

โครงการนี้เกี่ยวข้องกับการพัฒนาและการประยุกต์ของวัสดุที่มีรูพรุนและตัวเร่งปฏิกิริยาสำหรับอุตสาหกรรมเคมีที่รวมถึงเอพอกซิเดชันของแอลคีนซึ่งเร่งปฏิกิริยาด้วยสารประกอบเชิงซ้อนโคบอลต์ (II) แคลิกซ์[4]ไพโรล ออกซิเดชันของฟินอลโดยใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาไทเทโนซิลิกาไลต์-1 และไทเทเนียม-เอ็มดับเบิลยูดับเบิลยู กระบวนการแตกย่อยไฮโดรคาร์บอนโดยใช้แซตเอสเอ็ม-5 เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา และการเตรียมนาโนคอมพอสิตไทเทเนียมไดออกไซด์/คาร์บอนเพื่อเป็นขั้วไฟฟ้าทางเคมีไฟฟ้า ได้ตรวจสอบสมบัติของตัวเร่งปฏิกิริยาและคอมพอสิตด้วยเทคนิคต่างๆ เช่น นิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์ การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ กล้องอิเล็กตรอนแบบส่องกราด การสะท้อนรังสียูวี และการดูดซับในโครเจน ได้ศึกษาประสิทธิภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาเหล่านี้ด้วยเทคนิคแกสโครมาโทกราฟี ตัวเร่งปฏิกิริยากุ่มโคบอลต์มีความว่องไวสูงในการเร่งปฏิกิริยาเอพอกซิเดชันของแอลคีนชนิดต่างๆ ในทออุอินที่มี 2-เอทิลบิวทีราลดีไฮด์ภายใต้บรรยากาศของออกซิเจน ปริมาณผลิตภัณฑ์ที่เป็นเอพอกไซด์มีค่าสูงถึง 90 เปอร์เซ็นต์ขึ้นกับชนิดของสารตั้งต้น ตัวเร่งปฏิกิริยา และภาวะของการทำปฏิกิริยา ได้สำรวจกลุ่มตัวเร่งปฏิกิริยาไทเทโนซิลิกาในแง่ผลของภาวะที่ใช้เตรียมต่อสมบัติของตัวเร่งปฏิกิริยา ไทเทโนซิลิกาไลต์-1 ที่เตรียมโดยใช้สารต้นแบบผสม เทตระโพรพิลแอมโมเนียมไฮดรอกไซด์ และเทตระโพรพิลแอมโมเนียมโบรไมด์ มีความว่องไวในการเร่งปฏิกิริยาสูงที่สุดสำหรับปฏิกิริยาออกซิเดชันของฟินอลด้วยไฮโดรเจนเปอร์ออกไซด์ ไทเทเนียม-เอ็มดับเบิลยูดับเบิลยูมีความว่องไวในการเร่งปฏิกิริยาค่ากว่าตัวเร่งปฏิกิริยาไทเทโนซิลิกาไลต์-1 แต่มีความเลือกจำเพาะต่อผลิตภัณฑ์ที่เป็นพาราเบนโซควิโนนสูงกว่า ในโครงการนี้ได้ใช้วิธีทฤษฎีเคโนซิตีฟังก์ชันนัลศึกษาโครงสร้างที่ภาวะทรานซิชันและพลังงานก่อกัมมันต์ของปฏิกิริยาดีไฮโดรจีเนชัน และปฏิกิริยาการแตกของโพรเพน รวมทั้งปฏิกิริยาการถ่ายโอนโปรตอนกับแอลเคนของแอลเคน (อีเทน โพรเพน บิวเทน และ ไอโซบิวเทน) ที่เร่งปฏิกิริยาด้วยกรดบรอนสเตดในแซตเอสเอ็ม-5 ใช้แบบจำลองที่มีจำนวนหน่วยเทระฮิรัล 5-38 หน่วย การคำนวณทั้งหมดกระทำโดยใช้โปรแกรมเทอร์โบโมล ขนาดของคลัสเตอร์มีต่อค่าพลังงานก่อกัมมันต์ของปฏิกิริยาการแตกแอลเคน นอกจากนี้ได้ค้นพบวิธีใหม่ในการเตรียมนาโนคอมพอสิตไทเทเนียมไดออกไซด์/คาร์บอนที่มีความเสถียรต่ออุณหภูมิสูงโดยใช้ตะเกียบไม้ไผ่ที่ใช้แล้วเป็นแหล่งของคาร์บอน วิธีดังกล่าวมี 2 ขั้นตอนคือ อิมเพรเกนชันผงตะเกียบไม้ไผ่ด้วยสารละลายไทเทเนียมเทระไฮโซโพรพอกไซด์ใน 2-โพรพานอล ตามด้วยคาร์บอนในเซชันที่อุณหภูมิต่างๆ ในช่วง 500 ถึง 700 องศาเซลเซียส ไทเทเนียมไดออกไซด์ในคอมพอสิตมีโครงสร้างของแอนาเทส อุณหภูมิคาร์บอนในเซชันและวิธีในการเตรียมคอมพอสิตมีผลต่อขนาดผลึกของแอนาและค่าการเก็บประจุจำเพาะของขั้วไฟฟ้าคอมพอสิต การปรับสภาพคอมพอสิตด้วยกรดฟอสฟอริกมีแนวโน้มให้ค่าการเก็บประจุจำเพาะสูงขึ้น

This project involves the development and application of porous materials and catalysts for chemical industry including epoxidation of alkenes catalyzed by cobalt(II) calyx[4]pyrrole, oxidation of phenol using titanosilicalite-1 and titanium-MWW catalysts, cracking process of hydrocarbons using ZSM-5 as catalyst and preparation of composite titanium dioxide/carbon as an electrochemical electrode. The properties of the catalysts and composites were characterized using various techniques such as NMR, XRD, SEM, DR-UV and nitrogen adsorption techniques. The efficiencies of these catalysts were investigated by gas chromatography. The cobalt-containing catalysts exhibit high activities in the catalysis of epoxidation of various types of alkenes in toluene in the presence of 2-ethylbutyraldehyde under oxygen atmosphere. A high yield of epoxide up to 93% can be obtained depending on the type of substrate, catalysts and reaction condition. The series of titanosilicate catalysts were investigated for the effect of preparation conditions on the properties of the catalysts. Titanosilicalite-1 prepared using a mixture of tetrapropylammonium hydroxide and tetrapropylammonium bromide as template provides the highest activity in oxidation of phenol with hydrogenperoxide while Ti-MWW exhibits lower activity but higher selectivity to *p*-benzoquinone than titanosilicalite-1. Density functional theory was used in the study of the transition state structures and the corresponding activation energies in dehydrogenation, cracking reaction (two pathways), and proton exchange reactions of alkanes (ethane, propane, butane and isobutane) catalyzed by Brønsted acid site of ZSM-5 zeolite. The zeolite models containing 5-38 tetrahedral units in the zeolite structure were used. All calculations were carried out by the program Turbomole. The results show the dependence of the calculated activation energies on the cluster size, especially in case of cracking and dehydrogenation reactions. Furthermore, a novel method was discovered for preparation of the titanium dioxide/carbon nanocomposite with high thermal stability. The method contains 2 steps which are the impregnation of the bamboo powder with a solution of titanium tetraisopropoxide in 2-propanol and subsequently carbonization at a required temperature ranging from 500-700°C. The titanium dioxide in the composite is readily formed as anatase without rutile phase. The specific capacitance of the composite electrode depends on the carbonization temperature and the titanium dioxide content in the composite. The composite treated by phosphoric acid shows an enhanced specific capacitance.