

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ: MRG5580055

ชื่อโครงการ: การศึกษาเชิงอิเล็กทรอนิกส์ เชิงแสง และเชิงการดูดซับไฮโดรเจนของวัสดุพื้นผิวสูง

ชื่อนักวิจัย: ผศ. ดร. พรจักร ศรีพัชรารุณ

E-mail Address: spornj@kku.ac.th

ระยะเวลาโครงการ: กรกฎาคม 2555 - กรกฎาคม 2557

โครงการวิจัยนี้เกี่ยวข้องกับการศึกษาเชิงคำนวณคุณสมบัติเชิงอิเล็กทรอนิกส์ เชิงแสง และเชิงการดูดซับไฮโดรเจนของวัสดุพื้นผิวสูงโดยอาศัยทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น สำหรับระบบ Covalent triazine based framework-1 (CTF-1) ผู้วิจัยทำการปรับแต่งโครงสร้างดังกล่าวด้วยการแทนที่อะตอม N ทุกอะตอมด้วย P, As และ Sb โดยพบว่าช่องว่างแถบพลังงานมีค่าอยู่ในช่วง 0 ถึง 2.02 eV นอกจากนี้ ผู้วิจัยได้ทำการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของ P และ As ในโครงสร้าง CTF-1 และพบว่าช่องว่างแถบพลังงานลดลงอย่างไม่เป็นเชิงเส้น นอกจากนี้ผู้วิจัยได้เสนอวิธีเพิ่มพลังงานดูดซับไฮโดรเจนในวัสดุ Covalent Organic Framework-366 (COF-366) และ Zeolitic Imidazolate Framework-23 (ZIF-23) โดยในรายงานวิจัยฉบับนี้ ผู้วิจัยได้ทำการปรับปรุงพลังงานดูดซับไฮโดรเจนโดย (1) การเติมแต่งโลหะ Li ลงบนพื้นผิวของวัสดุ COF-366 และการขยายส่วนของโลหะไนไตรด์คลัสเตอร์ในวัสดุ ZIF-23 สำหรับวัสดุ COF-366 ที่ถูกเติมแต่งด้วย Li ผู้วิจัยพบว่าพลังงานยึดเหนี่ยวไฮโดรเจนมีค่าอยู่ในช่วง 0.03 ถึง 0.22 eV/H₂ นอกจากนี้ ผู้วิจัยได้ทำการคำนวณความสามารถในการกักเก็บไฮโดรเจนของโครงสร้างดังกล่าว โดยพบว่าปริมาณดังกล่าวมีค่าเท่ากับ 2.06 1.58 และ 1.05 เปอร์เซนต์โดยน้ำหนักที่ความดันปกติและอุณหภูมิ 77 150 และ 298 เคลวิน ตามลำดับ สำหรับโครงสร้าง ZIF-23 ผลการคำนวณแสดงให้เห็นว่า โมเลกุลไฮโดรเจนไม่เกาะบนสาย 4-Azabenzimidazolate สำหรับแหล่งดูดซับใกล้เคียงกับโลหะไนไตรด์คลัสเตอร์ ผู้วิจัยพบว่าพลังงานดูดซับที่แหล่งดูดซับดังกล่าวแปรผันตรงกับรัศมีอะตอมของโลหะไนไตรด์คลัสเตอร์

คำสำคัญ: ช่องว่างแถบพลังงาน พลังงานดูดซับไฮโดรเจน Covalent Triazine based Framework-1 Covalent Organic Framework-366 Zeolitic Imidazolate Framework-23

Abstract

Project Code: MRG5580055

Project Title: Computational Studies of electronic, optical and hydrogen adsorption properties of high-surface area materials

Investigator: Asst. Prof. Pornjuk Srepusharawoot

E-mail Address: spornj@kku.ac.th

Project Period: July 2012 – July 2014

This Project deals with the computational studies of electronic, optical and hydrogen adsorption properties of three types of high-surface area materials by means of the density functional theory. For Covalent Triazine based Framework-1 (CTF-1), we modified the CTF-1 structure by replacing all N atoms with P, As and Sb. Our results shown that energy gaps are ranged from 0.0 to 2.02 eV. Moreover, we also varied the concentrations of P and As in the CTF-1 structure and found that non-linear drop of energy gap is observed. In this report, we also proposed two methods for enhancing the hydrogen physisorption energy by (1) functionalizing hydrogen attracting metal, Li into the Covalent Organic Framework-366 (COF-366) and (2) opening metal nitride cluster of Zeolitic Imidazolate Framework-23 (ZIF-23). According to the results of Li decorated COF-366, we found that the hydrogen adsorption energies are ranged from 0.03 to 0.22 eV/H₂. In addition, the hydrogen capacity was also determined and found that it is 2.06 1.58 and 1.05 H₂ wt% for 77, 150 and 298 K and ambient pressure, respectively. For ZIF-23 structure, our results revealed that hydrogen molecule does not bind with 4-Azabenzimidazolate linker. For H₂ adsorption sites near metal nitride cluster, we found that the corresponding hydrogen adsorption energies are directly proportional to the atomic radius of metal in metal nitride cluster.

Keywords: Energy gap, Hydrogen adsorption energy, Covalent Triazine based Framework-1, Covalent Organic Framework-366, Zeolitic Imidazolate Framework-23