



รายงานวิจัยเรื่อง
โครงการ การดูดซับฟอสเฟตบนซีโอไลต์ชนิด FER โดยระเบียบวิธีการคำนวณ
ทางเคมีคอมพิวเตอร์

ยะโก๊ะ ขาเริ่มดาเบะ

งานวิจัยนี้ได้รับทุนอุดหนุนการวิจัยจากสำนักส่งเสริมการวิจัยและเขียนตำรา
มหาวิทยาลัยอิสลามยะลา

2553

ประกาศคุณูปการ

งานวิจัยเล่มนี้ สำเร็จลงได้ด้วยความกรุณาของผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. อุษา อันทอง ที่ปรึกษางานวิจัย ที่ได้กรุณาให้คำปรึกษา แนะนำ และให้ข้อคิดในเรื่องต่างๆ เป็นอย่างดี ทำให้งานวิจัยฉบับนี้มีความสมบูรณ์ยิ่งขึ้น รวมทั้งได้รับคำแนะนำปรึกษาจากคณะทีมวิจัยในหน่วยวิจัยและเขียนตำรา คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี มหาวิทยาลัยอิสลามยะลา ขอขอบคุณศูนย์นาโนเทคโนโลยี ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ วิทยาเขตบางเขน ที่ได้ให้ความอนุเคราะห์โปรแกรมสำเร็จรูปทางเคมี ที่ใช้ในการทำวิจัยในครั้งนี้ รวมทั้งขอขอบคุณสำนักส่งเสริมการวิจัยและเขียนตำรา มหาวิทยาลัยอิสลามยะลา ที่คอยช่วยเหลือในทุกโอกาส ทำให้ผู้วิจัยสามารถทำงานวิจัย ในครั้งนี้สำเร็จลุล่วงไปได้ ด้วยดี ผู้วิจัยขอขอบพระคุณเป็นอย่างสูง

ยะโก๊ะ ขาเริ่มดาเบะ

มิถุนายน 2555

สารบัญ

บทที่	หน้า
1 บทนำ	1
ที่มาและความสำคัญ	1
วัตถุประสงค์ของการวิจัย	2
ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับจากการวิจัย	2
ขอบเขตของการวิจัย	2
นิยามศัพท์เฉพาะ	2
2 เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	4
เคมีคอมพิวเตอร์	4
ซีไอไลต์	5
ชนิดของซีไอไลต์	6
สารประกอบฟอสเฟตที่พบในน้ำ	7
งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	8
3 วิธีดำเนินการวิจัย	12
สถานที่ทำการทดลอง และระยะเวลาทำการทดลอง	12
ระเบียบวิธีการวิจัย	12
4 ผลการวิเคราะห์ข้อมูล	13
ผลการวิเคราะห์โครงสร้างและองค์ประกอบทางเคมี.....	13
5 บทย่อ สรุปผล อภิปรายผล และข้อเสนอแนะ	18
บทย่อ	18
สรุปผล	18
อภิปรายผล	19
ข้อเสนอแนะ	19
บรรณานุกรม	20
ภาคผนวก	24
ประวัติย่อผู้วิจัย	44

สารบัญตาราง

ตารางที่	หน้า
4.1 แสดงความยาวพันธะและมุมที่ได้จากการคำนวณในระบบ H ₃ PO ₄ กับ FER zeolite คำนวณด้วยระเบียบวิธี ONIOM2(B3LYP/6-31g(d,p):UFF)	16
4.2 แสดงผลของขนาดโครงสร้าง (framework) ต่อพลังงานการดูดซับ ระหว่าง H ₃ PO ₄ กับ FER zeolite.....	17

สารบัญภาพประกอบ

ภาพที่	หน้า
2.1 ซีไอไลต์ ชนิด FER.....	6
4.1 แสดงโครงสร้างที่เสถียรที่สุดของการเกิดอันตรกิริยาระหว่าง H_3PO_4 กับ 5T; FER zeolite cluster จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี B3LYP/6-31G(d,p).....	13
4.2 แสดงโครงสร้างที่เสถียรที่สุดของอันตรกิริยาระหว่าง H_3PO_4 กับ FER- zeolite, 12T- ONIOM model (a) ภาพด้านหน้า H_3PO_4 /FER (b) ภาพด้านข้าง H_3PO_4 /FER จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี ONIOM2(B3LYP/6-31g(d,p):UFF).....	14
4.3 แสดงโครงสร้างที่เสถียรที่สุดของอันตรกิริยาระหว่าง H_3PO_4 กับ FER zeolite, 34T- ONIOM model (a) ภาพด้านหน้า H_3PO_4 /FER (b) ภาพด้านข้าง H_3PO_4 /FER จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี ONIOM2(B3LYP/6-31g(d,p):UFF)	15

บทคัดย่อ

การศึกษาคำนวณการดูดซับฟอสเฟตบนโครงสร้างซีโอไลต์ชนิด FER เป็นตัวดูดซับด้วยวิธีการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์ โดยใช้ระเบียบวิธี ONIOM คำนวณแบบ Density Functional Theory (DFT) ที่ระดับการคำนวณ B3LYP/6-31G(d,p) พบว่าค่าพลังงานการดูดซับเท่ากับ -29.24, -39.41 และ -45.2 kcal/mol สำหรับแบบจำลอง 5T-quantum cluster, 12T, และ 34T ONIOM2 ตามลำดับ แสดงให้เห็นว่าสมบัติการดูดซับของสารประกอบฟอสเฟตบนซีโอไลต์ชนิด FER ขึ้นอยู่กับการขยายขนาดของโครงสร้าง (extended structure) ของซีโอไลต์ ซึ่งผลการคำนวณที่ได้มีความสอดคล้องกับผลการทดลอง

Abstract

An ONIOM (Our-own-N-layered Integrated molecular Orbital + molecular Mechanics) method has been employed to investigate the interaction between phosphate on FER zeolite in which the effect of size of H-FER structure was considered and performed for four system : 5T (5 tetrahedral), 12T and 34T. The calculate result of adsorption energies of phosphate complexed with 5T, 12T and 34T H-FER at ONIOM2 (B3LYP/6-31G(d,p):UFF) level of theory are -29.4, -39.41 and -45.2 kcal/mol, respectively. The results demonstrate that the adsorption properties of phosphate compounds on the H-FER depend on the extended structure of zeolite. Our findings are in agreement with experimental data.

บทที่ 1

บทนำ

ที่มาและความสำคัญ

ปัจจุบันประเทศที่กำลังพัฒนาได้มีการเปลี่ยนแปลงในด้านต่าง ๆ อย่างรวดเร็วและต่อเนื่อง ทั้งทางด้านเศรษฐกิจ ทั้งภาคอุตสาหกรรมและภาคเกษตรกรรม การเปลี่ยนแปลงที่เกิดขึ้นอย่างรวดเร็ว นั้น ส่งผลกระทบต่อความเป็นอยู่ของประชาชน ซึ่งทำให้วิถีการดำรงชีวิตของมนุษย์เปลี่ยนแปลงไปด้วย โดยอาศัยการพัฒนาของเทคโนโลยีซึ่งเป็นสิ่งอำนวยความสะดวกสบายต่างๆ การเปลี่ยนแปลงวิถีชีวิตของมนุษย์ที่มุ่งเน้นแต่ความความก้าวหน้าทางด้านเทคโนโลยี เพื่อให้ทันต่อความต้องการที่เพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็ว ซึ่งการขยายตัวที่รวดเร็วเกินไปโดยปราศจากการควบคุมจะนำปัญหามาสู่มนุษย์ นั่นคือภาวะสิ่งแวดล้อมเป็นพิษ ส่งผลให้เกิดปัญหาทางด้านมลภาวะต่างๆ ทั้งด้านดิน แหล่งน้ำธรรมชาติ และอากาศ ซึ่งมลภาวะส่วนใหญ่ที่เกิดขึ้นนั้นเกิดจากการปล่อยของเสียจากโรงงานอุตสาหกรรม การทิ้งน้ำเสียจากกิจกรรมต่าง ๆ ในครัวเรือนลงในแหล่งน้ำธรรมชาติ และสารพิษตกค้างจากการเกษตร เป็นต้น ปัญหาหนึ่งที่ที่น่าสนใจศึกษาคือ ปัญหาการปนเปื้อนของสารประกอบฟอสเฟตส่วนใหญ่ในน้ำเสียชุมชนเกิดขึ้นจากการใช้สารซักล้างในครัวเรือน พบว่าน้ำเสียจากการซักล้างเสื้อผ้ามีปริมาณฟอสเฟตสูงถึง 24 มิลลิกรัมฟอสฟอรัสต่อลิตร (ธงชัย พรรณสวัสดิ์, 2530) ทำให้ความเข้มข้นของฟอสเฟตในน้ำเสียชุมชนอยู่ระหว่าง 2-10 มิลลิกรัมฟอสฟอรัสต่อลิตร(มันดิน ตันจุลเวศม์, 2545 : 20) ดังนั้นน้ำเสียจากชุมชนที่ระบายลงสู่แหล่งน้ำต่าง ๆ ถ้ามีปริมาณมากจะส่งผลต่อระบบสิ่งแวดล้อม ทำให้วัชพืชน้ำเติบโตเร็ว และช่วยในการเจริญเติบโตของสาหร่ายสีเขียวแกมน้ำเงินซึ่งหากบริโภคน้ำที่มีสาหร่ายเหล่านี้จะมีผลเสียต่อสุขภาพ และส่งผลกระทบต่อสุขภาพของสัตว์น้ำและสิ่งมีชีวิตต่างๆ ในแหล่งน้ำธรรมชาติ โดยการไม่ได้ผ่านกระบวนการบำบัดมาก่อน จึงเป็นสาเหตุที่ทำให้แหล่งน้ำนั้นเป็นน้ำเสีย ซึ่งนับวันมีแนวโน้มของการสะสมเพิ่มมากขึ้น และก่อให้เกิดมลภาวะต่อสิ่งแวดล้อมตามมา นอกจากนั้นยังมีผลต่อเนื่องมาสู่คนและสิ่งแวดล้อมอื่น ๆ ทั้งทางตรงและทางอ้อม

การศึกษาการบำบัดน้ำเสียที่มีสารประกอบฟอสเฟตปนเปื้อนนั้นโดยการใช้ซีโอไลต์ เป็นตัวดูดซับเป็นทางเลือกอีกทางหนึ่งที่จะนำมาใช้แก้ปัญหาในส่วนหนึ่งของน้ำเสียได้ ดังนั้นจึงได้ทำการศึกษาความเป็นไปได้ในการเกิดอันตรกิริยาระหว่างโครงสร้างซีโอไลต์ชนิด FER กับโมเลกุลฟอสเฟต เพื่อเป็นการยืนยันความเป็นไปได้ของการใช้ซีโอไลต์ธรรมชาติดูดซับฟอสเฟตใน

สารละลาย และวิธีการทดสอบสถานะที่เหมาะสมในการกำจัดฟอสฟอรัสโดยใช้ซีโอไลต์ธรรมชาติเป็นตัวดูดซับและแลกเปลี่ยนไอออนที่ปนเปื้อนอยู่ในน้ำ เพื่อเป็นแนวทางในการกำจัดสารประกอบฟอสฟอรัส ที่ปนเปื้อนในน้ำทิ้งและประยุกต์ใช้ในการบำบัดน้ำเสียที่มีสารประกอบฟอสฟอรัสปนเปื้อนอยู่ เป็นการช่วยลดปัญหาการปนเปื้อนของสารประกอบฟอสฟอรัส ที่ปล่อยลงสู่ลำคลองหรือแหล่งน้ำธรรมชาติให้มีคุณภาพดีขึ้น ลดปัญหามลพิษและรักษาสิ่งแวดล้อม

วัตถุประสงค์ของโครงการ

1. เพื่อศึกษาแนวทางการใช้ระเบียบวิธีทางเคมีคอมพิวเตอร์คำนวณอันตรกิริยาของการดูดซับฟอสเฟตบนโครงสร้างซีโอไลต์ชนิด FER
2. เพื่อใช้เป็นข้อมูลพื้นฐานในการกำจัดฟอสเฟตในน้ำทิ้ง

ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. สามารถนำเอาทฤษฎีหรือซอฟต์แวร์ทางคอมพิวเตอร์มาประยุกต์ใช้ในการศึกษาทางเคมี
2. สามารถเป็นข้อมูลพื้นฐานในการกำจัดฟอสเฟต
3. สามารถทำนายความน่าจะเป็นของการดูดซับฟอสเฟตบนซีโอไลต์ชนิด FER และสามารถช่วยลดงบประมาณ และเวลาในการทดลองในห้องปฏิบัติการจริง

ขอบเขตของการศึกษา

1. ศึกษาความสามารถการดูดซับฟอสเฟตบนซีโอไลต์ชนิด FER โดยการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์
2. ศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างผลที่ได้จากการคำนวณและผลที่ได้จากการทดลองซึ่งเป็นผลที่ได้จากงานวิจัยอื่นๆ
3. ศึกษาพลังงานของการดูดซับฟอสเฟตบนซีโอไลต์ชนิด FER ด้วยระเบียบวิธีการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์

นิยามศัพท์เฉพาะ

1. **ซีโอไลต์ (Zeolite)** เป็นแร่ที่ประกอบด้วยผลึกของอะลูมิโนซิลิเกตที่มีผลึกของ โลหะอัลคาไลน์หรือโลหะอัลคาไลน์เอิร์ธ ซึ่งโดยส่วนใหญ่จะเป็นโลหะโซเดียม โพแทสเซียม แมกนีเซียม

แคลเซียม และแบเรียม เป็นโครงสร้างที่มีลักษณะเป็นตาข่าย 3 มิติของอะลูมิเนียมออกซิเจนเตตระไฮดรอล (AlO_4) และซิลิกอนออกซิเจนเตตระไฮดรอล (SiO_4) ซึ่งประกอบกันเป็นอะลูมิโนซิลิเกตโดยการเชื่อมต่อกันของออกซิเจนอะตอมไม่รู้จัก

2. การดูดซับ (Adsorption) การดูดซับเป็นขบวนการที่โมเลกุลของสารที่เรียกว่า ตัวถูกดูดซับ (adsorbate) ซึ่งอยู่ในตัวกลางใดๆ ไปเกาะอยู่บนผิวของสารอีกชนิดหนึ่งถูกนำไปอยู่ในตัวกลางนั้นเรียกว่า ตัวดูดซับ (adsorbent) การดูดซับที่เกิดขึ้นในระบบบำบัดน้ำเสียมีอยู่ด้วยกัน 3 ลักษณะดังนี้

1. การดูดซับแบบแลกเปลี่ยนประจุ (Exchange Adsorption) การดูดซับแบบนี้อาศัยการเกิดปฏิกิริยาดังต่อไปนี้

2. การดูดซับแบบเคมี (Chemical Adsorption) การดูดซับแบบนี้อาศัยการเกิดปฏิกิริยาเคมีต่อกันทำให้โมเลกุลของสารเคมีที่ถูกดูดซับไม่เกิดการเคลื่อนที่บริเวณผิว

3. การดูดซับแบบกายภาพ (Physical Adsorption) การดูดซับแบบนี้อาศัยการดูดติดด้วยแรงประเภท van der waals ซึ่งไม่ยึดติดแน่นเหมือนกับสองแบบแรกมักจะเหมาะสมกับสภาวะอุณหภูมิต่ำๆ