อรวรรยา ติยเวศย์: การศึกษาการทดลองและการจำลองระดับโมเลกุลในการดูดซับแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ด้วยถ่านไบโอชาร์เจือควบคู่ด้วยไนโตรเจนและซัลเฟอร์ที่สังเคราะห์จากต้นพริก (EXPERIMENTAL AND MOLECULAR SIMULATION STUDY OF CARBON DIOXIDE ADSORPTION IN NITROGEN AND SULFUR CO-DOPED BIOCHAR SYNTHESIZED FROM CHILI STEM)
อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.นิคม กลมเกลี้ยง, 94 หน้า.

คำสำคัญ : แก๊สคาร์บอนไดออกไซด์/การดูดซับ/การเจือควบคู่ในถ่านไบโอชาร์/การจำลองระดับโมเลกุล

ปริมาณความเข้มข้นของแก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ (CO_2) ที่ยังคงเพิ่มขึ้นอย่างต่อเนื่องทุกวัน ส่งผลกระทบต่อการเปลี่ยนแปลงสภาพภูมิอากาศและเป็นสาเหตุหนึ่งที่ส่งผลกระทบต่อภาวะโลกร้อน ปัญหานี้กลายเป็นปัญหาระดับสากลและยังคงเป็นความท้าทายในการศึกษาและคิดค้นวิธีการลดปริมาณแก๊ส CO_2 อย่างมีประสิทธิภาพ ดังนั้น การศึกษานี้จึงศึกษาการดูดซับแก๊ส CO_2 ที่อุณหภูมิ 273 K และ 298 K ในถ่านไบโอชาร์ที่สังเคราะห์จากต้นพริกซึ่งเป็นขยะชีวมวล (biowaste) ต้นพริกถูกนำมาผ่านกระบวนการคาร์บอนิเซชัน (carbonization) เพื่อผลิตถ่านไบโอชาร์ดั้งเดิม ซึ่งใช้เป็นสารตั้งต้นในการปรับปรุงคุณสมบัติพื้นผิวโดยการเติมอะตอมวิวิธพันธ์ (heteroatom) เช่น ไนโตรเจน (N) และซัลเฟอร์ (S) โดยผ่านการบำบัดความร้อนร่วมกับยูเรีย (N-doped) ไทโอยูเรีย (N-S co-doped) แก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ และอากาศ จากการศึกษาคุณสมบัติของถ่านพบว่าไม่เพียงแต่เคมีพื้นผิวเท่านั้นที่ได้รับการปรับปรุง แต่ยังส่งผลให้เกิดขั้นตอนการพัฒนารูพรุนที่เหนือชั้น (superior pore size) อีกด้วย ถ่านไบโอชาร์ที่เจือควบคู่ด้วยไนโตรเจน-ซัลเฟอร์ มีความสามารถในการดูดซับแก๊ส CO_2 ที่โดดเด่น แม้ว่าจะมีพื้นที่ผิวหรือปริมาตรรูพรุนที่ต่ำกว่าเมื่อเทียบกับการศึกษาอื่น ๆ ในวรรณกรรมที่เกี่ยวข้องก็ตาม นอกจากนี้ ถ่านไบโอชาร์ที่ได้รับการปรับปรุง (modified biochar) ยังเผยให้เห็นจลนศาสตร์ที่รวดเร็วของการดูดซับแก๊ส CO_2 และมีความคุ้มค่าในการผลิตมากกว่าถ่านไบโอชาร์ที่ไม่มีการดัดแปลง (unmodified biochar) เพื่อสนับสนุนผลการทดลองและเข้าใจคุณลักษณะของกลุ่มฟังก์ชันของเคมีพื้นผิวบนวัสดุได้ดียิ่งขึ้น งานวิจัยนี้จึงได้ทำการจำลองระดับโมเลกุลโดยใช้หลักการแกรนด์ คาโนนิคัล มอนติ คาร์โล (GCMC) เพื่อแสดงให้เห็นถึงผลกระทบของกลุ่มฟังก์ชันไนโตรเจน ซัลเฟอร์ ขนาดรูพรุน และปริมาตรรูพรุนต่อการดูดซับแก๊ส CO_2 อย่างเป็นระบบ จากผลการจำลองพบว่ากลุ่มฟังก์ชันพื้นผิวเป็นปัจจัยรองที่ส่งผลกระทบต่อการดูดซับแก๊ส CO_2 ที่ช่วงความดันต่ำจนกระทั่งหมู่ฟังก์ชันเกิดการอิ่มตัวด้วยโมเลกุลของตัวดูดซับที่ความดันเท่ากับ 0.3 bar นอกจากนี้ การเพิ่มปริมาณของอะตอมซัลเฟอร์ (tuning S) สามารถช่วยเพิ่มปริมาณการดูดซับแก๊ส

CO_2 มากกว่าการปรับปริมาณอะตอมไนโตรเจน ในขณะที่ขนาดของรูพรุนเป็นปัจจัยหลักที่มีผลกระทบมากที่สุดต่อความสามารถในการดูดซับทั้งในช่วงความดันต่ำและความดันปานกลาง (สูงถึง 23 bar) ผลการจำลองแสดงให้เห็นว่าขนาดรูพรุนที่เหมาะสมที่สุดจะอยู่ในช่วง 0.66—4.0 nm ขึ้นอยู่กับความดัน ในทางกลับกันปริมาตรรูพรุนจะกลายเป็นปัจจัยหลักที่ส่งผลต่อการดูดซับแก๊ส CO_2 เมื่อความดันเพิ่มขึ้นเกิน 23 bar

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี
ปีการศึกษา 2566

ลายมือชื่อนักศึกษา อรวรรยา ศิยาวฤธ
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา นิกร กลางกลัน

AURAWANYA TIYAWATE: EXPERIMENTAL AND MOLECULAR SIMULATION STUDY OF CARBON DIOXIDE ADSORPTION IN NITROGEN AND SULFUR CO-DOPED BIOCHAR SYNTHESIZED FROM CHILI STEM
THESIS ADVISOR: ASSOC. PROF. NIKOM KLOMKLIANG, Ph.D., 94 PP.

Keywords : Carbon dioxide/Adsorption/Co-doped biochar/Molecular simulation

Carbon dioxide (CO_2) concentrations continue to increase every day, influencing climate change and contributing to global warming. This problem has become a global issue and continues to be a challenge to study and devise effective ways to reduce CO_2. Therefore, this study investigates the adsorption of CO_2 at 273 K and 298 K in biochar which is synthesized from chili stems, a biowaste. Chili stem was carbonized to produce the original biochar, which is used as a starting precursor to modify the surface properties by adding heteroatoms such as nitrogen (N) and sulfur (S) via heat treatment together with urea (N-doped), thiourea (N-S co-doped), carbon dioxide, and air activations. We found that not only the surface chemistry was enhanced but also the superior pore size was improved. The N-S co-doped biochar exhibited outstanding CO_2 adsorption capacity, even though it had a lower surface area or pore volume compared to other studies in literature. In addition, the modified biochar revealed fast kinetics of CO_2 adsorption and was more cost-effective for production than its unmodified biochar. To support the experimental results and better understand the characteristics of the functional groups on the material surface. We have used a grand canonical Monte Carlo (GCMC) simulation to systematically demonstrate the effects of N and S functional groups, pore size, and pore volume on CO_2 adsorption. According to the simulation results, surface functional group is the minor factor in the ability to adsorb CO_2 at low pressures until it is saturated with adsorbate molecules at 0.3 bar. By increasing the amount of S atoms (tuning S), CO_2 adsorbed amount increased rather than N tuning. While the pore size is the main factor that has the greatest impact on the adsorption capacity in both low and medium pressure ranges (up to 23 bar). The simulation results show that the optimum pore sizes are found in the range of 0.66—4.0 nm depending on the pressure. On the other hand, pore volume becomes the main

factor when the pressure is over 23 bar.

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

School of Chemical Engineering

Academic Year 2023

Student's Signature Auruwnya Tiyawate

Advisor's Signature Nikom Klomkliang