นายศุภกร อนุชิตสกล : การศึกษาการทดลองและการจำลองการกักเก็บแก๊สไฮโดรเจนในถ่านกัมมันต์ที่เจือด้วยออกซิเจนและไนโตรเจนที่เตรียมจากกิ่งพุทรา (EXPERIMENTAL AND SIMULATION STUDY OF HYDROGEN STORAGE IN OXYGEN AND NITROGEN CO-DOPED ACTIVATED CARBON PREPARED FROM JUJUBE BRANCHES)
อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.นิคม กลมเกลี้ยง, 64 หน้า.

คำสำคัญ: การดูดซับ/ไฮโดรเจน/ถ่านกัมมันต์ที่เจือด้วยออกซิเจนและไนโตรเจน/วัสดุชีวมวล/แบบจำลองเชิงโมเลกุล

ในปัจจุบันความต้องการในการใช้พลังงานทั่วโลกเพิ่มมากขึ้น โดยประชากรโลกส่วนใหญ่อาศัยพลังงานจากแหล่งพลังงานที่ใช้แล้วหมดไปที่เป็นมลพิษต่อสิ่งแวดล้อม ดังนั้นในงานวิจัยนี้จึงศึกษาแก๊สไฮโดรเจนที่เป็นมิตรต่อสิ่งแวดล้อม และใช้ถ่านกัมมันต์ที่เตรียมจากกิ่งพุทราในการกักเก็บแก๊สไฮโดรเจน โดยถ่านกัมมันต์ถูกเตรียมจากกระบวนการการให้ความร้อนและการกระตุ้นทางเคมีในการปรับปรุงถ่านกัมมันต์นั้นสังเคราะห์ได้จากกระบวนการการกระตุ้นด้วยโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ (KOH) ร่วมกับยูเรีย และศึกษาผลของอุณหภูมิและระยะเวลาในการกระตุ้น พบว่าการปรับปรุงถ่านกัมมันต์มีส่วนในการพัฒนาขนาดของรูพรุนที่เหมาะสมและหมู่ฟังก์ชันบนพื้นผิว นอกจากนี้ในการทดลองการเพิ่มอุณหภูมิและระยะเวลาในการกระตุ้นส่งผลให้ปริมาตรรูพรุนทั้งหมดและพื้นที่ผิวจำเพาะเพิ่มมากขึ้น

การศึกษาการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนที่อุณหภูมิ −196 และ 25 °C ภายใต้ความดันจนถึง 1 bar ในวัสดุที่สังเคราะห์ พบว่าถ่านกัมมันต์ที่เจือด้วยออกซิเจนและไนโตรเจนมีพื้นที่ผิวจำเพาะสูงที่สุดและความสามารถในการกักเก็บแก๊สไฮโดรเจน (2.62 wt%) เพิ่มขึ้นเป็นร้อยละ 47 จากถ่านกัมมันต์ที่ไม่ได้รับการปรับปรุงที่อุณหภูมิ −196 °C ในทางกลับกันที่ 25 °C ปริมาณการดูดซับของถ่านกัมมันต์ดั้งเดิมมีค่ามากกว่าปริมาณการดูดซับของถ่านกัมมันต์ที่ทำการปรับปรุง ซึ่งถือเป็นข้อได้เปรียบสำหรับงานวิจัยนี้ เนื่องจากความสามารถในการคายซับแก๊สไฮโดรเจนออกจากรูพรุนจากการเพิ่มอุณหภูมิและยิ่งไปกว่านั้น ยังช่วยให้ความสามารถในการทำงาน หรือความจุที่ใช้งานได้ของแก๊สไฮโดรเจนเพิ่มมากขึ้นจากรูพรุนที่อุณหภูมิ 25 °C และ 1 bar อย่างไรก็ตามถ่านกัมมันต์ดั้งเดิมมีความจุสูงกว่าที่ความดันต่ำ (น้อยกว่า 0.3 bar) เนื่องจากขนาดของรูพรุน การค้นพบนี้อธิบายโดยใช้วิธีแกรนด์ คาโนนิคอล มอนติคาร์โล (GCMC) ในการจำลองการดูดซับแก๊สไฮโดรเจนที่อุณหภูมิ −196 และ 25 °C โดยหมู่ฟังก์ชันของออกซิเจน และไนโตรเจนได้แก่ คาร์บอนิล (CO) ไฮดรอกซิล (COH) คาร์บอกซิล (COOH) Pyrrolic (N5) Pyridinic-N oxide (Ox-N6) และ Quaternary-N (NQ) ถูกนำไปใช้ในวัสดุดูดซับ จากการจำลองพบว่าความกว้างของรูพรุนที่เหมาะสมที่สุดคือ 0.65 nm ที่ความ

ดันต่ำกว่า 0.3 bar และที่รูพรุน 0.95–1.5 nm ที่ความดันในช่วงปานกลาง (0.3–15 bar) ขนาดของรูพรุนที่เหนือกว่านั้นสังเกตได้ในช่วง 0.8–1.3 nm ที่ความดัน 1 bar ซึ่งมีส่วนช่วยในการเพิ่มประสิทธิภาพของถ่านกัมมันต์ที่เจือด้วยออกซิเจนและไนโตรเจน เพื่อให้ได้การดูดซับที่มากกว่าถ่านกัมมันต์ชนิดอื่นที่อธิบายไว้ในรายงานวิจัย นอกจากนี้ที่ความดันสูงกว่า 15 bar ปริมาตรรูพรุนจะมีอิทธิพลต่อความจุมากกว่าความกว้างของรูพรุน และในบรรดาหมู่ฟังก์ชันของออกซิเจน และไนโตรเจนนั้นหมู่ Ox-N6 นั้นมีปริมาณมากที่สุดและมีบทบาทสำคัญที่ความดันต่ำและปานกลาง ซึ่งการค้นพบนี้ชี้ให้เห็นถึงแนวทางในการกักเก็บแก๊สไฮโดรเจนที่ดีกว่าในคาร์บอนที่มีรูพรุนภายใต้สภาวะความดันต่างๆ

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนักศึกษา ศุภกร อนุโพธกล

ปีการศึกษา 2566 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา นิกม กองแก้ว

SUPHAKORN ANUCHITSAKOL : EXPERIMENTAL AND SIMULATION STUDY OF HYDROGEN STORAGE IN OXYGEN AND NITROGEN CO-DOPED ACTIVATED CARBON PREPARED FROM JUJUBE BRANCHES.
THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. NIKOM KLOMKLIANG, Ph.D., 64 PP.

Keywords: Adsorption/Hydrogen/Oxygen and nitrogen co-doped activated carbon/ Biomass/Simulation

At present, the demand for energy around the world is increasing. The majority of the world's population relies on energy from nonrenewable energy sources that pollute the environment. Therefore, in this work, environmentally friendly hydrogen gas was studied, and activated carbon prepared from jujube branches was used to store hydrogen gas. Activated carbon was prepared through heat treatment and chemical activation processes. In modifying activated carbon, it was synthesized from the activation process with potassium hydroxide (KOH) combined with urea. The effect of temperature and time in the activation process was studied. It was discovered that the modification of activated carbon contributed to the enhancement of the optimum pore size and surface functional groups. Additionally, in the experiment, raising the activation temperature and time improved the total pore volume and specific surface area.

We studied hydrogen adsorption at −196 and 25 °C under pressures up to 1 bar in the synthesized materials. We found that oxygen and nitrogen co-doped activated carbon exhibited the highest specific surface area and hydrogen storage capacity (2.62 wt%), increasing to 47% from unmodified activated carbon at −196 °C. On the other hand, at 25 °C, the adsorption capacity of the original activated carbon was greater than the adsorption capacity of the modified activated carbon. This is an advantage for this research because of its ability to release hydrogen gas from the pores by increasing the temperature. And more than that, it facilitated a greater working capacity or useable capacity of hydrogen gas from the pores at 25 °C and 1 bar. However, original activated carbon had a higher capacity at lower pressures (less than 0.3 bar) because of the pore size. This finding was described using a Grand canonical

Monte Carlo (GCMC) approach to simulate hydrogen adsorption at −196 and 25 °C. Functional groups of oxygen and nitrogen namely carbonyl (CO), hydroxyl (COH), carboxylic (COOH), pyrrolic (N5), pyridinic-N oxide (Ox-N6), and quaternary-N (NQ) groups were applied to the absorbent material. The simulations revealed that the optimum pore width is 0.65 nm at pressures below 0.3 bar and 0.95–1.5 nm at medium pressures (0.3–15 bar). Superior pore size is observed in the range of 0.8–1.3 nm at a pressure of 1 bar, which contributes to increasing the efficiency of oxygen and nitrogen co-doped activated carbon to achieve greater adsorption than other activated carbons described in literature. Moreover, at pressures above 15 bar, pore volume has a stronger influence on capacity than pore width. Among the oxygen and nitrogen functional groups, the Ox-N6 group is the most abundant and plays an important role at low and medium pressures. These findings suggest a strategy for better hydrogen storage in porous carbons under various pressure conditions.

School of Chemical Engineering
Academic Year 2023

Student's Signature Suphakorn Aruchitsakol
Advisor's Signature Nikom Klomkliang