การสังเคราะห์สารประกอบไซโคลแอลคิลไนเทรตจากไซโคลแอลิแฟทิกโมโนแอลกอฮอล์
เพื่อใช้เป็นสารเพิ่มค่าซีเทน

นาย ธีรวัติ ขันกสิกรรม

SYNTHESIS OF CYCLOALKYL NITRATE COMPOUNDS FROM CYCLOALIPHATIC MONOALCOHOLS AS CETANE IMPROVERS

Mr. Theerawat Khankasikham

Thesis Title   SYNTHESIS OF CYCLOALKYL NITRATE COMPOUNDS
                    FROM   CYCLOALIPHATIC   MONOALCOHOLS   AS
                    CETANE IMPROVERS

By   Mr. Theerawat Khankasikham

Field of Study   Petrochemistry and Polymer Science

Thesis Advisor   Associate Professor Somchai Pengprecha, Ph.D.

Accepted by the Faculty of Science, Chulalongkorn University in Partial Fulfillment of the Requirements for the Master's Degree

....Deputy Dean for Administrative Affairs

...........*Pipat Karntiang*...............Acting Dean, Faculty of Science

(Associate Professor Pipat Karntiang, Ph.D.)

Thesis Committee

....Chairman

(Associate Professor Supawan Tantayanon, Ph.D.)
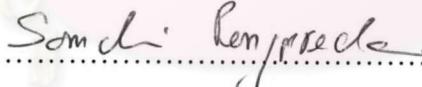
....Thesis Advisor

(Associate Professor Somchai Pengprecha, Ph.D.)
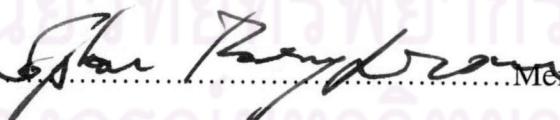
....Member

(Associate Professor Sophon Roengsumran, Ph.D.)

....Member

(Associate Professor Amorn   Petsom, Ph.D.)

....Member

(Assistant Professor Warinthorn Chavasiri, Ph.D.)

ธีรวัติ ขันกสิกรรม : การสังเคราะห์สารประกอบไซโคลแอลคิลไนเทรตจากไซโคลแอลิแฟ ทิกโมโนแอลกอฮอล์เพื่อใช้เป็นสารเพิ่มค่าซีเทน (SYNTHESIS OF CYCLOALKYL NITRATE COMPOUNDS FROM CYCLOALIPHATIC MONOALCOHOLS AS CETANE IMPROVERS) อ.ที่ปรึกษา : รศ.ดร. สมใจ เพ็งปรีชา; 98 หน้า, ISBN 974-03-1309-4

สารประกอบไซโคลแอลคิลไนเทรตและเททราไฮโดรเฟอฟิวริลไนเทรตสามารถสังเคราะห์ได้โดยวิธีไนเทรชันของสารประกอบไซโคลแอลิแฟทิกโมโนแอลกอฮอล์ เช่น ไซโคลเฮกซิลเมทานอล, 2-ไซโคลเฮกซิลเอทานอล, 1,4-ไซโคลเฮกเซนไดเมทานอล และ เททราไฮโดรเฟอฟิวริลแอลกอฮอล์เป็นต้น ด้วยกรดไนตริกเข้มข้นและซัลฟิวริกเข้มข้น โดยมีไดคลอโรมีเทนเป็นตัวทำละลาย ได้พิสูจน์เอกลักษณ์สารประกอบไนเทรตที่ได้โดยการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคทางสเปกโทรสโกปี ได้แก่ อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี และนิวเคลียร์แมกเนทิกเรโซแนนซ์สเปกโทรสโกปี สารประกอบไนเทรตที่สังเคราะห์ได้สามารถละลายในน้ำมันดีเซลพื้นฐานได้ง่าย จากการตรวจสอบค่าดัชนีซีเทนพบว่า สารเหล่านี้ให้ค่าดัชนีซีเทนเพิ่มขึ้นประมาณ 4.0 และ 6.4 หน่วยที่ความเข้มข้น 0.05 และ 0.10 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนักตามลำดับ ดังนั้นสารประกอบไนเทรตที่สังเคราะห์ได้มีแนวโน้มที่ให้ค่าซีเทนเพิ่มขึ้นมากกว่าน้ำมันดีเซลพื้นฐาน และ2-เอทิลเฮกซิลไนเทรตซึ่งเป็นสารเพิ่มค่าซีเทนที่จำหน่ายในเชิงพาณิชย์ โดยเฉพาะ เททราไฮโดรเฟอฟิวริลไนเทรตมีแนวโน้มเพิ่มค่าซีเทนมากที่สุด สารประกอบไนเทรตเหล่านี้มีแนวโน้มที่จะเพิ่มค่าซีเทนได้ดีกว่าเมื่อเทียบกับสารเพิ่มค่าซีเทนในปัจจุบัน

หลักสูตร....ปิโตรเคมีและวิทยาศาสตร์พอลิเมอร์.......... ลายมือชื่อนิสิต......ธีรวัติ ขันกสิกรรม......

สาขาวิชา...ปิโตรเคมีและวิทยาศาสตร์พอลิเมอร์.......... ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา.....................

ปีการศึกษา..........2544..........

THEERAWAT KHANKASIKHAM: SYNTHESIS OF CYCLOALKYL NITRATE COMPOUNDS FROM CYCLOALIPHATIC MONOALCOHOLS AS CETANE IMPROVERS. THESIS ADVISOR: ASSOC. PROF. SOMCHAI PENGPRECHA, Ph.D., 98 PAGES. ISBN 974-03-1309-4

Cycloalkyl nitrate compounds and tetrahydrofurfuryl nitrate could be synthesized by nitration of cycloalkyl alcohols such as cyclohexylmethanol, 2-cyclohexylethanol, 1,4-cyclohexanedimethanol and tetrahydrofurfuryl alcohol in the presence of concentrated nitric acid and concentrated sulfuric acid with dichloromethane as a solvent. The nitrate compounds obtained were identified by spectroscopic techniques, such as Infrared Spectroscopy and Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy. The nitrate compounds could be easily blended with base diesel fuel. They were effective in increasing cetane index to 4.0 units and 6.4 units at the concentration of 0.05 % and 0.10 %wt., respectively. It was found that these nitrate compounds gave higher cetane improvement than those of base diesel fuel and the commercial 2-ethylhexyl nitrate. Especially, tetrahydrofurfuryl nitrate gave the highest cetane improvement. These nitrate compounds had potential to be used to improve cetane number of base diesel fuel more than the commercial cetane improver.

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Program....... Petrochemistry and Polymer Science .... Student's signature................

Field of study.... Petrochemistry and Polymer Science. Advisor's signature................

Academic year............... 2001 ....

ACKNOWLEDGEMENTS

CONTENTS

CONTENTS (continued)

CONTENTS (continued)

LIST OF TABLES

LIST OF TABLES (continued)

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

LIST OF FIGURES

LIST OF FIGURES (continued)

LIST OF FIGURES (continued)

ABBREVIATIONS

ASTM	=	American Society for Testing and Materials
API	=	American Petroleum Institute
CCI	=	Calculated Cetane Index
^{13}C-NMR	=	Carbon-13 Nuclear Magnetic Resonance
cSt	=	Centistroke
CFR	=	Cooperative Fuel Research Council
°C	=	Degree Celcius
°F	=	Degree Fahrenheit
^{1}H-NMR	=	Proton Nuclear Magnetic Resonance
MPa	=	Mega Pascal
ml	=	Milliliter
Sp.Gr.	=	Specific Gravity
rpm	=	Round per minute
cm^{-1}	=	Unit of wave number
%wt	=	Weight percent
%yield	=	Yield percent