

การพัฒนาแบบจำลองคณิตศาสตร์สำหรับปฏิบัติการแตกตัวด้วยความร้อนของน้ำมันมะพร้าว



นางสาว กรุณรัตน์ สกุลนามรัตน์

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี


คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2545

ISBN 974-17-2351-2

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

DEVELOPMENT OF MATHEMATICAL MODEL FOR PYROLYSIS OF COCONUT OIL



Ms. Karunrat Sakulnarmrat

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Engineering in Chemical Engineering

Department of Chemical Engineering

Faculty of Engineering

Chulalongkorn University

Academic Year 2002

ISBN 974-17-2351-2

หัวข้อวิทยานิพนธ์ การพัฒนาแบบจำลองคณิตศาสตร์สำหรับปฏิบัติการแตกตัวด้วยความร้อนของน้ำมันมะพร้าว

โดย นางสาว กรุณรัตน์ สกุลนามรัตน์

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี

อาจารย์ที่ปรึกษา ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.เดชา ฉัตรศิริเวช

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้บัณฑิตวิทยาลัย
เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต

.....คณบดีคณะวิศวกรรมศาสตร์
(ศาสตราจารย์ ดร. สมศักดิ์ ปัญญาแก้ว)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

.....ประธานกรรมการ
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. วิจิตรา จงวิศาล)

.....อาจารย์ที่ปรึกษา
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. เดชา ฉัตรศิริเวช)

.....กรรมการ
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ประเสริฐ ภาวนันต์)

.....กรรมการ
(อาจารย์ ดร. เจ็ดศักดิ์ ไชยคุณา)

สภามหาวิทยาลัย
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

กฤษณ์รัตน์ สกลนามรัตน์ : การพัฒนาแบบจำลองคณิตศาสตร์สำหรับปฏิกิริยาการแตกตัว
ด้วยความร้อนของน้ำมันมะพร้าว (DEVELOPMENT OF MATHEMATICAL MODEL FOR
PYROLYSIS OF COCONUT OIL) อ.ที่ปรึกษา : ผศ.ดร. เตชา ฉัตรศิริเวช, 43 หน้า.
ISBN 974-17-2351-2.

น้ำมันมะพร้าวประกอบด้วยไตรกลีเซอไรด์ผสม 8 ชนิด ซึ่งไตรกลีเซอไรด์แต่ละชนิดประกอบด้วยกลุ่มเอสเทอร์ 3 กลุ่มที่เป็นผลจากกรดคาร์บอกซิลิกชนิดเดียวกัน สัดส่วนของไตรกลีเซอไรด์แต่ละชนิดในไตรกลีเซอไรด์ผสมจะเป็นสัดส่วนเดียวกับกรดคาร์บอกซิลิกในน้ำมันมะพร้าว ภายใต้เงื่อนไขของสมดุลเคมีไตรกลีเซอไรด์เกิดปฏิกิริยาเป็นสารประกอบกรดคาร์บอกซิลิก แอลดีไฮด์ และอัลคีนได้หมดที่อุณหภูมิตั้งแต่ 600 องศาเซลเซียสขึ้นไป ผลิตภัณฑ์หลักที่ได้ประกอบด้วยกรดโนนาโนอิกร้อยละ 43.28 อโครลีนร้อยละ 19.87 และ 2-เมทิลเพนทีนร้อยละ 35.94 โดยมีมวล



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี
สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี
ปีการศึกษา 2545

ลายมือชื่อนิสิต
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

4370208121 : MAJOR CHEMICAL ENGINEERING

KEY WORD: VEGETABLE OIL / COCONUT OIL / TRIGLYCERIDE / PYROLYSIS / EQUILIBRIUM MODEL

KARUNRAT SAKULNARMRAT: DEVELOPMENT OF MATHEMATICAL MODEL FOR PYROLYSIS OF COCONUT OIL. THESIS ADVISOR : ASSISTANT PROFESSOR DEACHA CHATSIRIWECH, 43 pp. ISBN 974-17-2351-2.

Coconut oil was modeled as a mixture of 8 triglycerides, each of which contained 3 ester groups resulted from the same carboxylic acids. The composition of the mixture corresponded with that of carboxylic acid in coconut oil. All triglycerides thermodynamically completely converted to carboxylic acids, aldehydes and alkenes at 600 °C and above. Main equilibrium pyrolyzed products consisted of 43.28 % nonanoic acid, 19.87 % acrolein and 35.94 % 2-methyl-pentene.



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Department Chemical Engineering.....

Field of study Chemical Engineering.....

Academic year 2002

Student's signature

Advisor's signature

Co-advisor's signature

กิตติกรรมประกาศ

ผู้เขียนขอกราบขอบพระคุณอาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. เดชา ฉัตรศิริเวช ผู้มีส่วนสำคัญในการริเริ่มงานวิจัย รวมทั้งการให้คำแนะนำและช่วยเหลือตลอดงานวิจัยนี้

ขอขอบคุณประธานกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. วิจิตรา จงวิศาล และกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ประเสริฐ ภาวสันต์ และ ดร. เจ็ดศักดิ์ ไชยคุนา สำหรับความช่วยเหลือ ตั้งแต่การตรวจสอบโครงร่างวิทยานิพนธ์ ตลอดจนข้อเสนอแนะต่างๆ ในการศึกษาวิจัย

ขอขอบคุณบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย สำหรับเงินสนับสนุนบางส่วนในงานวิจัย และขอขอบคุณเจ้าหน้าที่ภาควิชาวิศวกรรมเคมี สำหรับการอำนวยความสะดวกตลอดการศึกษา รวมทั้งความช่วยเหลือจากเพื่อนๆ ในห้องวิจัย Process System Engineering และห้องวิจัย Separation Technology

ท้ายสุดนี้ ขอขอบคุณครอบครัวและเพื่อนๆ ทุกคนที่เป็นกำลังใจในระหว่างการศึกษาจนสำเร็จได้ด้วยดี

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อ(ภาษาไทย).....	ง
บทคัดย่อ(ภาษาอังกฤษ).....	จ
กิตติกรรมประกาศ.....	ฉ
สารบัญ.....	ช
สารบัญรูป.....	ฌ
สารบัญตาราง.....	ฉ
สัญลักษณ์และอักษรย่อ.....	ญ
1 บทนำ.....	1
2 ปฏิบัติการแตกตัวของน้ำมันมะพร้าว.....	6
2.1 โครงสร้างและองค์ประกอบของน้ำมันมะพร้าว.....	6
2.2 ปฏิบัติการแตกตัวของไตรกลีเซอไรด์และกรดไขมัน.....	7
2.3 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง.....	9
3 การจำลองระบบปฏิกิริยาเคมีสำหรับปฏิบัติการแตกตัว ด้วยความร้อนของน้ำมันมะพร้าว.....	12
3.1 การจำลองระบบปฏิบัติการแตกตัวของน้ำมันมะพร้าว.....	13
3.2 การคำนวณหาปริมาณของผลิตภัณฑ์.....	22
3.2.1 พลังงานอิสระกิบบสที่น้อยที่สุด.....	23
3.2.2 วิธีการคำนวณและเปรียบเทียบผล.....	25
4 ผลการทดลอง.....	26
5 สรุปผลการวิจัยและข้อเสนอแนะ.....	39
5.1 สรุปผลการวิจัย.....	39
5.2 ข้อเสนอแนะ.....	40
รายการอ้างอิง.....	41
ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์.....	43

สารบัญรูป

	หน้า
1.2 ปฏิริยาเคมีที่เกี่ยวข้องและผลิตภัณฑ์ประเภทต่าง ๆ จากน้ำมันพืช	2
2.1 โครงสร้างโมเลกุลของไตรกลีเซอไรด์อิ่มตัว	6
2.2 โครงสร้างโมเลกุลของไตรกลีเซอไรด์ที่มีมวลโมเลกุลน้อยที่สุด (ก) และมากที่สุด (ข)	6
2.3 ปฏิริยาการแตกตัวของไตรกลีเซอไรด์	8
2.4 ปฏิริยาการแตกตัวของไตรกลีเซอไรด์ได้สารประกอบอัลคีน	9
3.1 โครงสร้างไตรกลีเซอไรด์จำลองของน้ำมันมะพร้าว	14
3.2 การคำนวณสมมูลเคมีระบบปฏิริยาของไตรกลีเซอไรด์ทั้งหมดพร้อมกัน	21
3.3 การคำนวณสมมูลเคมีระบบปฏิริยาของไตรกลีเซอไรด์แต่ละชนิดแยกกัน	21
4.1 เปรียบเทียบผลการทดลองที่อุณหภูมิ 700-1000 องศาเซลเซียส เวลา 30 วินาที	34
4.2 ผลการวิเคราะห์สารประกอบที่ได้จากการทดลองด้วย GC/MS	34



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญตาราง

	หน้า
1.1 ปริมาณการผลิตของมะพร้าวที่เพาะปลูกในปี 2536/2545.....	1
2.1 องค์ประกอบของกรดไขมันในน้ำมันมะพร้าว.....	7
3.1 สัดส่วนโดยมวลของไตรกลีเซอไรด์แต่ละชนิด	14
3.2 ค่าคงที่สำหรับการประมาณค่าคุณสมบัติของสารประกอบ	15
3.3 ค่า group interaction parameters a_{mn} และ a_{nm}	18
3.4 กลุ่มฟังก์ชันของสารประกอบแต่ละประเภท	18
3.5 ข้อมูลการประมาณค่าจากสูตรโครงสร้างด้วยวิธี UNIFAC	19
3.6 กลุ่มของสารประกอบประเภทต่าง ๆ ที่ได้จากการทดลอง	22
4.1 ชนิดของสารประกอบแบ่งประเภทจากผลการทดลองของฟอร์เทส.....	26
4.2 ปริมาณและชนิดของสารประกอบจากผลการทดลองที่สภาวะต่างๆ	27
4.3 ผลการคำนวณเมื่อใช้สมการสภาวะต่างๆ	28
4.4 ผลการคำนวณด้วยไตรกลีเซอไรด์จำลองเปรียบเทียบกับผลการทดลอง	29
4.5 ผลการคำนวณด้วยไตรกลีเซอไรด์ผสมด้วยวิธีการคำนวณต่างๆ.....	31
4.6 ผลการคำนวณกรณีใส่สารประกอบที่รายงานยกเว้นสารประกอบ ไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวประเภทอัลเคน.....	33
4.7 ปริมาณของกรดคาร์บอกซิลิกในน้ำมันมาคอบาและน้ำมันมะพร้าว	36
4.8 ผลการคำนวณกรณีใส่สารประกอบตามผลการรายงานยกเว้นสาร ประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวประเภทอัลเคนเมื่อใช้องค์ประกอบน้ำมันมะพร้าว.....	37

สัญลักษณ์และอักษรย่อ

A_k	จำนวนรวมของอะตอมของธาตุ k ในระบบ
a_{ik}	จำนวนของอะตอมของธาตุ k ในโมเลกุลขององค์ประกอบชนิด i
f_i	ฟูกาซิตีขององค์ประกอบ i ในสารละลาย
$G_{T,P}$	จำนวนรวมของ Gibbs free energy ของระบบที่อุณหภูมิและความดันคงที่
ΔG_{fi}°	Gibbs free energy of formation (kJ/mol)
ΔG^E	excess Gibbs free energy
n_i	จำนวนโมลขององค์ประกอบ i ในระบบ
y_i	vapor-phase mole fraction
λ_k	lagrangian multiplier ของธาตุ k
μ_i	chemical potential
ϕ_i	fugacity coefficient
t	เวลา [s]
T	อุณหภูมิ [$^\circ\text{C}$]
P	ความดัน [atm]
z	lattice coordination number
$\nu_k^{(i)}$	จำนวนของกลุ่มของธาตุ k ในองค์ประกอบชนิด i
R_k	group parameter
Q_k	group parameter
Γ_k	group residual activity coefficient
$\Gamma_k^{(i)}$	group residual activity coefficient ของธาตุ k ในองค์ประกอบ i
θ_m	area fraction
U_{mn}	interaction energy ระหว่างกลุ่ม m และ n
a_{mn}, a_{nm}	group-group interaction

ตัวห้อย

i	องค์ประกอบตัวที่ i
k	ธาตุตัวที่ k

ตัวยก

๐

ที่สภาวะมาตรฐาน



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 1

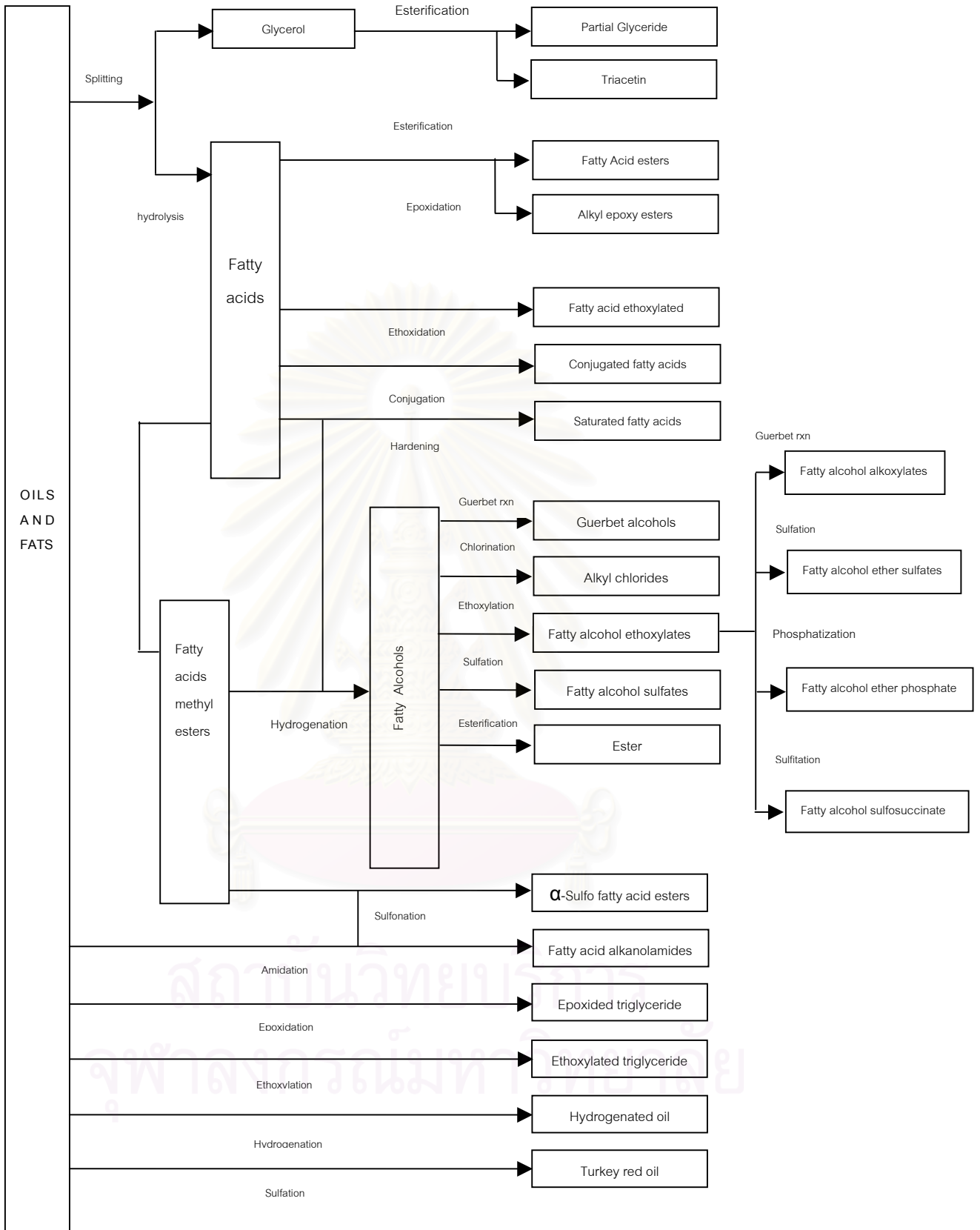
บทนำ

มะพร้าวเป็นพืชน้ำมันประเภทหนึ่ง ที่มีการผลิตภายในประเทศเป็นปริมาณมาก และเป็นที่ยอมรับกันทั่วทุกภูมิภาคของประเทศ มีราคาค่อนข้างถูก ดังนั้นน้ำมันมะพร้าวจึงได้รับความสนใจในฐานะของวัตถุดิบเพื่อการผลิตผลิตภัณฑ์สำหรับการอุปโภคและบริโภค และได้มีผู้ศึกษาวิจัยอย่างกว้างขวางนับตั้งแต่อดีตจนกระทั่งปัจจุบัน ด้วยการเปลี่ยนน้ำมันมะพร้าวให้เป็นน้ำมันเชื้อเพลิงสำหรับการสันดาปภายในรถยนต์โดยการให้เกิดปฏิกิริยาแตกตัวด้วยความร้อนพร้อมด้วยตัวเร่งปฏิกิริยา เช่น แมกนีเซียมออกไซด์ แคลเซียมออกไซด์ อลูมิเนียมไตรออกไซด์ และซีโอไลท์[1-5]

มะพร้าวโดยทั่วไปมีพื้นที่ในการเพาะปลูกในแถบจังหวัดชายทะเลของประเทศ เป็นส่วนมาก ต้นมะพร้าวมีความสูงประมาณ 30 เมตร ผลมะพร้าวที่ให้น้ำมันได้มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางประมาณ 20 เซนติเมตร เนื้อในเมล็ดมะพร้าวซึ่งเป็นแหล่งน้ำมันมีความหนาประมาณ 1 ถึง 2 เซนติเมตร ปริมาณการผลิตมะพร้าวมีประมาณ 1,500 ล้านตัน ในปี 2545[6] เพื่อใช้ในการบริโภคโดยตรงและใช้เป็นวัตถุดิบในอุตสาหกรรมเคมีต่างๆ ปริมาณการผลิตของมะพร้าวในช่วงที่ผ่านมาได้แสดงดังตารางที่ 1.1

ตารางที่ 1.1 ปริมาณการผลิตของมะพร้าวที่เพาะปลูกในปี 2536/2545[7]

ปี	ผลผลิต (ล้านตัน)
2536	1,462
2537	1,435
2538	1,413
2539	1,419
2540	1,386
2541	1,372
2542	1,381
2543	1,400
2544	1,480
2545	1,560



รูปที่ 1.1 แสดงปฏิกิริยาเคมีที่เกี่ยวข้องและผลิตภัณฑ์ประเภทต่างๆ จากน้ำมันพืช[8]

น้ำมันมะพร้าวซึ่งเป็นไตรกลีเซอไรด์ผสม ที่มีมวลโมเลกุลในช่วงคาร์บอน 27 – 57 หรือมวลโมเลกุลเฉลี่ย 675 สามารถเปลี่ยนเป็นสารประกอบอินทรีย์โซ่ตรงที่มีจำนวนอะตอมธาตุคาร์บอนระหว่าง 8 ถึง 12 อะตอม ได้แก่ กรดไขมัน เอสเทอร์ แอลกอฮอล์ เอไมด์ ซัลเฟต และฟอสเฟต ด้วยปฏิกิริยาต่างๆ ดังแสดงในรูปที่ 1.1 น้ำมันมะพร้าวซึ่งมีโครงสร้างเป็นไตรกลีเซอไรด์สามารถใช้เป็นสารตั้งต้นเพื่อเปลี่ยนเป็นสารประกอบผลิตภัณฑ์ในกลุ่มต่างๆ ได้มากมาย ซึ่งปฏิกิริยาเคมีที่เกี่ยวข้องเพื่อใช้การเปลี่ยนสารประกอบไตรกลีเซอไรด์ผสมเป็นสารประกอบอื่น ๆ มีดังต่อไปนี้[9]

ปฏิกิริยาสปลิตติง (Splitting) หรือปฏิกิริยาไฮโดรไลซิส (Hydrolysis) เป็นปฏิกิริยาเคมีที่ใช้ในการเปลี่ยนน้ำมันมะพร้าวและน้ำมันพืชประเภทอื่นๆ ให้ได้ผลิตภัณฑ์เป็นกรดไขมันหรือกรดคาร์บอกซิลิกและกลีเซอรอล กระบวนการเกิดปฏิกิริยาไฮโดรไลซิสสามารถแบ่งได้ 4 ประเภทคือ (1) กระบวนการทวิสเซล (Twitchell process), (2) กระบวนการออโตเคลบแบบกะ (Batch autoclave process), (3) กระบวนการแบบต่อเนื่อง (Continuous process) (3) กระบวนการเอนไซม์เมติก (Enzymatic process)

กระบวนการที่เป็นที่นิยมและมีประสิทธิภาพสูงสุดกระบวนการหนึ่งก็คือกระบวนการแบบต่อเนื่อง (Continuous process) หรือเป็นที่รู้จักโดยทั่วไปในชื่อของกระบวนการ Colgate Emery process ดำเนินการที่สภาวะอุณหภูมิประมาณ 250 ถึง 260 องศาเซลเซียส ความดัน 5 เมกะปาสคาล ใช้เวลา 2 ถึง 3 ชั่วโมง ได้ผลิตภัณฑ์กรดคาร์บอกซิลิกประมาณร้อยละ 99 โดยมวล ซึ่งผลิตภัณฑ์กรดคาร์บอกซิลิกที่ได้สามารถนำไปผลิตเป็นสารประกอบประเภทอื่นๆ ได้อีกมากมาย

กรดคาร์บอกซิลิกที่มีจำนวนคาร์บอนอะตอม 12 อะตอม ($C_{11}H_{23}COOH$) เป็นวัตถุดิบที่สำคัญที่ใช้ในการผลิตสบู่และสารทำความสะอาด (Detergent) และกรดคาร์บอกซิลิกที่เป็นองค์ประกอบในน้ำมันมะพร้าวช่วงคาร์บอนอะตอม 12 – 14 อะตอม เป็นกรดคาร์บอกซิลิกที่มีบทบาทสำคัญสำหรับใช้เป็นวัตถุดิบในอุตสาหกรรมเคมีต่างๆ เช่น สารลดแรงตึงผิว, สารหล่อลื่น, สารเคลือบผิว, อุตสาหกรรมเครื่องสำอาง, สารปรับปรุงคุณสมบัติในพลาสติก, อุตสาหกรรมเส้นใย อุตสาหกรรมกระดาษ, และอุตสาหกรรมยา เป็นต้น

ปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชัน (Esterification) เป็นปฏิกิริยาเคมีที่ใช้ในการเตรียมสารประกอบเอสเทอร์โดยการให้เกิดปฏิกิริยาระหว่างกรดคาร์บอกซิลิกกับแอลกอฮอล์ ในสภาวะที่ใช้ตัวเร่งปฏิกิริยา โดยตัวเร่งปฏิกิริยาที่นิยมใช้คือกรดกำมะถัน (Sulfuric acid) ได้ผลิตภัณฑ์เป็นสาร

ประกอบเอสเทอร์และน้ำ ปฏิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันเป็นปฏิริยาเคมีที่ผันกลับได้ตั้งนั้นหากต้องการสารประกอบผลิตภัณฑ์เอสเทอร์ในปริมาณมากๆ จำเป็นต้องดึงน้ำออกจากระบบ

กระบวนการเอสเทอร์ฟิเคชันแบ่งเป็น 2 กระบวนการคือ กระบวนการแบบกะ (Batch process) และกระบวนการแบบต่อเนื่อง (Continuous process) ดำเนินการที่อุณหภูมิระหว่าง 200 - 250 องศาเซลเซียส ภายใต้ความดันบรรยากาศ เฮนเคิล (Henkel) เป็นผู้หนึ่งดำเนินการพัฒนากระบวนการแบบต่อเนื่องที่เรียกว่ากระบวนการแบบต่อเนื่องของเฮนเคิลโดยการใช้คอลัมน์ปฏิริยาแบบแผ่นคู่ (double plate reaction column) กระบวนการแบบต่อเนื่องเป็นกระบวนการที่มีประสิทธิภาพดีกว่ากระบวนการแบบกะเนื่องจากให้ปริมาณของผลิตภัณฑ์ที่สูงกว่า ผลิตภัณฑ์เอสเทอร์ที่มีคาร์บอนอะตอม 8 - 10 อะตอม จะใช้สำหรับสารหล่อลื่นคุณสมบัติสูง (high performance lubricants)

ปฏิริยาไฮโดรจีเนชัน (Hydrogenation) เป็นปฏิริยาที่ใช้เตรียมแอลกอฮอล์จากสารตั้งต้นเมทิลเอสเทอร์หรือกรดคาร์บอกซิลิก ดำเนินการที่สภาวะความดัน 25 ถึง 30 เมกะปาสคาล อุณหภูมิ 250 - 300 องศาเซลเซียส โดยใช้ตัวเร่งปฏิริยา

แอลกอฮอล์สามารถแบ่งได้ตามช่วงของจำนวนคาร์บอนอะตอมซึ่งมีการใช้งานที่แตกต่างกัน เช่น แอลกอฮอล์ที่มีจำนวนคาร์บอน 8 - 10 อะตอม ใช้ในอุตสาหกรรมผลิตสารปรับปรุงคุณสมบัติในพลาสติก (Plasticizer) แอลกอฮอล์ที่มีคาร์บอนอะตอม 12 - 18 ใช้ในอุตสาหกรรมการผลิตสารทำความสะอาด แอลกอฮอล์ที่มีคาร์บอนอะตอม 12 - 14 จะใช้เป็นสารเพิ่มคุณสมบัติในสารหล่อลื่น (Lubricant additives) และใช้ปรับปรุงน้ำมันไฮดรอลิก แอลกอฮอล์ที่มีคาร์บอนอะตอม 16 - 18 ใช้ในการเปลี่ยนรูปโฟม (Defoamer) และใช้ในการเพิ่มความข้นในการผลิตครีม (Cream), ลิปสติก (Lipsticks), น้ำยาขัดเงา (Polishes), และยาสีฟัน (Pastes) การประยุกต์ใช้งานที่สำคัญที่สุดสำหรับแอลกอฮอล์ก็คือใช้ในอุตสาหกรรมแอลกอฮอล์ซัลเฟต (alcohol sulfate) และแอลกอฮอล์อีเทอร์ซัลเฟต (alcohol ether sulfate) ซึ่งสารประกอบทั้ง 2 ชนิดนี้มีคุณสมบัติที่ดีในการเปลี่ยนรูปโฟมและใช้เป็นสารลดแรงตึงผิวในอุตสาหกรรมการผลิตสารทำความสะอาดไม่ว่าจะเป็นแชมพู, น้ำยาล้างจาน และน้ำยาทำความสะอาดอื่นๆ

ปฏิริยาสฟอนิฟิเคชัน (Sponification) เป็นปฏิริยาการเตรียมสบู่จากสารตั้งต้นกรดคาร์บอกซิลิกหรือน้ำมันพืช ด้วยการให้เกิดปฏิริยากับโซเดียมไฮดรอกไซด์ ได้ผลิตภัณฑ์ข้างเคียงเป็นกลีเซอรินประมาณร้อยละ 8 ถึง 12 โดยมวล

ปฏิกิริยาพหุเอสเตอร์ฟิเคชัน (Partial esterification) เป็นปฏิกิริยาเคมีที่ใช้เตรียมพอสเฟตจากการทำปฏิกิริยาระหว่างแอลกอฮอล์และฟอสฟอรัสออกซิคลอไรด์ สารประกอบผลิตภัณฑ์ที่ได้เป็นของผสมของโมโนอัลคิล ไดอัลคิล และไตรอัลคิลพอสเฟต ดำเนินการที่สภาวะอุณหภูมิ 80 - 120 องศาเซลเซียส ความดันบรรยากาศ พอสเฟตที่ได้นำไปใช้งานในอุตสาหกรรมการผลิตสารลดแรงตึงผิว

จากสารประกอบที่กล่าวมาข้างต้น ล้วนเป็นสารประกอบที่มีบทบาทสำคัญในอุตสาหกรรมเคมีภายในประเทศที่ใช้ผลิตสารประกอบประเภทอื่นๆ ดังนั้นหากมีแนวทางในการเพิ่มกำลังการผลิต และใช้วัตถุดิบภายในประเทศก็จะช่วยให้เศรษฐกิจภายในประเทศดีขึ้น

วัตถุประสงค์งานวิจัย

พัฒนาแบบจำลองสมดุลเคมีของระบบปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อนของไตรกลีเซอไรด์ผสมในน้ำมันมะพร้าว เพื่อศึกษาปริมาณจำกัดของสารประกอบอินทรีย์ต่างๆ ที่ผลิตได้จากไตรกลีเซอไรด์ ณ อุณหภูมิระหว่าง 400 – 1000 องศาเซลเซียส ภายใต้ความดันบรรยากาศ

ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับในงานวิจัยชิ้นนี้ เพื่อเป็นการเพิ่มมูลค่าให้กับน้ำมันมะพร้าวซึ่งเป็นวัตถุดิบภายในประเทศที่สามารถหาได้ง่ายและราคาค่อนข้างถูก เป็นการพัฒนาเศรษฐกิจภายในประเทศอีกแนวทางหนึ่งที่สามารถเป็นไปได้ เนื่องจากสารประกอบอินทรีย์ประเภทต่างๆ ที่ผลิตได้จะมีบทบาทเป็นสารประกอบที่ช่วยทดแทนการนำเข้าสารประกอบเหล่านี้จากต่างประเทศเพื่อใช้ในอุตสาหกรรมเคมีภายในประเทศ ซึ่งจะส่งผลดีโดยรวมให้เศรษฐกิจภายในประเทศ และเป็นแนวทางในการสร้างแบบจำลองเพื่อใช้ทำนายชนิดและปริมาณของสารประกอบผลิตภัณฑ์ที่เกิดจากการแตกตัวด้วยความร้อนของน้ำมันมะพร้าว

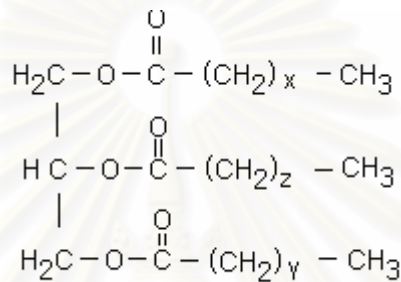
สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 2

ปฏิกิริยาเคมีของน้ำมันมะพร้าว

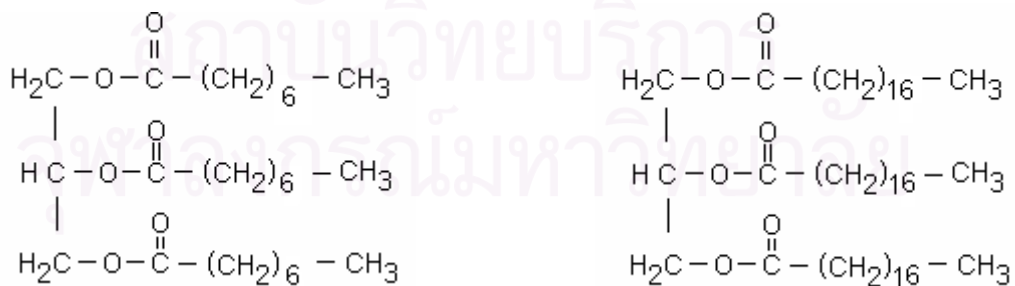
2.1 โครงสร้างและองค์ประกอบของน้ำมันมะพร้าว

มะพร้าวจัดเป็นพืชให้น้ำมันประเภทหนึ่งที่มีสัดส่วนน้ำมันพืชสูง น้ำมันมะพร้าวเป็นไตรกลีเซอไรด์ผสมที่มีหมู่เอสเทอร์ของกรดคาร์บอกซิลิกหรือกรดไขมัน กักเก็บไขมัน (1,2,3 - ไตรไฮดรอกซีโพรเพน) ซึ่งมีลักษณะโครงสร้างโมเลกุลดังแสดงในรูปที่ 2.1



รูปที่ 2.1 โครงสร้างโมเลกุลของไตรกลีเซอไรด์อิ่มตัว

โดยที่หมู่อัลคิลทั้งสามดังแสดงในรูปที่ 2.1 อาจมีจำนวนอะตอมคาร์บอนเท่ากันหรือต่างกัน เนื่องจากองค์ประกอบของน้ำมันมะพร้าวประกอบด้วยกรดไขมันที่มีจำนวนอะตอมของคาร์บอนระหว่าง 8 – 18 อะตอม โดยมีสัดส่วนของกรดลอริก ($\text{C}_{11}\text{H}_{23}\text{COOH}$) มากที่สุดดังสรุปในตารางที่ 2.1[10] ดังนั้นสารประกอบไตรกลีเซอไรด์ในน้ำมันมะพร้าวที่มีมวลโมเลกุลน้อยที่สุดและมากที่สุดสามารถแสดงได้ดังรูปที่ 2.2



(ก) มวลโมเลกุลน้อยที่สุด

(ข) มวลโมเลกุลมากที่สุด

รูปที่ 2.2 โครงสร้างโมเลกุลไตรกลีเซอไรด์ที่มีมวลโมเลกุลน้อยที่สุดและมากที่สุด

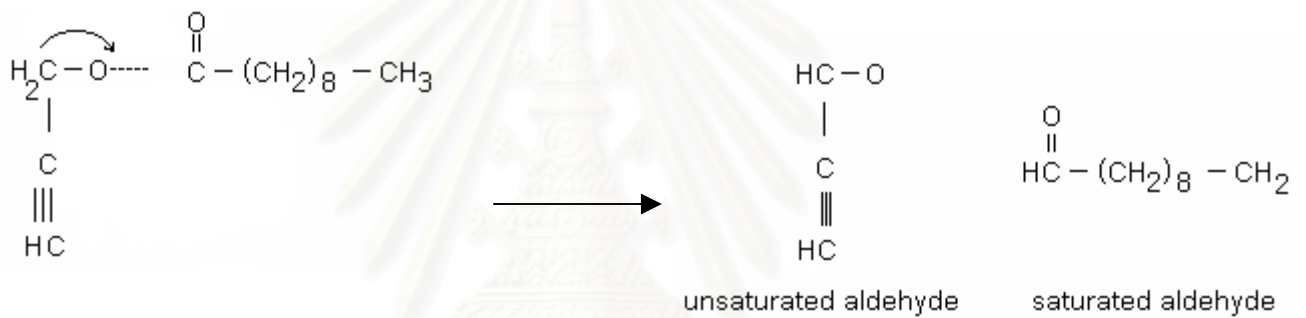
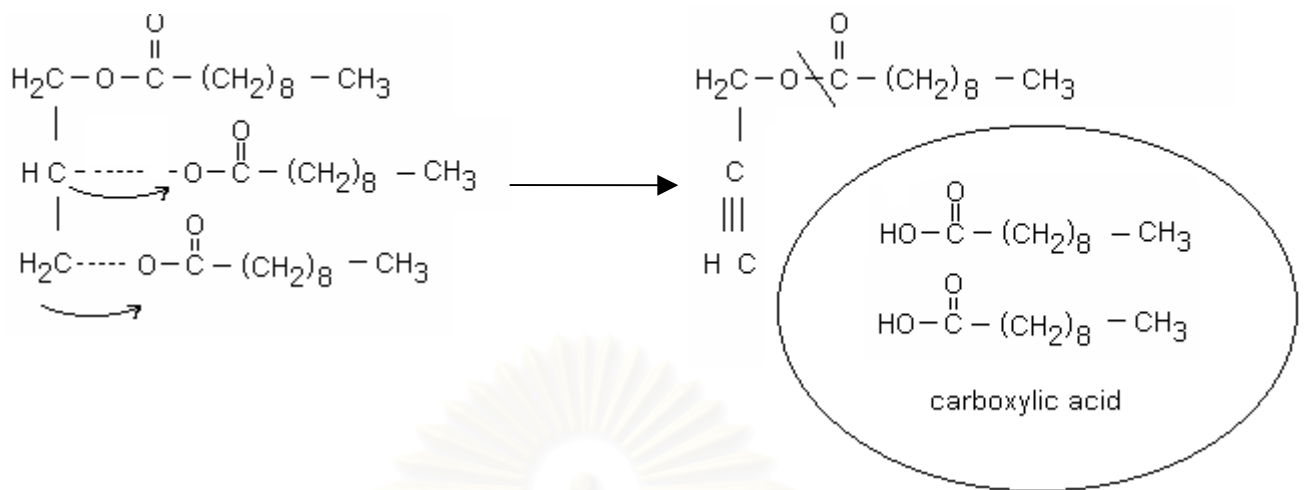
ตารางที่ 2.1 องค์ประกอบของกรดไขมันในน้ำมันมะพร้าว

กรดไขมัน	สูตรโมเลกุล	ปริมาณโดยน้ำหนัก
กรดไขมันอิ่มตัว		
กรดคาร์พริก	(C ₇ H ₁₅ COOH)	10
กรดคาร์พริลิก	(C ₉ H ₁₉ COOH)	8
กรดลอริก	(C ₁₁ H ₂₃ COOH)	50
กรดไมริสติก	(C ₁₃ H ₂₇ COOH)	17
กรดปาล์มิติก	(C ₁₅ H ₃₁ COOH)	8
กรดสเตียริก	(C ₁₇ H ₃₅ COOH)	5
กรดไขมันไม่อิ่มตัว		
กรดโอเลอิก	(C ₁₇ H ₃₃ COOH)	2
กรดไลโนเลอิก	(C ₁₇ H ₃₁ COOH)	1

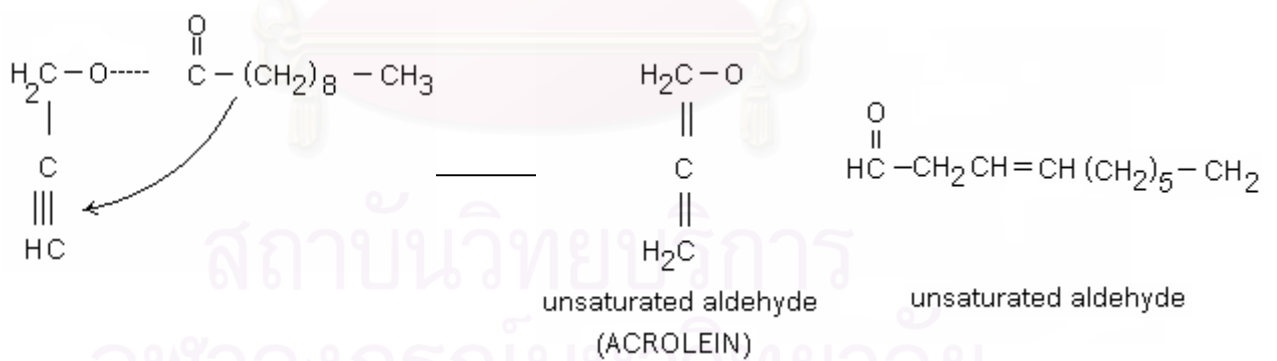
2.2 ปฏิกริยาการแตกตัวของไตรกลีเซอไรด์และกรดไขมัน

จากการศึกษาของฟอเทสเกี่ยวกับปฏิกริยาการแตกตัวด้วยความร้อนของน้ำมันมาคอบา (Macaba)[5] ซึ่งจัดเป็นน้ำมันพืชที่มีโครงสร้างเป็นไตรกลีเซอไรด์เช่นเดียวกับน้ำมันมะพร้าวรายงานถึงผลิตภัณฑ์หลักอโครลีน (acrolein, C₃H₄O) ซึ่งเป็นสารประกอบประเภทแอลดีไฮด์ไม่อิ่มตัวและมีขนาดโมเลกุลที่เล็กที่สุดที่มีรายงานในผลการทดลอง และสารประกอบประเภทอื่นๆ คือ อัลเคน ไฮโคลอัลเคน อัลคีน แอลกอฮอล์ แอลดีไฮด์ และกรดคาร์บอกซิลิก

จากผลการทดลองข้างต้นที่มีการรายงานถึงผลิตภัณฑ์ที่เป็นสารประกอบประเภทต่างๆ นั้นสามารถอธิบายถึงแนวคิดในการพิจารณาให้ปฏิกริยาการแตกตัวของน้ำมันมาคอบาเกิดเป็นสารประกอบต่างๆ เหล่านี้ได้ และการเกิดปฏิกริยาต่อเนื่องของสารประกอบเพื่อให้ได้ประเภทของสารประกอบผลิตภัณฑ์ครอบคลุมตามผลการทดลอง โดยอาศัยแนวคิดให้ไตรกลีเซอไรด์เกิดปฏิกริยาการแตกตัวด้วยความร้อนได้ผลิตภัณฑ์หลักเริ่มแรกเป็นสารประกอบแอลดีไฮด์ขนาดจำนวนคาร์บอนอะตอมเท่ากับสาม ซึ่งถือเป็นสารประกอบที่มีขนาดโมเลกุลเล็กที่สุดในรายงานของผลการทดลอง สารประกอบแอลดีไฮด์คือ อโครลีน (Acrolein) และผลิตภัณฑ์ประเภทอื่นๆ ที่ได้นอกจากนี้อโครลีน ได้แก่ กรดคาร์บอกซิลิกและแอลดีไฮด์ขนาดโมเลกุลใหญ่ และปฏิกริยาต่อเนื่องของผลิตภัณฑ์ได้เป็นสารประกอบอื่นๆ ดังรูปที่ 2.2

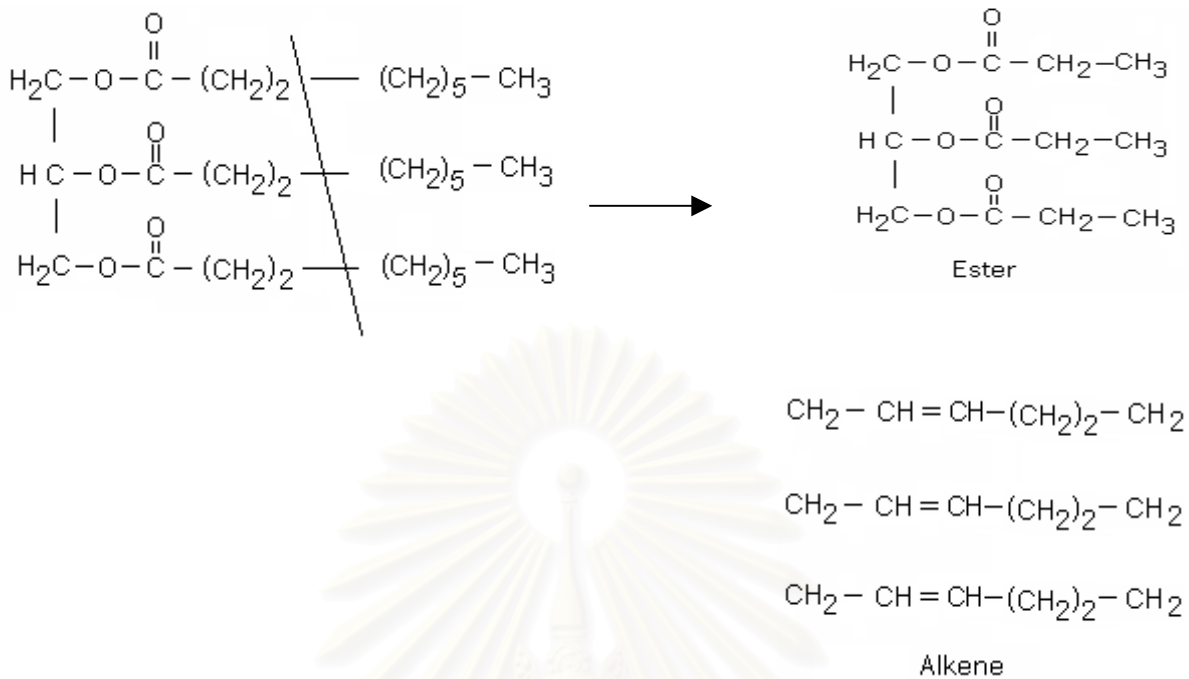


หรือ



รูปที่ 2.2 ปฏิกิริยาการแตกตัวของไตรกลีเซอไรด์

หากพิจารณาปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อนของไตรกลีเซอไรด์ดังรูปที่ 2.2 แล้ว จะเห็นได้ว่าไตรกลีเซอไรด์สามารถเกิดการแตกตัวด้วยความร้อนเกิดเป็นผลิตภัณฑ์ประเภท แอลดีไฮด์อิ่มตัวและไม่อิ่มตัว ซึ่งจากผลการทดลองพบว่าได้สารประกอบอโครลีนซึ่งเป็นแอลดีไฮด์ ชนิดไม่อิ่มตัวมากที่สุด ที่เป็นเช่นนี้อาจอธิบายได้ว่าแอลดีไฮด์ชนิดอิ่มตัวที่เกิดขึ้นในรูปที่ 2.2 นั้น ยังสามารถแตกตัวต่อไปได้อีกกลายเป็นสารประกอบอโครลีน



รูปที่ 2.3 ปฏิกิริยาการแตกตัวของไตรกลีเซอไรด์ได้สารประกอบอัลคีน

ไตรกลีเซอไรด์สามารถเกิดปฏิกิริยาแตกตัวได้อีกหนึ่งลักษณะดังแสดงในรูปที่ 2.3 คือการเกิดปฏิกิริยาแตกตัวได้ผลิตภัณฑ์เป็นสารประกอบเอสเทอร์และอัลคีน และเอสเทอร์ที่ได้ก็สามารถเกิดปฏิกิริยาแตกตัวต่อได้เช่นเดียวกับปฏิกิริยาดังแสดงในรูปที่ 2.2 ดังนั้นผลิตภัณฑ์ที่ได้จึงเป็นสารประกอบประเภทแอลดีไฮด์คือคอโรลีน กรดคาร์บอกซิลิก และอัลคีน เป็นผลิตภัณฑ์หลักสำหรับปฏิกิริยาแตกตัวด้วยความร้อนของไตรกลีเซอไรด์

2.2 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ฟอร์เทส (Fortes) และผู้ร่วมงาน[11] ศึกษาการเกิดปฏิกิริยาการแตกตัวของน้ำมันมาคาบา (Macaba) ที่อุณหภูมิ 700 - 800 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ เวลา 30 วินาที ได้กลุ่มผลิตภัณฑ์หลัก ได้แก่ อัลคีน แอลดีไฮด์ กรดคาร์บอกซิลิกร้อยละ 59 ถึง 74 โดยมวล กลุ่มผลิตภัณฑ์ที่สอง ได้แก่ อัลเคน ไฮโดรคาร์บอนร้อยละ 24 ถึง 37 โดยมวล กลุ่มผลิตภัณฑ์ที่สาม ได้แก่ แอลกอฮอล์ร้อยละ 5 ถึง 7 โดยมวล

อเลนคาร์ (Alencar) และผู้ร่วมงาน[12] ศึกษาการเกิดปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อนของน้ำมันบาบาซุ (Babassu) และน้ำมันพิกวิ (Piqui) ที่อุณหภูมิ 300 - 500 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ ใช้แพลตตินัมเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา โดยน้ำมันบาบาซุเปลี่ยนเป็น

อัลเคนที่มีอะตอมคาร์บอน 6 – 15 อะตอม และอัลคีนที่มีอะตอมคาร์บอน 6 -13 อะตอม ร้อยละ 95 โดยมวล และน้ำมันพืควิเปลี่ยนเป็นอัลเคนที่มีอะตอมคาร์บอน 6 – 17 อะตอม และอัลคีนที่มีอะตอมคาร์บอน 6 -17 อะตอม ร้อยละ 96 โดยมวล

ราฟาเอล (Raphael) และผู้ร่วมงาน[13] ได้ศึกษาการเกิดปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อนของน้ำมันคาโนลา (Canola) ที่อุณหภูมิ 300 องศาเซลเซียส ถึง 500 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ เวลา 3.3 วินาที ใช้สแตนเลสสตีลเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา ได้ผลิตภัณฑ์ที่เป็นแก๊ส ได้แก่ แก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ และสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีคาร์บอนอะตอม 1 – 5 อะตอม ที่มีคาร์บอนอะตอม C_1 ถึง C_5 ร้อยละ 15 - 75 โดยมวล และสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่เป็นของเหลวประมาณร้อยละ 14.8 – 38.1 โดยมวล ที่เหลือคือสารประกอบไม่ระบุชนิดประมาณร้อยละ 5 – 7 โดยมวล

ชาง (Chang) และผู้ร่วมงาน[14] เสนอกลไกของการเกิดปฏิกิริยาการแตกตัวของน้ำมันพืช และโพลีเอทเธน ได้ทดลองเพื่อยืนยันผลการทำนายกลไกของปฏิกิริยา โดยศึกษาปฏิกิริยาระหว่างกรดไขมันกับด่าง และการเปลี่ยนแปลงคุณสมบัติสภาพกรด (acidity) ของของเหลวที่กลั่นได้และแก๊สจากปฏิกิริยาของน้ำมันเมล็ดฝ้าย ด้วยไอน้ำความดันสูง ที่อุณหภูมิ 350 องศาเซลเซียส ได้ผลิตภัณฑ์เป็นของเหลวที่มีจุดเดือดปกติสูงกว่า 300 องศาเซลเซียส และแก๊สมีองค์ประกอบเป็น คาร์บอนไดออกไซด์ เอทิลีน และ คาร์บอนมอนอกไซด์

พิง (Ping)[15] ได้ศึกษาปฏิกิริยาแตกตัวในสถานะของเหลวของน้ำมันถั่วลิสง โดยใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาอลูมิเนียมไตรคลอไรด์ประมาณร้อยละ 1 โดยมวล อุณหภูมิ 250 - 400 องศาเซลเซียส ความดันบรรยากาศ การทดลองเป็นแบบกะ (batch) ปริมาตร 15 แกลลอน ได้สารประกอบไฮโดรคาร์บอนผสมที่เป็นของเหลวซึ่งมีจุดเดือดปกติต่ำกว่า 200 องศาเซลเซียส (แก๊สเอทิลีน) ร้อยละ 27 โดยมวล จุดเดือดประมาณ 200 - 300 องศาเซลเซียส ร้อยละ 31 โดยมวล น้ำมันส่วนเหลืออื่นๆ ร้อยละ 40 โดยมวล และถ่านโค้ก

เบนสัน (Benson)[16] ได้ศึกษาปฏิกิริยาแตกตัวของน้ำมันมะพร้าว ที่อุณหภูมิ 250 ถึง 500 องศาเซลเซียส โดยใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาต่างๆ คือ โซเดียมไฮดรอกไซด์ ($NaOH$) อลูมิเนียมไตรคลอไรด์ ($AlCl_3$) เหล็กออกไซด์ (Fe_2O_3) ซิงค์ไตรคลอไรด์ ($ZnCl_2$) ผลิตภัณฑ์ที่ได้จะเป็นส่วนของน้ำมันก๊าดประมาณร้อยละ 20 ถึง 50 โดยมวล

ไวโอเลตา (Violeta) และผู้ร่วมงาน[17] ศึกษาปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อนของน้ำมันมะพร้าว ที่อุณหภูมิ 200 - 400 องศาเซลเซียส ใช้โซเดียมไฮดรอกไซด์เป็นตัวเร่ง

ปฏิกิริยา ได้ผลิตภัณฑ์ที่เป็นของเหลว (แก๊สโซลีน น้ำมันก๊าด และดีเซล) ร้อยละ 60 ถึง 78 โดยมวล ที่เหลือคือสารประกอบไฮโดรคาร์บอนจำนวนอะตอมคาร์บอน 1 – 4 อะตอม ร้อยละ 32 ถึง 40 โดยมวล

ฟอกเลีย (FOGLIA) และ บาร์ (BARR)[18] ทดลองโดยใช้กรดสเตียริก (stearic acid) เป็นสารตั้งต้นให้เกิดปฏิกิริยาแยกคาร์บอนไดออกไซด์โดยใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาโรเดียมฟอสไฟน์ ที่อุณหภูมิ 280 องศาเซลเซียส ได้ผลิตภัณฑ์เป็นเฮปตะดีซีน (heptadecene) ร้อยละ 65 โดยมวล

บริษัทฮอนด้า[19] ได้ศึกษาการแปรรูปน้ำมันมะพร้าวเป็นแก๊สโซลีน โดยใช้ปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อนพร้อมด้วยตัวเร่งปฏิกิริยาเคมี และด้วยไฮโดรเจน ที่อุณหภูมิ 445 485 และ 390 องศาเซลเซียส ตามลำดับ ได้ผลิตภัณฑ์เป็นแก๊สโซลีนประมาณร้อยละ 4, 12 และ 13 โดยมวล ตามลำดับ ที่เหลือคือผลิตภัณฑ์ที่เป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีอะตอมคาร์บอน 1 – 4 อะตอม และสารประกอบไฮโดรคาร์บอนผสมที่มีจุดเดือดสูงกว่าแก๊สโซลีนร้อยละ 86, 59 และ 37 โดยมวล ตามลำดับ

สิทธิบัตรประเทศสหรัฐอเมริกาเลขที่ 4,554,397[20] เสนองานวิจัยเกี่ยวกับการผลิตโอเลฟินคาร์บอน 15 อะตอม (1-pentadecene) จากกรดไขมันอิ่มตัว โดยใช้ निकเกิดเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา อุณหภูมิประมาณ 200 ถึง 400 องศาเซลเซียส ได้ผลิตภัณฑ์ประมาณร้อยละ 69 โดยมวล

สิทธิบัตรประเทศสหรัฐอเมริกาเลขที่ 4,102,938[21] เสนองานวิจัยเกี่ยวกับการสังเคราะห์สารประกอบไฮโดรคาร์บอนจากน้ำมันพืช ที่อุณหภูมิระหว่าง 300 - 700 องศาเซลเซียส ความดันบรรยากาศ ใช้ซิลิกาอลูมินาเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา ผลิตภัณฑ์ที่ได้เป็นสารประกอบที่ไม่มีออกซิเจน ยกเว้นคาร์บอนไดออกไซด์และน้ำ และได้สารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีจุดเดือดต่ำกว่า 400 องศาเซลเซียส ร้อยละ 95 โดยมวล

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 3

การจำลองระบบปฏิกิริยาเคมีสำหรับปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อนของน้ำมันมะพร้าว

ในอุตสาหกรรมเคมี กระบวนการเปลี่ยนสารตั้งต้นให้เป็นผลิตภัณฑ์เพื่อเพิ่มมูลค่าให้กับสารตั้งต้นนั้นๆ มีความจำเป็นต้องอาศัยความรู้เกี่ยวกับการออกแบบถังปฏิกรณ์ เพื่อให้ได้ผลิตภัณฑ์ตามที่ต้องการ ดังนั้นการพิจารณาเรื่องการออกแบบถังปฏิกรณ์เพื่อใช้ในการผลิตสารประกอบประเภทต่างๆ ตามความต้องการนำไปใช้ประโยชน์จึงมีความสำคัญเป็นอย่างยิ่งเพื่อให้ได้ผลิตภัณฑ์ตามการใช้งานให้เกิดประโยชน์สูงสุด การจำลองระบบปฏิกิริยาเคมีเป็นอีกความสำคัญที่จำเป็นต้องมีการศึกษาเพื่อพิจารณาถึงโอกาสของการเกิดขึ้นได้ของสารประกอบนั้นๆ และสามารถบอกสัดส่วนของสารประกอบที่สมดุลของระบบได้ล่วงหน้า โดยทั่วไปสามารถแบ่งชนิดของแบบจำลองได้เป็น 2 ประเภทคือ

(1) แบบจำลองทางจลนพลศาสตร์ (Chemical kinetic model)

แบบจำลองทางจลนพลศาสตร์ เป็นแบบจำลองที่อาศัยการคำนวณที่ต้องทราบข้อมูลเกี่ยวกับ ชนิดของผลิตภัณฑ์ กลไกการเกิดปฏิกิริยาเคมี ชุดสมการอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี และวิธีการคำนวณค่าตัวแปรทางจลนพลศาสตร์ ซึ่งปัจจัยทั้งสี่อย่างนี้จะได้จากการศึกษาทดลองและเป็นพื้นฐานในการคำนวณภายใต้เงื่อนไขทางจลนพลศาสตร์ สามารถคำนวณหาปริมาณของผลิตภัณฑ์ ณ เวลาต่างๆ ได้ จึงมีประโยชน์ในทางอุตสาหกรรม ในด้านการคำนวณออกแบบเครื่องปฏิกรณ์เคมีและปริมาณของผลิตภัณฑ์ที่ผลิตได้ เมื่อกำหนดช่วงเวลาสำหรับปฏิกิริยา

(2) แบบจำลองทางสมดุลเคมี (Chemical Equilibrium model)

แบบจำลองทางสมดุลเคมี เป็นแบบจำลองที่ต้องการปัจจัยในการคำนวณเพียงอย่างเดียว คือชนิดของสารประกอบในระบบ เพื่อคำนวณความเป็นไปได้ในการเกิดสารประกอบต่างๆ และปริมาณของสารประกอบเหล่านั้น และอุณหภูมิที่ปฏิกิริยาเคมีเกิดขึ้นได้ก่อนเริ่มการทดลอง ซึ่งจะเป็นประโยชน์ในการกำหนดสภาวะการทดลองได้

สำหรับปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อนของน้ำมันมะพร้าว เป็นปฏิกิริยาเคมีที่มีกลไกซับซ้อน มีปฏิกิริยาเคมีเกิดขึ้นพร้อมๆ กันหลายปฏิกิริยา ดังนั้นในงานวิจัยขั้นนี้จึงได้เลือก

ใช้แบบจำลองทางสมดุลเคมีในการคำนวณหาปริมาณของผลิตภัณฑ์ที่เกิดขึ้นในระบบ ซึ่งมีความเหมาะสมมากกว่าแบบจำลองทางจลนพลศาสตร์ โดยข้อมูลทางจลนพลศาสตร์ของงานวิจัยที่ผ่านมาไม่เพียงพอต่อการคำนวณปริมาณและชนิดของผลิตภัณฑ์อื่นๆ ที่เกิดขึ้นได้

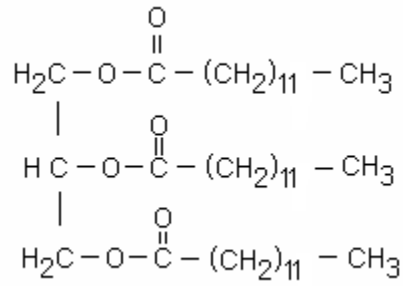
3.1 การจำลองระบบปฏิกิริยาการแตกตัวของน้ำมันมะพร้าว

การจำลองระบบปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อนของน้ำมันมะพร้าว อาศัยแบบจำลองทางสมดุลเคมีในการคำนวณหาปริมาณของผลิตภัณฑ์ ซึ่งต้องการทราบเพียงชนิดของผลิตภัณฑ์ที่มีอยู่ในระบบเท่านั้น จึงจำเป็นต้องมีการคัดเลือกผลิตภัณฑ์ที่จะใช้ในแบบจำลองทางสมดุลเคมี วิธีการคัดเลือกผลิตภัณฑ์คือการพิจารณาและการรวบรวมผลิตภัณฑ์จากการรายงานของงานวิจัยที่ผ่านมา

เนื่องจากน้ำมันมะพร้าวซึ่งมีโครงสร้างเป็นไตรกลีเซอไรด์ที่มีขนาดของมวลโมเลกุลใหญ่ ในการศึกษาวิจัยจำเป็นต้องศึกษา ณ อุณหภูมิที่สูงประมาณ 700 องศาเซลเซียสขึ้นไป ผลการศึกษาวิจัยและผลการวิเคราะห์ปริมาณและชนิดของสารประกอบชนิดต่างๆ ที่เกิดขึ้น ในการผลิตสารประกอบจากน้ำมันมาคอบา (Macauaba) ที่อุณหภูมิ 700 และ 800 องศาเซลเซียส ภายใต้ความดันบรรยากาศ เวลา 10, 20 และ 30 วินาที พบว่าที่เวลา 30 วินาที น้ำมันมาคอบา เกิดปฏิกิริยาร้อยละ 50 โดยมวลขึ้นไป ได้ผลิตภัณฑ์เป็นอัลคีนร้อยละ 18 – 25 แอลดีไฮด์ร้อยละ 15 – 16 กรดคาร์บอกซิลิกร้อยละ 17 - 36 อัลเคนร้อยละ 2.9 – 3.1 ไฮโดรคาร์บอนร้อยละ 2.7 – 10.2 และแอลกอฮอล์ร้อยละ 1 – 2.5 โดยมวล

จากผลการทดลองพบว่าปฏิกิริยาการแตกตัวของน้ำมันมาคอบา (Macauaba) ซึ่งสามารถเกิดเป็นสารประกอบประเภทต่างๆ ดังผลการทดลองข้างต้น ดังนั้นการจำลองระบบปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อนของน้ำมันมะพร้าวจึงอาศัยแนวคิดในการจำลองให้โมเลกุลของน้ำมันมะพร้าวเป็นไตรกลีเซอไรด์และกำหนดเลือกกลุ่มของผลิตภัณฑ์จากผลการทดลองเป็นตัวแทนของผลิตภัณฑ์ในแบบจำลอง ไตรกลีเซอไรด์ที่กำหนดเป็นตัวแทนของสารตั้งต้นในระบบปฏิกิริยาสามารถประมาณโครงสร้างได้ด้วยกรดคาร์บอกซิลิกที่เป็นองค์ประกอบอยู่ในน้ำมันมะพร้าว ซึ่งการจำลองโครงสร้างของไตรกลีเซอไรด์ สามารถจำลองได้ 2 วิธีคือ

1. โครงสร้างไตรกลีเซอไรด์ที่หมู่อัลคิล (-R) มีขนาดเท่ากันหมด โดยมวลโมเลกุลของไตรกลีเซอไรด์มีค่าเท่ากับมวลโมเลกุลเฉลี่ยของน้ำมันมะพร้าวซึ่งทำให้น้ำมันมะพร้าวเป็นสารประกอบไตรกลีเซอไรด์องค์ประกอบเดียวโดยที่ไตรกลีเซอไรด์ที่ได้มีสูตรโมเลกุลเป็น $C_{42}H_{80}O_6$ และมีโครงสร้างดังแสดงในรูปที่ 3.1



รูปที่ 3.1 โครงสร้างโมเลกุลไตรกลีเซอไรด์จำลองของน้ำมันมะพร้าว

2. โครงสร้างที่หมู่อัลคิล (-R) ของไตรกลีเซอไรด์มีขนาดเท่ากับหมู่อัลคิลของกรดคาร์บอกซิลิกแต่ละชนิดที่มีอยู่ในน้ำมันมะพร้าวและมีขนาดเท่ากับในโมเลกุลไตรกลีเซอไรด์เดียวกัน ซึ่งทำให้น้ำมันมะพร้าวเป็นของผสมไตรกลีเซอไรด์ 8 ชนิด โดยที่สัดส่วนไตรกลีเซอไรด์แต่ละชนิดคำนวณได้จากสัดส่วนโดยมวลของกรดคาร์บอกซิลิกในน้ำมันมะพร้าวดังสรุปในตารางที่ 3.1

ตารางที่ 3.1 สัดส่วนโดยมวลของไตรกลีเซอไรด์แต่ละชนิด

ชนิดไตรกลีเซอไรด์	สูตรโมเลกุลไตรกลีเซอไรด์	กรดคาร์บอกซิลิก	สัดส่วนโดยมวล
คาร์พริลิน	$\text{C}_{27}\text{H}_{50}\text{O}_6$	กรดคาร์พริลิก	0.10
คาร์พรีน	$\text{C}_{33}\text{H}_{62}\text{O}_6$	กรดคาร์พริก	0.08
ลอรีน	$\text{C}_{39}\text{H}_{74}\text{O}_6$	กรดลอริก	0.50
ไมริสทิน	$\text{C}_{45}\text{H}_{86}\text{O}_6$	กรดไมริสติก	0.17
ปาล์มิติน	$\text{C}_{51}\text{H}_{98}\text{O}_6$	กรดปาล์มิติก	0.07
สเตียรีน	$\text{C}_{57}\text{H}_{110}\text{O}_6$	กรดสเตียริก	0.05
โอเลอิน	$\text{C}_{57}\text{H}_{104}\text{O}_6$	กรดโอเลอิก	0.02
ไลโนเลอิน	$\text{C}_{57}\text{H}_{98}\text{O}_6$	กรดไลโนเลอิก	0.01

ไตรกลีเซอไรด์และสารประกอบแต่ละชนิดที่ไม่มีข้อมูลทางคุณสมบัติในฐานะข้อมูลสามารถประมาณคุณสมบัติทางอุณหพลศาสตร์ได้จากสูตรโครงสร้างโมเลกุล (Group contribution)[22] ซึ่งเป็นวิธีการประมาณคุณสมบัติของสารประกอบที่ไม่มีการรายงานอยู่ในฐานข้อมูล ข้อมูลพลังงานอิสระสำหรับการเกิดกลุ่มต่างๆที่เป็นสารประกอบของโมเลกุลสรุปไว้ในตารางที่ 3.2

ตารางที่ 3.2 ค่าคงที่สำหรับการประมาณค่าคุณสมบัติของสารประกอบ

กลุ่ม	ค่า R	ค่า Q
-CH ₃	0.9011	0.848
-CH ₂ -	0.6744	0.540
>CH-	0.4469	0.228
-CH=CH-	1.1167	0.867
-COO	1.3800	1.200
CH ₂ =CH-	1.3454	1.176
-CH=O	0.9980	0.947

วิธีการประมาณคุณสมบัติทางอุณหพลศาสตร์สำหรับสารประกอบที่ไม่มีข้อมูลในฐานข้อมูล สามารถคำนวณด้วยวิธีการประมาณจากโครงสร้างโมเลกุล ด้วยวิธี UNIFAC ดังตารางที่ 3.2 ซึ่งค่าคงที่ R และ Q จะนำไปคำนวณหาค่า activity coefficient ของสารประกอบที่ไม่มีอยู่ในฐานข้อมูล เพื่อนำไปใช้ในการคำนวณตามวิธีการของตารางต่อไป วิธีการของ group contribution เป็นวิธีการคำนวณที่ประมาณคุณสมบัติของสารประกอบจากกลุ่มฟังก์ชันในโมเลกุลของสารประกอบ ดังนั้น activity coefficient สามารถคำนวณได้จากคุณสมบัติของกลุ่มฟังก์ชันของสารประกอบ

ฟังก์ชันรวมของพลังงานอิสระกิบส์มีค่าเท่ากับค่าพลังงานอิสระกิบส์จากไอดีล (Ideal) และ excess Gibbs free energy ซึ่ง UNIFAC เป็นวิธีการประมาณค่าที่ใช้คำนวณ activity coefficient ในกรณีที่ไม่ใช่แก๊สอุดมคติ ดังนั้น excess Gibbs free energy จึงมีค่าดังสมการต่อไปนี้

$$G^E \equiv G_{(\text{actual solution at } T, P \text{ and } x)} - G_{(\text{ideal solution at } T, P \text{ and } x)}$$

ฟังก์ชัน excess Gibbs free energy แบ่งได้เป็น 2 ส่วน คือ combinatorial และ residual ในส่วนของ combinatorial แสดงดังสมการที่ (1)

$$\left(\frac{g^E}{RT} \right)_{T,P} = \left(\frac{g^E}{RT} \right)_{\text{combinatorial}} + \left(\frac{g^E}{RT} \right)_{\text{residual}} \quad (1)$$

$$\left(\frac{g^E}{RT}\right)_{\text{combinatorial}} = \sum_{i \in \text{Components}} x_i \left\{ -\ln x_i + \left[1 - \frac{z}{2} q_i\right] \ln \phi_{ii} + \frac{z}{2} q_i \ln \theta_i \right\} \quad (2)$$

$$\left(\frac{g^E}{RT}\right)_{\text{residual}} = \sum_{i \in \text{Components}} x_i \sum_{k \in \text{Groups}} v_k^{(i)} \left\{ \ln \Gamma_k + \ln \Gamma_k^{(i)} \right\} \quad (3)$$

ค่า activity coefficient วัดได้จากค่าความเบี่ยงเบนจากอุดมคติ (Ideality) ดังนั้นสำหรับค่า activity coefficient สำหรับของเหลวอุดมคติมีค่าเท่ากับ 1 ค่า activity coefficient นิยามจากค่า excess molar Gibbs energy

$$\left(\frac{\delta n_T g^E}{\delta n_i}\right)_{T,P,n_j; i \neq j} = RT \ln \gamma_i$$

ดังนั้น activity coefficient จะแบ่งได้เป็นสองส่วนคือ combinatorial และ residual แสดงดังสมการที่ (4)

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma^C + \ln \gamma^R \quad (4)$$

ส่วน combinatorial มาจากแบบจำลองของ UNIQUAC โดย Abrams และ Prausnitz ซึ่งสมการนี้ใช้สำหรับองค์ประกอบบริสุทธิ์เท่านั้น ส่วนที่เป็น combinatorial แสดงได้ดังสมการที่ (5)

$$\ln \gamma_i^C = \ln \frac{\Phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} + l_i - \frac{\Phi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j \quad (5)$$

เมื่อ $l_i = \frac{z}{2} (r_i - q_i) - (r_i - 1)$, θ_i คือค่า average surface fraction แสดงดังสมการที่ (6)

และ Φ_i คือ average segment fraction แสดงดังสมการที่ (7)

$$\theta_i = \frac{q_i x_i}{\sum_j q_j x_j} \quad (6)$$

$$\Phi_i = \frac{r_i x_i}{\sum_j r_j x_j} \quad (7)$$

พารามิเตอร์ z คือค่า lattice coordination ซึ่งขึ้นอยู่กับการเรียงตัวของโมเลกุล อาจมีค่าระหว่าง 6 – 12 อย่างไรก็ตามสำหรับของเหลวที่เงื่อนไขเริ่มต้น (ordinary conditions) พบว่าค่า z มีค่าใกล้ 10 ตามการรายงานของ Prausnitz et.al[]

พารามิเตอร์ r_i และ q_i เป็นพารามิเตอร์สำหรับองค์ประกอบบริสุทธิ์และสามารถวัดได้ด้วย molecular van der Waals volumes และ molecular surface area ตามลำดับ สำหรับแบบจำลอง UNIFAC สามารถคำนวณได้จากผลรวมของ group volume และ group area parameters R_k และ Q_k แสดงดังสมการที่ (8) เมื่อ $v_k^{(i)}$ คือกลุ่มของธาตุชนิด k ในโมเลกุล i

$$r_i = \sum_k v_k^{(i)} R_k \quad ; \quad q_i = \sum_k v_k^{(i)} Q_k \quad (8)$$

สำหรับ UNIFAC residual ของ activity coefficient จะถูกแทนที่ด้วยนิยามของ solution of groups

$$\ln \gamma_i^R = \sum_{k \in \text{Groups}} v_k^{(i)} (\ln \Gamma_i - \ln \Gamma_k^{(i)}) \quad (9)$$

เมื่อ Γ_k คือ group residual activity coefficient และ $\Gamma_k^{(i)}$ คือ group residual activity coefficient ของกลุ่ม k ในสารละลายอ้างอิง (reference solution) ซึ่งประกอบด้วยเพียงโมเลกุล i เท่านั้น เทอมของ $\Gamma_k^{(i)}$ จะต้องทำ normalization ซึ่งจะทำให้ค่า activity coefficient γ_i มีค่าเท่ากับหนึ่งเมื่อ $x_i \rightarrow 1$

ค่า group residual activity coefficient แสดงดังสมการที่ (10) เมื่อผลรวมคือผลต่างของกลุ่มทั้งหมดในของผสม θ_m คือ area fraction ของกลุ่ม m ซึ่งคำนวณได้จากสมการที่ (11) x_m คือ mole fraction ของกลุ่ม m ในของผสมสามารถคำนวณได้จากสมการที่ (12)

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left[1 - \ln \left(\sum_m \theta_m \psi_{km} \right) - \sum_m \frac{\theta_m \psi_{km}}{\sum_n \theta_n \psi_{nm}} \right] \quad (10)$$

$$\theta_m = \frac{Q_m X_m}{\sum_n Q_n X_n} \quad (11)$$

$$X_m = \frac{\sum_i v_m^{(i)} x_i}{\sum_i \sum_k v_k^{(i)} x_i} \quad (12)$$

ค่าพารามิเตอร์ group interaction ψ_{mn} แสดงดังสมการที่ (13) เมื่อ U_{mn} คือค่า interaction energy ระหว่างกลุ่ม m และ n

พารามิเตอร์ a_{mn} คือ group interaction parameter ของกลุ่ม m และ n

พารามิเตอร์สำหรับ group – group interaction มี 2 พารามิเตอร์คือ a_{mn} และ a_{nm} เมื่อ $a_{mn} \neq a_{nm}$ ซึ่ง group interaction parameter สามารถคำนวณได้จากข้อมูลสมดุลเฟสจากการทดลอง (phase equilibria data)

$$\psi_{mn} = \exp\left(-\frac{U_{mn} - U_{nm}}{RT}\right) = \exp\left(-\frac{a_{mn}}{T}\right) \quad (13)$$

สมการสำหรับ Γ_k สามารถคำนวณหา $\Gamma_k^{(i)}$ ได้ยกเว้นกรณีที่ค่าตัวแปร group composition θ_k เปลี่ยนจาก group fraction ของกลุ่ม k เป็นของบริสุทธ์ i ค่าพารามิเตอร์ a_{mn} และ a_{nm} แสดงดังตารางที่ 3.3 และ group interaction ของสารประกอบแสดงดังตารางที่ 3.4

ตารางที่ 3.3 ค่า group interaction parameters a_{mn} และ a_{nm}

กลุ่ม	1	2	3	4
1	0.000	86.02	61.31	76.50
2	-35.36	0.000	38.81	74.15
3	-11.12	3.446	0.000	167.0
4	-69.70	-113.6	-146.8	0.000

ตารางที่ 3.4 กลุ่ม group interaction ของสารประกอบ: กลุ่มหลักและกลุ่มรอง

กลุ่มหลัก		กลุ่มรอง
1	CH ₂	CH ₃ , CH ₂ , CH, C
2	C=C	CH ₂ =CH, CH=CH, CH ₂ =C, CH=C, C=C
3	ACH	ACH, AC
4	ACCH ₂	ACCH ₃ , ACCH ₂ , ACCH

ค่าพลังงานอิสระกิบบส์ของสารประกอบแต่ละชนิดที่ไม่มีรายงานในฐานข้อมูลคำนวณได้ด้วยวิธี group contribution แสดงดังตารางที่ 3.5

ตารางที่ 3.5 ข้อมูลการประมาณค่าจากสูตรโครงสร้างด้วยวิธี UNIFAC

สารประกอบ	สูตรโครงสร้าง	กลุ่ม	จำนวน	$\Delta G, f$ (J / mol)
คาร์พรีลิน	$C_{27}H_{50}O_6$	-CH ₃	3	-7.57E+05
		-CH ₂ -	20	
		>CH-	1	
		-COO	3	
คาร์พรีน	$C_{33}H_{62}O_6$	-CH ₃	3	-7.07E+05
		-CH ₂ -	26	
		>CH-	1	
		-COO	3	
ลอรีน	$C_{39}H_{74}O_6$	-CH ₃	3	-6.56E+05
		-CH ₂ -	32	
		>CH-	1	
		-COO	3	
ไมริสทิน	$C_{45}H_{86}O_6$	-CH ₃	3	-6.055E+05
		-CH ₂ -	38	
		>CH-	1	
		-COO	3	
ปาล์มมิทิน	$C_{51}H_{98}O_6$	-CH ₃	3	-5.55E+05
		-CH ₂ -	44	
		>CH-	1	
		-COO	3	
สเตียรีน	$C_{57}H_{110}O_6$	-CH ₃	3	-5.045E+05
		-CH ₂ -	50	
		>CH-	1	
		-COO	3	
โอเลอิน	$C_{57}H_{104}O_6$	-CH ₃	3	-2.64E+05
		-CH ₂ -	44	
		>CH-	1	
		-CH=CH-	3	
		-COO	3	

ตารางที่ 3.5 ข้อมูลการประมาณค่าจากสูตรโครงสร้างด้วยวิธี UNIFAC (ต่อ)

สารประกอบ	สูตรโครงสร้าง	กลุ่ม	จำนวน	ΔG_f (J / mol)
ไลโนเลนิน	$C_{57}H_{198}O_6$	-CH ₃ -CH ₂ - >CH- -CH=CH- -COO	3 38 1 3 3	-1.72E+05
ไตรกลีเซอไรด์จำลอง	$C_{42}H_{80}O_6$	-CH ₃ -CH ₂ - >CH- -COO	3 35 1 3	-6.23E+05
3-เมทิลเฮปทีน (1-heptene 3-methyl)	C_8H_{16}	-CH ₃ -CH ₂ - >CH ₃ - CH ₂ =CH-	2 3 1 1	1.02E+05
1-เมทิล 2-โพรพิลไซโคล เพนเทน (Cyclopentane 1-met, 2-propyl)	C_9H_{18}	-CH ₃ -CH ₂ - >CH ₃ - -CH ₂ -	2 3 2 2	5.37E+04
2undecenal	$C_{11}H_{20}O$	-CH=O CH ₂ =CH- -CH ₂ -	1 1 8	3.01E+04
2dodecenal	$C_{12}H_{22}O$	-CH=O CH ₂ =CH- -CH ₂ -	1 1 9	3.85E+04
6-เมทิลเตตระเดเคน (Tetradecane, 6 met)	$C_{51}H_{98}O_6$	-CH ₃ -CH ₂ - >CH ₃ -	3 11 1	7.30E+04

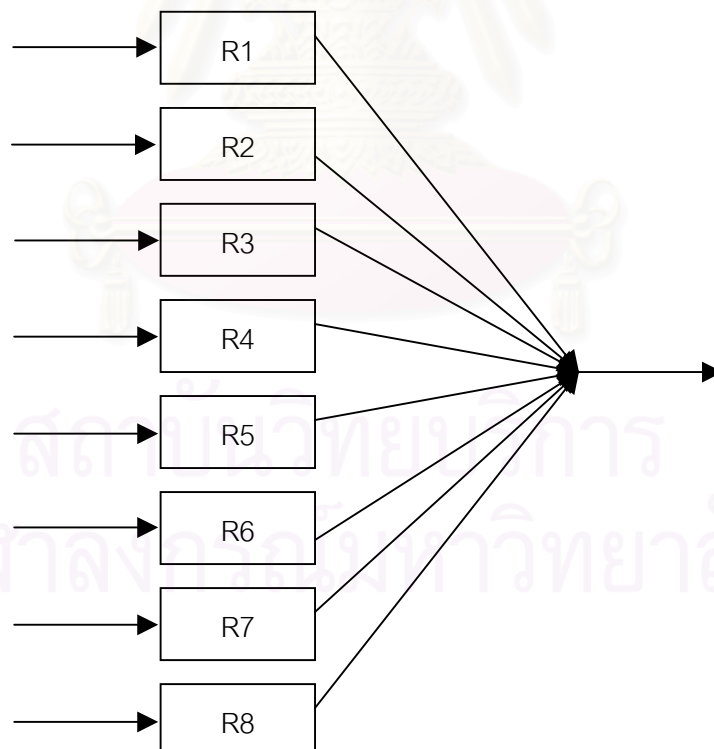
สำหรับการจำลองน้ำมันด้วยไตรกลีเซอไรด์ผสม 8 ชนิด การคำนวณสมดุลเคมีของระบบปฏิกิริยาอาจแบ่งออกได้เป็น 2 กรณี คือ

กรณีที่ 1 พิจารณาให้ระบบปฏิกิริยาของไตรกลีเซอไรด์ทั้งหมดในน้ำมันมะพร้าวจำลองเกิดปฏิกิริยาพร้อมๆ กัน ซึ่งคำนวณโดยใช้เครื่องปฏิกรณ์เคมีเพียงหนึ่งเครื่อง ดังแสดงในรูปที่ 3.2 โดยน้ำมันมะพร้าวจำลองประกอบด้วยไตรกลีเซอไรด์และละชนิดตามสัดส่วนที่ได้สรุปไว้ในตารางที่ 3.1



รูปที่ 3.2 การคำนวณสมดุลเคมีระบบปฏิกิริยาของไตรกลีเซอไรด์ทั้งหมดพร้อมกัน

กรณีที่ 2 พิจารณาสมดุลเคมีของไตรกลีเซอไรด์แต่ละชนิดแยกออกจากสมดุลเคมีของไตรกลีเซอไรด์ชนิดอื่นๆ การคำนวณจึงต้องใช้เครื่องปฏิกรณ์เคมีเท่ากับจำนวนชนิดของไตรกลีเซอไรด์ในน้ำมันมะพร้าวจำลองดังแสดงในรูปที่ 3.3



รูปที่ 3.3 การคำนวณสมดุลเคมีระบบปฏิกิริยาของไตรกลีเซอไรด์แต่ละชนิดแยกกัน

การพิจารณาคัดเลือกสารประกอบที่เกิดขึ้นในระบบปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อนในงานวิจัยนี้ ได้อ้างอิงข้อมูลของผลการทดลองของฟอเทส[11] ที่มีการรายงานถึงชนิดของสารประกอบแต่ละประเภทที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อน โดยสามารถจัดกลุ่มชนิดของสารประกอบได้ดังตารางที่ 3.4 ซึ่งเป็นการศึกษาปฏิกิริยาแตกตัวของน้ำมันมาคอบาที่อุณหภูมิ 700 และ 800 องศาเซลเซียส ความดันบรรยากาศ

ตารางที่ 3.6 กลุ่มของสารประกอบประเภทต่าง ๆ ที่ได้จากการทดลอง

สารประกอบไฮโดรคาร์บอน		สารประกอบอนุพันธ์ไฮโดรคาร์บอน		
อิ่มตัว	ไม่อิ่มตัว	แอลกอฮอล์	แอลดีไฮด์	กรดคาร์บอกซิลิก
C_6H_{14}	C_6H_{12}	$C_{12}H_{26}OH$	C_3H_4O	$C_8H_{17}COOH$
C_7H_{14}	C_7H_{14}		$C_{11}H_{20}O$	$C_{10}H_{21}COOH$
C_7H_{16}	C_8H_{16}		$C_{11}H_{22}O$	$C_{11}H_{23}COOH$
C_8H_{16}	C_9H_{18}		$C_{12}H_{22}O$	$C_{13}H_{27}COOH$
C_8H_{18}	$C_{10}H_{20}$			$C_{15}H_{31}COOH$
C_9H_{18}	$C_{11}H_{22}$			
C_9H_{20}				
$C_{10}H_{20}$				
$C_{11}H_{24}$				
$C_{15}H_{32}$				

3.2 การคำนวณหาปริมาณของผลิตภัณฑ์

การคำนวณหาปริมาณของผลิตภัณฑ์ชนิดต่างๆ สำหรับระบบที่มีปฏิกิริยาเคมีหลายปฏิกิริยาเคมีเกิดขึ้นพร้อมๆ กัน ที่สภาวะสมดุลเคมี ด้วยวิธีค่าพลังงานอิสระกิบส์ของระบบมีค่าต่ำที่สุด (minimize Gibbs free energy) โดยการกำหนดเลือกเพียงชนิดของสารประกอบของผลิตภัณฑ์เท่านั้น

3.2.1 พลังงานอิสระกิบบส์ที่น้อยที่สุด [23]

ที่สภาวะสมดุลเคมี ผลรวมของค่าพลังงานอิสระกิบบส์ (Gibbs free energy) ของระบบจะมีค่าน้อยที่สุด ซึ่งค่าพลังงานอิสระกิบบส์รวมของระบบ ที่อุณหภูมิและความดันหนึ่งๆ เป็นฟังก์ชันของปริมาณของผลิตภัณฑ์ชนิดต่างๆ ในระบบ แสดงได้ดังสมการ

$$G_{T,P} = f(n_1, n_2, \dots, n_n) \quad (1)$$

การประมาณค่าการกระจายตัวของผลิตภัณฑ์สำหรับระบบที่มีปฏิกิริยาเคมีหลายปฏิกิริยาเกิดขึ้นพร้อมๆ กัน สามารถคำนวณได้ด้วยวิธีของลากราง (lagrangian-multiplier) ดังนั้นจึงเป็นวิธีการที่สนับสนุนการแก้ปัญหาได้เป็นอย่างดี สำหรับสมการได้แสดงแสดงได้ดังสมการ

สำหรับปฏิกิริยาเคมีที่เกิดในสภาวะแก๊ส

1. สมการอนุรักษ์มวลสารของแต่ละอะตอมธาตุในระบบ

$$\sum_i n_i a_{ik} = A_k \quad (2)$$

เมื่อ $k = H, C, O$

2. คูณสมการอนุรักษ์มวลสารของแต่ละอะตอมธาตุด้วย λ_k

$$\lambda_k (\sum_i n_i a_{ik} - A_k) = 0 \quad (3)$$

จะได้ผลรวมของทุกอะตอมธาตุ k มีค่าเท่ากับ

$$\sum_k \lambda_k (\sum_i n_i a_{ik} - A_k) = 0 \quad (4)$$

จากสมการฟังก์ชัน สมการที่ (1) จะได้ว่า

$$F = G + \sum_k \lambda_k (\sum_i n_i a_{ik} - A_k) \quad (5)$$

จากสมการที่ (5) จะได้ว่า: $F \equiv G$, เมื่อเทอมทางขวามีค่าเท่ากับศูนย์ตามสมการที่ (4)

3. หาอนุพันธ์ย่อยของค่า F เทียบกับ n_i

$$\left(\frac{\partial F}{\partial n_i}\right)_{T,P,n_j} = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{T,P,n_j} + \sum_k \lambda_k a_{ik} = 0 \quad (6)$$

$$= \mu_i + \sum_k \lambda_k a_{ik} = 0 \quad (7)$$

เมื่อ $i = 1, 2, \dots, n$

แทนค่า $\mu_i = \Delta G_{fi}^\circ + RT \ln \frac{\mu_i}{f_i}$ ลงในสมการที่ (7) จะได้

$$\Delta G_{fi}^\circ + RT \ln \frac{\mu_i}{f_i} + \sum_k \lambda_k a_{ik} = 0 \quad (8)$$

แทนค่า $\frac{\mu_i}{f_i} = y_i \phi_i P$ ลงในสมการที่ (8) จะได้

$$\Delta G_{fi}^\circ + RT \ln (y_i \phi_i P) + \sum_k \lambda_k a_{ik} = 0 \quad (10)$$

สำหรับระบบที่เป็นแก๊สอุดมคติ จะได้ว่า

$$\Delta G_{fi}^\circ + RT \ln (y_i P) + \sum_k \lambda_k a_{ik} = 0 \quad (11)$$

เมื่อ $y_i = \frac{n_i}{\sum n_i}$ (12)

$$\Delta G_{fi}^\circ = 0, \text{ เมื่อ } i \text{ เป็นธาตุและ}$$

$$\phi_i = 1 \text{ สำหรับแก๊สอุดมคติ}$$

จำนวนของตัวแปร = n (n_i ของผลิตภัณฑ์แต่ละชนิด)
 + m (λ_k ของแต่ละอะตอมธาตุ)

จำนวนของสมการ = n (สมการสมดุลเคมี) + m (สมการอนุรักษ์มวลสาร)

แก้สมการ $n+m$ สมการเพื่อหาจำนวนโมลของชนิดของผลิตภัณฑ์ที่สมดุลเคมี

3.2.2 วิธีการคำนวณและเปรียบเทียบผล

กำหนดเลือกชนิดของผลิตภัณฑ์ทั้งหมดในทุกกลุ่มของสารประกอบผลิตภัณฑ์ คือสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัว สารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว แอลกอฮอล์ แอลดีไฮด์ และกรดคาร์บอกซิลิก ที่สภาวะการดำเนินการ 700 และ 800 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ เพื่อดูแนวโน้มของผลิตภัณฑ์ที่จะเกิดขึ้นในแบบจำลองเปรียบเทียบกับผลการทดลอง

วิธีการคำนวณปริมาณของสารประกอบด้วยวิธีของลากรางสำหรับงานวิจัยนี้ จะประยุกต์ใช้โปรแกรมสำเร็จรูป Pro II/Pro vision โดยเลือกใช้สมการสภาวะของ โซฟ เรดลิช ก่วง (Soave Redlich Kwong, SRK) เพ็ง โรบินสัน (Peng Robinson, PR) ยูนิแฟค (UNIFAC) และ ไอเดียล (IDEAL) สำหรับการประมาณค่าตัวแปรทางอุณหพลศาสตร์ของสารประกอบในระบบ ปฏิกริยา



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 4

ผลการทดลองและการวิเคราะห์

ระบบปฏิกิริยาเคมีของการเกิดสารประกอบต่างๆ จากไตรกลีเซอไรด์ ซึ่งเป็นโมเลกุลใหญ่มีจำนวนอะตอมของคาร์บอนและไฮโดรเจนสูงถึง 42 และ 80 อะตอม ตามลำดับ ดังนั้นจำนวนชนิดสารประกอบที่อาจเกิดขึ้นจึงมีจำนวนมาก เพื่อความสะดวกต่อการเปรียบเทียบชนิดสารประกอบไฮโดรคาร์บอนและสารประกอบอินทรีย์ที่เกิดขึ้นจากไตรกลีเซอไรด์จึงกำหนดสารประกอบในแบบจำลองตามผลการทดลองของฟอร์เทส[11] ดังที่ได้สรุปไว้ในตารางที่ 4.1

ตารางที่ 4.1 ชนิดของสารประกอบแบ่งตามประเภทจากผลการทดลองของฟอร์เทส

สารประกอบ	สูตรโมเลกุล
สารประกอบไฮโดรคาร์บอน	
- อิมิตัว	$C_6H_{14}, C_7H_{14}, C_7H_{16}, C_8C_{16}, C_8C_{18}, C_9H_{20}, C_{11}H_{24}, C_{15}H_{32}, C_7H_{14}, C_9H_{18}$
- ไม่อิมิตัว	$C_6H_{12}, C_8H_{16}, C_9H_{18}, C_{10}H_{20}, C_{11}H_{22}$
สารประกอบอนุพันธ์ไฮโดรคาร์บอน	
- แอลกอฮอล์	$C_{12}H_{26}O$
- แอลดีไฮด์	$C_3H_4O, C_{11}H_{20}O, C_{11}H_{22}O, C_{12}H_{22}O$
- กรดคาร์บอกซิลิก	$C_9H_{18}O_2, C_{11}H_{22}O_2, C_{12}H_{24}O_2, C_{14}H_{28}O_2, C_{16}H_{32}O_2$

ชนิดและปริมาณของสารประกอบจากผลการทดลองสำหรับปฏิกิริยาการแตกตัวของไตรกลีเซอไรด์ที่อุณหภูมิ 700 และ 800 องศาเซลเซียส ความดัน 1 บรรยากาศ ณ เวลาต่างๆ แสดงผลดังตารางที่ 4.2 ความสัมพันธ์ระหว่างระยะเวลาที่ปริมาณของสารประกอบผลิตภัณฑ์ในแต่ละประเภทเป็นดังนี้คือ

1. สารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิมิตัวในระบบมีปริมาณลดลงเมื่อให้เกิดปฏิกิริยานานมากขึ้น และเมื่อเพิ่มอุณหภูมิให้สูงขึ้นพบว่าสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิมิตัวในระบบมีปริมาณลดลงโดยเฉพาะสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิมิตัวประเภทอัลเคน

2. สารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัวที่เกิดขึ้นได้ลดลงตามระยะเวลาในการเกิดปฏิกิริยา และเมื่อเพิ่มอุณหภูมิให้สูงขึ้นปริมาณการเกิดสารประกอบกลุ่มนี้ลดลง แต่ยังคงมีปริมาณมากกว่าสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวอย่างชัดเจน

ตารางที่ 4.2 ปริมาณและชนิดของสารประกอบจากผลการทดลองที่สภาวะต่างๆ

สารประกอบ	700 องศาเซลเซียส			800 องศาเซลเซียส		
	10 วินาที	20 วินาที	30 วินาที	10 วินาที	20 วินาที	30 วินาที
ไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัว	16.30	14.90	13.10	24.00	16.00	5.80
ไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว	41.00	37.00	25.00	30.00	27.00	18.00
แอลกอฮอล์	0.40	0.50	1.00	0.32	1.10	2.50
แอลดีไฮด์	25.00	18.00	16.00	21.00	14.00	15.00
กรดคาร์บอกซิลิก	8.20	11.70	17.40	14.00	24.00	36.00
ไม่ระบุชนิด	9.25	18.13	27.74	11.89	18.27	23.81

3. สารประกอบแอลกอฮอล์มีปริมาณเพิ่มขึ้นเล็กน้อยเมื่อให้ระยะเวลาในการเกิดปฏิกิริยาที่นานขึ้น และเมื่อเพิ่มอุณหภูมิให้สูงขึ้นก็ยังคงมีแนวโน้มของการเกิดขึ้นเพิ่มตามอุณหภูมิ แต่เมื่อเทียบเป็นสัดส่วนกับสารประกอบกลุ่มอื่นที่เกิดขึ้นพบว่ามีส่วนการเกิดที่เพิ่มขึ้นเพียงเล็กน้อยเท่านั้น

4. สารประกอบแอลดีไฮด์มีแนวโน้มของการเกิดลดลงเมื่อให้ระยะเวลาในการเกิดปฏิกิริยานานขึ้น และเมื่อเพิ่มอุณหภูมิให้สูงขึ้นปริมาณของการเกิดสารประกอบแอลดีไฮด์ก็ยังคงมีปริมาณลดลงด้วยเช่นกัน และที่เวลา 30 วินาที ปริมาณของแอลดีไฮด์ที่เกิดขึ้น ณ อุณหภูมิ 700 และ 800 องศาเซลเซียสมีค่าใกล้เคียงกันมาก

5. สารประกอบกรดคาร์บอกซิลิกมีแนวโน้มของการเกิดเพิ่มขึ้นเมื่อให้ระยะเวลาในการเกิดนานขึ้น และเมื่อเพิ่มอุณหภูมิให้สูงขึ้นพบว่าแนวโน้มของการเกิดสารประกอบเหล่านี้ยังคงมีปริมาณเพิ่มขึ้น

ในงานวิจัยนี้ได้เลือกพิจารณาสมการสภาวะของ ซอฟ เรดลิช ก่วง (SRK) เฟ็ง โร บินสัน (PR) ยูนิแฟค (UNIFAC) และแก๊สอุดมคติ (IDEAL) เพื่อเปรียบเทียบความแตกต่างของผลการคำนวณที่ได้จากแต่ละสมการสภาวะ ผลการคำนวณที่ได้แสดงดังตารางที่ 4.3 พบว่าผลการ

ตารางที่ 4.3 ผลการคำนวณเมื่อใช้สมการสภาวะประเภทต่างๆ

สารประกอบ	700 องศาเซลเซียส				800 องศาเซลเซียส			
	SRK	PR	UNIFAC	IDEAL	SRK	PR	UNIFAC	IDEAL
ไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัว	21.98	21.98	32.09	32.09	28.09	28.09	34.65	34.65
ไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว	25.74	25.74	18.22	18.22	21.27	21.27	16.59	16.59
แอลกอฮอล์	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
แอลดีไฮด์	33.70	33.70	40.53	40.53	37.67	37.67	42.25	42.25
กรดคาร์บอกซิลิก	18.59	18.59	8.96	8.96	12.97	12.97	6.51	6.51

คำนวณปริมาณของสารประกอบแต่ละประเภทด้วยสมการสภาวะดังกล่าวข้างต้นแตกต่างกัน โดยสมการสภาวะ UNIFAC และ IDEAL มีค่าเดียวกัน และสมการสภาวะ SRK และ PR ก็ให้ผลเท่ากันเช่นเดียวกัน เมื่อเปรียบเทียบแนวโน้มของสารประกอบที่เกิดขึ้นเมื่อใช้สมการสภาวะดังกล่าวพบว่าปริมาณของสารประกอบที่เกิดขึ้นมีแนวโน้มเช่นเดียวกับผลการทดลอง ยกเว้นสารประกอบในกลุ่มกรดคาร์บอกซิลิกที่ให้ผลการคำนวณที่แตกต่างจากผลการทดลองเมื่อคำนวณด้วยสมการสภาวะ UNIFAC และ IDEAL

จากคู่มือการใช้โปรแกรมสำเร็จรูป PRO II/Provision และ Aspen plus ระบุไว้ว่าสมการสภาวะ IDEAL เหมาะสำหรับระบบที่มีอุณหภูมิสูงและความดัน 0 – 2 บรรยากาศ สมการสภาวะ UNIFAC เหมาะสำหรับระบบที่เป็นของเหลวและมีอุณหภูมิต่ำประมาณ 17 - 150 องศาเซลเซียส สมการ SRK และ PR เหมาะสำหรับระบบของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่ไม่มีขั้วหรือความมีขั้วน้อยๆ และอยู่ในสถานะแก๊สโดยกำหนดขอบเขตสภาวะอุณหภูมิอยู่ในช่วง -260 – 1700 องศาเซลเซียส ความดัน 0 – 340 บรรยากาศ สำหรับงานวิจัยนี้มีขอบเขตการดำเนินงานอยู่ในช่วงอุณหภูมิ 400 – 1000 องศาเซลเซียส และความดัน 1 บรรยากาศ ในระบบมีสารประกอบที่มีความมีขั้วน้อยและมีสถานะเป็นของเหลวและแก๊สที่อุณหภูมิ 400 - 500 องศาเซลเซียส และระบบจะมีเพียงสถานะแก๊สเพียงอย่างเดียวตั้งแต่อุณหภูมิ 600 องศาเซลเซียสขึ้นไป ดังนั้นจึงได้เลือกใช้สมการสภาวะดังกล่าวมาประยุกต์ใช้สำหรับงานวิจัยนี้

ผลการคำนวณด้วยสมการสภาวะทั้ง 4 สมการข้างต้นพบว่าสมการสภาวะ UNIFAC และ IDEAL ให้ผลการคำนวณเช่นเดียวกันอาจอธิบายได้ว่าเนื่องจากการประมาณค่าคุณสมบัติทางอุณหพลศาสตร์บางค่าด้วยวิธีการของ UNIFAC เช่น เอนทาลปี (enthalpy)

สัมประสิทธิ์ฟูกาซีตี (fugacity coefficient) และความหนาแน่น (density) ได้ใช้วิธีการประมาณค่าด้วยสมการสถานะ IDEAL ร่วมด้วยจึงทำให้ผลการคำนวณไม่แตกต่างกัน และสำหรับกรณีของสมการสถานะ IDEAL และ SRK หรือ PR ให้ผลการคำนวณที่แตกต่างกันเนื่องจากในระบบมีสารประกอบหลายชนิดซึ่งอาจมีแรงกระทำระหว่างโมเลกุลทำให้ระบบเบี่ยงเบนไปจากอุดมคติ ผลการคำนวณที่ได้จากสมการสถานะ IDEAL จึงแตกต่างจากผลที่ได้จากการทดลองมากกว่าการใช้สมการสถานะ SRK หรือ PR สมการสถานะที่สามารถคำนวณได้ในช่วงอุณหภูมิและความดันสำหรับงานวิจัยนี้จึงเหลือเพียงสมการสถานะ SRK และ PR ซึ่งจากผลการคำนวณที่ได้พบว่าสมการสถานะ SRK และ PR มีค่าไม่แตกต่างกัน ดังนั้นสำหรับงานวิจัยนี้จึงเลือกใช้สมการสถานะ SRK ในการคำนวณเพียงอย่างเดียว

การคำนวณโดยใช้ไตรกลีเซอไรด์จำลอง ($C_{42}H_{80}O_6$) ภายใต้เงื่อนไขของสมดุลเคมี โดยกำหนดให้สารประกอบผลิตภัณฑ์ในแบบจำลองเป็นชนิดเดียวกันกับผลการทดลองดังตารางที่ 4.1 ได้ผลการคำนวณแสดงดังตารางที่ 4.4

ตารางที่ 4.4 ผลการคำนวณด้วยไตรกลีเซอไรด์จำลองเปรียบเทียบกับผลการทดลอง

สารประกอบ	700 องศาเซลเซียส		800 องศาเซลเซียส	
	ทดลอง	คำนวณ	ทดลอง	คำนวณ
ไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัว	13.10	21.98	5.80	28.09
ไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว	25.00	25.74	18.00	21.27
แอลกอฮอล์	1.00	0.00	2.50	0.0
แอลดีไฮด์	16.00	33.70	15.00	37.67
กรดคาร์บอกซิลิก	17.40	18.59	36.00	12.97
ไม่ระบุชนิด	27.74	-	23.81	-

เมื่อเปรียบเทียบแนวโน้มของปริมาณสารประกอบที่เกิดขึ้นในระบบพบว่า กลุ่มของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว แอลกอฮอล์ และแอลดีไฮด์ มีแนวโน้มเป็นไปตามผลการทดลอง นั่นคือกลุ่มของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัวในระบบมีปริมาณลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นซึ่งให้ผลเช่นเดียวกับผลการทดลอง สารประกอบแอลกอฮอล์ไม่เกิดขึ้นในระบบซึ่งสอดคล้องกับผลการทดลองที่รายงานไว้ว่า ปริมาณของสารประกอบแอลกอฮอล์มีปริมาณเพิ่มขึ้นตามอุณหภูมิใน สัดส่วนเพียงเล็กน้อยประมาณร้อยละ 1 – 2.5 โดยมวล ซึ่งถือได้ว่าเกิดขึ้นน้อยมาก สารประกอบแอลดีไฮด์มีปริมาณเพิ่มขึ้นเล็กน้อยตามอุณหภูมิประมาณร้อยละ 33.67 – 37.70

โดยมวล ซึ่งปริมาณที่เพิ่มขึ้นด้วยอิทธิพลของอุณหภูมินี้ถือได้ว่ามีแนวโน้มไม่แตกต่างจากผลการทดลอง โดยผลการทดลองได้ปริมาณของสารประกอบแอลดีไฮด์ที่เกิดขึ้น ณ อุณหภูมิ 700 และ 800 องศาเซลเซียสมีค่าใกล้เคียงกันมากประมาณร้อยละ 15 และ 16 โดยมวล ตามลำดับ

สารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวและสารประกอบกรดคาร์บอกซิลิกเพียง 2 กลุ่มที่มีแนวโน้มแตกต่างจากผลการทดลอง นั่นคือปริมาณของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวที่คำนวณได้มีปริมาณเพิ่มขึ้นเมื่อเพิ่มอุณหภูมิให้สูงขึ้น โดยเฉพาะสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวประเภทอัลเคน ในขณะที่ผลการทดลองรายงานปริมาณของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวประเภทอัลเคนมีแนวโน้มลดลงเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้น ส่วนสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวประเภทไซโคลอัลเคนมีปริมาณลดลงตามอุณหภูมิเพียงเล็กน้อย และปริมาณที่เกิดขึ้นในระบบมีเพียงร้อยละ 0.03 – 0.02 โดยมวล ผลการทดลองได้รายงานปริมาณของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวประเภทไซโคลอัลเคนมีปริมาณลดลงเมื่อเพิ่มอุณหภูมิให้สูงขึ้นคือมีปริมาณร้อยละ 10.2 โดยมวล และร้อยละ 2.7 โดยมวล ณ อุณหภูมิ 700 และ 800 องศาเซลเซียส ตามลำดับ ซึ่งถือได้ว่าปริมาณของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวประเภทไซโคลอัลเคนมีแนวโน้มเช่นเดียวกับผลการทดลอง สารประกอบกรดคาร์บอกซิลิกมีปริมาณลดลงเมื่อเพิ่มอุณหภูมิให้สูงขึ้นในขณะที่ผลการทดลองรายงานว่าได้ปริมาณของกรดคาร์บอกซิลิกเพิ่มขึ้นตามอุณหภูมิในปริมาณที่ค่อนข้างมากร้อยละ 17.40 – 36.00 โดยมวล

จากผลการคำนวณที่ผ่านมา เป็นการคำนวณโดยใช้ไตรกลีเซอไรด์จำลอง ($C_{42}H_{80}O_6$) ในส่วนของการคำนวณด้วยไตรกลีเซอไรด์ผสมสามารถแบ่งการคำนวณได้ 2 แบบคือการคำนวณโดยพิจารณาให้ไตรกลีเซอไรด์ผสมเกิดปฏิกิริยาพร้อมๆ กันดังแสดงในรูปที่ 3.2 เรียกว่ากรณีที่ 1 และการคำนวณโดยพิจารณาให้ไตรกลีเซอไรด์ผสมเกิดปฏิกิริยาแยกกันดังแสดงในรูปที่ 3.3 เรียกว่ากรณีที่ 2 ผลการคำนวณที่ได้แสดงดังตารางที่ 4.5 พบว่าการคำนวณด้วยกรณีที่ 1 ได้สารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวประเภทไซโคลอัลเคนเกิดขึ้นเพียงเล็กน้อยและมีปริมาณใกล้เคียงกันมากร้อยละ 0.002 – 0.003 โดยมวล ณ อุณหภูมิ 700 และ 800 องศาเซลเซียส และสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวประเภทอัลเคนไม่เกิดขึ้นในระบบซึ่งถือได้ว่าสอดคล้องกับผลการทดลองที่ได้ปริมาณของสารประกอบอัลเคนมีปริมาณลดลงตามอุณหภูมิและเกิดขึ้นเพียงเล็กน้อย สารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัวมีปริมาณเท่ากันทั้ง 2 อุณหภูมิ ประมาณร้อยละ 3.03 โดยมวล สารประกอบแอลกอฮอล์ไม่เกิดขึ้นในระบบซึ่งสอดคล้องกับผลการทดลองที่เกิดขึ้นเพียงเล็กน้อยและมีปริมาณลดลงตามอุณหภูมิ สารประกอบแอลดีไฮด์มีปริมาณลดลงในสัดส่วนเพียงเล็กน้อยเมื่อเพิ่มอุณหภูมิให้สูงขึ้นร้อยละ 48.54 - 48.92 โดยมวล และ

ตารางที่ 4.5 ผลการคำนวณด้วยโปรแกรมไฮโดรไลซิสผสมด้วยวิธีการคำนวณต่างๆ

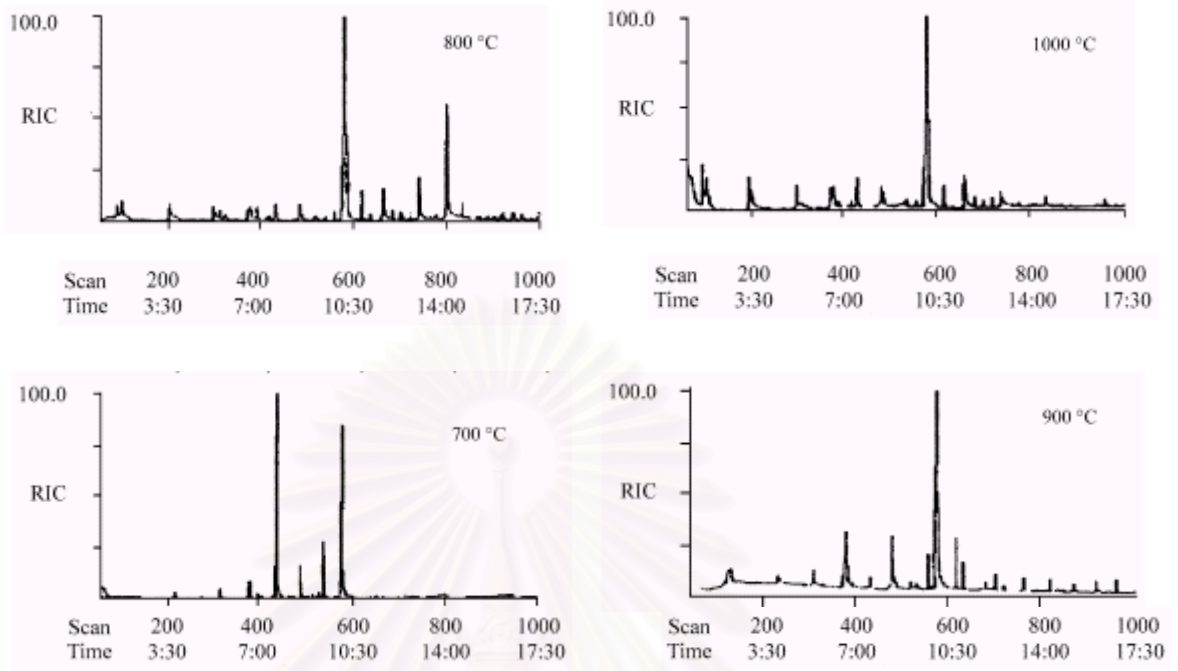
สารประกอบ	700 องศาเซลเซียส			800 องศาเซลเซียส		
	ทดลอง	กรณีที่ 1	กรณีที่ 2	ทดลอง	กรณีที่ 1	กรณีที่ 2
ไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัว	13.10	0.00	21.98	5.80	0.00	28.09
- อัลเคน	2.90	0.00	17.28	3.10	0.00	24.94
C ₇	-	-	13.50	-	-	20.35
C ₈	-	-	3.05	-	-	3.83
C ₉	-	-	0.61	-	-	0.65
C ₁₀	-	-	0.11	-	-	0.10
- ไฮโคอัลเคน	10.20	0.003	0.033	2.70	0.002	0.01
C ₇	-	-	0.021	-	-	0.01
C ₉	-	-	0.012	-	-	-
ไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว	25.00	3.03	21.79	18.00	3.30	16.23
C ₆	-	3.03	20.40	-	3.30	15.37
C ₇	-	-	0.71	-	-	0.53
C ₈	-	-	0.67	-	-	0.40
C ₉	-	-	0.02	-	-	0.01
แอลกอฮอล์	1.00	0.00	0.00	2.50	0.00	0.00
C ₈ -C ₁₂	-	-	-	-	-	-
แอลดีไฮด์	16.00	48.92	23.39	15.00	48.54	27.52
อโครลีน	-	-	23.36	-	-	27.38
C ₁₀ -C ₁₂	-	48.92	0.03	-	48.58	0.014
กรดคาร์บอกซิลิก	17.40	42.53	27.56	36.00	42.14	21.35
C ₈	-	39.54	22.66	-	39.05	18.14
C ₉	-	2.17	4.22	-	2.06	2.83
C ₁₀	-	0.82	0.68	-	0.62	0.38

สารประกอบกรดคาร์บอกซิลิกมีปริมาณลดลงในสัดส่วนเพียงเล็กน้อยเมื่อให้อุณหภูมิสูงขึ้นเช่นเดียวกับสารประกอบแอลดีไฮด์ที่มีปริมาณลดลงในสัดส่วนเล็กน้อยตามอุณหภูมิประมาณร้อยละ 42.14 – 42.53 โดยมวล จึงอาจถือได้ว่าปริมาณของสารประกอบทั้ง 2 ชนิดมีค่าใกล้เคียงกันมากทั้งสองอุณหภูมิ เมื่อเปรียบเทียบผลการคำนวณในกรณีที่ 1 กับผลการทดลองพบว่า ปริมาณและ

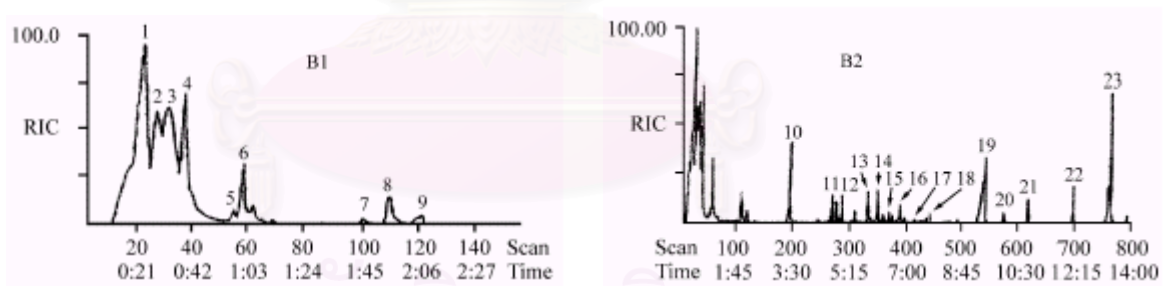
ชนิดของสารประกอบที่มีแนวโน้มสอดคล้องกับผลการทดลองมีเพียงสารประกอบ 2 กลุ่มคือสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวประเภทไซโคลอัลเคนและสารประกอบแอลกอฮอล์ และในกรณีของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวประเภทอัลเคน สารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว สารประกอบแอลดีไฮด์ และสารประกอบกรดคาร์บอกซิลิก มีแนวโน้มแตกต่างจากผลการทดลองอย่างชัดเจน

จากผลการคำนวณในตารางที่ 4.5 พบว่าปริมาณของแอลดีไฮด์และกรดคาร์บอกซิลิกที่คำนวณได้จากการใช้ไตรกลีเซอไรด์จำลองแบบเครื่องปฏิกรณ์เดียวและการใช้ไตรกลีเซอไรด์ผสมแบบหลายเครื่องปฏิกรณ์มีปริมาณที่แตกต่างกัน แต่ปริมาณของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัว สารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว และแอลกอฮอล์ จะให้ผลการคำนวณที่ใกล้เคียงกัน โดยปริมาณของแอลดีไฮด์ที่ได้จากผลการคำนวณโดยใช้ไตรกลีเซอไรด์จำลองจะมีค่าแตกต่างจากผลการทดลองมากกว่าผลการคำนวณกรณีที่ใช้ไตรกลีเซอไรด์ผสมแบบหลายเครื่องปฏิกรณ์ ในขณะที่ปริมาณของกรดคาร์บอกซิลิกที่ได้จากการคำนวณโดยใช้ไตรกลีเซอไรด์จำลองจะมีค่าแตกต่างจากผลการทดลองน้อยกว่าผลการคำนวณที่ใช้ไตรกลีเซอไรด์ผสม แต่หากพิจารณาโดยรวมแล้วจะเห็นได้ว่า ผลการคำนวณของการใช้ไตรกลีเซอไรด์ผสมแบบหลายเครื่องปฏิกรณ์จะให้ผลการคำนวณที่ใกล้เคียงกับผลการทดลองมากกว่า ดังนั้นงานวิจัยจากนี้ไปจะเลือกใช้แบบจำลองที่ใช้ไตรกลีเซอไรด์ผสมคำนวณแบบหลายเครื่องปฏิกรณ์

ผลการคำนวณที่ผ่านมาพบว่าปริมาณและชนิดของสารประกอบที่เกิดขึ้นในกลุ่มของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวประเภทอัลเคนมีความแตกต่างจากผลการทดลองอย่างเห็นได้ชัด ดังนั้นจึงจำเป็นต้องปรับแบบจำลองด้วยการไม่พิจารณาสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวประเภทอัลเคนในระบบเพื่อเปรียบเทียบปริมาณและชนิดของสารประกอบที่เกิดขึ้น ผลการคำนวณแสดงดังตารางที่ 4.6 พบว่าที่อุณหภูมิ 400 - 550 องศาเซลเซียส ไตรกลีเซอไรด์ผสมไม่สามารถเกิดปฏิกิริยาแตกตัวได้อย่างสมบูรณ์ ทำให้ในระบบยังคงมีไตรกลีเซอไรด์เหลืออยู่ค่อนข้างมากและอยู่ในสถานะของเหลว แล้วจากผลการคำนวณก็พบว่าปริมาณของสารประกอบที่เกิดขึ้นมีปริมาณเพียงเล็กน้อย เมื่อให้อุณหภูมิเพิ่มขึ้นเป็น 600 องศาเซลเซียส ขึ้นไปพบว่าปริมาณของสารตั้งต้นไตรกลีเซอไรด์ในแบบจำลองสามารถเกิดปฏิกิริยาแตกตัวได้อย่างสมบูรณ์ ชนิดของสารประกอบที่เกิดขึ้นมีเพียงสารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว สารประกอบแอลดีไฮด์ และสารประกอบกรดคาร์บอกซิลิก เมื่อเพิ่มอุณหภูมิให้สูงกว่า 600 องศาเซลเซียส ปริมาณของสารประกอบทั้งสามกลุ่มไม่เปลี่ยนแปลงตามอุณหภูมิ ซึ่งเป็นลักษณะของระบบปฏิกิริยาเคมีที่มีเพียงปฏิกิริยาเดียว นั่นคือไตรกลีเซอไรด์แตกตัวให้สารประกอบในกลุ่มของกรดคาร์บอกซิลิก สาร



รูปที่ 4.1 เปรียบเทียบผลการทดลองที่อุณหภูมิ 700 – 1000 องศาเซลเซียส เวลา 30 วินาที[11]



รูปที่ 4.2 ผลการวิเคราะห์สารประกอบที่ได้จากการทดลองด้วย GC/MS[11]

ประกอบแอลดีไฮด์ไม่อิ่มตัว โดยเฉพาะอโครลีนและสารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว (อัลคีน) ซึ่งผลการคำนวณที่ได้สามารถอธิบายกับผลการทดลองที่อุณหภูมิ 700 และ 800 องศาเซลเซียส ได้แสดงดังรูปที่ 4.1 และสารประกอบที่วิเคราะห์ได้ ณ อุณหภูมิ 700 องศาเซลเซียส แสดงดังรูปที่ 4.2 พบว่าเมื่อเพิ่มอุณหภูมิจาก 700 เป็น 800 องศาเซลเซียส สารประกอบที่มีขนาดเล็กกลงจะเกิดขึ้นเป็นปริมาณมากขึ้นซึ่งผลการทดลองได้รายงานไว้เช่นเดียวกัน และที่อุณหภูมิ 900

องศาเซลเซียสขึ้นไป ปริมาณของสารประกอบที่มีขนาดโมเลกุลเล็กกลงควรมีปริมาณเพิ่มขึ้นโดยพิจารณาจากรูปที่ 4.1 แต่เนื่องจากการทดลองไม่ได้วิเคราะห์ชนิดและปริมาณของสารประกอบเหล่านั้นจึงไม่สามารถระบุชนิดของสารประกอบได้

การพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างชนิดของสารประกอบที่ได้จากปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อนของน้ำมันมาคอบากับอุณหภูมิต่างๆ จะเห็นได้ว่า ปริมาณของสารประกอบที่มีขนาดโมเลกุลเล็กที่เกิดขึ้นในช่วงอุณหภูมิ 700 - 1000 องศาเซลเซียส จะเกิดได้มากขึ้นเมื่อให้อุณหภูมิเพิ่มขึ้น และในทางตรงกันข้ามสารประกอบที่มีขนาดโมเลกุลใหญ่จะมีปริมาณลดลงเมื่อให้อุณหภูมิเพิ่มขึ้นซึ่งสังเกตได้จากในช่วงระยะเวลา 0 - 7 วินาที จะมีจำนวนยอดกราฟเพิ่มขึ้นที่อุณหภูมิสูงขึ้น โดยแต่ละยอดกราฟที่ระยะเวลาต่างๆ แสดงถึงชนิดของสารประกอบแต่ละชนิดที่เกิดขึ้น และพื้นที่ใต้กราฟของแต่ละยอดกราฟจะแสดงถึงปริมาณของสารประกอบที่เกิดขึ้น และเมื่อพิจารณาจากรูปที่ 4.2 แล้วจะเห็นได้ว่าในช่วงระยะเวลาดังกล่าวสารประกอบที่เกิดขึ้นที่มีปริมาณมากที่สุดคือสารประกอบโครลีน (ยอดกราฟที่ 1) ในขณะที่ระยะเวลาดั้งแต่ 10 วินาทีขึ้นไป จำนวนยอดกราฟที่แสดงถึงสารประกอบที่ขนาดโมเลกุลใหญ่จะมีปริมาณลดน้อยลง และมีความสูงของยอดกราฟลดลงด้วยซึ่งผลการคำนวณที่อุณหภูมิ 700 และ 800 องศาเซลเซียสก็ได้ผลที่มีแนวโน้มเช่นเดียวกันกับผลการทดลองคือ ได้สารประกอบโครลีนเป็นผลิตภัณฑ์ที่มีปริมาณมากที่สุด

เมื่อพิจารณาผลการทดลองที่อุณหภูมิสูงกว่า 800 องศาเซลเซียส คือที่อุณหภูมิ 900 และ 1000 องศาเซลเซียส พบว่าในช่วงแรกของการเกิดปฏิกิริยาแตกตัวด้วยความร้อนมีสารประกอบที่มีขนาดโมเลกุลเล็กเกิดขึ้นค่อนข้างมาก โดยสังเกตได้จากยอดกราฟในรูปที่ 4.1 ณ อุณหภูมิดังกล่าว ยอดกราฟที่เกิดขึ้นจะมีปริมาณเพิ่มมากขึ้นซึ่งแสดงให้เห็นว่าสารประกอบที่มีขนาดโมเลกุลเล็กกลงสามารถเกิดได้มากขึ้น และเมื่อเพิ่มอุณหภูมิเป็น 1000 องศาเซลเซียส ปริมาณของยอดกราฟที่เกิดขึ้นยังคงมีปริมาณเพิ่มมากขึ้น ซึ่งแสดงให้เห็นว่าสารประกอบที่มีขนาดโมเลกุลเล็ก สามารถเกิดได้ในปริมาณที่มากขึ้นเมื่อเพิ่มอุณหภูมิให้สูงขึ้น แต่การทดลองไม่ได้รายงานชนิดและปริมาณของสารประกอบเหล่านั้นไว้ทำให้ไม่สามารถระบุชนิดได้ ส่งผลให้ผลการคำนวณที่อุณหภูมิสูงกว่า 800 องศาเซลเซียส ไม่สามารถเปรียบเทียบผลได้ และจากกราฟในรูปที่ 4.1 ยังคงเป็นข้อสันนิษฐานที่ดีว่าหากให้ระบบปฏิกิริยาเกิดปฏิกิริยาที่อุณหภูมิสูงกว่า 800 องศาเซลเซียส จะทำให้ได้สารประกอบที่มีขนาดโมเลกุลเล็กกลงเพิ่มมากขึ้น

การคำนวณหาปริมาณและชนิดของสารประกอบที่ผ่านมาสามารถสรุปได้ว่าแบบจำลองที่เหมาะสมสำหรับระบบปฏิกิริยาแตกตัวด้วยความร้อนของไตรกลีเซอไรด์ ประกอบด้วย

ด้วยระบบปฏิกิริยาที่ไม่รวมสารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัวประเภทอัลเคนในระบบ ซึ่งจากผลการคำนวณพบว่าให้ผลที่ใกล้เคียงกับผลการทดลอง นั่นคือได้ผลิตภัณฑ์เป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว สารประกอบแอลดีไฮด์โดยเฉพาะอโครลีน และกรดคาร์บอกซิลิก เพียงสามประเภทในระบบ ดังนั้นจึงได้พิจารณาแบบจำลองที่สร้างขึ้นเพื่อใช้ทำนายผลของชนิดและปริมาณของสารประกอบโดยใช้องค์ประกอบของน้ำมันมะพร้าวแทนน้ำมันมาคอบา องค์ประกอบของน้ำมันมาคอบาและน้ำมันมะพร้าวแสดงดังตารางที่ 4.7 และผลการคำนวณแสดงดังตารางที่ 4.8

ตารางที่ 4.7 ปริมาณของกรดคาร์บอกซิลิกในน้ำมันมาคอบาและน้ำมันมะพร้าว

กรดคาร์บอกซิลิก	สูตรโมเลกุล	น้ำมันมาคอบา (ปริมาณโดยมวล)	น้ำมันมะพร้าว (ปริมาณโดยมวล)
กรดคาร์บอกซิลิกอิ่มตัว			
กรดคาร์พริก	(C ₇ H ₁₅ COOH)	2.10	10
กรดคาร์พริลิก	(C ₉ H ₁₉ COOH)	3.72	8
กรดลอริก	(C ₁₁ H ₂₃ COOH)	38.89	50
กรดไมริสติก	(C ₁₃ H ₂₇ COOH)	11.00	17
กรดปาล์มิติก	(C ₁₅ H ₃₁ COOH)	17.35	8
กรดสเตียริก	(C ₁₇ H ₃₅ COOH)	4.34	5
กรดคาร์บอกซิลิกไม่อิ่มตัว			
กรดโอเลอิก	(C ₁₇ H ₃₃ COOH)	22.60	2
กรดไลโนเลอิก	(C ₁₇ H ₃₁ COOH)	-	1

จากผลการคำนวณในตารางที่ 4.8 จะเห็นได้ว่าเมื่อนำแบบจำลองที่ใช้ในการคำนวณในกรณีของน้ำมันมาคอบามาประยุกต์ใช้กับน้ำมันมะพร้าว ผลการคำนวณที่ได้ประกอบด้วยชนิดและปริมาณของสารประกอบที่เกิดขึ้นเช่นเดียวกับกรณีที่ใช้องค์ประกอบของน้ำมันมาคอบา แตกต่างกันตรงที่ปริมาณของสารประกอบแอลดีไฮด์ และสารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัวที่เกิดขึ้นในระบบมีปริมาณน้อยกว่าการคำนวณด้วยน้ำมันมาคอบาในขณะที่ปริมาณของกรดคาร์บอกซิลิกที่คำนวณได้จากองค์ประกอบของน้ำมันมะพร้าว จะมีปริมาณมากกว่าผลการคำนวณกรณีใช้น้ำมันมาคอบาสาเหตุที่เป็นเช่นนี้อาจสามารถอธิบายได้ว่า เนื่องจากน้ำมันมาคอบามีสัดส่วนโดยมวลของกรดคาร์บอกซิลิกไม่อิ่มตัวที่มีจำนวนคาร์บอนอะตอม 18 อะตอม (C₁₇H₃₃COOH) ประมาณร้อยละ 23 และน้ำมันมะพร้าวมีสัดส่วนโดยมวลของกรดคาร์บอกซิลิกไม่อิ่มตัวที่มีจำนวนคาร์บอนอะตอม 18 อะตอม (C₁₇H₃₃COOH) เพียงร้อยละ 2 ซึ่งมีปริมาณน้อยกว่าน้ำมันมาคอบา

ตารางที่ 4.8 ผลการคำนวณกรณีใส่สารประกอบตามผลการรายงานยกเว้นสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวประเภทอัลเคนเมื่อใช้องค์ประกอบน้ำมันมะพร้าว

สารประกอบ	อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)						
	400	500	600	700	800	900	1000
ไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัว	0.03	1.84	0.89	0.23	0.11	0.10	0.09
ไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว	0.17	17.04	35.94	35.94	35.94	35.94	35.94
แอลกอฮอล์	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
แอลดีไฮด์	0.52	10.71	19.89	19.89	19.89	19.89	19.89
- อโครลีน	0.52	9.89	19.87	19.87	19.87	19.87	19.87
กรดคาร์บอกซิลิก	1.46	29.69	43.28	43.28	43.28	43.28	43.28
ไตรกลีเซอไรด์	97.83	40.47	-	-	-	-	-

ค่อนข้างมาก ทำให้น้ำมันมาคอบาเกิดปฏิกิริยาแตกตัวด้วยความร้อนได้สารประกอบผลิตภัณฑ์เป็นแอลดีไฮด์และสารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว (อัลคีน) ได้มากกว่า

ผลการคำนวณที่อุณหภูมิ 400 - 500 องศาเซลเซียส พบว่าปริมาณของสารประกอบไตรกลีเซอไรด์ผสมยังคงมีเหลือออกมาเป็นปริมาณมาก ซึ่งผลการทดลองรายงานไว้ว่า ที่อุณหภูมิตั้งกล่าวไม่สามารถเกิดปฏิกิริยาได้หรือเกิดสารประกอบได้ค่อนข้างน้อยไม่สามารถวิเคราะห์สารประกอบในระบบได้ จึงได้เลือกสภาวะของการทดลองที่อุณหภูมิตั้งแต่ 700 องศาเซลเซียสขึ้นไป และเมื่อเปรียบเทียบปริมาณของไตรกลีเซอไรด์ที่เหลืออยู่ในระบบกรณีที่ใช้น้ำมันมะพร้าวและน้ำมันมาคอบาคำนวณจะให้ปริมาณของไตรกลีเซอไรด์เหลืออยู่ในระบบเป็นปริมาณร้อยละ 40.47 และ 54.93 โดยมวล ตามลำดับ ผลการคำนวณกรณีของน้ำมันมะพร้าวให้ค่าน้อยกว่ากรณีที่ใช้น้ำมันมาคอบา ที่อุณหภูมิ 500 องศาเซลเซียส น้ำมันมะพร้าวสามารถเกิดปฏิกิริยาได้ดีกว่าน้ำมันมาคอบา ทั้งนี้อธิบายได้จากปริมาณของกรดโอเลอิกที่มีขนาดโมเลกุลใหญ่ที่สุดในน้ำมันมาคอบาและน้ำมันมะพร้าวที่แสดงดังตารางที่ 4.7 มีความแตกต่างกันค่อนข้างมากส่งผลให้ไตรกลีเซอไรด์ที่ได้จากกรดโอเลอิกมีขนาดโมเลกุลใหญ่และมีปริมาณค่อนข้างมากตาม และเมื่อพิจารณาสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาแตกตัวของไตรกลีเซอไรด์แต่ละชนิดแล้วพบว่าไตรกลีเซอไรด์ที่มีมวลโมเลกุลเล็กจะเกิดปฏิกิริยาได้ดีกว่าไตรกลีเซอไรด์ที่มีมวลโมเลกุลใหญ่ ดังนั้นการคำนวณด้วยน้ำมันมาคอบาจึงมีไตรกลีเซอไรด์เหลืออยู่มากกว่ากรณีที่คำนวณด้วยน้ำมันมะพร้าว

ผลการคำนวณที่อุณหภูมิตั้งแต่ 600 องศาเซลเซียสขึ้นไป พบว่าสารประกอบที่เกิดขึ้นในระบบมีเพียง 3 กลุ่มเท่านั้น คือ สารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว (อัลคีน) สารประกอบแอลดีไฮด์ และสารประกอบกรดคาร์บอกซิลิก โดยปริมาณของสารประกอบโคโรลีนที่คำนวณได้จากน้ำมันมาคอบาและน้ำมันมะพร้าวมีปริมาณเท่ากันในขณะที่สารประกอบประเภทอื่นมีปริมาณแตกต่างกัน และเมื่อพิจารณาสารประกอบโคโรลีนที่เกิดขึ้นจะพบว่าปริมาณของสารประกอบโคโรลีนที่เกิดขึ้นต่อสารตั้งต้นไตรกลีเซอไรด์แต่ละชนิดที่เปลี่ยนไปมีปริมาณใกล้เคียงกัน คือมีค่า 0.199 กิโลกรัมต่อโคโรลีนต่อกิโลกรัมไตรกลีเซอไรด์ และเมื่อคิดเป็นจำนวนโมลจะได้ความสัมพันธ์เป็นไตรกลีเซอไรด์ 1 โมลจะเกิดเป็นโคโรลีน 2 โมล ภายใต้เงื่อนไขของสมดุลเคมีจากไตรกลีเซอไรด์แต่ละชนิด จึงทำให้การคำนวณด้วยน้ำมันมาคอบาและน้ำมันมะพร้าวให้ผลการคำนวณปริมาณของโคโรลีนออกมาเท่ากัน สำหรับสารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัวและกรดคาร์บอกซิลิกเมื่อคำนวณด้วยน้ำมันมะพร้าวพบว่าให้ปริมาณในสัดส่วนเท่ากับ 0.36 และ 0.43 กิโลกรัมต่อกิโลกรัมไตรกลีเซอไรด์ ตามลำดับ จากไตรกลีเซอไรด์แต่ละชนิด และกรดคาร์บอกซิลิกเป็นสัดส่วนดังกล่าว และที่อุณหภูมิสูงขึ้นพบว่าปริมาณของสารประกอบทั้งสามกลุ่มยังคงไม่เปลี่ยนแปลง จึงทำให้พิจารณาได้ว่าปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อนของไตรกลีเซอไรด์เป็นลักษณะของระบบปฏิกิริยาเดียว ในกลุ่มของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัวเกิด 2-เมทิลเพนทีน (2-methylpentene, C_6H_{12}) เป็นผลิตภัณฑ์หลักในปริมาณร้อยละ 35.94 โดยมวล ในกลุ่มของแอลดีไฮด์เกิดโคโรลีนเป็นผลิตภัณฑ์หลักในปริมาณร้อยละ 19.87 โดยมวล และในกลุ่มของกรดคาร์บอกซิลิกเกิดกรดโนนาโนอิก (nonanoic acid, $C_8H_{17}COOH$) เป็นผลิตภัณฑ์หลักในปริมาณร้อยละ 43.28 โดยมวล

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สรุปผลการวิจัยและข้อเสนอแนะ

5.1 สรุปผลการวิจัย

ระบบปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อนของน้ำมันมะพร้าว โดยการประมาณค่าโครงสร้างของไตรกลีเซอไรด์เพื่อใช้เป็นตัวแทนในระบบปฏิกิริยาเคมี สามารถสรุปผลการคำนวณได้ดังนี้คือ

1. การคำนวณด้วยไตรกลีเซอไรด์จำลอง ($C_{42}H_{80}O_6$) ได้สารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัว ไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว แอลดีไฮด์ และกรดคาร์บอกซิลิกมีปริมาณร้อยละ 21.98 25.74 33.70 และ 18.59 โดยมวล ตามลำดับ และไตรกลีเซอไรด์ผสมแบบระบบปฏิกิริยาเกิดแยกกันได้สารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัว ไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว แอลดีไฮด์ และกรดคาร์บอกซิลิกมีปริมาณร้อยละ 21.79 23.39 และ 27.59 โดยมวล ตามลำดับ

2. ระบบปฏิกิริยาสมดุลเคมีการแตกตัวด้วยความร้อนของไตรกลีเซอไรด์ได้เป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว (อัลคีน) แอลดีไฮด์ และกรดคาร์บอกซิลิก

3. ไตรกลีเซอไรด์เกิดปฏิกิริยาการแตกตัวด้วยความร้อนได้ทั้งหมดที่อุณหภูมิตั้งแต่ 600 องศาเซลเซียสขึ้นไป

4. ที่อุณหภูมิ 600 องศาเซลเซียส ขึ้นไปปริมาณของกรดคาร์บอกซิลิก สารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว และแอลดีไฮด์ จะมีปริมาณคงที่โดยมีปริมาณร้อยละ 43.28 35.94 และ 19.89 โดยมวล ตามลำดับ

5. สารประกอบหลักที่ได้สำหรับระบบปฏิกิริยาแตกตัวด้วยความร้อนของไตรกลีเซอไรด์คือสารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัวเกิด 2-เมทิลเพนทีน เป็นผลิตภัณฑ์หลักในปริมาณร้อยละ 35.94 โดยมวล ในกลุ่มของแอลดีไฮด์เกิดออกโรลีนเป็นผลิตภัณฑ์หลักในปริมาณร้อยละ 19.87 โดยมวล และกลุ่มของกรดคาร์บอกซิลิกเกิดกรดโนนาโนอิกเป็นผลิตภัณฑ์หลักในปริมาณร้อยละ 43.28 โดยมวล

6. ไตรกลีเซอไรด์แต่ละชนิด 1 โมล สามารถเกิดปฏิกิริยาแตกตัวด้วยความร้อนได้เป็นสารประกอบอโรลีน 2 โมล

5.2 ข้อเสนอแนะ

การศึกษาเพื่อทำนายผลของชนิดและปริมาณของสารประกอบผลิตภัณฑ์ที่คาดว่าจะเกิดขึ้นในระบบปฏิบัติการแตกตัวด้วยความร้อนของน้ำมันมะพร้าว จำเป็นต้องมีข้อมูลจากผลการทดลองที่สภาวะช่วงอุณหภูมิอื่นๆ เพิ่มเติม เพื่อสามารถใช้เปรียบเทียบกับผลการคำนวณในช่วงอุณหภูมินั้นๆ ได้ โดยเฉพาะที่อุณหภูมิสูงกว่า 800 องศาเซลเซียสขึ้นไป ซึ่งผลการทดลองไม่มีการรายงานผลของชนิดและปริมาณของสารประกอบที่เกิดขึ้นในระบบ ดังนั้นหากต้องการศึกษาถึงโอกาสของการเกิดขึ้นได้ของสารประกอบผลิตภัณฑ์ประเภทต่างๆ ที่จะสามารถเกิดขึ้นได้สูงสุดภายใต้เงื่อนไขของสมดุล จำเป็นต้องทำการทดลองเพิ่มเติมที่สภาวะดังกล่าว เพื่อนำผลที่ได้มาทำการเปรียบเทียบกับผลการคำนวณ ซึ่งจะช่วยให้การคำนวณหาชนิดและปริมาณของสารประกอบผลิตภัณฑ์ภายใต้เงื่อนไขของสมดุลมีความแม่นยำยิ่งขึ้น



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

รายการอ้างอิง

1. Soltés E.J., Milne T.A., Pyrolysis Oils Biomass : Producing , Analyzing and Upgrading. American Chemical Society, Division of Fuel Chemistry Abstracts, New York, 1988.
2. Jurge J.W., Eisma E., Biomass. Science. Vol. 144 No. 151, 1964.
3. Trailer H., Kratzl K., J. Am. Oil. Chem. Soc. Vol. 57 No. 153, 1980.
4. Craveiro A.A., Matos F.J.A., Alencar J.W., Silverira E.R., Pyrolysis of vegetable oil. Energia : Fontes Alternativas. Vol. 57 No. 153, 1981.
5. Williams P.T., Nittaya H. P., Biomass Gasification Pyrolysis. Vol.142, 1979.
6. เศรษฐกิจสารสนเทศการเกษตร, สถิติการเกษตรของประเทศไทย ปีเพาะปลูก 2535/2545. สำนักงานเศรษฐกิจการเกษตร, 2545.
7. เศรษฐกิจสารสนเทศการเกษตร, ปริมาณการผลิตพืชน้ำมันในประเทศไทย. กรมการค้าภายใน, 2545.
8. Swern D., Bailey's Industrial Oil and Fat Products. John Wiley & Sons. 5 th edition, 1996.
9. โสภณ เรืองสำราญ, อินทรีย์เคมี 2. สำนักพิมพ์แห่งจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2543.
10. เกษร พะลัง, เคมีอินทรีย์. สำนักพิมพ์แห่งจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2543.
11. Fortes I.C.P., Baugh P.J., Study of Analytical On-line Pyrolysis from Macauba Fruit. J. Braz. Chem. Soc. Vol. 10. No. 6, 1999.
12. นัยจันทร์ วรรณระภูติ, การสังเคราะห์น้ำมันหล่อลื่นจากน้ำมันมะพร้าว. วิทยานิพนธ์ปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต. จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2539.
13. Alencar J.W., Alves P. B., Craveiro A.A., Pyrolysis of Tropical Vegetable Oils. J. Agric. Food Chem. 9, 1523-1531, 1983.
14. Raphael O.I., Sai P.R., Bakhshi N.N., Thermal cracking of Canola oil: Reaction Products in the Presence and Absence of Steam. Energy & Fuels. 10, 1150-1162, 1996.
15. Chang C.C., Wan S.W., Artificial petroleum from soy bean and coconut oils. Ind. Eng. Chem. 39, 1543-1548, 1947.

16. Ping K., Cracking of Peanuts Oil. J. Chem. Eng. China. 3, 201-210, 1936.
17. Banzon J., Coconut oil. I. Pyrolysis. Philippine Agriculturing. 25, 817-832, 1937.
18. Crossley A., Heyes T.D., Hudson B.J.F., J.Am.Oil Chem Soc. 3, 9-14, 1962.
19. นายจันทร์ วรรณะภุติ, การสังเคราะห์น้ำมันหล่อลื่นจากน้ำมันมะพร้าว, วิทยานิพนธ์ปริญญา
วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต, 2539.
20. Chao C.C, Process for manufacturing a linear Olefin from a saturated fatty acid or
fatty acid ester, U.S. Pat. No. 4,554,397, 1985.
21. Rao K.V., Production of hydrocarbon by thermolysis of vegetable oil, U.S. Pat. No.
4,102,938, 1978.
22. Poling B.E., Prausnitz J.M., O'Connell J.P., The Properties of Gases and Liquids.
McGraw-Hill. 5 th edition, 2001.
23. เกริกชัย สุภาภูจนัจที, อุณหพลศาสตร์สำหรับอุตสาหกรรมซีพีโอ. โรงพิมพ์จุฬาลงกรณ์
มหาวิทยาลัย, 2538.



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์

นางสาวกรุณรัตน์ สกุลนามรัตน์ เกิดที่อำเภอลำดวน จังหวัดสุรินทร์ สำเร็จการ
ศึกษาปริญญาวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์
มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี จังหวัดนครราชสีมา ในปีการศึกษา 2542 และเข้าศึกษาต่อระดับ
ปริญญาโท หลักสูตรวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัยในปีการศึกษา 2543



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย