สุปวรรณ อินทวงษ์ : ผลของการเติมสารประกอบเหล็กในถ่านกัมมันต์ที่มีต่อการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์และมีเทน (EFFECT OF ADDITION OF IRON COMPOUNDS IN ACTIVATED CARBON ON THE ADSORPTION OF CARBON DIOXIDE AND METHANE) อาจารย์ที่ปรึกษา : รศ. ดร.อติชาต วงศ์กอบลาภ, 118 หน้า.

คำสำคัญ : การดูดซับ; ถ่านกัมมันต์; คาร์บอนไดออกไซด์; มีเทน

วิทยานิพนธ์นี้มีวัตถุประสงค์เพื่อศึกษาการดูดซับคาร์บอนไดออกไซด์และมีเทนในถ่านกัมมันต์ที่มีการปรับปรุงพื้นผิวด้วยเหล็ก โดยวิธีการดำเนินงานแบ่งออกเป็น 2 ส่วนหลัก คือ การทดลองในห้องปฏิบัติการและการจำลองเชิงโมเลกุลที่อาศัยแบบจำลองทางคอมพิวเตอร์ ซึ่งในการทดลองได้นำถ่านกัมมันต์ทางการค้ามาทำการปรับปรุงให้มีเหล็กเจืออยู่บนพื้นผิวโดยการเติมสารประกอบเหล็กแล้วนำไปวิเคราะห์คุณสมบัติก่อนที่จะทำการทดลองดูดซับคาร์บอนไดออกไซด์และมีเทนที่อุณหภูมิ 273 K และ 298 K ควบคู่ไปกับการจำลองเชิงโมเลกุลโดยอาศัยแบบจำลองแกรนด์คาโนคัลมอนติคาร์โล (Grand Canonical Monte Carlo, GCMC) เพื่อช่วยให้เข้าใจกลไกและพฤติกรรมการดูดซับคาร์บอนไดออกไซด์และมีเทนได้ดียิ่งขึ้น ในการจำลองทางคอมพิวเตอร์ถ่านกัมมันต์ถูกจำลองให้เป็นแผ่นกราฟีนขนานกันหรือที่เรียกว่าแบบจำลองรูพรุนแบบแผ่น (slit pore) โดยทำการจำลองการดูดซับที่อุณหภูมิ 273 K และ 298 K เช่นเดียวกับการศึกษาการดูดซับในห้องปฏิบัติการ รวมทั้งได้ทำการศึกษาถึงอิทธิพลของขนาดความกว้างรูพรุนที่มีต่อการดูดซับแก๊ส สำหรับผลการทดลองพบว่าการดูดซับคาร์บอนไดออกไซด์และมีเทนเป็นการดูดซับทางกายภาพเป็นหลัก การเติมเหล็กในปริมาณที่สูงเกินไปที่ความเข้มข้น 15% และ 20% นั้นทำให้ปริมาณการดูดซับต่ำลง แต่ที่ความเข้มข้น 1% เมื่ออุณหภูมิการดูดซับเท่ากับ 273 K เหล็กช่วยเพิ่มความสามารถในการดูดซับ 6% สำหรับการดูดซับ CO_2 ที่ความดัน 30 bar รวมถึงช่วยเพิ่มความสามารถในการดูดซับถึง 20% สำหรับการดูดซับ CH_4 ที่ความดัน 35 bar ในส่วนของการจำลองทางคอมพิวเตอร์นั้นพบว่าหากอุณหภูมิในการดูดซับต่ำลงปริมาณการดูดซับจะเพิ่มขึ้น ชี้ว่าเป็นการดูดซับทางกายภาพ ผลของปริมาณเหล็กที่มีต่อการดูดซับในรูพรุนขนาดเล็กคือขนาด 6.5 Å และ 7.0 Å มีลักษณะเช่นเดียวกับผลที่ได้จากการทดลอง แต่การดูดซับในรูพรุนที่กว้างกว่าเช่นรูพรุนขนาด 15 Å ปริมาณการดูดซับจะเพิ่มขึ้นตามปริมาณเหล็กที่เพิ่มขึ้น

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนักศึกษา สุปวรรณ อินทวงษ์

ปีการศึกษา 2565 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา

SUPAWAN INTHAWONG : EFFECT OF ADDITION OF IRON COMPOUNDS IN ACTIVATED CARBON ON THE ADSORPTION OF CARBON DIOXIDE AND METHANE. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. ATICHAT WONGKOBLAP, Ph.D. 118 PP.

Keywords : adsorption; activated carbon; carbon dioxide; methane

This thesis studied the adsorption of carbon dioxide and methane on activated carbon modified with iron on its surface. The operation method is divided into two parts: experimental and molecular simulation. For the experiment, various concentrations of iron compounds were added to commercial activated carbon. The properties of activated carbon were analyzed before carbon dioxide and methane adsorption experiments were carried out at 273 K and 298 K, coupled with molecular simulations based on the Grand Canonical Monte Carlo model (GCMC), to help better understand the mechanism and behavior of carbon dioxide and methane adsorption. Activated carbon was simulated in computer simulations as a parallel graphene sheet, also known as the slit pore model, by simulating at the same temperatures (273 K and 298 K) as in the experiment. The influence of pore width on gas adsorption was also investigated. In terms of experimental data, it was discovered that carbon dioxide and methane adsorption is primarily physical. The excessive amount of iron at concentrations of 15% and 20% led to decreased adsorption. However, at a concentration of 1% and an adsorption temperature of 273 K, iron enhanced the adsorption capacity by 6% for CO_2 adsorption at a pressure of 30 bar, and also raised the adsorption capacity by 20% for CH_4 adsorption at a pressure of 35 bar. In the computer simulation, it was discovered that when the adsorption temperature is decreased, the adsorption amount increases, which is a typical occurrence for physical adsorption. The effect of iron concentration on micropore adsorption at 6.5 Å and 7.0 Å correlates with the experimental results. However, with larger pore sizes, such as 15 Å, the adsorption amount increases as the iron content increases.

School of Chemical Engineering Student's Signature สุพรรณ อินทวงษ์

Academic Year 2022 Advisor's Signature