ยุพาวรรณ มณีวงค์ : การศึกษาการแยกพาราเซตามอลออกจากน้ำ โดยใช้ถ่านกัมมันต์ที่โด๊ปด้วยไนโตรเจนโดยเตรียมจากกะลามะพร้าว ในการดูดซับแบบกะ ทั้งการทดลองและแบบจำลองเชิงโมเลกุล (PARACETAMOL REMOVAL FROM WATER BY N-DOPED ACTIVATED CARBON DERIVED FROM COCONUT SHELL IN A BATCH ADSORPTION : EXPERIMENTAL AND MOLECULAR SIMULATION STUDY) อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.นิคม กลมเกลี้ยง, 128 หน้า.

คำสำคัญ : การดูดซับ/พาราเซตามอล/ถ่านกัมมันต์ที่โด๊ปไนโตรเจน/แบบจำลองเชิงโมเลกุล

ในปัจจุบันมีปริมาณยาพาราเซตามอลจำนวนมากปนเปื้อนในน้ำซึ่งส่งผลเสียต่อสุขภาพและสิ่งแวดล้อม ดังนั้นในงานวิจัยนี้จึงศึกษาเทคโนโลยีการกำจัดพาราเซตามอลโดยใช้กระบวนการดูดซับด้วยถ่านกัมมันต์ที่โด๊ปไนโตรเจนจากกะลามะพร้าว (N-Doped AC) เตรียมได้จากถ่านชาร์ (Char) และถ่านกัมมันต์ (AC) ที่ได้จากการนำกะลามะพร้าวมาผ่านกระบวนการคาร์บอไนเซชันและการก่อกัมมันต์ซึ่งเป็นถ่านตั้งต้นในการโด๊ปไนโตรเจนด้วยยูเรีย (Urea) และกระตุ้นทางเคมีด้วยโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ (KOH) โดยศึกษาผลของถ่านตั้งต้นในการเตรียมถ่านกัมมันต์ที่โด๊ปไนโตรเจน อุณหภูมิที่กระตุ้นในการกระตุ้นทางเคมี และอัตราส่วนของแก๊สออกซิไดซ์ระหว่างแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์กับแก๊สไนโตรเจน พบว่าถ่านกัมมันต์ที่โด๊ปด้วยไนโตรเจนโดยเตรียมจากกะลามะพร้าวทุกตัวอย่างได้รับการพัฒนาทั้งความเป็นรูพรุนและหมู่ฟังก์ชันบนพื้นผิวของถ่าน สำหรับการดูดซับพาราเซตามอลทำการทดลองแบบกะที่อุณหภูมิ 298 K เพื่อศึกษาจลนพลศาสตร์และสมดุลของการดูดซับพาราเซตามอลพบว่าสมการแพร่ภายในรูพรุน (Intraparticle diffusion) เหมาะสมในการใช้อธิบายกลไกการดูดซับพาราเซตามอลบนถ่านกัมมันต์ที่โด๊ปไนโตรเจนมากกว่าสมการอื่นๆ เนื่องจากวัสดุดูดซับที่ใช้ในการดูดซับจริงมีการเชื่อมต่อกันของรูพรุนหลายขนาดจึงทำให้กระบวนการดูดซับที่เกิดขึ้นมีความซับซ้อน โดยความสามารถสูงสุดในการดูดซับพาราเซตามอลของถ่านทั้งหมดเหล่านี้มีค่าอยู่ในช่วง 39.9 ถึง 357.1 mg/g โดยในบรรดาถ่านทั้งหมด NAC-1123-1:0 เป็นถ่านกัมมันต์ที่โด๊ปไนโตรเจนที่มีพื้นที่ผิวจำเพาะและปริมาตรทั้งหมดของรูพรุนสูงคือ 538 m^2/g ซึ่งเป็นมีความสามารถในการดูดซับพาราเซตามอลสูงที่สุด นอกจากนี้ปริมาณพาราเซตามอลที่ถูกดูดซับที่สมดุลมีค่าค่อนข้างคงคงที่ไม่ขึ้นกับความเป็นกรด ด่างของสารละลายพาราเซตามอลซึ่งบ่งชี้ว่าขนาดของรูพรุนเป็นปัจจัยสำคัญที่มีผลต่อความสามารถในการดูดซับพาราเซตาอลมากกกว่าประจุทางไฟฟ้าสถิตของหมู่ฟังก์ชันบนพื้นผิวของถ่านที่ใช้ดูดซับ ซึ่งเห็นได้จากผลการจำลองโมเลกุลด้วยการใช้แบบจำลองโมเลกุลแกรนต์คาโนนิคอลมอนติคาร์โล (GCMC) ในการศึกษาของขนาดรูพรุน(0.6-6 nm) หมู่ฟังก์ชัน ได้แก่ หมู่ไนโตรเจน ได้แก่ Pyrrolic (N-5) Pyridinic (N-6) และ Quaternary Nitrogen (NQ) หมู่ที่มีออกซิเจน ได้แก่ หมู่คาร์บอกซิล (-COOH) หมู่ไฮดรอกซิล (-OH) และหมู่คาร์บอนิล (-C=O) และไม่มีหมู่ฟังก์ชัน (Perfect Surface) และความเข้มข้นของพาราเซตามอล (25-2000 mg/L) โดยการทดสอบด้วยระบบของผสมระหว่างพาราเซตามอลกับน้ำที่อุณหภูม 298K พบว่าความเข้มข้นของพาราเซตามอลทุกความเข้มข้นรูพรุนขนาด 0.7 nm เป็นขนาดของรูพรุนที่เหมาะสม

ในการดูดซับพาราเซตามอลมากที่สุด เนื่องจากเกิดดูดซับแบบชั้นเดียวที่สมบูรณ์ และหมู่ฟังก์ชันชนิดหมู่ไนโตรเจนโดยเฉพาะ N-6 ที่อยู่บนพื้นผิวของรูพรุนสามารถดูดซับพาราเซตามอลได้ดีกว่าหมู่ที่มีออกซิเจน นอกจากนี้ความเข้มข้นของพาราเซตามอลในช่วง 25-1000 mg/L มีผลต่อการดูดซับพาราเซตามอลที่รูพรุนขนาดมากกว่า 2 nm แต่ไม่มีผลต่อการดูดซับที่รูพรุนขนาด น้อยกว่า 2 nm นอกจากนี้ต้นทุนการผลิตโดยประมาณสำหรับการผลิตถ่านชาร์ ถ่านกัมมันต์ และถ่านกัมมันต์ที่โด๊ปด้วยไนโตรเจนอยู่ที่ประมาณ 0.73 2.63 และ 3.83 U.S.$/kg ตามลำดับ ซึ่งบงชี้ว่าต้นทุนในการผลิตมีการแข่งขันกันสูงมากในท้องตลาด อย่างไรก็ตามถ่านกัมมันต์ที่โด๊ปด้วยไนโตรเจนมีราคาถูกที่สุดในการแยกพาราเซตามอลในจำนวนที่เท่ากันออกจากน้ำ

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนักศึกษา _____

ปีการศึกษา 2565 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา _____

YUPAWAN MANEEWONG : PARACETAMOL REMOVAL FROM WATER BY N-DOPED ACTIVATED CARBON DERIVED FROM COCONUT SHELL IN A BATCH ADSORPTION : EXPERIMENTAL AND MOLECULAR SIMULATION STUDY. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. NIKOM KLOMKLIAG, Ph.D., 128 PP.

Keywords : Adsorption/Paracetamol/ N-doped AC/Simulation

Nowadays, large amounts of paracetamol are contaminated in water, which has great potential to negatively affect health and environment. Therefore, this work studies the technologies for the purification of water using adsorption via N-doped AC which is prepared by Char and activated carbon (AC) derived from coconut shells were modified using urea and KOH. The effect of starting sample (AC and Char) activated temperature and gas agent was studied. it was found that all sample the pore size and surface functional group were developed thoroughly. Paracetamol (PC) removal from aqueous solution was accomplished by adsorption in a batch system at 298K in order to studied kinetic and equilibrium of paracetamol adsorption. The intraparticle diffusion model was suitable to describe the kinetic PC removal from water rather than other models because of a complicated adsorption process in the pore connection of actual materials. The maximum capacity of these adsorbents was in a range of 39.9–357.1mg/g. Among them, the NAC-1123-1:0 had the highest surface area (538m^2/g) and the highest PC adsorption capacity. The PC equilibrium uptakes in these samples were not pH-dependent, indicating that the pore size is the most dominant factor than the electrostatic charge of functional group on the solid surface for adsorption, which is evidenced in our simulation results. Furthermore, a Grand Canonical Monte Carlo simulation was used to study equilibrium adsorption. The effect of pore size (0.6-6 nm) functional group type (carboxylic, hydroxyl, carbonyl, quaternary-N, pyrrolic-N, and pyridinic-N) and the bulk concentration (25-2000 mg/L) were investigated on PC-water mixtures at 298K. It was found that the maximum capacity was found in the pore size of 0.70nm, which was the best fit for complete monolayer coverage of PC molecules. The simulation confirmed that N-group types, especially pyridinic-N were more attractive than O-group types for enhanced PC removal. Furthermore, the bulk concentration in the range of 25-1000 mg/L plays a key role on the capacity in mesoporous size, but not in microporous size. In addition, the estimated cost of production for char, AC, and N-doped AC were about 0.73, 2.63, and 3.83 U.S.$/kg respectively, indicating a highly competitive cost in the market. However, the N-doped

AC was the cheapest price in order to remove the same amount of PC from aqueous solution.

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

School of Chemical Engineering
Academic Year 2022

Student's Signature _____
Advisor's Signature _____