ชลธิรา บุญฟุ้ง : การศึกษาการดูดซับของซิลิกาพรุนที่เตรียมด้วยวิธีโซลเจล: การทดลองและการสร้างแบบจำลองทางคอมพิวเตอร์ (ADSORPTION STUDY OF POROUS SILICA PREPARED BY SOL-GEL METHOD: EXPERIMENTS AND COMPUTER SIMULATION) อาจารย์ที่ปรึกษา : ศาสตราจารย์ ดร.ชัยยศ ตั้งสถิตย์กุลชัย, 191 หน้า.

งานวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อศึกษาการเตรียมซิลิกาพรุนจากโซเดียมซิลิเกตด้วยวิธีโซลเจล และศึกษากระบวนการดูดซับในระบบของเหลวและแก๊ส รวมทั้งศึกษาแบบจำลองทางคอมพิวเตอร์สำหรับการดูดซับแก๊สบนซิลิกาพรุน โดยวัดสมบัติความพรุนของซิลิกาพรุนด้วยวิธีการดูดซับไนโตรเจนที่อุณหภูมิ 77 เคลวิน สำหรับชนิดของหมู่ไซลานอลและปริมาณบนพื้นผิววิเคราะห์ด้วยเทคนิคฟลูเรียทรานสฟอร์ม อินฟราเรด สเปกโทรสโคปีและเทอร์โมกราวิเมตริก ตามลำดับ ขนาดรูพรุนเฉลี่ยของซิลิกาพรุนที่เตรียมได้อยู่ในช่วง 2.2-10.9 นาโนเมตร และปริมาณของหมู่ไซลานอลอยู่ในช่วง 4.22-7.94 มิลลิโมลต่อกรัมของซิลิกาพรุน การศึกษาพฤติกรรมการดูดซับน้ำโดยซิลิกาพรุนได้ทำการศึกษาทั้งในการดูดซับในของเหลวแบบกะและการดูดซับในวัฏภาคแก๊สแบบต่อเนื่องในเบดนิ่ง รวมถึงการศึกษาการดูดซับเมทิลินบูลจากสารละลายในระบบดูดซับกะด้วย

การดูดซับแบบกะของสารละลายเอทานอล-น้ำ ทำการทดลองที่ความเข้มข้นของเอทานอลในสารป้อนอยู่ในช่วง 60-95 ร้อยละโดยน้ำหนัก พบว่าซิลิกาพรุนที่เตรียมนั้นสามารถแยกน้ำออกจากเอทานอลโดยสามารถเพิ่มความเข้มข้นของเอทานอลได้สูงถึง 97.34 ร้อยละโดยน้ำหนัก แบบจำลองไอโซเทิร์มแลงมัวร์สามารถใช้อธิบายดูดซับน้ำจากสารละลายได้ดี สำหรับการศึกษากระบวนการดูดซับทางจลนพลศาสตร์ ได้ทำการศึกษาที่อุณหภูมิการดูดซับต่างๆ โดยแบบจำลองอันดับสองเสมือนมีความเหมาะสมและให้ผลสอดคล้องกับผลการทดลองได้ดีที่สุด ในส่วนการศึกษากระบวนการดูดซับทางพลวัตของไอผสมเอทานอล-น้ำบนซิลิกาพรุนในคอลัมน์แบดนิ่งชี้ว่าซิลิกาพรุนมีประสิทธิภาพในการแยกน้ำของจากไอผสมเอทานอล-น้ำ และสามารถเพิ่มความเข้มข้นของเอทานอลข้ามจุดอะซิโอโทรปของเอทานอลได้

สำหรับกระบวนการกำจัดสีสังเคราะห์ในงานวิจัยนี้ได้ทำการศึกษาการดูดซับเมทิลินบูลจากสารละลายโดยใช้ซิลิกาในระบบการดูดซับแบบกะ จากผลการทดลองพบว่าปริมาณของหมู่ไซลานอลไม่ได้ส่งผลมากนักต่อการดูดซับเมทิลินบูล แต่ปริมาณการดูดซับของเมทิลินบูลจะเพิ่มขึ้นตามขนาดรูพรุนเฉลี่ยของซิลิกาพรุนที่เพิ่มขึ้น และการศึกษาสมดุลการดูดซับและจลนพลศาสตร์ของการดูดซับเมทิลินบูลสามารถอธิบายด้วยแบบจำลองไอโซเทิร์มของแลงมัวร์และแบบจำลองอันดับสองเสมือนตามลำดับ

ในส่วนของการศึกษาการจำลองแบบทางคอมพิวเตอร์สำหรับการดูดซับ ทำการศึกษาโดยการจำลองโครงสร้างของซิลิกาพรุนเป็นแบบโครงสร้างเตตระฮีดรอลของซิลิกอนเตตระออกไซด์และมีหมู่ไฮดรอกซิลแทนหมู่ไซลานอลที่อยู่บนพื้นผิว โดยใช้แบบจำลองวิธีจีซีเอ็มซีในการศึกษาพฤติกรรมการดูดซับสารประกอบเดี่ยวของแก๊สมีเทนและแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์บนซิลิกาพรุนจำลอง นำผลของไอโซเทิร์มการดูดซับของคาร์บอนไดออกไซด์ที่จากการจำลองทางคอมพิวเตอร์ไปเปรียบเทียบกับผลการทดลอง โดยพบว่าแบบจำลองรุพรุนแบบแผ่นขนานที่ผนังประกอบไปด้วยโครงข่ายของซิลิกอนเตตระออกไซด์ สามารถใช้ศึกษาการดูดซับคาร์บอนไดออกไซด์และมีเทนได้เป็นอย่างดี

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนักศึกษา _____

ปีการศึกษา 2563 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา _____

CHONTIRA BOONFUNG : ADSORPTION STUDY OF POROUS SILICA PREPARED BY SOL-GEL METHOD: EXPERIMENTS AND COMPUTER SIMULATION. THESIS ADVISOR : PROF. CHAIYOT TANGSATHITKULCHAI, Ph.D. 191 PP.

POROUS SILICA/ ETHANOL/ADSORPTION/GCMC SIMULATION

This thesis work was concerned with the preparation of porous silica from sodium silicate by the sol-gel method and studying its adsorption performance in both liquid and gas systems, as well as studying the computer simulation of gas adsorption on porous silica. Porous properties and of porous silica were determined by means of N_2 adsorption at 77 K and the presence of surface silanol groups was identified both qualitatively and quantitatively by FTIR and TGA, respectively. The mean pore size of the porous silica prepared by the sol-gel method was in the mesopore size range varying from 2.2-10.9 nm and silanol contents in the range of 4.22-7.94 mmol/g. The water adsorption behavior by the prepared porous silica was studied both in a liquid batch system and a continuous fixed-bed vapor system, as well as the batch adsorption of methylene blue (MB) from aqueous solution.

For batch adsorption of an ethanol-water mixture and with the initial ethanol feed concentration in the range from 60 to 95 wt%, the prepared porous glass was able to effectively remove water, giving the final concentration as high as 97.34 wt%. The water adsorption isotherms by porous silica were well described by the Langmuir isotherm equation. The kinetics of water adsorption was also studied at various temperatures and the pseudo second-order model was found to excellently describe the experimental kinetic data. The dynamics of water adsorption from an ethanol-water

vapor mixture by the prepared porous silica was conducted in a fixed-bed adsorption column. It was found that the porous silica was able to effectively separate water from ethanol-water vapor mixtures and could break the azeotrope point of ethanol, giving the final ethanol product concentration of higher than 99% by weight.

The removal of MB from aqueous solution by the prepared porous silica was carried out in a batch system. From the results obtained, it was observed that the silanol contents did not greatly affect the methylene blue adsorption. However, the methylene blue adsorption capacity increased with the increase in the mean pore size of porous silica. The equilibrium and kinetics of adsorption were satisfactorily described by the Langmuir isotherm and the pseudo-second-order kinetics model, respectively.

For the simulation study, the structure of porous silica was modeled as a tetrahedral structure of SiO_4 for the pore walls and the surface silanol groups was represented as hydroxyl groups. The GCMC simulation method was then used to investigate the adsorption behavior for the single component of methane (CH_4) and carbon dioxide (CO_2) in the porous silica model. The simulated CO_2 adsorption isotherms were also presented and compared with the experimental data. It was demonstrated that the finite-length slit pore model, whose walls consist of an assemblage of connected SiO_4, can be employed to represent the structure of porous silica glass for a successful simulation study of CO_2 and CH_4 adsorption.

School of Chemical Engineering Student's Signature

Academic Year 2020 Advisor's Signature