บทคัดย่อ

การออกแบบตัวเร่งปฏิกิริยาและการศึกษากระบวนการเร่งปฏิกิริยาเคมีระดับโมเลกุล –เป็นงานวิจัยด้านหนึ่งที่มีบทบาทและเป็นประโยชน์อย่างมาก ต่อการพัฒนาอุตสาหกรรมเคมีและปิโตรเคมี ซึ่งจากการศึกษาโดยอาศัยความรู้ด้านนาโนเทคโนโลยีของวัสดุนาโนที่มีรูพรุน พบว่า ตัวเร่งปฏิกิริยาที่มีโครงสร้างในระดับนาโนเมตรแสดงสมบัติพิเศษแตกต่างไป เช่น มีความว่องไวสูงและมีคุณสมบัติที่ดีในการเลือกเกิดปฏิกิริยาที่จำเพาะกับขนาดและรูปร่างของโมเลกุล ดังนั้นการออกแบบตัวเร่งปฏิกิริยาเพื่อให้ได้คุณสมบัติตามต้องการและมีประสิทธิภาพสูงสุดนั้น จำเป็นอย่างยิ่งที่จะต้องเข้าใจโครงสร้างระดับนาโนเมตร อิทธิพลของโครงสร้างต่อสมบัติทางเคมีและสมบัติทางกายภาพและกลไลการเกิดปฏิกิริยาเคมีในระดับโมเลกุล

คณะวิจัยได้ดำเนินงานวิจัยอย่างต่อเนื่องเพื่อพัฒนางานวิจัยด้านการออกแบบ สังเคราะห์และวิเคราะห์วัสดุที่มีโครงสร้างระดับนาโนเมตร โดยเฉพาะอย่างยิ่งวัสดุนาโนที่มีรูพรุนในกลุ่มซีโอไลต์ เพราะเป็นตัวเร่งปฏิกิริยาที่มีประสิทธิภาพสูงในหลากหลายปฏิกิริยาที่มีความสำคัญในอุตสาหกรรมเคมีและปิโตรเคมี โดยได้ทำการปรับปรุงโครงสร้างของซีโอไลต์ทั้งขนาดผลึกและขนาดของรูพรุน เพื่อแก้ปัญหาเกี่ยวการแพร่ของสารตั้งต้นหรือสารผลิตภัณฑ์ที่มีขนาดใหญ่ เช่น โมเลกุลไฮโดรคาร์บอนในน้ำมันดิบจากแหล่งปิโตรเลียมธรรมชาติ ซึ่งมีผลให้ซีโอไลต์มีประสิทธิภาพในการเร่งปฏิกิริยาดีขึ้น นอกเหนือจากการสังเคราะห์และทดสอบประสิทธิภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาในห้องปฏิบัติการจริงแล้ว คณะวิจัยยังได้ศึกษาทางทฤษฎีด้วยการคำนวนทางเคมีคอมพิวเตอร์ควบคู่กัน โดยการจำลองแบบโครงสร้างซีโอไลต์ที่ถูกดัดแปลงซึ่งมีผลต่อประสิทธิภาพในการเร่งปฏิกิริยาที่ศึกษา เสนอและอธิบายกลไกการเกิดปฏิกิริยา คำนวณค่าคงที่ทางจลนพลศาสตร์และอุณหพลศาสตร์ ในแต่ละขั้นตอนของปฏิกิริยาพื้นฐานเพื่อทำนายผลการทดลอง ซึ่งการวิเคราะห์ข้อมูลต่างๆเหล่านี้นำไปสู่การพัฒนาตัวเร่งปฏิกิริยาซีโอไลต์ได้อย่างมีประสิทธิผลมากขึ้น นอกจากนี้คณะวิจัยยังได้ศึกษาวัสดุนาโนที่มีรูพรุนอื่นๆ เช่น Nanoporous carbons, Metal-organic frameworks และ Nanoporous alkali halide polymophs เพื่อให้ได้ข้อมูลอันเป็นแนวทางในการประยุกต์ใช้งานด้านต่างๆ อาทิเช่น ด้านอิเลคทรอนิกส์ พลังงาน และการแพทย์

ตลอดระยะเวลา 3 ปีของการดำเนินโครงการ คณะวิจัยสามารถตีพิมพ์ผลงานในวารสารวิชาการนานาชาติชั้นนำจำนวนทั้งสิ้น 29 ผลงาน โดยเป็นงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการออกแบบโครงสร้างเพื่อพัฒนาคุณสมบัติของตัวเร่งปฏิกิริยาซีโอไลต์มากถึง 13 ผลงาน และงานวิจัยด้านวัสดุนาโนรูพรุนชนิดอื่นๆ อีก 16 ผลงาน ซึ่งผลผลิตจากคณะวิจัยโครงการฯนี้ ถือเป็นองค์ความรู้ที่สำคัญและเป็นประโยชน์อย่างยิ่งต่อภาคการผลิตในอุตสาหกรรมเคมีและปิโตรเคมี ซึ่งจะนำไปสู่ความร่วมมือด้านงานวิจัยของประเทศต่อไปในอนาคต

Abstract

Our research project has been carefully developed to focus on molecular design, fabrication and characterization of nanostrcutured and nanoporous materials, in particular, on design, synthesis and reaction mechanism of the industrially important zeolite catalysts. Our newly developed synthetic methods are able to effectively control their crystals and pore sizes for facilitating the diffusion of the large chemical molecules such as the long chain hydrocarbon compounds. These excellent properties are very important and one of the essential key factors for cracking reactions frequently undertaken in Thai chemical industries. In addition to this, fine experiments, either state-of-the-art syntheses or the high performance of catalysts, the Nanoscale ab initio electronic structure theory and cutting-edge simulations are also employed as effective tools to design the molecular structure and reaction mechanisms and, more importantly, to derive kinetic and thermodynamic parameters which are employed to predict the feasibility of reaction. Thus, the combined state-of-the-art methods lead to the fabrication of novel and high efficiency nanoporous and nanostructured materials. Moreover, other porous materials including nanoporous carbons, metal-organic frameworks and nanoporous alkali halide polymophs are investigated. Such systematic and accurate findings provide not only reliable data for experimental and theoretical researchers for further development, but real-time beneficial information for utilizing them as nano-materials for many important areas such as, chemical, electronic, energy and medical applications.

Our small project of 3 MB could generate 29 articles published in prestige international journals, each with a very high impact factor, including the American Chemical Society Journals and Royal Society of Chemistry, England. These scientific outputs are crucial and indeed beneficial information for creating nano-materials used in chemical and petrochemical industries and do lead to collaboration between academic and industrial sections to propel the development of the potential researches in Thailand.