

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ MRG5480175
ชื่อโครงการ การจำลองแบบอนุภาคขนาดนาโนของแพลเลเดียมบนผิวท่อคาร์บอน
ขนาดนาโนสำหรับการเร่งปฏิกิริยาและการดูดซับ
ชื่อนักวิจัย ผศ.ดร.ชาญ อินทร์แท้ มหาวิทยาลัยอุบลราชธานี
E-mail Address inntam@gmail.com
ระยะเวลาโครงการ 15 มิถุนายน 2554 – 14 มิถุนายน 2556

งานวิจัยนี้เป็นการศึกษาการดูดซับโลหะแพลเลเดียมคลัสเตอร์ขนาด 2-5 อะตอม (Pd_n , $n=2-5$) บนผิวท่อคาร์บอนขนาดนาโนแบบผนังเดี่ยว (SWNTs) ด้วยระเบียบวิธีฟังก์ชันความหนาแน่นที่ระดับการคำนวณ B3LYP/6-31G (d) โดยใช้แบบจำลองทางควอนตัมขนาด $\text{C}_{99}\text{H}_{20}$ แทนท่อคาร์บอนขนาดนาโนแบบผนังเดี่ยว จากผลการศึกษาพบว่ารูปร่างโลหะแพลเลเดียมคลัสเตอร์เมื่อเกาะติดบนผิวของท่อคาร์บอนจะมีรูปร่างเหมือนเดิมไม่มีการเปลี่ยนแปลงรูปร่าง แสดงให้เห็นว่าแรงยึดเหนี่ยวภายในโลหะคลัสเตอร์ระหว่างอะตอมแพลเลเดียมมีความแข็งแรงมากกว่าแรงระหว่างอะตอมแพลเลเดียมกับอะตอมคาร์บอนของท่อนาโน นอกจากนี้ยังได้ศึกษาการดูดซับโมเลกุลของคาร์บอนมอนอกไซด์บนโลหะแพลเลเดียมคลัสเตอร์ขนาด 2-5 อะตอมและบนสารประกอบ $\text{Pd}_4\text{-C}_{99}\text{H}_{20}$ พบว่าโมเลกุลคาร์บอนมอนอกไซด์จะถูกดูดซับบนสารประกอบ $\text{Pd}_4\text{-C}_{99}\text{H}_{20}$ ได้ดีกว่าบนโลหะแพลเลเดียมคลัสเตอร์ (Pd_4) แสดงให้เห็นว่าท่อคาร์บอนขนาดนาโนจะช่วยให้ดูดซับคาร์บอนมอนอกไซด์ได้ดียิ่งขึ้นกว่าเดิม ในตอนสุดท้ายเป็นการศึกษากัมมันตภาพในการเร่งปฏิกิริยาของสารประกอบ $\text{Pd}_4\text{-C}_{99}\text{H}_{20}$ สำหรับปฏิกิริยาออกซิเดชันของคาร์บอนมอนอกไซด์ จากการศึกษาทำให้ทราบว่าตัวเร่ง $\text{Pd}_4\text{-C}_{99}\text{H}_{20}$ นี้สามารถลดพลังงานกระตุ้นของปฏิกิริยานี้ได้ 7 kcal/mol เมื่อเทียบกับตัวเร่งโลหะแพลเลเดียมคลัสเตอร์ (Pd_4) และปฏิกิริยานี้เป็นกระบวนการคายพลังงาน ได้ 25.9 kcal/mol

คำหลัก: แพลเลเดียมคลัสเตอร์ ท่อคาร์บอนขนาดนาโนแบบผนังเดี่ยว ทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่น ปฏิกิริยาออกซิเดชันของคาร์บอนมอนอกไซด์

Abstract

Project Code MRG5480175
Project Title Design of Palladium Nanoparticles Deposited on Carbon Nanotubes for catalysis and Adsorption Applications
Investigator Asst.Prof. Chan Inntam Ubon Ratchathani University
E-mail Address inntam@gmail.com
Project Period 15 June 2011 – 14 June 2013

We have studied the adsorption of Pd_n ($n=2-5$) clusters on the single-walled carbon nanotubes (SWNTs) by means of the B3LYP/6-31G (d) hybrid density functional method. The quantum cluster model of $\text{C}_{99}\text{H}_{20}$ has been employed for representing the single-walled carbon nanotubes (SWNTs) with atomic vacancy. Our results showed that the Pd_n clusters remain the same geometry as found in gas phase. These results imply that the interaction between metal-metal of the Pd_n clusters is stronger than the interaction of the metal-SWNTs. Also, the adsorption of CO molecule on Pd_n ($n = 2-5$) has been investigated as well as on $\text{Pd}_4\text{-C}_{99}\text{H}_{20}$ complex. We found that the interaction of CO on $\text{Pd}_4\text{-C}_{99}\text{H}_{20}$ complex is stronger than that of on the Pd_4 cluster by about 10 kcal/mol. This indicates that the carbon nanotubes facilitate the adsorption of CO molecule. Finally, the reactivity of the $\text{Pd}_4\text{-C}_{99}\text{H}_{20}$ complex has been evaluated by studying the CO oxidation. The $\text{Pd}_4\text{-C}_{99}\text{H}_{20}$ complex decreases the activation energy of this oxidation reaction by 7 kcal/mol compared with the Pd_4 cluster. The reaction was found to be an exothermic process with 25.9 kcal/mol.

Keywords: Pd cluster, Single-walled carbon nanotubes, Density functional theory, CO oxidation