232180

การศึกษาทางทฤษฎีเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพการดูดซับสารโมเลกุลไฮโดรเจนซัลไฟด์และไนเตรทไอออนด้วยซีโอไลต์ธรรมชาติชนิดคลินอพทิลโอไลต์ โดยระเบียบวิธีทางเคมีควอนตัม คือ Density Functional Theory (DFT) ที่ระดับการคำนวณแบบ B3LYP/6-31G(d) ร่วมกับการใช้แบบจำลองทางควอนตัม คือ แบบจำลองขนาด 20T ทั้งที่มีโลหะทองแดงและไม่มีโลหะทองแดงอยู่ภายในโมเลกุล

จากการศึกษาการดูดซับโมเลกุลไฮโดรเจนซัลไฟด์และไนเตรทไอออนในโครงสร้างของซีโอไลต์นั้น พบว่ามีพลังงานในการดูดซับของไฮโดรเจนซัลไฟด์และไนเตรทไอออนในซีโอไลต์ที่ไม่มีทองแดงมีค่า -9.6 และ -19.6 kcal mol^{-1} ตามลำดับ โดยการดูดซับของไฮโดรเจนซัลไฟด์จะเกิดอันตรกิริยาระหว่างอะตอมกำมะถันของไฮโดรเจนซัลไฟด์กับโปรตอนของซีโอไลต์ เมื่อศึกษาการดูดซับโมเลกุลไฮโดรเจนซัลไฟด์และไนเตรทไอออนพบว่าซีโอไลต์ที่มีทองแดงอยู่สามารถเพิ่มประสิทธิภาพในการดูดซับไฮโดรเจนซัลไฟด์และไนเตรทไอออนได้ดียิ่งขึ้น โดยพลังงานการดูดซับของโมเลกุลทั้งสองที่คำนวณได้คือ -23.8 และ -98.1 kcal mol^{-1} สำหรับไฮโดรเจนซัลไฟด์และไนเตรทไอออนตามลำดับ โดยจะเกิดอันตรกิริยาที่แรงระหว่างทองแดงในซีโอไลต์กับโมเลกุลที่เกิดการดูดซับ นอกจากนี้กระบวนการถ่ายโอนโปรตอนที่เกิดขึ้นในกระบวนการดูดซับไฮโดรเจนซัลไฟด์ของซีโอไลต์ที่มีอัตราส่วนของอะลูมิเนียมต่อซิลิกอนสูงก็ช่วยให้การดูดซับมีความเสถียรมากขึ้น

จากผลการศึกษาที่ได้ซีโอไลต์ธรรมชาติชนิดคลินอพทิลโอไลต์สามารถใช้ในการบำบัดน้ำเสียโดยเฉพาะที่มีไฮโดรเจนซัลไฟด์และไนเตรทไอออนได้ดีและสามารถเพิ่มประสิทธิภาพในการบำบัดน้ำเสียได้โดยการเจือทองแดงในโครงสร้างของซีโอไลต์ซึ่งจะช่วยให้เกิดอันตรกิริยาระหว่างไฮโดรเจนซัลไฟด์และไนเตรทไอออนได้ดียิ่งขึ้น

232180

Adsorptions of NO_3^- and H_2S molecule on a natural zeolite framework (Clinoptilolite, HEU) have been studied by means of the density functional theory (DFT) at B3LYP/6-31G(d,p) level of calculation. The natural zeolite framework was represented by a 20T of quantum cluster model. In order to investigate the effect of a Cu cation on the efficiency of the NO_3^- and H_2S adsorption, the adsorption of the NO_3^- and H_2S molecule on pure HEU and Cu(I) and Cu(II)-exchanged HEU (Cu(I)-HEU and Cu(II)-HEU) were considered. We found that the adsorption of the NO_3^- and H_2S on HEU were calculated to be -19.6 and -9.6 kcal mol^{-1}, respectively. However, the efficiency of the NO_3^- and H_2S adsorption considerably increases when the Cu cation presented in HEU framework. The estimated adsorption energy of the NO_3^- and H_2S on the Cu-HEU are -98.1 and -23.8 kcal mol^{-1}, respectively. Moreover, the adsorption of H_2S on the Cu(II)-HEU occurs via the proton transfer process which provide the more stable adsorption complex. We can conclude that the Cu-exchanged HEU can be used to improve the performance of the wastewater treatment, especially NO_3^- and H_2S molecule.