ณัฐาพร ทวีลาภ : การดูดซับไฮโดรเจนบนเส้นใยคาร์บอนระดับนาโนที่ติดด้วยโลหะนิกเกิล (HYDROGEN ADSORPTION ON NICKEL SUPPOERTED ON ACTIVATED CARBON NANOFIBERS) อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.ระพี อูทเคอ, 59 หน้า.

การแตกตัวการดูดซับ/ การกักเก็บไฮโดรเจน/ การติดโลหะบนคาร์บอน/ ความสามารถในการผันกลับของการกักเก็บไฮโดรเจน / การสร้างแบบจำลองทางคอมพิวเตอร์/ การคำนวณแบบเฟิสต์พรินซิเพิล

ในวิทยานิพนธ์นี้ เส้นใยคาร์บอนระดับนาโน (ACNF/PVP) ที่เตรียมโดยวิธีการคาร์บอไนซ์และการกระตุ้นทางเคมีของโพลีอะคริโลไนไตรล์ (PAN)-โพลิไวนิลไพโรลิโดน(PVP) นาโนไฟเบอร์ และเจือด้วย 5-20 wt. % นิลเกิลถูกเสนอสำหรับการดูดซับไฮโดรเจนที่อุณหภูมิห้อง ความสามารถในการดูดซับไฮโดรเจนสูงสุดถึง 2.12 wt. % H_2 ภายใต้ความดันไฮโดรเจน 100 บาร์ และความสามารถในการกักเก็บเมื่อครบ 10 รอบ มีความจุเฉลี่ย 1.17 wt. % H_2 ภายใต้ความดันไฮโดรเจน 50 บาร์ ถูกพบจากตัวอย่าง 5Ni-ACNF/PVP การคำนวณทางคอมพิวเตอร์และการทดลองยืนยันปฏิกิริยาระหว่างนิลเกิลและเฮเทอโรอะตอม (E_b = 826 kJ/mol) ซึ่งนำไปสู่การกระจายตัวที่ดีของอนุภาคนิกเกิลระดับนาโน ผลลัพธ์นี้ช่วยเพิ่มพื้นที่ผิวของปฏิกิริยาสำหรับการดูดซับไฮโดรเจนและป้องกันการรวมตัวของอนุภาคนิลเกิลเมื่อการกักเก็บไฮโดรเจน 10 รอบ พลังงานการดูดซับที่คำนวณได้คือ -88 kJ/mol H_2 แสดงถึงลักษณะการดูดซับทางเคมีที่แข็งแรง โดยมีระยะพันธะนิลเกิลกับไฮโดรเจนเฉลี่ย 1.71 อังสตรอง ยิ่งไปกว่านั้นผลการคำนวณประจุยังระบุว่า โลหะนิลเกิลแบ่งปันอิเล็กตรอนให้กับไฮโดรเจนเพื่อสร้างพันธะนิลเกิล-ไฮโดรเจน (Ni-H) เนื่องจากไฮโดรเจนมีค่าอิเล็กโทรเนกาติวิตีมากขึ้น นอกจากนี้กลไกการดูดซับไฮโดรเจนไม่ได้เป็นเพียงการดูดซับทางเคมีของอะตอมไฮโดรเจนที่ดูดซับไปยังอนุภาคนาโนของ Ni เท่านั้น แต่ยังรวมถึงการดูดซับทางกายภาพและการรั่วไหลของไฮโดรเจนอีกด้วย ดังนั้นประสิทธิภาพการดูดซับไฮโดรเจนจึงสามารถปรับปรุงได้โดยการเพิ่มพื้นที่ผิว และการกระจายตัวของอนุภาคนิกเกิลระดับนาโนบนพื้นผิวคาร์บอน

สาขาวิชาเคมี ลงมือชื่อนักศึกษา ณัฐาพร ทวีลาภ

ปีการศึกษา 2562 ลงมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา

NATTHAPORN THAWEELAP : HYDROGEN ADSORPTION ON NICKEL SUPPOERTED ON ACTIVATED CARBON NANOFIBERS. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. RAPEE UTKE, Ph.D. 59 PP.

DISSOCIATIVE ADSORPTION/ HYDROGEN STORAGE/METAL DOPED CARBON/ REVERSIBILITY/ DFT CALCULATION/ FIRST-PRINCIPLE COMPUTATIONS.

In this thesis, activated carbon nanofibers (ACNF/PVP) prepared by carbonization and chemical activation of polyacrylonitrile (PAN)-polyvinylpyrrolidone (PVP) electrospun nanofibers and doped with 5-20 wt. % Ni are proposed for hydrogen adsorption at room temperature. The excellent hydrogen adsorption capacities of up to 2.12 wt. % H_2 ($p(H_2)$=100 bar) and cycling stability upon 10 cycles with average capacity of 1.17 wt. % H_2 ($p(H_2)$=50 bar) are obtained from 5Ni-ACNF/PVP. Computations and experiments confirm strong interactions between Ni and heteroatoms (E_b=826 kJ/mol), leading to good distribution of Ni nanoparticles. The latter results enhance reactive surface area for hydrogen adsorption and preventing agglomeration of Ni particles upon cycling. The calculated adsorption energy of -88 kJ/mol H_2 implies strong chemisorption character with an average Ni–H bond distance of 1.71 Å. Furthermore, The Bader charge indicated Ni shared its electrons to H to form Ni–H bonds due to greater electronegativity of H. Besides, hydrogen adsorption mechanisms are not only chemisorption of adsorbed hydrogen atoms onto Ni nanoparticles but also physisorption and spillover of hydrogen. Therefore, hydrogen adsorption performance could be improved by the enhanced

reactive surface area and uniform distribution of Ni nanoparticles on the carbon surface.

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

School of Chemistry

Academic Year 2019

Student's Signature

Advisor's Signature