บทที่ 5
สรุปและข้อเสนอแนะ

5.1 สรุปผล

ถ่านกัมมันต์ที่เจือด้วยออกซิเจนและไนโตรเจนถูกสังเคราะห์จากกิ่งพุทราซึ่งเป็นวัสดุชีวมวลเหลือทิ้งทางการเกษตร โดยใช้วิธีการให้ความร้อนและสารเคมีร่วมกัน ในกระบวนการสังเคราะห์ยูเรียถูกชุบลงในถ่านกัมมันต์เพื่อเพิ่มปริมาณไนโตรเจน ตามด้วยการกระตุ้นโดยใช้ความร้อนและ KOH เพื่อเปลี่ยนให้เป็นถ่านกัมมันต์ที่เจือด้วยออกซิเจนและไนโตรเจน การปรับปรุงนี้ไม่เพียงแต่ช่วยเพิ่มการมีอยู่ของหมู่ไนโตรเจนเท่านั้น แต่ยังส่งผลให้เกิดการพัฒนาและเพิ่มขนาดรูพรุนที่เหนือกว่า (0.8–1.3 nm) พื้นที่ผิวจำเพาะ และปริมาตรรูพรุน ซึ่งถ่านกัมมันต์ที่ได้รับการปรับปรุงนี้เรียกว่าถ่านกัมมันต์ที่เจือด้วยออกซิเจนและไนโตรเจน อีกทั้งยังแสดงให้เห็นการปรับปรุงที่น่าทึ่งจากความสามารถในการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนโดยสูงถึง 2.62 wt% ที่ −196 °C และ 1 bar ซึ่งเหนือกว่าประสิทธิภาพของถ่านกัมมันต์อื่นๆ อีกหลายตัวที่มาจากรายงานวิจัยอื่น ในแง่ของการใช้งานการมีขนาดรูพรุนที่เหนือกว่าไม่เพียงแต่ช่วยเพิ่มความสามารถในการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนเท่านั้น แต่ยังส่งผลให้ความร้อนของการดูดซับลดลง ทำให้ได้เปรียบสำหรับการใช้งานในการทำความเย็น ยิ่งไปกว่านั้นถ่านกัมมันต์ที่เจือด้วยออกซิเจนและไนโตรเจนที่ได้รับการปรับปรุงแสดงให้เห็นถึงความสามารถในการทำงาน หรือความจุที่ใช้งานได้จากความสามารถในการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนที่สูงขึ้นที่อุณหภูมิ −196 °C และการคายซับแก๊สไฮโดรเจนออกจากรูพรุนที่อุณหภูมิ 25 °C และ 1 bar มากขึ้นเมื่อเปรียบเทียบกับถ่านกัมมันต์ดั้งเดิม

เพื่อตรวจสอบและศึกษาการทดลองเพิ่มเติมแบบจำลอง GCMC จึงถูกใช้เพื่อศึกษาอิทธิพลของหมู่ฟังก์ชัน ขนาดความกว้างของรูพรุน และปริมาตรของรูพรุนต่อพฤติกรรมการดูดซับแก๊สไฮโดรเจน การจำลอง GCMC จะให้ข้อมูลเชิงลึกในระดับโมเลกุลโดยละเอียดเกี่ยวกับการกระจายตัวของความร้อนและจุดเริ่มต้นของการดูดซับโมเลกุล ซึ่งจะช่วยเพิ่มความเข้าใจเกี่ยวกับไอโซเทอมที่ความดันต่ำ (น้อยกว่า 0.3 bar) และมีการระบุความกว้างของรูพรุนที่เหมาะสมที่สุดคือ 6.5 nm ซึ่งช่วยเพิ่มความสะดวกในการทำให้เกิดการดูดซับแบบชั้นเดียวที่สมบูรณ์ และในช่วงความดันปานกลาง (0.3–15 bar) ความจุในการดูดซับสูงสุดถูกพบที่ช่วงความกว้างของรูพรุน 0.95–1.5 nm โดยขึ้นอยู่กับความดัน โดยเฉพาะอย่างยิ่งถ่านกัมมันต์ที่ได้รับการปรับปรุง ซึ่งมีขนาดรูพรุนที่เหนือกว่าในช่วง 0.8–1.3 nm แสดงการดูดซับเพิ่มขึ้นที่ 1 bar อย่างไรก็ตามที่ความดันสูงกว่า (มากกว่า 15 bar) ปริมาตรรูพรุนมีบทบาทสำคัญในการกำหนดความจุในการดูดซับมากกว่าความกว้างของรูพรุน

และเคมีพื้นผิวมีบทบาทสำคัญในการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนที่ความดันต่ำและปานกลาง จนกระทั่งโมเลกุลถูกดูดซับถึงจุดอิ่มตัว แรงกระทำระหว่างหมู่ฟังก์ชันกับแก๊สไฮโดรเจนเป็นไปตามลำดับดังนี้ Ox-N6 > COOH > N5 > COH > CO > NQ ภายในรูพรุนเดียวกัน ซึ่งไม่เพียงแต่ขนาดรูพรุนที่เหนือกว่าเท่านั้น แต่ยังมีแนวโน้มว่าหมู่ฟังก์ชัน Ox-N6 จะได้รับการปรับปรุงบนพื้นผิวของแข็งในระหว่างการปรับปรุงด้วยอุณหภูมิและเวลาในการทดลอง และผลจากการจำลองแสดงให้เห็นถึงความเข้ากันได้ดีกับข้อมูลการทดลอง และนำเสนอกลยุทธ์ที่มีศักยภาพในการเพิ่มขนาดรูพรุนและเคมีพื้นผิวเพื่อให้ได้การดูดซับแก๊สไฮโดรเจนที่เหนือกว่าในวัสดุคาร์บอนที่มีรูพรุนตลอดช่วงความดันที่กว้าง รวมไปถึงในช่วงความดันต่ำ ความดันปานกลาง และความดันสูง

5.2 ข้อเสนอแนะ

จากการศึกษาการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนในถ่านกัมมันต์ดั้งเดิม และถ่านกัมมันที่เจือด้วยออกซิเจนและไนโตรเจน ทั้งการทดลองและการจำลองสามารถต่อยอดเพิ่มขึ้นได้ โดยทางผู้เขียนมีข้อเสนอแนะดังต่อไปนี้

5.2.1 เพิ่มการศึกษาการปรับปรุงพื้นผิวและหมู่ฟังก์ชันที่หลากหลายมากยิ่งขึ้นสำหรับใช้ในการกระตุ้นถ่านกัมมันต์

5.2.2 เพิ่มการศึกษาผลกระทบของอุณหภูมิและระยะเวลาในการกระตุ้นถ่านกัมมันต์ และถ่านกัมมันที่เจือด้วยออกซิเจนและไนโตรเจน

5.2.3 ศึกษาผลกระทบจากหมู่ฟังก์ชันในถ่านกัมมันต์ที่ทำการปรับปรุงสำหรับการดูดซับแก๊สชนิดอื่นๆ เช่น มีเทน คาร์บอนไดออกไซด์ และคาร์บอนมอนอกไซด์ เป็นต้น

5.2.4 เพิ่มการศึกษาการจำลองการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนในแบบจำลองรูปทรงอื่นๆ และศึกษาการอิทธิพลของชนิด ความเข้มข้น และการเรียงตัวของหมู่ฟังก์ชันในแบบจำลอง