

Abstract (บทคัดย่อ)

Project Code : MRG6080103

Project Title : การศึกษาปฏิกิริยากลีเซอรอลด้วยตัวเร่งปฏิกิริยาซีโอไลต์

Investigator : ผศ.ดร.บุญเดช เบิกฟ้า มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

E-mail Address : bundet.b@ku.ac.th

Project Period : 2 ปี

Executive Summary

ในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยได้ศึกษา ปฏิกิริยา dehydration ของ glycerol ได้ผลิตภัณฑ์ คือ Acrolein โดยทดลองทั้งในห้องปฏิบัติการ และคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์ พบว่า การเกิดปฏิกิริยาขึ้นกับความแรงของกรด สามารถเรียงลำดับความแรงของปฏิกิริยา คือ $\text{Al-ZSM-5} \sim \text{Ga-ZSM-5} > \text{B-ZSM-5}$ ทั้งนี้สำหรับการทดลองในห้องปฏิบัติการ พบว่า H-ZSM-5 และ H-Beta สามารถเร่งปฏิกิริยานี้ได้ดี นอกจากนี้ได้ศึกษาตัวเร่งปฏิกิริยา metal-organic framework ชนิด $\text{UiO-66-SO}_3\text{H}$ โดยคำนวณการดูดซับ แอมโมเนียบน UiO-66 และ UiO-66-SO₃H และได้คำนวณการเกิดปฏิกิริยา Aldol condensation ของ Acetone บน UiO-66-SO₃H ทั้งนี้ ได้ทำการทดลองในห้องปฏิบัติการ โดยผลิตภัณฑ์ที่ได้ไปวัดด้วยเทคนิค TLC และ ¹H-NMR สำหรับการศึกษาปฏิกิริยา methane decomposition โดยศึกษาการแตกพันธะ C-H บนโลหะ Ru, Rh และ Pd บน carbon และ boron nitride nanotubes ด้วยการคำนวณ M06-L พบว่าปฏิกิริยาสามารถเกิดได้ดี โดยการคำนวณนี้ Rh-B₄₈N₄₈H₁₆ และ Ru-B₄₈N₄₈H₁₆ สามารถเกิดปฏิกิริยาได้ดีที่สุด

บทคัดย่อ

ในงานวิจัยนี้ผู้วิจัยได้ศึกษา ปฏิกิริยาบนซีโอไลต์ Metal-Organic-Framework และ carbon nanotube ดังนี้

ปฏิกิริยา dehydration ของ glycerol ได้ผลิตภัณฑ์ คือ Acrolein โดยทดลองทั้งในห้องปฏิบัติการ และคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์ จากการคำนวณพบว่า การเกิดปฏิกิริยา ขึ้นกับความแรงของกรด โดยเทียบความแรงของ B-ZSM-5, Al-ZSM-5 และ Ga-ZSM-5 โดยการคำนวณ ONIOM(MP2:M06-2X) ปฏิกิริยาเป็น 3 ขั้นตอน คือ 1. 1st dehydration 2. Tautomerization และ 3. 2nd dehydration พบว่าขั้นกำหนดอัตราคือ dehydration โดยมีพลังงานกระตุ้น 37.3 และ 41.1 kcal/mol สำหรับ Al-ZSM-5, 34.7 และ 41.5 kcal/mol สำหรับ Ga-ZSM-5 และ 44.2 และ 46.1 kcal/mol สำหรับ B-ZSM-5 สามารถเรียงลำดับความแรงของปฏิกิริยา คือ Al-ZSM-5 ~ Ga-ZSM-5 > B-ZSM-5 ทั้งนี้สำหรับการทดลองในห้องปฏิบัติการ พบว่า H-ZSM-5 และ H-Beta สามารถเร่งปฏิกิริยานี้ได้ดี

สำหรับตัวเร่งปฏิกิริยา metal-organic framework ชนิด UiO-66-SO₃H ผู้วิจัยได้ทำการคำนวณการดูดซับ แอมโมเนียบน UiO-66 และ UiO-66-SO₃H พบว่า การคำนวณแบบ M06-L ให้พลังงานและโครงสร้างใกล้เคียงกับ MP2 และได้คำนวณการเกิดปฏิกิริยา Aldol condensation บน UiO-66-SO₃H กลไกการเกิดปฏิกิริยาแบ่งเป็น 2 ขั้นได้แก่ tautomerization และ aldol condensation โดยขั้น tautomerization เป็นขั้นกำหนดอัตรา ทั้งนี้ ได้ทำการทดลองในห้องปฏิบัติการ โดยผลิตภัณฑ์ที่ได้ไปวัดด้วยเทคนิค TLC และ ¹H-NMR

สำหรับการเกิดปฏิกิริยา methane decomposition โดยศึกษาการแตกพันธะ C-H บน โลหะ Ru, Rh และ Pd บน carbon และ boron nitride nanotubes ด้วยการคำนวณ M06-L พบว่าปฏิกิริยาสามารถเกิดได้ดี โดยค่าพลังงานการดูดซับและแนวโน้มพลังงานกระตุ้นมีค่า Rh-C₉₆H₁₆ > Rh-C₉₆H₁₆ > Pd-C₉₆H₁₆ ตามลำดับ การให้อิเล็กตรอนของ boron nitride nanotube แก่โลหะ ทำให้ปฏิกิริยาเกิดได้ดีขึ้น โดยการคำนวณนี้ Rh-B₄₈N₄₈H₁₆ และ Ru-B₄₈N₄₈H₁₆ ให้ค่าพลังงานกระตุ้น ลดลงมาเหลือเพียง 10.2 และ 14.0 kcal/mol งานวิจัยเหล่านี้ทำให้เข้าใจกลไกการเกิดปฏิกิริยาของบนตัวเร่งปฏิกิริยาต่าง ๆ อันจะนำไปสู่การพัฒนาตัวเร่งปฏิกิริยาต่อไป