

การกำจัดตะกั่วและทองแดงบนโครงสร้างซีโอไลต์ชนิด ZSM-5 ด้วยระเบียบวิธีการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์ Removal of Lead and Copper on ZSM-5 Zeolite by Computational Chemistry Method

อุษา อ้นทอง^{1*} และพิทย์พิมล ชูรอด²
Usa Onthong^{1*} and Pitpimon Choorod²

บทคัดย่อ

แนวทางการใช้วิธีทางเคมีคอมพิวเตอร์คำนวณอันตรกิริยาระหว่างสารประกอบเชิงซ้อนของไอออนตะกั่วและทองแดง บนโครงสร้างซีโอไลต์ชนิด ZSM-5 โดยการคำนวณพลังงานการดูดซับของระบบที่ระดับการคำนวณ ONIOM2 (B3LYP/SDD : UFF) และ ONIOM2 (B3LYP /6-31G (d,p) : UFF) สำหรับระบบการดูดซับไอออนตะกั่ว และไอออนทองแดง พบว่าที่บริเวณอะตอมออกซิเจนของโครงสร้างซีโอไลต์ เป็นบริเวณที่มีความหนาแน่นของอิเล็กตรอนค่อนข้างสูง จึงสามารถเกิดอันตรกิริยากับไอออนของโลหะได้ แสดงให้เห็นว่าซีโอไลต์สามารถดูดซับโลหะหนักทั้งสองชนิดได้ ดังนั้นสามารถใช้ซีโอไลต์ในการบำบัดโลหะหนักในน้ำเสียก่อนปล่อยน้ำเสียสู่แหล่งน้ำสาธารณะได้

คำสำคัญ : เคมีคอมพิวเตอร์ การดูดซับ ซีโอไลต์ ทองแดง ตะกั่ว

¹ ผศ.ดร., หน่วยวิจัยเคมีและคอมพิวเตอร์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยทักษิณ พัทลุง 93210

² นักวิชาการ., หน่วยวิจัยเคมีและคอมพิวเตอร์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยทักษิณ พัทลุง 93210

* Corresponding autor: e-mail: usaonthong@hotmail.com Tel. 074-693995 ext. 2332

จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557

Abstract

The interaction of lead and copper ions on ZSM-5 was investigated under computational chemistry method. The adsorption energy of these various lead and copper form molecules on ZSM-5 of which the structures are treated as the rigid molecules were determined at the ONIOM2 (B3LYP/SDD :UFF) and ONIOM2 (B3LYP /6-31G (d,p): UFF) theoretical level approached, respectively. The interaction is found to bound at density electron site (Oxygen atom) of ZSM-5. It was found that the extended zeolitic framework covering the nanocavity was essential for describing the confinement effect of the zeolite. The results of these calculations show that the zeolite can be used to adsorb lead and copper. Heavy metal ions are pollutant in the environment. There for, zeolite can be use to treat wastewater before discharge into the public water supply.

Keywords : Computational Chemistry, Adsorption, Zeolite, Copper Ion, Lead Ion

บทนำ

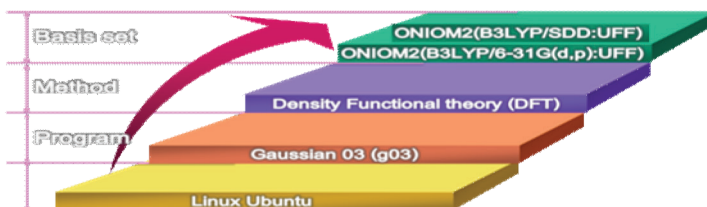
การบำบัดโลหะหนักในแหล่งน้ำด้วยกระบวนการดูดซับ โดยใช้ซีโอไลต์ชนิด ZSM-5 เป็นวัสดุดูดซับ เนื่องจากมีโครงสร้างที่เหมาะสมในการเกิดอันตรกิริยากับไอออนอื่น ๆ เพราะเป็นสารประกอบอะลูมิเนียมซิลิเกต (crystalline aluminosilicates) เป็นผลึกแข็งมีรูพรุนและช่องว่างหรือโพรงที่ต่อเนื่องกันอย่างเป็นระเบียบในสามมิติขนาดตั้งแต่ 2-10 อังสตรอม (1 อังสตรอมเท่ากับ 1×10^{-10} เมตร) ทำให้มีคุณสมบัติในการดูดซับตลอดจนสามารถแลกเปลี่ยนไอออน ซึ่งการศึกษาความสามารถในการดูดซับโดยใช้ซีโอไลต์ในห้องปฏิบัติการทางวิทยาศาสตร์ต้องใช้งบประมาณในการปฏิบัติการสูง และอาจจะได้ผลที่ไม่ละเอียดมากนัก ตลอดจนระยะเวลาที่ทำการศึกษาคงต้องใช้เวลานาน

ดังนั้นจึงมีความจำเป็นอย่างมากในการนำศาสตร์ทางด้านเคมีคอมพิวเตอร์ศึกษานานตรกิริยาของระบบดังกล่าวเพื่อเป็นการทำนายความน่าจะเป็นของความสามารถในการนำซีโอไลต์มาเป็นตัวกำจัดโลหะหนัก หรือตรวจสอบประสิทธิภาพการเกิดอันตรกิริยาระหว่างโลหะหนักบนโครงสร้างซีโอไลต์ เพื่อนำไปใช้เป็นข้อมูลในการออกแบบการทดลองในห้องปฏิบัติการเคมี ซึ่งเคมีคอมพิวเตอร์เป็นสาขาที่นำเอาความรู้ทางคณิตศาสตร์บริสุทธิ์ ฟิสิกส์พื้นฐาน [1] และสถิติมาใช้อธิบายสิ่งที่เกิดขึ้นในระบบโมเลกุลทางเคมี โดยใช้คอมพิวเตอร์เป็นเครื่องมือในการคำนวณระบบการดูดซับโลหะหนัก [2] บนโครงสร้างของซีโอไลต์ ZSM-5 ด้วยระเบียบวิธีการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์ ซึ่งสามารถนำข้อมูลที่ได้ออกไปเป็นแนวทางในการใช้ซีโอไลต์ธรรมชาติกำจัดโลหะหนักในน้ำเสีย ต่อไป

วิธีการวิจัย

1. เตรียมวัสดุอุปกรณ์คอมพิวเตอร์ และโปรแกรมสำเร็จรูปทางเคมีคอมพิวเตอร์
2. สร้าง input file ระบบการเกิดอันตรกิริยาของโลหะหนัก บนโครงสร้างซีโอไลต์ ZSM-5 ขนาดต่าง ๆ
3. ศึกษาเลือกวิธีการคำนวณและ Basis set ทางเคมีคอมพิวเตอร์เพื่อให้เหมาะสมกับระบบที่ทำการศึกษา
4. ทำการคำนวณโครงสร้างและพลังงานของระบบที่ศึกษาที่เสถียรที่สุด วิเคราะห์ข้อมูล และคุณสมบัติต่าง ๆ ทางเคมี เพื่อดูความน่าจะเป็นของการดูดซับ

จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557



ภาพที่ 1 ขั้นตอนวิธีการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์

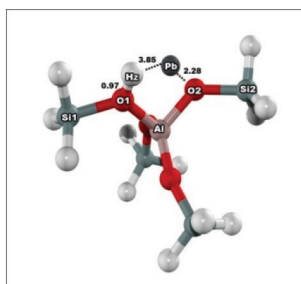
ผลการวิจัย และอภิปรายผล

ในการทำการศึกษาคำนวณดูดซับสารประกอบเชิงซ้อนของไอออนตะกั่วและทองแดงบนโครงสร้างซีโอไลต์ชนิด ZSM-5 ที่มีขนาดแตกต่างกันโดยทำการคำนวณด้วยระเบียบวิธี ONIOM2 (B3LYP/SDD : UFF) และ ONIOM2 (B3LYP/6-31G**) สามารถแสดงรูปแบบโครงสร้างของระบบการดูดซับที่เสถียรที่สุด ดังนี้

ตอนที่ 1 ศึกษาการคำนวณอันตรกิริยาของไอออนตะกั่ว (Pb^{2+}) บนโครงสร้างซีโอไลต์ชนิด ZSM-5

การคำนวณระบบอันตรกิริยาระหว่าง Pb^{2+} บนโครงสร้างของซีโอไลต์ชนิด H-ZSM-5 (MFI) ที่มีขนาดโครงสร้าง (framework) 5T, 12T, 34T เพื่อศึกษาอันตรกิริยา จากผลการคำนวณ และการวิเคราะห์ข้อมูล การเกิดอันตรกิริยาของระบบด้วยระเบียบวิธีการ ONIOM2 (B3LYP/SDD : UFF) ได้ผลดังนี้

1. อันตรกิริยาระหว่าง $[Pb^{2+}]/[H-ZSM-5]$, 5T-quantum cluster : B3LYP/SDD



Total energy = -1712.185 a.u.

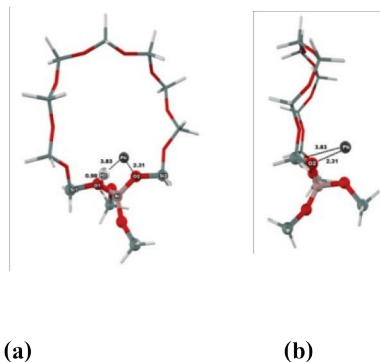
Binding energy = -56.97 kcal/mol

ภาพที่ 2 โครงสร้างที่เสถียรที่สุดของการเกิดอันตรกิริยาระหว่าง Pb^{2+} กับ 5T; H-ZSM-5 zeolite cluster จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี B3LYP/SDD

จากโครงสร้างแสดงอันตรกิริยาระหว่าง Pb^{2+} กับ H-ZSM-5 zeolite; 5T cluster มีค่าพลังงานการดูดซับ (adsorption energy) จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี B3LYP/6-31G(d,p) เท่ากับ -56.97 kcal/mol และไอออน Pb^{2+} เกิดอันตรกิริยากับอะตอมออกซิเจนที่ 2 (O2) ของซีโอไลต์ มีความยาวพันธะ O2- Pb^{2+} เท่ากับ 2.28 Å และอะตอมของ Pb^{2+} กับอะตอมไฮโดรเจน (Hz) ของซีโอไลต์มีความยาวพันธะ Pb^{2+} -Hz เท่ากับ 3.85 Å

จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557

2. อันตรกิริยาระหว่าง $[Pb^{2+}]/[H-ZSM-5]$, 12T-ONIOM model : ONIOM2(B3LYP/SDD: UFF)



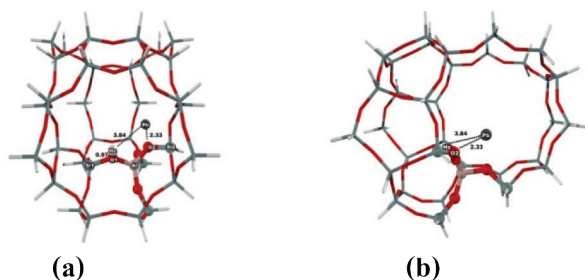
Total energy = -1711.4311 a.u.

Binding energy = -53.08 kcal/mol

ภาพที่ 3 โครงสร้างที่เสถียรที่สุดของอันตรกิริยาระหว่าง Pb^{2+} กับ H-ZSM-5 zeolite, 12T-ONIOM model (a) ภาพด้านหน้า $Pb^{2+}/H-ZSM-5$ (b) ภาพด้านข้าง $Pb^{2+}/H-ZSM-5$ จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี ONIOM2 (B3LYP/SDD : UFF)

จากโครงสร้างแสดงอันตรกิริยาระหว่าง Pb^{2+} กับ H-ZSM-5 zeolite; 12T-ONIOM model มีค่าพลังงานการดูดซับ (adsorption energy) จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี B3LYP/6-31G(d,p) เท่ากับ -53.08 kcal/mol ตามลำดับ และอะตอม Pb^{2+} เกิดอันตรกิริยากับอะตอมออกซิเจนที่ 2 (O2) ของซีโอไลต์ มีความยาวพันธะ O2- Pb^{2+} เท่ากับ 3.83 Å และอะตอมของ Pb^{2+} กับอะตอมไฮโดรเจน (Hz) ของซีโอไลต์มีความยาวพันธะ Pb^{2+} -Hz เท่ากับ 3.85 Å

3. อันตรกิริยาระหว่าง $[Pb^{2+}]/[H-ZSM-5]$, 34T-ONIOM2 model: ONIOM2(B3LYP/SDD:UFF)



Total energy = -1707.97 a.u.

Binding energy = -45.01 kcal/mol

ภาพที่ 4 โครงสร้างที่เสถียรที่สุดของอันตรกิริยาระหว่าง Pb^{2+} กับ H-ZSM-5 zeolite, 34T-ONIOM model (a) ภาพด้านหน้า $Pb^{2+}/H-ZSM-5$ (b) ภาพด้านข้าง $Pb^{2+}/H-ZSM-5$ จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี ONIOM2 (B3LYP/SDD : UFF)

จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557

จากโครงสร้างแสดงอันตรกิริยาระหว่าง Pb^{2+} กับ H-ZSM-5 zeolite; 34T-ONIOM model มีค่าพลังงานการดูดซับ (adsorption energy) จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี B3LYP/6-31G(d,p) เท่ากับ -45.01 kcal/mol และเกิดอันตรกิริยาบริเวณอะตอมออกซิเจนที่ 2 (O2) ของซีโอไลต์กับอะตอมของ Pb^{2+} มีความยาวพันธะ O2- Pb^{2+} เท่ากับ 2.33 Å และมีความยาวพันธะ Pb^{2+} -Hz เท่ากับ 3.84 Å

ตารางที่ 1 แสดงความยาวพันธะและมุมพันธะที่ได้จากการคำนวณในระบบ Pb^{2+} กับ H-ZSM-5 zeolite คำนวณด้วยระเบียบวิธี ONIOM2 (B3LYP/SDD : UFF)

Parameters	B3LYP/SDD		B3LYP/SDD:UFF			
	5T		12T		34T	
	Isolated	Complex	Isolated	Complex	Isolated	Complex
Distances (Å)						
O1-Hz	0.963	0.977	0.950	0.980	0.950	0.979
Al-O1	1.855	1.796	1.830	1.770	1.824	1.757
Si1-O1	1.691	1.815	1.665	1.811	1.648	1.779
Al-O2	1.692	1.783	1.675	1.759	1.670	1.739
Si2-O2	1.616	1.766	1.579	1.756	1.571	1.722
Pb-Hz	2.205	3.852	2.062	3.835	2.034	3.843
Pb-Al	3.723	3.098	3.618	3.078	3.607	3.081
Pb-O2	2.515	2.282	2.683	2.316	2.653	2.333
Angles (degree)						
∠ Si1-O1-Al	131.338	127.175	131.893	133.948	131.752	128.844
∠ Si2-O2-Al	132.548	128.167	138.042	136.651	136.704	134.304
∠ O1-Al-O2	90.263	96.900	92.935	100.003	92.736	96.901
∠ Hz-Pb-O2	58.251	43.238	59.063	42.714	59.336	40.749
∠ Hz-O1-Al	108.695	117.750	111.223	111.857	110.791	114.774

ตารางที่ 2 แสดงผลของขนาดโครงสร้าง (framework) ต่อพลังงานการดูดซับ ระหว่าง Pb^{2+} กับ H-ZSM-5 zeolite

	Adsorption energies (kcal/mol)		
	Pb^{2+} /H-ZSM-5		
	5T	12T	34T
Full B3LYP/SDD	-56.97	-	-
ONIOM2 (B3LYP/SDD : UFF)	-	-53.98	-45.01

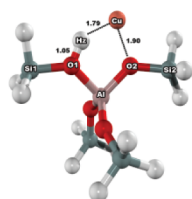
จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557

จากการศึกษาการเกิดอันตรกิริยาของ Pb^{2+} บนโครงสร้างซีโอไลต์ชนิด H-ZSM คำนวนด้วยระเบียบวิธีการ ONIOM2 (B3LYP/SDD:UFF) พบว่า extended structure ของซีโอไลต์ชนิด H-ZSM-5 จาก 5T, 12T ถึง 34T มีค่าพลังงานการดูดซับ (adsorption energy) เพิ่มขึ้นตามขนาดโครงสร้าง ผลที่ได้สนับสนุนว่าในระบบมีการดูดซับ Pb^{2+} บนโครงสร้างซีโอไลต์ชนิด H-ZSM-5 ได้ และมีความสามารถ ดูดซับได้แตกต่างกัน

ตอนที่ 2 ศึกษาการคำนวณอันตรกิริยาของไอออนทองแดง (Cu^{2+}) บนโครงสร้างซีโอไลต์ชนิด ZSM-5

จากทฤษฎีการคำนวณระบบอันตรกิริยาระหว่างโครงสร้างของซีโอไลต์ ชนิด H-ZSM-5 (MFI) กับ Cu^{2+} ด้วยวิธีการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์ โดยสร้าแบบจำลองโครงสร้างของซีโอไลต์ ชนิด H-ZSM-5 ที่มีขนาดโครงสร้าง (framework) 5T, 12T, 34T และแบบจำลองโครงสร้างของ Cu^{2+} จากผลการคำนวณ และการวิเคราะห์ข้อมูลการเกิดอันตรกิริยาของระบบดังกล่าว โดยเปรียบเทียบผลของขนาดโครงสร้าง (framework) ด้วยระเบียบวิธีการ ONIOM2 (B3LYP /6-31G(d,p): UFF) ได้ผลดังนี้

1. อันตรกิริยาระหว่าง $[Cu^{2+}]/[H-ZSM-5]$, 5T-quantum cluster : B3LYP /6-31G(d,p)



Total energy = -3349.67 a.u.

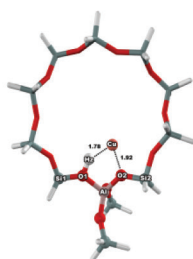
Binding energy = -35.20 kcal/mol

ภาพที่ 5 โครงสร้างที่เสถียรที่สุดของการเกิดอันตรกิริยาระหว่าง Cu^{2+} กับ 5T; H-ZSM-5 zeolite cluster
จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี B3LYP/6-31G(d,p)

จากโครงสร้างแสดงอันตรกิริยาระหว่าง Cu^{2+} กับ H-ZSM-5 zeolite; 5T cluster พลังงานที่ได้จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี B3LYP/6-31G(d,p) มีค่าพลังงานการดูดซับ (adsorption energy) เท่ากับ -35.20 kcal/mol ตามลำดับ และบริเวณที่เกิดอันตรกิริยาคือบริเวณอะตอมออกซิเจนที่ 2 (O2) ของซีโอไลต์กับอะตอมของ Cu^{2+} มีความยาวพันธะ O2- Cu^{2+} เท่ากับ 1.90 Å และอะตอมของ Cu^{2+} กับอะตอมไฮโดรเจน (Hz) ของซีโอไลต์มีความยาวพันธะ Cu^{2+} -Hz เท่ากับ 1.79 Å

จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557

2. อันตรกิริยาระหว่าง $[\text{Cu}^{2+}]/[\text{H-ZSM-5}]$, 12T-ONIOM model: ONIOM2(B3LYP/6-31g(d,p): UFF)



(a)



(b)

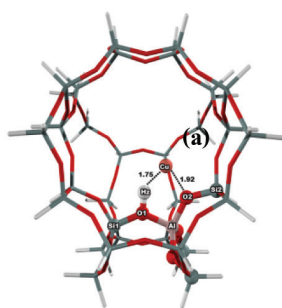
Total energy = -3348.93 a.u.

Binding energy = -34.92 kcal/mol

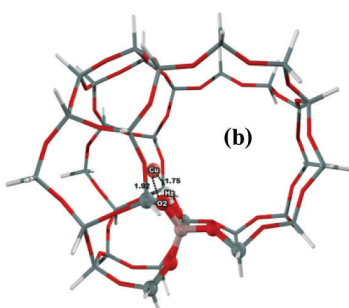
ภาพที่ 6 โครงสร้างที่เสถียรที่สุดของอันตรกิริยาระหว่าง Cu^{2+} กับ H-ZSM-5 zeolite, 12T-ONIOM model (a) ภาพด้านหน้า $\text{Cu}^{2+}/\text{H-ZSM-5}$ (b) ภาพด้านข้าง $\text{Cu}^{2+}/\text{H-ZSM-5}$ จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี ONIOM2(B3LYP/6-31g(d,p): UFF)

จากโครงสร้างแสดงอันตรกิริยาของระบบ $[\text{Cu}^{2+}]/[\text{H-ZSM-5}]$, 12T-ONIOM model พลังงานที่ได้จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี ONIOM2(B3LYP/6-31g(d,p):UFF) มีค่าพลังงานการดูดซับ (adsorption energy) เท่ากับ -34.92 kcal/mol บริเวณที่เกิดปฏิกิริยาคือบริเวณอะตอมออกซิเจนที่ 2 (O2) ของซีโอไลต์กับอะตอมของ Cu^{2+} มีความยาวพันธะ O2- Cu^{2+} เท่ากับ 1.92 Å และอะตอมของ Cu^{2+} กับอะตอมไฮโดรเจน (Hz) ของซีโอไลต์มีความยาวพันธะ $\text{Cu}^{2+}\text{-Hz}$ เท่ากับ 1.78 Å

3. อันตรกิริยาระหว่าง $[\text{Cu}^{2+}]/[\text{H-ZSM-5}]$, 34T-ONIOM2 model :ONIOM2(B3LYP/6-31g(d,p):UFF)



(a)



(b)

Total energy = -3345.482 a.u.

Binding energy = -33.70 kcal/mol

ภาพที่ 7 โครงสร้างที่เสถียรที่สุดของอันตรกิริยาระหว่าง Cu^{2+} กับ H-ZSM-5 zeolite, 34T-ONIOM model (a) ภาพด้านหน้า $\text{Cu}^{2+}/\text{H-ZSM-5}$ (b) ภาพด้านข้าง $\text{Cu}^{2+}/\text{H-ZSM-5}$ จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี ONIOM2(B3LYP/6-31g(d,p):UFF)

จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557

จากโครงสร้างแสดงอันตรกิริยาของระบบ $[Cu^{2+}]/[H-ZSM-5]$, 34T-ONIOM model พลังงานที่ได้จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธี ONIOM2(B3LYP/6-31g(d,p):UFF) มีค่าพลังงานการดูดซับ (adsorption energy) เท่ากับ -33.70 kcal/mol บริเวณที่เกิดปฏิกิริยาคือบริเวณอะตอมออกซิเจนที่ 2 (O2) ของซีโอไลต์กับอะตอมของ Cu^{2+} มีความยาวพันธะ O2- Cu^{2+} เท่ากับ 1.92 Å และอะตอมของ Cu^{2+} กับอะตอมไฮโดรเจน (Hz) ของซีโอไลต์มีความยาวพันธะ Cu^{2+} -Hz เท่ากับ 1.75 Å

ตารางที่ 3 แสดงความยาวพันธะและมุมพันธะที่ได้จากการคำนวณในระบบ Cu^{2+} กับ H-ZSM-5 zeolite คำนวณด้วยระเบียบวิธี ONIOM2 (B3LYP/6-31g(d,p):UFF)

Parameters	B3LYP/6-31G(d,p)		B3LYP/6- 31G(d,p):UFF			
	5T		12T		34T	
	Isolated	Complex	Isolated	Complex	Isolated	Complex
Distances (Å)						
O1-Hz	0.948	1.056	0.950	1.052	0.950	1.064
Al-O1	1.847	1.805	1.830	1.785	1.824	1.764
Si1-O1	1.684	1.684	1.665	1.680	1.648	1.658
Al-O2	1.684	1.755	1.675	1.738	1.670	1.723
Si2-O2	1.600	1.653	1.579	1.655	1.571	1.627
Cu-Hz	2.264	1.790	2.062	1.782	2.034	1.750
Cu-O2	3.148	1.908	2.683	1.919	2.653	1.924
Cu-Al	4.122	3.123	3.618	3.100	3.607	3.141
Angles (degree)						
∠ Si1-O1-Al	131.820	130.515	131.893	139.526	131.752	132.993
∠ Si2-O2-Al	135.634	130.104	138.042	135.220	136.704	131.579
∠ O1-Al-O2	92.300	91.531	92.935	94.023	92.736	90.649
∠ Hz-Cu-O2	48.230	78.754	59.063	77.015	59.336	75.616
∠ O1-Hz-Cu	174.41	141.393	151.722	146.689	154.040	144.762

จากงานประชุมวิชาการระดับชาติ มหาวิทยาลัยทักษิณ ครั้งที่ 24 ประจำปี 2557

ตารางที่ 4 แสดงผลของขนาดโครงสร้าง (framework) ต่อพลังงานการดูดซับ ระหว่าง Cu^{2+} กับ H-ZSM-5 zeolite

	Adsorption energies (kcal/mol)		
	$\text{Cu}^{2+}/\text{H-ZSM-5}$		
	5T	12T	34T
Full B3LYP/6-31G(d,p)	-35.20	-	-
ONIOM2(B3LYP/6-31G(d,p):UFF)	-	-34.92	-33.71

จากการศึกษาการเกิดอันตรกิริยาของ Cu^{2+} บนโครงสร้างซีโอไลต์ชนิด H-ZSM จำนวนด้วยระเบียบวิธีการ ONIOM2 (B3LYP/6-31G (d,p):UFF) พบว่า extended structure ของซีโอไลต์ชนิด H-ZSM-5 จาก 5T, 12T ถึง 34T มีค่าพลังงานการดูดซับ (adsorption energy) เพิ่มขึ้นตามขนาดโครงสร้าง การเกิดอันตรกิริยาระหว่าง Cu^{2+} กับซีโอไลต์ชนิด H-ZSM-5 ผลที่ได้สนับสนุนว่าในระบบมีการดูดซับ Cu^{2+} บนโครงสร้างซีโอไลต์ชนิด H-ZSM-5 ได้ และความสามารถการดูดซับแตกต่างกันตามขนาดของโครงสร้างซีโอไลต์ จากนั้นได้ทำการทดลองในระดับห้องปฏิบัติการเคมี

สรุปผลการวิจัย

การศึกษาการเกิดอันตรกิริยาของไอออนตะกั่วและทองแดงบนโครงสร้างซีโอไลต์ โดยมีความเสถียรของระบบและพลังงานของระบบ พบว่าไอออนตะกั่วและทองแดงจะเกิดอันตรกิริยากับโครงสร้างของ ZSM-5 บริเวณที่มีความหนาแน่นของอิเล็กตรอน คืออะตอมของออกซิเจนนั่นเอง ซึ่งโครงสร้างของซีโอไลต์เป็นโครงสร้างตัวแทนของชนิดซีโอไลต์ที่พบในปริมาณมากในซีโอไลต์ธรรมชาติ จากผลการศึกษาสามารถสร้างความน่าจะเป็นทางทฤษฎีเคมีในการเกิดอันตรกิริยาขึ้น หรือมีความเป็นไปได้ที่โครงสร้างซีโอไลต์สามารถดูดซับไอออนตะกั่วและทองแดงได้ ดังนั้นน่าจะเป็นทางเลือกหนึ่ง ในการกำจัดโลหะหนัก ด้วยซีโอไลต์ธรรมชาติเป็นวัสดุดูดซับ จึงสามารถใช้เป็นข้อมูลพื้นฐานในการประยุกต์ใช้ซีโอไลต์ธรรมชาติในการกำจัดโลหะหนักที่ปนเปื้อนในน้ำเสีย ร่วมกับวัสดุดูดซับชนิดต่าง ๆ

คำขอบคุณ

ผู้วิจัยขอขอบคุณสำนักงานกองทุนสภาวิจัยแห่งชาติที่ให้ทุนสนับสนุนการวิจัย และขอขอบคุณหน่วยวิจัยเคมีคอมพิวเตอร์ มหาวิทยาลัยทักษิณ ที่ให้การสนับสนุนด้านวิชาการและอำนวยความสะดวกในการดำเนินการวิจัย

เอกสารอ้างอิง

- [1] สุพจน์ หารหนองบัว. (2547). การพัฒนาระบบวิธีทางเคมีคอมพิวเตอร์และการนำไปใช้ในการ ออกแบบยาและการศึกษาการใช้ประโยชน์จากซีโอไลต์. วารสารวิทยาศาสตร์สมาคมวิทยาศาสตร์แห่งประเทศไทย (สวท.) ในพระบรมราชูปถัมภ์. 57(4), 245-251.
- [2] Zhanpiesov, N.U., Ju, W.S. and Anpo, M. (2002). Local structure of highly displaced lead containing zeolite. An ab initio and density functional theory study. J. Mol. Struct. (Theochem). 592, 155-160.