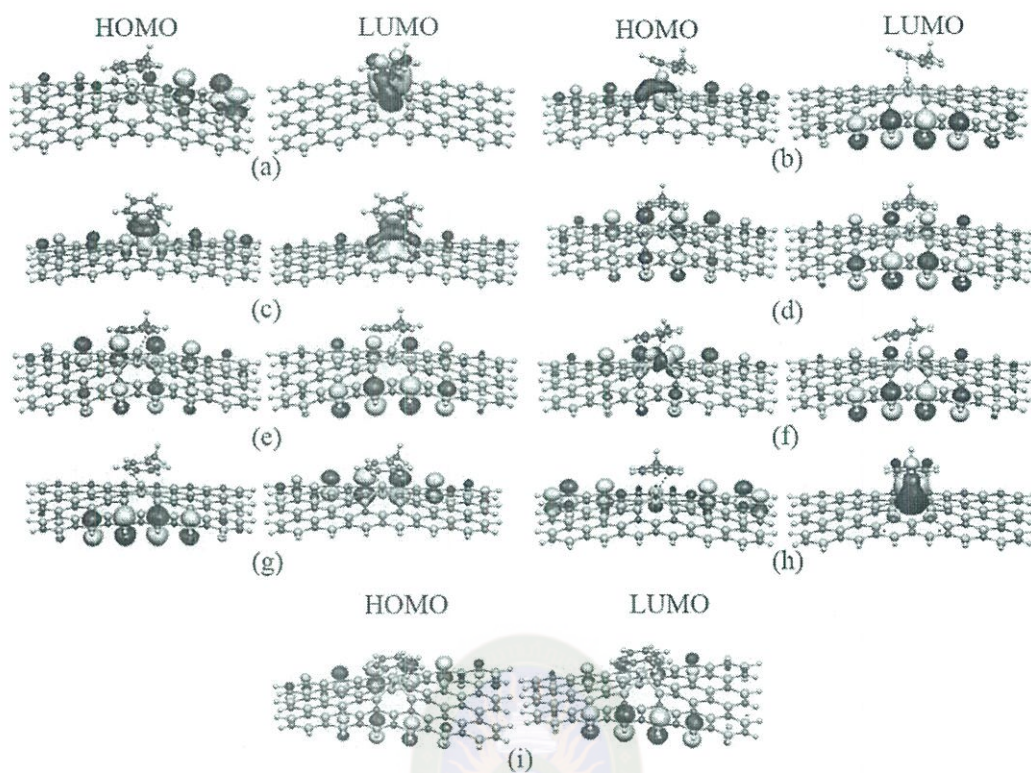
ภาพที่ 4.30 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของ (a) nitrobenzene/ $V_{5+}$ -SiCNT, (b) nitrobenzene/ $Nb_{5+}$ -SiCNT, (c) nitrobenzene/ $Ta_{5+}$ -SiCNT, (d) nitrobenzene/ $Cr_{5+}$ -SiCNT, (e) nitrobenzene/ $Mo_{5+}$ -SiCNT, (f) nitrobenzene/ $W_{5+}$ -SiCNT, (g) nitrobenzene/ $Mn_{5+}$ -SiCNT, (h) nitrobenzene/ $Tc_{5+}$ -SiCNT และ (i) nitrobenzene/ $Re_{5+}$ -SiCNT

4.3.2.4 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับโกลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

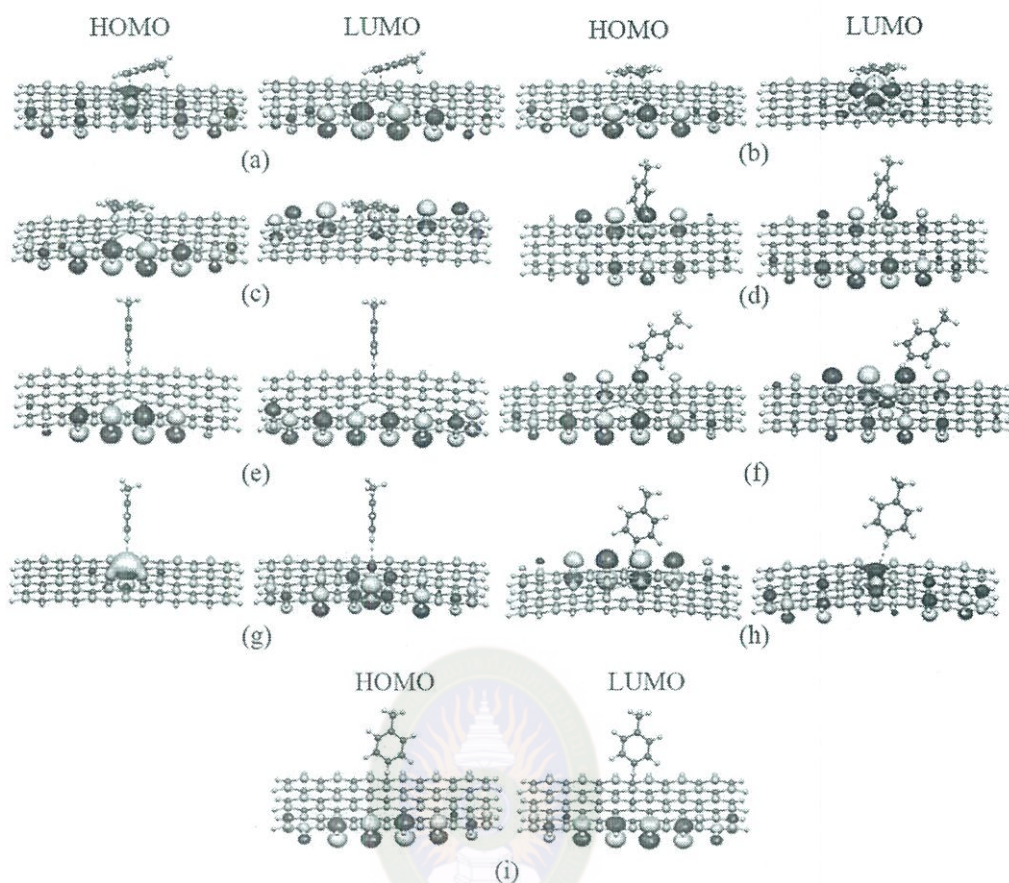
การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับโกลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมแสดงดังภาพที่ 4.31 พบว่าออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่จะกระจายอยู่รอบ ๆ แผ่น ไม่กระจายบริเวณที่เกิดการดูดซับโกลูอิน ดังนั้นการดูดซับโกลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีผลต่อสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของการพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่เพียงเล็กน้อย ซึ่งสอดคล้องกับแถบพลังงานที่มีการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อย การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับโกลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนแสดงดังภาพที่ 4.32 และ 4.33 ตามลำดับ จากภาพพบว่าออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนมีการกระจายตัวตรงบริเวณที่มีการดูดซับโกลูอิน โดยเฉพาะการดูดซับโกลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม ทังสแตนและเทคนีเซียมตรงตำแหน่งคาร์บอน วาเนเดียม ไนโอเบียม ทังสแตน แมงกานีสและเทคนีเซียมตรงตำแหน่งซิลิกอน พบการกระจายตัวของออร์บิทัลอย่างชัดเจน



ภาพที่ 4.31 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของการดูดซับโกลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (toluene/SiCNS)



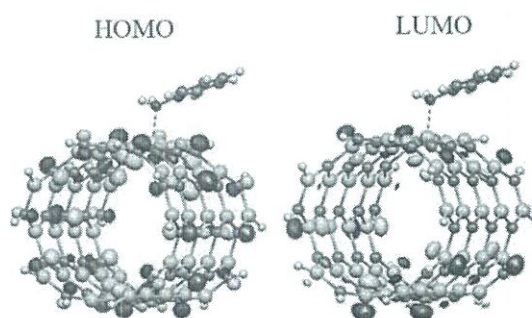
ภาพที่ 4.32 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของ (a) toluene/ $V_C$ -SiCNS, (b) toluene/ $Nb_C$ -SiCNS, (c) toluene/ $Ta_C$ -SiCNS, (d) toluene/ $Cr_C$ -SiCNS, (e) toluene/ $Mo_C$ -SiCNS, (f) toluene/ $W_C$ -SiCNS, (g) toluene/ $Mn_C$ -SiCNS, (h) toluene/ $Tc_C$ -SiCNS และ (i) toluene/ $Re_C$ -SiCNS



ภาพที่ 4.33 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของ (a) toluene/ $V_{5f}$ -SiCNS, (b) toluene/ $Nb_{5f}$ -SiCNS, (c) toluene/ $Ta_{5f}$ -SiCNS, (d) toluene/ $Cr_{5f}$ -SiCNS, (e) toluene/ $Mo_{5f}$ -SiCNS, (f) toluene/ $W_{5f}$ -SiCNS, (g) toluene/ $Mn_{5f}$ -SiCNS, (h) toluene/ $Tc_{5f}$ -SiCNS และ (i) toluene/ $Re_{5f}$ -SiCNS

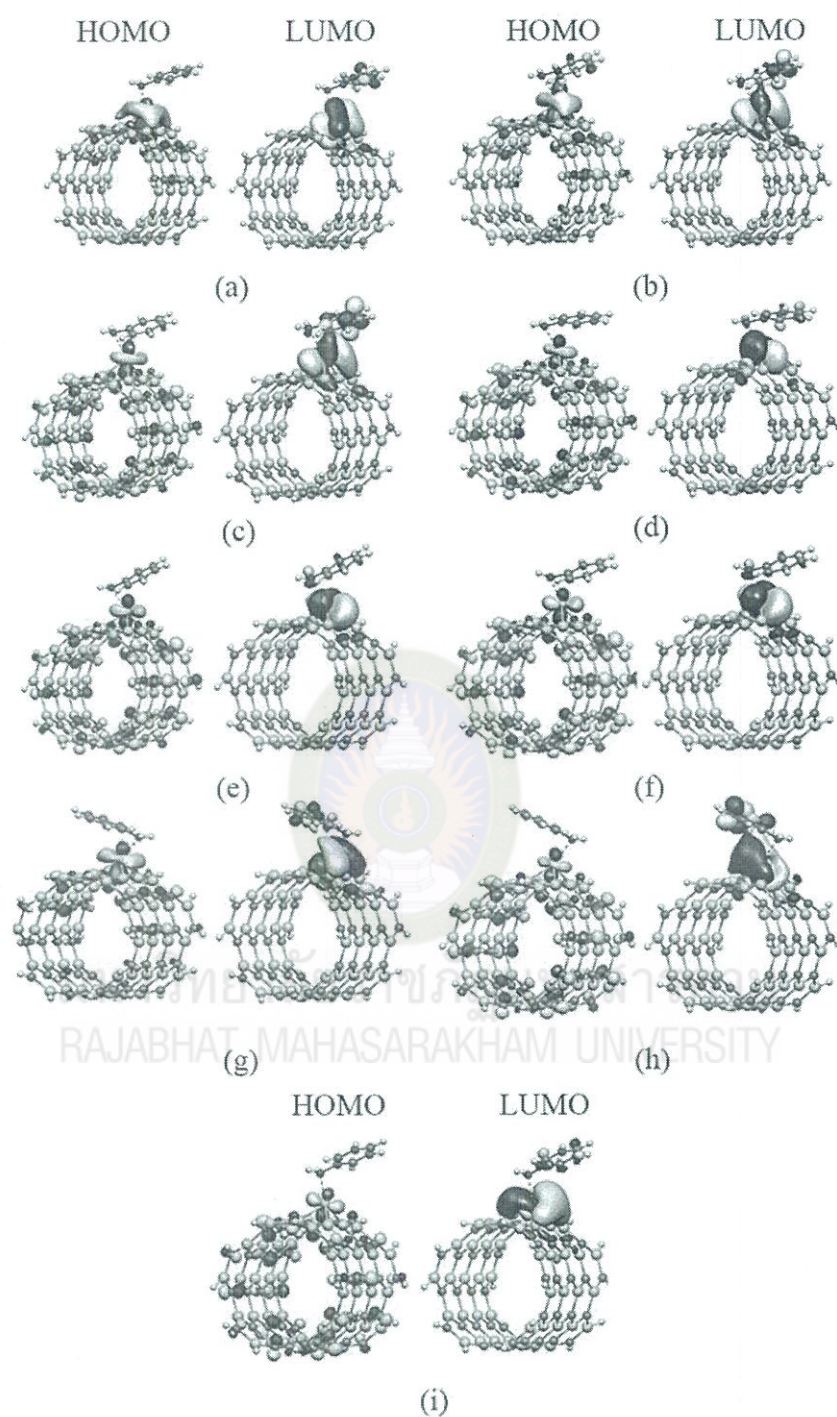
4.3.2.5 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม แสดงดังภาพที่ 4.34 พบว่าออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่บริเวณรอบ ๆ ท่อ ไม่กระจายบริเวณที่เกิดการดูดซับอนิไลน์ ดังนั้นการดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีผลต่อสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของการพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่เพียงเล็กน้อย ซึ่งสอดคล้องกับแถบพลังงานที่มีการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อย การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนแสดงดังภาพที่ 4.35 และ 4.36 ตามลำดับ พบว่าออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนมีการกระจายตัวตรงบริเวณที่มีการดูดซับอนิไลน์ โดยเฉพาะการดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเชียมและรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน และการเติมวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเชียมและรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน การกระจายตัวของออร์บิทัลอย่างชัดเจน

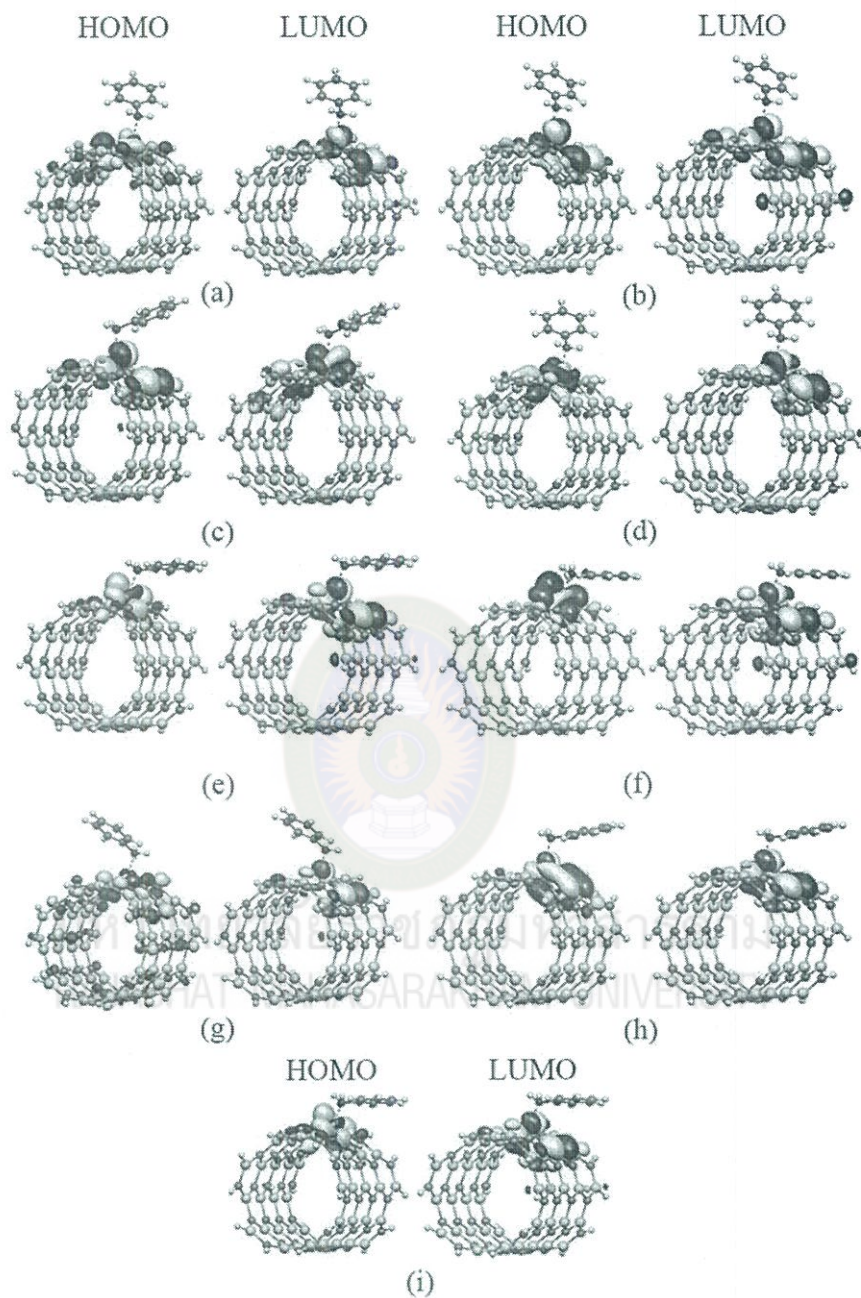


ภาพที่ 4.34 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของการดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม (aniline/SiCNT)





ภาพที่ 4.35 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของ (a) aniline/ $V_C$ -SiCNT, (b) aniline/ $Nb_C$ -SiCNT, (c) aniline/ $Ta_C$ -SiCNT, (d) aniline/ $Cr_C$ -SiCNT, (e) aniline/ $Mo_C$ -SiCNT, (f) aniline/ $W_C$ -SiCNT, (g) aniline/ $Mn_C$ -SiCNT, (h) aniline/ $Tc_C$ -SiCNT และ (i) aniline/ $Re_C$ -SiCNT

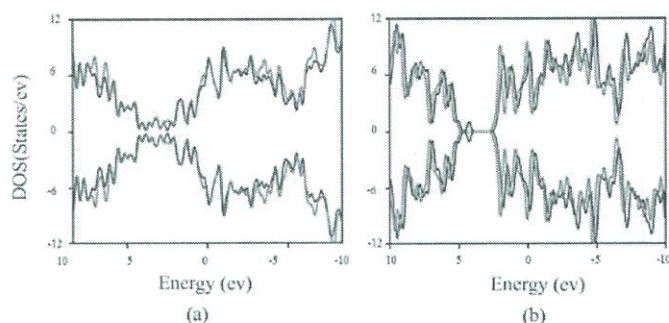


ภาพที่ 4.36 การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (HOMO) และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ (LUMO) ของ (a) aniline/ $V_{5f}$ -SiCNT, (b) aniline/ $Nb_{5f}$ -SiCNT, (c) aniline/ $Ta_{5f}$ -SiCNT, (d) aniline/ $Cr_{5f}$ -SiCNT, (e) aniline/ $Mo_{5f}$ -SiCNT, (f) aniline/ $W_{5f}$ -SiCNT, (g) aniline/ $Mn_{5f}$ -SiCNT, (h) aniline/ $Tc_{5f}$ -SiCNT และ (i) aniline/ $Re_{5f}$ -SiCNT

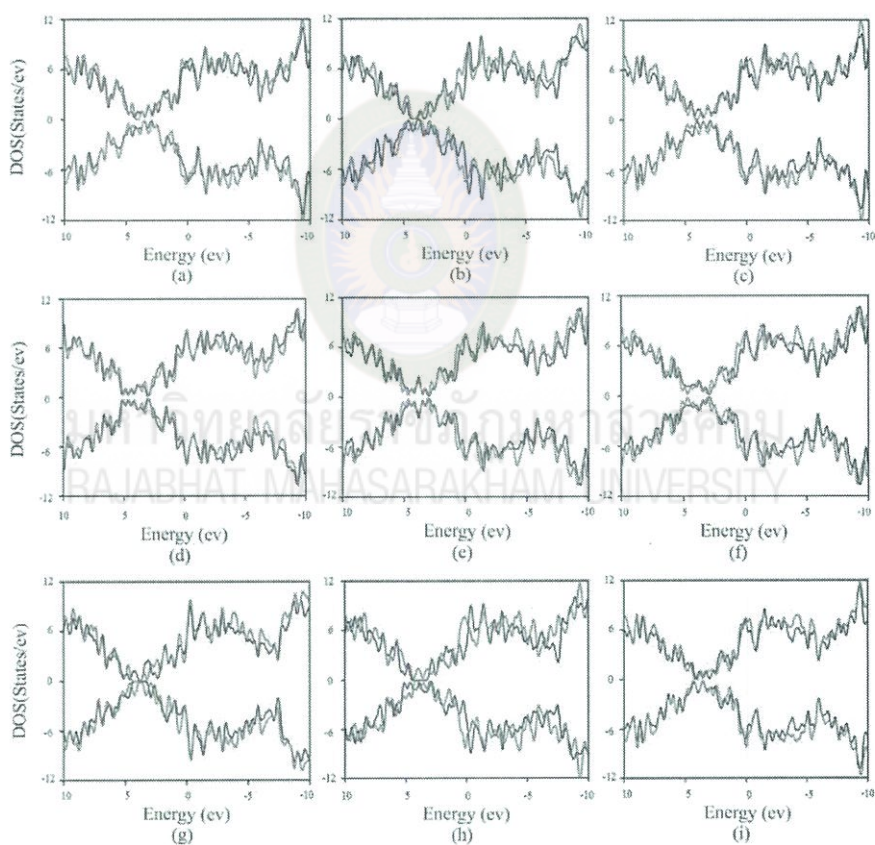
### 4.3.3 ความหนาแน่นสถานะ

4.3.3.1 ความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันที่มีการดูดซับไนโตรเบนซีน

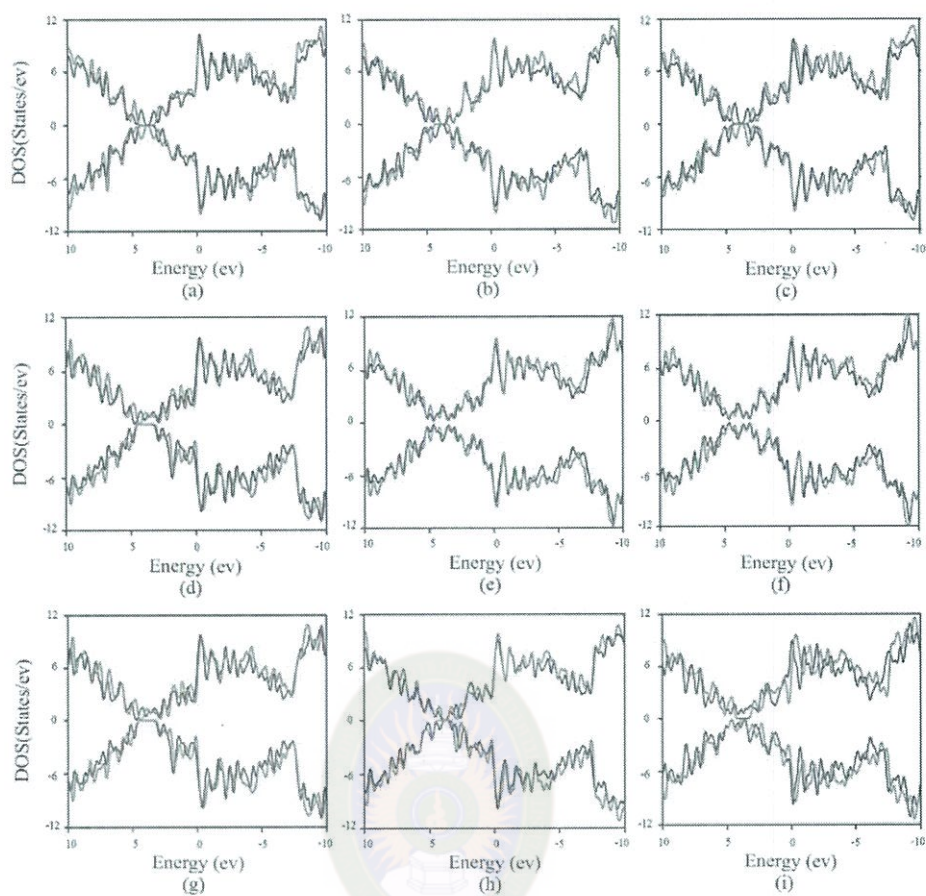
สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของความหนาแน่นสถานะ (Density of State, DOS) ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมที่มีการดูดซับไนโตรเบนซีนแสดงดังภาพที่ 4.37 พบว่าความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมก่อนและหลังดูดซับไนโตรเบนซีนมีการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อย เกิดจากการเลื่อนตำแหน่งของพลังงาน อธิบายได้ว่าการดูดซับไนโตรเบนซีนส่งผลต่อความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมเพียงเล็กน้อย ความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนที่มีการดูดซับไนโตรเบนซีนแสดงดังภาพที่ 4.38 และ 4.39 ตามลำดับ ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนที่มีการดูดซับไนโตรเบนซีนแสดงดังภาพ 4.40 และ 4.41 ตามลำดับ จากภาพพบว่าความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนที่มีการดูดซับไนโตรเบนซีนมีการเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจน โดยเฉพาะความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนที่มีการดูดซับไนโตรเบนซีนมีการเปลี่ยนแปลงมากกว่าความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอน ดังนั้นสามารถสรุปได้ว่าการหลังการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนส่งผลต่อความหนาแน่นสถานะอย่างชัดเจน



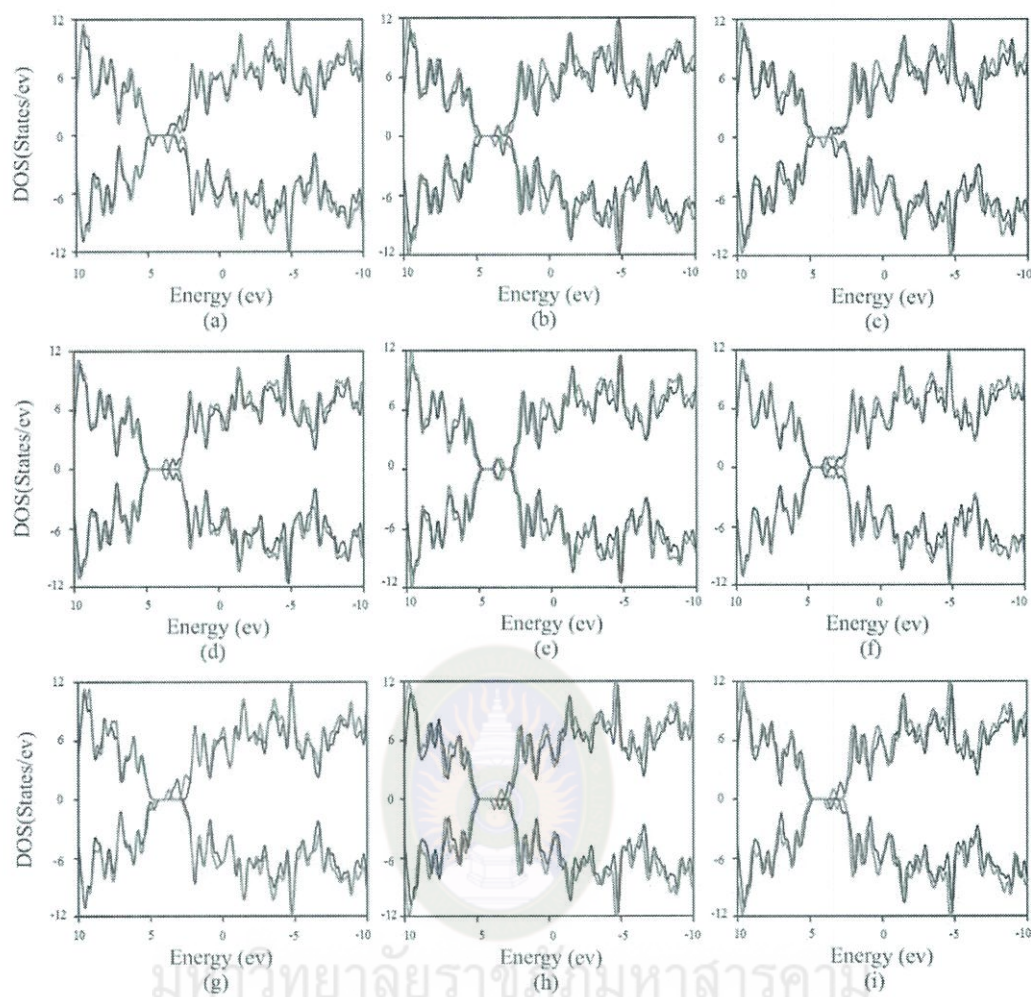
ภาพที่ 4.37 ความหนาแน่นสถานะของ (a) nitrobenzene/SiCNS และ (b) nitrobenzene/SiCNT เส้นสีดำ (ก่อนดูดซับไนโตรเบนซีน) และเส้นสีแดง (หลังดูดซับไนโตรเบนซีน)



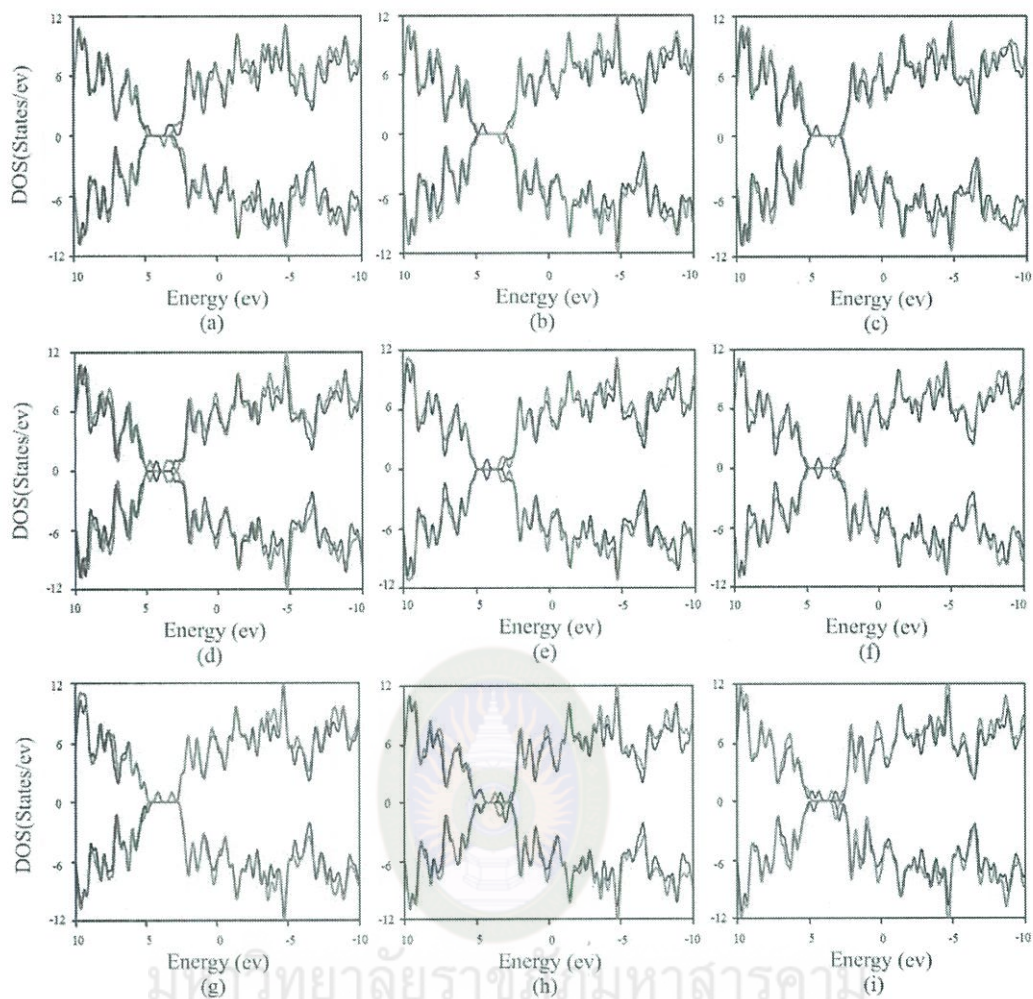
ภาพที่ 4.38 ความหนาแน่นสถานะของ (a) nitrobenzene/ $V_C$ -SiCNS, (b) nitrobenzene/ $Nb_C$ -SiCNS, (c) nitrobenzene/ $Ta_C$ -SiCNS, (d) nitrobenzene/ $Cr_C$ -SiCNS, (e) nitrobenzene/ $Mo_C$ -SiCNS, (f) nitrobenzene/ $W_C$ -SiCNS, (g) nitrobenzene/ $Mn_C$ -SiCNS, (h) nitrobenzene/ $Tc_C$ -SiCNS และ (i) nitrobenzene/ $Re_C$ -SiCNS เส้นสีดำ (ก่อนดูดซับไนโตรเบนซีน) และเส้นสีแดง (หลังดูดซับไนโตรเบนซีน)



ภาพที่ 4.39 ความหนาแน่นสถานะของ (a) nitrobenzene/ $V_{Si}$ -SiCNS, (b) nitrobenzene/ $Nb_{Si}$ -SiCNS, (c) nitrobenzene/ $Ta_{Si}$ -SiCNS, (d) nitrobenzene/ $Cr_{Si}$ -SiCNS, (e) nitrobenzene/ $Mo_{Si}$ -SiCNS, (f) nitrobenzene/ $W_{Si}$ -SiCNS, (g) nitrobenzene/ $Mn_{Si}$ -SiCNS, (h) nitrobenzene/ $Tc_{Si}$ -SiCNS และ (i) nitrobenzene/ $Re_{Si}$ -SiCNS เส้นสีดำ (ก่อนดูดซับไนโตรเบนซีน) และเส้นสีแดง (หลังดูดซับไนโตรเบนซีน)



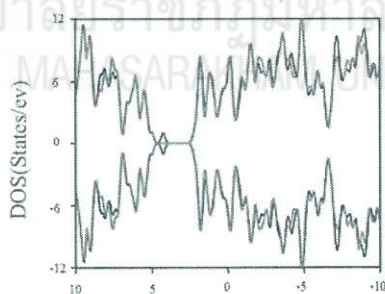
ภาพที่ 4.40 ความหนาแน่นสถานะของ (a) nitrobenzene/ $V_C$ -SiCNT, (b) nitrobenzene/ $Nb_C$ -SiCNT, (c) nitrobenzene/ $Ta_C$ -SiCNT, (d) nitrobenzene/ $Cr_C$ -SiCNT, (e) nitrobenzene/ $Mo_C$ -SiCNT, (f) nitrobenzene/ $W_C$ -SiCNT, (g) nitrobenzene/ $Mn_C$ -SiCNT, (h) nitrobenzene/ $Tc_C$ -SiCNT และ (i) nitrobenzene/ $Re_C$ -SiCNT เส้นสีดำ (ก่อนดูดซับไนโตรเบนซีน) และเส้นสีแดง (หลังดูดซับไนโตรเบนซีน)



ภาพที่ 4.41 ความหนาแน่นสถานะของ (a) nitrobenzene/ $V_{Si}$ -SiCNT, (b) nitrobenzene/ $Nb_{Si}$ -SiCNT, (c) nitrobenzene/ $Ta_{Si}$ -SiCNT, (d) nitrobenzene/ $Cr_{Si}$ -SiCNT, (e) nitrobenzene/ $Mo_{Si}$ -SiCNT, (f) nitrobenzene/ $W_{Si}$ -SiCNT, (g) nitrobenzene/ $Mn_{Si}$ -SiCNT, (h) nitrobenzene/ $Tc_{Si}$ -SiCNT และ (i) nitrobenzene/ $Re_{Si}$ -SiCNT เส้นสีดำ (ก่อนดูดซับไนโตรเบนซีน) และเส้นสีแดง (หลังดูดซับไนโตรเบนซีน)

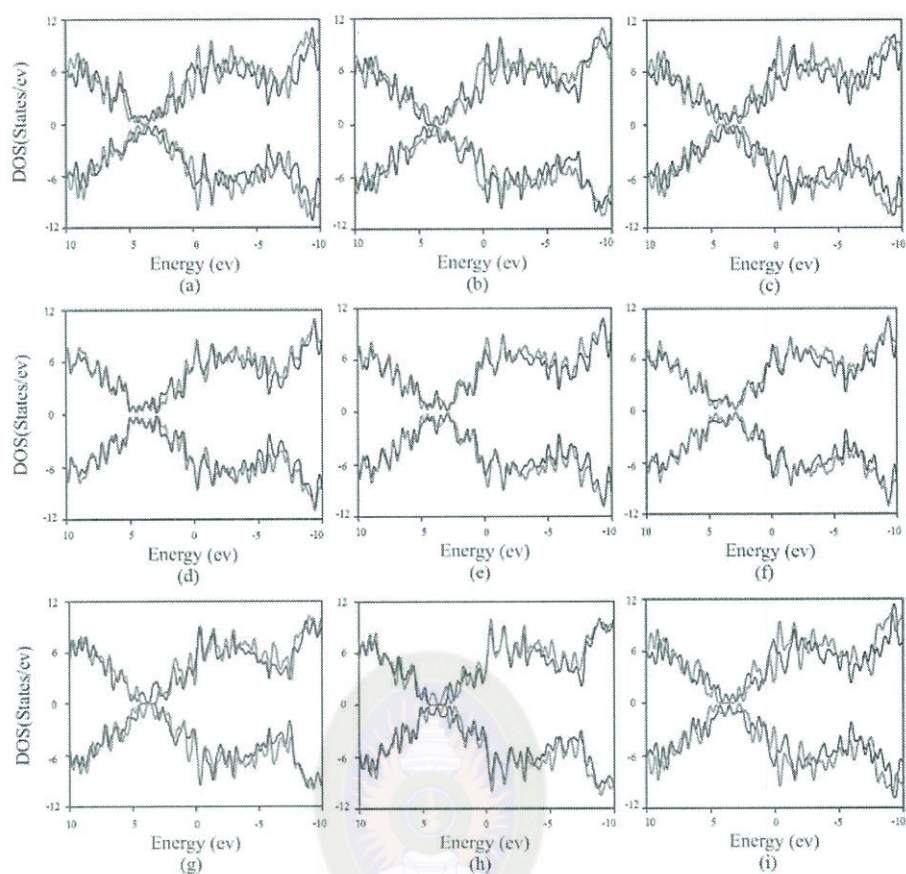
4.3.3.2 ความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันที่มีการดูดซับโพลูอิน

สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมที่มีการดูดซับโพลูอินแสดงดังภาพที่ 4.42 จะพบว่าความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมก่อนและหลังดูดซับอนิซีนมีการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อย เกิดจากการเลื่อนตำแหน่งของพลังงาน อธิบายได้ว่าการดูดซับโพลูอินส่งผลต่อความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมเพียงเล็กน้อย ความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนที่มีการดูดซับโพลูอิน แสดงดังภาพที่ 4.43 และ 4.44 ตามลำดับ จากภาพพบว่าความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนที่มีการดูดซับโพลูอินมีการเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจน โดยเฉพาะความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนที่มีการดูดซับโพลูอินมีการเปลี่ยนแปลงมากกว่าความหนาแน่นสถานะของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งซิลิกอนที่มีการดูดซับโพลูอิน ดังนั้นสามารถสรุปได้ว่าการหลังการดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนส่งผลต่อความหนาแน่นสถานะอย่างชัดเจน

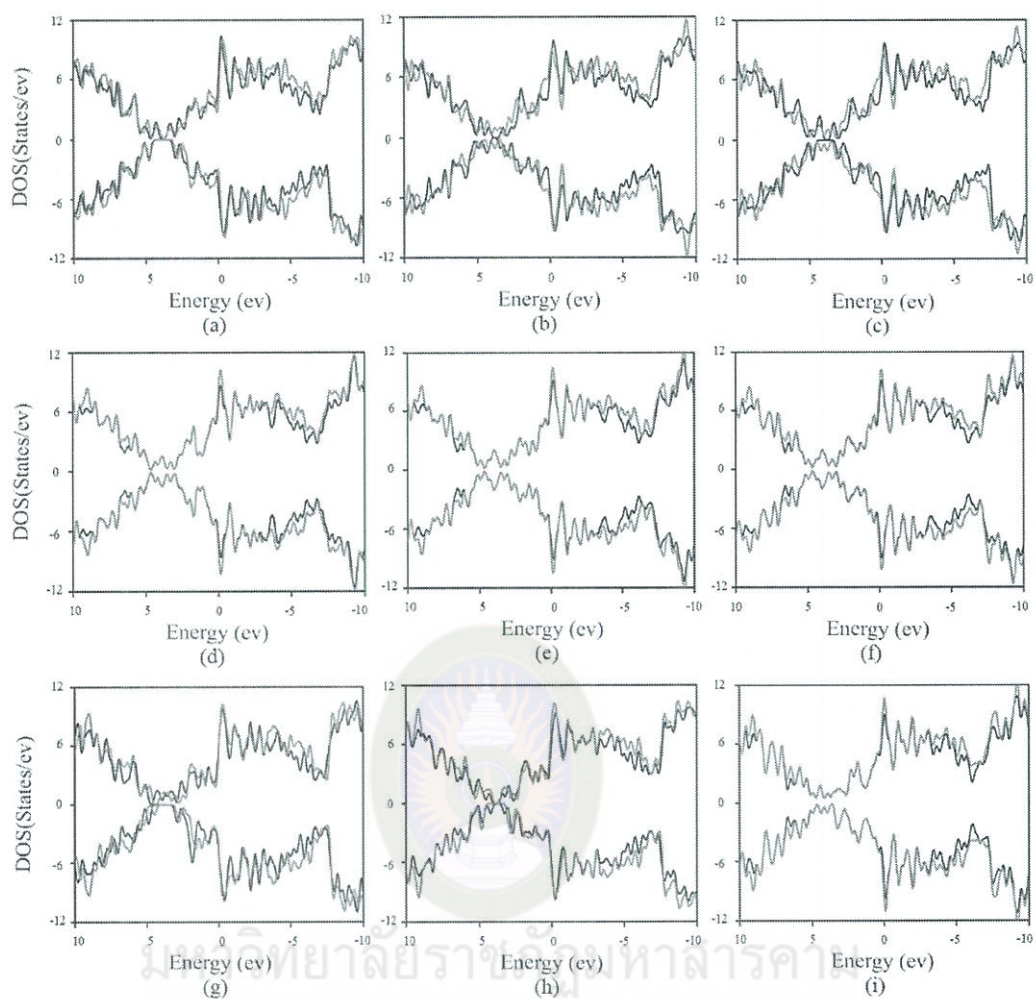


ภาพที่ 4.42 ความหนาแน่นสถานะแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมที่มีการดูดซับโพลูอิน (toluene/SiCNS) เส้นสีดำ (ก่อนดูดซับโพลูอิน) และเส้นสีแดง (หลังดูดซับโพลูอิน)





ภาพที่ 4.43 ความหนาแน่นสถานะของ (a) toluene/ $V_C$ -SiCNS, (b) toluene/ $Nb_C$ -SiCNS, (c) toluene/ $Ta_C$ -SiCNS, (d) toluene/ $Cr_C$ -SiCNS, (e) toluene/ $Mo_C$ -SiCNS, (f) toluene/ $W_C$ -SiCNS, (g) toluene/ $Mn_C$ -SiCNS, (h) toluene/ $Tc_C$ -SiCNS และ (i) toluene/ $Re_C$ -SiCNS เส้นสีดำ (ก่อนดูดซับโทลูอิน) และเส้นสีแดง (หลังดูดซับโทลูอิน)

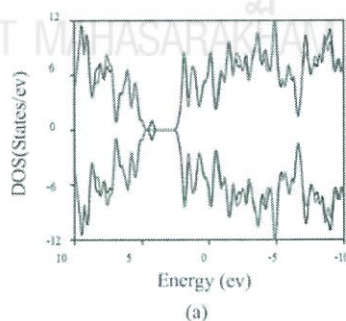


ภาพที่ 4.44 ความหนาแน่นสถานะของ (a) toluene/ $V_{Si}$ -SiCNS, (b) toluene/ $Nb_{Si}$ -SiCNS, (c) toluene/ $Ta_{Si}$ -SiCNS, (d) toluene/ $Cr_{Si}$ -SiCNS, (e) toluene/ $Mo_{Si}$ -SiCNS, (f) toluene/ $W_{Si}$ -SiCNS, (g) toluene/ $Mn_{Si}$ -SiCNS, (h) toluene/ $Tc_{Si}$ -SiCNS และ (i) toluene/ $Re_{Si}$ -SiCNS เส้นสีดำ (ก่อนดูดซับโทลูอิน) และเส้นสีแดง (หลังดูดซับโทลูอิน)

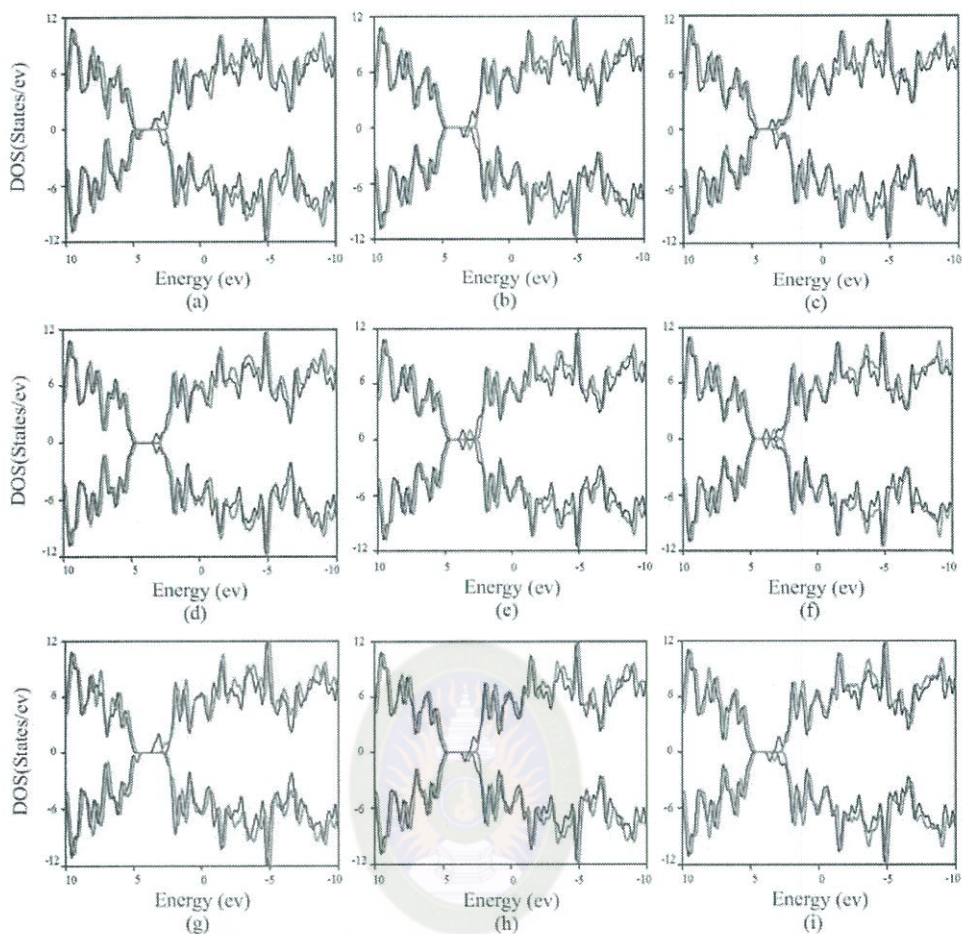
4.3.3.3 ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันที่มีการดูดซับอนิไลน์

สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ในเทอมของความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมที่มีการดูดซับอนิไลน์แสดงดังภาพที่ 4.45 พบว่าความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมก่อนและหลังดูดซับอนิไลน์มีการเปลี่ยนแปลงเพียงเล็กน้อย เกิดจากการเลื่อนตำแหน่งของพลังงาน อธิบายได้ว่าการดูดซับอนิไลน์ส่งผลต่อความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมเพียงเล็กน้อย การดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน แสดงดังภาพที่ 4.46 และ 4.47 ตามลำดับ จากภาพพบว่าความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนที่มีการดูดซับอนิไลน์มีการเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจน ความหนาแน่นสถานะของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนที่มีการดูดซับอนิไลน์มีการเปลี่ยนแปลงแตกต่างกันเล็กน้อย สามารถสรุปได้ว่าการหลังการดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนส่งผลต่อความหนาแน่นสถานะอย่างชัดเจนเมื่อเปรียบเทียบกับก่อนดูดซับอนิไลน์ และการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนมีการเปลี่ยนแปลงของความหนาแน่นสถานะที่แตกต่างกันเล็กน้อย

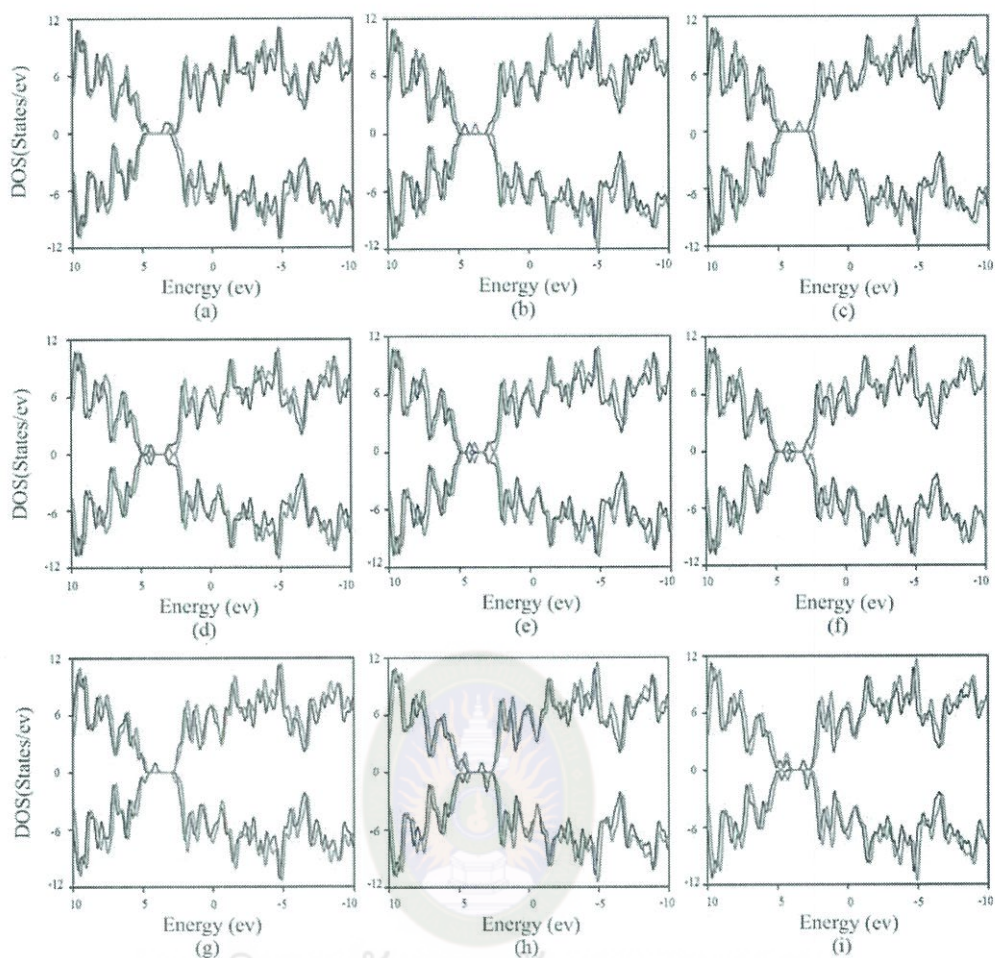
มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY



ภาพที่ 4.45 ความหนาแน่นสถานะของการดูดซับอนิไลน์บนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม aniline/SiCNT เส้นสีดำ (ก่อนดูดซับอนิไลน์) และเส้นสีแดง (หลังดูดซับอนิไลน์)



ภาพที่ 4.46 ความหนาแน่นสถานะของ (a) aniline/ $V_C$ -SiCNT, (b) aniline/ $Nb_C$ -SiCNT, (c) aniline/ $Ta_C$ -SiCNT, (d) aniline/ $Cr_C$ -SiCNT, (e) aniline/ $Mo_C$ -SiCNT, (f) aniline/ $W_C$ -SiCNT, (g) aniline/ $Mn_C$ -SiCNT, (h) aniline/ $Tc_C$ -SiCNT และ (i) aniline/ $Re_C$ -SiCNT เส้นสีดำ (ก่อนดูดซับอนิลีน) และเส้นสีแดง (หลังดูดซับอนิลีน)



ภาพที่ 4.47 ความหนาแน่นสถานะของ aniline/ $V_{Si}$ -SiCNT, (b) aniline/ $Nb_{Si}$ -SiCNT, (c) aniline/ $Ta_{Si}$ -SiCNT, (d) aniline/ $Cr_{Si}$ -SiCNT, (e) aniline/ $Mo_{Si}$ -SiCNT, (f) aniline/ $W_{Si}$ -SiCNT, (g) aniline/ $Mn_{Si}$ -SiCNT, (h) aniline/ $Tc_{Si}$ -SiCNT และ (i) aniline/ $Re_{Si}$ -SiCNT เส้นสีดำ (ก่อนดูดซับอนิไลน์) และเส้นสีแดง (หลังดูดซับอนิไลน์)

## บทที่ 5

### สรุปผลการวิจัย

ในงานวิจัยนี้ได้ศึกษาสมบัติทางโครงสร้าง สมบัติทางพลังงานและสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียม ตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน ที่มีการดูดซับไนโตรเบนซีน โทลูอิน และอนิลีน ด้วยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นที่ระดับ B3LYP/LanL2DZ ของทฤษฎี จากผลการคำนวณสามารถสรุปได้ดังนี้

#### 5.1 สมบัติทางโครงสร้าง

จากการศึกษาสมบัติทางโครงสร้างในเทอมของความยาว มุมพันธะของการเติมโลหะวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ และสมบัติทางโครงสร้างในเทอมของความยาวพันธะ มุมพันธะและระยะดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทนทาลัม การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทนทาลัม และการดูดซับอนิลีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทนทาลัม พบว่าการเติมโลหะแทนทาลัมทั้งตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ จะทำให้สมบัติทางโครงสร้างของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมเปลี่ยนแปลงไปจากเดิม ความยาวพันธะตรงตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทนทาลัมยาวขึ้น และมุมพันธะตรงตำแหน่งที่มีการเติมโลหะแทนทาลัมแคบลง ทำให้เกิดเป็นโครงสร้างโค้งงอหรือมีลักษณะนูนขึ้น ทำให้แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์มีพื้นผิวเพิ่มมากขึ้น ตำแหน่งดังกล่าวจะเกิดการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนทำให้ตำแหน่งนั้นมีความว่องไวต่อโมเลกุลที่จะทำการดูดซับ ดังนั้นการเติมโลหะวานาเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนอาจจะช่วยเพิ่มความสามารถในการดูดซับอนุพันธ์เบนซีนได้ดียิ่งขึ้น งานวิจัยชิ้นนี้จึงได้เลือกดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทนทาลัม ดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์

แบบที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซัน และดูดซับอนิสินบนท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซัน การเติมโลหะแทรกนชิซันในงานวิจัยนี้เลือกเติมทั้งตำแหน่งอะตอมของคาร์บอนและซิลิกอน เพื่อเปรียบเทียบกับแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม จากการศึกษาพบว่า การดูดซับไนโตรเจนขึ้นบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม การดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและการดูดซับอนิสินบนท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ส่งผลต่อสมบัติทางโครงสร้างของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมเพียงเล็กน้อย อีกทั้งระยะดูดซับที่มีค่ามากของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมแสดงให้เห็นถึงอันตรกิริยาอ่อน ๆ กับโมเลกุลไนโตรเจนขึ้น โพลูอิน ยกเว้นการดูดซับอนิสินบนท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมที่มีระยะดูดซับที่เหมาะสมในการดูดซับ อย่างไรก็ตามการดูดซับไนโตรเจนขึ้นบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซัน การดูดซับโพลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซัน และการดูดซับอนิสินบนท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซัน แสดงให้เห็นถึงการเปลี่ยนแปลงสมบัติทางโครงสร้างหลังการดูดซับอย่างชัดเจน ความยาวพันธะระหว่างอะตอมโลหะแทรกนชิซันที่ยึดจับอะตอมคาร์บอนหรือซิลิกอนของแผ่นและท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนจะมีความยาวพันธะเพิ่มขึ้น มุมพันธะแคบลงและระยะการดูดซับของไนโตรเจนขึ้น โพลูอิน อนิสินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซันมีค่าน้อย ทั้งนี้เกิดขึ้นจากอันตรกิริยาที่แรงระหว่างไนโตรเจนขึ้น โพลูอิน อนิสินและแผ่นหรือท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน

## 5.2 สมบัติทางพลังงาน

### 5.2.1 พลังงานการยึดจับระหว่างอะตอมโลหะแทรกนชิซันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์

จากการศึกษาสมบัติทางพลังงานของการยึดจับระหว่างอะตอมโลหะแทรกนชิซันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์ พบว่าการเติมโลหะวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนมีค่าพลังงานการยึดจับที่มากกว่าการเติมโลหะวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมตรงตำแหน่งคาร์บอน โดยเฉพาะการเติมแทนทาลัมบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งซิลิกอนและการเติมทั้งสแตนบนท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่ง

ซิลิกอนมีค่าพลังงานการยึดจับที่สูงที่สุด ( $E_{\text{binding}}$ ) เท่ากับ  $-383.07$  และ  $-346.36$  kcal/mol ตามลำดับ

### 5.2.2 พลังงานการดูดซับและความสามารถในการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัม

จากการศึกษาสมบัติทางพลังงานของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัม พบว่าไนโตรเบนซีนสามารถดูดซับบนแผ่นและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัมตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนได้ดีกว่าแผ่นและท่อแบบดั้งเดิมอย่างชัดเจน โดยค่าพลังงานการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัม อยู่ในช่วงระหว่าง  $-94.340$  ถึง  $-22.086$  kcal/mol ซึ่งค่าพลังงานการดูดซับในการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม มีค่าเท่ากับ  $-3.587$  kcal/mol พลังงานการดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัม อยู่ในช่วงระหว่าง  $-89.877$  ถึง  $-23.621$  kcal/mol ซึ่งค่าพลังงานการดูดซับไนโตรเบนซีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม มีค่าเท่ากับ  $-6.227$  kcal/mol จากข้อมูลด้านพลังงานสามารถสรุปได้ว่าการเติมโลหะแพลทินัมบนแผ่นและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์จะสามารถปรับปรุงความสามารถในการดูดซับไนโตรเบนซีนได้ชัดเจน โดยแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัมตรงตำแหน่งคาร์บอนสามารถดูดซับไนโตรเบนซีนได้ดี และเหมาะที่จะนำไปพัฒนาเป็นวัสดุสำหรับการดูดซับไนโตรเบนซีน

### 5.2.3 พลังงานการดูดซับและความสามารถในการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และแบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัม

จากการศึกษาสมบัติทางพลังงานของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัม พบว่าโทลูอินสามารถดูดซับบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัมตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนได้ดีกว่าแผ่นแบบดั้งเดิมอย่างชัดเจน ยกเว้นการเติมโลหะแพลทินัมตรงตำแหน่งซิลิกอนบางตัว ได้แก่ โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเตนและรีเนียมที่มีค่าพลังงานการดูดซับที่ต่ำ ค่าพลังงานการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัมมีค่าอยู่ในช่วงระหว่าง  $-0.708$  ถึง  $-46.172$  kcal/mol ความสามารถในการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม มีค่าเท่ากับ  $-3.587$  kcal/mol นอกจากนี้ยังพบว่าการเติมโลหะแพลทินัมเชื่อมตรงตำแหน่งซิลิกอนที่แสดงปฏิกิริยาการดูดซับเป็นแบบดูดความร้อนโดยมีค่าพลังงานดูดซับเท่ากับ  $7.531$  kcal/mol จากข้อมูลด้านพลังงานสามารถสรุปได้ว่าโทลูอินสามารถดูดซับบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแพลทินัมตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนได้ดีกว่าแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ยกเว้นการเติมโลหะ



โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน เทคนีเชียม และรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอน การเติมโลหะแทรนซิชันบนแผ่นและท่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์สามารถปรับปรุงความสามารถในการดูดซับโพลูอินได้ชัดเจน โดยเฉพาะแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทังสเทนตรงตำแหน่งคาร์บอนสามารถดูดซับโพลูอินได้ดีที่สุดและเหมาะที่จะนำไปพัฒนาเป็นวัสดุการดูดซับโพลูอินได้ดีที่สุด

#### 5.2.4 พลังงานการดูดซับและความสามารถในการดูดซับอนิซีนบนท่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

จากการศึกษาสมบัติทางพลังงานของการดูดซับอนิซีนบนท่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ทั้งแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน พบว่าอนิซีนสามารถดูดซับบนท่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนได้ดีกว่าท่อและท่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมอย่างชัดเจน โดยค่าพลังงานการดูดซับอนิซีนบนท่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันมีค่าอยู่ในช่วงระหว่าง  $-41.395$  ถึง  $-19.224$  kcal/mol ค่าพลังงานการดูดซับอนิซีนบนท่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม มีค่าเท่ากับ  $15.439$  kcal/mol แสดงถึงความสามารถในการดูดซับอนิซีนที่ไม่เหมาะสมและเป็นการดูดซับแบบดูดความร้อน ดังนั้นจึงสรุปได้ว่าอนิซีนสามารถดูดซับบนท่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนได้ดีกว่าท่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม จากข้อมูลด้านพลังงานสามารถสรุปได้ว่าการเติมโลหะแทรนซิชันบนท่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์สามารถปรับปรุงความสามารถในการดูดซับอนิซีนได้ชัดเจน โดยท่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะทังสเทนตรงตำแหน่งคาร์บอนสามารถดูดซับอนิซีนได้ดีที่สุดและเหมาะที่จะนำไปพัฒนาเป็นวัสดุการดูดซับอนิซีน

### 5.3 สมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์

จากการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมท่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันในเทอมของพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน ประจุของโลหะแทรนซิชัน การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พบว่าการเติมโลหะแทรนซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ได้ส่งผลต่อแถบพลังงานโดยพบการเพิ่มขึ้นและลดลงของแถบพลังงาน โดยเฉพาะแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโมลิบดีนัมตรงตำแหน่งคาร์บอนและท่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมแมงกานีสตรงตำแหน่งซิลิกอนพบว่าแถบพลังงานมีค่าลดลงมากที่สุดจึงส่งผลต่อคุณสมบัติไฟฟ้าเพิ่มขึ้นและดีที่สุด จากประจุโลหะแทรนซิชันที่เติมบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อานาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ พบว่าโลหะแทรนซิชันที่เติมบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อานาโน

ซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งคาร์บอนจะมีค่าประจุเป็นลบ ในทางตรงกันข้ามโลหะแทรนซิชันที่มีการเติมบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งซิลิกอนจะมีค่าประจุเป็นบวก การพล็อตออร์บิทัลสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และออร์บิทัลต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมพบว่าการกระจายบริเวณรอบ ๆ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ในทางตรงกันข้ามแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันส่วนใหญ่มีการกระจายบริเวณที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน

จากการศึกษาสมบัติทางอิเล็กทรอนิกส์ของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน และการดูดซับอนิลีนบนท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ในเทอมของพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ แถบพลังงาน การเปลี่ยนแปลงแถบพลังงาน การถ่ายโอนประจุบางส่วน ประจุโลหะแทรนซิชัน การพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และความหนาแน่นสถานะ พบว่าการดูดซับไนโตรเบนซีน โทลูอินและอนิลีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ ทำให้พลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ทั้งแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันเกิดการเลื่อนตำแหน่ง จากการวิเคราะห์การถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับไนโตรเบนซีน จากค่าการถ่ายโอนประจุบางส่วนพบว่าเกิดการถ่ายโอนประจุบางส่วนจากโมเลกุลไนโตรเบนซีนไปยังแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและเกิดการถ่ายโอนประจุบางส่วนเพียงเล็กน้อยจากท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ไปยังโมเลกุลไนโตรเบนซีน และเกิดการถ่ายโอนประจุจำนวนมากจากแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันไปยังโมเลกุลไนโตรเบนซีน จากการวิเคราะห์การถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับโทลูอิน พบว่ามีการถ่ายโอนประจุเล็กน้อยจากโมเลกุลโทลูอินไปยังแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และเกิดถ่ายโอนประจุจำนวนมากจากโมเลกุลโทลูอินไปยังแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ยกเว้นการเติมโครเมียม โมลิบดีนัม ทั้งสแตน เทคนีเซียมและรีเนียมตรงตำแหน่งซิลิกอนที่มีการถ่ายโอนประจุบางส่วนเพียงเล็กน้อย จากการวิเคราะห์การถ่ายโอนประจุบางส่วนของการดูดซับอนิลีนพบว่ามีการถ่ายโอนประจุบางส่วนจำนวนมากจากโมเลกุลอนิลีนไปยังท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ทั้งแบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน จากการศึกษาระดับประจุโลหะแทรนซิชันของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน การดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและแบบที่มี

การเติมโลหะแทรกนชิซัน และการดูดซับอนิสินบนท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์และแบบที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซัน พบว่าประจุโลหะแทรกนชิซันหลังการดูดซับอนุพันธ์เบนซีนมีการเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจนแสดงให้เห็นถึงการถ่ายโอนประจุของวัสดุและโมเลกุลอนุพันธ์เบนซีน จากการศึกษาการพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พบว่าออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่พบว่าการกระจายรอบ ๆ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และเมื่อแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมมีการดูดซับไนโตรเบนซีน โทลูอิน และอนิสินพบว่าการพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่มีการเปลี่ยนแปลงไปจากเดิมเพียงเล็กน้อยและกระจายบริเวณรอบ ๆ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ดังนั้นการดูดซับไนโตรเบนซีน โทลูอิน และอนิสิน จึงไม่มีผลต่อการเคลื่อนที่อิเล็กตรอนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมและท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม ในทางตรงกันข้ามการพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซัน พบว่าจะมีการกระจายตรงบริเวณที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซัน และมีบางระบบที่เป็นส่วนน้อยมีการกระจายบริเวณรอบ ๆ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซัน ที่หลังจากแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซันเกิดการดูดซับไนโตรเบนซีน โทลูอิน อนิสิน พบว่าออร์บิทัลส่วนใหญ่จะมีการกระจายตรงบริเวณที่มีการดูดซับไนโตรเบนซีน โทลูอินและอนิสิน แต่จะมีเพียงระบบส่วนน้อยที่มีการกระจายของออร์บิทัลบริเวณรอบ ๆ แผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซัน เมื่อเปรียบเทียบการพล็อตออร์บิทัลของตำแหน่งพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และตำแหน่งพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ของก่อนและหลังดูดซับอนุพันธ์เบนซีนทั้งสามพบว่าการเปลี่ยนแปลงอย่างชัดเจน จากการศึกษาความหนาแน่นสถานะอิเล็กตรอนของการดูดซับไนโตรเบนซีน โทลูอิน และอนิสินบนแผ่นและท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม พบว่าความหนาแน่นสถานะอิเล็กตรอนมีการเปลี่ยนแปลงเล็กน้อย แต่เกิดการเปลี่ยนแปลงความหนาแน่นสถานะอย่างชัดเจนเมื่อมีการดูดซับไนโตรเบนซีน โทลูอิน และอนิสินบนแผ่นและท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซัน เนื่องจากเกิดการเลื่อนตำแหน่งของแถบพลังงานและโมเลกุลของไนโตรเบนซีน โทลูอิน และอนิสินแสดงถึงการเกิดอันตรกิริยาที่แรงกับแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนานาซิลิกอนคาร์ไบด์แบบที่มีการเติมโลหะแทรกนชิซัน

ดังนั้นงานวิจัยชิ้นนี้สามารถสรุปได้ว่าการเติมโลหะวาเนเดียม ไนโอเบียม แทนทาลัม โครเมียม โมลิบดีนัม ทังสเทน แมงกานีส เทคนีเซียม และรีเนียมบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอนจะสามารถเพิ่มความสามารถในการดูดซับไนโตรเบนซีน โทลูอิน และอนิลีน โดยเฉพาะการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนจะมีความสามารถในการดูดซับอนุพันธ์ของเบนซีนได้ดีที่สุด เหมาะที่จะนำไปพัฒนาเป็นวัสดุสำหรับกักเก็บอนุพันธ์ของเบนซีน และจากการศึกษาทางอิเล็กทรอนิกส์แสดงให้เห็นว่าการเติมโลหะแทรนซิชันบนแผ่นและท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์เหมาะสำหรับการพัฒนาเป็นวัสดุตรวจจับที่มีความไวสูงและมีความจำเพาะกับอนุพันธ์ของเบนซีนได้ดี

## 5.4 ข้อเสนอแนะ

5.7.1 ควรศึกษาการดูดซับอนุพันธ์ของเบนซีนชนิดอื่นบนแผ่นหรือท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์หรือวัสดุอื่นชนิดอื่น เพื่อเปรียบเทียบความสามารถในการดูดซับ

5.7.2 ควรศึกษาในการเติมโลหะชนิดอื่นบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์และท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์เพื่อเปรียบเทียบความสามารถในการดูดซับไนโตรเบนซีน โทลูอิน อนิลีน

5.7.3 ควรศึกษาเพิ่มเติมต่อพฤติกรรมการดูดซับไนโตรเบนซีน โทลูอิน และอนิลีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์หรือท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ในห้องปฏิบัติการจริง

5.7.4 ควรศึกษาเพิ่มเติมในการวิเคราะห์ด้วยด้วยทฤษฎีฟังก์ชันัลความหนาแน่นที่ระดับเบสิสเซต B3LYP/LanL2DZ



บรรณานุกรม

มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

## บรรณานุกรม

- กองโรคจากการประกอบอาชีพและสิ่งแวดล้อม. (2557). โทลูอิน. สืบค้นจาก <http://envocc.ddc.moph.go.th/contents/view/58>.
- เกตุศิริ เกื้อแสง, (2546). นาโนคอมโพสิตจากท่อนาโนคาร์บอน. *วารสารเทคโนโลยีวัสดุ*, 32, 29-34.
- ชัยวัฒน์ เจนวานิชย์, (2543). *ตารางธาตุ*. สืบค้นจาก <https://web.ku.ac.th/schoolnet/snet5/topic2.html>.
- ทวิต ไม้ทองศรี. (2560). การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอฟทีของการดูดซับไฮโดรเจนบนแผ่นนาโนกราฟีนที่มีการเติมโบรอน อะลูมิเนียมและไนโตรเจนและการดูดซับฟอร์มอลดีไฮด์ ไฮโดรเจนซัลไฟด์และไฮโดรเจนไซยาไนด์บนแผ่นนาโนกราฟีน. (วิทยานิพนธ์ปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต). มหาสารคาม : มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม.
- ทีพานิส ซาชิโย. *ตอบคำถาม Band-gap DFT*. สืบค้นจาก <http://teeapanis.blogspot.com/2018/04/band-gap-dft.html>.
- บุญทวี เลิศปัญญาพรชัย. (2554). ท่อนาโนคาร์บอน. *ก้าวทันโลก*, 1(1), 34-42.
- ประยูรศักดิ์ เปลื้องผล, (2557). ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่นกับการศึกษาโครงสร้างของสารควบแน่น. *วารสารวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี*, 22(1). 137-145
- ปรารธนา โป่งฟ้า. (2008). *กระบวนการดูดซับ*. สืบค้นจาก <http://pradthana.wordpress.com/author/pradthana>.
- ปิยนันท์ บุญประเสริฐ. (2011). เทคโนโลยีเคลือบสารนาโนช่วยหลบเลี่ยงการตรวจจับเครื่องบินจากรadar. สืบค้นจาก สถาบันเทคโนโลยีป้องกันประเทศ: [http://dti.or.th/page\\_bx.php?cid=24&cno=4273](http://dti.or.th/page_bx.php?cid=24&cno=4273).
- วาสนา ฮ่องวง. (2547). การสังเคราะห์บีตา-ซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีอนุภาคระดับนาโนที่อุณหภูมิต่ำ. (วิทยานิพนธ์ปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต). กรุงเทพฯ : จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย.
- วิศณุสรรคร์ ซาติอารยะวดี. (2556). แกรฟีน ตอนที่ 1 : การสังเคราะห์คาร์บอนรูปแบบใหม่. *Naresuan Phayao Journal*, 6(1), 10-24.
- ศรัญญา พรหมโคตร. (2554). *นาโนเทคโนโลยีขั้นต้น (เล่ม 1)*. ขอนแก่น : หจก.โรงพิมพ์คลังนาโนวิทยา.
- ศิริกาญจน์ วิเศษสุวรรณภูมิ, (2560). แกรฟีนวัสดุ 2 มิติ เพื่ออนาคต. *วารสารเทคโนโลยีวัสดุ*, 86, 65-70.
- ศิริกาญจนา ทองมี, (2556). การผลิตและสมบัติของท่อนาโนคาร์บอน. *วารสารมหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ*, 5(10), 97-109

ศูนย์ข้อมูลพิษวิทยา, (2544). อนิสิ่น. สืบค้นจาก

[http://webdb.dmsc.moph.go.th/ifc\\_toxic/a\\_tx\\_3\\_001c.asp?info\\_id=5](http://webdb.dmsc.moph.go.th/ifc_toxic/a_tx_3_001c.asp?info_id=5).

ศูนย์ความเป็นเลิศด้านการจัดการสารและของเสียอันตราย, (2546), ไนโตรเบนซีน. สืบค้นจาก

<http://www.chemtrack.org/Chem-Detail.asp?ID=01431>.

อภิชาติ ตำนวิททยากุล. (2553). ท่อนาโนคาร์บอน : วัสดุในอนาคต, *MTEC*, 10:118, 13-18.

Amaya-Roncancio, S., García Blanco, A. A., Linares, D. H., & Sapag, K. (2018). DFT study of hydrogen adsorption on Ni/graphene. *Applied Surface Science*, 447, 254–260.

Bakhshi, F., & Farhadian, N. (2018). Co-doped graphene sheets as a novel adsorbent for hydrogen storage: DFT and DFT-D3 correction dispersion study. *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(17), 8355–8364.

Barghi, S. H., Tsotsis, T. T., & Sahimi, M. (2016). Experimental investigation of hydrogen adsorption in doped silicon-carbide nanotubes. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(1), 369–374.

Chabi, S., Chang, H., Xia, Y., & Zhu, Y. (2016). From graphene to silicon carbide : ultrathin silicon carbide flakes. *Nanotechnology*, 27(7), 075602.

Dai Z & Zhao Y. (2014). First-principles study of nitrobenzene adsorption on graphene. *Applied Surface Science*, 305, 382–385.

Delavari, N., & Jafari, M. (2018). Electronic and optical properties of hydrogenated silicon carbide nanosheets : A DFT study. *Solid State Communications*, 275, 1–7.

Deng, X., Liang, X., Ng, S.-P., & Wu, C.-M. L. (2019). Adsorption of formaldehyde on transition metal doped monolayer MoS<sub>2</sub> : A DFT study. *Applied Surface Science*, 484, 1244–1252.

Doust Mohammadi, M., & Hamzehloo, M. (2018). The adsorption of bromomethane onto the exterior surface of aluminum nitride, boron nitride, carbon, and silicon carbide nanotubes : A PBC-DFT, NBO, and QTAIM study. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1144, 26–37.

Edward, R. S., & Coleman, K. S. (2013). Graphene synthesis : Relationship to application. *Nanoscale*, 5, 38-51.

Etienne Sicard. (2017). *Introducing 7-nm FinFET technology in Microwind*, hal-01558775.

- Farmanzadeh, D., & Ardehjani, N. A. (2018). Adsorption of O<sub>3</sub>, SO<sub>2</sub> and NO<sub>2</sub> molecules on the surface of pure and Fe-doped silicon carbide nanosheets : A computational study. *Applied Surface Science*, 462, 685–692.
- Hassanzadeh, K., Akhtari, K., Fakhraei, B., Akhtari, G., & Hassanzadeh, H. (2017). Silicon carbide (SiC) nanotubes as potential sensors for organophosphate molecules. *Current Applied Physics*, 17(5), 793–800.
- Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*, 136(3B), B864–B871.
- Hurst, J. (2014). Boron Nitride Nanotubes, Silicon Carbide Nanotubes, and Carbon Nanotubes—A Comparison of Properties and Applications. *Nanotube Superfiber Materials*, 267–287.
- Ijima, S. & Ichihashi, T., (1993). *Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter*. Nature 363:603-605.
- Ijima, S., (1991). Helical microtubules of graphitic carbon. Nature 354 : 56-58.
- Ku, M.-J., Dossin, F. M., Choi, Y., Moraes, C. B., Ryu, J., Song, R., & Freitas-Junior, L. H. (2011). Quantum dots: a new tool for anti-malarial drug assays. *Malaria Journal*, 10(1), 118.
- Kunaseeth, M., Poldorn, P., Junkeaw, A., Meeprasert, J., Rungnim, C., Namuangruk, S., ... Jungsuttiwong, S. (2017). A DFT study of volatile organic compounds adsorption on transition metal deposited graphene. *Applied Surface Science*, 396, 1712–1718.
- Luo, M., Xu, Y.-E., & Song, Y.-X. (2018). Impact of isotropic strain on electronic and magnetic properties of O-adsorbed SiC monolayer. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 83, 27–32.
- Mandeep, Sharma, L., & Kakkar, R. (2018). DFT study on the adsorption of p-nitrophenol over vacancy and Pt-doped graphene sheets. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1142, 88–96.
- molecular dynamics and conjugate gradients*. *Reviews of Modern Physics*, 64(4), 1045–1097.



- Parr, R. G., Yang, W. (1994). *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules* (International Series of Monographs on Chemistry). Oxford University Press, USA. ISBN : 0195092767.
- Payne, M. C., Teter, M. P., Allan, D. C., Arias, T. A., & Joannopoulos, J. D. (1992). *Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations.*
- Robert R. Johnson & Axel Kohlmeyer. (2013). *About Carbon / Boron Nitride Nanostructure Builder Plugin*. สืบค้นจาก <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/plugins/nanotube>.
- Singh, R. S., & Solanki, A. (2016). Hydrogen adsorption in metal-decorated silicon carbide nanotubes. *Chemical Physics Letters*, 660, 155–159.
- Sisto, T. J., Zakharov, L. N., White, B. M., & Jasti, R. (2016). Towards pi-extended cycloparaphenylenes as seeds for CNT growth: investigating strain relieving ring-openings and rearrangements. *Chemical Science*, 7(6), 3681–3688.
- St. Clair, Bartmoss. (2016). *Nanotechnology And Predicting The Future (Review of The Current State of Nanotechnology And Making Future Predictions With A Discussion of Forecasting Methods)*.
- Sun, L., & Hu, J. (2018). Adsorption of O<sub>2</sub> on the M doped (M=Fe, Co, Al, Cu, and Zn) SiC sheets: DFT study. *Computational Condensed Matter*, 16, e00323.
- Tabtimsai, C., Kansawai P., Phoson P., Pooboontong P., Wannoo B., (2015). Adsorption of CO<sub>2</sub> on Ga- and B-doped silicon carbide nanosheets : A theoretical study. The 5th International Conference on Sciences and Social Sciences 2015 (ICSSS 2015): Research and Innovation for Community and Regional Development, *Rajabhat Maha Sarakham University, Thailand*, September 17-18.
- Tabtimsai, C., Ruangpornvisuti, V., Tontapha, S., & Wannoo, B. (2018). A DFT investigation on group 8B transition metal-doped silicon carbide nanotubes for hydrogen storage application. *Applied Surface Science*, 439, 494–505.
- Taguchi, T., Igawa, N., Yamamoto, H., & Jitsukawa, S. (2005). Synthesis of Silicon Carbide Nanotubes. *Journal of the American Ceramic Society*, 88(2), 459–461.
- Yang, S., Lei, G., Xu, H., Xu, B., Li, H., Lan, Z., ... Gu, H. (2019). A DFT study of CO adsorption on the pristine, defective, In-doped and Sb-doped graphene and the effect of applied electric field. *Applied Surface Science*, 480, 205–211.

- Yu, L., Wang, L., Xu, W., Chen, L., Fu, M., Wu, J., & Ye, D. (2018). Adsorption of VOCs on reduced graphene oxide. *Journal of Environmental Sciences*, 67, 171–178.
- Zhou, K., Ma, W., Zeng, Z., Ma, X., Xu, X., Guo, Y., ... Li, L. (2019). Experimental and DFT study on the adsorption of VOCs on activated carbon/metal oxides composites. *Chemical Engineering Journal*, 372, 1122–1133.
- Zhou, Q., Yong, Y., Ju, W., Su, X., Li, X., Wang, C., & Fu, Z. (2018). DFT study of the adsorption of 2, 3, 7, 8-tetrachlorodibenzofuran (TCDF) on vacancy-defected graphene doped with Mn and Fe. *Current Applied Physics*, 18(1), 61–67.



มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY



ภาคผนวก

มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY



ภาคผนวก ก

การคำนวณพลังงาน

มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

## ตารางที่ ก.1

การคำนวณพลังงานการยึดจับของการเติมโลหะทรานซิชันบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน ( $E_{\text{binding}}$ )

ระบบ	พลังงานหลังการเติมโลหะทรานซิชัน (a.m.u.)	พลังงานของแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่นำตำแหน่ง C และ Si ออก (a.m.u.)	พลังงานของโลหะทรานซิชัน	$E_{\text{binding}}$ (a.m.u.)	$E_{\text{binding}}$ (kcal/mol)
V <sub>C</sub> -SiCNS	-1684.78	-1613.41	-71.1618	-0.21003	-131.79
Nb <sub>C</sub> -SiCNS	-1669.76	-1613.41	-56.1130	-0.23377	-146.69
Ta <sub>C</sub> -SiCNS	-1671.25	-1613.41	-57.5867	-0.24801	-155.63
Cr <sub>C</sub> -SiCNS	-1699.69	-1613.41	-86.0859	-0.18803	-117.99
Mo <sub>C</sub> -SiCNS	-1680.95	-1613.41	-67.2504	-0.28960	-181.73
W <sub>C</sub> -SiCNS	-1681.22	-1613.41	-67.5334	-0.27354	-171.65
Mn <sub>C</sub> -SiCNS	-1717.36	-1613.41	-103.752	-0.19665	-123.40
Tc <sub>C</sub> -SiCNS	-1693.57	-1613.41	-79.8727	-0.28270	-177.40
Re <sub>C</sub> -SiCNS	-1692.58	-1613.41	-78.8456	-0.31907	-200.22
V <sub>Si</sub> -SiCNS	-1719.05	-1647.36	-71.1618	-0.52411	-328.88
Nb <sub>Si</sub> -SiCNS	-1704.04	-1647.36	-56.113	-0.56707	-355.84
Ta <sub>Si</sub> -SiCNS	-1705.56	-1647.36	-57.5867	-0.61046	-383.07
Cr <sub>Si</sub> -SiCNS	-1733.94	-1647.36	-86.0859	-0.48955	-307.20
Mo <sub>Si</sub> -SiCNS	-1715.19	-1647.36	-67.2504	-0.58169	-365.02
W <sub>Si</sub> -SiCNS	-1715.50	-1647.36	-67.5334	-0.6062	-380.40
Mn <sub>Si</sub> -SiCNS	-1751.55	-1647.36	-103.752	-0.44159	-277.10
Tc <sub>Si</sub> -SiCNS	-1727.76	-1647.36	-79.8727	-0.53111	-333.27
Re <sub>Si</sub> -SiCNS	-1726.79	-1647.36	-78.8456	-0.58372	-366.29

## ตารางที่ ก.2

การคำนวณพลังงานการดูดซับของการดูดซับไนโตรเบนซีนบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชัน ( $E_{ads}$ )

ระบบ	พลังงานหลังดูดซับ (a.m.u.)	พลังงานก่อนดูดซับ (a.m.u.)	พลังงานของโมเลกุล ไนโตรเบนซีน (a.m.u.)	$E_{ads}$ (a.m.u.)	$E_{ads}$ (kcal/mol)
nitrobenzene/SiCNS	-2088.34	-1651.645	-436.686	-0.00572	-3.587
nitrobenzene/V <sub>C</sub> -SiCNS	-2121.56	-1684.785	-436.686	-0.08887	-55.769
nitrobenzene/Nb <sub>C</sub> -SiCNS	-2106.55	-1669.760	-436.686	-0.10547	-66.186
nitrobenzene/Ta <sub>C</sub> -SiCNS	-2108.08	-1671.248	-436.686	-0.15034	-94.340
nitrobenzene/Cr <sub>C</sub> -SiCNS	-2136.47	-1699.687	-436.686	-0.10036	-62.978
nitrobenzene/Mo <sub>C</sub> -SiCNS	-2117.73	-1680.953	-436.686	-0.09322	-58.494
nitrobenzene/W <sub>C</sub> -SiCNS	-2118.03	-1681.220	-436.686	-0.12659	-79.437
nitrobenzene/Mn <sub>C</sub> -SiCNS	-2154.15	-1717.362	-436.686	-0.10650	-66.831
nitrobenzene/Tc <sub>C</sub> -SiCNS	-2130.33	-1693.568	-436.686	-0.07120	-44.680
nitrobenzene/Re <sub>C</sub> -SiCNS	-2129.35	-1692.577	-436.686	-0.08582	-53.850
nitrobenzene/V <sub>Si</sub> -SiCNS	-2155.80	-1719.047	-436.686	-0.06633	-41.622
nitrobenzene/Nb <sub>Si</sub> -SiCNS	-2140.82	-1704.041	-436.686	-0.09725	-61.026
nitrobenzene/Ta <sub>Si</sub> -SiCNS	-2142.36	-1705.558	-436.686	-0.11330	-71.095
nitrobenzene/Cr <sub>Si</sub> -SiCNS	-2170.66	-1733.936	-436.686	-0.03520	-22.086
nitrobenzene/Mo <sub>Si</sub> -SiCNS	-2151.97	-1715.193	-436.686	-0.08858	-55.585
nitrobenzene/W <sub>Si</sub> -SiCNS	-2152.30	-1715.501	-436.686	-0.11340	-71.161
nitrobenzene/Mn <sub>Si</sub> -SiCNS	-2188.29	-1751.555	-436.686	-0.05147	-32.296
nitrobenzene/Tc <sub>Si</sub> -SiCNS	-2164.51	-1727.765	-436.686	-0.05937	-37.257
nitrobenzene/Re <sub>Si</sub> -SiCNS	-2163.55	-1726.790	-436.686	-0.07675	-48.161

## ตารางที่ ก.3

การคำนวณพลังงานสูงสุดที่อิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่  
แถบพลังงานของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์แบบดั้งเดิมแบบที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันตรงตำแหน่ง  
คาร์บอนและซิลิกอน

ระบบ	$E_{\text{HOMO}}$ (eV)				
	$E_{\text{HOMO}}$ (a.m.u.)	$E_{\text{HOMO}}$ (eV)	$E_{\text{LUMO}}$ (a.m.u.)	$E_{\text{HOMO}}$ (eV)	$E_{\text{gap}}$ (eV)
SiCNS	-0.145	-3.946	-0.137	-3.728	0.218
V <sub>C</sub> -SiCNS	-0.148	-4.027	-0.136	-3.701	0.327
Nb <sub>C</sub> -SiCNS	-0.150	-4.082	-0.133	-3.619	0.463
Ta <sub>C</sub> -SiCNS	-0.147	-4.000	-0.138	-3.755	0.245
Cr <sub>C</sub> -SiCNS	-0.143	-3.891	-0.136	-3.701	0.190
Mo <sub>C</sub> -SiCNS	-0.143	-3.891	-0.138	-3.755	0.136
W <sub>C</sub> -SiCNS	-0.149	-4.055	-0.137	-3.728	0.327
Mn <sub>C</sub> -SiCNS	-0.152	-4.136	-0.125	-3.402	0.735
Tc <sub>C</sub> -SiCNS	-0.150	-4.082	-0.132	-3.592	0.490
Re <sub>C</sub> -SiCNS	-0.147	-4.000	-0.140	-3.810	0.190
V <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.155	-4.218	-0.124	-3.374	0.844
Nb <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.155	-4.218	-0.124	-3.374	0.844
Ta <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.155	-4.218	-0.124	-3.374	0.844
Cr <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.146	-3.973	-0.138	-3.755	0.218
Mo <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.145	-3.946	-0.138	-3.755	0.190
W <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.146	-3.973	-0.138	-3.755	0.218
Mn <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.154	-4.191	-0.125	-3.402	0.789
Tc <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.158	-4.299	-0.124	-3.374	0.925
Re <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.148	-4.027	-0.129	-3.510	0.517

## ตารางที่ ก.4

การคำนวณพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ พลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่  
แถบพลังงาน และการเปลี่ยนแปลงแถบพลังงานของการดูดซับไนโตรเจนชั้นบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์  
ไบด์แบบดั้งเดิม และแบบที่มีการเติมโลหะทรานซิชันตรงตำแหน่งคาร์บอนและซิลิกอน

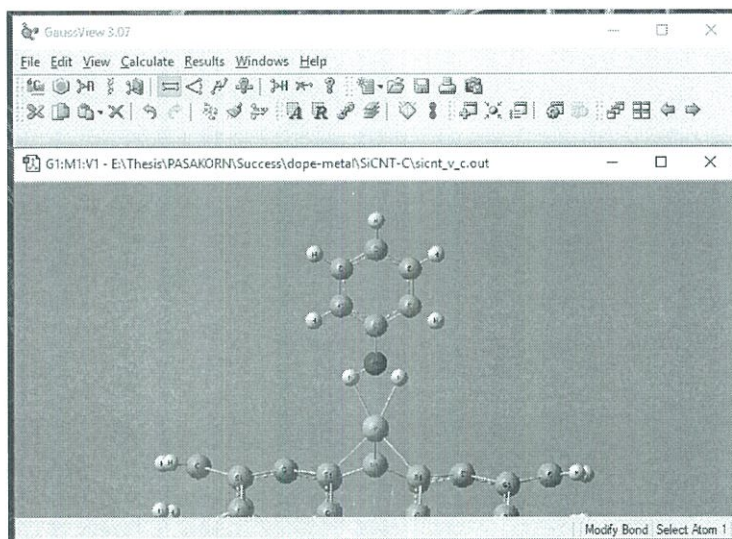
ระบบ	$E_{\text{HOMO}}$ (a.m.u.)	$E_{\text{HOMO}}$ (eV)	$E_{\text{LUMO}}$ (a.m.u.)	$E_{\text{HOMO}}$ (eV)	$E_{\text{gap}}$ (eV)	$\Delta E_{\text{gap}}$ (eV)
nitrobenzene/SiCNS	-0.144	-3.919	-0.137	-3.728	0.190	-0.027
nitrobenzene/V <sub>C</sub> -SiCNS	-0.144	-3.919	-0.135	-3.674	0.245	-0.082
nitrobenzene/Nb <sub>C</sub> -SiCNS	-0.147	-4.000	-0.138	-3.755	0.245	-0.218
nitrobenzene/Ta <sub>C</sub> -SiCNS	-0.151	-4.109	-0.142	-3.864	0.245	0.000
nitrobenzene/Cr <sub>C</sub> -SiCNS	-0.145	-3.946	-0.138	-3.755	0.190	0.000
nitrobenzene/Mo <sub>C</sub> -SiCNS	-0.151	-4.109	-0.141	-3.837	0.272	0.136
nitrobenzene/W <sub>C</sub> -SiCNS	-0.148	-4.027	-0.14	-3.810	0.218	-0.109
nitrobenzene/Mn <sub>C</sub> -SiCNS	-0.152	-4.136	-0.127	-3.456	0.680	-0.054
nitrobenzene/Tc <sub>C</sub> -SiCNS	-0.149	-4.055	-0.141	-3.837	0.218	-0.272
nitrobenzene/Re <sub>C</sub> -SiCNS	-0.148	-4.027	-0.14	-3.810	0.218	0.027
nitrobenzene/V <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.153	-4.163	-0.125	-3.402	0.762	-0.082
nitrobenzene/Nb <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.154	-4.191	-0.122	-3.320	0.871	0.027
nitrobenzene/Ta <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.152	-4.136	-0.123	-3.347	0.789	-0.054
nitrobenzene/Cr <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.144	-3.919	-0.137	-3.728	0.190	-0.027
nitrobenzene/Mo <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.147	-4.000	-0.14	-3.810	0.190	0.000
nitrobenzene/W <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.147	-4.000	-0.14	-3.810	0.190	-0.027
nitrobenzene/Mn <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.146	-3.973	-0.138	-3.755	0.218	-0.571
nitrobenzene/Tc <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.153	-4.163	-0.125	-3.402	0.762	-0.163
nitrobenzene/Re <sub>Si</sub> -SiCNS	-0.153	-4.163	-0.124	-3.374	0.789	0.272



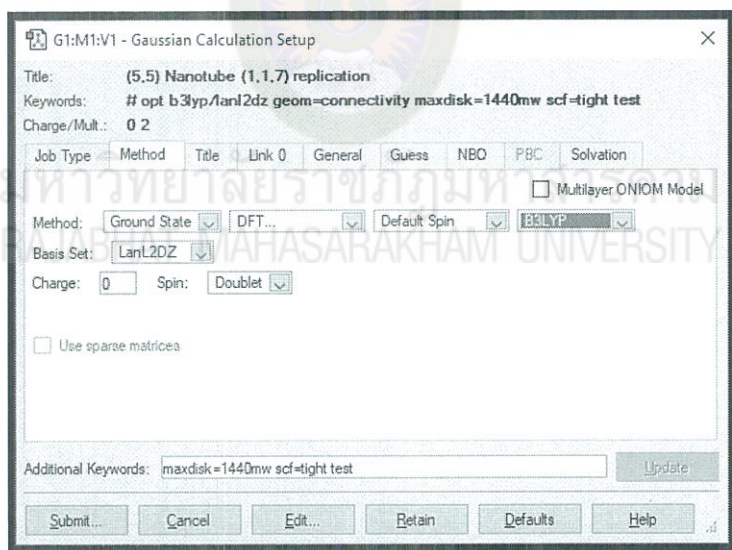
ภาคผนวก ข

ตัวอย่างการใช้โปรแกรม และการอ่านผลที่ได้จากการคำนวณสมบัติต่าง ๆ

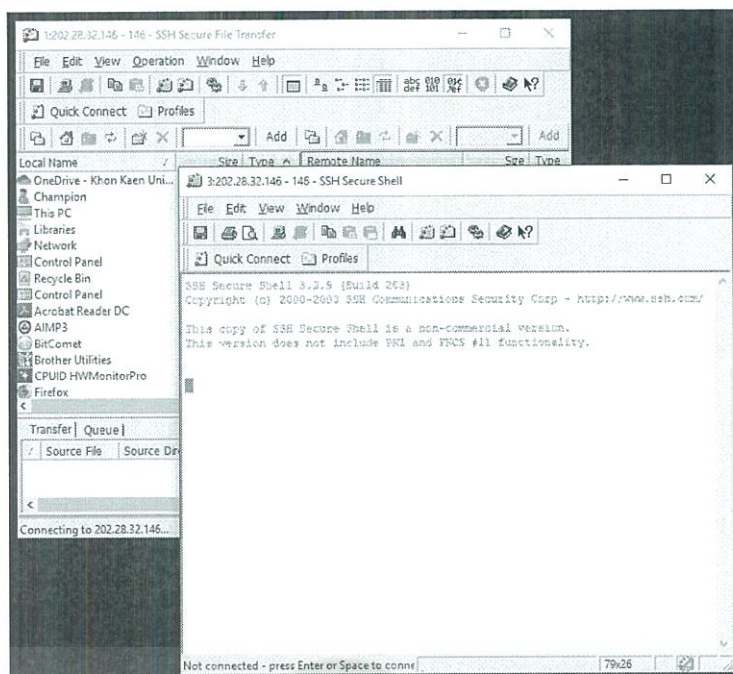
มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY



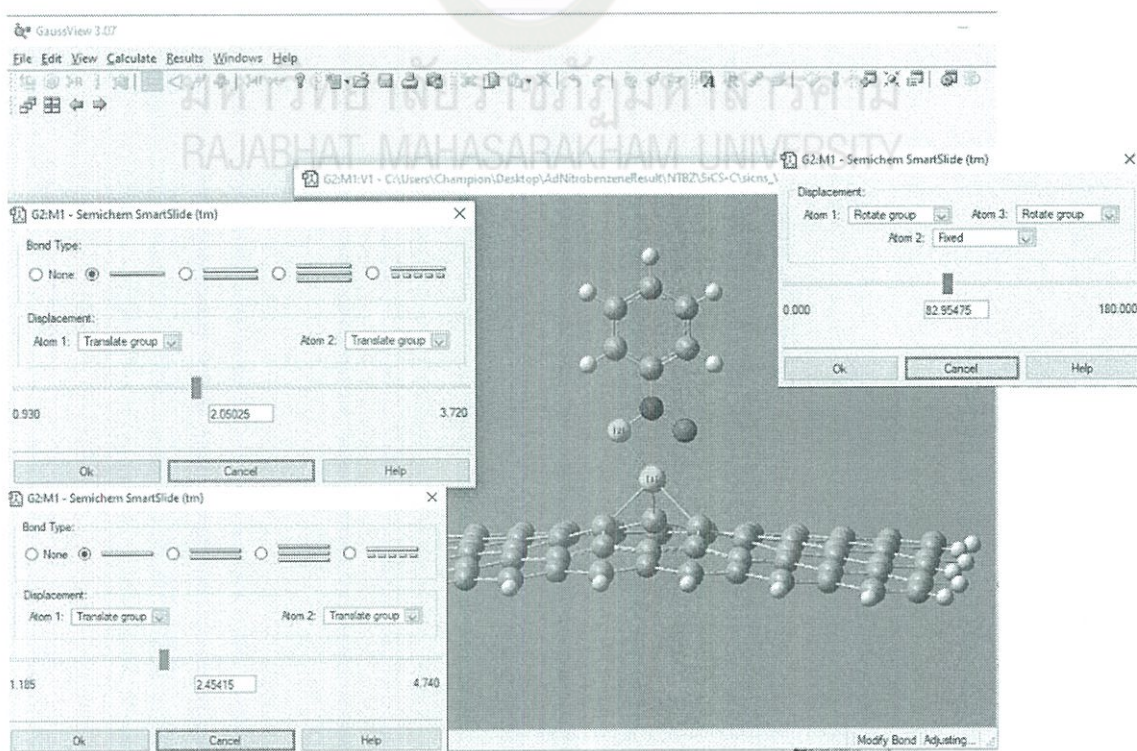
ภาพที่ ข.1 การใช้โปรแกรม GaussView ที่ใช้ในการเตรียมโครงสร้างของท่อนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ (ภาพโดยโปรแกรม GaussView 3.0)



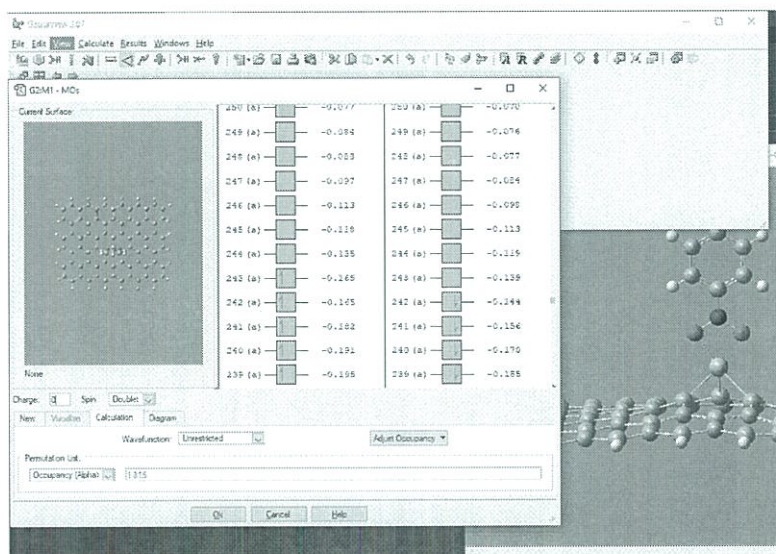
ภาพภาคที่ ข.2 การเลือกทฤษฎีที่ใช้ในการคำนวณ (ภาพจากโปรแกรม GaussView 3.0)



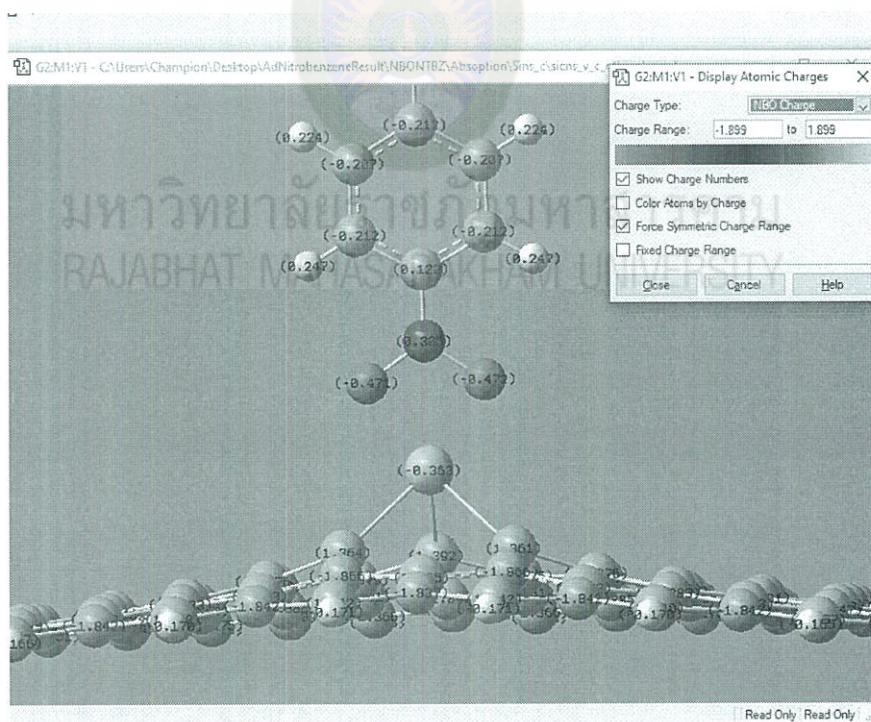
ภาพที่ ข.3 หน้าต่างโปรแกรม SSH สำหรับการส่งคำนวณงาน



ภาพที่ ข 4 การหาระยะยึดจับ ระยะคูดจับ และมุมพันธะ โดยโปรแกรม GaussView 3.0



ภาพที่ ข.5 การหาค่าพลังงานสูงสุดที่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่และพลังงานต่ำสุดที่ไม่มีอิเล็กตรอนบรรจุอยู่ โดยใช้โปรแกรม GaussView



ภาพที่ ข.6 การหาค่าการถ่ายโอนประจุ โดยโปรแกรม GaussView 3.0



ภาคผนวก ค

ภาพการนำเสนอผลงาน

มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม  
RAJABHAT MAHASARAKHAM UNIVERSITY

## DFT investigation of toluene adsorption on silicon carbide nanosheet doping with transition metal for storage and sensor application

Pasakorn Sangnikul<sup>1</sup>, Chanukorn Tabtimsai<sup>1\*</sup>, Wandee Rakrai<sup>1</sup>, Banchob Wann<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Computational Chemistry Center for Nanotechnology and Department of Chemistry, Faculty of Science and Technology, Rajabhat Maha Sarakham University, Maha Sarakham 44000, Thailand

<sup>2</sup> Center of Excellence for Innovation in Chemistry and Supramolecular Chemistry Research Unit, Department of Chemistry, Faculty of Science, Mahasarakham University, Maha Sarakham 44150, Thailand  
 Corresponding author e-mail: \*tabtimsai@gmail.com

Received: 24 April, 2018 / Accepted: 15 July, 2018

### Abstract

Nowadays, the emission of volatile organic compounds (VOC) is giving rise to several health hazards and damage to the environment. Consequently, the nanomaterial development is considerably important for VOC adsorption and sensing. In this work, the adsorptions of toluene on silicon carbide nanosheets doping with transition metal atoms (TM-doped SiCNS) were investigated using the density functional theory method (DFT). The B3LYP/LanL2DZ was employed in all calculations for the geometric, energetic, and electronic properties. In addition, the doping of TM atom at different sites will have different effects on the adsorption behavior of the systems. Calculation results reveal that the adsorption distances and adsorption energies of TM doping on SiCNS are suitable for toluene adsorption greater than pristine SiCNS. According to the changes of electronic properties of TM-doped SiCNS show highly sensitive to toluene molecule. The results indicate that the introducing of TM doping on SiCNS significantly improve the sensitivity toward toluene molecule. Therefore, the results of our work may be useful in developing and designing new types of storage and sensor materials.

**Keywords:** DFT, Silicon carbide nanosheet, Toluene, Transition metals, VOC

### 1. Introduction

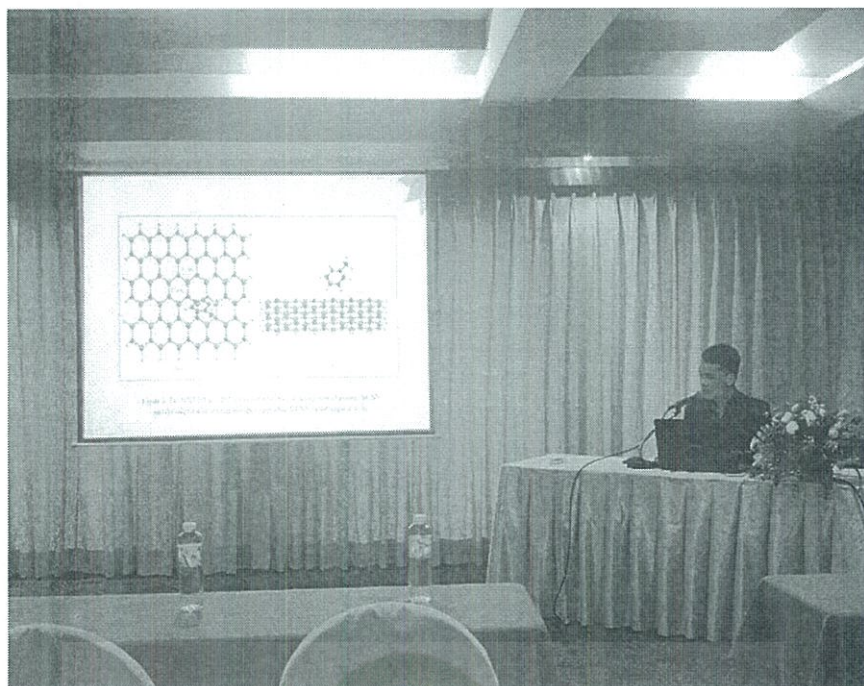
Volatile organic compounds (VOC) are common air pollutants emitted by the chemical industries such as production of adhesives, paints, printing materials, building materials, and chemicals for synthesis (Kim et al., 2019). For this reason, it is an important issue to develop sensors for detect and manage VOC. In the recent year, the experimental and theoretical studies about VOC adsorption on different nanostructures have been reported widely (Chiang et al., 2001; Su et al., 2018). Manaschai Kunaseth et al. have investigated the adsorption of VOC on transition metal deposited graphene which adsorption energy of benzene was -1.93 eV calculated by using Perdew-Wang functional (PW91) (Kunaseth et al., 2017). The para-nitrophenol molecule adsorption on vacancy and Pt-doped graphene sheets showed that the adsorption capacity of graphene can be significantly increased (Mandeep et al., 2018). Toluene is volatile organic compound that evaporate at room temperature.

Toluene is harmful to human health, and may cause various diseases such as headache, nausea, coryza, pharyngitis, emphysema, lung cancer, and even death (Yi et al., 2008). Also study of the adsorptions of VOCs on activated carbon/metal oxide composites have been performed by Ke Zhou et al. that calculation shows that the highest adsorption energy of toluene on activated carbon was -20.87 kJ/mol calculated by using JW-BK13Z functional (Zhou et al., 2019). Liam Yu et al. have reported the adsorption of VOC on reduced graphene oxide, and the results suggested that graphene oxide is excellent adsorption performance for toluene molecule (Yu et al., 2018). As previously mentioned, Experimental and theoretical studies on the adsorption of VOC are showed extremely interesting and it is necessary to understand more.

The silicon carbide nanosheet (SiCNS) has recently attracted considerable attention due to it has the notable properties such as thermal stability, chemical inertness, high thermal conductivity, and others (Delavari & Jafari., 2018; Ansari et al., 2013).

Vol.05, No.2 DOI:

ภาพที่ ค. 7 ภาพรูปแบบการตีพิมพ์นวารสาร SSST Journal Vol.7 No.2, มหาวิทยาลัยราชภัฏ  
 สวนสุนันทา



ภาพที่ ค.9 การนำเสนอผลงาน SsSci 2<sup>nd</sup> Conference 2019 วันที่ 8 พฤศจิกายน พ.ศ. 2562



ภาพที่ ค.10 เกียรติบัตรการเข้าร่วมนำเสนอผลงาน SsSci 2<sup>nd</sup> Conference 2019 วันที่ 8 พฤศจิกายน พ.ศ. 2562

## ประวัติผู้วิจัย

ชื่อ สกุล	นายภาสกร แสงนิกุล
วัน เดือน ปี เกิด	15 มิถุนายน พ.ศ. 2538
ที่อยู่ปัจจุบัน	55 หมู่ 3 ตำบลหัวหนอง อำเภอบ้านไผ่ จังหวัดขอนแก่น 40110
ประวัติการศึกษา	
พ.ศ. 2553	ชั้นมัธยมศึกษาปีที่ 3 โรงเรียนบ้านไผ่ อำเภอบ้านไผ่ จังหวัดขอนแก่น
พ.ศ. 2556	ชั้นมัธยมศึกษาปีที่ 6 โรงเรียนบ้านไผ่ อำเภอบ้านไผ่ จังหวัดขอนแก่น
พ.ศ. 2561	ครุศาสตรบัณฑิต (ค.บ.) เคมี มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม
พ.ศ. 2563	วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (วท.ม.) สาขาเคมีศึกษา ในโครงการส่งเสริมและผลิตครูผู้มีความรู้ความสามารถทางด้านวิทยาศาสตร์และคณิตศาสตร์ (สควค) มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม
ผลงานวิจัย	
พ.ศ. 2563	การศึกษาด้วยทฤษฎีดีเอพีของการดูดซับโทลูอินบนแผ่นนาโนซิลิกอนคาร์ไบด์ที่มีการเติมโลหะแทรนซิชันสำหรับประยุกต์ใช้เป็นตัวตรวจจับ (DFT investigation of toluene adsorption on silicon carbide nanosheet doping with transition metal for storage and sensor application)
รางวัลดีเด่น	
พ.ศ. 2561	จบการศึกษาเกียรตินิยมอันดับ 2 ครุศาสตรบัณฑิต (ค.บ.) เคมี มหาวิทยาลัยราชภัฏมหาสารคาม เกรดเฉลี่ย 3.71
ทุนการศึกษา	
พ.ศ. 2561	ทุนโครงการส่งเสริมและผลิตครูผู้มีความรู้ความสามารถทางด้านวิทยาศาสตร์และคณิตศาสตร์ (สควค) ประเภท Premium ประจำปีการศึกษา 2561