ภูมิวัต ผดุงบุตร : การจำลองทางคอมพิวเตอร์ของโครงสร้างคาร์บอนพรุนและการดูดซับก๊าซภายใต้สภาวะกึ่งวิกฤตและเหนือวิกฤต (COMPUTER SIMULATION OF POROUS CARBON STRUCTURES AND GAS ADSORPTION UNDER SUBCRITICAL AND SUPERCRITICAL CONDITIONS) อาจารย์ที่ปรึกษา : ศาสตราจารย์ ดร.ชัยยศ ตั้งสถิตย์กุลชัย, 164 หน้า.

วิทยานิพนธ์นี้ศึกษาการจำลองโครงสร้างคาร์บอนพรุนและมุมมองใหม่เกี่ยวกับพฤติกรรมการดูดซับก๊าซที่อุณหภูมิต่างๆโดยใช้แบบจำลองมอนติคาร์โล (MC) งานวิจัยนี้สามารถแบ่งออกได้เป็นสามส่วน โดยในส่วนแรกทำการศึกษาการสร้างโครงสร้างคาร์บอนและพัฒนาวิธีการหาคุณลักษณะของโครงสร้างรูพรุนด้วยวิธีการจำลองทางคอมพิวเตอร์ โดยในขั้นแรกทำการทดสอบวิธีที่นำเสนอกับแบบจำลองอย่างง่ายที่มีรูปร่างแน่นอน เช่น รูพรุนทรงกระบอก และรูพรุนแผ่นขนาน เป็นต้น จากนั้นขยายไปใช้กับแบบจำลองคาร์บอนพรุนที่มีความซับซ้อนของโครงสร้างมากขึ้น จากการศึกษาพบว่า สมบัติรูพรุน และ ไอโซเทิร์มการดูดซับของคาร์บอนพรุนที่สร้างขึ้นสอดคล้องกับผลของถ่านกัมมันต์จริงที่เตรียมจากเม็ดลำไย

ในส่วนที่สอง ได้ศึกษาการจำลองการเกิดวงรอบฮิสเทอรีซิส (Hysteresis) ของการดูดซับก๊าซอาร์กอนที่สภาวะกึ่งวิกฤติ บนพื้นผิวกราฟีนและรูพรุนอย่างง่ายทั้งแบบช่องแคบ แบบทรงกระบอก และแบบทรงกลม โดยการใช้แบบจำลองแบบแกรนด์คาร์โนนิคัล (GCE) และคาร์โนนิคัลแบบสองปริมาตร (MCE) เพื่อค้นหา สภาวะเสถียร กึ่งเสถียร และไม่เสถียรภายในรูพรุนดังกล่าว จากการศึกษาพบว่าจุดเริ่มต้นของการเกิดวงฮิสเทอรีซิสเป็นผลมาจากการเปลี่ยนเฟส การเกิดผิวคลื่นก่อนการควบแน่น และการจัดโครงสร้างของสารถูกดูดซับภายในรูพรุน

ในส่วนสุดท้ายของวิทยานิพนธ์ ได้นำเสนอวิธีใหม่ในการหาปริมาณการดูดซับสัมบูรณ์ที่สภาวะเหนือวิกฤตโดยได้แนวคิดจากการหาบริเวณช่องว่างที่บรรจุโมเลกุลของก๊าซได้สำเร็จ วิธีนี้สามารถอธิบายการดูดซับของก๊าซอาร์กอนบนพื้นผิวกราฟีนได้เป็นอย่างดี จากการศึกษาพบว่าที่ความดันและอุณหภูมิเหนือจุดวิกฤต ในเฟสดูดซับจะมีชั้นดูดซับของอาร์กอนไม่เกิน 2 ชั้น และเฟสดูดซับจะมีสภาวะเป็นของเหลวเสมือน

สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนักศึกษา _____

ปีการศึกษา 2558 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา _____

POOMIWAT PHADUNGBUT : COMPUTER SIMULATION OF POROUS CARBON STRUCTURES AND GAS ADSORPTION UNDER SUBCRITICAL AND SUPERCRITICAL CONDITIONS. THESIS ADVISOR : PROF. CHAIYOT TANGSATHITKULCHAI, Ph.D., 164 PP.

POROUS CARBON/ADSORPTION/
CHARACTERIZATION/MONTE CARLO SIMULATION

This thesis is concerned with the modeling of porous carbon structure and novel aspects of gas adsorption behavior over a wide range of conditions using Monte Carlo (MC) simulation. The thesis was divided into three parts. The first part was focused on the creation of simulated porous carbon and the development of pore characterization technique based on the concept of accessibility using computer simulation. This proposed characterization method was first validated with several simple pore models such as cylindrical and slit pores and extended to a more complex porous carbon model. The result indicated that both the computed structural properties and adsorption isotherms of the simulated porous carbon were in qualitative agreement with those of longan seed-derived activated carbon, thus proving the potential of this new pore characterization technique.

In the second part, a smooth graphitic surface and simple pore models, slit, cylindrical and spherical pores, were used to study the microscopic behaviors of hysteresis loop for argon adsorption under subcritical conditions. Grand canonical (GCE) and Meso-canonical (MCE) ensembles were applied to search for the stable, metastable and unstable states in the corresponding pores. It can be summarized that

the phase transition, the undulating interface at the onset of condensation and the restructuring of adsorbate are the microscopic origin of hysteresis loops.

For the final part, the novel approach based on the concept of fraction of successful insertion was proposed to determine absolute adsorbed amount under supercritical conditions. The method has well described the adsorption mechanism of argon adsorbed on a graphitic surface. The results showed that the adsorbed phase is confined to no more than two adsorbed layers above the surface and it is a liquid-like state at this extremely high pressure condition.

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

School of Chemical Engineering Student's Signature _____

Academic Year 2015 Advisor's Signature _____