

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ: MRG5280122

ชื่อโครงการ: การจำลองระดับโมเลกุลของการดูดซับของคาร์บอนไดออกไซด์ มีเทน และก๊าซผสมของสารทั้งสองในรูพรุนของถ่าน

ชื่อนักวิจัย และสถาบัน:

- 1) ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. อติชาต วงศ์กอบलग มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี
- 2) ศาสตราจารย์ ดร. ชัยยศ ตั้งสฤติย์กุลชัย มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี
- 3) ศาสตราจารย์ ดร. จวง โต The University of Queensland

อีเมล: atichat_w@hotmail.com, atichat@sut.ac.th

ระยะเวลาโครงการ: 16 มีนาคม 2552 ถึง 30 กันยายน 2556

บทคัดย่อ:

การศึกษานี้เป็นการศึกษาการดูดซับของก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ (CO_2) มีเทน (CH_4) และก๊าซผสมทั้งสองในมัดท่อนาโนคาร์บอนผนังเดี่ยวหรือถ่านกัมมันต์ โดยใช้วิธีการสร้างแบบจำลองด้วยคอมพิวเตอร์ด้วยวิธีมอนติคาร์โล (Monte Carlo) และทำการทดลองการดูดซับก๊าซในห้องปฏิบัติการ แบบจำลองโมเลกุลของมีเทนจะเป็นทรงกลมในขณะที่แบบจำลองโมเลกุลของคาร์บอนไดออกไซด์จะประกอบด้วยศูนย์กลางอะตอมสามจุดจัดเรียงตัวเป็นแนวเดียวกัน แบบจำลองของถ่านกัมมันต์ที่ใช้จะใช้เป็นแบบร่อง (slit pore) ซึ่งประกอบด้วยแผ่นแกรไฟต์ที่มีความยาวจำกัดสองด้านวางคู่ขนานกัน และแบบจำลองของท่อนาโนจะประกอบด้วยด้วยท่อทรงกระบอกจำนวนเจ็ดท่อจัดเรียงตัวกันเป็นรูปทรงหกเหลี่ยม โดยมีหนึ่งท่ออยู่ตรงกลาง จากผลการทดลองพบว่าที่อุณหภูมิเดียวกันก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์จะดูดซับในถ่านที่มีรูพรุนได้มากกว่าก๊าซมีเทน สำหรับทุกๆ ตัวอย่างถ่านที่ใช้ในการทดลอง ผลของอุณหภูมิพบว่า การดูดซับจะเกิดขึ้นได้มากขึ้นที่อุณหภูมิต่ำ แสดงว่าการดูดซับก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์หรือมีเทนเป็นการดูดซับทางกายภาพ เมื่อเปรียบเทียบการดูดซับก๊าซของถ่านกัมมันต์และท่อนาโนคาร์บอนที่อุณหภูมิเดียวกันพบว่าท่อนาโนคาร์บอนสามารถดูดซับก๊าซได้เร็วกว่าถ่านกัมมันต์ สิ่งแปลกปลอมบนพื้นผิวถ่านช่วยให้การดูดซับก๊าซเกิดขึ้นได้เร็วขึ้นโดยดูดซับได้ด้วยความดันต่ำลงมา จากการเปรียบเทียบผลที่ได้จากการจำลองและการทดลองในห้องปฏิบัติการ พบว่าให้ผลที่สอดคล้องกันดี จากการศึกษาในเรื่องนี้จะช่วยให้เกิดความเข้าใจในพฤติกรรมของการดูดซับของก๊าซทั้งสองในถ่านกัมมันต์และท่อนาโนคาร์บอน โดยเฉพาะอย่างยิ่งความสามารถในการแข่งขันดูดซับในรูพรุนของถ่าน ซึ่งสามารถนำไปประยุกต์ใช้ในเรื่องการแยกสารออกจากกันหรือการศึกษาการกักเก็บก๊าซไว้ใช้เป็นพลังงานต่อไป

คำหลัก : ถ่านกัมมันต์, ท่อนาโนคาร์บอน, คาร์บอนไดออกไซด์, มีเทน, แบบจำลองมอนติคาร์โล

Abstract

Project Code : MRG5280122

Project Title : Molecular Simulations of Adsorption of Carbon dioxide, Methane and their mixture in Carbon Nanopores

Investigator :

- | | |
|---|------------------------------------|
| 1) Assistant Professor Dr. Atichat Wongkoblap | Suranaree University of Technology |
| 2) Professor Dr. Chaiyot Tangsathitkulchai | Suranaree University of Technology |
| 3) Professor Dr. Duong Do | The University of Queensland |

E-mail Address : atichat_w@hotmail.com, atichat@sut.ac.th

Project Period : March 16, 2009 to September 30, 2013

Abstract:

A Grand Canonical Monte Carlo (GCMC) simulation is used to study the adsorption of fluid in either activated carbon or single wall carbon nanotubes (SWCNs), while the experiment is performed by using a Gravimetric Analyzer. Methane is assumed to be a spherical model, while carbon dioxide is modeled as a 3-center-Lennard Jones (LJ) molecule. Activated carbon is assumed to be a parallel pair of finite-length graphene layers while that of SWCNs is the carbon-based adsorbents whose pores are cylinder. This model has seven tubes which arranged in a hexagonal form with one tube at the center of the hexagon and the other six are placed on the vertices of the hexagon. Adsorption of CO₂ in porous carbons is greater than that of CH₄ in the same sample of carbons and at the same temperature. The adsorption of fluid decreases by increasing temperature. An early onset of the isotherm and a lower saturated adsorbed amount inside the tubes are observed in the case of carbon nanotubes. Surface heterogeneity on graphene layer also affect the isotherm, CO₂ and CH₄ can be absorbed at lower pressures. The adsorption isotherm obtained for the finite-length pores agree significantly well with the experimental data. This study will provide the understanding of the adsorption behaviors of CO₂ and CH₄ in SWCNs and activated carbon, especially the competitive adsorption of a gas mixture on nanopores should have the potential in industrial applications such as energy storage and gas separation.

Keywords: activated carbon, carbon nanotubes, carbon dioxide, methane, Monte Carlo simulation