บทที่ 3
วิธีการศึกษา

3.1 วิธีการศึกษาทางเคมีคอมพิวเตอร์

เป็นการศึกษาอันตรกิริยาระหว่างไฮโดรเจนซัลไฟด์กับโครงสร้างของซีโอไลต์ชนิด H-FER ด้วยระเบียบวิธีการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์แบบ ONIOM (HF/6-31G(d,p):UFF) และ ONIOM (B3LYP/6-31G(d,p):UFF) เพื่อศึกษาค่าพลังงานในการดูดซับ

อุปกรณ์

1. คอมพิวเตอร์ ระบบปฏิบัติการ Linux Ubuntu
2. โปรแกรมสำเร็จรูปทางเคมี Gaussian (g03) และ GaussView เป็นต้น

วิธีการ

1. สร้างแบบจำลองของระบบการดูดซับของ ไฮโดรเจนซัลไฟด์ (H_2S) คาร์บอนไดออกไซด์ (CO_2) มีเทน (CH_4) (ตัวถูกดูดซับ) บนโครงสร้างของซีโอไลต์ (ตัวดูดซับ)

1.1 H_2S

1.2 CO_2

1.3 CH_4

1.4 H-ZSM-5; 5T, 12T และ 34T

1.5 [H_2S]/[H-FER]; 5T quantum cluster

1.6 [H_2S]/[H- FER]; 12T ONIOM

1.7 [H_2S]/[H- FER]; 34T ONIOM

1.8 [CO_2]/[H-FER]; 5T quantum cluster

1.9 [CO_2]/[H- FER]; 12T ONIOM

1.10 [CO_2]/[H- FER]; 34T ONIOM

1.11 [CH_4]/[H-FER]; 5T quantum cluster

1.12 [CH_4]/[H- FER]; 12T ONIOM

1.13 [CH_4]/[H- FER]; 34T ONIOM

ด้วยโปรแกรม GaussView ศึกษาระเบียบวิธีการคำนวณแบบ Hartree-Fock (HF) และ Density Functional Theory (DFT) โดยเลือก basis 6-31G (d,p)

2. คำนวณโครงสร้างของระบบการดูดซับ เพื่อคำนวณค่าพลังงานการดูดซับไฮโดรเจนซัลไฟด์ คาร์บอนไดออกไซด์ และมีเทนบนโครงสร้างซีโอไลต์ชนิด H-FER

3. วิเคราะห์ข้อมูล และคุณสมบัติต่างๆ ของโครงสร้างที่ได้จากการคำนวณโดยพิจารณาการเปลี่ยนแปลงรูปร่างของระบบ (Geometry) (ความยาวพันธะ มุมพันธะที่เกิดการเปลี่ยนแปลง) ร่วมกับการพิจารณาพลังงานของระบบ

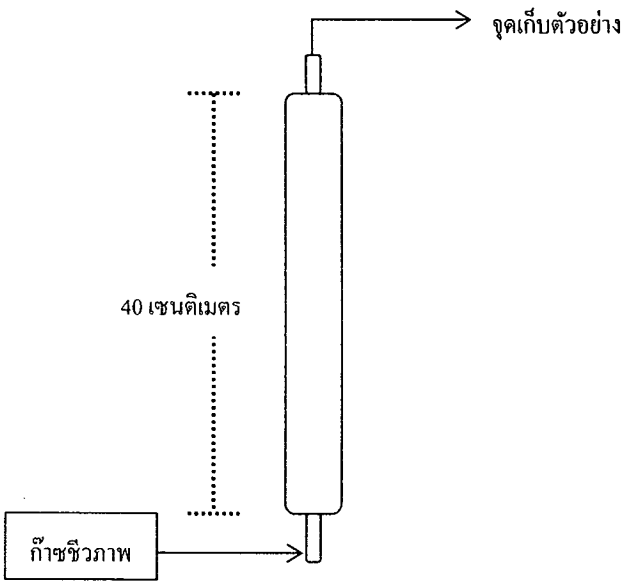
3.2 การทดลองดักจับก๊าซไฮโดรเจนซัลไฟด์ในก๊าซชีวภาพ

- ทดลองใช้วัสดุต่างๆ ได้แก่ ซีโอไลต์ธรรมชาติ ฝอยเหล็ก และถ่านไม้ประสิทธิภาพสูง ทำการทดลองเพื่อหาชนิด และปริมาณที่เหมาะสมกับก๊าซชีวภาพจากน้ำเสียยางแผ่น

- เก็บตัวอย่างก๊าซชีวภาพจากระบบบำบัดน้ำเสียจากการผลิตยางแผ่นด้วยกระบวนการหมักแบบไร้อากาศโดยใช้ถุงเก็บก๊าซ นำตัวอย่างก๊าซชีวภาพมาผ่านชุดคอลัมน์ที่บรรจุวัสดุดูดซับด้วยปั๊ม ที่อัตราการไหล 0.5 ลิตร/ชั่วโมง เพื่อนำก๊าซชีวภาพที่ผ่านการดูดซับไปวิเคราะห์หาความเข้มข้นของก๊าซไฮโดรเจนซัลไฟด์ (วิเคราะห์โดยใช้วิธีแคดเมียมซัลไฟด์) โดยใช้วัสดุดูดซับดังนี้เพื่อศึกษาประสิทธิภาพการดูดซับก๊าซไฮโดรเจนซัลไฟด์ที่ดีที่สุด

  - ซีโอไลต์ธรรมชาติ ปริมาณ 100 กรัม 500 กรัม และ 1,000 กรัม
  - ฝอยเหล็ก
  - ถ่านไม้ประสิทธิภาพสูง

- เลือกวัสดุดูดซับที่มีประสิทธิภาพดีที่สุดไปประยุกต์ใช้ในพื้นที่จริง โดยเลือกครัวเรือนเกษตรกรชาวสวนยางที่มีการใช้งานระบบก๊าซชีวภาพจากน้ำเสียยางแผ่นอยู่แล้ว ในพื้นที่จังหวัดนครศรีธรรมราช



ภาพที่ 3.1 แผนภาพชุดคอลัมน์ที่ใช้ศึกษาการปรับปรุงคุณภาพก๊าซชีวภาพ

3.3 ตรวจวัดสารมลพิษจากการเผาไหม้ก๊าซชีวภาพและเชื้อเพลิงอื่นๆ

- นำก๊าซชีวภาพที่ได้จากระบบฯ ไปใช้ประโยชน์ในการหุงต้มในครัวเรือน และวิเคราะห์สารมลพิษในอากาศในระดับหายใจของผู้ใช้งาน ก๊าซที่ศึกษาได้แก่ ไนโตรเจนไดออกไซด์ และซัลเฟอร์ไดออกไซด์

ก๊าซไนโตรเจนไดออกไซด์ วิเคราะห์ด้วยวิธี Sodium Arsenite โดยเก็บตัวอย่างอากาศโดยใช้ปั๊มเก็บตัวอย่างอากาศเฉพาะบุคคล ดูดตัวอย่างอากาศในระดับหายใจผ่าน Midget Impinger ซึ่งบรรจุสารละลาย Sodium hydroxide กับ Sodium arsenite เพื่อนำไปวิเคราะห์ในห้องปฏิบัติการต่อไป

ก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ วิเคราะห์โดยวิธีพาราโรซานิลีน (Pararosaniline) โดยการดูดตัวอย่างอากาศในระดับหายใจผ่านสารละลายโพแทสเซียม เตตร้าคลอโรซัลไฟโตเมอคิวเรท (Potassium tetrachlorosulfitomercurate; TCM) และนำไปวิเคราะห์ในห้องปฏิบัติการต่อไป

- วิเคราะห์สารมลพิษในอากาศในระดับหายใจและในพื้นที่อยู่อาศัยของผู้ใช้งานเชื้อเพลิงถ่านไม้ และก๊าซ LPG ในการหุงต้ม เพื่อเปรียบเทียบกับการใช้งานก๊าซชีวภาพจากน้ำเสียยางแผ่น ก๊าซที่ศึกษาได้แก่ ไนโตรเจนไดออกไซด์ และซัลเฟอร์ไดออกไซด์