บทคัดย่อ **230901**

การวิจัยนี้เป็นการศึกษาการดูดซับโลหะทองแดง เงินและทอง ที่อยู่ในรูปของอะตอม แคตไอออน แอนไอออนและไดเมอร์บนผิวข้างของท่อคาร์บอนนาโนทิวบ์ชนิดต่างๆ ด้วยระเบียบวิธีทางเคมีควอนตัมร่วมกับแบบจำลองทางควอนตัมที่มีขนาดอะตอม 100 อะตอม เพื่อศึกษาตำแหน่งและรูปร่างของโลหะอะตอมและโลหะไดเมอร์ที่ถูกดูดซับบนผิวข้างของท่อนาโน ผลการศึกษาในครั้งนี้ได้ข้อมูลที่สอดคล้องกับงานวิจัยที่ศึกษาด้วยระเบียบวิธีขั้นสูง เมื่อเปรียบเทียบโลหะที่อยู่ในรูปต่างๆพบว่าโลหะแคตไอออนจะเกิดอันตรกิริยากับคาร์บอนนาโนทิวบ์ได้ดีกว่าโลหะแอนไอออนและโลหะอะตอม โดยการถ่ายโอนอิเล็กตรอนจากโลหะไปยังคาร์บอนนาโนทิวบ์เป็นปัจจัยสำคัญที่ช่วยให้เกิดอันตรกิริยาได้ดีในขณะที่แรงผลักระหว่างอิเล็กตรอนที่เกิดขึ้นจะลดความแรงของการเกิดอันตรกิริยา การถ่ายโอนอิเล็กตรอนที่เกิดขึ้นนี้จะทำให้โลหะแสดงประจุบวกและคาร์บอนอะตอมของท่อนาโนแสดงประจุลบ จากพลังงานการดูดซับที่คำนวณได้ทำให้ทราบว่าโลหะจะเกิดอันตรกิริยาได้ดีกับคาร์บอนนาโนทิวบ์ที่มีตำหนิมากกว่าท่อที่ไม่มีตำหนิโดยเฉพาะตำหนิแบบวาแคนซีจะเกิดอันตรกิริยาที่แรงมาก นอกจากนี้ยังพบว่าพลังงานการดูดซับต่ออะตอมของโลหะมีค่าลดลงเมื่อจำนวนอะตอมของโลหะเพิ่มขึ้นเนื่องจากพลังงานยึดเหนี่ยวภายในระหว่างแต่ละอะตอมของโลหะมีค่ามากกว่าอันตรกิริยาระหว่างโลหะกับคาร์บอนนาโนทิวบ์



**Abstract** **230901**

The adsorption of neutral M, charged M and $M_2$ dimers (M = Cu, Ag, Au) on pristine SWNTs as well as on Stone-Wales and vacancy sites has been studied using a density functional theory at B3LYP level of calculation. The most favorable adsorption site and geometry relevant to atomic metal species and metal dimers were identified. Our results for neutral metal atom on the pristine and defective SWNTs agree very well with previous periodic calculations. The interaction of metal cations on SWNTs is stronger than that of metal anions and neutral metal atoms, respectively. This is mainly contributed by the transfer of electron density from metal species to the nanotubes, counteracted by the Pauli repulsion. Our results are in accordance with the Mulliken population analysis. The transfer of electron density induces positive charges of metal species as well as negative charges of carbon atoms of the nanotubes. As far as the adsorption energy is concerned, the metal species are likely to deposit on the defect site, particularly on vacancy site, rather than the pristine tube. We also found that the adsorption energy per atom decreases from metal atom to metal dimers in line with the fact that metal-metal cohesion dominates over metal-SWNTs interaction.