บทที่ 1
บทนำ

1.1 ความสำคัญ และที่มาของปัญหา

เซลล์เชื้อเพลิงที่ทำงานที่อุณหภูมิต่ำเช่นเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแลกเปลี่ยนโปรตอนที่ใช้ไฮโดรเจนหรือแอลกอฮอล์เป็นเชื้อเพลิงเป็นทางเลือกหนึ่งที่น่าสนใจสำหรับการใช้เป็นแหล่งกำเนิดไฟฟ้าในอนาคต แต่ในระดับของเทคโนโลยีในปัจจุบันยังมีหลายปัจจัยที่ลดทอนประสิทธิภาพของเซลล์เชื้อเพลิงลง เช่น อัตราการเกิดปฏิกิริยาของปฏิกิริยารีดักชันของออกซิเจนหรืออัตราการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันของเมทานอลที่ต่ำ นอกจากนี้แพลตตินัมซึ่งเป็นส่วนประกอบหลักของตัวเร่งปฏิกิริยายังเสื่อมสภาพอย่างรวดเร็วเมื่อสัมผัสกับก๊าซคาร์บอนมอนอกไซด์ แม้จะด้วยความเข้มข้นเพียง 20 ส่วนในล้านส่วนก็ตาม

ในทางทฤษฎีมีหลายวิธีที่จะสามารถปรับใช้เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพของเซลล์เชื้อเพลิงได้ เช่น การเพิ่มอุณหภูมิ การเพิ่มความดัน การเพิ่มปริมาณตัวเร่งปฏิกิริยา อย่างไรก็ตามทุกวิธีที่อาจนำมาปรับใช้ได้ต่างก็มีข้อจำกัดของตัวเอง เช่นการเพิ่มอุณหภูมิจะทำได้เพียงจุดหนึ่งเนื่องจากการนำโปรตอนของเยื่อแลกเปลี่ยนโปรตอนจะต้องอาศัยความชื้น อุณหภูมิที่สูงเกินไปจะทำให้ความชื้นนี้หายไปและลดความสามารถในการนำโปรตอนลง

วิธีอื่นๆ ที่เป็นไปได้เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพโดยรวมของเซลล์เชื้อเพลิงที่ทำงานที่อุณหภูมิต่ำคือการปรับปรุงสภาวะปฏิกิริยาของตัวเร่งปฏิกิริยา ซึ่งโดยทั่วไปจะทำโดยการนำโลหะแพลตตินัมไปผสมกับโลหะชนิดอื่นเป็นโลหะอัลลอย หาวิธีที่จะทำให้โลหะแพลตตินัมเกิดการกระจายตัวที่ดีที่สุดบนคาร์บอน หรือการใช้ตัวรองรับชนิดอื่นเช่นโลหะออกไซด์มาช่วยปรับปรุงสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา

มีผลการทดลองที่แน่ชัดที่บ่งชี้ว่าการใช้ตัวรองรับชนิดโลหะออกไซด์สามารถช่วยเพิ่มประสิทธิภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาได้ โดยพบว่าการมีอยู่ของโลหะออกไซด์สามารถเพิ่มความทนต่อความเป็นพิษของคาร์บอนมอนนอกไซด์และเมทานอล และยังเพิ่มพื้นที่ผิวสำหรับการทำปฏิกิริยาทางไฟฟ้าเคมีอีกด้วย แม้จะสามารถสังเกตการเพิ่มขึ้นของประสิทธิภาพได้อย่างชัดเจน แต่กลับไม่มีคำอธิบายที่ชัดเจนสำหรับที่มาของประสิทธิภาพที่ดีขึ้นของตัวเร่งปฏิกิริยา

ด้วยประสิทธิภาพของคอมพิวเตอร์ และระดับของทฤษฎีทางกลศาสตร์ควอนตัมที่พัฒนาขึ้นอย่างมากในปัจจุบัน ทำให้วิธีทางกลศาสตร์ควอนตัมเป็นเครื่องมือหนึ่งที่เราสามารถนำมาใช้เพื่อศึกษาคุณสมบัติต่างๆ ทางด้านเคมีและกายภาพได้อย่างถูกต้องและเป็นที่ยอมรับ แม้ว่าจะไม่ได้ทำการทดลองจริง ผลที่ได้รับจากการใช้เทคนิคนี้ในการศึกษาเกี่ยวกับปฏิกิริยาเคมีและตัวเร่งปฏิกิริยาได้ทำให้เกิด

ความก้าวหน้าขึ้นในการเพิ่มประสิทธิภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาขึ้นมากมาย การทดลองนี้เป็นการพยายามหาที่มาของการเพิ่มประสิทธิภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาโดยใช้วิธีทางกลศาสตร์ควอนตัม เพื่อที่จะได้นำความรู้พื้นฐานที่ได้นี้ไปพัฒนาประสิทธิภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาที่ใช้กับเซลล์เชื้อเพลิงให้ดีขึ้นต่อไป รวมทั้งอาจนำไปสู่การออกแบบตัวเร่งปฏิกิริยาชนิดใหม่ๆ ต่อไป

1.2. วัตถุประสงค์ของการวิจัย

1.2.1 ศึกษาอิทธิพลของตัวรองรับแบบออกไซด์ของโลหะต่อคุณลักษณะของโลหะไวที่ใช้ในเซลล์เชื้อเพลิงแบบเยื่อแลกเปลี่ยนโปรตอน

1.2.2 ศึกษาอันตรกิริยาของโลหะไวและสารที่เป็นพิษต่อตัวเร่งปฏิกิริยา

1.3 ขอบเขตของการวิจัย

1.3.1 ใช้โปรแกรม Gaussian03 เป็นหลักในการคำนวณระบบของตัวเร่งปฏิกิริยาแบบต่างๆ

1.3.2 ศึกษาระบบตัวเร่งปฏิกิริยา Pt/TiO_2 เริ่มที่การเติบโตของโลหะแพลตตินัมบนพื้นผิวไทเทเนียมไดออกไซด์ และผลที่มีต่อคุณสมบัติต่างๆ ของโลหะแพลตตินัม

1.3.3 ศึกษาผลที่ติตาเนียมไดออกไซด์มีต่อโลหะแพลตตินัมในการทำอันตรกิริยากับโมเลกุลคาร์บอนไดออกไซด์