อธิศ วัดเวียงคำ : การศึกษาเชิงทฤษฎีของปฏิกิริยารีดักชันเชิงเคมีไฟฟ้าของคาร์บอนไดออกไซด์บนตัวเร่งปฏิกิริยาทองแดงและสังกะสี (A THEORETICAL STUDY OF ELECTROCHEMICAL CARBON DIOXIDE REDUCTION REACTION ON COPPER–ZINC CATALYSTS). อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.สุวิทย์ สุธีรากุล, 92 หน้า

คำสำคัญ: ปฏิกิริยารีดักชันของคาร์บอนไดออกไซด์ การเร่งปฏิกิริยาเชิงเคมีไฟฟ้า เอทานอล ทองแดง สังกะสี ทฤษฎีฟังก์ชันนอลความหนาแน่น

ปฏิกิริยารีดักชันเชิงเคมีไฟฟ้าของคาร์บอนไดออกไซด์ (CO_2RR) เป็นหนึ่งในกระบวนการที่มีประสิทธิภาพสูงในการเปลี่ยน CO_2 เป็นผลิตภัณฑ์ที่มีมูลค่าเพิ่มชนิดต่าง ๆ โดยตัวเร่งปฏิกิริยาเชิงไฟฟ้าที่มีโลหะ 2 ชนิดซึ่งประกอบด้วยทองแดงและสังกะสีได้รับความสนใจอย่างมากเนื่องจากเป็นตัวเร่งปฏิกิริยาที่มีประสิทธิภาพและมีความจำเพาะในการผลิตเอทานอลจากกระบวนการ CO_2RR แม้ว่าการศึกษากระบวนการ CO_2RR บนตัวเร่งปฏิกิริยาเดี่ยวของทองแดงและสังกะสี รวมทั้งอัลลอยชนิดเนื้อเดียวจะมีจำนวนมาก แต่การศึกษากระบวนการ CO_2RR บนพื้นผิวระหว่างโลหะทองแดงและสังกะสีแบบวิวิธพันธ์นั้นยังมีไม่มากนัก ดังนั้น ผู้วิจัยจึงทำการศึกษาผลของพื้นผิวระหว่างโลหะทองแดงและสังกะสีต่อกระบวนการ CO_2RR ไปเป็นเอทานอลของตัวเร่งปฏิกิริยาทองแดงและสังกะสีแบบแยกวัฏภาคด้วยวิธีการเชิงทฤษฎี จากการศึกษา พบว่า ตำแหน่งพื้นผิวดังกล่าวมีผลกระทบอย่างยิ่งต่อกระบวนการ CO_2RR โดยการเปลี่ยนแปลงความเสถียรของสารมัธยันตร์และส่งเสริมให้เกิดปฏิกิริยาการควบรวมระหว่างสารมัธยันตร์สองชนิดที่มีคาร์บอนหนึ่งอะตอมซึ่งแตกต่างจากปฏิกิริยาบนตำแหน่งอื่น ได้แก่กระบวนการควบรวมระหว่าง *CO และ *CH ซึ่งมีโอกาสเกิดขึ้นได้สูงทั้งเชิงอุณหพลศาสตร์และจลนศาสตร์ หลังจากกระบวนการควบรวมดังกล่าว ปฏิกิริยาการผลิตเอทานอลที่ตำแหน่งพื้นผิวระหว่างโลหะจะมีโอกาสเกิดขึ้นได้มากกว่าปฏิกิริยาการผลิตเอทิลีน นอกจากนี้ ผู้วิจัยยังทำการศึกษากระบวนการ CO_2RR บนตำแหน่งโลหะทองแดงเพื่อเปรียบเทียบกับตำแหน่งพื้นผิวระหว่างโลหะอีกด้วย จากผลการศึกษาสามารถสรุปได้ว่า ตำแหน่งพื้นผิวระหว่างโลหะ 2 ชนิดมีส่วนช่วยในกระบวนการ CO_2RR ไปเป็นเอทานอลอย่างจำเพาะบนตัวเร่งปฏิกิริยาที่มีทองแดงและสังกะสีแบบแยกวัฏภาค

สาขาวิชาเคมี
ปีการศึกษา 2566

ลายมือชื่อนักศึกษา _____
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา _____

ATHIS WATWIANGKHAM : A THEORETICAL STUDY OF ELECTROCHEMICAL CARBON DIOXIDE REDUCTION REACTION ON COPPER–ZINC CATALYSTS. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. SUWIT SUTHIRAKUN, Ph.D. 92 PP.

Keywords: Carbon dioxide reduction reaction; ethanol; electrocatalysis; copper; zinc; density functional theory

Electrochemical carbon dioxide reduction reaction (CO_2RR) is one of the most efficient methods to convert CO_2 to value-added products. Bimetallic Cu–Zn electrocatalysts have gained considerable interest as one of the effective catalysts for selective CO_2RR to ethanol. Although the CO_2RR has been studied extensively on Cu and Zn monometallic catalysts as well as their homogenous alloys, the reaction on heterogeneous Cu–Zn interface has not been explored yet. Herein, we theoretically studied the effect of interface Cu–Zn site on CO_2 conversion to C_2H_5OH catalyzed by phase-separated Cu–Zn catalysts. The interface site has significant impacts on the CO_2 reduction pathway by tuning the stability of the intermediates and promoting the distinct C–C coupling step. The *CO–*CH coupling at the interface site is the most kinetically and thermodynamically favorable step. The interface site will then favor the ethanol pathway over the ethylene after subsequent *COCH production. The reaction on the Cu site was also studied as the comparative counterpart to highlight the effect of interface site. Overall, this study reveals the cooperative role of the interface site in selective ethanol production for CO_2RR on the Cu–Zn catalysts.

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

School of Chemistry
Academic Year 2023

Student's Signature _____
Advisor's Signature _____