รายการอ้างอิง

[1] Waddell, D. Laboratory Waste Management Guide, Final Report. Seattle WA: Local Hazardous Waste Management Program in King County, 2005.

[2] Edogan, K. and Brennecke, J.F. Supercritical Fluid Engineering Science Washington DC: American Chemical Society, 1993.

[3] Arai, Y. Sato, T. and Takebayashi, Y. Supercritical Fluids: Molecular Interaction, Physical Properties, and New Applications. German: Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2002.

[4] Katritzky, A.R. Nichols, D.A. Siskin, M. Murugan, R. and Balasubramanian, M. Reactions in High-Temperature Aqueous Media. Chem. Rev. 101 (2001) 837-892.

[5] McHugh, M. Supercritical Fluid Extraction. 2nded. Butterworth Heiemann, 1994.

[6] Lee, M.L. Markides, K.E. and Eds. Analytical Supercritical Fluid Chromatography and Extraction, Chromatography Conferences. UT: Provo Inc. 1990.

[7] Yu, J. and Savage, P.E. Catalytic oxidation of phenol over MnO_2 in supercritical water. Ind.Eng.Chem.Res. 38 (1999): 3793-3801.

[8] Yu, J. and Savage, P.E. Catalyst activity, stability, and transformations during oxidation supercritical water. Applied Catalysis B: Environmental. 31 (2001): 123-132.

[9] Center for Scientific Creation, Supercritical, [online]. Available from: www.creationscience.com/onlinebook/webpictures/Supercritical%20Zone.jpg [2010, May 17]

[10] Savage, P.E. Gopalan, S. Tahmid, I.M. Martino, C.J. and Brock, E.E. Reactions at Supercritical Conditions: Applications and Fundamentals. AIChE. 41 (1995): 1723-1778.

[11] The University of Nottingham, Supercritical Fluids, [online]. Available from: http://www.nottingham.ac.uk/supercritical/beta/introduction.html [2010, May 19]

[12] Kritzer, P. Corrosion in high-temperature and supercritical water and aqueous solutions: a review. J. of Supercritical Fluid. 29 (2004): 1-29.

[13] Akiya, N. and Savage, P.E. Roles of Water for Chemical Reactions in High-Temperature water. Chem. Rev. 102 (2002): 2725-2750.

[14] Uematsu, M. and Franck, E.U. Static dielectric constant of water and steam. J. Physical Chemical Ref. Data 9 (1980): 1291-1306.

[15] Marshall, W.L. and Franck, E.U. Ion product of water substance, 0-100 °C, 1-1000 bars, new international formulation and its background. J. of Physical Chemical Reference Data.10 (1981):295-304.

[16] Savage, P.E. Heterogeneous catalysis in supercritical water. Catalysis Today 62 (2000): 167-173.

[17] Zhong, Y.D. Michael, A.F. Lixiong, L. and Earnest, F.G. Catalysis Oxidation in Supercritical Water. Ind. Eng. Chem. Res. 35 (1996): 3257-3279.

[18] Savage, P.E. Organic Chemical Reactions in Supercritical Water. Chem.Rev. 99 (1999): 603-621.

[19] ELECTRONIC SCIENCE TUTOR®, Catalysis, [online]. Available from: http://www.physchem.co.za/OB12-che/catalysis.htm [2010 March 26]

[20] Kritzer, P. and Dinjus, E. An Assessment of Supercritical Water Oxidation (SCWO) Existing Problems, Possible Solutions and New Reactor Concepts. Chem. Eng. J. 83 (2001): 207-214.

[21] WIKIPEDIA, Phenol, [online]. Available from: http://en.wikipedia.org/wiki/Phenol [2010 January 23]

[22] PTT Phenol Company Limited, ผลิตภัณฑ์, [online]. Available from: http://www.pttphenol.com/product.asp?strurl=คขชujaXฆขคญข•oYขกญคnc [2010 May 14]

[23] W. Arnold (Leissigen - CH) – Heilpflanzen, Thymus vulgaris, [online]. Available from: http://www.awl.ch/heilpflanzen/thymus_vulgaris/index.htm [2010 May 16]

[24] WIKIPEDIA, Pyridine chemical structure.png, [online]. Available from: http://en.wikipedia.org/wiki/File:Pyridine_chemical_structure.png [2010 May 3]

[25] WIKIPEDIA, Pyridine, [online]. Available from: http://en.wikipedia.org/wiki/Pyridine [2010 May 14]

[26] มหาวิทยาลัยขอนแก่น, Heterocyclic compounds, [online]. Available from: http://202.28.94.202/arayan/heterocyclic/index.html [2010 March 17]

[27] ฐานความรู้เรื่องความปลอดภัยด้านสารเคมี, Pyridine, [online]. Available from: http://www.chemtrack.org/HazMap-Agent-Info.asp?ID=1262 [2010 March 19]

[28] Anikee, V.I. Ermakova, A. and Goto, M. Decomposition and oxidation reaction of Aliphatic Nitro compounds in supercritical water. Kinet. Catal. 46 (2005): 821-825.

[29] Sogut, O.O. and Akgun, M. Treatment of textile wastewater by SCWO in tube reactor. J. of Supercrit Fluids. 43 (2007): 106-111.

[30] Yuan, P.Q. Cheng, Z.M. Zhang, X.Y. and Yuan, W.K. Catalytic denitrogenation of hydrocarbons through partial oxidation in supercritical water. J. Fuel. 85 (2006): 367-373.

[31] Perez, I.V. Rogak, S. and Branion, R. Supercritical water oxidation of phenol and 2,4-dinitrophenol. J. of Supercrit Fluids. 30 (2004): 71-87.

[32] Croiset, E. Rice, S.F. and Hanush, R.G. Hydrogen Peroxide Decomposition in Supercritical Water. AIChE. 43 (1997): 2343-2352.

[33] Shin, Y.H. Shin, N.C. Veriansyah, B. Kim, J. Lee, Y.W. Supercritical water oxidation of wastewater from acrylonitrile manufacturing plant. Journal of Hazardous Materials 163 (2009): 1142–1147.

[34] Erkonak, H. Sogut, O.O. Akgun, M. Treatment of olive mill wastewater by supercritical water oxidation. J. of Supercritical Fluids 46 (2008): 142–148.

[35] Angeles-Hernandez, M.J. Leeke, G. A. Santos, R.C.D. Catalytic supercritical water oxidation for the destruction of quinoline over MnO_2/CuO catalyst. Ind. Eng. Chem. Res. 48 (2009): 1208–1214.

[36] Oshima, Y. Tomit, a K. and Koda, S. Kinetics of the Catalytic Oxidation of Phenol over Manganese Oxide in Supercritical Water. Ind. Eng. Chem. Res. 38 (1999): 4183-4188.

[37] Thornton, T.D. and Savage, P.E. Phenol Oxidation Pathways in Supercritical Water. Ind. Eng. Chem. Res. 31 (1992): 2451-2456.

[38] Krajnc, M. Levec, J. On the Kinetics of Phenol Oxidation in Supercritical Water. AIChE 42 (1996): 1977-1984.

[39] Crain, N. Tebbal, S. Li, L. and Gloyna, E. F. Kinetics and Reaction Pathways of Pyridine Oxidation in Supercritical Water. Ind. Eng. Chem. Res. 32 (1993): 2259-2268.

[40] Zhang, X. and Savage, P. E. Fast catalytic oxidation of phenol in supercritical water. Catalysis Today 40 (1998): 333-342.

[41] Sudhir, A. and Martin A. A. Catalytic Supercritical Water Oxidation of Pyridine: Comparison of Catalysts. Ind. Eng. Chem. Res. 38 (1999): 358-367.

[42] ภัทรพรรณ ประศาสน์สารกิจ. เทอร์โมไดนามิกส์วิศวกรรมเคมี. ครั้งที่ 1. กรุงเทพฯ: สำนักพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2538.

[43] Li, R. Thornton, T.D. and Savage, P.E. Kinetics of CO_2 Formation from the Oxidation of Phenols in Supercritical Water. Envlron. Scl. Technol. 26 (1992): 2388-2395.

ภาคผนวก

ภาคผนวก ก

สำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ ห้องสมุดงานวิจัย

ภาคผนวก ก.
ตารางแสดงข้อมูลดิบ

การออกซิเดชันเชิงเร่งปฏิกิริยาในน้ำภาวะเหนือวิกฤตของฟีนอลในเครื่องปฏิกรณ์ที่มีขนาดกะทัดรัด

ตาราง ก.1 ตารางแสดงข้อมูลดิบของฟีนอลความเข้มข้น 0.046 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.644 โมลต่อลิตร

ทำการทดลองที่ อุณหภูมิ 380 องศาเซลเซียส
ความดัน 25 เมกะพาสคัล

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	TOC (mg/l)
phenol 0.046	1	2	19.05	120004.8	85.12
	2	2.5	20.76	111386.5	80.35
	3	3	21.05	118459.2	91.46
	4	3.5	21.35	139573.4	193.8

หมายเหตุ ความเข้มข้นฟีนอลเริ่มต้น = 0.046 M และค่า TOC เริ่มต้น = 3121.67 mg/l

ตาราง ก.2 ตารางแสดงข้อมูลดิบของฟีนอลความเข้มข้น 0.046 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.644 โมลต่อลิตร

ทำการทดลองที่ อุณหภูมิ 390 องศาเซลเซียส
ความดัน 25 เมกะพาสคัล

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	TOC (mg/l)
phenol 0.046	5	2	5.20	267700.8	14.54
	6	2.5	6.98	352113.2	19.59
	7	3	8.00	284969.7	23.48
	8	3.5	9.76	343097.8	31.75

หมายเหตุ ความเข้มข้นฟีนอลเริ่มต้น = 0.046 M และค่า TOC เริ่มต้น = 3121.67 mg/l

ตาราง ก.3 ตารางแสดงข้อมูลดิบของฟีนอลความเข้มข้น 0.046 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.644 โมลต่อลิตร

ทำการทดลองที่ อุณหภูมิ 400 องศาเซลเซียส

ความดัน 25 เมกะพาสคัล

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	TOC (mg/l)
phenol 0.046	9	2	9.35	201244.8	26.26
	10	2.5	12.99	148927.5	29.08
	11	3	11.52	170169.6	43.91
	12	3.5	17.52	177736.3	42.96

หมายเหตุ ความเข้มข้นฟีนอลเริ่มต้น = 0.046 M และค่า TOC เริ่มต้น = 3121.67 mg/l

ตาราง ก.4 ตารางแสดงข้อมูลดิบของฟีนอลความเข้มข้น 0.046 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.644 โมลต่อลิตร

ทำการทดลองที่ อุณหภูมิ 410 องศาเซลเซียส

ความดัน 25 เมกะพาสคัล

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	TOC (mg/l)
phenol 0.046	13	2	9.27	157692.2	19.49
	14	2.5	11.53	171953.9	26.19
	15	3	12.8	173639.5	31.21
	16	3.5	16	142543.9	35.14

หมายเหตุ ความเข้มข้นฟีนอลเริ่มต้น = 0.046 M และค่า TOC เริ่มต้น = 3121.67 mg/l

ตาราง ก.5 ตารางแสดงข้อมูลดิบของฟีนอลความเข้มข้น 0.0304 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.4256 โมลต่อลิตร

ทำการทดลองที่ อุณหภูมิ 380 องศาเซลเซียส

ความดัน 25 เมกะพาสคัล

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	TOC (mg/l)
phenol 0.0304	49	2	18.93	61457.2	81.95
	50	2.5	21.82	78472.4	90.49
	51	3	20.41	79235.3	84.87
	52	3.5	22.64	87214.4	92.68

หมายเหตุ ความเข้มข้นฟีนอลเริ่มต้น = 0.0304 M และค่า TOC เริ่มต้น = 1334 mg/l

การออกซิเดชันเชิงเร่งปฏิกิริยาในน้ำภาวะเหนือวิกฤตของไพริดีนในเครื่องปฏิกรณ์ที่มีขนาดกะทัดรัด

ตาราง ก.6 ตารางแสดงข้อมูลดิบของไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.614 โมลต่อลิตร

ทำการทดลองที่ อุณหภูมิ 380 องศาเซลเซียส

ความดัน 25 เมกะพาสคัล

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	TOC (mg/l)
pyridine 0.049	17	2	6.13	77287.2	4161.3	847.6
	18	2.5	7.74	54970.8	2237.9	1178
	19	3	8.53	23564.6	20686.1	1150
	20	3.5	12.38	33154	779.2	1375

หมายเหตุ ความเข้มข้นไพริดีนเริ่มต้น = 0.049 M และค่า TOC เริ่มต้น = 3625 mg/l

ตาราง ก.7 ตารางแสดงข้อมูลดิบของไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.614 โมลต่อลิตร

ทำการทดลองที่ อุณหภูมิ 390 องศาเซลเซียส

ความดัน 25 เมกะพาสคัล

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	TOC (mg/l)
pyridine 0.049	21	2	6.49	36317.9	19790.1	857.5
	22	2.5	9.60	50446.5	-	1225
	23	3	8.43	41340.4	1868.8	1268
	24	3.5	12.57	37461.6	-	1265

หมายเหตุ ความเข้มข้นไพริดีนเริ่มต้น = 0.049 M และค่า TOC เริ่มต้น = 3625 mg/l

ตาราง ก.8 ตารางแสดงข้อมูลดิบของไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.614 โมลต่อลิตร

ทำการทดลองที่ อุณหภูมิ 400 องศาเซลเซียส

ความดัน 25 เมกะพาสคัล

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	TOC (mg/l)
pyridine 0.049	25	2	4.75	60172	352.1	1141
	26	2.5	7.02	48763.6	1862.2	1236
	27	3	7.4	42276	-	1257
	28	3.5	7.68	38779.3	-	1268

หมายเหตุ ความเข้มข้นไพริดีนเริ่มต้น = 0.049 M และค่า TOC เริ่มต้น = 3625 mg/l

ตาราง ก.9 ตารางแสดงข้อมูลดิบของไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.614 โมลต่อลิตร

ทำการทดลองที่ อุณหภูมิ 410 องศาเซลเซียส

ความดัน 25 เมกะพาสคัล

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	TOC (mg/l)
pyridine 0.049	29	2	5.12	56065.1	4059.1	988.6
	30	2.5	5.98	46549.2	14700.3	1126
	31	3	7.42	47274.6	4357.4	1150
	32	3.5	8.17	47140.7	-	1234

หมายเหตุ ความเข้มข้นไพริดีนเริ่มต้น = 0.049 M และค่า TOC เริ่มต้น = 3625 mg/l

ตาราง ก.10 ตารางแสดงข้อมูลดิบของไพริดีนความเข้มข้น 0.0246 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.307 โมลต่อลิตร

ทำการทดลองที่ อุณหภูมิ 380 องศาเซลเซียส

ความดัน 25 เมกะพาสคัล

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	TOC (mg/l)
pyridine 0.0246	53	2	5.66	27984.9	3568.9	427.3
	54	2.5	5.55	23617.3	3836.8	467.8
	55	3	5.93	27965.9	-	571.6
	56	3.5	11.23	28394.4	-	578.5

หมายเหตุ ความเข้มข้นไพริดีนเริ่มต้น = 0.0246 M และค่า TOC เริ่มต้น = 1843 mg/l

การออกซิเดชันเชิงเร่งปฏิกิริยาในน้ำภาวะเหนือวิกฤตของของผสมระหว่างฟีนอลและไพริดีนในเครื่องปฏิกรณ์ขนาดกะทัดรัด

ตาราง ก.11 ตารางแสดงข้อมูลดิบของของผสมระหว่างฟีนอลความเข้มข้น = 0.046 โมลต่อลิตร กับไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 1.2585 โมลต่อลิตร

ทำการทดลองที่ อุณหภูมิ 380 องศาเซลเซียส

ความดัน 25 เมกะพาสคัล

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	TOC (mg/l)
Mixture	33	2	3.13	126811.1	7858.9	297.4
	34	2.5	4.02	131055.3	4821.5	375
	35	3	6.24	126470.9	3956.9	411.1
	36	3.5	7.83	122577	5745.7	380.6

หมายเหตุ ค่า TOC เริ่มต้น = 3396.5 mg/l

ตาราง ก.12 ตารางแสดงข้อมูลดิบของของผสมระหว่างฟีนอลความเข้มข้น = 0.046 โมลต่อลิตร กับไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 1.2585 โมลต่อลิตร

ทำการทดลองที่ อุณหภูมิ 390 องศาเซลเซียส

ความดัน 25 เมกะพาสคัล

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	TOC (mg/l)
Mixture	37	2	3.37	107405.7	25895.4	251.4
	38	2.5	4.09	125318.3	5133.1	321.4
	39	3	5.66	118920	6530.6	364.5
	40	3.5	8.11	116639.2	6443.1	386.7

หมายเหตุ ค่า TOC เริ่มต้น = 3396.5 mg/l

ตาราง ก.13 ตารางแสดงข้อมูลดิบของของผสมระหว่างฟีนอลความเข้มข้น = 0.046 โมลต่อลิตร กับไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 1.2585 โมลต่อลิตร

ทำการทดลองที่ อุณหภูมิ 400 องศาเซลเซียส

ความดัน 25 เมกะพาสคัล

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	TOC (mg/l)
Mixture	41	2	4.22	117324.9	7237.2	248.9
	42	2.5	5.12	116254.6	7712.5	290.1
	43	3	6.62	128420.8	3152.3	330
	44	3.5	7.57	138074.5	157.5	364

หมายเหตุ ค่า TOC เริ่มต้น = 3396.5 mg/l

ตาราง ก.14 ตารางแสดงข้อมูลดิบของของผสมระหว่างฟีนอลความเข้มข้น = 0.046 โมลต่อลิตร กับไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 1.2585 โมลต่อลิตร

ทำการทดลองที่ อุณหภูมิ 410 องศาเซลเซียส

ความดัน 25 เมกะพาสคัล

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	TOC (mg/l)
Mixture	45	2	4.39	103693.9	19959.4	262.9
	46	2.5	6.38	123875.5	6690.9	338.4
	47	3	7.04	117919.1	9664.6	351.4
	48	3.5	8.59	134745.8	179	435.9

หมายเหตุ ค่า TOC เริ่มต้น = 3533 mg/l

ภาคผนวก ข

ภาคผนวก ข

ตารางแสดงผลการคำนวณ

ตาราง ข.1 ความหนาแน่นของน้ำที่ภาวะต่างๆ

Condition	Water density (kg/m^3)
Ambient (25°C)	997.05
410°C, 25 MPa	143.8
400°C, 25 MPa	161.9
390°C, 25 MPa	199.5
380°C, 25 MPa	316.5

ตารางที่ ข.2 ค่า Contact time ณ ภาวะต่างๆ

Temperature (°C)	Pressure (MPa)	Flow rate (ml/min)	Contact time (s)
410	25	2	4.58
		2.5	3.66
		3	3.05
		3.5	2.62
400	30	2	5.15
		2.5	4.12
		3	3.44
		3.5	2.94
390	25	2	6.35
		2.5	5.08
		3	4.23
		3.5	3.63
380	25	2	10.08
		2.5	8.06
		3	6.72
		3.5	5.76

ตารางที่ ข.3 ค่าพื้นที่ใต้กราฟ ร้อยละโดยโมล อัตราการไหลโดยโมลของแก๊สที่ภาวะต่างๆ

Run order	Integrated area		Mole fr. of gas product (%mol)		Molar flow rate (mol/min)		
	N_2	CO_2	N_2	CO_2	N_2	CO_2 (g)	CO_2 (l)
1	-	77287.2	-	26.73	-	6.66E-05	1.81E-05
2	-	54970.8	-	19.01	-	5.98E-05	1.61E-05
3	-	23564.6	-	8.15	-	2.82E-05	8.27E-06
4	-	33154	-	11.46	-	5.77E-05	1.36E-05
5	-	36317.9	-	12.56	-	3.31E-05	8.50E-06
6	-	50446.5	-	17.44	-	6.80E-05	1.48E-05
7	-	41340.4	-	14.30	-	4.90E-05	1.45E-05
8	-	37461.6	-	12.95	-	6.62E-05	1.53E-05
9	-	60172	-	20.81	-	4.02E-05	1.41E-05
10	-	48763.6	-	16.86	-	4.81E-05	1.43E-05
11	-	42276	-	14.62	-	4.40E-05	1.48E-05
12	-	38779.3	-	13.41	-	4.18E-05	1.59E-05
13	-	56065.1	1.03	19.39	-	4.03E-05	1.31E-05
14	-	46549.2	3.73	16.10	-	3.91E-05	1.36E-05
15	-	47274.6	1.10	16.35	-	4.93E-05	1.66E-05
16	-	47140.7	-	16.30	-	5.41E-05	1.93E-05
17	4161.3	77287.2	1.05	26.73	2.63E-06	6.66E-05	1.81E-05
18	2237.9	54970.8	0.57	19.01	1.78E-06	5.98E-05	1.61E-05
19	20686.1	23564.6	5.24	8.15	1.82E-05	2.82E-05	8.27E-06
20	779.2	33154	0.20	11.46	9.93E-07	5.77E-05	1.36E-05
21	19790.1	36317.9	5.02	12.56	1.32E-05	3.31E-05	8.50E-06
22	-	50446.5	-	17.44	-	6.80E-05	1.48E-05
23	1868.8	41340.4	0.47	14.30	1.62E-06	4.90E-05	1.45E-05
24	-	37461.6	-	12.95	-	6.62E-05	1.53E-05

ตารางที่ ข.3 (ต่อ) ค่าพื้นที่ใต้กราฟ ร้อยละโดยโมล อัตราการไหลโดยโมลของแก๊สที่ภาวะต่างๆ

Run order	Integrated area		Mole fr. of gas product (%mol)		Molar flow rate (mol/min)		
	N_2	CO_2	N_2	CO_2	N_2	CO_2 (g)	CO_2 (l)
25	352.1	60172	0.09	20.81	1.72E-07	4.02E-05	1.41E-05
26	1862.2	48763.6	0.47	16.86	1.35E-06	4.81E-05	1.43E-05
27	-	42276	-	14.62	-	4.40E-05	1.48E-05
28	-	38779.3	-	13.41	-	4.18E-05	1.59E-05
29	4059.1	56065.1	1.03	19.39	2.14E-06	4.03E-05	1.31E-05
30	14700.3	46549.2	3.73	16.10	9.05E-06	3.91E-05	1.36E-05
31	4357.4	47274.6	1.10	16.35	3.33E-06	4.93E-05	1.66E-05
32	-	47140.7	-	16.30	-	5.41E-05	1.93E-05
33	7858.9	126811.1	1.99	43.85	2.53E-06	5.58E-05	2.97E-05
34	4821.5	131055.3	1.22	45.32	2.00E-06	7.40E-05	3.83E-05
35	3956.9	126470.9	1.00	43.73	2.54E-06	1.11E-04	4.44E-05
36	5745.7	122577	1.46	42.39	4.63E-06	1.35E-04	5.02E-05
37	25895.4	107405.7	6.56	37.14	8.99E-06	5.09E-05	2.51E-05
38	5133.1	125318.3	1.30	43.34	2.16E-06	7.20E-05	3.67E-05
39	6530.6	118920	1.66	41.12	3.81E-06	9.46E-05	4.18E-05
40	6443.1	116639.2	1.63	40.33	5.38E-06	1.33E-04	4.78E-05
41	7237.2	117324.9	1.83	40.57	3.14E-06	6.96E-05	2.75E-05
42	7712.5	116254.6	1.95	40.20	4.07E-06	8.36E-05	3.40E-05
43	3152.3	128420.8	0.80	44.41	2.15E-06	1.19E-04	4.51E-05
44	157.5	138074.5	0.04	47.75	1.23E-07	1.47E-04	5.66E-05
45	19959.4	103693.9	5.06	35.86	9.02E-06	6.40E-05	2.43E-05
46	6690.9	123875.5	1.70	42.84	4.40E-06	1.11E-04	3.62E-05
47	9664.6	117919.1	2.45	40.78	7.01E-06	1.17E-04	4.14E-05
48	179	134745.8	0.05	46.60	1.58E-07	1.63E-04	5.52E-05

ตารางที่ ข.3 (ต่อ) ค่าพื้นที่ใต้กราฟ ร้อยละโดยโมล อัตราการไหลโดยโมลของแก๊สที่ภาวะต่างๆ

Run order	Integrated area		Mole fr. of gas product (%mol)		Molar flow rate (mol/min)		
	N_2	CO_2	N_2	CO_2	N_2	CO_2 (g)	CO_2 (l)
49	-	61457.2	-	6.29	-	4.84E-05	4.26E-06
50	-	78472.4	-	8.03	-	7.12E-05	6.80E-06
51	-	79235.3	-	8.11	-	6.73E-05	8.24E-06
52	-	87214.4	-	8.93	-	8.21E-05	1.06E-05
53	3568.9	27984.9	0.90	9.68	2.08E-06	2.23E-05	6.55E-06
54	3836.8	23617.3	0.97	8.17	2.19E-06	1.84E-05	6.91E-06
55	-	27965.9	-	9.67	-	2.33E-05	9.82E-06
56	-	28394.4	-	9.82	-	4.48E-05	1.16E-05

ตาราง ข.4 ตารางแสดงผลการคำนวณของฟีนอลความเข้มข้น 0.046 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.644 โมลต่อลิตร

T = 380 °C

P = 25 MPa

P = 1 atm MW H_2O 18

0.101 MPa MW C 12

T = 300 K V_{MnO2} = 0.2 ml/g

R = 0.08205 l.atm/gmole.K g_{MnO2} = 5.2898 g

H = 165.8 MPa (T=300K, P=1atm) ρ_a = 997.05 kg/m^3

ρ_T = 316.5 kg/m^3

Std. CO_2 (%mole) = 99.9 area CO_2 = 975,725

Conc. Phenol 0.046 mol/l

TOC at initial 3121.67 mg/l

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Conc.CO_2 %mole	Contact time min	Contact time sec	Mole fr. CO_2 (g) Y_{CO2} (g)	Mole fr. CO_2 (l) Y_{CO2} (l)	Gas flow (CO_2) mol/min	TOC mg/l	%TOC conversion	Y TOC	Total C Balance
phenol 0.046	1	2	19.05	120004.8	12.29	0.17	10.08	1.0336	0.0904	9.51E-05	85.12	97.27	0.0273	1.1512
	2	2.5	20.76	111386.5	11.40	0.13	8.06	0.8364	0.0839	9.62E-05	80.35	97.43	0.0257	0.9460
	3	3	21.05	118459.2	12.13	0.11	6.72	0.7516	0.0892	1.04E-04	91.46	97.07	0.0293	0.8701
	4	3.5	21.35	139573.4	14.29	0.10	5.76	0.7699	0.1051	1.24E-04	193.8	93.79	0.0621	0.9371

ตาราง ข.5 ตารางแสดงผลการคำนวณของฟีนอลความเข้มข้น 0.046 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.644 โมลต่อลิตร

T = 390 °C

P = 25 MPa

P = 1 atm MW H_2O 18

0.101 MPa MW C 12

T = 300 K V_{MnO2} = 0.2 ml/g

R = 0.08205 l.atm/gmole.K g_{MnO2} = 5.2898 g

H = 165.8 MPa (T=300K, P=1atm) ρ_a = 997.05 kg/m^3

ρ_T = 199.5 kg/m^3

Std. CO_2 (%mole) = 99.9 area CO_2 = 975,725

Conc. Phenol 0.046 mol/l

TOC at initial 3121.67 mg/l

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Conc.CO_2 %mole	Contact time min	Contact time sec	Mole fr. CO_2 (g) Y_{CO2} (g)	Mole fr. CO_2 (l) Y_{CO2} (l)	Gas flow (CO_2) mol/min	TOC mg/l	%TOC conversion	Y TOC	Total C Balance
phenol 0.046	5	2	5.20	267700.8	27.41	0.11	6.35	0.6298	0.2016	5.79E-05	14.54	99.53	0.0047	0.8361
	6	2.5	6.98	352113.2	36.05	0.08	5.08	0.8891	0.2652	1.02E-04	19.59	99.37	0.0063	1.1606
	7	3	8.00	284969.7	29.18	0.07	4.23	0.6871	0.2147	9.48E-05	23.48	99.25	0.0075	0.9093
	8	3.5	9.76	343097.8	35.13	0.06	3.63	0.8648	0.2584	1.39E-04	31.75	98.98	0.0102	1.1334

ตาราง ข.6 ตารางแสดงผลการคำนวณของฟีนอลความเข้มข้น 0.046 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.644 โมลต่อลิตร

T = 400 °C

P = 25 MPa

P = 1 atm MW H_2O 18

0.101 MPa MW C 12

T = 300 K

R = 0.08205 l.atm/gmole.K

H = 165.8 MPa (T=300K, P=1atm)

V_{MnO2} = 0.2 ml/g

g_{MnO2} = 5.2898 g

ρ_a = 997.05 kg/m^3

ρ_T = 161.9 kg/m^3

Std. CO_2 (%mole) = 99.9 area CO_2 = 975,725

Conc. Phenol 0.046 mol/l

TOC at initial 3237 mg/l

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Conc.CO_2 %mole	Contact time min	Contact time sec	Mole fr. CO_2 (g) Y_{CO2} (g)	Mole fr. CO_2 (l) Y_{CO2} (l)	Gas flow (CO_2) mol/min	TOC mg/l	%TOC conversion	Y TOC	Total C Balance
phenol 0.046	9	2	9.35	201,244.80	20.60	0.09	5.15	0.8507	0.3032	7.83E-05	26.26	99.19	0.0081	1.1620
	10	2.5	12.99	148,927.50	15.25	0.07	4.12	0.6997	0.2244	8.05E-05	29.08	99.10	0.0090	0.9331
	11	3	11.52	170,169.60	17.42	0.06	3.44	0.5909	0.2564	8.15E-05	43.91	98.64	0.0136	0.8608
	12	3.5	17.52	177,736.30	18.20	0.05	2.94	0.8045	0.2678	1.30E-04	42.96	98.67	0.0133	1.0855

ตาราง ข.7 ตารางแสดงผลการคำนวณของฟีนอลความเข้มข้น 0.046 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.644 โมลต่อลิตร

T = 410 °C

P = 25 MPa

P = 1 atm MW H_2O 18

0.101 MPa MW C 12

T = 300 K V_{MnO2} = 0.2 ml/g

R = 0.08205 l.atm/gmole.K g_{MnO2} = 5.2898 g

H = 165.8 MPa (T=300K, P=1atm) ρ_a = 997.05 kg/m^3

ρ_T = 143.8 kg/m^3

Std. CO_2 (%mole) = 99.9 area CO_2 = 975,725

Conc. Phenol 0.046 mol/l

TOC at initial 3237 mg/l

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Conc.CO_2 %mole	Contact time min	Contact time sec	Mole fr. CO_2 (g) Y_{CO2} (g)	Mole fr. CO_2 (l) Y_{CO2} (l)	Gas flow (CO_2) mol/min	TOC mg/l	%TOC conversion	Y TOC	Total C Balance
phenol 0.046	13	2	9.27	157692.2	16.15	0.08	4.58	0.6609	0.2376	6.08E-05	19.49	99.40	0.0060	0.9045
	14	2.5	11.53	171953.9	17.61	0.06	3.66	0.7171	0.2591	8.25E-05	26.19	99.19	0.0081	0.9842
	15	3	12.8	173639.5	17.78	0.05	3.05	0.6699	0.2616	9.24E-05	31.21	99.04	0.0096	0.9411
	16	3.5	16	142543.9	14.59	0.04	2.62	0.5892	0.2147	9.49E-05	35.14	98.91	0.0109	0.8148

ตาราง ข.8 ตารางแสดงผลการคำนวณของฟีนอลความเข้มข้น 0.0304 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.4256 โมลต่อลิตร

T = 380 °C

P = 25 MPa

P = 1 atm MW H_2O 18

0.101 MPa MW C 12

T = 300 K V_{MnO2} = 0.2 g/ml

R = 0.08205 l.atm/gmole.K g_{MnO2} = 5.2898 g

H = 165.8 MPa (T=300K, P=1atm) ρ_a = 997.05 kg/m^3

ρ_T = 316.5 kg/m^3

Std. CO_2 (%mole) = 99.9 area CO_2 = 975,725

Conc. Phenol 0.03 mol/l

TOC at initial 1334 mg/l

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Conc.CO_2 %mole	Contact time min	Contact time sec	Mole fr. CO_2 (g) Y_{CO2} (g)	Mole fr. CO_2 (l) Y_{CO2} (l)	Gas flow (CO_2) mol/min	TOC mg/l	%TOC conversion	Y TOC	Total C Balance
phenol 0.046	49	2	18.93	61457.2	6.29	0.17	10.08	0.8064	0.0710	4.84E-05	81.95	93.86	0.0614	0.9388
	50	2.5	21.82	78472.4	8.03	0.13	8.06	0.9495	0.0906	7.12E-05	90.49	93.22	0.0678	1.1080
	51	3	20.41	79235.3	8.11	0.11	6.72	0.7473	0.0915	6.73E-05	84.87	93.64	0.0636	0.9025
	52	3.5	22.64	87214.4	8.93	0.10	5.76	0.7822	0.1007	8.21E-05	92.68	93.05	0.0695	0.9525

ตาราง ข.9 ตารางแสดงผลการคำนวณของไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.614 โมลต่อลิตร

T = 380 °C

P = 25 MPa

P = 1 atm MW H_2O 18

0.101 MPa MW C 12

T = 300 K

R = 0.08205 l.atm/gmole.K

H = 165.8 MPa (T=300K, P=1atm)

V_{MnO2} = 0.2 ml/g

g_{MnO2} = 5.2898 g

ρ_a = 997.05 kg/m^3

ρ_T = 316.5 kg/m^3

Std. CO_2 (%mole) = 99.9 area CO_2 = 288,888 Std. N_2 (%mole) = 99.99

Conc. Pyridin 0.04916 mol/l area N_2 = 394518.4

TOC at initial 3625 mg/l

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	Conc.CO_2 %mole	Conc.N_2 %mole	Contact time min	Contact time sec	Mole fr. CO_2 (g) Y_{CO2} (g)	Mole fr. CO_2 (l) Y_{CO2} (l)	Gas flow (CO_2) mol/min	Mole fr. N_2 (g) Y_{N2} (g)	Gas flow (N_2) mol/min	TOC mg/l	%TOC conversion	Y TOC	Total C Balance
pyridine 0.04916	17	2	6.13	77287.2	4161.3	26.73	1.05	0.17	10.08	0.6770	0.1840	6.66E-05	0.0267	2.63E-06	847.6	76.62	0.2338	1.0948
	18	2.5	7.74	54970.8	2237.9	19.01	0.57	0.13	8.06	0.4864	0.1309	5.98E-05	0.0145	1.78E-06	1178	67.50	0.3250	0.9422
	19	3	8.53	23564.6	20686.1	8.15	5.24	0.11	6.72	0.1915	0.0561	2.82E-05	0.1232	1.82E-05	1150	68.28	0.3172	0.5648
	20	3.5	12.38	33154	779.2	11.46	0.20	0.10	5.76	0.3351	0.0789	5.77E-05	0.0058	9.93E-07	1375	62.07	0.3793	0.7934

ตาราง ข.10 ตารางแสดงผลการคำนวณของไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.614 โมลต่อลิตร

T = 390 °C

P = 25 MPa

P = 1 atm MW H_2O 18

0.101 MPa MW C 12

T = 300 K

R = 0.08205 l.atm/gmole.K

H = 165.8 MPa (T=300K, P=1atm)

V_{MnO2} = 0.2 ml/g

g_{MnO2} = 5.2898 g

ρ_a = 997.05 kg/m^3

ρ_T = 199.5 kg/m^3

Std. CO_2 (%mole) = 99.9 area CO_2 = 288,888 Std. N_2 (%mole) = 99.99

Conc. Pyridin 0.04916 mol/l area N_2 = 394518.4

TOC at initial 3625 mg/l

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	Conc.CO_2 %mole	Conc.N_2 %mole	Contact time min	Contact time sec	Mole fr. CO_2 (g) Y_{CO2} (g)	Mole fr. CO_2 (l) Y_{CO2} (l)	Gas flow (CO_2) mol/min	Mole fr. N_2 (g) Y_{N2} (g)	Gas flow (N_2) mol/min	TOC mg/l	%TOC conversion	Y TOC	Total C Balance
pyridine 0.04916	21	2	6.49	36317.9	19790.1	12.56	5.02	0.11	6.35	0.3368	0.0865	3.31E-05	0.1345	1.32E-05	857.5	76.34	0.2366	0.6598
	22	2.5	9.60	50446.5	0	17.44	0.00	0.08	5.08	0.5536	0.1201	6.80E-05	0.0000	0.00E+00	1225	66.21	0.3379	1.0116
	23	3	8.43	41340.4	1868.8	14.30	0.47	0.07	4.23	0.3320	0.0984	4.90E-05	0.0110	1.62E-06	1268	65.02	0.3498	0.7802
	24	3.5	12.57	37461.6	0	12.95	0.00	0.06	3.63	0.3845	0.0892	6.62E-05	0.0000	0.00E+00	1265	65.10	0.3490	0.8226

ตาราง ข.11 ตารางแสดงผลการคำนวณของไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.614 โมลต่อลิตร

T = 400 °C

P = 25 MPa

P = 1 atm MW H_2O 18

0.101 MPa MW C 12

T = 300 K

R = 0.08205 l.atm/gmole.K

H = 165.8 MPa (T=300K, P=1atm)

V_{MnO2} = 0.2 ml/g

g_{MnO2} = 5.2898 g

ρ_a = 997.05 kg/m^3

ρ_T = 161.9 kg/m^3

Std. CO_2 (%mole) = 99.9 area CO_2 = 288,888 Std. N_2 (%mole) = 99.99

Conc. Pyridin 0.04916 mol/l area N_2 = 394518.4

TOC at initial 3625 mg/l

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	Conc.CO_2 %mole	Conc.N_2 %mole	Contact time min	Contact time sec	Mole fr. CO_2 (g) Y_{CO2} (g)	Mole fr. CO_2 (l) Y_{CO2} (l)	Gas flow (CO_2) mol/min	Mole fr. N_2 (g) Y_{N2} (g)	Gas flow (N_2) mol/min	TOC mg/l	%TOC conversion	Y TOC	Total C Balance
pyridine 0.04916	25	2	4.75	60172	352.1	20.81	0.09	0.09	5.15	0.4084	0.1432	4.02E-05	0.0018	1.72E-07	1141	68.52	0.3148	0.8664
	26	2.5	7.02	48763.6	1862.2	16.86	0.47	0.07	4.12	0.3913	0.1161	4.81E-05	0.0110	1.35E-06	1236	65.90	0.3410	0.8484
	27	3	7.4	42276	0	14.62	0.00	0.06	3.44	0.2980	0.1006	4.40E-05	0.0000	0.00E+00	1257	65.32	0.3468	0.7454
	28	3.5	7.68	38779.3	0	13.41	0.00	0.05	2.94	0.2432	0.0923	4.18E-05	0.0000	0.00E+00	1268	65.02	0.3498	0.6853

ตาราง ข.12 ตารางแสดงผลการคำนวณของไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.614 โมลต่อลิตร

T = 410 °C

P = 25 MPa

P = 1 atm MW H_2O 18

0.101 MPa MW C 12

T = 300 K

R = 0.08205 l.atm/gmole.K

H = 165.8 MPa (T=300K, P=1atm)

V_{MnO2} = 0.2 ml/g

g_{MnO2} = 5.2898 g

ρ_a = 997.05 kg/m^3

ρ_T = 143.8 kg/m^3

Std. CO_2 (%mole) = 99.9 area CO_2 = 288,888 Std. N_2 (%mole) = 99.99

Conc. Pyridin 0.04916 mol/l area N_2 = 394518.4

TOC at initial 3625 mg/l

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	Conc.CO_2 %mole	Conc.N_2 %mole	Contact time min	Contact time sec	Mole fr. CO_2 (g) Y_{CO2} (g)	Mole fr. CO_2 (l) Y_{CO2} (l)	Gas flow (CO_2) mol/min	Mole fr. N_2 (g) Y_{N2} (g)	Gas flow (N_2) mol/min	TOC mg/l	%TOC conversion	Y TOC	Total C Balance
pyridine	29	2	5.12	56065.1	4059.1	19.39	1.03	0.08	4.58	0.4102	0.1335	4.03E-05	0.0218	2.14E-06	988.6	72.73	0.2727	0.8163
0.04916	30	2.5	5.98	46549.2	14700.3	16.10	3.73	0.06	3.66	0.3182	0.1108	3.91E-05	0.0736	9.05E-06	1126	68.94	0.3106	0.7396
	31	3	7.42	47274.6	4357.4	16.35	1.10	0.05	3.05	0.3341	0.1125	4.93E-05	0.0226	3.33E-06	1150	68.28	0.3172	0.7639
	32	3.5	8.17	47140.7	0	16.30	0.00	0.04	2.62	0.3145	0.1122	5.41E-05	0.0000	0.00E+00	1234	65.96	0.3404	0.7671

ตาราง ข.13 ตารางแสดงผลการคำนวณของไพริดีนความเข้มข้น 0.0246 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 0.307 โมลต่อลิตร

T = 380 °C

P = 25 MPa

P = 1 atm MW H_2O 18

0.101 MPa MW C 12

T = 300 K

R = 0.08205 l.atm/gmole.K

H = 165.8 MPa (T=300K, P=1atm)

V_{MnO2} = 0.2 ml/g

g_{MnO2} = 5.2898 g

ρ_a = 997.05 kg/m^3

ρ_T = 316.5 kg/m^3

Std. CO_2 (%mole) = 99.9 area CO_2 = 288,888 Std. N_2 (%mole) = 99.99

Conc. Pyridin 0.02458 mol/l area N_2 = 394518.4

TOC at initial 1843 mg/l

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	Conc.CO_2 %mole	Conc.N_2 %mole	Contact time min	Contact time sec	Mole fr. CO_2 (g) Y_{CO2} (g)	Mole fr. CO_2 (l) Y_{CO2} (l)	Gas flow (CO_2) mol/min	Mole fr. N_2 (g) Y_{N2} (g)	Gas flow (N_2) mol/min	TOC mg/l	%TOC conversion	Y TOC	Total C Balance
pyridine 0.02458	53	2	5.66	27984.9	3568.9	9.68	0.90	0.17	10.08	0.4527	0.1332	2.23E-05	0.0423	2.08E-06	427.3	76.81	0.2319	0.8177
	54	2.5	5.55	23617.3	3836.8	8.17	0.97	0.13	8.06	0.2997	0.1124	1.84E-05	0.0357	2.19E-06	467.8	74.62	0.2538	0.6659
	55	3	5.93	27965.9	0	9.67	0.00	0.11	6.72	0.3159	0.1332	2.33E-05	0.0000	0.00E+00	571.6	68.99	0.3101	0.7592
	56	3.5	11.23	28394.4	0	9.82	0.00	0.10	5.76	0.5207	0.1352	4.48E-05	0.0000	0.00E+00	578.5	68.61	0.3139	0.9698

ตาราง ข.14 ตารางแสดงผลการคำนวณของผสมระหว่างฟีนอลความเข้มข้น = 0.046 โมลต่อลิตร กับไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 1.2585 โมลต่อลิตร

T = 380 °C

P = 25 MPa

P = 1 atm MW H_2O 18

0.101 MPa MW C 12

T = 300 K V_{MnO2} = 0.2 ml/g

R = 0.08205 l.atm/gmole.K g_{MnO2} = 5.2898 g

H = 165.8 MPa (T=300K, P=1atm) ρ_a = 997.05 kg/m^3

ρ_T = 316.5 kg/m^3

Mixture Phenol + Pyridine

Std. CO_2 (%mole) = 99.9 area CO_2 = 288,888 Std. N_2 (%mole) = 99.99

Conc. Pyridine 0.04916 mol/l Conc. Phenol = 0.046 mol/l area N_2 = 394518.4

TOC at initial 3396.5 mg/l

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	Conc.CO_2 %mole	Conc.N_2 %mole	Contact time min	Contact time sec	Mole fr. CO_2 (g) Y_{CO2} (g)	Mole fr. CO_2 (l) Y_{CO2} (l)	Gas flow (CO_2) mol/min	Mole fr. N_2 (g) Y_{N2} (g)	Gas flow (N_2) mol/min	TOC mg/l	%TOC conversion	Y TOC	Total C Balance
Mixture	33	2	3.13	126811.1	7858.9	43.85	1.99	0.17	10.08	0.5860	0.1560	5.58E-05	0.0258	2.53E-06	297.4	91.24	0.0876	0.8295
Phenol /	34	2.5	4.02	131055.3	4821.5	45.32	1.22	0.13	8.06	0.6222	0.1612	7.40E-05	0.0162	2.00E-06	375	88.96	0.1104	0.8938
Pyridine	35	3	6.24	126470.9	3956.9	43.73	1.00	0.11	6.72	0.7767	0.1555	1.11E-04	0.0172	2.54E-06	411.1	87.90	0.1210	1.0533
	36	3.5	7.83	122577	5745.7	42.39	1.46	0.10	5.76	0.8097	0.1507	1.35E-04	0.0269	4.63E-06	380.6	88.79	0.1121	1.0725

ตาราง ข.15 ตารางแสดงผลการคำนวณของผสมระหว่างฟีนอลความเข้มข้น = 0.046 โมลต่อลิตร กับไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 1.2585 โมลต่อลิตร

T = 390 °C

P = 25 MPa

P = 1 atm MW H_2O 18

0.101 MPa MW C 12

T = 300 K

R = 0.08205 l.atm/gmole.K

H = 165.8 MPa (T=300K, P=1atm)

V_{MnO2} = 0.2 ml/g

g_{MnO2} = 5.2898 g

ρ_a = 997.05 kg/m^3

ρ_T = 199.5 kg/m^3

Std. CO_2 (%mole) = 99.9 area CO_2 = 288,888 Std. N_2 (%mole) = 99.99

Conc. Pyridine 0.04916 mol/l Conc. Phenol = 0.046 mol/l area N_2 = 394518.4

TOC at initial 3396.5 mg/l

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	Conc.CO_2 %mole	Conc.N_2 %mole	Contact time min	Contact time sec	Mole fr. CO_2 (g) Y_{CO2} (g)	Mole fr. CO_2 (l) Y_{CO2} (l)	Gas flow (CO_2) mol/min	Mole fr. N_2 (g) Y_{N2} (g)	Gas flow (N_2) mol/min	TOC mg/l	%TOC conversion	Y TOC	Total C Balance
Mixture	37	2	3.37	107405.7	25895.4	37.14	6.56	0.11	6.35	0.5344	0.1321	5.09E-05	0.0914	8.99E-06	251.4	92.60	0.0740	0.7405
Phenol /	38	2.5	4.09	125318.3	5133.1	43.34	1.30	0.08	5.08	0.6054	0.1541	7.20E-05	0.0176	2.16E-06	321.4	90.54	0.0946	0.8541
Pyridine	39	3	5.66	118920	6530.6	41.12	1.66	0.07	4.23	0.6625	0.1463	9.46E-05	0.0258	3.81E-06	364.5	89.27	0.1073	0.9160
	40	3.5	8.11	116639.2	6443.1	40.33	1.63	0.06	3.63	0.7980	0.1434	1.33E-04	0.0313	5.38E-06	386.7	88.61	0.1139	1.0553

ตาราง ข.16 ตารางแสดงผลการคำนวณของผสมระหว่างฟีนอลความเข้มข้น = 0.046 โมลต่อลิตร กับไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 1.2585 โมลต่อลิตร

T = 400 °C

P = 25 MPa

P = 1 atm MW H_2O 18

0.101 MPa MW C 12

T = 300 K

R = 0.08205 l.atm/gmole.K

H = 165.8 MPa (T=300K, P=1atm)

V_{MnO2} = 0.2 ml/g

g_{MnO2} = 5.2898 g

ρ_a = 997.05 kg/m^3

ρ_T = 161.9 kg/m^3

Std. CO_2 (%mole) = 99.9 area CO_2 = 288,888 Std. N_2 (%mole) = 99.99

Conc. Pyridin 0.04916 mol/l Conc. Phenol = 0.046 mol/l area N_2 = 394518.4

TOC at initial 3396.5 mg/l

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	Conc.CO_2 %mole	Conc.N_2 %mole	Contact time min	Contact time sec	Mole fr. CO_2 (g) Y_{CO2} (g)	Mole fr. CO_2 (l) Y_{CO2} (l)	Gas flow (CO_2) mol/min	Mole fr. N_2 (g) Y_{N2} (g)	Gas flow (N_2) mol/min	TOC mg/l	%TOC conversion	Y TOC	Total C Balance
Mixture Phenol / Pyridine	41	2	4.22	117324.9	7237.2	40.57	1.83	0.09	5.15	0.7309	0.1443	6.96E-05	0.0320	3.14E-06	248.9	92.67	0.0733	0.9485
	42	2.5	5.12	116254.6	7712.5	40.20	1.95	0.07	4.12	0.7030	0.1430	8.36E-05	0.0331	4.07E-06	290.1	91.46	0.0854	0.9314
	43	3	6.62	128420.8	3152.3	44.41	0.80	0.06	3.44	0.8367	0.1579	1.19E-04	0.0146	2.15E-06	330	90.28	0.0972	1.0918
	44	3.5	7.57	138074.5	157.5	47.75	0.04	0.05	2.94	0.8818	0.1698	1.47E-04	0.0007	1.23E-07	364	89.28	0.1072	1.1587

ตาราง ข.17 ตารางแสดงผลการคำนวณของผสมระหว่างฟีนอลความเข้มข้น = 0.046 โมลต่อลิตร กับไพริดีนความเข้มข้น 0.049 โมลต่อลิตร และความเข้มข้นของออกซิเจน (100% excess) = 1.2585 โมลต่อลิตร

T = 410 °C

P = 25 MPa

P = 1 atm MW H_2O 18

0.101 MPa MW C 12

T = 300 K V_{MnO2} = 0.2 ml/g

R = 0.08205 l.atm/gmole.K g_{MnO2} = 5.2898 g

H = 165.8 MPa (T=300K, P=1atm) ρ_a = 997.05 kg/m^3

ρ_T = 143.8 kg/m^3

Std. CO_2 (%mole) = 99.9 area CO_2 = 288,888 Std. N_2 (%mole) = 99.99

Conc. Pyridine 0.04916 mol/l Conc. Phenol = 0.046 mol/l area N_2 = 394518.4

TOC at initial 3533 mg/l

Type	Run	Flow rate (ml/min)	Flow Gas (ml/min)	Peak area CO_2 GC	Peak area N_2 GC	Conc.CO_2 %mole	Conc.N_2 %mole	Contact time min	Contact time sec	Mole fr. CO_2 (g) Y_{CO2} (g)	Mole fr. CO_2 (l) Y_{CO2} (l)	Gas flow (CO_2) mol/min	Mole fr. N_2 (g) Y_{N2} (g)	Gas flow (N_2) mol/min	TOC mg/l	%TOC conversion	Y TOC	Total C Balance
Mixture	45	2	4.39	103693.9	19959.4	35.86	5.06	0.08	4.58	0.6720	0.1275	6.40E-05	0.0918	9.02E-06	262.9	92.56	0.0744	0.8740
Phenol /	46	2.5	6.38	123875.5	6690.9	42.84	1.70	0.06	3.66	0.9334	0.1523	1.11E-04	0.0358	4.40E-06	338.4	90.42	0.0958	1.1815
Pyridine	47	3	7.04	117919.1	9664.6	40.78	2.45	0.05	3.05	0.8170	0.1450	1.17E-04	0.0475	7.01E-06	351.4	90.05	0.0995	1.0615
	48	3.5	8.59	134745.8	179	46.60	0.05	0.04	2.62	0.9765	0.1657	1.63E-04	0.0009	1.58E-07	435.9	87.66	0.1234	1.2655

ตาราง ข.18 ตารางแสดงร้อยละการเปลี่ยนของปริมาณคาร์บอนอินทรีย์ทั้งหมดของฟีนอลความเข้มข้น = 0.046 M และไพริดีนความเข้มข้น = 0.049 M โดยออกซิเดชันในน้ำภาวะเหนือวิกฤตแบบไม่มีตัวเร่งปฏิกิริยาที่อุณหภูมิ 410 องศาเซลเซียส ความดัน 25 เมกะพาสคัล และร้อยละความมากเกินพอของออกซิเจน = 100%

Run order	Temperature (°C)	Pressure (MPa)	Flow rate (ml/min)	Initial concentration (M)		TOC Conversion (%)
				Phenol	Pyridine	
57	410	25	2	0.046	-	94.73
58	410	25	2.5	0.046	-	91.23
59	410	25	3	0.046	-	91.52
60	410	25	3.5	0.046	-	89.42
61	410	25	2	-	0.049	62.34
62	410	25	2.5	-	0.049	61.34
63	410	25	3	-	0.049	54.26
64	410	25	3.5	-	0.049	48.71

ตาราง ข.19 ค่าพื้นที่ใต้กราฟ และร้อยละโดยโมลของแก๊สที่อุณหภูมิ 410 องศาเซลเซียส ความดัน 25 เมกะพาสคัล และร้อยละความมากเกินพอของออกซิเจน = 100% ในกรณีที่ไม่มีตัวเร่งปฏิกิริยา

Run Order	Integrated area			Mole fr. of gas product (%mol)		
	N_2	CO	CO_2	N_2	CO	CO_2
57	-	2136.1	43945.2	-	1.10	13
61	10661.8	6353.2	40472.6	3.59	3.29	12.35

หมายเหตุ Standard N_2 (%mol) = 94 Integrated area = 279342.3

CO (%mol) = 1 Integrated area = 1933.4

CO_2 (%mol) = 1 Integrated area = 3277

ภาคผนวก ค

ภาคผนวก ค

การคำนวณและตัวอย่างการคำนวณ

1.การคำนวณปริมาตรของเครื่องปฏิกรณ์ (V_R)

$$V_R = \frac{\pi D^2 L}{4}$$

V_R = ปริมาตรเครื่องปฏิกรณ์ (ลูกบาศก์เมตร)

D = เส้นผ่านศูนย์กลางภายในของเครื่องปฏิกรณ์ (เมตร)

L = ความยาวของเครื่องปฏิกรณ์ (เมตร)

ในงานวิจัยนี้เครื่องปฏิกรณ์ทำจากท่อสแตนเลส SS-316 (เส้นผ่านศูนย์กลางภายในของเครื่องปฏิกรณ์ 0.7747 เซนติเมตร ความยาว 0.1 เมตร

$$V_R = \frac{\pi(0.007747^2)(0.1)}{4}$$
$$= 4.71\times10^{-6} m^3 = 4.71\ ml$$

ปริมาตรของเครื่องปฏิกรณ์ในงานวิจัยนี้เท่ากับ 4.71 มิลลิลิตร

2.การคำนวณหาเวลาในการเกิดปฏิกิริยา (Contact time)

$$Contact\ time = \frac{Catalyst\ bulk\ volume\ (ml)}{Fluid\ volumetric\ flow\ rate\ (ml/\min)}$$ [36]

$$Contact\ time = \frac{V_{MnO_2} \times g_{Mno_2}}{V_T \times \frac{\rho_a}{\rho_T}}$$

$Contact\ time$ = เวลาในการเกิดปฏิกิริยา (min)

V_{MnO_2} = Pore volume of MnO_2 = 0.20 ml/g

g_{MnO_2} = ปริมาณของแมงกานีสออกไซด์ (g) = 5.2898 g

V_T = อัตราการไหลเชิงปริมาตรรวมของสารละลาย (ml/min)

ρ_T = ความหนาแน่นของน้ำที่เงื่อนไขต่างๆ (kg/m^3)

ρ_a = ความหนาแน่นของน้ำที่สภาวะแวดล้อม (kg/m^3) (T = 25 °C)

จาก **ภาคผนวก ข.1 และ ข.2** ที่ flow rate = 2 ml/min และอุณหภูมิมีค่าเท่ากับ 380 °C

ρ_a = 997.05 kg/m^3

ρ_T = 316.50 kg/m^3

$$Contact\ time = \frac{0.2 \times 5.2898}{2 \times \frac{997.05}{316.50}} = 0.168\ \text{min} = 10.08\ \text{sec}$$

3.ร้อยละความมากเกินพอของออกซิเจน

$$\%O_2\ excess = \left(\frac{O_2 concentration\ input}{O_2 concentration\ stoichiometric} \times 100 \right) - 100 \quad [31]$$

% Oxygen excess = ร้อยละความมากเกินพอของออกซิเจน

O_2 concentration input = ความเข้มข้นของออกซิเจนที่ป้อน (mol/l)

O_2 concentration stoichiometric = ความเข้มข้นของออกซิเจนที่ปริมาณสัมพันธ์ (mol/l)

ตัวอย่างที่ 1ค จากการทดลอง ความเข้มข้นฟีนอลเริ่มต้น 0.046 โมลต่อลิตร ปฏิกิริยาออกซิเดชันของฟีนอล แสดงดังสมการที่ (1)

$$C_6H_5OH + 7O_2 \rightarrow 6CO_2 + 3H_2O \quad (1)$$

$$2H_2O_2 \rightarrow O_2 + 2H_2O \quad (2)$$

O_2 concentration stoichiometric = $7 \times 0.046 = 0.322$ mol/l

โดยในงานวิจัยนี้ต้องการร้อยละความมากเกินพอของออกซิเจนเท่ากับ 100 จะได้

O_2 concentration input = 0.322 x (1+1) = 0.644 mol/l

โดยในงานวิจัยนี้ใช้ไฮโดรเจนเปอร์ออกไซด์เป็นตัวออกซิไดส์ ซึ่งไฮโดรเจนเปอร์ออกไซด์เกิดปฏิกิริยาการสลายตัวเมื่อได้รับความร้อน ดังสมการที่ (2)

ดังนั้น ความเข้มข้นของไฮโดรเจนเปอร์ออกไซด์ที่ใช้ = 0.644 x 2 = 1.288 mol/l

4.การวิเคราะห์ปริมาณของเหลว

<u>การคำนวณหาค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงของจำนวนคาร์บอนอินทรีย์ทั้งหมด (%TOC Conversion)</u>

$$\%TOC_{conversion} = \left(1 - \frac{TOC_t}{TOC_o}\right) \times 100$$

$\%TOC_{conversion}$ = ร้อยละการเปลี่ยนแปลงของจำนวนคาร์บอนอินทรีย์ทั้งหมด

TOC_t = ค่าการเปลี่ยนแปลงของจำนวนคาร์บอนอินทรีย์ทั้งหมดที่อัตราการไหลต่างๆ

TOC_0 = ค่าการเปลี่ยนแปลงของจำนวนคาร์บอนอินทรีย์ทั้งหมดที่เริ่มต้น

ตัวอย่างที่ 2ค จาก**ภาคผนวก ก.1** ที่ flow rate = 2.5 ml/min (run 2)

TOC_0 = 3121.67 mg/l

TOC_t = 80.35 mg/l

$$\%TOC_{conversion} = \left(1 - \frac{80.35}{3121.67}\right) \times 100 = 97.43\%$$

การคำนวณค่าสัดส่วนคาร์บอนที่เหลือ

$$Fr.TOC_{OUT} = 1 - X$$

Fr.TOC = ค่าสัดส่วนคาร์บอนที่เหลือ

X = สัดส่วนการเปลี่ยนของปริมาณคาร์บอนอินทรีย์ทั้งหมด = $\frac{\%TOC_{conversion}}{100}$

ตัวอย่างที่ 3ค จากตัวอย่างที่ 2ค ค่าสัดส่วนคาร์บอนที่เหลือที่ภาวะนี้มีค่าเท่ากับ 0.9743

$$Fr.TOC_{OUT} = 1 - 0.9743 = 0.0257$$

ดังนั้น ค่าสัดส่วนคาร์บอนที่เหลือที่ภาวะนี้มีค่าเท่ากับ 0.0257

5.การวิเคราะห์ปริมาณแก๊ส

การคำนวณร้อยละโดยโมลของผลิตภัณฑ์แก๊ส

% mole CO_2 in gas product

$$= \frac{\%mol\ \ Std.CO_2}{peak\ \ area\ \ of\ \ Std.CO_2} \times \text{peak area } CO_2 \text{ in gas product}$$

ตัวอย่างที่ 4ค

จาก **ภาคผนวก ก.1** ที่ flow rate = 2.5 ml/min (run 2)

% mole CO_2 in gas product = $\frac{\%mol\ \ Std.CO_2}{peak\ \ area\ \ of\ \ Std.CO_2} \times$ peak area CO_2 in gas product

$$= \frac{99.9}{975725.25} \times 111386.5$$

$$= 11.4\ \%\text{mol } CO_2$$

จาก **ภาคผนวก ก.6** ที่ flow rate = 2 ml/min (run 17)

% mole N_2 in gas product = $\frac{\%mol\ \ Std.N_2}{peak\ \ area\ \ of\ \ Std.N_2} \times$ peak area N_2 in gas product

$$= \frac{99.99}{394518.4} \times 4161.3$$

$$= 1.05\ \%\text{mol } N_2$$

การคำนวณอัตราการไหลของผลิตภัณฑ์แก๊ส

จาก $PV = nRT$

$$\therefore n = \frac{PV}{RT}$$

P = 1 atm

T = อุณหภูมิห้อง (300K)

R = 0.08205 (liter)(atm)/(gmole)(K)

V = อัตราการไหลของผลิตภัณฑ์แก๊ส (mL/min) × %mole ของผลิตภัณฑ์แก๊ส

n = molar flow rate ของผลิตภัณฑ์แก๊ส (mol/min)

ตัวอย่างที่ 5ค

จาก **ภาคผนวก ก.1** ที่ flow rate = 2.5 ml/min (run 2) และจากตัวอย่างที่ 4ค

$$\text{Gas flow } CO_2 \text{ (mol/min)} = \frac{1atm \times \left(20.76ml/1000ml\right) l/\min \times (11.4\%/100)}{0.08205 \, (l)(atm)/(gmole)(K) \times 300K}$$

$$= 0.0000962 \text{ mol/min}$$

จาก **ภาคผนวก ก.6** ที่ flow rate = 2 ml/min (run 17) และจากตัวอย่างที่ 4ค

$$\text{Gas flow } N_2 \text{ (mol/min)} = \frac{1atm \times \left(6.13ml/1000ml\right) l/\min \times (1.05\%/100)}{0.08205 \, (l)(atm)/(gmole)(K) \times 300K}$$

$$= 0.00000263 \text{ mol/min}$$

6.การคำนวณผลได้ของผลิตภัณฑ์แก๊ส

$$Y_{(g)} = \left(\frac{\text{Molar flow rate of gas product}}{[C_6H_5OH]_0 \times F_T} \right)$$

$Y_{(g)}$ = ผลได้ของผลิตภัณฑ์แก๊ส

$[C_6H_5OH]_0$ = ความเข้มข้นเริ่มต้นของฟีนอล (mol/l)

F_T = อัตราการไหลของสารละลาย (ml/min)

ตัวอย่างที่ 6ค จากตัวอย่างที่ 5ค

$$Y_{(CO_2,g)} = \left(\frac{0.0000962 \text{ mol/min} \times 1000\text{ml/l}}{0.046 mol/l \times 2.5 ml/\text{min}} \right)$$

$$Y_{(CO_2,g)} = 0.8364$$

ผลได้ของแก๊ส CO_2 ที่ภาวะนี้มีค่าเท่ากับ 0.8364

7.การคำนวณผลได้ของผลิตภัณฑ์แก๊สในเฟสของเหลว

เนื่องจาก CO_2 สามารถละลายน้ำได้ง่าย ดังนั้นจึงไม่สามารถคิดเฉพาะ CO_2 ที่อยู่ในผลิตภัณฑ์แก๊สอย่างเดียวได้ ต้องคิดในผลิตภัณฑ์ของเหลวด้วย ซึ่ง CO_2 นี้จะเกิดสมดุลระหว่างเฟสแก๊สและของเหลว ซึ่งคำนวณโดยใช้ "Henry's Law" [42]

$$P_{CO_2} = X_{CO_2} \times H$$
$$\therefore X_{CO_2} = \frac{P_{CO_2}}{H}$$

P_{CO_2} = Partial Pressure

$$= \frac{\%mol\ \ CO_2\ \ in\ \ gas\ \ product}{100} \times \text{Total Pressure}$$

X_{CO_2} = Molar fraction ของ CO_2 ในผลิตภัณฑ์ของเหลว

H = ค่าคงที่ของเฮนรี = 165.8 MPa ที่ 1 atm และ 300 K

Total Pressure = 0.101 MPa

$$\text{Molar flow rate of } CO_2 \text{ in liquid phase (mol/min)} = \frac{F_T \times X_{CO_2} \times \rho_{H_2O}}{MW_{H_2O}}$$

ตัวอย่างที่ 7ค

จาก **ภาคผนวก ก.1** ที่ flow rate = 2.5 ml/min (run 2)

Molar flow rate of CO_2 in liquid product (mol/min)

$$= \frac{\left(\frac{2.5ml/\min}{1000ml/l}\right)\times\left(\frac{0.114\times 0.101MPa}{165.8MPa}\right)\times 1000g/l}{18}$$

= 0.00000965 mol/min

ผลได้ของแก๊ส CO_2 ในเฟสของเหลว, $Y_{(CO_2,l)}$

$$\boxed{Y_{(CO_2,l)} = \left(\frac{\text{Molar flow rate of } CO_2 \text{ in liquid phase}}{[C_6H_5OH]_0 \times F_T}\right)}$$

$$= \frac{0.00000965mol/\min}{(0.046mol/l)\times\frac{2.5ml/\min}{1000ml/l}}$$

= 0.0839

ผลได้ของแก๊ส CO_2 ในเฟสของเหลวที่ภาวะนี้มีค่าเท่ากับ 0.0839

8.การคำนวณผลได้ของผลิตภัณฑ์แก๊สทั้งหมด

∴ ผลได้ของแก๊ส CO_2

= ผลได้ของ CO_2 ในผลิตภัณฑ์แก๊ส + ผลได้ของ CO_2 ในผลิตภัณฑ์ของเหลว

$$Y_{(CO_2)} = Y_{(CO_2,g)} + Y_{(CO_2,l)}$$

จากตัวอย่างที่ 6ค $Y_{(CO_2,g)}$ = 0.8364

$$Y_{(CO_2)} = 0.8364 + 0.0839 = 0.9203$$

ผลได้ของแก๊ส CO_2 ที่ภาวะนี้มีค่าเท่ากับ 0.9203

9.การคำนวณดุลคาร์บอน

$$\boxed{\text{Total Carbon} = Fr.TOC_{OUT} + Y_{CO_2}}$$

Total Carbon = ปริมาณคาร์บอนทั้งหมด

$Fr.TOC_{OUT}$ = สัดส่วนของคาร์บอนที่เหลือ

Y_{CO_2} = สัดส่วนของการเกิด CO_2

จากตัวอย่างที่ 3ค และตัวอย่างที่ 7ค

Total Carbon = 0.0257 + 0.9203

= 0.946

ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์

นายวิบูลย์ ศิริมาวิเศษ เกิดเมื่อวันที่ 14 พฤษภาคม พ.ศ. 2529 ที่จังหวัดกรุงเทพมหานคร สำเร็จการศึกษาปริญญาตรี วิทยาศาสตรบัณฑิต สาขาเทคโนโลยีเชื้อเพลิง ภาควิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ในปีการศึกษา 2550 และเข้าศึกษาต่อในหลักสูตรวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาเคมีเทคนิค คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ปีการศึกษา 2551