ภุชงค์ ศรีหลิ่ง : การศึกษาการดูดซับมีเทนและไฮโดรเจนในถ่านกัมมันต์ที่มีนิกเกิลบนพื้นผิวโดยแบบจำลองมอนติคาร์โล (STUDY OF METHANE AND HYDROGEN ADSORPTION IN ACTIVATED CARBON WITH NICKEL ON ITS SURFACE BY MONTE CARLO SIMULATION) อาจารย์ที่ปรึกษา : ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.อติชาต วงศ์กอบลาภ, 88 หน้า

งานวิจัยนี้ได้ทำการเตรียมถ่านกัมมันต์ที่มีนิกเกิลเป็นตัวเร่งปฏิกิริยาบนพื้นผิวใช้แกรนด์คาโนนิคัลมอนติคาร์โล ในการศึกษาการดูดซับแก๊สไนโตรเจน ไฮโดรเจน และมีเทนในถ่านกัมมันต์ที่มีนิกเกิลอยู่บนพื้นผิว โดยนิกเกิลได้ถูกจำลองให้วางไว้ที่บริเวณขอบของแผ่นกราฟีน ในปริมาณที่แตกต่างกันตั้งแต่ 0-6% โดยน้ำหนัก จากนั้นจึงนำข้อมูลการดูดซับของไนโตรเจนที่ 77 เคลวิน มาทำการวิเคราะห์หาการกระจายขนาดของรูพรุน(Pore Size Distribution) ของถ่านกัมมันต์ที่มีนิกเกิลเป็นตัวเร่งปฏิกิริยาบนพื้นผิวโดยใช้ MP-method ในแบบจำลองการดูดซับของไฮโดรเจนได้ทำการศึกษาที่อุณหภูมิ 298 และ 323 เคลวิน และมีเทนได้ทำการศึกษาที่อุณหภูมิ 298, 303 และ 308 เคลวิน ได้ศึกษาการจำลองการดูดซับแก๊สบนแบบจำลองของถ่านกัมมันต์ที่มีขนาดต่างๆกันและผลของโลหะนิกเกิลต่อการดูดซับแก๊ส จากการศึกษาพบว่าผลจากการเติมหมู่โลหะนิกเกิลส่งผลให้เกิดการดูดซับได้ดีขึ้นในช่วงที่มีความดันต่ำ ปริมาณการดูดซับจะเพิ่มขึ้นตามปริมาณนิกเกิลบนพื้นผิวที่เพิ่มขึ้น เมื่อนำข้อมูลการกระจายขนาดของรูพรุนมาสร้างไอโซเทิร์มการดูดซับของมีเทน จะพบว่าตัวอย่างที่มีปริมาณนิกเกิล 1% จะมีปริมาณการดูดซับมากกว่าถ่านกัมมันต์ที่ไม่ผ่านการปรับปรุงพื้นผิวถึง 27% ในส่วนของผลของอุณหภูมิที่ทำการดูดซับจะพบว่าปริมาณการดูดซับจะเพิ่มขึ้นตามอุณหภูมิที่ลดลง ซึ่งเป็นเหตุการณ์ปกติของการดูดซับทางกายภาพ พฤติกรรมการดูดซับที่เกิดขึ้นแสดงให้เห็นว่าการเติมหมู่โลหะนิกเกิลบนพื้นผิวของถ่านกัมมันต์จะช่วยเพิ่มความสามารถในการดูดซับมีเทนและไฮโดรเจนได้ดียิ่งขึ้น

สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนักศึกษา_____

ปีการศึกษา 2558 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา_____

PUCHONG SRILING : STUDY OF METHANE AND HYDROGEN ADSORPTION IN ACTIVATED CARBON WITH NICKEL ON ITS SURFACE BY MONTE CARLO SIMULATION. THESIS ADVISOR : ASST. PROF. ATICHAT WONGKOBLAP, Ph.D., 88 PP

ACTIVATED CARBON/ADSORPTION/MONTE CARLO/SIMULATION/NICKEL

In this work, the activated carbon with nickel on its surface has been prepared and a Grand Canonical Monte Carlo simulation (GCMC) method is used to study the adsorption of nitrogen, hydrogen and methane on activated carbon whose surface contain nickel catalyst. Nickel is placed at the edge of graphene and varied from 0-6% by weight. Nitrogen adsorption isotherm at 77K were used to analyses the pore size distribution of activated carbons based catalyst using MP method. The simulation of hydrogen adsorptions were studied at 298 and 323K, while those of methane were studied at 298, 303 and 308K. The isotherm obtained by Monte Carlo simulation for various pore sizes were studied and the effect of nickel on carbon surfaces was also investigated. It was found that an early onset in adsorption isotherm was observed and the adsorption isotherm increased with an increase of nickel. The pore size distribution derived from nitrogen adsorption data was used to predict the adsorption isotherm for methane adsorption. Adsorption of methane on activated carbon with 1% nickel on surface was greater than that of homogeneous carbon about 27%. The temperature effect was found that the adsorption increased when the temperature decreased which is typically observed for physisorption. The nickel on surface of activated carbon can be used to enhance the adsorption of methane and hydrogen.

School of Chemical Engineering Student's Signature _____

Academic Year 2015 Advisor's Signature _____