



ใบรับรองวิทยานิพนธ์
บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต (วิศวกรรมเคมี)

ปริญญา

วิศวกรรมเคมี

วิศวกรรมเคมี

สาขา

ภาควิชา

เรื่อง การวิเคราะห์วิถีทางปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันของน้ำมันปาล์ม โดยใช้เบสเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา

Pathway Analysis of Transesterification of Palm oil using Base Catalyst

นามผู้วิจัย นางสาวพจนีย์ ครองสินสุข

ได้พิจารณาเห็นชอบโดย

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก

(รองศาสตราจารย์เพ็ญจิตร ศรีนพคุณ, Ph.D.)

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์จรูญ นัตรมานพ, วศ.ด.)

หัวหน้าภาควิชา

(รองศาสตราจารย์ผ่องแผ้ว พรรณวดี, Ph.D.)

บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์รับรองแล้ว

(รองศาสตราจารย์กัญญา ธีระกุล, D.Agr.)

คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

วันที่ เดือน พ.ศ.

วิทยานิพนธ์

เรื่อง

การวิเคราะห์วิถีทางปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มโดยใช้เบสเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา

Pathway Analysis of Transesterification Reaction of Palm oil using Base Catalyst

โดย

นางสาวพจนีย์ ครองสินสุข

เสนอ

บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

เพื่อความสมบูรณ์แห่งปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต (วิศวกรรมเคมี)

พ.ศ. 2552

พจนีย์ ครอบสินสุข 2552: การวิเคราะห์วิถีทางทางปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันของน้ำมัน
ปาล์มโดยใช้เบสเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา ปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต (วิศวกรรมเคมี)
สาขาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก:
รองศาสตราจารย์เพ็ญจิตร ศรีนพคุณ, Ph.D. 147 หน้า

งานวิจัยนี้เป็นการศึกษาวิถีทางปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันของไตรกลีเซอไรด์โดยใช้
น้ำมันปาล์มบริสุทธิ์เป็นสารตั้งต้นและใช้โพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก เป็นตัวเร่ง
ปฏิกิริยา อัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ทดลองที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ด้วยความเร็ว
ในการกวน 400 รอบ/นาที ศึกษาวิถีทางของการเกิดปฏิกิริยาโดยติดตามไอโซเมอร์ของไตรกลีเซอไรด์
และ โมโนกลีเซอไรด์ที่เกิดขึ้นในปฏิกิริยาด้วยเทคนิค HPLC MS และ NMR

การทดลองนี้ได้เลือกเก็บน้ำมันตัวอย่างที่เวลา 20 นาที มาแยกสารประกอบชนิดต่างๆ โดยจะ
นำไปวิเคราะห์หาน้ำหนักโมเลกุลด้วยเครื่อง MS พบว่าสารประกอบที่แยกออกมาได้นั้นประกอบไป
ด้วย เมทิลเอสเทอร์ ไตรกลีเซอไรด์ ไดกลีเซอไรด์และ โมโนกลีเซอไรด์ และจากการพิจารณาน้ำหนัก
โมเลกุลที่วิเคราะห์ได้จากเครื่อง MS จะเห็นได้ว่าหมู่เอซิลของสารประกอบเหล่านี้มาจากกรดไขมัน
อิสระชนิด 16:0 18:1 และ 18:2 จากนั้นเมื่อนำสารประกอบเหล่านี้ไปวิเคราะห์ด้วยเครื่อง ¹H NMR โดย
การพิจารณาสัญญาณโปรตอนของสารประกอบแต่ละชนิด เพื่อวิเคราะห์หาไอโซเมอร์ของไตรกลีเซอไรด์
และ โมโนกลีเซอไรด์ พบว่า ไตรกลีเซอไรด์ที่แยกได้คือ 1,2-ไตรกลีเซอไรด์ และ 1,3-ไตรกลีเซอไรด์ ส่วน
โมโนกลีเซอไรด์ที่แยกได้เป็นสารผสมของ 1-โมโนกลีเซอไรด์ และ 2-โมโนกลีเซอไรด์ สารประกอบ
ทั้งหมดที่ทราบชนิดและไอโซเมอร์แล้วจะใช้เป็นสารมาตรฐานในการวิเคราะห์ตัวอย่างด้วยเครื่อง
HPLC เพื่อคู่ตำแหน่งโครมาโทแกรมของสารมาตรฐานทั้งหมด ผลจากการวิเคราะห์น้ำมันตัวอย่างที่
เวลาต่างๆแล้วเปรียบเทียบกับกราฟมาตรฐานแสดงให้เห็นว่า ในน้ำมันตัวอย่างมีปริมาณ 1,3-ไตรกลีเซอ
ไรด์ มากกว่า 1,2-ไตรกลีเซอไรด์ และที่เวลาของการทดลองผ่านไปมากขึ้นปริมาณ 1,3-ไตรกลีเซอไรด์ จะ
สูงขึ้น เมื่อนำเทคนิคการจำลองโมเลกุลมาเปรียบเทียบกับค่าพลังงานโมเลกุลของ 1,2-ไตรกลีเซอไรด์ และ
1,3-ไตรกลีเซอไรด์ พบว่า 1,3-ไตรกลีเซอไรด์ เป็นโครงสร้างที่มีความเสถียรกว่า 1,2-ไตรกลีเซอไรด์ จึงมี
ความเป็นไปได้ที่ปฏิกิริยาเลือกเกิดเป็นผลิตภัณฑ์ที่มีความเสถียรกว่า ทำให้สรุปได้ว่า วิถีทางปฏิกิริยาที่
เป็นไปได้มากที่สุด เมทอกไซด์ไอออนเข้าทำปฏิกิริยาได้ติดบนตำแหน่งที่ 2 บนโมเลกุลไตรกลีเซอไรด์ทำ
ให้เกิดเป็นสารประกอบ 1,3-ไตรกลีเซอไรด์ จากนั้นเมทอกไซด์ไอออนจะเข้าทำปฏิกิริยาบนตำแหน่งที่
1(3) บนโมเลกุล 1,3-ไตรกลีเซอไรด์ เกิดเป็นสารประกอบของ 1-โมโนกลีเซอไรด์ และสุดท้ายปฏิกิริยาค่า
ต่อทำให้เกิดกลีเซอรอลและไป โอคิเซลในที่สุด

Pojanee Kongsinsuk 2009: Pathway Analysis of Transesterification Reaction of Palm oil using Base Catalyst. Master of Engineering (Chemical Engineering), Major Field: Chemical Engineering, Department of Chemical Engineering. Thesis Advisor: Associate Professor Penjit Srinophakun, Ph.D. 147 pages.

This research aims to clarify the pathways of the transesterification of triglycerides (TG) and methanol using potassium hydroxide as a catalyst. Experiments were performed in a batch system, 400 rpm, 20 °C and the molar ratio of oil to methanol at 1:6. To clarify the pathway of the transesterification of TG, detection of positional isomers of *sn*-DG and *sn*-MG is needed. The equipment for identifying TG, DG, MG, ME and GL in the reaction mixture of transesterification reaction are HPLC, MS and NMR.

In this experiment, the samples were taken at 20 min and kept for the isolation of compounds. After that it was confirmed by MS analysis to consider the molecular species. The isolated compound was matched with the molecular species of TG, DG, MG and ME. From the mass spectrum analysis showed that the alkyl chain of these compounds predominated the palmitic, oleic and linoleic fatty acid. For ¹H NMR method, the isolated compounds were determined with respect to a resonance signal of proton and expected to distinguish the positional isomers of *sn*-DG and *sn*-MG. The result showed that, there were 2 positional isomers on *sn*-DG (*sn*-1,2-DG and *sn*-1,3-DG). For MG, the mixture of *sn*-1-MG and *sn*-2-MG was found. All these compounds were used as the standard for HPLC analysis to identify the chromatogram. The experimental result demonstrated that, the amounts of *sn*-1,3-DG was higher than *sn*-1,2-DG during in the reaction. To support the experimental result, the computational technique was used to determine the minimum molecular energy of *sn*-1,2-DG and *sn*-1,3-DG, it showed that the structure of *sn*-1,3-DG was more stable than *sn*-1,2-DG. It could be explained by the selectivity in the reaction that involved the formation of mainly *sn*-1,3-DG over *sn*-1,2-DG. All of these analyses showed that the transesterification reaction occurred easily at *sn*-2-position for both TG and DG. Our results suggested that the most possible pathway was the attack of methoxide ion to the carbonyl group of TG which occurred easily at *sn*-2-position to form *sn*-1,3-DG. After that, methoxide ion attacked at *sn*-1(3)-position of *sn*-1,3-DG to form *sn*-1-MG. In the last step, *sn*-1-MG reacted with methoxide ion to get glycerol and biodiesel.

/ /

Student's signature

Thesis Advisor's signature

กิตติกรรมประกาศ

ข้าพเจ้าขอขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร. เพ็ญจิตร์ ศรีนพคุณประธานกรรมการที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ที่กรุณาให้คำปรึกษา แนะนำ และแก้ไขวิทยานิพนธ์ฉบับนี้จนเสร็จสมบูรณ์ และขอขอบพระคุณ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.จรัญ ฉัตรมานพ ที่กรุณาสละเวลาในการตรวจแก้ไขวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ให้มีความสมบูรณ์ยิ่งขึ้น

ขอขอบพระคุณ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สุพรรณมา เตชะสกุล ดร. นิสาชล คุณวุฒิมโนธรรม และดร. นิธิรัตน์ ฉิมน้อย ที่กรุณาสละเวลาให้คำปรึกษา แนะนำและอบรมการใช้เครื่องมือทดลองงานวิจัย

ขอขอบคุณสถาบันวิจัยจุฬาภรณ์ที่เอื้อเฟื้อสถานที่ อุปกรณ์และเครื่องมือวิเคราะห์ NMR, MS และ HPLC สำหรับงานวิจัยนี้

ขอขอบคุณสถาบันวิจัยและพัฒนาแห่งมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ (KURDI) ศูนย์ความเป็นเลิศแห่งชาติด้านปิโตรเลียม ปิโตรเคมีและวัสดุขั้นสูง และบัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ที่ให้การสนับสนุนในด้านทุนวิจัยและส่งเสริมการทำวิทยานิพนธ์

ท้ายสุดขอกราบขอบพระคุณ คุณพ่อชัชวาล ครองสินสุข คุณแม่มารีสา ชีรภาพสมบัติ คุณอานันทนา ครองสินสุข คุณอาพิทักษ์ ครองสินสุข ที่ให้ความรักและความห่วงใยตลอดมา รวมถึงเพื่อนๆและน้องๆ ที่ให้กำลังใจแก่ข้าพเจ้าจนสามารถทำในสิ่งที่หวังได้สำเร็จ

ประโยชน์อันใดอันจะเกิดจากวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ ขอมอบแด่ วงศ์ตระกูล และคณาจารย์ทุกท่าน ที่กรุณาเมตตาอบรมสั่งสอน ให้ความรู้ คำแนะนำต่างๆ จนถึงปัจจุบัน

พจนีย์ ครองสินสุข

กันยายน 2552

สารบัญ

	หน้า
สารบัญ	(1)
สารบัญตาราง	(3)
สารบัญภาพ	(5)
คำนำ	1
วัตถุประสงค์	3
การตรวจเอกสาร	4
อุปกรณ์และวิธีการ	40
อุปกรณ์	40
วิธีการ	43
ผลและวิจารณ์	48
สรุปและข้อเสนอแนะ	76
สรุป	76
ข้อเสนอแนะ	78
เอกสารและสิ่งอ้างอิง	79
ภาคผนวก	85
ภาคผนวก ก การคำนวณอัตราส่วนโดยโมลระหว่างเมทานอลต่อน้ำมัน	86
ภาคผนวก ข การคำนวณหาปริมาณ โมโนกลีเซอไรด์ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค $^1\text{H NMR}$	87
ภาคผนวก ค การสร้างกราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างอัตราส่วนความสูงของสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์กับอัตราส่วนความเข้มข้นของสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์	88
ภาคผนวก ง แมสสเปกตรัมของสารประกอบที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค MS	100
ภาคผนวก จ สเปกตรัมของสารประกอบที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค $^1\text{H NMR}$	103
ภาคผนวก ฉ โครมาโทแกรมที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค HPLC	111

สารบัญ (ต่อ)

หน้า

ภาคผนวก ช การวิเคราะห์โดยใช้เทคนิคการจำลองโมเลกุล	132
ประวัติการศึกษา และการทำงาน	147

สารบัญตาราง

ตารางที่		หน้า
1	ปริมาณของกรดไขมันชนิดต่างๆที่เกาะบนกลีเซอรอลคาร์บอน	5
2	ข้อมูลทั่วไปของกรดไขมัน	9
3	องค์ประกอบกรดไขมันในน้ำมันพืชชนิดต่างๆ	10
4	องค์ประกอบของกรดไขมันในน้ำมันเมล็ดในปาล์มกับน้ำมันปาล์มและคุณสมบัติต่างๆของกรดไขมัน	14
5	สัญญาณ ^1H NMR บนกลีเซอรอลคาร์บอนของสารประกอบพวกเอซิลกลีเซอรอล	29
6	สัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบพวกเอซิลกลีเซอรอล	32
7	ผลการทดลองที่ได้จากแมสสเปกตรัมของสารประกอบตำแหน่งที่ 1	58
8	ผลการทดลองที่ได้จากแมสสเปกตรัมของสารประกอบตำแหน่งที่ 2	58
9	ผลการทดลองที่ได้จากแมสสเปกตรัมของสารประกอบตำแหน่งที่ 3	58
10	ผลการทดลองที่ได้จากแมสสเปกตรัมของสารประกอบตำแหน่งที่ 4	59
11	ผลการทดลองที่ได้จากแมสสเปกตรัมของสารประกอบตำแหน่งที่ 5	59
12	สัญญาณ ^1H NMR และชนิดของโปรตอนของสารประกอบเมทิลเอสเทอร์บริสุทธิ์	61
13	สัญญาณ ^1H NMR และชนิดของโปรตอนของสารประกอบไตรกลีเซอไรด์บริสุทธิ์	62
14	สัญญาณ ^1H NMR และชนิดของโปรตอนของสารประกอบไดกลีเซอไรด์บริสุทธิ์ (สารมัธยันต์ตำแหน่งที่ 3)	62
15	สัญญาณ ^1H NMR และชนิดของโปรตอนของสารประกอบไดกลีเซอไรด์บริสุทธิ์ (สารมัธยันต์ตำแหน่งที่ 4)	63
16	สัญญาณ ^1H NMR และชนิดของโปรตอนของสารประกอบโมนอกลิเซอไรด์บริสุทธิ์(สารมัธยันต์ตำแหน่งที่ 5)	64
17	ผลการวิเคราะห์สารประกอบที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชัน	66
18	อัตราส่วนโดยน้ำหนักของ 1,3-ไดกลีเซอไรด์และ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันที่เวลาต่างๆ	69

สารบัญตาราง (ต่อ)

ตารางผนวกที่		หน้า
ค1	สารมาตรฐาน	88
ค2	อัตราส่วนความสูงพีคของสารมาตรฐาน	89
ค3	อัตราส่วน โดยน้ำหนักและอัตราส่วนความสูงระหว่างสารประกอบ 1,2-ไดคลีเซอไรด์ และ 1,3-ไดคลีเซอไรด์	90
ค4	แสดงค่า Area และค่า Retention time (RT) ของโมโนกลีเซอไรด์ ไดคลีเซอไรด์ ไตรกลีเซอไรด์และเมทิลเอสเทอร์ ในน้ำมันชั้นบนที่เวลา 2 นาที ที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส อัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6	91
ค5	แสดงค่า Area และค่า Retention time (RT) ของโมโนกลีเซอไรด์ ไดคลีเซอไรด์ ไตรกลีเซอไรด์และเมทิลเอสเทอร์ ในน้ำมันชั้นบนที่เวลา 10 นาที ที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส อัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6	93
ค6	แสดงค่า Area และค่า Retention time (RT) ของโมโนกลีเซอไรด์ ไดคลีเซอไรด์ ไตรกลีเซอไรด์และเมทิลเอสเทอร์ ในน้ำมันชั้นบนที่เวลา 20 นาที ที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส อัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6	94
ค7	แสดงค่า Area และค่า Retention time (RT) ของโมโนกลีเซอไรด์ ไดคลีเซอไรด์ ไตรกลีเซอไรด์และเมทิลเอสเทอร์ ในน้ำมันชั้นบนที่เวลา 30 นาที ที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส อัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6	95
ค8	แสดงค่า Area และค่า Retention time (RT) ของโมโนกลีเซอไรด์ ไดคลีเซอไรด์ ไตรกลีเซอไรด์และเมทิลเอสเทอร์ ในน้ำมันชั้นบนที่เวลา 40 นาที ที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส อัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6	97
ค9	แสดงค่า Area และค่า Retention time (RT) ของโมโนกลีเซอไรด์ ไดคลีเซอไรด์ ไตรกลีเซอไรด์และเมทิลเอสเทอร์ ในน้ำมันชั้นบนที่เวลา 50 นาที ที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส อัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6	98

สารบัญภาพ

ภาพที่		หน้า
1	ปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของไตรกลีเซอไรด์กับแอลกอฮอล์	2
2	กลไกการเกิดปฏิกิริยาปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันระหว่างน้ำมันและแอลกอฮอล์	2
3	โครงสร้างโมเลกุลของไตรกลีเซอไรด์	5
4	โครงสร้างโมเลกุลของ 1,2-ไดกลีเซอไรด์และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์	7
5	โครงสร้างโมเลกุลของ 1-โมโนกลีเซอไรด์และ 2-โมโนกลีเซอไรด์	8
6	ลักษณะของผลปาล์มสด	13
7	ส่วนประกอบของผลปาล์ม	13
8	กระบวนการแตกสลายด้วยความร้อน	17
9	กลไกการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของไตรกลีเซอไรด์กับแอลกอฮอล์โดยใช้เบสเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา	19
10	ปฏิกิริยาสaponิฟิเคชันจากกรดไขมันอิสระโดยความร้อน	20
11	ปฏิกิริยาสaponิฟิเคชันจากเอสเทอร์ในปฏิกิริยาที่มีน้ำเป็นองค์ประกอบ	20
12	กลไกการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของไตรกลีเซอไรด์กับแอลกอฮอล์โดยใช้กรดเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา	21
13	ปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันระหว่างกรดไขมันอิสระกับแอลกอฮอล์	22
14	ระดับพลังงานของอิเล็กตรอนและการเปลี่ยนแปลงภาวะอิเล็กตรอน	26
15	ขบวนการดูดกลืนพลังงานโดยโปรตอน	27
16	ผลการวิเคราะห์สารประกอบที่เกิดขึ้นในปฏิกิริยาด้วยวิธีโครมาโทกราฟีแบบแผ่นบาง	31
17	ตัวเลขแสดงสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนในตำแหน่งต่างๆ	34
18	แอลฟา-คาร์บอนิลเมทิลีนโปรตอนในเมทิลเอสเทอร์และไตรกลีเซอไรด์	35
19	กลไกการเกิดปฏิกิริยาปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันระหว่างน้ำมันและแอลกอฮอล์	36
20	กลไกการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของสารประกอบไตรกลีเซอไรด์	39
21	แผนผังการทดลอง	47

สารบัญญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
22	น้ำมันตัวอย่างที่ทำการปั่นเหวี่ยงให้แยกชั้นในช่วงเวลา 2 10 20 30 40 และ 50 นาที	50
23	น้ำมันตัวอย่างที่ทำการแยกชั้นบนออกมาในช่วงเวลา 2 10 20 30 40 และ 50 นาที	50
24	โครมาโทแกรมของการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่เวลา 20 นาที ระบบของตัวทำละลาย คือ เอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 20 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร	51
25	โครมาโทแกรมของการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่เวลา 20 นาที ระบบของตัวทำละลาย คือ เอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 15 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร	51
26	โครมาโทแกรมของการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่เวลา 20 นาที ระบบของตัวทำละลาย คือ เอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 30 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร	52
27	โครมาโทแกรมของการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่เวลาต่างๆ ระบบของตัวทำละลาย คือ เอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 20 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร	52
28	โครมาโทแกรมของการแยกสารผสมน้ำมันตัวอย่าง ที่เวลา 20 นาที ที่เตรียมได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน โดยระบบของตัวทำละลาย คือ เอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 30 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร	55
29	ซิลิกาเจลที่ขูดออกจากแผ่น PTLC ของการแยกเมทิลเอสเทอร์ออกจากไตรกลีเซอไรด์ ระบบตัวทำละลาย คือ เอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 15 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร	55
30	ซิลิกาเจลที่ขูดออกจากแผ่น PTLC ของการแยกเมทิลเอสเทอร์ออกจากไตรกลีเซอไรด์ ระบบตัวทำละลาย คือ เอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 20 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร	56
31	การสูญเสียไนโตรเจนของสารประกอบแอลกอฮอล์	57
32	ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราส่วนความสูงของสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ เทียบกับอัตราส่วนความเข้มข้นของสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์	69
33	พลังงานกระตุ้นของการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์	70
34	โครงสร้างทางโมเลกุลของสารประกอบไดกลีเซอไรด์	72
35	โครงสร้างทางโมเลกุลของสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์	73
36	วิถีทางการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของสารประกอบไตรกลีเซอไรด์	75

สารบัญญภาพ (ต่อ)

ภาพผนวกที่	หน้า	
ง1	แมสสเปกตรัมของเมทิลเอสเทอร์ที่แยกได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	100
ง2	แมสสเปกตรัมของไตรกลีเซอไรด์ที่แยกได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	100
ง3	แมสสเปกตรัมของสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 3 ที่แยกได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	101
ง4	แมสสเปกตรัมของสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 4 ที่แยกได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	101
ง5	แมสสเปกตรัมของสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 5 ที่แยกได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	102
จ1	สัญญาณ ^1H NMR ของเมทิลเอสเทอร์ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	103

สารบัญญภาพ (ต่อ)

ภาพผนวกที่	หน้า	
จ2	แสดงการขยายสัญญาณ ^1H NMR ของเมทิลเอสเทอร์ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	103
จ3	สัญญาณ ^1H NMR ของไตรกลีเซอไรด์ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	104
จ4	แสดงการขยายสัญญาณ ^1H NMR ของไตรกลีเซอไรด์ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที สภาวะที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	104
จ5	สัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	105
จ6	แสดงการขยายสัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	105
จ7	สัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	106

สารบัญญภาพ (ต่อ)

ภาพผนวกที่	หน้า	
จ8	แสดงการขยายสัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบ 1,2-ไดคลิเซอไรด์ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	106
จ9	สัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบโมโนกลิเซอไรด์ ครั้งที่ 1 ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	107
จ10	แสดงการขยายสัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบโมโนกลิเซอไรด์ ครั้งที่ 1 ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	108
จ11	สัญญาณ ^1H NMR ของโมโนกลิเซอไรด์ ครั้งที่ 2 ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	109
จ12	แสดงการขยายสัญญาณ ^1H NMR ของโมโนกลิเซอไรด์ ครั้งที่ 2 ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส	110
ฉ1	โครมาโทแกรมของไตรกลิเซอไรด์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย A 30 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร ตัวทำละลาย B 70 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร: A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร	111

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพผนวกที่	หน้า
<p>ฅ2 โครมาโทแกรมของไตรกลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย A 40 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร ตัวทำละลาย B 60 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร: A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	112
<p>ฅ3 โครมาโทแกรมของไตรกลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย A 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร ตัวทำละลาย B 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร: A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	113
<p>ฅ4 โครมาโทแกรมของโมโนกลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย A 40 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร ตัวทำละลาย B 60 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร: A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	114
<p>ฅ5 โครมาโทแกรมของเมทิลเอสเทอร์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A -100เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คืออะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอล ใน เฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	115

สารบัญญภาพ (ต่อ)

ภาพผนวกที่	หน้า
<p>ฉ6 โครมาโทแกรมของไตรกลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คืออะซิโตนไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	115
<p>ฉ7 โครมาโทแกรมของ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตนไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	117
<p>ฉ8 โครมาโทแกรมของ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 3000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตนไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	118
<p>ฉ9 โครมาโทแกรมของ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตนไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	119

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพผนวกที่	หน้า
<p>ฉ10 โครมาโทแกรมของ1,2-ไดคลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 2000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	120
<p>ฉ11 โครมาโทแกรมของ1,2-ไดคลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 3000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	121
<p>ฉ12 โครมาโทแกรมของโมโนกลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	122
<p>ฉ13 โครมาโทแกรมของสารผสมระหว่าง 1,3-ไดคลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1000 ppm และ1,2-ไดคลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	123

สารบัญญภาพ (ต่อ)

ภาพผนวกที่	หน้า
<p>ฉ14 โครมาโทแกรมของสารผสมระหว่าง 1,3-ไดคลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 3000 ppm และ 1,2-ไดคลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 3000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์ โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	124
<p>ฉ15 โครมาโทแกรมของสารผสมระหว่าง 1,3-ไดคลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 3000 ppm และ 1,2-ไดคลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์ โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	125
<p>ฉ16 โครมาโทแกรมของน้ำมันชั้นบน ที่ความเข้มข้น 5000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ที่เวลา 2 นาที สภาวะการทดลองดังนี้ อัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อ เมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	126
<p>ฉ17 โครมาโทแกรมของน้ำมันชั้นบน ที่ความเข้มข้น 5000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ที่เวลา 10 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	127

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพผนวกที่	หน้า
<p>ฉ18 โครมาโทแกรมของน้ำมันชั้นบน ที่ความเข้มข้น 5000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยา ทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อ เมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตนไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	128
<p>ฉ19 โครมาโทแกรมของน้ำมันชั้นบน ที่ความเข้มข้น 5000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยา ทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ที่เวลา 30 นาที ที่สภาวะอัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อ เมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตนไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	129
<p>ฉ20 โครมาโทแกรมของน้ำมันชั้นบน ที่ความเข้มข้น 5000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยา ทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ที่เวลา 40 นาที ที่สภาวะอัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อ เมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตนไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดย ปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	130
<p>ฉ21 โครมาโทแกรมของน้ำมันชั้นบน ที่ความเข้มข้น 5000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยา ทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ที่เวลา 50 นาที ที่สภาวะอัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อ เมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตนไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดย ปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร</p>	131

คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ

δ	=	chemical shift (ppm)
1,2-DG	=	1,2-diglyceride
1,3-DG	=	1,3-diglyceride
1-MG	=	1-monoglyceride
2-MG	=	2-monoglyceride
CDCl_3	=	deuteriochloroform
DG	=	diglyceride
d	=	doublet
dd	=	doublet of doublet
GL	=	glycerol
HPLC	=	high performance liquid chromatography
J	=	coupling constant
m/z	=	mass-to-charge ratio
ME	=	methyl ester
M^+	=	molecular ion
MG	=	monoglyceride
m	=	multiplet
q	=	quartet
PTLC	=	preparative thin layer chromatography
ppm	=	part per million
TG	=	triglyceride
TLC	=	thin layer chromatography
s	=	singlet

การวิเคราะห์วิถีทางปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มโดยใช้เบส เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา

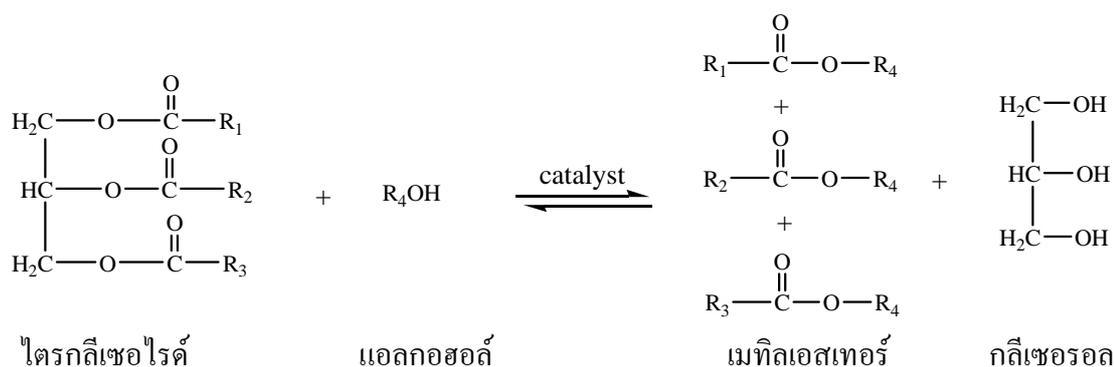
Pathway Analysis of Transesterification Reaction of Palm oil using Base Catalyst

คำนำ

ปัจจุบันความต้องการในการใช้พลังงานเชื้อเพลิงมีแนวโน้มเพิ่มสูงขึ้นในขณะที่พลังงานเชื้อเพลิงปิโตรเลียมที่ได้จากฟอสซิล (Fossil Fuel) ซึ่งเป็นแหล่งพลังงานสำคัญมีเหลืออยู่อย่างจำกัด และจะหมดไปในอีกไม่ช้านี้ ประกอบกับสถานการณ์ปัจจุบันที่น้ำมันมีราคาสูง จึงได้มีการศึกษาเพื่อหาแหล่งพลังงานแหล่งใหม่เพื่อนำมาใช้ทดแทน (Goyal *et al.*, 2008)

ไบโอดีเซล (Biodiesel) เป็นผลิตภัณฑ์ที่ได้จากสารชีวมวล (Biomass) สามารถนำมาใช้เป็นเชื้อเพลิงให้กับยานพาหนะได้ ไบโอดีเซลมีคุณสมบัติใกล้เคียงกับน้ำมันดีเซล (Diesel oil) จึงสามารถนำมาใช้ทดแทนน้ำมันดีเซลได้โดยไม่ต้องดัดแปลงเครื่องยนต์ อีกทั้งยังช่วยรักษาสภาพเครื่องยนต์ให้ใช้งานได้นานอีกด้วย เนื่องจากไบโอดีเซลให้การสันดาปที่สมบูรณ์กว่าดีเซลปกติทำให้มีเขม่าคาร์บอนน้อยจึงช่วยลดการอุดตันของระบบไอเสีย นอกจากนี้ไบโอดีเซลยังเป็นเชื้อเพลิงสะอาดและปลอดภัยต่อสิ่งแวดล้อม กล่าวคือไม่มีกำมะถันซัลเฟอร์ (Sulfur) จากการเผาไหม้และไม่ก่อให้เกิดมลพิษทางอากาศ นอกจากนี้การใช้ไบโอดีเซลยังสามารถลดปรากฏการณ์ฝนกรด ปรากฏการณ์เรือนกระจก (Green House Effect) ลดปริมาณก๊าซคาร์บอนมอนอกไซด์ (CO) กลุ่มไนโตรเจนออกไซด์ (NO_x) กลุ่มซัลเฟอร์ออกไซด์ (SO_x) และสารไฮโดรคาร์บอนที่ไม่สมบูรณ์ลงได้ (Shay, 1993) ทำให้ไบโอดีเซลได้รับความสนใจมากในปัจจุบัน

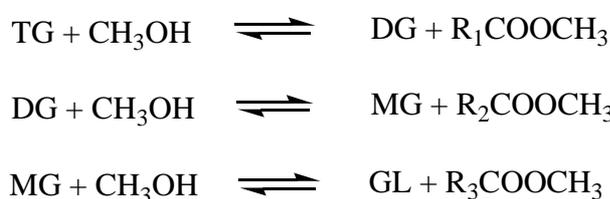
ไบโอดีเซลหรือแอลคิลเอสเทอร์ (Alkyl esters) เป็นผลิตภัณฑ์หลักที่ได้จากการทำปฏิกิริยาของน้ำมันจากพืชหรือไขมันจากสัตว์ ผ่านกระบวนการทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันด้วยแอลกอฮอล์โดยอาศัยตัวเร่งปฏิกิริยา แสดงดังภาพที่ 1 ไบโอดีเซลนี้มีคุณสมบัติใกล้เคียงกับน้ำมันดีเซล เช่น ความหนืด ค่าความร้อน (Heating value) ค่าซีเทน และ จุดวาบไฟ (Fukada *et al.*, 2001)



ภาพที่ 1 ปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของไตรกลีเซอไรด์กับแอลกอฮอล์

ที่มา: Agarwal (2007)

สำหรับกลไกการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันระหว่างน้ำมันและแอลกอฮอล์มี 3 ขั้นตอนแบบต่อเนื่องที่ผันกลับได้ แสดงดังภาพที่ 2 แต่สำหรับรายละเอียดวิถึทางของปฏิกิริยานั้น ยังไม่เป็นที่ทราบแน่ชัดโดยที่วิถึทางของปฏิกิริยาการผลิตไบโอดีเซลจะแตกต่างกันขึ้นอยู่กับชนิดของตัวเร่งปฏิกิริยา จึงมีความสำคัญต่อการศึกษาและทำความเข้าใจเป็นอย่างมาก



ภาพที่ 2 กลไกการเกิดปฏิกิริยาปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันระหว่างน้ำมันและแอลกอฮอล์

ที่มา: Darnoko and Cheryan (2000)

ดังนั้นโครงการวิจัยนี้จึงให้ความสนใจการศึกษาวิถึทางของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์ม โดยใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบเบสคือ โพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ เพื่อศึกษาหาวิถึทางของปฏิกิริยาที่เป็นไปได้ ประโยชน์ที่ได้จากการศึกษาค้นคว้าครั้งนี้คือ ทราบข้อมูลและรายละเอียดที่สำคัญของการดำเนินไปของปฏิกิริยา ซึ่งจะช่วยให้สามารถนำเอาข้อมูลที่ได้อไปประยุกต์ใช้ในการผลิตน้ำมันไบโอดีเซลเพื่อควบคุมหรือดัดแปลงปฏิกิริยาทำให้ได้ผลผลิตสูงที่สุด

วัตถุประสงค์

ศึกษาวิถีทางปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มโดยใช้เครื่องมือวิเคราะห์ทางเคมี

ขอบเขตของการวิจัย

การผลิตไบโอดีเซลจากน้ำมันปาล์มบริสุทธิ์และเมทานอลโดยผ่านปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันและใช้เบสโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา อัตราส่วนโดยโมลระหว่างน้ำมันและเมทานอลเท่ากับ 1:6 ทำการทดลองที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียสตลอดการทดลอง (Jin *et al.*, 2007) จากนั้นวิเคราะห์โครงสร้างของสารประกอบระหว่างการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ได้แก่ เมทิลเอสเทอร์ (Methyl ester) ไตรกลีเซอไรด์ (Triglyceride) ไดกลีเซอไรด์ (Diglyceride) และ โมโนกลีเซอไรด์ (Monoglyceride) โดยใช้เครื่องมือวิเคราะห์ทางเคมี ได้แก่ นิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์ สเปกโตรมิเตอร์ (Nuclear Magnetic Resonance Spectrometer, NMR) แมสสเปกโตรมิเตอร์ (Mass Spectrometer, MS) และโครมาโทกราฟีของเหลวสมรรถนะสูง High Performance Liquid Chromatography, HPLC)

การตรวจเอกสาร

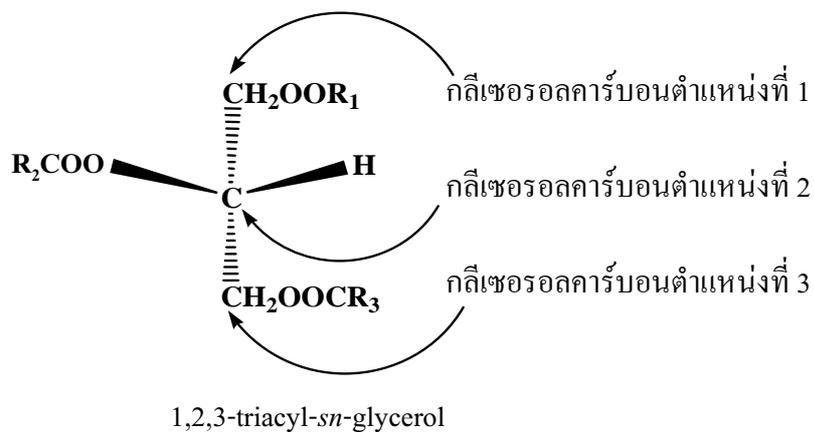
เอซิลกลีเซอรอล

เอซิลกลีเซอรอล (Acylglycerol) หรือไขมัน เป็นเอสเทอร์ระหว่างกรดไขมันกับแอลกอฮอล์ กลีเซอรอลซึ่งเป็นส่วนประกอบสำคัญในเนื้อเยื่อพบได้ทั่วไปในน้ำมันพืชและไขมันสัตว์ เอซิลกลีเซอรอลแบ่งออกเป็น ไตรเอซิลกลีเซอรอล (Triacylglycerol) ไดเอซิลกลีเซอรอล (Diacylglycerol) และ โมโนเอซิลกลีเซอรอล (Monoacylglycerol)

1. ไตรเอซิลกลีเซอรอลหรือไตรกลีเซอไรด์

ไตรเอซิลกลีเซอรอลหรือไตรกลีเซอไรด์เป็นเอซิลกลีเซอรอลที่พบมากที่สุด ไตรกลีเซอไรด์ส่วนใหญ่จะพบในรูปเอซิลกลีเซอรอลซึ่งเป็นเอสเทอร์ของกรดไขมัน 3 โมเลกุล และ กลีเซอรอล 1 โมเลกุล โครงสร้างโมเลกุลของไตรกลีเซอไรด์ แสดงได้ดังภาพที่ 3 องค์ประกอบหลักในน้ำมัน คือ ไตรกลีเซอไรด์ ซึ่งจะประกอบด้วยกรดไขมัน แบ่งออกเป็น 2 กลุ่มใหญ่ คือ กรดไขมันอิ่มตัว (Saturated Fatty Acid) และกรดไขมันไม่อิ่มตัว (Unsaturated Fatty Acid) ในน้ำมันพืชกรดไขมันที่พบส่วนใหญ่ จะเป็นกรดไขมันพหุไม่อิ่มตัว ทำให้ที่อุณหภูมิห้องจะมีสถานะเป็นของเหลว ซึ่งต่างจากไขมันจากสัตว์ที่จะประกอบด้วยกรดไขมันอิ่มตัวสูงและจะมีสถานะเป็นของแข็งที่อุณหภูมิห้อง (Fangrui and Milford, 1999) สำหรับกรดไขมันแต่ละชนิดที่สร้างพันธะเอสเทอร์กับกลีเซอรอลนั้นมีโอกาสเกาะอยู่บนกลีเซอรอลที่คาร์บอนทั้งสามตำแหน่งในปริมาณที่ต่างกันขึ้นอยู่กับประเภทของน้ำมัน แสดงดังตารางที่ 1

หมู่ R_1 , R_2 และ R_3 คือ กรดไขมันอิ่มตัวและกรดไขมันไม่อิ่มตัวโดยน้ำมันแต่ละชนิดจะมีปริมาณสัดส่วนของกรดทั้งสองชนิดจะแตกต่างกัน (Agarwal, 2007)



ภาพที่ 3 โครงสร้างโมเลกุลของไตรกลีเซอไรด์

ที่มา: Christie (1992)

ตารางที่ 1 ปริมาณของกรดไขมันชนิดต่างๆที่เกาะบนกลีเซอรอลคาร์บอนทั้งสามตำแหน่ง

น้ำมัน	ตำแหน่งกลีเซอรอลคาร์บอน	ปริมาณกรดไขมัน (โมลเปอร์เซ็นต์)				
		16:0	18:0	18:1	18:2	18:3
Peanut		9	3	58	23	-
	1	14	5	59	19	-
	2	2	tr	59	39	-
	3	11	5	57	10	-
Rapeseed		3	2	26	17	10
	1	4	2	23	11	-
	2	1	-	37	36	6
	3	4	3	17	4	20
Soybean		9	4	24	54	8
	1	14	6	23	48	9
	2	1	tr	22	70	7
	3	13	6	28	45	9

ตารางที่ 1 (ต่อ)

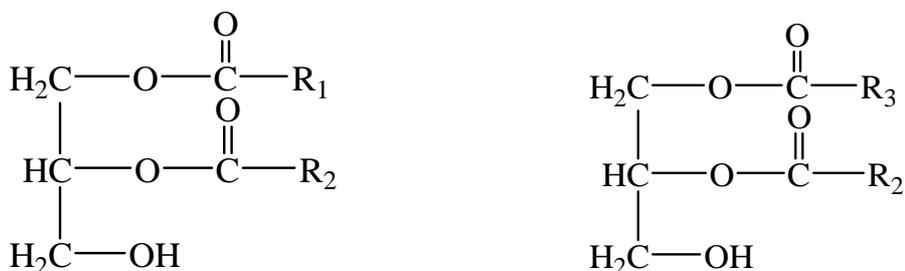
น้ำมัน	ตำแหน่งกลีเซอรอล คาร์บอน	ปริมาณกรดไขมัน (โมลเปอร์เซ็นต์)				
		16:0	18:0	18:1	18:2	18:3
Linseed		6	4	16	17	57
	1	10	6	15	16	53
	2	2	1	16	21	60
	3	6	4	17	13	59
Corn		11	2	29	57	1
	1	1	3	28	50	1
	2	18	tr	27	70	1
	3	2	3	31	52	1
Olive		10	2	76	10	1
	1	13	3	72	10	1
	2	1	-	83	14	1
	3	17	4	74	5	-
Cacao		24	3	36	3	tr
butter	1	34	50	12	1	1
	2	2	2	87	9	-
	3	37	53	9	tr	-
palm		48	4	36	10	-
	1	60	3	27	9	-
	2	43	tr	68	18	-
	3	72	8	14	3	-

หมายเหตุ tr = trace (<0.5%)

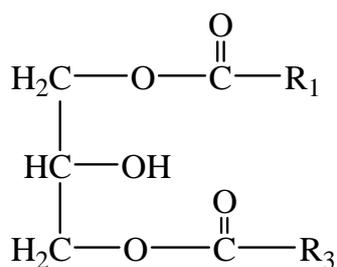
ที่มา: Christie (1992)

2. ไดเอซิลกลีเซอรอลหรือไดกลีเซอไรด์

ไดเอซิลกลีเซอรอลหรือโมโนกลีเซอไรด์เป็นเอสเทอร์ของกลีเซอรอลกับกรดไขมันสองหมู่และมีหมู่ไฮดรอกซิลอิสระเหลืออยู่ 1 หมู่ เอซิลกลีเซอรอลชนิดนี้ไม่ค่อยพบมากในธรรมชาติแต่จะพบในไขมันที่เกิดการไฮโดรไลซิสไม่สมบูรณ์ สำหรับไดกลีเซอไรด์นั้นสามารถพบชนิดของไอโซเมอร์ได้สองไอโซเมอร์ ไอโซเมอร์แรกได้แก่ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ ซึ่งเป็นเอซิลกลีเซอรอลที่มีหมู่เอซิลเกาะอยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 1 และ 2 แสดงดังภาพ 4ก ส่วนอีกไอโซเมอร์ได้แก่ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ ซึ่งเป็นเอซิลกลีเซอรอลที่มีหมู่เอซิลเกาะอยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 1 และ 3 แสดงดังภาพที่ 4ข



ก) 1,2-diacyl-*sn*-glycerol

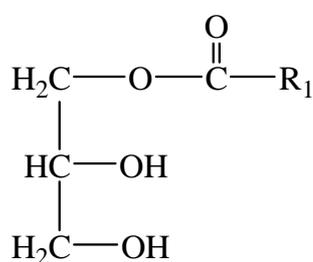


ข) 1,3-diacyl-*sn*-glycerol

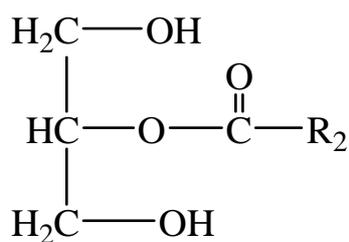
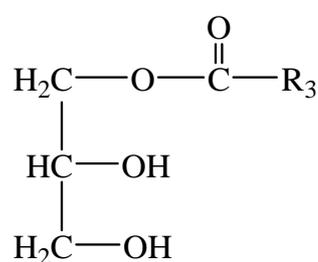
ภาพที่ 4 โครงสร้างโมเลกุลของไดกลีเซอไรด์ ก) 1,2-ไดกลีเซอไรด์ ข) 1,3-ไดกลีเซอไรด์
ที่มา: Christie (1992)

3. โมโนเอซิลกลีเซอรอลหรือโมโนกลีเซอไรด์

โมโนเอซิลกลีเซอรอลหรือโมโนกลีเซอไรด์เป็นเอสเทอร์ของกลีเซอรอลกับกรดไขมันเพียงหนึ่งหมู่และมีหมู่ไฮดรอกซิลอิสระเหลืออยู่ 2 หมู่ เอซิลกลีเซอรอลชนิดนี้ไม่ค่อยพบมากในธรรมชาติแต่จะพบในไขมันที่เกิดการไฮโดรไลซิสไม่สมบูรณ์ สำหรับโมโนกลีเซอไรด์นั้นสามารถพบชนิดของไอโซเมอร์ได้สองไอโซเมอร์ ได้แก่ 1-โมโนกลีเซอไรด์ ซึ่งเป็นเอซิลกลีเซอรอลที่มีหมู่เอซิลเกาะอยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 1 แสดงดังภาพที่ 5ก และ 2-โมโนกลีเซอไรด์ ซึ่งเป็นเอซิลกลีเซอรอลที่มีหมู่เอซิลเกาะอยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 2 แสดงดังภาพที่ 5ข



ก) 1-acyl-*sn*-glycerol



ข) 2-acyl-*sn*-glycerol

ภาพที่ 5 โครงสร้างโมเลกุลของโมโนกลีเซอไรด์ ก) 1-โมโนกลีเซอไรด์ ข) 2-โมโนกลีเซอไรด์
ที่มา: Christie (1992)

4. กรดไขมัน (Fatty acid)

กรดไขมันเป็นสารอินทรีย์ที่มีจำนวนคาร์บอนอะตอมเท่ากับ 4-24 อะตอม ปลายข้างหนึ่งเป็นหมู่คาร์บอกซิล ($-\text{COOH}$) ส่วนปลายอีกข้างหนึ่งมีลักษณะเป็นสายโซ่ยาวของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนแบบไม่มีขั้ว จึงทำให้กรดไขมันไม่ละลายน้ำ ในธรรมชาติกรดไขมันมีจำนวนคาร์บอนอะตอมเป็นเลขคู่และเป็นโซ่ยาวที่อิมตัวหรือไม่อิมตัว กรดไขมันแต่ละชนิดมีความยาวของสายโซ่คาร์บอน จำนวนพันธะคู่และตำแหน่งของพันธะคู่แตกต่างกัน (Warabi *et al.*, 2004) กรดไขมันที่พบในเซลล์พืชหรือสัตว์จะไม่พบในรูปอิสระแต่จะอยู่รวมกันในรูปแบบของไขมัน (Lipid) ด้วยพันธะโคเวเลนต์ ซึ่งถูกย่อยสลายได้ด้วยการใช้เอนไซม์หรือสารเคมี กรดไขมันที่พบในพืชและในสัตว์จะมีจำนวนคาร์บอนอะตอมเป็นเลขคู่อยู่ระหว่าง 14-22 อะตอม โดยเฉพาะคาร์บอนอะตอมเท่ากับ 16 และ 18 พบได้มากที่สุด และถ้าหากมีพันธะคู่มากกว่า 1 คู่ก็จะเป็นแบบนอนคอนจูเกต ($-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-$) โดยมีคอนฟิเจอร์ชันแบบซิส (Cis-configuration) กรดไขมันที่มีสายโซ่ยาวๆ (C16-C18) ละลายน้ำไม่ได้แต่เกลือของมันสามารถสร้างไมเซลล์ (Micelle) ในน้ำได้และไมเซลล์สามารถคงรูปอยู่ได้ด้วยอันตรกิริยา (Interaction) แบบไฮโดรโฟบิก (อาภัสตรา, 2537) ข้อมูลทั่วไปของกรดไขมันชนิดต่างๆ แสดงได้ดังตารางที่ 2 และชนิดของกรดไขมันที่เป็นองค์ประกอบในน้ำมันพืชชนิดต่างๆ แสดงได้ดังตารางที่ 3

ตารางที่ 2 ข้อมูลทั่วไปของกรดไขมัน

ชื่อทั่วไป (Common Name)	ชื่อทางวิทยาศาสตร์ (Scientific Name)	จำนวนคาร์บอน (Carbon Atoms)	จำนวนพันธะคู่ (Double Bonds)
Butyric acid	butanoic acid	4	0
Caproic Acid	hexanoic acid	6	0
Caprylic Acid	octanoic acid	8	0
Capric Acid	decanoic acid	10	0
Lauric Acid	dodecanoic acid	12	0
Myristic Acid	tetradecanoic acid	14	0
Palmitic Acid	hexadecanoic acid	16	0
Palmitoleic Acid	9-hexadecenoic acid	16	1
Vaccenic Acid	11-octadecenoic acid	18	1

ตารางที่ 2 (ต่อ)

ชื่อทั่วไป (Common Name)	ชื่อทางวิทยาศาสตร์ (Scientific Name)	จำนวนคาร์บอน (Carbon Atoms)	จำนวนพันธะคู่ (Double Bonds)
Ricinoleic acid	12-hydroxy-9-octadecenoic acid	18	1
Oleic Acid	9-octadecenoic acid	18	1
Linoleic Acid	9,12-octadecadienoic acid	18	2
Stearic Acid	octadecanoic acid	18	0

ที่มา: บริษัท พาราไซแอนติฟิค จำกัด (2547)

ตารางที่ 3 องค์ประกอบกรดไขมันในน้ำมันพืชชนิดต่างๆ

น้ำมัน	ปริมาณกรดไขมัน (โมลเปอร์เซ็นต์)						อื่นๆ
	16:0	16:1	18:0	18:1	18:2	18:3	
Cotton seed	28.7	0	0.9	13.0	57.4	0	0
Poppy seed	12.6	0.1	4.0	22.3	60.2	0.5	0
Rapeseed	3.5	0	0.9	64.1	22.3	8.2	0
Safflower seed	7.3	0	1.9	13.6	77.2	0	0
Sunflower seed	6.4	0.1	2.9	17.7	72.9	0	0
Sesame seed	13.1	0	3.9	52.8	30.2	0	0
Linseed	5.1	0.3	2.5	18.9	18.1	55.1	0
Wheat grain	20.6	1.0	1.1	16.6	56.0	2.9	1.8
Palm	42.6	0.3	4.4	40.5	10.1	0.2	1.1
Corn marrow	11.8	0	2.0	24.8	61.3	0	0.3
Castor	1.1	0	3.1	4.9	1.3	0	89.6
Tallow	23.3	0.1	19.3	42.4	2.9	0.9	2.9
Soybean	13.9	0.3	2.1	23.2	56.2	4.3	0
Bay laurel leaf	25.9	0.3	3.1	10.8	11.3	17.6	31.0
Peanut kernel	11.4	0	2.4	48.3	32.0	0.9	4.0

ตารางที่ 3 (ต่อ)

น้ำมัน	ปริมาณกรดไขมัน (โมลเปอร์เซ็นต์)						
	16:0	16:1	18:0	18:1	18:2	18:3	อื่นๆ
Almond kernel	6.5	0.5	1.4	70.7	20.0	0	0.9
Olive kernel	5.0	0.3	1.6	74.7	17.6	0	0.8
Coconut	9.7	0.1	3.0	6.9	2.2	0	65.7
Hazelnut kernel	4.9	0.2	2.6	83.9	8.5	0.2	0
Walnut kernel	7.2	0.2	1.9	18.5	56.0	16.2	0

ที่มา: Goering *et al.* (1982)

ปาล์มน้ำมัน

ปาล์มน้ำมันเป็นไม้ยืนต้นมีถิ่นกำเนิดทางตะวันตกของทวีปแอฟริกา เป็นพืชที่ให้ผลผลิตน้ำมันต่อหน่วยพื้นที่สูงกว่าพืชน้ำมันทุกชนิด (640-800 กิโลกรัมน้ำมันต่อพื้นที่ปลูก 1 ไร่) และปาล์มน้ำมันเป็นพืชที่สามารถปลูกได้ตลอดปี เริ่มให้ผลผลิตเมื่ออายุ 2 ปีครึ่งถึง 3 ปี และเก็บเกี่ยวผลผลิตได้นานถึง 25 ปี โดยที่ปาล์มน้ำมันมีการผลิตทั่วโลกเป็นอันดับสองคือประมาณ 25 เปอร์เซ็นต์ หรือคิดเป็นปริมาณผลิต 23.355 ล้านตันรองจากน้ำมันถั่วเหลือง ซึ่งมีสัดส่วนประมาณ 28 เปอร์เซ็นต์ โดยมีประเทศมาเลเซียเป็นผู้ผลิตรายใหญ่ที่สุดของโลก (52 เปอร์เซ็นต์) และอินโดนีเซียเป็นอันดับสอง (32 เปอร์เซ็นต์) ส่วนประเทศไทยถึงแม้จะมีอันดับการผลิตอยู่อันดับที่ 4 ของโลก แต่มีสัดส่วนการผลิตเพียง 2 เปอร์เซ็นต์เท่านั้น คือ มีพื้นที่ปลูกถึงปี 2547 ประมาณ 2.19 ล้านไร่ และมีผลผลิตปาล์มน้ำมัน 0.68 ล้านตัน และผลิตน้ำมันปาล์มดิบได้ 775,000 ตัน

สำหรับกลุ่มพืชที่ให้น้ำมันที่สำคัญในตลาดโลกมี 4 ชนิด คือ ปาล์มน้ำมัน ถั่วเหลือง เมล็ดเรพและทานตะวัน เมื่อทำการเปรียบเทียบราคาค้นทุนการผลิต ปาล์มน้ำมันมีต้นทุนผลิตที่ต่ำ ผลผลิตต่อพื้นที่สูง ราคาซื้อขายในตลาดไม่สูง เนื่องจากปาล์มน้ำมันเป็นพืชยืนต้น มีโอกาสเสี่ยงต่อผลกระทบของภัยธรรมชาติน้อย เมื่อเทียบกับพืชอายุสั้นกว่า ซึ่งสามารถผลิตน้ำมันได้ในปริมาณมาก เพื่อรองรับความต้องการของประชากรโลกที่เพิ่มขึ้นได้ จากหลักฐานกล่าวว่ามีผู้นำมาปลูกในเอเชียครั้งแรก ที่สวน พฤษศาสตร์โบเกอร์ในอินโดนีเซีย ในปี พ.ศ. 2391 ต่อมาผู้นำไปปลูกใน

ตอนเหนือของสุมาตรา ปรากฏว่าให้ผลผลิตสูง จึงมีการปลูกในเชิงการค้า และประเทศมาเลเซียได้กลายเป็นประเทศส่งออกน้ำมันปาล์มมากที่สุด (ศักดิ์ศิลป์ และคณะ, 2541)

ในปาล์มน้ำมันหนึ่งทะลายจะประกอบไปด้วย ก้านทะลาย ช่อทะลายย่อย ลักษณะผลปาล์ม แสดงดังภาพที่ 6 และผลในแต่ละผลประกอบไปด้วยเปลือกชั้นนอก เปลือกชั้นกลางหรือกาบ ซึ่งทั้ง 2 ส่วนนี้เป็นส่วนที่มีน้ำมัน และมีชั้นในสุดเป็นกะลา (Endocarp) ถัดจากส่วนนี้ไปเป็นส่วนของเมล็ดซึ่งประกอบไปด้วยเนื้อในเมล็ด (Kernel) ที่มีน้ำมันอยู่เช่นเดียวกัน และคัพพะ (Embryo) แสดงดังภาพที่ 7 สำหรับผลปาล์มน้ำมัน สามารถให้ผลผลิตน้ำมัน 2 ชนิด คือ

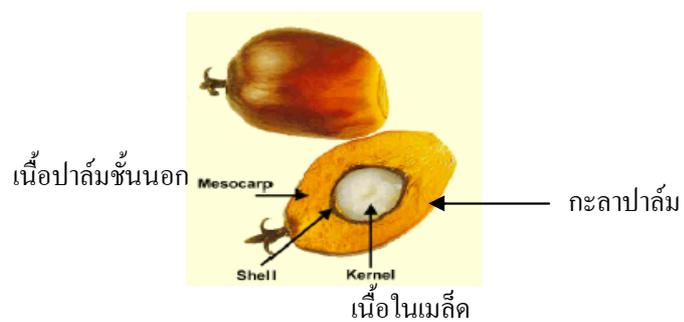
1. น้ำมันปาล์มดิบ (Crude Palm Oil) สกัดได้จากส่วนเปลือกสดของผลปาล์มน้ำมัน
2. น้ำมันเมล็ดในปาล์ม (Crude Palm Kernel Oil) สกัดได้จากเมล็ดในของผลปาล์มน้ำมัน

สำหรับปาล์มน้ำมันนั้นจะให้ผลปีละประมาณ 12-15 ทะลาย ออกผลปีละ 2 ครั้ง ประมาณ 6 เดือนต่อครั้ง ปาล์มน้ำมันเจริญได้ดีในที่ราบต่ำของภูมิภาคแถบศูนย์สูตร ใกล้เคียงทะเลน้ำไม่ขัง เช่น ดินเหนียวปนทราย ปลูกขึ้นน้ำได้ดี อากาศถ่ายเทสะดวก อุณหภูมิเฉลี่ย 23-29 องศาเซลเซียส ความชื้น 70-80 เปอร์เซ็นต์ องค์ประกอบของกรดไขมันในน้ำมันเมล็ดในปาล์มกับน้ำมันปาล์ม และคุณสมบัติต่างๆของกรดไขมัน แสดงดังตารางที่ 4



ภาพที่ 6 ลักษณะของผลปาล์มสด

ที่มา: กระทรวงพลังงาน (2550)



ภาพที่ 7 ส่วนประกอบของผลปาล์ม

ที่มา: กระทรวงพลังงาน (2550)

ตารางที่ 4 องค์ประกอบของกรดไขมันในน้ำมันเมล็ดในปาล์มกับน้ำมันปาล์มและคุณสมบัติต่างๆ
ของกรดไขมัน

ชื่อสามัญ	มวล โมเลกุล	น้ำมันเมล็ดใน ปาล์ม(ร้อยละ โดยมวล)	น้ำมันปาล์ม (ร้อยละโดย มวล)	จุดหลอมเหลว (องศา เซลเซียส)	จุดเดือด (องศา เซลเซียส)
Caprylic acid	144.22	3-6	-	16.3	239.7
Lauric acid	200.32	40-52	-	44.0	298.0
Myristic acid	228.38	14-18	0-2	54.4	210.6
Palmitic acid	256.43	6-10	38-48	62.9	228.7
Stearic acid	284.49	1-4	3-6	69.6	245.9
Arachidic acid	312.54	-	0-1	-5.0	223.0
Oleic acid	282.47	9-16	38-44	16.3	224.0
Linoleic acid	280.45	1-3	9-12	75.4	
มวลโมเลกุล เฉลี่ย		218.25-222.08	270.61-271.15		
จุด หลอมเหลว (องศา เซลเซียส)		24-26	27-50		

ที่มา: Wing *et al.* (2003)

ไบโอดีเซล

ไบโอดีเซลหรือแอลคิลเอสเทอร์เป็นผลิตภัณฑ์หลักที่ได้จากการทำปฏิกิริยาของน้ำมันจากพืชหรือไขมันจากสัตว์ ผ่านกระบวนการทรานส์เอสเทอริฟิเคชันด้วยแอลกอฮอล์ โดยอาศัยตัวเร่งปฏิกิริยา คุณสมบัติของน้ำมันไบโอดีเซลจะแตกต่างกันขึ้นอยู่กับองค์ประกอบของกรดไขมันที่มีขนาดเล็กหรือใหญ่และจำนวนพันธะคู่ที่ไม่เท่ากัน

ไบโอดีเซลเหมาะที่จะเป็นเชื้อเพลิงทางเลือกสำหรับประเทศไทย เนื่องจากประเทศไทยเป็นประเทศเกษตรกรรมและมักจะประสบปัญหาเรื่องราคาผลผลิตตกต่ำ ประเทศไทยมีแหล่งวัตถุดิบที่ใช้ในการผลิตไบโอดีเซลอยู่เป็นจำนวนมาก หากนำผลผลิตทางการเกษตรเหล่านั้นมาแปรรูปเป็นน้ำมันไบโอดีเซลเพื่อใช้ทดแทนน้ำมันดีเซลในภาคเกษตร อย่างน้อยก็เป็นการลดค่าใช้จ่ายของภาครัฐในการนำเข้าเชื้อเพลิงจากต่างประเทศก็ทั้งยังช่วยให้พืชผลทางการเกษตรมีราคาสม่ำเสมออีกด้วย

นอกจากเรื่องการผลิตการนำเข้าน้ำมันจากต่างประเทศแล้ว ไบโอดีเซลยังช่วยลดมลภาวะของอากาศ ช่วยลดมลพิษแม้ว่าจะผสมเข้ากับเชื้อเพลิงปิโตรเลียมและบรรเทาภาวะโลกร้อน ไบโอดีเซลนับเป็นหนึ่งในเชื้อเพลิงไม่ก็ชนิดที่สามารถทำงานร่วมกับดีเซลธรรมดาได้ซึ่งนับเป็นข้อดีอีกอย่างหนึ่ง (กระทรวงพลังงาน, 2547)

1. กระบวนการผลิตไบโอดีเซล

วิธีการทั่วไปที่ปัจจุบันใช้ในการผลิตไบโอดีเซลทั้งที่เป็นแบบยากและง่าย ในแบบที่ง่ายจะได้มาจากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันหรือการผสมโดยตรง (Ma and Hanna, 1999) ตัวอย่างการผลิตมีดังต่อไปนี้

1.1 การใช้โดยตรงและการผสม (Direct use and Blending)

การใช้โดยตรงและการผสม คือ การนำน้ำมันพืชบริสุทธิ์หรือการผสมน้ำมันพืชบริสุทธิ์กับน้ำมันดีเซลในอัตราส่วนต่าง ๆ ก่อนนำไปใช้กับเครื่องยนต์ดีเซล ซึ่งอาจส่งผลกระทบต่อเครื่องยนต์เนื่องจากปัญหาจากการที่น้ำมันพืชมีความหนืดสูง อัตราส่วนของกรดและปริมาณ

กรดไขมัน การเกิดยางเหนียวจากปฏิกิริยาออกซิเดชัน ปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชันระหว่างการเก็บรักษาและการเผาไหม้ อย่างไรก็ตามยังต้องใช้เวลาเพื่อศึกษาปัญหาของเครื่องยนต์ในระยะยาว (Agarwal, 2007)

1.2 ไมโครอิมัลชัน (Microemulsion)

ไมโครอิมัลชันเป็นวิธีที่ช่วยแก้ปัญหาเกี่ยวกับความหนืดสูงของน้ำมันพืชโดยใช้ตัวทำละลาย เช่น เมทานอล เอทานอล และ 1-บิวทานอล เนื่องจากไมโครอิมัลชัน คือ คอลลอยด์ที่กระจายตัวในสถานะสมดุลโดยอนุภาคในคอลลอยด์นั้นส่วนมากมีขนาดอยู่ในช่วง 1 – 150 นาโนเมตรซึ่งเกิดจากการก่อรูปขึ้นเองจากของเหลวสองชนิดที่ไม่ละลายซึ่งกันและกัน ซึ่งน้ำมันที่ผลิตจากวิธีนี้จะมีลักษณะสมบัติใกล้เคียงกับน้ำมันดีเซล แต่มีค่าซีเทนและค่าความร้อนต่ำกว่า (Srivastava and Prasad, 2000)

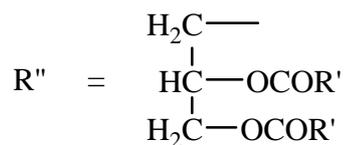
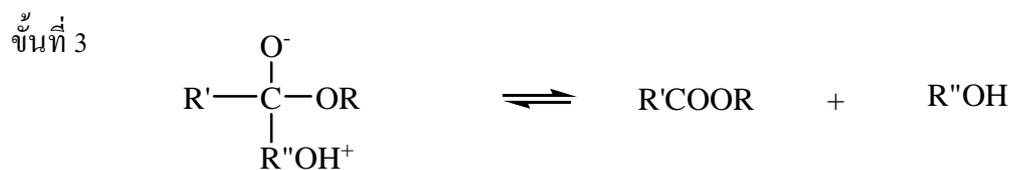
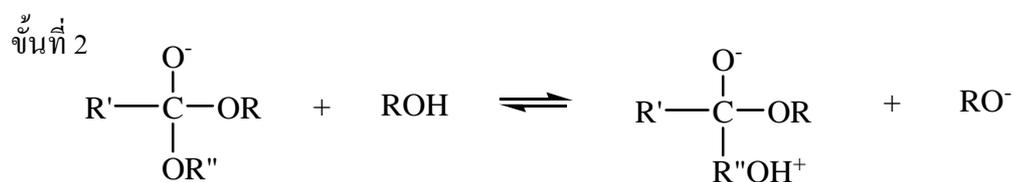
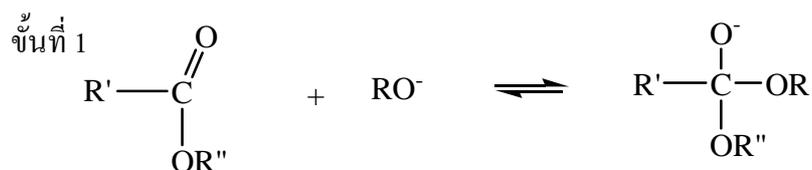
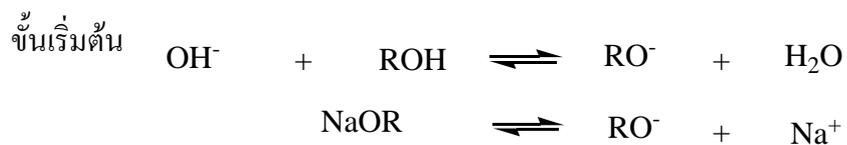
1.3 กระบวนการแตกสลายด้วยความร้อน (Thermalcracking or Pyrolysis)

การแตกตัวด้วยความร้อนของไขมันมีการศึกษามานานกว่า 100 ปี โดยเฉพาะในพื้นที่ที่ขาดแคลนแหล่งผลิตปิโตรเลียม การแตกตัวด้วยความร้อน เป็นการเปลี่ยนสารหนึ่งไปเป็นอีกสารหนึ่งที่มีขนาดโมเลกุลเล็กลงโดยใช้ความร้อนเพียงอย่างเดียวหรือใช้ความร้อนร่วมกับตัวเร่งปฏิกิริยาในสภาพที่ไม่มีออกซิเจน ซึ่งใช้ความร้อนที่อุณหภูมิ 550-850 องศาเซลเซียส วัตถุประสงค์ที่สามารถนำมาใช้ในกระบวนการแตกสลายด้วยความร้อนได้แก่ น้ำมันพืช ไขมันสัตว์ กรดไขมันธรรมชาติ และเมทิลเอสเทอร์ของกรดไขมันเป็นต้น ผลิตภัณฑ์ที่เกิดขึ้นมีหลายแบบเช่น แอลเคน แอลคีน อะโรมาติกและกรดคาร์บอกซิลิกในขณะที่เกิดปฏิกิริยาจะมีการปล่อยออกซิเจนออกมา ซึ่งเป็นผลดีต่อสิ่งแวดล้อม จากรายงานส่วนใหญ่พบว่า การแตกตัวด้วยความร้อนของไตรกลีเซอไรด์สามารถทำให้เกิดผลิตภัณฑ์ได้ดีและสามารถนำน้ำมันไบโอดีเซลที่ได้ไปใช้กับเครื่องยนต์ดีเซล การผลิตไบโอดีเซลด้วยการแตกตัวด้วยความร้อนพบว่าน้ำมันมีความหนืดต่ำและมีค่าซีเทนสูง แต่อย่างไรก็ตามอุปสรรคในการแตกตัวของไขมันมีราคาค่อนข้างสูงและผลิตภัณฑ์ที่ได้จากการแตกตัวด้วยความร้อนมีปริมาณน้อย (Fukuda *et al.*, 2001) กลไกของกระบวนการแตกสลายด้วยความร้อน แสดงดังภาพที่ 8

ในกระบวนการทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันส่วนใหญ่จะใช้เมทานอลและเอทานอล สำหรับแอลกอฮอล์ที่สามารถนำมาใช้ได้เช่น เมทานอล เอทานอล โพรพานอล บิวทานอลและเอมิลแอลกอฮอล์ (Amyl alcohol) เนื่องจากว่าคุณสมบัติทางเคมีและกายภาพที่ดีคือ ความเป็นขั้ว (Polar) และสายโซ่ของแอลกอฮอล์ที่สั้น จึงทำให้เกิดปฏิกิริยาเกิดขึ้นได้ดีและเข้าทำปฏิกิริยาได้เร็ว (Doell *et al.*, 2008) การนำตัวเร่งปฏิกิริยามาใช้ในกระบวนการทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันจะช่วยทำให้การเกิดปฏิกิริยาเคมีและผลิตภัณฑ์เกิดได้ดีขึ้น (Fangrui and Milford, 1999) โดยชนิดของตัวเร่งปฏิกิริยาที่นิยมใช้กันดังนี้

1.4.1 ตัวเร่งปฏิกิริยาชนิดเบส

ตัวเร่งปฏิกิริยาชนิดเบสที่ใช้กัน โดยทั่วไปคือ โซเดียมไฮดรอกไซด์หรือโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ โดยน้ำมันที่ใช้จะเป็นชนิดใดก็ได้ เช่นน้ำมันดิบ (Crude oil) หรือน้ำมันที่ใช้แล้ว เป็นต้น ในขั้นเริ่มต้น (Pre-step) ของการทำปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ควรเปลี่ยนจากรูปเบส (NaOH, KOH) ไปเป็นรูปของสารประกอบอัลคอกซี (Alkoxy) โดยการทำปฏิกิริยากับเมทานอลหรือเอทานอล กลไกการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของไตรกลีเซอไรด์กับแอลกอฮอล์โดยใช้เบสเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา มี 3 ขั้นตอน แสดงดังภาพที่ 9

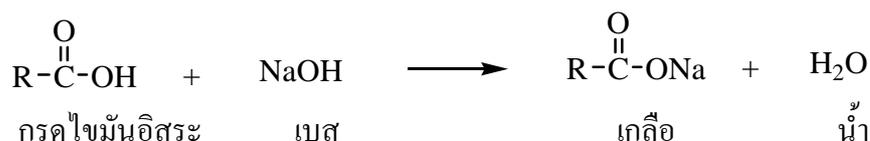


ภาพที่ 9 กลไกการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของไตรกลีเซอไรด์กับแอลกอฮอล์โดย
ใช้เบสเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา

ที่มา: Schuchardt *et al.* (1996)

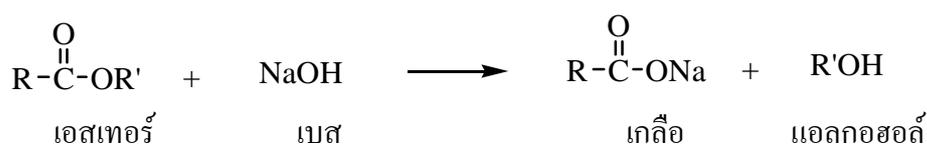
1.4.1.1 ปฏิกิริยาสaponification

ปฏิกิริยาสaponification เป็นปฏิกิริยาผลิตสบู่ สามารถเกิดขึ้นได้จากการที่สารตั้งต้นคือ กรดไขมันอิสระกับสารละลายเบส โดยมีความร้อนในปฏิกิริยาหรือเกิดจากสารตั้งต้นคือ เอสเทอร์กับสารละลายเบส โดยมีน้ำร่วมในปฏิกิริยา ดังภาพที่ 10 และ 11 ตัวเร่งปฏิกิริยาชนิดเบสจะเร่งปฏิกิริยาให้เกิดเร็วกว่า เมื่อเทียบกับการใช้กรดเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา อีกทั้งยังให้ผลิตภัณฑ์เมทิลเอสเทอร์ในปริมาณที่สูงด้วย (Fangrui and Milford, 1999) ส่วนข้อควรระวังสำหรับตัวเร่งปฏิกิริยาชนิดเบสคือ ถ้าพบว่า มีน้ำและกรดในน้ำมันในระหว่างการทำปฏิกิริยาจะทำให้มีสบู่เกิดขึ้นแทนที่จะได้น้ำมัน ไบโอดีเซลเป็นผลิตภัณฑ์และการแยกชั้นของเมทิลเอสเทอร์กับกลีเซอรอลจะทำให้ยากขึ้น ทำให้ต้องกำจัดสบู่เหล่านั้นออกอีกด้วย เพราะฉะนั้นวิธีที่เหมาะสมสำหรับน้ำมันที่มีน้ำและกรดไขมันอิสระ คือ เลือกใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาชนิดกรดแทนชนิดเบส (Keim, 1945)



ภาพที่ 10 ปฏิกิริยาสaponification จากกรดไขมันอิสระโดยความร้อน

ที่มา: Graham and Fryhle (2004)

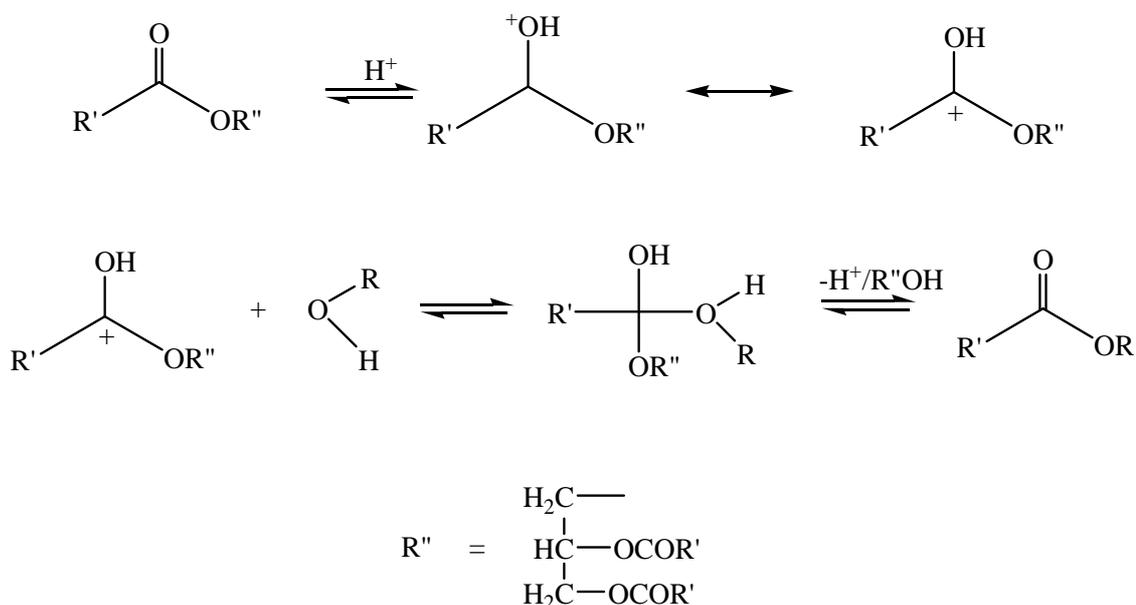


ภาพที่ 11 ปฏิกิริยาสaponification จากเอสเทอร์ในปฏิกิริยาที่มีน้ำเป็นองค์ประกอบ

ที่มา: Graham and Fryhle (2004)

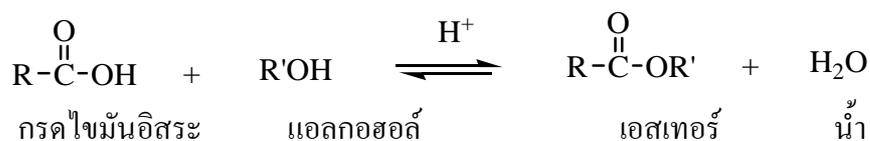
1.4.2 ตัวเร่งปฏิกิริยาชนิดกรด (Acid catalyst)

ตัวเร่งปฏิกิริยาชนิดกรด (Acid catalyst) จะเร่งการเกิดทั้งปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันและปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชัน (Esterification) กรดที่ใช้กัน โดยทั่วไปคือกรดซัลฟิวริก (H_2SO_4) กรดฟอสฟอริก กรดไฮโดรคลอริก เป็นต้น (Khan, 2002) ตัวเร่งปฏิกิริยาชนิดนี้จะทำให้ได้ผลผลิตคือน้ำมัน ไบโอดีเซลในปริมาณมาก แต่ปฏิกิริยาจะเกิดช้ามากอาจจะใช้เวลามากกว่า 1 วัน ปฏิกิริยาจึงจะเกิดอย่างสมบูรณ์ แต่ตัวเร่งปฏิกิริยาชนิดกรดสามารถใช้ได้ดีกับน้ำมันที่มีส่วนประกอบของกรดไขมันอิสระและน้ำในปริมาณสูงได้ เช่น ในน้ำมันที่ใช้แล้ว เป็นต้น (Fukuda *et al.*, 2001) กลไกการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของไตรกลีเซอไรด์กับแอลกอฮอล์โดยใช้กรดเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา แสดงดังภาพที่ 12 สำหรับปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันของกรดไขมันอิสระที่มีปริมาณสูงในน้ำมันเริ่มต้นกับแอลกอฮอล์ โดยมีกรดเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา แสดงดังภาพที่ 13



ภาพที่ 12 กลไกการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของไตรกลีเซอไรด์กับแอลกอฮอล์โดยใช้กรดเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา

ที่มา: Schuchardt *et al.* (1996)



ภาพที่ 13 ปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันระหว่างกรดไขมันอิสระกับแอลกอฮอล์

ที่มา: Khan (2002)

1.4.3 ตัวเร่งปฏิกิริยาทางชีวภาพ (Enzyme catalyst)

ตัวเร่งปฏิกิริยาทางชีวภาพที่นิยมใช้คือ เอนไซม์ไลเปส (Lipase) ซึ่งเป็นเอนไซม์ไฮโดรไลติก ใช้สะดวกไม่อันตรายหากนำมาตรึงบนวัสดุจะมีสภาพค่อนข้างคงตัว เสถียรภาพยาวนานกลับมาใช้ใหม่ได้และไม่ต้องการโค-เอนไซม์ (Co-enzyme) อื่นร่วมในการทำปฏิกิริยา (Khan, 2002) ซึ่งเอนไซม์ไลเปสจะเร่งปฏิกิริยาในกระบวนการไฮโดรไลซิสของกลีเซอรอล แอลกอฮอล์ไลซิส (Alcoholysis) และ แอซิโดไลซิส (Acidolysis) ใช้เอนไซม์ไลเปสเร่งปฏิกิริยาจะไม่มีของเสียออกมาจากกระบวนการ ไม่ต้องล้างไบโอดีเซลเพื่อเอาตัวเร่งปฏิกิริยาออก ข้อเสียคือให้ผลผลิตน้อยเมื่อเทียบกับตัวเร่งปฏิกิริยาชนิดเบส

1.4.4 ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบวิวิธพันธุ์ (Heterogeneous or Solid catalyst)

เป็นการผลิตไบโอดีเซลด้วยกระบวนการทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันโดยตัวเร่งปฏิกิริยาจะไม่ละลายเป็นเนื้อเดียวกัน (Heterogeneous) กับสารตั้งต้นทั้งสองตัว ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบวิวิธพันธุ์ที่นิยมใช้ได้แก่ $(\text{Zn}_5(\text{OH})_8(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O})$, ZrO_2 , ZnO , $\text{KNO}_3/\text{ZrO}_2$, KNO_3/KL , Zeolite และ MgO เป็นต้น ตัวเร่งปฏิกิริยาเหล่านี้ไม่ทำให้เกิดสนุ่และง่ายต่อการแยกเอาตัวเร่งปฏิกิริยาออกจากไบโอดีเซลและใช้ได้น้ำมันที่มีน้ำปนเปื้อนในการทำปฏิกิริยาได้ (Cordeiro *et al.*, 2008; Jitputti *et al.*, 2006)

2. ปัจจัยที่มีผลต่อปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน

2.1 ผลของอุณหภูมิในการทำปฏิกิริยา

อุณหภูมิมีผลอย่างมากต่อการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน (Fangrui and Milford, 1999) กล่าวว่ายิ่งอุณหภูมิสูงมากขึ้น การเกิดปฏิกิริยาก็จะเร็วตามไปด้วย ซึ่งจะเกี่ยวข้องกับโดยตรงกับ เวลาที่ใช้ในการทำปฏิกิริยา คือ อุณหภูมิสูงระยะเวลาที่จะทำให้ปฏิกิริยาเกิดเสร็จสมบูรณ์ก็จะสั้นเมื่อเทียบกับอุณหภูมิต่ำระยะเวลาที่จะทำให้ปฏิกิริยาเกิดเสร็จสมบูรณ์ก็จะนาน (Narvaez *et al.*, 2007) ศึกษาการทำปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์ม ใช้โซเดียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ที่ 60 องศาเซลเซียส เวลา 1 ชั่วโมง ปฏิกิริยาก็เสร็จสมบูรณ์ ในขณะที่ 50 องศาเซลเซียส ต้องใช้เวลามากกว่า 2 ชั่วโมง ปฏิกิริยาจึงเสร็จสมบูรณ์แต่ข้อจำกัดของอุณหภูมิ คือ จะต้องไม่เกินจุดเดือดของ ชนิดแอลกอฮอล์ที่ใช้ เช่น ใช้เมทานอล ที่ความดันบรรยากาศ อุณหภูมิควรไม่เกิน 70 องศาเซลเซียส

2.2 ชนิดปริมาณตัวเร่งปฏิกิริยา

ตัวเร่งปฏิกิริยาที่ใช้ในปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันมีอยู่หลายแบบ เช่น กรด เบส เอนไซม์ น้ำมันเริ่มต้นที่มีน้ำและกรดไขมันอิสระปนอยู่น้อยมาก เหมาะกับการใช้เบส เช่น โซเดียมไฮดรอกไซด์ หรือโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา มีการศึกษาหลายงานวิจัยของ (Vicente *et al.*, 2006); (Encinar *et al.*, 2007) พบว่าปริมาณในช่วงที่เหมาะสมเท่ากับ 0.5-1.5 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก ยิ่งปริมาณตัวเร่งปฏิกิริยามาก การเกิดปฏิกิริยาก็เร็วเช่นเดียวกันและให้ปริมาณเมทิลเอสเทอร์ 90-97 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก แต่อย่างไรก็ตามหากเพิ่มปริมาณตัวเร่งปฏิกิริยาไปมากกว่านี้ก็ไม่ทำให้ได้ผลผลิตไปมากกว่านี้มากนักมีแต่จะสิ้นเปลืองและยากต่อการกำจัดความเป็นเบสของไบโอดีเซล น้ำมันที่มีส่วนประกอบของกรดไขมันอิสระและน้ำในปริมาณสูง เช่น น้ำมันที่ใช้แล้ว ตัวเร่งปฏิกิริยาชนิดกรดเหมาะสมและใช้ได้ดีกว่า (Fangrui and Milford, 1999)

2.3 ผลของอัตราการกวนผสม (Mixing rate)

น้ำมันและแอลกอฮอล์เป็นสารตั้งต้นที่ไม่ละลายกัน และเกิดการแยกชั้นกัน ในการทำปฏิกิริยาการกวนผสมจึงมีส่วนสำคัญเป็นอย่างมาก เพื่อให้สารตั้งต้นสองตัวกระจายและสัมผัสกันในระดับโมเลกุลได้ดีขึ้น Nouredini and Zhu, (1997) ได้ศึกษากระบวนการทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันถั่วเหลือง ศึกษาถึงปัจจัยของอัตราการกวนผสมที่อัตราการกวนผสมสูง พบว่าที่อัตราการกวนผสม 300 และ 600 รอบ/นาที ให้ค่าปริมาณเมทิลเอสเทอร์สูงสุดใกล้เคียงกัน ส่วนที่ 150 รอบ/นาที ให้ค่าปริมาณเมทิลเอสเทอร์ต่ำกว่า ที่ 300 และ 600 รอบ/นาที ณ เวลาเดียวกัน

2.4 ความชื้นและกรดไขมันอิสระ

ความชื้นและกรดไขมันอิสระจะมีผลเสีย เมื่อใช้เบสเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา เช่น โซเดียมไฮดรอกไซด์ โพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ และโซเดียมเมทอกไซด์ เป็นต้น เนื่องจากถ้าน้ำมันเริ่มต้นหรืออุปกรณ์มีน้ำปนเปื้อนมาจะเป็นสาเหตุทำให้เกิดสบู่ขึ้นระหว่างการทำปฏิกิริยาได้ โดยจะไปขัดขวางการเกิดปฏิกิริยา ทำให้สภาพความหนืดของน้ำมันเพิ่มขึ้น อีกทั้งจะไปรบกวนการแยกชั้นของกลีเซอรอลกับไบโอดีเซล นอกจากนี้ไบโอดีเซลที่ได้จะมีคุณภาพต่ำและมีความหนืดสูง (Kyu *et al.*, 2007)

2.5 ผลของอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อแอลกอฮอล์

ปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันเป็นปฏิกิริยาที่สามารถผันกลับได้ (Vicente *et al.*, 2006) ดังนั้นถ้าปริมาณแอลกอฮอล์มีมากพอ ก็จะช่วยขับเคลื่อนให้ปฏิกิริยาไปทางด้านขวามากขึ้น ทำให้ได้ปริมาณไบโอดีเซลมาก และยังยับยั้งการเกิดปฏิกิริยาย้อนกลับได้ด้วย หากใช้อัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอลเป็น 1:3 เมื่อปฏิกิริยาเกิดไประยะหนึ่งจะทำให้ไบโอดีเซลและกลีเซอรอลเกิดเพิ่มขึ้น แต่ปริมาณแอลกอฮอล์ลดลงส่งผลให้เกิดปฏิกิริยาย้อนกลับ ส่วนที่อัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอลเป็น 1:6 เป็นค่าที่ใช้กันมากในอุตสาหกรรมการผลิตไบโอดีเซลที่ทำให้ได้ไบโอดีเซล 98 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก (Fukuda *et al.*, 2001)

สเปกโทรสโคปี

สเปกโทรสโคปี เป็นวิชาที่ศึกษาถึงแรงกระทำ (Interaction) ระหว่างรังสีแม่เหล็กไฟฟ้า (Electromagnetic radiation) กับสาร ในปัจจุบันนี้ คำว่า สเปกโทรสโคปี มีความหมายกว้างขึ้น หมายถึงการแยก การตรวจวัดและการบันทึกการเปลี่ยนแปลงพลังงานที่เกิดกับนิวเคลียส อะตอม หรือโมเลกุล อันเป็นผลมาจากการดูดกลืน (Absorption) การเปล่ง (Emission) รังสีแม่เหล็กไฟฟ้า โดยอนุภาคเหล่านี้

ในปัจจุบันมีเครื่องมือชนิดต่างๆและเทคนิคที่ทันสมัยในการศึกษาสเปกโทรสโคปี เครื่องมือเหล่านี้ประกอบไปด้วยแหล่งกำเนิดรังสีที่แตกต่างกัน ขึ้นกับย่านสเปกตรัมรังสีแม่เหล็กไฟฟ้าที่ต้องการศึกษา เครื่องมือเหล่านี้จะแยกรังสีแม่เหล็กไฟฟ้าออกมาเป็นช่วงความถี่ต่างๆและวัดความถี่ที่อนุภาคต่างๆดูดกลืนและบันทึกข้อมูลออกมาเป็นสเปกตรัม

วิธีทางสเปกโทรสโคปีมีความสำคัญต่อการศึกษาโครงสร้างสารประกอบอินทรีย์มี 4 ประเภทคือ อัลตราไวโอเลต สเปกโทรสโคปี (Ultraviolet spectroscopy), อินฟราเรด สเปกโทรสโคปี (Infrared spectroscopy), นิวเคลียร์ แมกเนติกเรโซแนนซ์ สเปกโทรสโคปีและแมสสเปกโตรเมตรี

1. อัลตราไวโอเลต สเปกโทรสโคปี

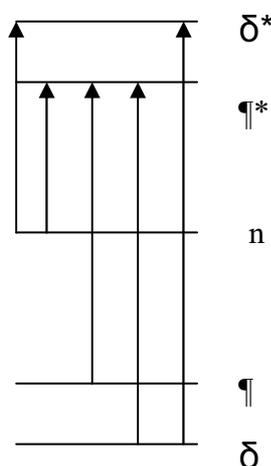
การดูดกลืนรังสีอัลตราไวโอเลตจะก่อให้เกิดการเปลี่ยนแปลงภาวะของอิเล็กตรอน (Electronic transition) โดยโมเลกุลของสารประกอบอินทรีย์จะดูดกลืนรังสีที่มีความยาวคลื่นใด ขึ้นอยู่กับว่าอิเล็กตรอนภายในโมเลกุลถูกยึดไว้แน่นเพียงใด

1.1 การเปลี่ยนภาวะของอิเล็กตรอน (Electronic transition)

การดูดกลืนรังสีอัลตราไวโอเลตจะก่อให้เกิดการเปลี่ยนภาวะของอิเล็กตรอนใน π -orbital และ n-orbital จากภาวะปกติ (Ground state) ไปสู่สภาวะเร้า (Excited state) ทำให้เกิดผลต่างของพลังงานระหว่างระดับพลังงานของอิเล็กตรอน (Electron energy level) 2 ระดับ แสดงดังภาพที่ 14 ในโมเลกุลส่วนใหญ่ Occupied molecular orbital หรือ Bonding molecular orbital ที่มีพลังงานต่ำสุดคือ σ -orbital ถัดขึ้นไปคือ π -orbital และ nonbonding orbital (n-orbital) ซึ่งมีพลังงานสูงขึ้น

ตามลำดับ ส่วน unoccupied หรือ antibonding molecular orbital ซึ่งได้แก่ π^* และ δ^* เป็นออร์บิทัลที่มีพลังงานสูงขึ้นอีก (Pavia and Lampman, 2001) ในสารประกอบอินทรีย์ทั้งหมดยกเว้นอัลเคน อาจเกิดการเปลี่ยนแปลงของอิเล็กตรอนที่สำคัญมีดังนี้

n	→	π^*	เกิดในสารประกอบคาร์บอนิล
n	→	δ^*	เกิดในสารประกอบที่มีออกซิเจน, ไนโตรเจน, ซัลเฟอร์, และแฮโลเจน
π	→	π^*	เกิดในสารประกอบอัลคีน, คาร์บอนิล, อังไคน์, เอโซ
δ	→	π^*	เกิดในสารประกอบคาร์บอนิล
δ^*	→	δ^*	เกิดในสารประกอบอัลเคน



ภาพที่ 14 ระดับพลังงานของอิเล็กตรอนและการเปลี่ยนแปลงสถานะอิเล็กตรอน
ที่มา: Pavia and Lampman (2001)

2. อินฟราเรดสเปกโตรสโคปี

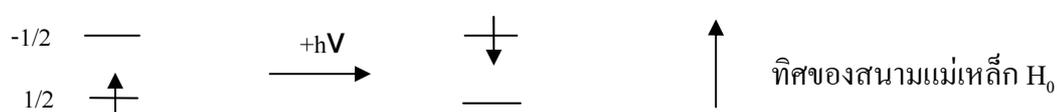
อะตอมที่อยู่ในโมเลกุลไม่ได้อยู่นิ่งแต่จะมีการสั่นอยู่ตลอดเวลา การสั่นของโมเลกุลแบบพื้นฐาน มีอยู่ 2 แบบคือ การยืด (Stretching) และการงอ (Bending) การสั่นแบบยืดได้แก่ การสั่นของสองอะตอมใดๆไปตามแกนของพันธะที่เชื่อมระหว่างอะตอมทั้งสอง ซึ่งทำให้ระยะห่างระหว่างอะตอมเพิ่มขึ้นหรือลดลงส่วนการสั่นแบบงอได้แก่การสั่นอะตอมซึ่งมีผลทำให้ตำแหน่งอะตอมเปลี่ยนแปลงไปจากแกนของพันธะเดิม เมื่อโมเลกุลดูดกลืนรังสีอินฟราเรดที่มีความถี่ตรงกับความถี่ของการสั่นพันธะในโมเลกุลทำให้โมเลกุลอยู่ในสถานะกระตุ้นและ

โมเลกุลที่อยู่ในสถานะกระตุ้นกลับคืนสู่สภาวะปกติพลังงานที่โมเลกุลดูดกลืนไปจะออกมาอยู่ในรูปความร้อน ในบรรดาการสั่นที่เกิดขึ้นทั้งหมด มีเพียงการสั่นที่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงไดโพลโมเมนต์ในโมเลกุลเท่านั้นจะทำให้เกิดการดูดกลืนรังสีอินฟราเรดได้ เราเรียกการสั่นชนิดนี้ว่า Infrared active ส่วนโมเลกุลที่ประกอบด้วยพันธะที่สมมาตร (Symmetry) เช่น H_2 , N_2 และ Cl_2 จะไม่มีแถบดูดกลืนรังสีอินฟราเรดสเปกตรัม เนื่องจากการสั่นของพันธะเหล่านี้ไม่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงไดโพลโมเมนต์ (Dipole moment) แต่อย่างไรก็ตาม เรียกการสั่นชนิดนี้ว่า Infrared inactive

ย่านของรังสีอินฟราเรดอยู่ในช่วง $4000-12800 \text{ cm}^{-1}$ (2.5-0.78 ไมโครเมตร) เป็นย่านอินฟราเรดใกล้ ช่วง $200-4000 \text{ cm}^{-1}$ (5-2.5 ไมโครเมตร) เป็นย่านอินฟราเรดกลาง และช่วง $10-200 \text{ cm}^{-1}$ (1000-50 ไมโครเมตร) เป็นย่านอินฟราเรดไกล แต่ย่านอินฟราเรดในช่วง $667-4000 \text{ cm}^{-1}$ (15-2.5 ไมโครเมตร) เป็นย่านที่ถูกนำมาวิเคราะห์มากที่สุดเพราะให้ข้อมูลเกี่ยวกับการสั่นของพันธะในโมเลกุลซึ่งเป็นประโยชน์อย่างยิ่งต่อการหาสูตร โครงสร้าง สารประกอบอินทรีย์ (Pavia and Lampman, 2001)

3. นิวเคลียส แมกเนติกเรโซแนนซ์ สเปกโตรสโกปี

ปรากฏการณ์ของนิวเคลียส แมกเนติกเรโซแนนซ์ เกิดขึ้นเมื่อนิวเคลียสซึ่งวางตัวในทิศเดียวกับสนามแม่เหล็ก H_0 ถูกเหนี่ยวนำให้ดูดกลืนพลังงานโดยคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าและเปลี่ยนทิศทางการวางตัวไปทางตรงข้ามกับสนามแม่เหล็ก H_0 ภาวะการเปลี่ยนทิศทางสปินของนิวเคลียสที่เกิดขึ้นเรียกว่า เรโซแนนซ์ (Resonance) แสดงดังภาพที่ 15



ภาพที่ 15 ขบวนการดูดกลืนพลังงานโดยโปรตอน

ที่มา: Pavia and Lampman (2001)

โปรตอนที่อยู่ภายในโมเลกุลมีหลายชนิด เช่น โอลิฟินิกโปรตอน (Olefinic protons) อะโรมาติกโปรตอน (Aromatic proton) เป็นต้น ภายในโมเลกุลโปรตอนเหล่านี้จะถูกล้อมรอบโดยอิเล็กตรอนและอยู่ในสภาพแวดล้อมทางอิเล็กทรอนิกส์ (Electronic environment) ที่แตกต่างกัน อิเล็กตรอนเหล่านี้สามารถบดบังโปรตอนไว้เมื่ออยู่ในสนามแม่เหล็ก H_0 วาเลนซ์อิเล็กตรอน (Valence electron) ที่อยู่รอบๆ โปรตอนจะถูกเหนี่ยวนำให้เกิดการโคจรรอบๆ นิวเคลียสและอยู่ในระนาบตั้งฉากกับสนามแม่เหล็ก H_0 การโคจรของอิเล็กตรอนจะทำให้เกิดสนามแม่เหล็กใหม่ซึ่งมีทิศทางกับทิศของสนามแม่เหล็ก H_0 ดังนั้นความเข้มสนามแม่เหล็กที่โปรตอนได้รับจึงมีค่าน้อยกว่า H_0 นอกจากนี้โปรตอนแต่ละตัวในโมเลกุลยังได้รับความเข้มสนามแม่เหล็กไม่เท่ากันขึ้นกับความหนาแน่นอิเล็กตรอนที่อยู่รอบๆ โปรตอนนั้น ถ้าความหนาแน่นยิ่งมาก โปรตอนจะถูกบดบังมากขึ้น นั่นหมายความว่าโปรตอนเหล่านี้จะถูกคลื่นรังสีที่มีความถี่แตกต่างกัน ทำให้เกิดเรโซแนนซ์ที่ความถี่แตกต่างกันด้วยทำให้สามารถวิเคราะห์ความแตกต่างของสารแต่ละชนิดได้ (Pavia and Lampman, 2001)

4. แมสสเปกโตรเมตรี

แมสสเปกโตรเมตรีหรือแมสสเปกโตรสโคปี (Mass spectroscopy) เริ่มพัฒนามาจากการศึกษาเกี่ยวกับพฤติกรรมของไอออนประจุบวกในสนามแม่เหล็กและสนามไฟฟ้าต่อมาได้รับการปรับปรุงโดยศึกษาความสำคัญเกี่ยวกับความอุดมสมบูรณ์ (Abundance) ของไอโซโทปของธาตุต่างๆ

วิธีการของแมสสเปกโตรเมตรี เริ่มต้นจากการที่สารถูกระดมยิง (Bombard) ด้วยอิเล็กตรอนพลังงานสูง ทำให้อิเล็กตรอนหลุดออกจากโมเลกุลหนึ่งตัวเกิดเป็นไอออนที่มีประจุบวก เรียกว่า Molecular ion หรือ M^+ ไอออนตัวนี้สามารถเกิดการแตกหักต่อไปเป็น Fragment ion โดยที่ไอออนทั้งหมดจะถูกแยกตามอัตราส่วนของมวลต่อประจุ หรือ m/z ของสารชนิดนั้น อัตราส่วนของมวลต่อประจุของไอออนเหล่านี้จะถูกบันทึก ไอออนส่วนใหญ่เป็นไอออนประจุเดี่ยวการบันทึก m/z ของไอออนเหล่านี้ก็คือการบันทึกมวลของไอออนนั่นเอง ดังนั้นค่า m/z ของ Molecular ion จึงมีค่าเท่ากับน้ำหนักโมเลกุลของสารตัวอย่างลบด้วยน้ำหนักของอิเล็กตรอนที่หลุดออกไปซึ่งมีค่าน้อยมากจึงไม่คำนึงถึง นอกจากนี้สารตัวอย่างแต่ละชนิดมีรูปแบบของการแตกหักที่เป็นเอกลักษณ์ จะทำให้ไอออนมีค่า m/z เฉพาะซึ่งใช้เป็นข้อมูลในการหาสูตรโครงสร้างของสารตัวอย่างได้ (Pavia and Lampman, 2001)

งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

Guillén and Ruiz (2001) ได้ทำการศึกษาคุณภาพของน้ำมันมะกอกที่นำมาใช้บริโภค โดยนำเทคนิค $^1\text{H NMR}$ มาประยุกต์ใช้เพื่อวิเคราะห์หาปริมาณ ไคกลีเซอไรด์ที่ปนอยู่ในน้ำมัน คุณภาพของน้ำมันที่ดีควรมีปริมาณของ ไคกลีเซอไรด์ที่มีชนิดไอโซเมอร์แบบ 1,2-ไคกลีเซอไรด์ มากกว่า 1,3-ไคกลีเซอไรด์ ซึ่งเป็นปริมาณที่บ่งบอกถึงคุณภาพของการผลิตน้ำมันอันเนื่องมาจากกระบวนการผลิตและกระบวนการเก็บรักษาโดยพิจารณาได้จากอัตราส่วนของความสูงของสัญญาณโปรตอนบนกลีเซอรอล อีกทั้งวิธีนี้ยังสามารถศึกษาเสถียรภาพต่อการเกิดออกซิเดชันของน้ำมันมะกอกได้โดยพิจารณาจากสัญญาณโปรตอนที่อยู่บนหมู่เอซิล สำหรับสัญญาณโปรตอนบนกลีเซอรอลคาร์บอนของสารประกอบพวกเอซิลกลีเซอรอลสรุปได้ดังตารางที่ 5

ตารางที่ 5 แสดงสัญญาณ $^1\text{H NMR}$ บนกลีเซอรอลคาร์บอนของสารประกอบพวกเอซิลกลีเซอรอล

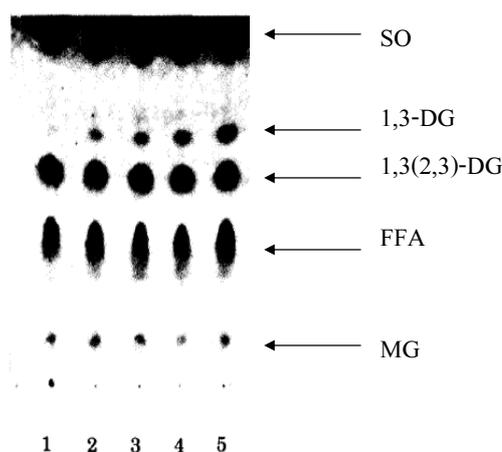
ชนิดสารประกอบ	ชนิดโปรตอน	δ (พีพีเอ็ม)
TG	H-1(3), $\text{CH}_2\text{O}-$	4.10–4.20/4.4.2–4.4
	H-2, $\text{CHO}-$	5.15–5.22
<i>sn</i> -1,2-DG	H-1, $\text{CH}_2\text{O}-$	4.13–4.18/4.29–4.34
	H-2, $\text{CHO}-$	5.06–5.2
	H-3, CH_2O	3.66–3.78
<i>sn</i> -1,3-DG	H-1(3), CH_2O	3.99–4.10
	H-2, $\text{CHO}-$	4.0–4.06
<i>sn</i> -1-MG	H-1, $\text{CH}_2\text{O}-$	4.10
	H-2, $\text{CHO}-$	3.8
	H-3, CH_2O	3.50–3.66
<i>sn</i> -2-MG	H-1(3), $\text{CH}_2\text{O}-$	3.9–4.0
	H-2, $\text{CHO}-$	4.9–5.0

ที่มา: Guillén and Ruiz (2001)

Jin *et al.* (2007) ทำการศึกษาปฏิกิริยาเมทาโนไลซิสของน้ำมันเมล็ดแรมไพโดยใช้เทคนิค ^1H NMR เพื่อศึกษาการเกิดไอโซเมอร์เซชันของหมู่เอซิลของไดกลีเซอไรด์และโมโนกลีเซอไรด์ สำหรับไตรกลีเซอไรด์ โปรตอนบนหมู่เอซิลจะให้สัญญาณเรโซแนนซ์อยู่ในช่วง 0.8-2.9 พีพีเอ็ม ในขณะที่โปรตอนที่เกาะอยู่บนคาร์บอนตำแหน่งที่ 1, 2 และ 3 ของหมู่กลีเซอรอลจะให้สัญญาณเรโซแนนซ์อยู่ในช่วง 4.0-5.2 พีพีเอ็ม ไตรกลีเซอไรด์เมื่อเกิดปฏิกิริยาเมทาโนไลซิสจะทำให้หมู่เอซิลหลุดออก ถ้าหมู่เอซิลหลุดออกหนึ่งหรือสองหมู่จะทำให้เกิดไดกลีเซอไรด์และโมโนกลีเซอไรด์ตามลำดับ ซึ่งจะทำให้โปรตอนที่เกาะอยู่บนคาร์บอนตำแหน่งที่ 1, 2 และ 3 ของกลีเซอรอลมีการเลื่อนตำแหน่งของการเรโซแนนซ์อยู่ในสนามที่แรงขึ้นเนื่องจากการสูญเสียหมู่เอซิลซึ่งเป็นหมู่ดึงอิเล็กตรอนทำให้สามารถวิเคราะห์ความแตกต่างระหว่างไดกลีเซอไรด์ที่มีหมู่เอซิลเกาะอยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 1 และ 2 (*sn*-1,2(2,3)-DG) กับ ไดกลีเซอไรด์ที่มีหมู่เอซิลเกาะอยู่บนกลีเซอรอลบนคาร์บอนตำแหน่งที่ 1 และ 3 (*sn*-1,3-DG) ของกลีเซอรอลได้ อีกทั้งยังสามารถวิเคราะห์ความแตกต่างระหว่างโมโนกลีเซอไรด์ที่มีหมู่เอซิลเกาะอยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 1 หรือ 2 (*sn*-1(3)MG, *sn*-2-MG) จากการวิเคราะห์ผลิตภัณฑ์ที่ได้หลังจากการทำปฏิกิริยาเมทาโนไลซิสพบว่าสารมัธยันตร์ที่สำคัญที่วิเคราะห์ได้ คือ *sn*-1,3-DG และไม่พบ *sn*-2-MG สรุปได้ว่าปฏิกิริยาเมทาโนไลซิสของน้ำมันเมล็ดแรมไพจะเกิดขึ้นที่คาร์บอนตำแหน่งที่สองของหมู่กลีเซอรอล

Kaieda *et al.* (1999) ทำการศึกษาการผลิตไบโอดีเซลจากน้ำมันถั่วเหลืองโดยใช้เอนไซม์ไลเปสจากรา *Rhizopus oryzae* เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา จากนั้นติดตามปฏิกิริยาโดยใช้เทคนิค Thin Layer Chromatography (TLC) โดยทำการเก็บสารตัวอย่างจากปฏิกิริยาที่เวลา 13, 38 และ 62 ชั่วโมง แล้วนำไปทดสอบบนแผ่น TLC ที่อิมมูบิลิซด์ด้วยตัวทำละลายซึ่งประกอบไปด้วยเฮกเซน 90 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร เอทิลเอซิเตต 10 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร และกรดอะซิติก 1 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตรเมื่อตัวทำละลายเคลื่อนที่ไปถึงปลายด้านบนบนแผ่น TLC นำแผ่น TLC ไปทำให้แห้ง จากนั้นพ่นด้วยสารละลายผสมของเมทานอลและกรดอะซิติกด้วยอัตราส่วน 1:1 โดยน้ำหนัก จากนั้นนำแผ่น TLC อบอุ่นให้แห้งจะปรากฏแถบสีชัดเจน จากผลการทดลองพบว่าระหว่างที่ปฏิกิริยาดำเนินไปนั้นหมู่เอซิลของไดกลีเซอไรด์สามารถเกิดการเคลื่อนย้ายหมู่ โดยเปลี่ยนสารประกอบจาก *sn*-1,2(2,3)-DG ไปเป็น *sn*-1,3-DG สรุปได้ว่าเอนไซม์ไลเปสชนิดนี้มี ความจำเพาะต่อกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 1 และ 3 บนโมเลกุลไตรกลีเซอไรด์

Du *et al.* (2005) ทำการศึกษาการผลิตไบโอดีเซลจากน้ำมันถั่วเหลืองและเมทานอลโดยใช้เอนไซม์ไลเปสจากรา *Thermomyces lanuginos* เป็นตัวเร่งปฏิกิริยาจากนั้นติดตามปฏิกิริยาโดยใช้เทคนิค TLC โดยทำการเก็บสารตัวอย่างจากปฏิกิริยาที่เวลา 1, 13, 20 38 และ 62 ชั่วโมงแล้วนำไปทดสอบบนแผ่น TLC ที่อิมมัวไปด้วยตัวทำละลายซึ่งประกอบไปด้วยคลอโรฟอร์ม 96 เปอร์เซ็นต์ โดยปริมาตร แอซีโตน 4 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร และ กรดอะซิติก 1 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร เมื่อตัวทำละลายเคลื่อนที่ไปถึงปลายด้านบนบนแผ่น TLC นำแผ่น TLC ไปทำให้แห้ง จากนั้นพ่นด้วยสารละลายผสมของเมทานอลและกรดอะซิติกด้วยอัตราส่วน 1:1 โดยน้ำหนักจากนั้นนำแผ่น TLC ไปอบที่อุณหภูมิ 180 องศาเซลเซียส จะปรากฏแถบสีชัดเจน โดยตำแหน่งของสารประกอบต่างๆ แสดงดังภาพที่ 16 สัญลักษณ์ SO คือ น้ำมันถั่วเหลือง สัญลักษณ์ 1,3-DG คือ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ สัญลักษณ์ 1,2(2,3)-DG คือ 1,2(2,3)-ไดกลีเซอไรด์ สัญลักษณ์ FFA คือ กรดไขมันอิสระ และสัญลักษณ์ MG คือ โมโนกลีเซอไรด์



ภาพที่ 16 ผลการวิเคราะห์สารประกอบที่เกิดขึ้นในปฏิกิริยาด้วยวิธีโครมาโทกราฟีแบบแผ่นบาง
ที่มา: Du *et al.* (2005)

Spyros and Drimitrios (2004) ทำการศึกษาการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันและปฏิกิริยาไฮโดรไลซิสของน้ำมันเมล็ดลิน (Linseed oil) และน้ำมันเมล็ดปอปปี้ (Poppy seed oil) โดยใช้เทคนิค ^{13}C NMR ในการวิเคราะห์สารประกอบที่มีอยู่ในน้ำมัน สำหรับไตรกลีเซอไรด์ให้ตำแหน่งสัญญาณเรโซแนนซ์ของคาร์บอนทั้งสามบนกลีเซอรอลที่ 69.9 พีพีเอ็ม สำหรับ 1,2(2,3)-ไดกลีเซอไรด์ ให้ตำแหน่งสัญญาณ เรโซแนนซ์ของคาร์บอนตำแหน่งที่ 1, 2 และ 3 บนกลีเซอรอลเป็น 63.1 73.0 และ 61.2 พีพีเอ็ม ตามลำดับ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ ให้ตำแหน่งสัญญาณ

เรโซแนนซ์ของคาร์บอนตำแหน่งที่ 1, 2 และ 3 บนกลีเซอรอล เป็น 65.7 68.1 และ 65.7 พีพีเอ็ม ตามลำดับ 1(3)-โมโนกลีเซอไรด์ ให้ตำแหน่งสัญญาณเรโซแนนซ์ของคาร์บอนตำแหน่งที่ 1 2 และ 3 บนกลีเซอรอล เป็น 66.1 70.8 และ 64.0 พีพีเอ็ม ตามลำดับ สำหรับการศึกษานี้โดยใช้เทคนิค ^{13}C NMR ตำแหน่งสัญญาณเรโซแนนซ์ แสดงได้ดังตารางที่ 6

ตารางที่ 6 สัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบพวกเอซิดกลีเซอรอล

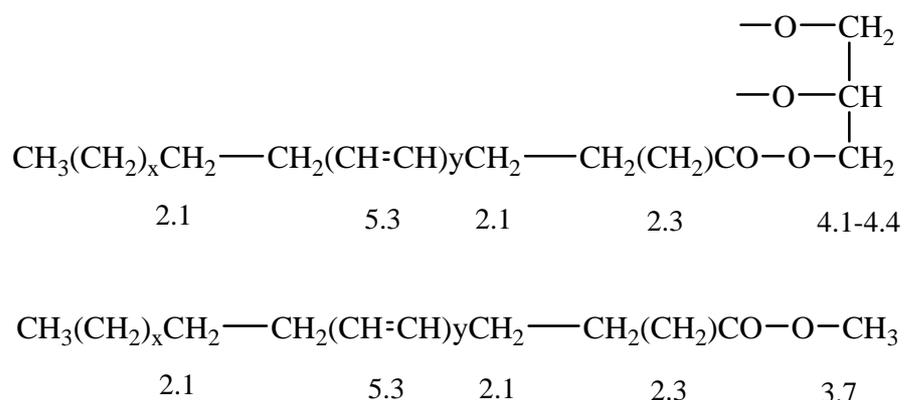
ชนิดสารประกอบ	ชนิดโปรตอน	δ (พีพีเอ็ม)
unsaturated vinyl protons	CH=CH	5.33
triglycerides	CHOCOR	5.25
1,2-diglycerides	CHOCOR	5.05
triglycerides	CH ₂ OCOR	4.32/4.16
1,2-diglycerides	CH ₂ OCOR	4.34/4.13
1,3-diglycerides	CH ₂ OCOR	4.1
1,3-diglycerides	CHOH (H-2)	4.06
hydroxy and oxo acids	CHOH	3.8
1,2-diglycerides	CH ₂ OH (H-3)	3.66
1-monoglycerides	CH ₂ OH (H-3)	3.5
<i>sn</i> -2 esterified acids and diacids	CH ₂ COOR	2.30
free fatty acids and diacids	CH ₂ COOH	2.24
unsaturated fatty acids	CH ₂ CH=	2.02
all fatty acids and diacids	CH ₂ CH ₂ COO-	1.57
all fatty acids and diacids	(CH ₂) _x	1.2-1.4
oleic/linoleic acid	CH ₂ CH ₂ CH ₃	1.2-1.4
oleic/linoleic acid	CH ₂ CH ₃	1.2-1.4

ที่มา: Spyros and Drimitrios (2004)

Monteiro *et al.* (2009) ศึกษาคุณภาพของน้ำมันไบโอดีเซลโดยทำการทดลองดั่งนี้ ผสมน้ำมันถั่วเหลืองกับน้ำมันดีเซลที่ความเข้มข้นต่างๆ ผสมน้ำมันไบโอดีเซลกับน้ำมันดีเซลที่ความเข้มข้นต่างๆ ผสมน้ำมันถั่วเหลืองกับน้ำมันไบโอดีเซลกับน้ำมันดีเซลที่ความเข้มข้นต่างๆ โดยนำเทคนิค $^1\text{H NMR}$ มาประยุกต์ใช้ในการวิเคราะห์ โดยการพิจารณาค่าแห่งสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอน พบว่าสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนบนหมู่เอซิลปรากฏที่ 0.4-3.3 พีพีเอ็ม ส่วนโปรตอนทั้งสามบนกลีเซอรอลคาร์บอนปรากฏในช่วง 4.0-4.4 พีพีเอ็ม และสัญญาณเรโซแนนซ์ของหมู่เมทอกซิลบนเมทิลเอสเทอร์ปรากฏที่ 3.6 พีพีเอ็ม จากผลการทดลองสรุปได้ว่าเทคนิค $^1\text{H NMR}$ สามารถนำไปใช้ประเมินคุณภาพของน้ำมันไบโอดีเซลได้

Sacchi *et al.* (1996) ทำการศึกษาองค์ประกอบที่นอกเหนือจากกรดไขมัน (Minor product) เช่น ปริมาณน้ำ ปริมาณฟีนอล ปริมาณแอลกอฮอล์ ที่อยู่ในน้ำมันมะกอกที่ยังไม่ผ่านกระบวนการสกัดโดยใช้เทคนิค $^1\text{H NMR}$ ในการวิเคราะห์สารประกอบที่มีอยู่ในน้ำมัน สำหรับไตรกลีเซอไรด์ ให้ค่าแห่งสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนทั้งสามบนกลีเซอรอลที่ 5.25 พีพีเอ็ม 1,2(2,3)-ไดกลีเซอไรด์ให้ค่าแห่งสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนบนคาร์บอนตำแหน่งที่ 1, 2 และ 3 เป็น 4.34, 5.05 และ 3.66 พีพีเอ็ม ตามลำดับ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ ให้ค่าแห่งสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนบนคาร์บอนตำแหน่งที่ 1 2 และ 3 เป็น 4.1, 4.06 และ 4.1 พีพีเอ็ม ตามลำดับ 1(3)-โมโนกลีเซอไรด์ให้ค่าแห่งสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนบนคาร์บอนตำแหน่งที่ 1, 2 และ 3 เป็น 3.8, 3.5 และ 3.5 พีพีเอ็ม ตามลำดับ

Gelbard *et al.* (1995) ได้ทำการศึกษาวิเคราะห์ปริมาณร้อยละของเมทิลเอสเทอร์จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันระหว่างน้ำมันเมล็ดเรพและเมทานอลโดยใช้เทคนิค $^1\text{H NMR}$ ซึ่งให้ผลถูกต้องและแม่นยำกว่าการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี แสดงดังภาพที่ 17 ตัวเลขแสดงสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนตำแหน่งต่างๆที่ได้จากการทดลองพบว่า โปรตอนบนหมู่เมทอกซิลของเมทิลเอสเทอร์ให้สัญญาณเรโซแนนซ์ที่ 3.7 พีพีเอ็ม และโปรตอนที่ตำแหน่งแอลฟา-คาร์บอนิลเมทิลีนให้สัญญาณเรโซแนนซ์ที่ 2.3 พีพีเอ็ม สำหรับเมทิลเอสเทอร์จะไม่พบสัญญาณเรโซแนนซ์ที่ตำแหน่ง 4.1-4.4 พีพีเอ็ม ซึ่งเป็นสัญญาณของโปรตอนบนกลีเซอรอล

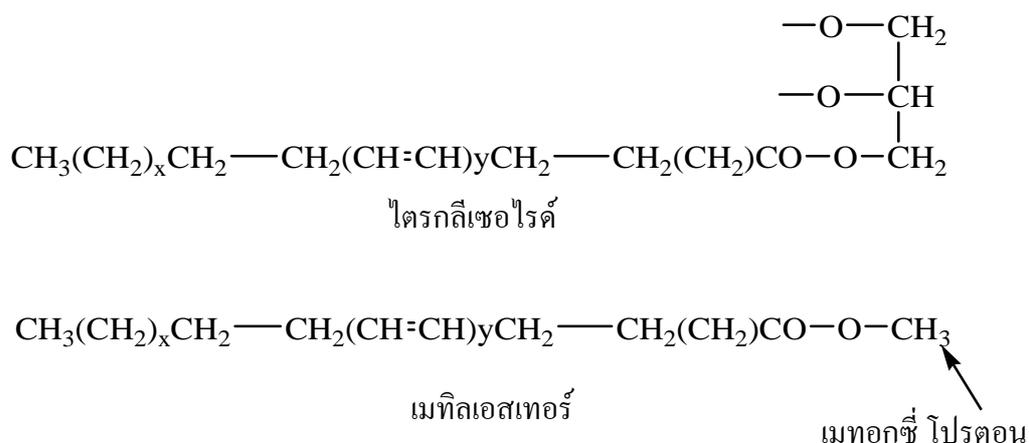


ภาพที่ 17 ตัวเลขแสดงสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนที่ตำแหน่งต่างๆ

ที่มา: Gelbard *et al.* (1995)

ปฏิกิมา และคณะ (2550) ได้ทำการศึกษาวิเคราะห์ปริมาณร้อยละเมทิลเอสเทอร์ในไบโอดีเซลที่ผลิตจากน้ำมันทอดใช้แล้วและน้ำมันเมล็ดในปาล์มโดยใช้เทคนิค $^1\text{H NMR}$ สำหรับการวิเคราะห์ปริมาณร้อยละเมทิลเอสเทอร์โดยใช้เทคนิค $^1\text{H NMR}$ มีข้อจำกัดว่า วัตถุดิบเริ่มต้นต้องเป็นกลีเซอไรด์ 100% อย่างไรก็ตามหากสารตั้งต้นมีสารปนเปื้อนน้อยมาก ก็สามารถใช้เทคนิค $^1\text{H-NMR}$ เพื่อตรวจสอบความน่าเชื่อถือของผลการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟีได้ โดยในการคำนวณค่าร้อยละผลที่ได้ (% Yield) ของเมทิลเอสเทอร์นั้นจะนำค่าอินทิเกรชันของเมทอกซีโปรตอน ($-\text{OCH}_3$) ของเมทิลเอสเทอร์ที่เกิดขึ้นในปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันและนำค่าอินทิเกรชันของแอลฟา-คาร์บอนิลเมทิลีนโปรตอน ($\alpha\text{-CH}_2$) ซึ่งมีอยู่ทั้งในเมทิลเอสเทอร์และไตรกลีเซอไรด์ (แสดงตำแหน่งดังภาพที่ 18) มาใช้ในการคำนวณตามสมการ

$$\text{\%Yield} = \frac{100 \times (2 \times \text{integration value of } -\text{OCH}_3)}{3 \times \text{integration value of } \alpha\text{-CH}_2}$$



ภาพที่ 18 แอลฟา-คาร์บอนิลเมทิลีน โปรตอนในเมทิลเอสเทอร์และไตรกลีเซอไรด์

ที่มา: ปฏิมา และคณะ (2550)

Meher *et al.* (2005) ศึกษาการผลิตไบโอดีเซลจากน้ำมัน Karanja และเมทานอล โดยผ่านกระบวนการทรานส์เอสเทอริฟิเคชันและใช้โพแทสเซียมไฮดรอกไซด์เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา ปัจจัยที่มีผลต่อการผลิตไบโอดีเซลคือ ความเข้มข้นของตัวเร่งปฏิกิริยา อัตราส่วนโดยโมลของเมทานอลต่อน้ำมัน อุณหภูมิของการทำปฏิกิริยาและอัตราเร็วของการกวนผสม ศึกษาหาสภาวะที่เหมาะสมในการผลิตไบโอดีเซล โดยการวิเคราะห์หาปริมาณเมทิลเอสเทอร์ที่ผลิตได้โดยใช้เทคนิค HPLC จากการศึกษาพบว่าสภาวะที่เหมาะสมในการผลิตไบโอดีเซลจากน้ำมัน Karanja และเมทานอล คือ ใช้ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนักของโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์เทียบกับน้ำหนักของน้ำมัน อัตราส่วนโดยโมลระหว่างเมทานอลต่อน้ำมันเป็น 6:1 อุณหภูมิของการทำปฏิกิริยา 65 องศาเซลเซียส อัตราเร็วของการกวนผสม 360 รอบต่อนาที

Darnoko and Cheryan (2000) ได้ทำการศึกษาจลนพลศาสตร์ของปฏิกิริยาการผลิตไบโอดีเซลด้วยกระบวนการเอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มในถังปฏิกรณ์แบบกะ การศึกษาครั้งนี้ใช้น้ำมันปาล์มบริสุทธิ์และใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบเบส คือ โพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ โดยศึกษาปัจจัยที่มีผลต่อการผลิตไบโอดีเซล คือ อุณหภูมิ 50, 55, 60 และ 65 องศาเซลเซียส ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 0.5, 1.0 และ 1.2 เปอร์เซ็นต์ และเวลาของการทำปฏิกิริยา 20, 40, 60, 80 และ 100 นาที ส่วนอัตราส่วนโดยโมลของเมทานอลต่อน้ำมันปาล์มที่ใช้ คือ 6:1 ผู้ทำการศึกษได้เสนอกลไกการเกิดปฏิกิริยาเป็น 3 ขั้นตอนต่อเนื่องที่ผันกลับได้ อันดับสองแสดงดังภาพที่ 2 จากการทดลองพบว่าอุณหภูมิมิมีผลต่อค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยา ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นเป็นปฏิกิริยาอันดับสอง และค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาของแต่ละขั้นตอนที่ 50-65 องศาเซลเซียส มีค่าดังนี้

ขั้นตอนการเปลี่ยนไตรกลีเซอไรด์ไปเป็นไดกลีเซอไรด์ มีค่า 0.018-0.048 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก ต่อมาที่ ขั้นตอนการเปลี่ยน ไดกลีเซอไรด์เป็น โมโนกลีเซอไรด์ มีค่า 0.038-0.098 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนักต่อมาที่ ขั้นตอนการเปลี่ยน โมโนกลีเซอไรด์เป็นกลีเซอรอล มีค่า 0.112-0.191 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนักต่อมาที่ ค่าพลังงานกระตุ้นของขั้นตอน 1 เท่ากับ 14.7 กิโลแคลอรีต่อโมล ขั้นตอน 2 เท่ากับ 14.2 กิโลแคลอรีต่อโมล ขั้นตอน 3 เท่ากับ 6.4 กิโลแคลอรีต่อโมล สรุปได้ว่า โมโนกลีเซอไรด์เปลี่ยนไปเป็นเอสเทอร์มีค่าสูงกว่าไตรกลีเซอไรด์และไดกลีเซอไรด์เปลี่ยนไปเป็น เอสเทอร์โดยเวลาที่เหมาะสมสำหรับการศึกษา เท่ากับ 90 นาที และปริมาณตัวเร่งปฏิกิริยาที่ เหมาะสมเท่ากับ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก

Doell *et al.* (2008) ได้ทำการศึกษาจลนพลศาสตร์ของปฏิกิริยาการผลิตไบโอดีเซลโดยผ่าน กระบวนการเอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันถั่วเหลืองกับเมทานอลโดยอาศัยตัวเร่งปฏิกิริยาแบบ เบส คือ โพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ และใช้ เตตระไฮโดรฟูแรน (THF) เป็นตัวทำละลาย โดยศึกษา ปัจจัยที่มีผลต่อการผลิตไบโอดีเซล คือ อุณหภูมิ 23, 30, 40 และ 50 องศาเซลเซียสและเวลาของการ ทำปฏิกิริยา 1, 3, 5, 7, 10, 20, 30, 60, 120, 240, 360, และ 480 นาที ส่วนอัตราส่วนโดยโมลของ เมทานอลต่อน้ำมันถั่วเหลืองที่ใช้ คือ 27:1 โดยปกติทั่วไปแล้วปริมาณตัวเร่งปฏิกิริยาที่เหมาะสม เท่ากับ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนักซึ่งปฏิกิริยาจะดำเนินไปอย่างรวดเร็ว จึงทำการทดลองโดยลดความ เข้มข้นของตัวเร่งปฏิกิริยาเหลือ 0.05 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก ซึ่งจะทำให้ปฏิกิริยาเกิดช้าลงเหมาะสม แก่การศึกษาทดลอง ผู้ทำการศึกษาได้เสนอกลไกการเกิดปฏิกิริยาเป็น 3 ขั้นตอนต่อเนื่องที่ผันกลับได้ แสดงดังภาพที่ 19

$$d[\text{TG}]/dt = -k_1[\text{CH}_3\text{O}^-][\text{TG}]$$

$$d[\text{DG}]/dt = -k_1[\text{CH}_3\text{O}^-][\text{TG}] - k_2[\text{CH}_3\text{O}^-][\text{DG}]$$

$$d[\text{MG}]/dt = -k_2[\text{CH}_3\text{O}^-][\text{DG}] - k_3[\text{CH}_3\text{O}^-][\text{MG}]$$

ภาพที่ 19 กลไกการเกิดปฏิกิริยาปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันระหว่างน้ำมันและแอลกอฮอล์
ที่มา: Doell *et al.*, (2008)

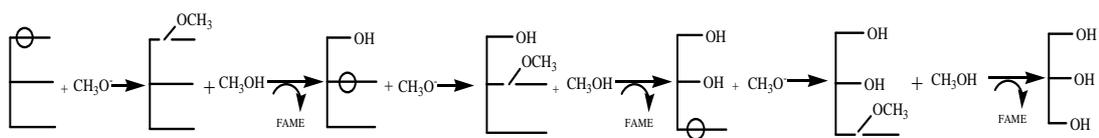
จะพบว่าอุณหภูมิมิผลต่อค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยา ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นเป็นปฏิกิริยา อันดับสองและค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาของแต่ละขั้นตอนที่ 23 องศาเซลเซียส เป็นดังนี้ ขั้นตอนการเปลี่ยนไตรกลีเซอไรด์เป็นไดกลีเซอไรด์ มีค่า 6.3 ลิตรต่อโมลต่อมาที่ ขั้นตอนการ

เปลี่ยน ไดคลีเซอไรด์ เป็น โมโนคลีเซอไรด์ มีค่า 15.3 ลิตรต่อโมลต่ออนาที่ ขั้นตอนการเปลี่ยน โมโนคลีเซอไรด์เป็นกลีเซอรอลมีค่า 13.0 ลิตรต่อโมลต่ออนาที่ ส่วนค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาของแต่ละขั้นตอนที่ 50 องศาเซลเซียส เป็นดังนี้ ขั้นตอนการเปลี่ยน ไตรคลีเซอไรด์เป็นไดคลีเซอไรด์ มีค่า 54.2 ลิตรต่อโมลต่ออนาที่ ขั้นตอนการเปลี่ยน ไดคลีเซอไรด์เป็น โมโนคลีเซอไรด์ มีค่า 136 ลิตรต่อโมลต่ออนาที่ ขั้นตอนการเปลี่ยน โมโนคลีเซอไรด์เป็นกลีเซอรอล มีค่า 139 ลิตรต่อโมลต่ออนาที่ ค่าพลังงานกระตุ้นของทั้งสามขั้นตอนเท่ากับ 14.2 กิโลแคลอรีต่อโมล โดยพบว่าความเกาะกะของหมู่เอสเทอร์ที่เกาะอยู่บนกลีเซอรอลมีผลต่อการเข้าทำลายพันธะเอสเทอร์ของเมทอกไซค์ไอออน

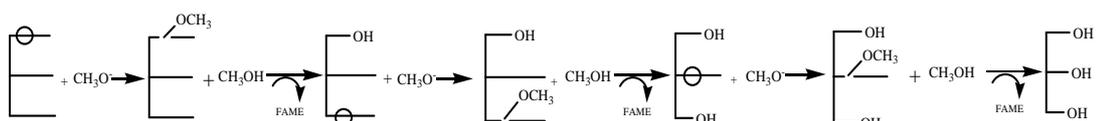
Holčapek *et al.* (1999) ติดตามความก้าวหน้าของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันในการผลิตไบโอดีเซลจากน้ำมันเมล็ดเรพกับเมทานอลโดยใช้เทคนิค HPLC เพื่อการเปลี่ยนแปลงปริมาณของสารตั้งต้น สารผลิตภัณฑ์และสารมัธยันตร์ระหว่างการเกิดปฏิกิริยา ทำการวิเคราะห์ด้วยเครื่อง HPLC ที่ความยาวคลื่น 205 นาโนเมตร โดยระบบของตัวทำละลายเคลื่อนที่เป็นแบบ Gradient โดยเริ่มจากอะซิโตไนไตรล์ในน้ำ 70 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร ที่เวลา 0 นาทีจนถึง 100% อะซิโตไนไตรล์ เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร ที่เวลา 10 นาที ตามด้วยอะซิโตไนไตรล์ในไอโซโพรพานอล 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร ที่เวลา 20 นาที อัตราการไหลของตัวทำละลายเคลื่อนที่คือ 1 มิลลิลิตรต่ออนาที่ จากการทดลองพบว่าในปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันอัตราส่วนของ 1,3-ไดคลีเซอไรด์มากกว่า 1,2-ไดคลีเซอไรด์ ตลอดการทดลอง

Sonthisawate *et al.* (2006) ได้นำเทคนิคการจำลองโมเลกุลมาใช้ในการศึกษากลไกของปฏิกิริยา ทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันเพื่อนำมาหาโครงสร้างทางโมเลกุลของไตรโอเลอิน โดยใช้ระเบียบวิธี AM1, PM3 และ *ab initio* Hatree-Fock ผ่านโปรแกรม GaussViewW และ GAUSSIAN 03W ผลการวิเคราะห์ที่ได้จากระเบียบวิธี AM1, PM3 และ *ab initio* Hatree-Fock 6-31G แสดงให้เห็นว่าโครงสร้างทางโมเลกุลของทั้งสามระเบียบวิธีให้โครงสร้างทางโมเลกุลของไตรโอเลอินที่ใกล้เคียงกันจากนั้นจึงนำแบบจำลองโครงสร้างทางโมเลกุลของไตรโอเลอินไปใช้ประยุกต์ใช้จำลองกลไกของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่เป็นไปได้ กลไกการเกิดปฏิกิริยา ทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันแบ่งออกเป็น 6 แบบ หรือ 36 ปฏิกิริยา ได้ถูกนำมาศึกษาโดยใช้ระเบียบวิธี *ab initio* HF6-31G จากการทำแบบจำลองพบว่าชนิดของปฏิกิริยาได้ถูกแบ่งเป็น 6 ชนิด ดังนี้ ชนิดที่ 1 เป็นปฏิกิริยาผันกลับไม่ได้ โดยที่ผลของการทำแบบจำลองได้ผลิตภัณฑ์ตามที่ศึกษา ชนิดที่ 2 เป็นปฏิกิริยาผันกลับไม่ได้ โดยผลของการทำแบบจำลองได้เป็นสารตั้งต้นแทนที่จะได้ผลิตภัณฑ์ตาม

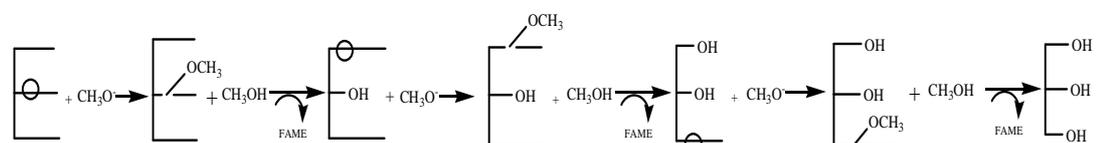
แบบที่ศึกษา ชนิดที่ 3 ปฏิริยาผันกลับไม่ได้ โดยที่ผลของการทำแบบจำลองได้โครงสร้างโมเลกุลคล้ายกับผลิตภัณฑ์ของปฏิริยาที่ศึกษา ชนิดที่ 4 ปฏิริยาผันกลับได้โดยที่ผลของการทำแบบจำลองได้โครงสร้างโมเลกุลเป็นสารตั้งต้นแทนที่จะได้ผลิตภัณฑ์ตามแบบที่ศึกษา ชนิดที่ 5 ปฏิริยาผันกลับได้ โดยที่ผลของการทำแบบจำลองไม่ได้โครงสร้างของผลิตภัณฑ์ของปฏิริยาที่ศึกษา ชนิดที่ 6 ปฏิริยาผันกลับได้โดยที่ผลของการทำแบบจำลองได้โครงสร้างของโมเลกุลคล้ายกับผลิตภัณฑ์ของปฏิริยาที่ศึกษา พลังงานทางโมเลกุลของสารตั้งต้นมากกว่าพลังงานทางโมเลกุลของผลิตภัณฑ์และพลังงานของปฏิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันทั้ง 6 ชนิด มีค่าทางพลังงานที่ใกล้เคียงกัน กลไกทั้ง 6 แบบของปฏิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของไตรโอเลอินที่ถูกเสนอแสดงดังภาพที่ 20



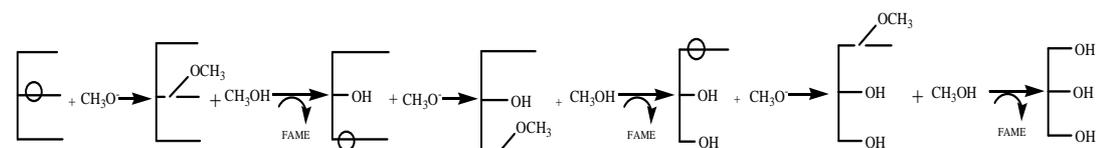
แบบที่ 1



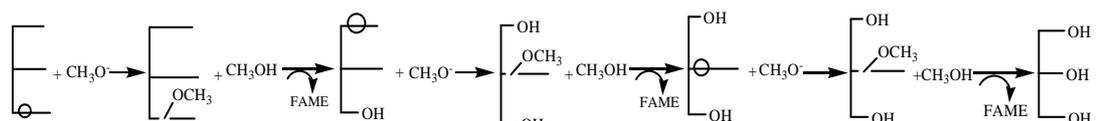
แบบที่ 2



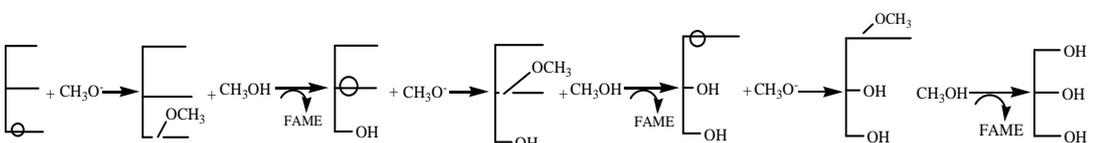
แบบที่ 3



แบบที่ 4



แบบที่ 5



แบบที่ 6

ภาพที่ 20 กลไกการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันของสารประกอบไตรกลีเซอไรด์

ที่มา: Sonthisawate *et al.* (2006)

อุปกรณ์และวิธีการ

อุปกรณ์

1. อุปกรณ์สำหรับปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน

- 1.1 เตาให้ความร้อน: Heidolph MR 3001
- 1.2 เครื่องน้ำหล่อเย็น (Cooling bath): EYELA COOL ACE CA-1111, Japan
- 1.3 เครื่องปั่นเหวี่ยง (Centrifuge): model EBRA 20, Hettich ZENTRIFUGEN, Germany
- 1.4 เครื่องชั่งไฟฟ้า 4 ตำแหน่ง: model CP224S, Sartorius, Goettingen, Germany
- 1.5 ชุดเครื่องระเหยตัวทำละลาย (Evaporator): BUCHI Rotavapor R-200, BUCHI Heating Bath B-490, BUCHI Vac V-500, Switzerland
- 1.6 ชุดเครื่องแก้ว
- 1.7 นาฬิกาจับเวลา
- 1.8 กรวยแยก ขนาด 500 มิลลิลิตร: Witeg, Pereco
- 1.9 กระดาษกรองเบอร์ 4: Whatman
- 1.10 กระดาษลิตมัสช่วงพีเอช 5.5-9.0: Merck
- 1.11 ขวด Vial ขนาด 10 มิลลิลิตร

2. อุปกรณ์และสารเคมีที่ใช้วิเคราะห์สารประกอบโดยใช้เทคนิค MS

- 2.1 เครื่องวิเคราะห์แมสสเปกโตรมิเตอร์แบบกำลังแยกสูง (High resolution mass spectrometer): micro TOF, Bruker Daltonics, Germany
 - การฉีด: ฉีดโดยตรง (Direct infusion) ผ่าน Syringe pump
 - ตัวทำละลาย: เมทานอล (A.R. grade)

3. อุปกรณ์และสารเคมีที่ใช้วิเคราะห์สารประกอบโดยใช้เทคนิค NMR

- 3.1 เครื่องวิเคราะห์ NMR ความถี่ (400 MHz): Bruker AVANCE 400

3.2 หลอด NMR ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 5 มิลลิเมตร: Aldrich series 400

3.3 ตัวทำละลายดิวเทอเรียมคลอไรด์ (CDCl₃)

4. อุปกรณ์และสารเคมีที่ใช้วิเคราะห์สารประกอบโดยใช้เทคนิค HPLC

4.1 เครื่องวิเคราะห์ HPLC: VARIAN (Prostar)

- คอลัมน์: C18 ความยาว 250 มิลลิเมตร เส้นผ่านศูนย์กลาง 4.6 มิลลิเมตรและความหนา 5 ไมโครเมตร

- ดีเทคเตอร์: Photo diode array UV detector

- อินเจคเตอร์: โปรแกรมอุณหภูมิของคอลัมน์ (Column Temperature Program) ที่อุณหภูมิห้อง 20-25 องศาเซลเซียส ตลอดการทดลอง

- ตัวทำละลาย: A คือ อะซิโตนไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร

B คือ ไอโซโพรพานอล ใน เฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร

4.2 อะซิโตนไนไตรล์ (Acetonitrile): A.R. grade, LAB SCAN Ireland

4.3 ไอโซโพรพานอล (Isopropanol): A.R. grade, LAB SCAN Ireland

4.4 เฮกเซน (Hexane): A.R. grade, LAB SCAN Ireland

5. อุปกรณ์และสารเคมีสำหรับการแยกสารประกอบโดยเทคนิค TLC และ PTLC (Preparative thin layer chromatography)

5.1 Siliga gel 60 PF254 เบอร์ 7747: Merck Germany

5.2 TLC aluminium plate Siliga gel 60 F254: Merck Germany

5.3 WAKO plate Siliga gel 70: รุ่น PKG2079, Japan

5.4 กระจกแก้วขนาด 20 ซม.×20 ซม.

5.5 โพแทสเซียมเปอร์แมงกาเนต (KMnO₄): Merck Germany

5.6 โพแทสเซียมคาร์บอเนต (K₂CO₃): Merck Germany

5.7 โซเดียมไฮดรอกไซด์ (NaOH): A.R. Grade, Ajax Chemical Co., Ltd.

5.8 เฮกเซน (Hexane): A.R. grade, LAB SCAN Ireland

5.9 เอทิลแอซิเตต (Ethylacetate): A.R. grade, LAB SCAN Ireland

5.10 น้ำกลั่น

6. วัตถุดิบและสารเคมีสำหรับทำปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชัน

6.1 น้ำมันปาล์มบริสุทธิ์: ตรา หยก ผลิตวันที่ 13 ก.ย. 2551

6.2 โพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ (KOH): A.R. Grade, Ajax Chemical Co., Ltd.

6.3 เมทานอล: ความเข้มข้น 99.99 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก, A.R. Grade, Merck

Germany

6.4 กรดไฮโดรคลอริก: ความเข้มข้น 36.5-38 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก, J.T. Baker USA

6.5 โซเดียมซัลเฟต: Anhydrous, A.R. Grade, Ajax Chemical

7. สารเคมีมาตรฐานเพื่อทดสอบเทียบตำแหน่งบนแผ่น TLC

7.1 เมทิลปาล์มมิเตต (methyl palmitate) 5000 ไมโครกรัม/มิลลิลิตร ของไฟรีดีน:

Supelco Spain

7.2 ไตรโอเลอิน (Triolein): Fluka Switzerland

วิธีการ

1. ศึกษาการเปลี่ยนแปลงปริมาณของสารประกอบต่างๆที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มบริสุทธิ์

1.1 นำน้ำมันปาล์มหนัก 12.87 กรัม หรือ 0.015 โมล (วิธีการคำนวณใน ภาคผนวก ก) ใส่ลงในฟลาสก์ ขนาด 50 มิลลิลิตร ควบคุมอุณหภูมิน้ำมันที่ 20 องศาเซลเซียส พร้อมทั้งกวนด้วยความเร็วรอบ 400 รอบ/นาที (Noureddini and Zhu, 1997)

1.2 เตรียมสารผสมของโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์น้ำหนัก 0.0128 กรัม (วิธีการคำนวณใน ภาคผนวก ก) กับเมทานอลปริมาณ 2.88 กรัม (อัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอลเป็น 1:6) ละลายเป็นเนื้อเดียวกันของสารละลายเมทอกไซด์

1.3 เริ่มต้นทำปฏิกิริยาเติมสารละลายเมทอกไซด์ใส่ลงในฟลาสก์ที่ได้อุณหภูมิตามที่กำหนด (20 องศาเซลเซียส) และเริ่มจับเวลาการทำปฏิกิริยา ในระหว่างการทำปฏิกิริยาให้ดูน้ำมันตัวอย่าง ประมาณ 2 มิลลิลิตร ที่เวลา 2, 10, 20, 30, 40 และ 50 นาที ตามลำดับ

1.4 ทำการหยุดปฏิกิริยาของน้ำมันตัวอย่างแต่ละช่วงเวลาโดยทันที โดยหยดสารละลายกรดไฮโดรคลอริก 10 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร จนตัวอย่างสารผสมของน้ำมันมีค่าพีเอชประมาณ 7

1.4 นำน้ำมันตัวอย่างไประเหยเมทานอล

1.5 นำไปปั่นเหวี่ยงด้วยความเร็วรอบ 400 รอบ/นาที เป็นเวลา 20 นาที แยกสารผสมของน้ำมันชั้นบนเก็บไว้เพื่อวิเคราะห์ต่อไป

1.6 น้ำมันตัวอย่างที่ได้หลังจากการปั่นเหวี่ยงถูกนำไปวิเคราะห์ดูความก้าวหน้าของปฏิกิริยาอย่างคร่าวๆด้วย TLC (ทำการทดลองโดยเปลี่ยนอัตราส่วนของตัวทำละลายเคลื่อนที่จนเห็นการแยกชัดเจน)

1.7 น้ำมันตัวอย่างจากข้อ 1.5 ไปวิเคราะห์หาสัดส่วนของ ไตรกลีเซอไรด์ ไดกลีเซอไรด์และ โมโนกลีเซอไรด์ด้วยเทคนิค HPLC

2. เตรียมสารละลาย โซเดียมเปอร์แมงกาเนต สำหรับ TLC และ PTLC

2.1 ละลาย KMnO_4 3 กรัม ในน้ำกลั่น 300 มิลลิลิตร

2.2 เติม K_2CO_3 20 กรัม ในสารละลายข้อ 2.1

- 2.3 เติมสารละลาย NaOH 5 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก ปริมาตร 5 มิลลิลิตร ในสารละลายข้อ 2.2
- 2.4 เขย่าสารผสมทั้งหมดให้เข้ากันจากนั้นเก็บบรรจุขวดสีชาเตรียมไว้ใช้สำหรับการทดลอง

3. การเตรียม PTLC

- 3.1 นำซิลิกาเจลผสมในน้ำกลั่นด้วยอัตราส่วน 1:2 โดยน้ำหนัก จากนั้นกวนให้เข้ากันจนเป็นลักษณะของเหลวข้นหนืด
- 3.2 นำสารผสมที่ได้ไปเคลือบบนแผ่นกระจกขนาด 20 ซม. × 20 ซม. ให้มีความหนาประมาณ 2 มิลลิเมตร
- 3.3 ผึ่งทิ้งไว้ให้แห้งจึงสามารถนำมาใช้ได้

4. แยกสารประกอบที่เกิดขึ้นจากการทดลองให้บริสุทธิ์ โดยใช้ PTLC

ทำการแยกสารประกอบต่างๆ อันได้แก่ ไตรกลีเซอไรด์ ไดกลีเซอไรด์ โมโนกลีเซอไรด์ และเมทิลเอสเทอร์ที่ได้ปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ให้บริสุทธิ์

- 4.1 นำน้ำมันตัวอย่างส่วนหนึ่งที่ได้จากข้อ 1.5 ใส่กรวยแยก จากนั้นจึงล้างด้วยน้ำ
- 4.2 สกัดด้วยตัวทำละลายเอทิลเอซิเตต 3 ครั้ง เพื่อที่สารผสมของน้ำมันจะอยู่ในชั้นเอทิลเอซิเตต
- 4.3 แยกชั้นเอทิลเอซิเตตออกมา เติม Na_2SO_4 และเขย่าเพื่อกำจัดน้ำที่อยู่ในสารละลาย
- 4.4 กรอง Na_2SO_4 ออก
- 4.5 ระเหยตัวทำละลายเอทิลเอซิเตตออกจนหมดด้วยเครื่องระเหยสุญญากาศแบบหมุน
- 4.6 จะได้สารผสมของน้ำมันที่ประกอบไปด้วยไตรกลีเซอไรด์ ไดกลีเซอไรด์ โมโนกลีเซอไรด์ และเมทิลเอสเทอร์
- 4.7 ชั่งสารผสมของน้ำมันที่ได้หนัก 0.02 กรัม ในขวดแก้วขนาดเล็ก (Vial) หยดตัวทำละลายเอทิลเอซิเตตประมาณ 3-4 หยด จากนั้นละลายให้เข้ากัน
- 4.8 นำไปหยดบน PTLC ที่เตรียมไว้บริเวณปลายแผ่นด้านล่าง (สูงจากขอบล่างประมาณ 1.5 นิ้ว)

4.9 นำไปวางลงในภาชนะที่บรรจุตัวทำละลายเคลื่อนที่ (Mobile phase) ไว้เรียบร้อยแล้ว โดยครั้งแรกใช้ระบบของตัวทำละลายคือ เอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 30 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร

4.10 เมื่อตัวทำละลายเคลื่อนที่ถึงปลายแผ่น PTLC ให้นำแผ่น PTLC ออกจากภาชนะ จากนั้นรอให้แผ่น PTLC แห้งสนิท

4.11 นำสำลิจุ่มลงในสารละลายของโพแทสเซียมเปอร์แมงกาเนต จากนั้นป้ายตรงบริเวณ ด้านข้างของแผ่น PTLC จะปรากฏแถบสีเหลืองทั้งสองข้างตลอดแนวความสูง เพื่อให้เห็นตำแหน่งของสารประกอบที่แยกได้บนแผ่น PTLC

4.12 ทำการขีดชิลิกาเจลออกจากแผ่น PTLC ที่ตำแหน่งต่างๆ จะได้ชิลิกาเจลที่ดูดซับ สารประกอบชนิดต่างๆในแต่ละตำแหน่ง

4.13 นำชิลิกาเจลที่ขูดออกมาที่ตำแหน่งต่างๆบรรจุใส่ขวดรูปชมพู่จากนั้นเติมตัวทำละลาย เอทิลเอซิเทตเพื่อละลายสารที่เกาะอยู่บนชิลิกาเจล

4.14 กวนโดยใช้ความเร็วรอบประมาณ 300 รอบต่อนาที เป็นเวลา 20 นาที เพื่อให้ สารประกอบหลุดออกจากชิลิกาเจล

4.15 กรองชิลิกาเจลออก

4.16 ระเหยตัวทำละลายเอทิลเอซิเทตจนแห้งจะได้สารประกอบต่างๆที่ถูกแยกจากสารผสมของน้ำมันที่บริสุทธิ์ ซึ่งได้แก่ ไตรกลีเซอไรด์ ไดกลีเซอไรด์ โมโนกลีเซอไรด์ และเมทิลเอสเทอร์

4.17 ชั่งน้ำหนักที่ได้

4.18 ตำแหน่งของสารประกอบที่ซ้อนกัน ให้ทำการทดลองแยกซ้ำ ตามข้อ 4.12-4.21 โดยเปลี่ยนระบบของตัวทำละลายเคลื่อนที่ (สารประกอบตำแหน่งที่ 1 ที่ปนกับสารประกอบตำแหน่งที่ 2 ใช้ระบบตัวทำละลาย เอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 15 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร, สารประกอบตำแหน่งที่ 3 ที่ปนกับสารประกอบตำแหน่งที่ 4 ใช้ระบบตัวทำละลาย เอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 20 เปอร์เซ็นต์โดย ปริมาตร)

5. วิเคราะห์โครงสร้างของสารประกอบบริสุทธิ์ที่แยกได้

5.1 นำสารประกอบบริสุทธิ์ทั้งหมดที่แยกได้จากข้อ 4.16 ประมาณ 0.001 กรัมไปวิเคราะห์ ด้วยเครื่อง MS เพื่อวิเคราะห์ชนิดของสารประกอบ

5.2 นำสารประกอบบริสุทธิ์ทั้งหมดที่แยกจากข้อ 4.16 ประมาณ 0.001 กรัมละลายด้วย CDCl_3 จากนั้นนำไปวิเคราะห์ด้วยเครื่อง NMR เพื่อศึกษาค่าตำแหน่งสัญญาณของสารประกอบ ทั้งหมดและชนิดไอโซเมอร์ของสารประกอบ ไคกลีเซอไรด์ และ โมโนกลีเซอไรด์

6. ศึกษาเปรียบเทียบการเปลี่ยนแปลงปริมาณของสารประกอบต่างๆที่เกิดขึ้นในปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันโดยใช้เครื่องมือวิเคราะห์ HPLC

สารประกอบบริสุทธิ์ของไตรกลีเซอไรด์ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ โมโนกลีเซอไรด์และเมทิลเอสเทอร์จะถูกนำไปใช้เป็นสารตัวอย่างมาตรฐานในการวิเคราะห์ด้วยเครื่อง HPLC

6.1 ชั่งสารประกอบบริสุทธิ์ของไตรกลีเซอไรด์ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ โมโนกลีเซอไรด์ และเมทิลเอสเทอร์ที่ได้จากข้อ 4.16 น้ำหนัก 1.2 มิลลิกรัม ลงในขวด vial

6.2 เติมตัวทำละลายเฮกเซน 500 ไมโครลิตรและตัวทำละลายไอโซโพรพานอล 500 ไมโครลิตร

6.3 ปิดฝาและเขย่าสารละลายอย่างรุนแรงให้เข้ากัน

6.4 นำสารตัวอย่าง ปริมาตร 30 ไมโครลิตร วิเคราะห์ด้วยเครื่อง HPLC

6.5 ชั่งตัวอย่างสารผสมของน้ำมันที่เวลา 2 10 20 30 40 และ 50 นาที ที่เตรียมได้ 5 มิลลิกรัมลงในขวด vial

6.6 เติมตัวทำละลายเฮกเซน 500 ไมโครลิตรและตัวทำละลายไอโซโพรพานอล 500 ไมโครลิตร

6.7 ปิดฝาและเขย่าสารละลายอย่างรุนแรงให้เข้ากัน

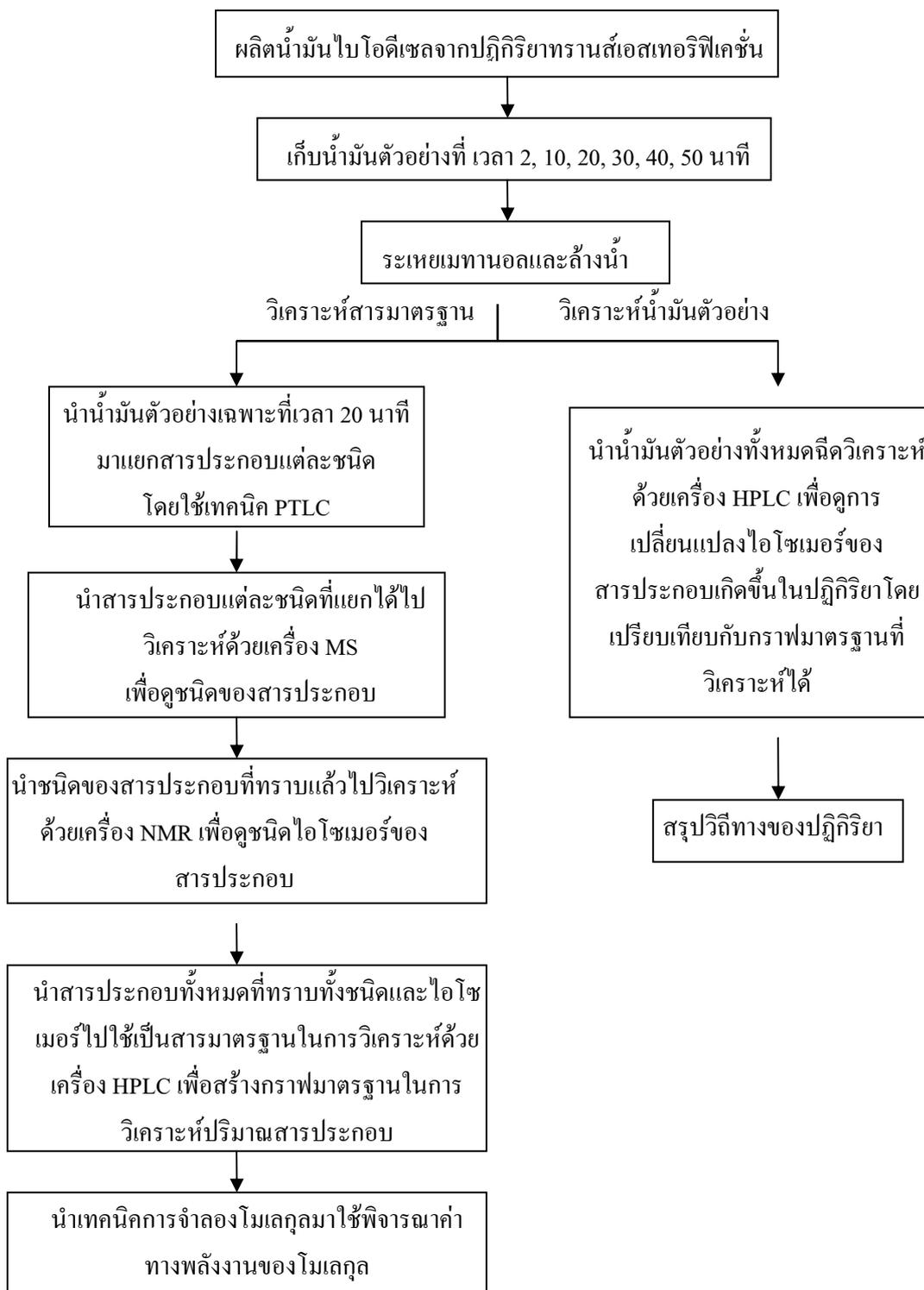
6.8 นำสารตัวอย่าง ปริมาตร 30 ไมโครลิตร วิเคราะห์ด้วยเครื่อง HPLC

6.9 ชั่งน้ำมันตัวอย่างที่เวลาต่างๆที่ได้จากข้อ 1.5 น้ำหนัก 5.0 มิลลิกรัม จากนั้นทำตามข้อ 6.2-6.8

7. นำเทคนิคการจำลองโมเลกุล (Molecular Simulation) มาใช้พิจารณาพลังงานทางโมเลกุลของสารมัธยันตร์

หาโครงสร้างโมเลกุลของสารมัธยันตร์อันได้แก่ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ 1-โมโนกลีเซอไรด์ และ 2-โมโนกลีเซอไรด์ โดยใช้ระเบียบวิธี *ab initio* Hartree-Fock ผ่านโปรแกรม GaussViewW และ GAUSSIAN 03W แล้วนำผลที่ได้จากโปรแกรมเปรียบเทียบกับผลการทดลองในห้องปฏิบัติการ

การศึกษาทั้งหมดสามารถแสดงได้ดังภาพที่ 21



ภาพที่ 21 แผนผังการทดลอง

ผลและวิจารณ์

งานวิจัยนี้ได้ศึกษาหาวิถีทางที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของการผลิตไบโอดีเซลจากน้ำมันปาล์มบริสุทธิ์ โดยทำการทดลองที่อุณหภูมิต่ำเพื่อลดอัตราเร็วของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันซึ่งง่ายต่อการศึกษาวิถีทางของปฏิกิริยา ในการทดลองนี้จึงควบคุมอุณหภูมิที่ 20 องศาเซลเซียสตลอดการทดลอง (Jin *et al.*, 2007) ปัจจัยสำคัญของการศึกษาวิถีทางปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันคือการวิเคราะห์ตำแหน่งและปริมาณของไอโซเมอร์ของสารประกอบไดกลีเซอไรด์และโมโนกลีเซอไรด์ที่เกิดขึ้นระหว่างการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน จากนั้นยืนยันผลการทดลองที่ได้โดยนำเทคนิคการจำลองโมเลกุลมาใช้ในการพิจารณาโครงสร้างทางโมเลกุลที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันว่าสอดคล้องกับผลการทดลองในห้องปฏิบัติการมากน้อยเพียงใด

1. ศึกษาความก้าวหน้าของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันอย่างคร่าวๆโดยใช้เทคนิค TLC

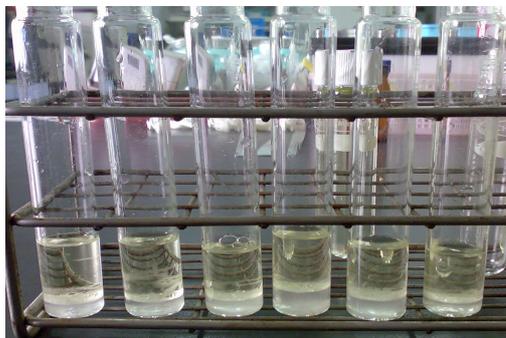
ผลการทดลองของน้ำมันตัวอย่างหลังทำการปั่นเหวี่ยงให้แยกชั้นที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มบริสุทธิ์ในเมทานอลโดยใช้โพแทสเซียมไฮดรอกไซด์เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา ทำการทดลองที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส โดยมีน้ำมันชั้นบนและชั้นล่างของกลีเซอรอล แสดงดังภาพที่ 22 หลังจากแยกน้ำมันชั้นบนแล้ว จะได้ตัวอย่างสารผสมของน้ำมันที่เวลาต่างๆ แสดงดังภาพที่ 23

ในการทดลองนี้แผ่น TLC ที่ใช้สำหรับการวิเคราะห์นั้นทำมาจากซิลิกาเจลที่เคลือบบนแผ่นอะลูมิเนียม (ความหนาของซิลิกาเจลประมาณ 0.25 มิลลิเมตร) ส่วนแผ่น PTLC ที่ใช้จะมีซิลิกาเจลเคลือบอยู่บนกระดาษแก้ว (ความหนาของซิลิกาเจลประมาณ 1 มิลลิเมตร) เพราะฉะนั้นในการทดลองนี้จะใช้ TLC วิเคราะห์สารผสมในน้ำมันตัวอย่างโดยคร่าวๆ แต่สำหรับการแยกสารประกอบต่างๆที่อยู่ในน้ำมันตัวอย่างจะใช้แผ่น PTLC เนื่องจาก PTLC มีความสามารถรองรับสารตัวอย่างได้มากกว่าแผ่น TLC ซึ่งเหมาะแก่การนำไปแยกสารตัวอย่างที่มีปริมาณมาก (Liu and Kinderlerer, 1999)

สำหรับการวิเคราะห์ TLC จำเป็นต้องหาระบบตัวทำละลายที่เหมาะสม โดยคาดว่าตำแหน่งบน TLC ของสารประกอบที่มีความเป็นขั้วมากกว่าจะอยู่ต่ำกว่าสารประกอบที่มีความเป็นขั้วน้อยกว่า อันเนื่องมาจากระบบของตัวทำละลายที่ใช้ที่องค์ประกอบหลักเป็นเฮกเซน ซึ่งเป็นตัวทำละลาย

แบบไม่มีขี้ผึ้ง พบว่าที่ระบบตัวทำละลายเอทิลเอซิเทคในเฮกเซน 20 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร สามารถมองเห็นจุดการแยกของสารมัธยันต์ชัดเจน แต่ยังมีสารมัธยันต์ตัวล่างสุดจะใกล้จุดเริ่มต้นของการแยกมากเกินไปและจุดการแยกของไตรกลีเซอไรด์กับเมทิลเอสเทอร์จะแยกไม่ชัดเจน แสดงได้ดังภาพที่ 24 แต่เมื่อใช้ระบบตัวทำละลายเอทิลเอซิเทคในเฮกเซน 15 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร จุดการแยกของสารมัธยันต์จะติดกันจนมองเห็นไม่ชัดเจนแต่จุดการแยกของไตรกลีเซอไรด์กับเมทิลเอสเทอร์จะแยกชัดเจน แสดงได้ดังภาพที่ 25 และถ้าใช้ระบบตัวทำละลายเอทิลเอซิเทคในเฮกเซน 30 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร สารมัธยันต์ตัวล่างสุดจะแยกออกจากจุดเริ่มต้นชัดเจน แต่จุดของสารมัธยันต์ที่เหลือจะติดกันมากเกินไปและจุดของไตรกลีเซอไรด์กับเมทิลเอสเทอร์จะซ้อนกันแสดงดังภาพที่ 26 ข้อมูลดังกล่าวจะถูกนำไปใช้ในการแยกสารประกอบที่บริสุทธิ์ของเมทิลเอสเทอร์ ไตรกลีเซอไรด์และสารมัธยันต์โดยใช้ PTLC ต่อไป

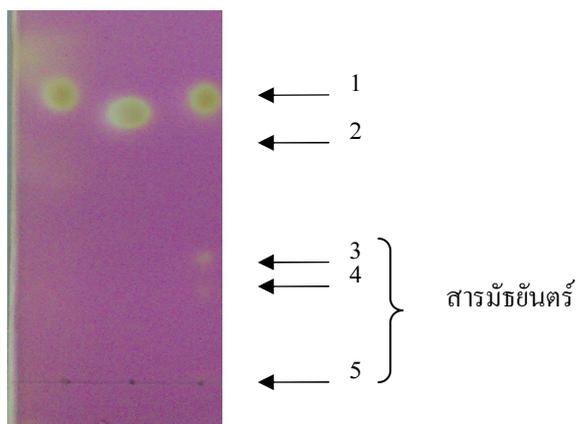
สำหรับการวิเคราะห์ความก้าวหน้าปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันอย่างคร่าวๆ ทำได้โดยการใช้หลอดคาปิลารีดูดสารบริสุทธิ์ของเมทิลเอสเทอร์ ไตรกลีเซอไรด์และน้ำมันตัวอย่างที่เวลา 2, 10, 20, 30, 40 และ 50 นาที ประมาณ 10 ไมโครลิตร ที่ละลายอยู่ในตัวทำละลายเฮกเซน 1 มิลลิลิตร ลงบนแผ่น TLC (Kaieda *et al.*, 1999) โดยใช้ระบบตัวทำละลายเอทิลเอซิเทคในเฮกเซน 20 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร โครมาโทแกรมบนแผ่น TLC จะปรากฏให้เห็นได้โดยการจุ่มแผ่น TLC ในสารละลายของ โฟแทสเซียมเปอร์แมงกาเนตตามด้วยการให้ความร้อนลงบนแผ่น TLC ด้วยอุณหภูมิประมาณ 150 องศาเซลเซียส จนปรากฏจุดสีเหลืองชัดเจน เมื่อพิจารณาโครมาโทแกรมบนแผ่น TLC (แสดงดังภาพที่ 27) จะปรากฏให้เห็นการแยกของน้ำมันตัวอย่างที่เวลา 2, 5, 10, 20, 30, 40 และ 50 นาที (แสดงดังตำแหน่ง c d e f g และ h) จะเห็นได้ว่าน้ำมันตัวอย่างที่เวลาต่างๆ ประกอบไปด้วย เมทิลเอสเทอร์ ไตรกลีเซอไรด์และสารมัธยันต์อีก 3 ชนิด จึงพอสรุปคร่าวๆได้ว่า ในระหว่างการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันนั้นมีสารมัธยันต์เกิดขึ้นทั้งหมด 3 ชนิด โดยคาดไว้ว่าสารมัธยันต์ที่เกิดขึ้นควรจะเป็นสารประกอบพวกไดกลีเซอไรด์และโมโนกลีเซอไรด์ จากโครมาโทแกรมจะเห็นได้ว่าปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่เวลาผ่านไป 50 นาที ยังไม่เสร็จสิ้นสมบูรณ์ เนื่องจากยังมีการปรากฏให้เห็นถึงตำแหน่งของสารมัธยันต์บนโครมาโทแกรม นอกจากนี้เมื่อพิจารณาจากโครมาโทแกรมจะเห็นได้ว่าปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่เวลาผ่านไป 20 นาที ปรากฏสารมัธยันต์ค่อนข้างชัดเจน ในการทดลองนี้จึงเลือกเก็บน้ำมันตัวอย่างจากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่เวลา 20 นาที มาแยกสารมัธยันต์ สารตั้งต้นและสารผลิตภัณฑ์ที่เกิดขึ้นให้บริสุทธิ์ เพื่อนำไปใช้เป็นส่วนตัวอย่างมาตรฐานในวิเคราะห์ด้วยเทคนิคอื่นต่อไป



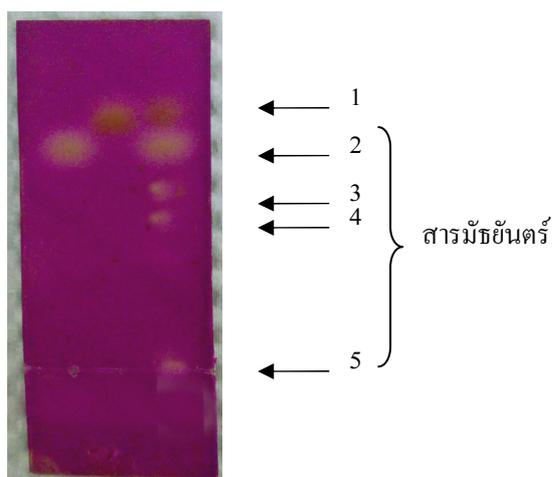
ภาพที่ 22 น้ำมันตัวอย่างที่ทำการปั่นเหวี่ยงให้แยกชั้นที่เวลาการทำปฏิกิริยา 2, 10, 20, 30, 40 และ 50 นาที



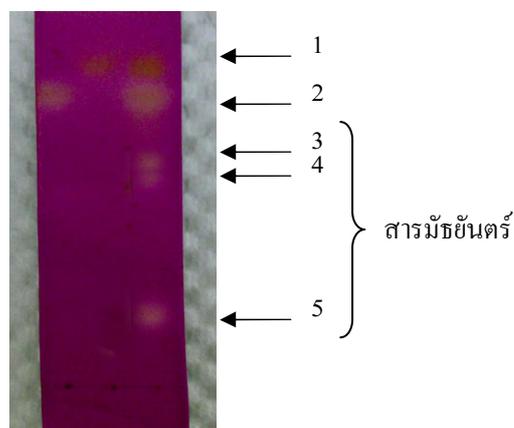
ภาพที่ 23 น้ำมันตัวอย่างที่ทำการแยกชั้นบนแล้วที่เวลาการทำปฏิกิริยา 2, 10, 20, 30, 40 และ 50 นาที



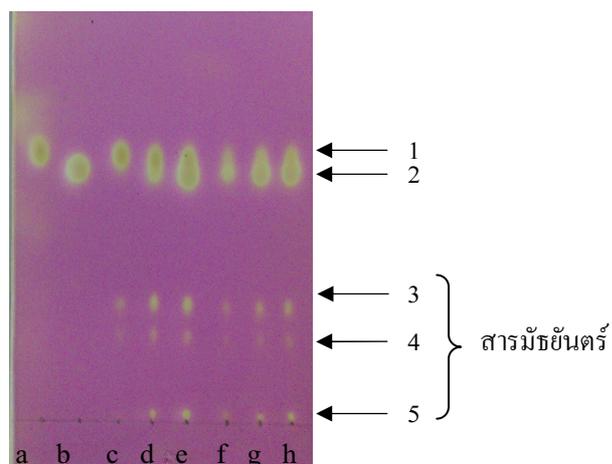
ภาพที่ 24 โครมาโทแกรมของการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่เวลา 20 นาที ระบบของตัวทำละลาย คือ เอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 20 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร 1 คือ เมทิลเอสเทอร์ 2 คือ ไตรกลีเซอไรด์ 3, 4 และ 5 คือ สารมัธยันตร์



ภาพที่ 25 โครมาโทแกรมของการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่เวลา 20 นาที ระบบของตัวทำละลาย คือ เอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 15 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร 1 คือ เมทิลเอสเทอร์ 2 คือ ไตรกลีเซอไรด์ 3, 4 และ 5 คือ สารมัธยันตร์



ภาพที่ 26 โครมาโทแกรมของการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันที่เวลา 20 นาที ระบบของตัวทำละลาย คือ เอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 30 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร 1 คือ เมทิลเอสเทอร์ 2 คือ ไตรกลีเซอไรด์ 3, 4 และ 5 คือ สารมัธยันตร์



ภาพที่ 27 โครมาโทแกรมของการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันที่เวลาต่างๆ โดยระบบของตัวทำละลาย คือ เอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 20 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร

a) เมทิลเอสเทอร์	d) 10 นาที	g) 40 นาที
b) ไตรกลีเซอไรด์	e) 20 นาที	h) 50 นาที
c) 2 นาที	f) 30 นาที	

2. แยกสารประกอบต่างๆที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันให้บริสุทธิ์

ทำการแยกสารประกอบต่างๆที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน โดยใช้เทคนิค PTLC สารตัวอย่างที่ใช้แยกคือน้ำมันตัวอย่าง ที่เวลา 20 นาที ที่เตรียมได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มบริสุทธิ์ในเมทานอล โดยใช้โพแทสเซียมไฮดรอกไซด์เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา ทำการทดลองที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส หลังจากหยุดปฏิกิริยาด้วยกรดแล้วทำการปรับค่าพีเอชน้ำมันตัวอย่างให้เป็นกลาง น้ำมันตัวอย่างที่ได้จำเป็นต้องผ่านกระบวนการสกัดเพื่อให้ได้น้ำมันตัวอย่างที่สะอาดและไม่มีสารประกอบจำพวกสบู่หรือน้ำเจือปน ทำได้โดยหลังจากที่น้ำมันตัวอย่างถูกระเหยเมทานอลออกจนหมดแล้วให้ทำการล้างด้วยน้ำเพื่อกำจัดสบู่ที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยา จากนั้นจึงสกัดด้วยตัวทำละลายเอทิลเอซิเทตทั้งหมด 3 ครั้ง สารผสมของน้ำมันตัวอย่างจะอยู่ในชั้นเอทิลเอซิเทต หลังจากระเหยตัวทำละลายเอทิลเอซิเทตจนหมดแล้วจะได้น้ำมันตัวอย่างที่สะอาด สารผสมของน้ำมันตัวอย่างที่ได้นี้จะถูกนำไปแยกโดยใช้ PTLC แสดงดังภาพที่ 28 จะแยกสารประกอบได้ทั้งหมด 5 ชนิด ได้แก่ เมทิลเอสเทอร์ ไตรกลีเซอไรด์และสารมัธยันตร์อีก 3 ชนิด (พิจารณาได้จากโครมาโทแกรมที่ปรากฏบน TLC)

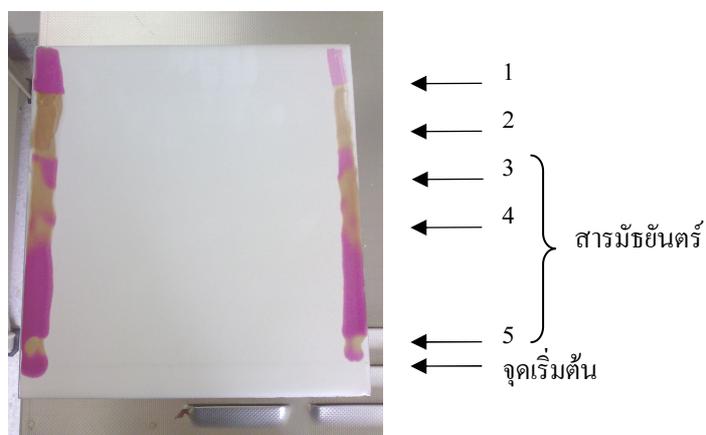
การนำน้ำมันตัวอย่างมาแยกด้วย PTLC ทำได้โดยเตรียมสารผสมของน้ำมันหนัก 0.0215 กรัม ละลายในตัวทำละลายเอทิลเอซิเทตประมาณ 5-6 หยด จากนั้นค่อยๆหยดสารละลายที่เตรียมไว้ลงบนแผ่น PTLC ให้เป็นเส้นตรงที่บริเวณด้านล่างของแผ่น PTLC ทำการแยกโครมาโทแกรมโดยใช้ระบบตัวทำละลายเอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 30 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร (ในการทดลองนี้ ใช้ตัวทำละลาย 100 มิลลิลิตร ต่อ 1 แผ่น PTLC) เมื่อแยกเสร็จแล้วจำเป็นต้องนำลำกล้องสารละลายโพแทสเซียมเปอร์แมงกาเนตแล้วป้ายบริเวณด้านข้างของแผ่น PTLC เพื่อให้สามารถเห็นแถบตำแหน่งของสารประกอบที่แยกได้อย่างชัดเจน แสดงดังภาพที่ 28 จะเห็นได้ว่ามีสารประกอบทั้งหมด 5 ชนิด ได้แก่ เมทิลเอสเทอร์ (ตำแหน่งที่ 1) ไตรกลีเซอไรด์ (ตำแหน่งที่ 2) และสารมัธยันตร์ 3 ชนิด (ตำแหน่งที่ 3, 4 และ 5) โดยแถบของเมทิลเอสเทอร์จะซ้อนทับกับแถบของไตรกลีเซอไรด์และแถบของสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 3 จะซ้อนทับกับแถบของสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 4 ดังนั้นในการแยกครั้งแรกจะชุดซิลิกาเจลออกมาได้ 3 แถบ ได้แก่ แถบของตำแหน่งที่ 1+2 แถบของตำแหน่งที่ 3+4 และแถบของตำแหน่งที่ 5 จากนั้นนำซิลิกาเจลที่ชุดออกมาแล้วนำไปปั่นกวนในตัวทำละลายเอทิลเอซิเทตโดยประมาณ 30 นาที เพื่อชะสารที่เกาะอยู่บนซิลิกาเจลออกมา เมื่อกรองซิลิกาเจลและระเหยตัวทำละลายออกจนหมดแล้วสารประกอบทั้งหมดที่ได้จะถูกเก็บไว้ในขวด Vial ในการแยกครั้งแรกจะได้สารมัธยันตร์ที่บริสุทธิ์ที่ปรากฏบน PTLC ที่ตำแหน่งที่ 5 มีน้ำหนัก

0.0021 กรัม ส่วนเมทิลเอสเทอร์ที่ปนกับไตรกลีเซอไรด์และสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 3 ที่ปนกับสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 4 จะถูกนำมาแยกใหม่อีกครั้งโดยเปลี่ยนระบบของตัวทำละลาย

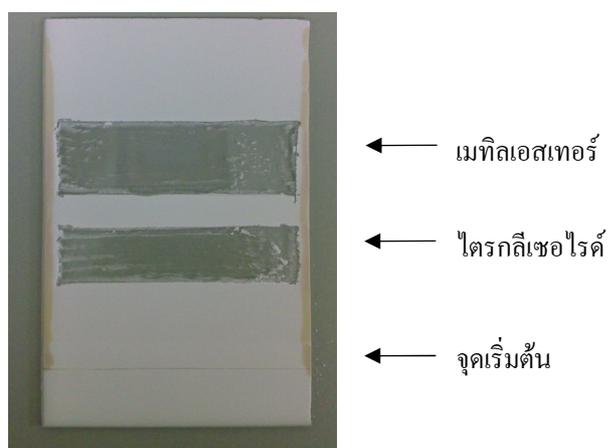
สำหรับเมทิลเอสเทอร์ที่ปนกับไตรกลีเซอไรด์ได้ถูกนำมาแยกอีกครั้งโดยใช้ระบบตัวทำละลายเอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 15% เปอร์เซนต์โดยปริมาตร แต่การแยกครั้งนี้จะแยกโดยใช้ PTLC แผ่นเล็ก ที่มีขนาดของซิลิกาเจล 70 เมช (WAKO plate) เนื่องจากมีความสามารถของการแยกดีกว่าและไม่จำเป็นต้องใช้ PTLC ขนาดใหญ่เพราะสารที่จะแยกมีปริมาณน้อยลง หลังจากที่นำซิลิกาเจลที่ขูดออกมาจากแผ่น PTLC ขนาดเล็กแล้ว แสดงดังภาพที่ 29 ของแข็งที่ขูดออกมาจะถูกนำไปปั่นกวนในตัวทำละลายเอทิลเอซิเทตโดยใช้เวลาประมาณ 30 นาที จากนั้นกรองซิลิกาเจลและระเหยตัวทำละลายออกจนหมด ได้น้ำหนักของ ไตรกลีเซอไรด์ 0.0042 กรัม และน้ำหนักของเมทิลเอสเทอร์ 0.0028 กรัม

สำหรับสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 3 ที่ปนกับสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 4 ถูกนำมาแยกอีกครั้งโดยใช้ระบบตัวทำละลายเอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 20 เปอร์เซนต์โดยปริมาตร และใช้ PTLC แผ่นเล็ก ที่มีขนาดของซิลิกาเจล 70 เมช WAKO plate หลังจากที่นำซิลิกาเจลที่ขูดออกมา (แสดงดังภาพที่ 30) แล้วให้นำไปปั่นกวนในตัวทำละลายเอทิลเอซิเทตเป็นเวลาประมาณ 30 นาที จากนั้นกรองซิลิกาเจลและระเหยตัวทำละลายออกจนหมดแล้ว ปริมาณของสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 3 ที่แยกได้น้ำหนัก 0.0012 กรัม มีลักษณะกึ่งของแข็งกึ่งของเหลวสีเหลืองอ่อน ส่วนปริมาณสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 4 ที่แยกได้น้ำหนัก 0.0008 กรัม มีลักษณะกึ่งของแข็งกึ่งของเหลวสีเหลืองอ่อน จะเห็นว่าสารประกอบทั้งหมดที่แยกได้มีปริมาณน้อยมาก จึงจำเป็นต้องทำการแยกสารผสมของน้ำมันอีกในการทดลองครั้งนี้ได้ทำการแยกสารผสมเป็นจำนวนทั้งหมด 6 ครั้ง เพื่อให้ได้สารที่เพียงพอต่อการวิเคราะห์ต่อไป

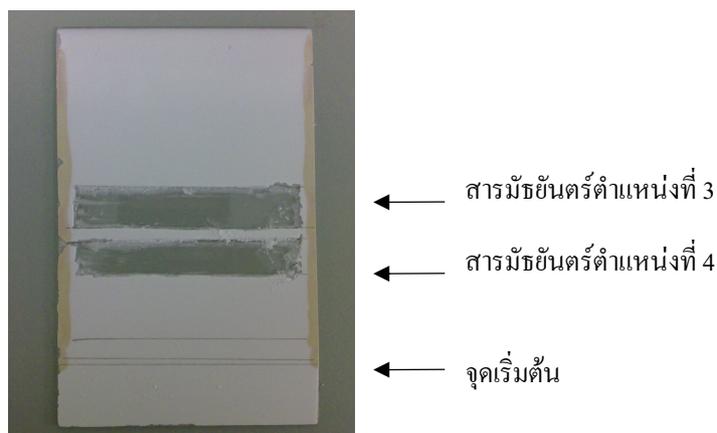
จะเห็นได้ว่าสารผสมของน้ำมันตัวอย่างที่ได้จากการทดลองปฏิบัติการทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มบริสุทธิ์ ที่เวลา 20 นาที ที่นำมาใช้แยกเริ่มต้นมีน้ำหนัก 0.0215 กรัม แต่หลังจากการแยกสารผสมของน้ำมันตัวอย่างออกเป็นสารประกอบต่างๆ ได้แก่ เมทิลเอสเทอร์ ไตรกลีเซอไรด์และสารมัธยันตร์อีก 3 ชนิด พบว่า ได้น้ำหนักของสารประกอบหลังจากการแยกทั้งหมดรวม 0.0114 กรัม สาเหตุที่สูญเสียน้ำมันตัวอย่างเนื่องมาจาก สารละลายโพแทสเซียมเปอร์แมงกาเนตที่ป้ายบริเวณด้านข้างของแผ่น PTLC จะป้ายทับสารตัวอย่าง จึงทำให้เสียตัวอย่างไปบางส่วนไม่สามารถนำมาใช้ได้



ภาพที่ 28 โครมาโทแกรมของการแยกสารผสมน้ำมันตัวอย่าง ที่เวลา 20 นาที ที่เตรียมได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน โดยใช้ตัวทำละลายเอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 30 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



ภาพที่ 29 ซิลิกาเจลที่ขูดออกจากแผ่น PTLC ของการแยกเมทิลเอสเทอร์ออกจากไตรกลีเซอไรด์ โดยใช้ตัวทำละลายเอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 15 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



ภาพที่ 30 ซิลิกาเจลที่ขูดออกจากแผ่น PTLC ของการแยกสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 3 และ สารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 4 โดยใช้ตัวทำละลายเอทิลเอซิเทตในเฮกเซน 20 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร

3. วิเคราะห์หาชนิดของสารประกอบด้วยเครื่องแมสสเปกโตรมิเตอร์

สารประกอบ เมทิลเอสเทอร์ ไตรกลีเซอไรด์และสารมัธยันตร์อีก 3 ชนิด ที่แยกได้จะถูกนำไปวิเคราะห์โดยใช้เทคนิค MS เพื่อวิเคราะห์ว่าเป็นสารประกอบประเภทใดโดยพิจารณาได้จากตำแหน่งของสัญญาณบนแมสสเปกตรัม ซึ่งแสดงให้เห็นถึงน้ำหนักโมเลกุลของสารประกอบชนิดต่างๆ ผลจากการพิจารณา เป็นดังนี้

แมสสเปกตรัมของเมทิลเอสเทอร์หรือสารประกอบตำแหน่งที่ 1 (แสดงดังภาพผนวกที่ 1) ให้ค่าอัตราส่วนมวลต่อประจุ (m/z) บนแมสสเปกตรัมเป็นดังนี้ 271.2621, 295.2624, 297.2784 ผลการทดลองแสดงดังตารางที่ 7 จากผลการทดลองพบว่า สารประกอบเมทิลเอสเทอร์ที่ได้เป็นสารประกอบเอสเทอร์ที่ได้จากกรดไขมันอิสระชนิด 16:0 18:1 และ 18:2

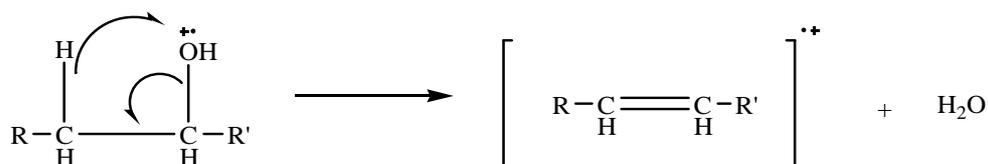
แมสสเปกตรัมของไตรกลีเซอไรด์หรือสารประกอบที่ตำแหน่งที่ 2 (แสดงดังภาพผนวกที่ 2) ให้ค่าอัตราส่วนมวลต่อประจุ (m/z) บนแมสสเปกตรัมเป็นดังนี้ 833.7558, 855.7382, 857.7553, 859.7712, 883.7696, 885.7860 ผลการทดลอง แสดงดังตารางที่ 8 จากผลการทดลองพบว่า หมู่เอซิลที่เกาะอยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนของสารประกอบไตรกลีเซอไรด์ที่เป็นไปได้ประกอบด้วยกรดไขมันอิสระชนิด 16:0 16:1 18:0 18:1 และ 18:2

ผลจากแมสสเปกตรัมสารประกอบที่ตำแหน่งที่ 3 (แสดงดังภาพผนวกที่ ง3) ให้ค่าอัตราส่วนมวลต่อประจุ (m/z) เป็นดังนี้ 551.5025, 577.5152, 595.5249, 603.5312 ผลการทดลองแสดงดังตารางที่ 9 จากผลการทดลองแสดงให้เห็นว่าสารประกอบชนิดนี้ คือ สารประกอบไดกลีเซอไรด์และหมู่เอซิลที่เกาะอยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนของสารประกอบไดกลีเซอไรด์ที่เป็นไปได้ประกอบด้วยกรดไขมันอิสระชนิด 16:0 18:1 และ 18:2

ผลจากแมสสเปกตรัมสารประกอบที่ตำแหน่งที่ 4 (แสดงดังภาพผนวกที่ ง4) ให้ค่าอัตราส่วนมวลต่อประจุ (m/z) เป็นดังนี้ 551.5047, 569.5315, 577.5184, 595.5272, 621.5424, 603.5337 ผลการทดลองแสดงดังตารางที่ 10 จากผลการทดลองแสดงให้เห็นว่าสารประกอบชนิดนี้ คือ สารประกอบไดกลีเซอไรด์และหมู่เอซิลที่เกาะอยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนของสารประกอบไดกลีเซอไรด์ที่เป็นไปได้ประกอบด้วยกรดไขมันอิสระชนิด 16:0 18:1 และ 18:2

ผลจากแมสสเปกตรัมสารประกอบที่ตำแหน่งที่ 5 (แสดงดังภาพผนวกที่ ง5) ให้ค่าอัตราส่วนมวลต่อประจุ (m/z) เป็นดังนี้ 331.2837, 355.2846, 357.2994 ผลการทดลองแสดงดังตารางที่ 11 จากผลการทดลองแสดงให้เห็นว่าสารประกอบชนิดนี้ คือ สารประกอบโมโนกลีเซอไรด์และหมู่เอซิลที่เกาะอยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนของสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์ที่เป็นไปได้ประกอบด้วยกรดไขมันอิสระชนิด 16:0 18:1 และ 18:2

พิจารณาโครงสร้างสารประกอบพวกไดกลีเซอไรด์และโมโนกลีเซอไรด์ จะเห็นได้ว่าสารประกอบเหล่านี้เป็นสารประกอบที่มีโครงสร้างของแอลกอฮอล์แบบปฐมภูมิและทุติยภูมิ ตามทฤษฎีนั้น Molecular ion ของสารประกอบเหล่านี้มีเสถียรภาพ (Stability) ต่ำและเกิดการแตกหักเป็น fragment ion ได้ง่าย (Pavia and Lampman, 2001) ดังนั้นการนำสารประกอบเหล่านี้มาวิเคราะห์โดยเทคนิค MS จะทำให้สามารถปรากฏค่าอัตราส่วนมวลต่อประจุได้สองค่า ได้แก่ ค่าอัตราส่วนมวลต่อประจุที่แท้จริงของสารประกอบนั้นๆ $[M+1]^+$ กับค่าอัตราส่วนมวลต่อประจุของสารประกอบที่มีการสูญเสียโมเลกุลน้ำ $[M+1-H_2O]^+$ แสดงดังภาพที่ 31



ภาพที่ 31 การสูญเสียโมเลกุลน้ำในโมเลกุลของสารประกอบแอลกอฮอล์

ตารางที่ 7 ผลการทดลองที่ได้จากแมสสเปกตรัมของสารประกอบตำแหน่งที่ 1

m/z	หมู่เอซิล	สูตรโมเลกุล	มวลโมเลกุล
271.2621[M+1] ⁺	16:0	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	270
295.2624[M+1] ⁺	18:2	C ₁₉ H ₃₄ O ₂	294
297.2784[M+1] ⁺	18:1	C ₁₉ H ₃₆ O ₂	296

ตารางที่ 8 ผลการทดลองที่ได้จากแมสสเปกตรัมของสารประกอบตำแหน่งที่ 2

m/z	หมู่เอซิล	สูตรโมเลกุล	มวลโมเลกุล
833.7558 [M+1] ⁺	16:0, 16:0, 18:1	C ₅₃ H ₁₀₀ O ₆	832
855.7382 [M+1] ⁺	16:0, 18:2, 18:2	C ₅₅ H ₉₈ O ₆	854
857.7553 [M+1] ⁺	18:2, 18:1, 16:0	C ₅₅ H ₁₀₀ O ₆	856
859.7712 [M+1] ⁺	16:0, 18:1, 18:1	C ₅₅ H ₁₀₂ O ₆	858
883.7696 [M+1] ⁺	18:1, 18:1, 18:2	C ₅₇ H ₁₀₂ O ₆	882
885.7860 [M+1] ⁺	18:1, 18:1, 18:1	C ₅₇ H ₁₀₄ O ₆	884

ตารางที่ 9 ผลการทดลองที่ได้จากแมสสเปกตรัมของสารประกอบตำแหน่งที่ 3

m/z	หมู่เอซิล	สูตรโมเลกุล	มวลโมเลกุล
551.5047 [M+1-H ₂ O] ⁺ , 569.5313 [M+1] ⁺	16:0, 16:0	C ₃₅ H ₆₈ O ₅	568
575.5007 [M+1-H ₂ O] ⁺ , 593.5838 [M+1] ⁺	16:0, 18:2	C ₃₇ H ₆₈ O ₅	593
577.5152 [M+1-H ₂ O] ⁺ , 595.5249[M+1] ⁺	16:0, 18:1	C ₃₇ H ₇₀ O ₅	594
603.5312 [M+1-H ₂ O] ⁺ , 621.5415[M+1] ⁺	18:1, 18:1	C ₃₉ H ₇₂ O ₅	620

ตารางที่ 10 ผลการทดลองที่ได้จากแมสสเปกตรัมของสารประกอบตำแหน่งที่ 4

m/z	หมู่เอซิล	สูตรโมเลกุล	มวลโมเลกุล
551.5047 [M+1-H ₂ O] ⁺ , 569.5315 [M+1] ⁺	16:0, 16:0	C ₃₅ H ₆₈ O ₅	568
575.5027 [M+1-H ₂ O] ⁺ , 593.5127 [M+1] ⁺	16:0, 18:2	C ₃₇ H ₆₈ O ₅	592
577.5184 [M+1-H ₂ O] ⁺ , 595.5272 [M+1] ⁺	18:1, 16:0	C ₃₇ H ₇₀ O ₅	594
603.5337 [M+1-H ₂ O] ⁺ , 621.5424 [M+1] ⁺	18:1, 18:1	C ₃₉ H ₇₂ O ₅	620

ตารางที่ 11 ผลการทดลองที่ได้จากแมสสเปกตรัมของสารประกอบตำแหน่งที่ 5

m/z	หมู่เอซิล	สูตรโมเลกุล	มวลโมเลกุล
313.2750[M+1-H ₂ O] ⁺ , 331.2837 [M+1] ⁺	C 16:0	C ₁₉ H ₃₈ O ₄	330
337.2932[M+1-H ₂ O] ⁺ , 355.2846 [M+1] ⁺	C 18:2	C ₂₁ H ₄₀ O ₄	354
339.2901[M+1-H ₂ O] ⁺ , 357.2994 [M+1] ⁺	C 18:1	C ₂₁ H ₄₀ O ₄	356

ผลจากแมสสเปกตรัมที่ได้นี้นอกจากจะทราบชนิดของสารประกอบพวกเอซิลกลีเซอรอลแล้ว ยังสามารถทราบถึงชนิดของกรดไขมันที่เกาะอยู่บนเอซิลกลีเซอรอล โดยคำนวณจากค่าน้ำหนักโมเลกุลที่ได้จากแมสสเปกตรัมว่าควรจะตรงกับกรดไขมันชนิดใด จากผลการทดลองแสดงให้เห็นว่าชนิดของกรดไขมันที่พบในน้ำมันปาล์มส่วนใหญ่มี 2 ชนิด ได้แก่ กรดไขมันอิ่มตัวที่มีจำนวนคาร์บอน 16 อะตอม (16:0) และกรดไขมันไม่อิ่มตัวที่มีจำนวนคาร์บอน 18 อะตอมที่ประกอบด้วยพันธะคู่ 1 พันธะ (18:1) ส่วนปริมาณกรดไขมันไม่อิ่มตัวที่มีจำนวนคาร์บอน 18 อะตอมที่ประกอบด้วยพันธะคู่ 2 พันธะ (18:2) พบน้อยมากเมื่อเทียบกับกรดไขมันทั้งสองชนิดดังกล่าวไว้ข้างต้น

4. วิเคราะห์ชนิดสารประกอบด้วยเครื่อง นิวเคลียร์ แมกเนติกเรโซแนนซ์ สเปกโตรมิเตอร์

ผลจากการวิเคราะห์สารประกอบ เมทิลเอสเทอร์ ไตรกลีเซอไรด์และสารมัธยันต์อีก 3 ชนิดที่แยกได้จากน้ำมันตัวอย่างของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่เวลา 20 นาที ด้วยเทคนิค MS พบว่าสารมัธยันต์ที่ตำแหน่งที่ 3 และ 4 คือ ไดกลีเซอไรด์ และสารมัธยันต์ที่ตำแหน่งที่ 5 คือ โมโนกลีเซอไรด์ แต่เทคนิค MS ไม่สามารถวิเคราะห์ชนิดของไอโซเมอร์ที่เกิดขึ้นบนไดกลีเซอไรด์

และโมโนกลีเซอไรด์ได้ แต่ในการศึกษาวิถีทางของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันนั้น จำเป็นต้องทราบปริมาณไอโซเมอร์ของไตรกลีเซอไรด์และโมโนกลีเซอไรด์ในปฏิกิริยา ดังนั้นเทคนิค $^1\text{H NMR}$ จึงถูกนำมาประยุกต์ใช้ในการทดลองนี้ จากงานวิจัยของ Gelbard และคณะ (1995) ได้ทำการศึกษาวิเคราะห์ปริมาณร้อยละของเมทิลเอสเทอร์จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันระหว่างน้ำมันเมล็ดเรพและเมทานอล โดยใช้เทคนิค $^1\text{H NMR}$ ซึ่งให้ผลถูกต้องและแม่นยำกว่าการวิเคราะห์ด้วยเทคนิคแก๊สโครมาโทกราฟี เนื่องจากการวิเคราะห์เมทอกซีโปรตอนที่อยู่บนโมเลกุลเมทิลเอสเทอร์และจากงานวิจัยของ Spyros และ Drimitrios (2004) ซึ่งได้ทำการศึกษาการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันและปฏิกิริยาไฮโดรไลซิสของน้ำมันเมล็ดลิน (Linseed oil) และน้ำมันเมล็ดปอปปี้ (Poppy seed oil) โดยใช้เทคนิค $^1\text{H NMR}$ และ $^{13}\text{C NMR}$ เพื่อวิเคราะห์สารประกอบไตรกลีเซอไรด์และโมโนกลีเซอไรด์ที่เกิดขึ้นในการทดลองนี้จึงเลือกนำเทคนิค $^1\text{H NMR}$ มาประยุกต์ใช้เพื่อที่จะให้ทราบถึงชนิดของไอโซเมอร์ที่เกิดขึ้นบนไตรกลีเซอไรด์และโมโนกลีเซอไรด์

ในการวิเคราะห์สัญญาณ $^1\text{H NMR}$ นั้นจะเริ่มพิจารณาจากสารประกอบไตรกลีเซอไรด์ซึ่งถือว่าเป็นสารตั้งต้นของปฏิกิริยา สารประกอบไตรกลีเซอไรด์เป็นสารประกอบที่มีหมู่เอซิลเกาะอยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนทั้งสามตัว เมื่อเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันจะทำให้หมู่เอซิลหลุดออกจากกลีเซอรอลคาร์บอนถ้าหมู่เอซิลหลุดออกหนึ่งหมู่จะทำให้เกิดสารประกอบไตรกลีเซอไรด์และถ้าหมู่เอซิล หลุดออกสองหมู่จะทำให้เกิดสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์ การที่หมู่เอซิลหลุดออกจากสารประกอบไตรกลีเซอไรด์จะทำให้โปรตอนที่เกาะอยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 1, 2 และ 3 มีการเลื่อนตำแหน่งของการเรโซแนนซ์อยู่ในสนามที่แรงขึ้น เนื่องจากมีการสูญเสียหมู่เอซิลซึ่งเป็นหมู่ดึงอิเล็กตรอน (Pavia and Lampman, 2001) จึงทำให้สามารถวิเคราะห์ความแตกต่างระหว่างไตรกลีเซอไรด์ที่มีหมู่เอซิลเกาะอยู่บนคาร์บอนตำแหน่งที่ 1 และ 2 (*sn*-1,2(2,3)-DG) ของกลีเซอรอล กับไตรกลีเซอไรด์ที่มีหมู่เอซิลเกาะอยู่บนคาร์บอนตำแหน่งที่ 1 และ 3 (*sn*-1,3-DG) ของกลีเซอรอล อีกทั้งยังสามารถวิเคราะห์ความแตกต่างระหว่างโมโนกลีเซอไรด์ที่มีหมู่เอซิลเกาะอยู่บนคาร์บอนตำแหน่งที่ 1 หรือ 2 (*sn*-1(3)MG, *sn*-2-MG) ได้

สารประกอบบริสุทธิ์ของ เมทิลเอสเทอร์ ไตรกลีเซอไรด์ ไตรกลีเซอไรด์ทั้งสองชนิดและโมโนกลีเซอไรด์ ที่แยกได้จาก PTLC ของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มบริสุทธิ์ในเมทานอลโดยใช้โพแทสเซียมไฮดรอกไซด์เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา จึงถูกนำมาวิเคราะห์ด้วยเทคนิค $^1\text{H NMR}$ โดยผลจากการทดลองเป็นดังนี้

ผลการทดลองสัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบเมทิลเอสเทอร์บริสุทธิ์ (แสดงดังภาพผนวกที่ จ1) สรุปได้ดังตารางที่ 12 จากผลการทดลองจะเห็นได้ว่าในช่วงของสัญญาณที่ 0.86-2.77 พีพีเอ็ม และ 5.32-5.36 พีพีเอ็ม เป็นช่วงสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนที่อยู่บนหมู่เอซิลซึ่งสัญญาณในลักษณะนี้สามารถพบได้ในทั้งสารประกอบ ไตรกลีเซอไรด์ ไดกลีเซอไรด์และเมทิลเอสเทอร์ ส่วนสัญญาณที่เห็นได้ชัดเจนที่ 3.65 พีพีเอ็ม จะเป็นสัญญาณของโปรตอนที่อยู่บนหมู่เมทอกซีของสารประกอบเมทิลเอสเทอร์เท่านั้น

ตารางที่ 12 สัญญาณ ^1H NMR และชนิดของโปรตอนของสารประกอบเมทิลเอสเทอร์บริสุทธิ์

δ (พีพีเอ็ม)	Functional group
5.32-5.36 m (1H)	$-\text{CH}=\text{CH}-$ (acyl group)
3.65 s (3H)	$\text{CH}_3\text{O}-$ (methoxy group)
2.77 t ($J=6.8$, 2H)	$=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}=(\text{acyl group})$
2.30 t ($J=7.5$, 2H)	$-\text{OCO}-\text{CH}_2-$ (acyl group)
1.90-2.10 m (2H)	$\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}$ (acyl group)
1.58-1.66 m (2H)	$-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COO}-$ (acyl group)
1.25-1.30 m (2H)	$-(\text{CH}_2)_n-$ (acyl group)
0.86-0.90 m (3H)	$-\text{CH}_3$ (acyl group)

ผลการทดลองสัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบไตรกลีเซอไรด์บริสุทธิ์ (แสดงดังภาพผนวกที่ จ3) สรุปได้ดังตารางที่ 13 จากผลการทดลองจะเห็นได้ว่า ในช่วงของสัญญาณที่ 0.86-2.77 พีพีเอ็ม และ 5.30-5.40 พีพีเอ็ม เป็นช่วงสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนที่อยู่บนหมู่เอซิล ส่วนในช่วงของสัญญาณที่ 4.10-4.40 พีพีเอ็ม เป็นช่วงสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนที่อยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 2 และในช่วงของสัญญาณที่ 5.24-5.30 พีพีเอ็ม เป็นช่วงสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนที่อยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 1(3)

ตารางที่ 13 สัญญาณ ^1H NMR และชนิดของโปรตอนของสารประกอบไตรกลีเซอไรด์บริสุทธิ์

δ (พีพีเอ็ม)	Functional group
5.30-5.40 m (2H)	-CH=CH- (acyl group)
5.24-5.30 m (1H)	-CHOCOR (glyceryl group)
4.10-4.40 m (4H)	-CH ₂ OCOR (glyceryl group)
2.77 t ($J=6.5$, 2H)	=CH-CH ₂ -CH= (acyl group)
2.31 t ($J=7.5$, 2H)	-OCO-CH ₂ - (acyl group)
1.98-2.08 m (2H)	CH ₂ -CH=CH (acyl group)
1.50-1.65 m (2H)	-CH ₂ CH ₂ COO- (acyl group)
1.20-1.35 m (2H)	-(CH ₂) _n - (acyl group)
0.86-0.91 m (3H)	-CH ₃ (acyl group)

ผลการทดลองสัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบไตรกลีเซอไรด์บริสุทธิ์หรือสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 3 (แสดงดังภาพผนวกที่ จ5) สรุปได้ดังตารางที่ 14 จากผลการทดลองจะเห็นได้ว่าในช่วงของสัญญาณที่ 0.85-2.80 พีพีเอ็ม และ 5.31-5.40 พีพีเอ็ม เป็นช่วงสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนที่อยู่บนหมู่ เอซิล ส่วนในช่วงของสัญญาณที่ 4.06-4.12 พีพีเอ็ม เป็นช่วงสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนที่อยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 1(3) (พิจารณาได้จากรูปแบบของสัญญาณและค่าอินทิเกรชัน) และในช่วงของสัญญาณที่ 4.06-4.12 พีพีเอ็ม เป็นช่วงสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนที่อยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 2 (พิจารณาได้จากรูปแบบของสัญญาณและค่าอินทิเกรชัน) จึงสรุปได้ว่าสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 3 คือสารประกอบ 1,3-ไตรกลีเซอไรด์

ตารางที่ 14 สัญญาณ ^1H NMR และชนิดของโปรตอนของสารประกอบไตรกลีเซอไรด์บริสุทธิ์ (สารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 3)

δ (พีพีเอ็ม)	Functional group
5.31-5.40 m (2H)	-CH=CH- (acyl group)
4.11-4.22 m (2H)	-CH ₂ OCOR (glyceryl group)
4.06-4.12 m (1H)	-CHOH (glyceryl group)

ตารางที่ 14 (ต่อ)

δ (พีพีเอ็ม)	Functional group
2.75-2.80 m (2H)	=CH-CH ₂ -CH=
2.35 t ($J=7.5$, 2H)	-OCO-CH ₂ - (acyl group)
1.97-2.05 m (2H)	-CH ₂ -CH=CH (acyl group)
1.55-1.65 m (2H)	-CH ₂ CH ₂ COO-(acyl group)
1.22-1.34 m (2H)	-(CH ₂) _n - (acyl group)
0.85-0.94 m (2H)	-CH ₃ (acyl group)

ผลการทดลองสัญญาณ ¹H NMR ของสารประกอบไดกลีเซอไรด์บริสุทธิ์หรือสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 4 (แสดงดังภาพผนวกที่ จ7) สรุปได้ดังตารางที่ 15 จากผลการทดลองจะเห็นได้ว่าในช่วงของสัญญาณที่ 0.80-2.75 พีพีเอ็ม และ 5.20-5.40 พีพีเอ็ม เป็นช่วงสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนที่อยู่บนหมู่เอซิล สัญญาณที่ 3.66 พีพีเอ็ม เป็นช่วงสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนที่อยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 3 (พิจารณาได้จากรูปแบบของสัญญาณและค่าอินทิเกรชัน) ส่วนในช่วงของสัญญาณที่ 4.14-4.28 พีพีเอ็ม เป็นช่วงสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนที่อยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 1 (พิจารณาได้จากรูปแบบของสัญญาณและค่าอินทิเกรชัน) และช่วงของสัญญาณที่ 4.99-5.04 พีพีเอ็ม เป็นช่วงสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนที่อยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 2 (พิจารณาได้จากรูปแบบของสัญญาณและค่าอินทิเกรชัน) จึงสรุปได้ว่าสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 4 คือ สารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์

ตารางที่ 15 สัญญาณ ¹H NMR และชนิดของโปรตอนของสารประกอบไดกลีเซอไรด์บริสุทธิ์ (สารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 4)

δ (พีพีเอ็ม)	Functional group
5.20-5.40 m (2H)	-CH=CH- (acyl group)
4.99-5.04 m (1H)	-CHOCOR (glyceryl group)
4.14-4.28 m (2H)	-CH ₂ OCOR (glyceryl group)
3.66 d ($J=4.8$, 2H)	-CH ₂ OH (glyceryl group)
2.75 t ($J=6.0$, 2H)	=CH-CH ₂ -CH=(acyl group)

ตารางที่ 15 (ต่อ)

δ (พีพีเอ็ม)	Functional group
2.25-2.30 m (2H)	-OCO-CH ₂ - (acyl group)
1.90-2.00 m (2H)	-CH ₂ -CH=CH (acyl group)
1.50-1.70 m (2H)	-CH ₂ CH ₂ COO-(acyl group)
1.15-1.40 m (2H)	-(CH ₂) _n - (acyl group)
0.80-1.00 m (2H)	-CH ₃ (acyl group)

ผลการทดลองสัญญาณ ¹H NMR ของสารประกอบ โมโนกลีเซอไรด์บริสุทธิ์หรือ สารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 5 (แสดงดังภาพผนวกที่ ๑9) สรุปได้ดังตารางที่ 16 จากผลการทดลองจะ เห็นได้ว่าในช่วงของสัญญาณที่ 0.85-2.78 พีพีเอ็ม และ 5.30-5.40 พีพีเอ็ม เป็นช่วงสัญญาณ เรโซแนนซ์ของโปรตอนที่อยู่บนหมู่เอซิด เมื่อพิจารณารูปแบบของสัญญาณและค่าอินทิเกรชัน พบว่าตำแหน่งของสัญญาณที่ 4.12-4.24 พีพีเอ็ม 3.90-3.97 พีพีเอ็ม และ 3.30-3.75 พีพีเอ็ม เป็นสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนที่อยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 1 2 และ 3 ของ 1-โมโนกลีเซอไรด์ ส่วนตำแหน่งของสัญญาณที่ 3.84 พีพีเอ็ม และ 4.90-5.00 พีพีเอ็ม เป็นสัญญาณเรโซแนนซ์ของโปรตอนที่อยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 1(3) และ 2 ของ 2-โมโนกลีเซอไรด์

ตารางที่ 16 สัญญาณ ¹H NMR และชนิดของโปรตอนของสารประกอบ โมโนกลีเซอไรด์บริสุทธิ์ (สารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 5)

δ (พีพีเอ็ม)	Functional group
5.30-5.40 m (2H)	-CH=CH- (acyl group)
4.90-5.00 m (1H)	-CHOCOR of 2-MG
4.12-4.24 m (2H)	-CH ₂ OCOR of 1-MG
3.90-3.97 (1H)	-CHOH of 1-MG
3.84 d (<i>J</i> =4.5, 2H)	-CH ₂ OH of 2-MG
3.30-3.75 m (2H)	-CH ₂ OH of 1-MG
2.78 t (<i>J</i> =6.0, 2H)	=CH-CH ₂ -CH=(acyl group)

ตารางที่ 16 (ต่อ)

δ (พีพีเอ็ม)	Functional group
2.30-2.40t ($J=8.0$, 2H)	-OCO-CH ₂ - (acyl group)
1.90-2.10 m (2H)	-CH ₂ -CH=CH (acyl group)
1.58-1.70 m (2H)	-CH ₂ CH ₂ COO-(acyl group)
1.20-1.40 m (2H)	-(CH ₂) _n - (acyl group)
0.85-0.92 m (2H)	-CH ₃ (acyl group)

ผลจากการพิจารณาสัญญาณ ¹H NMR สรุปได้ว่าโคกลีเซอไรด์ทั้งสองชนิด คือ 1,3-โคกลีเซอไรด์ (สารประกอบตำแหน่งที่ 3) และ 1,2-โคกลีเซอไรด์ (สารประกอบตำแหน่งที่ 4) ส่วนสัญญาณ ¹H NMR ของสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์ (สารมัธยันต์ตำแหน่งที่ 5) พบว่าประกอบไปด้วยโมโนกลีเซอไรด์ทั้งสองไอโซเมอร์ ได้แก่ 1-โมโนกลีเซอไรด์ และ 2-โมโนกลีเซอไรด์ เมื่อพิจารณาปริมาณอัตราส่วนของ 1-โมโนกลีเซอไรด์ เทียบกับ 2-โมโนกลีเซอไรด์ จากค่าอินทิเกรชัน พบว่า 1-โมโนกลีเซอไรด์ มีปริมาณมากกว่า 2-โมโนกลีเซอไรด์ประมาณ 10 เท่า (วิธีการคำนวณในภาคผนวก ข) ค่าอัตราส่วนที่ได้นี้ถือเป็นค่าอัตราส่วนไอโซเมอร์ของสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์ที่อยู่ในสารผสมน้ำมันตัวอย่างของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันที่เวลา 20 นาที เนื่องจากว่าสารบริสุทธิ์ของโมโนกลีเซอไรด์ที่นำมาวิเคราะห์เป็นสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์ที่แยกมาจากน้ำมันตัวอย่างของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันที่เวลา 20 นาที จึงสรุปได้ว่าสารผสมของน้ำมันที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันนั้นจะประกอบไปด้วย เมทิลเอสเทอร์ ไตรกลีเซอไรด์ 1,3-โคกลีเซอไรด์ 1,2-โคกลีเซอไรด์ 1-โมโนกลีเซอไรด์และ 2-โมโนกลีเซอไรด์

ผลจากการวิเคราะห์โดยใช้เทคนิค ¹H NMR และ MS ทำให้ทราบชนิดของสารประกอบต่างๆที่เกิดขึ้นในปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มบริสุทธิ์ แสดงดังตารางที่ 17

ตารางที่ 17 ผลการวิเคราะห์สารประกอบที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชัน
ที่เวลา 20 นาที

ชื่อสารประกอบ	หมู่เอซิล
เมทิลเอสเทอร์	
Methyl palmitate	16:0
Methyl oleate	18:1
Methyl linoleate	18:2
ไตรกลีเซอไรด์	
Dipalmitoyl-oleoyl-glycerol	16:0,16:0, 18:1
Palmitoyl-dilinoleoyl-glycerol	18:2, 18:2, 16:0
Palmitoyl-oleoyl-linoleoyl-glycerol	18:2, 18:1, 16:0
Palmitoyl-dioleoyl-glycerol	18:1, 18:1, 16:0
Dioleoyl-linoleoyl-glycerol	18:1, 18:1, 18:2
Triolein	18:1, 18:1, 18:1
ไดกลีเซอไรด์	
1,2-palmitolein	16:0, 16:0
1,3-palmitolein	16:0, 16:0
1,2-palmitoyl-linoleoyl-glycerol	16:0, 18:2
1,3-palmitoyl-linoleoyl-glycerol	16:0, 18:2
1,2-palmitoyl-oleoyl-glycerol	16:0, 18:1
1,3-palmitoyl-oleoyl-glycerol	16:0, 18:1
1,2-diolein	18:1, 18:1
1,3-diolein	18:1, 18:1

ตารางที่ 17 (ต่อ)

ชื่อสารประกอบ	หมู่เอซิด
โมโนกลีเซอไรด์	
1-monopalmitin	16:0
2-monopalmitin	16:0
1-monoolein	18:1
2-monoolein	18:1

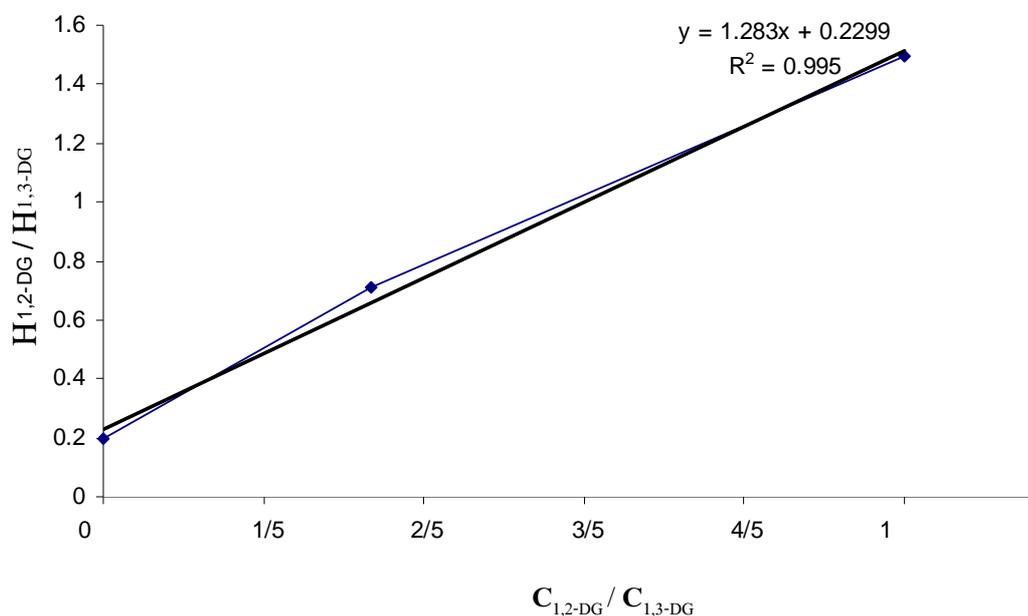
เมื่อพิจารณาสัญญาณเรโซแนนซ์ของสารประกอบ เมทิลเอสเทอร์ ไตรกลีเซอไรด์ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ 1-โมโนกลีเซอไรด์และ 2-โมโนกลีเซอไรด์ จะพบว่าถ้ามีสารประกอบทั้งหมดรวมกันจะไม่สามารถแยกวิเคราะห์สารประกอบแต่ละชนิดได้ เนื่องจากว่าช่วงของสัญญาณเรโซแนนซ์ที่ 3.60-3.65 พีพีเอ็ม เกิดการซ้อนทับของสัญญาณโปรตอนระหว่าง H-3 ของ 1,2-ไดกลีเซอไรด์กับ H-3 ของ 1-โมโนกลีเซอไรด์ ส่วนในช่วงของสัญญาณเรโซแนนซ์ที่ 4.10-4.20 พีพีเอ็ม จะเกิดการซ้อนทับของสัญญาณโปรตอนระหว่าง H-1(3) ของไตรกลีเซอไรด์กับ H-1 ของ 1,2-ไดกลีเซอไรด์และ H-1 ของ 1-โมโนกลีเซอไรด์ ทำให้การทดลองนี้ไม่สามารถนำน้ำมันตัวอย่างที่เวลาต่างๆ มาวิเคราะห์ด้วย $^1\text{H NMR}$ เพื่อคัดตำแหน่งสัญญาณเรโซแนนซ์ของสารประกอบเมทิลเอสเทอร์ ไตรกลีเซอไรด์ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ 1-โมโนกลีเซอไรด์ และ 2-โมโนกลีเซอไรด์ ที่เกิดขึ้นในปฏิกิริยาได้โดยตรง แต่การศึกษาวิถีทางของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันนั้นจำเป็นต้องทราบถึงปริมาณและชนิดของไอโซเมอร์ที่เกิดขึ้นบนไดกลีเซอไรด์และโมโนกลีเซอไรด์ในระหว่างการเกิดปฏิกิริยา การทดลองนี้จึงนำเทคนิค HPLC มาประยุกต์ใช้เพื่อวิเคราะห์หาปริมาณของไอโซเมอร์ของสารมัธยันตร์ที่เกิดขึ้น แต่จะสามารถวิเคราะห์ได้เฉพาะไอโซเมอร์ของสารประกอบไดกลีเซอไรด์เท่านั้น เนื่องจากว่าการทดลองนี้ยังไม่สามารถแยกไอโซเมอร์ของสารประกอบ โมโนกลีเซอไรด์ทั้งสองชนิดที่อยู่ในปฏิกิริยาได้

4. วิเคราะห์ชนิดสารประกอบด้วย HPLC

ในการวิเคราะห์สารตัวอย่างด้วยเทคนิค HPLC ได้นำสารบริสุทธิ์ของเมทิลเอสเทอร์ ไตรกลีเซอไรด์ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ 1,2-ไดกลีเซอไรด์และ โมโนกลีเซอไรด์ที่แยกได้จากปฏิกิริยา

ทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ที่เวลา 20 นาที มาใช้เป็นสารตัวอย่างมาตรฐาน ผลจากการทดลองฉีดวิเคราะห์น้ำมันตัวอย่างที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน โดยใช้ระบบตัวทำละลายแบบ Isocratic พบว่าไม่สามารถแยกวิเคราะห์ได้ เนื่องจากโครมาโทแกรมของสารประกอบ โมโนกลีเซอไรด์และไตรกลีเซอไรด์จะอยู่ชิดกันมากเกินไป (แสดงดังภาพผนวกที่ ฉ2 และ ฉ4) จึงต้องใช้ระบบตัวทำละลายแบบ Gradient จากงานวิจัยของ Holcapek *et al.* (1999) ได้ใช้ระบบตัวทำละลายที่ประกอบไปด้วย ไอโซโพรพานอล เฮกเซน อะซิโตน ไตรคลอโรเอทิลีน และน้ำ เพื่อความสะดวกในการวิเคราะห์การทดลองนี้จึงเลือกใช้ระบบตัวทำละลาย ได้แก่ ไอโซโพรพานอล เฮกเซน อะซิโตน ไตรคลอโรเอทิลีน พบว่าโครมาโทแกรมของสารประกอบ เมทิลเอสเทอร์ โมโนกลีเซอไรด์ ไดกลีเซอไรด์และไตรกลีเซอไรด์แยกกันชัดเจน

วัตถุประสงค์หลักของการนำเทคนิค HPLC มาประยุกต์ใช้ คือ การวิเคราะห์หาปริมาณของไดกลีเซอไรด์ทั้งสองไอโซเมอร์ อันได้แก่ 1,3-ไดกลีเซอไรด์และ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ โดยที่สารบริสุทธิ์ของ 1,3-ไดกลีเซอไรด์และ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ ที่แยกได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ถูกนำมาใช้เป็นสารตัวอย่างมาตรฐานในการวิเคราะห์ (แสดงดังภาพผนวกที่ ฉ8 และ ฉ11) ผลการทดลองแสดงให้เห็นว่าถ้ามีสารประกอบ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ ปนกับ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ โครมาโทแกรมของสารผสมจะไม่ได้แยกออกจากกันชัดเจน การทดลองนี้จึงทำการฉีดวิเคราะห์อัตราส่วนโดยน้ำหนักของสารประกอบผสมระหว่าง 1,3-ไดกลีเซอไรด์ และ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ที่อัตราส่วนต่างๆ (แสดงดังภาพผนวกที่ ฉ8 ฉ14 และ ฉ15) จากนั้นจึงสร้างกราฟความสัมพันธ์ระหว่างอัตราส่วนความสูงของโครมาโทแกรมเทียบกับอัตราส่วน โดยน้ำหนักของสารประกอบผสมระหว่าง 1,3-ไดกลีเซอไรด์และ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ แสดงดังภาพที่ 32 จากกราฟความสัมพันธ์ที่ได้ ทำให้สามารถวิเคราะห์หาอัตราส่วนระหว่าง 1,3-ไดกลีเซอไรด์และ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ ที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันตัวอย่างที่เวลา 2, 10, 20, 30, 40 และ 50 นาที ได้ แสดงดังตารางที่ 18 (วิธีการคำนวณภาคผนวก ค) สำหรับโครมาโทแกรมของน้ำมันตัวอย่างที่เวลา 2, 10, 20, 30, 40 และ 50 นาที แสดงดังภาพผนวกที่ ฉ16 ฉ17 ฉ18 ฉ19 ฉ20 และ ฉ21 ตามลำดับ ผลจากการทดลองจะเห็นได้ว่าตลอดการทดลองของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันนั้น ปริมาณของ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ จะมากกว่า 1,2-ไดกลีเซอไรด์ และที่เวลาของการทดลองผ่านไปมากขึ้น ปริมาณของ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ จะมีการสะสมเพิ่มขึ้นเรื่อยๆ แสดงให้เห็นว่าปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของไตรกลีเซอไรด์นั้นมีการเลือกเกิดเป็นผลิตภัณฑ์ของ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ มากกว่า 1,2-ไดกลีเซอไรด์



ภาพที่ 32 ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราส่วนความสูงของสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ เทียบกับอัตราส่วนความเข้มข้นของสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์

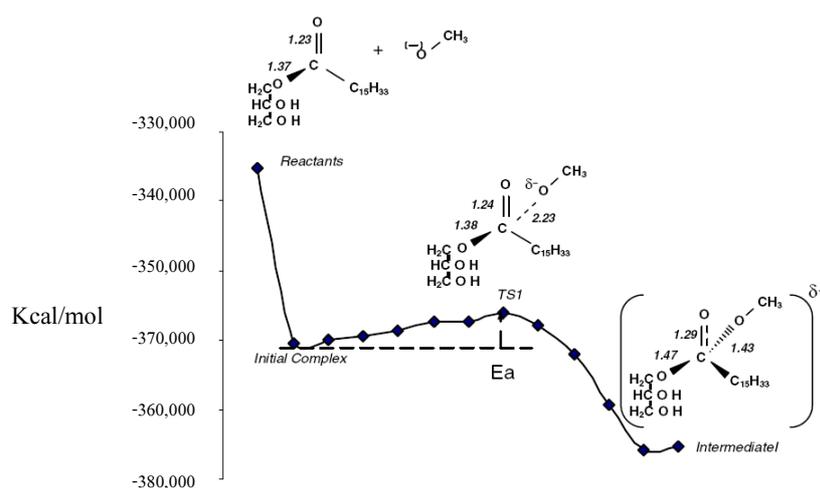
ตารางที่ 18 อัตราส่วนโดยน้ำหนักของ 1,3-ไดกลีเซอไรด์และ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ ของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันที่เวลาต่างๆ

เวลา (นาที)	อัตราส่วน 1,3-DG : 1,2-DG
2	1.78
10	2.44
20	2.80
30	3.26
40	3.63
50	4.94

5. การวิเคราะห์โดยเทคนิคการจำลองโมเลกุล

นำเทคนิคการจำลองโมเลกุลมาหาโครงสร้างทางโมเลกุลของสารมัธยันตร์อันได้แก่ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ 1-โมโนกลีเซอไรด์ และ 2-โมโนกลีเซอไรด์ โดยใช้ระเบียบวิธี *ab initio* Hatree-Fock ผ่านโปรแกรม GaussViewW และ GAUSSIAN 03W โดยที่หมู่เอซิลของโครงสร้างสารประกอบเหล่านี้มาจากกรดไขมันอิสระแบบ C16:0 หรือกรดปาล์มมิติก สาเหตุที่เลือกใช้กรดไขมันอิสระแบบ C16:0 เนื่องจากว่าน้ำมันปาล์มประกอบด้วยกรดไขมันอิสระชนิดนี้มากที่สุด

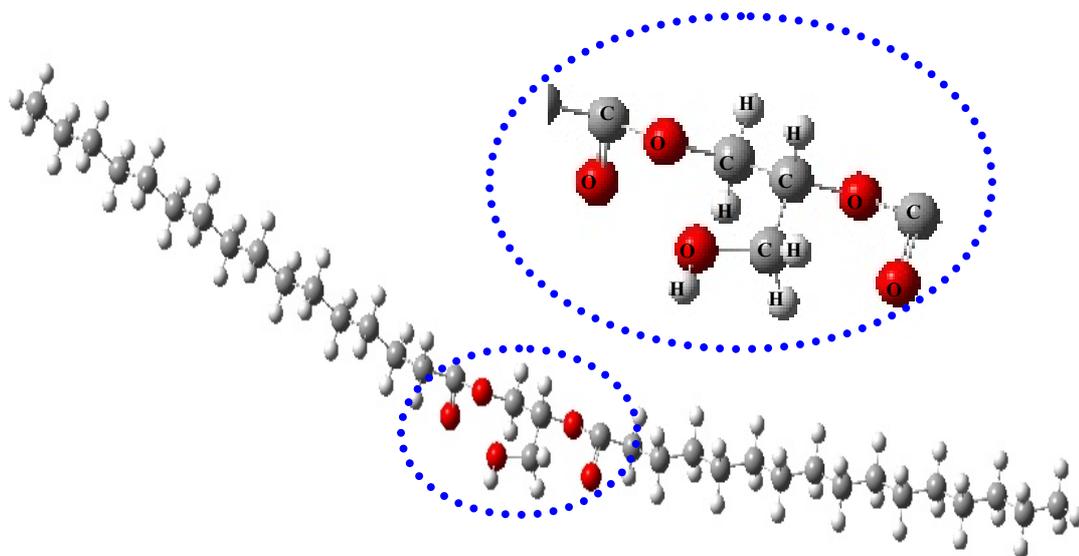
จากงานวิจัยของ Tapanes *et al.* (2008) ได้นำเทคนิคการจำลองโมเลกุลมาใช้จำลองกลไกและจำลองโครงสร้างทางโมเลกุลที่เสถียรของการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันโดยใช้เบสเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา ของสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์ อันได้แก่ 1-Monopalmitin (C16:0) 1-Monoolein (C18:1) และ 1-Monolinolein (C18:2) โดยใช้ระเบียบวิธี Semi-empirical AM1 ผ่านโปรแกรม GaussViewW และ GAUSSIAN 03W ผลจากการทดลองพบว่าค่าพลังงานกระตุ้นของการเกิดปฏิกิริยาของสารประกอบ 1-Monopalmitin มีค่าพลังงานกระตุ้นต่ำที่สุด $E_{1-MGpalm} = 18.13$ kcal/mol ผลจากการทำแบบจำลองโมเลกุล แสดงดังภาพที่ 33



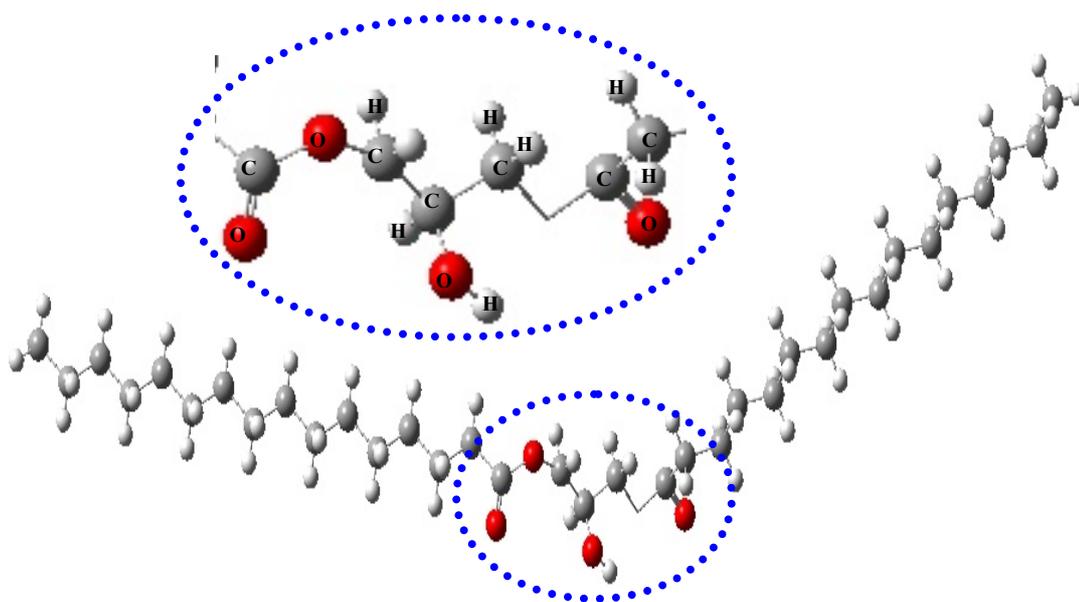
ภาพที่ 33 พลังงานกระตุ้นของการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันของสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์

โครงสร้างทางโมเลกุลของสารประกอบ 1,2-ไดคลีเซอไรด์ และ 1,3-ไดคลีเซอไรด์ที่วิเคราะห์ได้ที่ได้จากระเบียบวิธี Hatree-Fock 6-31G แสดงดังภาพที่ 34ก และ 34ข ผลจากการวิเคราะห์ค่าพลังงานโมเลกุลของสารประกอบ 1,2-ไดคลีเซอไรด์ได้เท่ากับ -1.085×10^9 cal/mol ส่วนค่าพลังงานโมเลกุลของสารประกอบ 1,3-ไดคลีเซอไรด์ได้เท่ากับ -1.098×10^9 cal/mol เมื่อเปรียบเทียบค่าทางพลังงานของสารประกอบไดคลีเซอไรด์ทั้งสองชนิดแสดงให้เห็นว่าสารประกอบ 1,3-ไดคลีเซอไรด์เป็นโครงสร้างที่มีความเสถียรมากกว่าสารประกอบ 1,2-ไดคลีเซอไรด์ จึงมีโอกาสเป็นไปได้ที่ปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันของสารประกอบไตรกลีเซอไรด์ไปเป็นสารประกอบไดคลีเซอไรด์นั้น ปฏิกิริยาเลือกที่จะเกิดเป็นผลิตภัณฑ์ของสารประกอบ 1,3-ไดคลีเซอไรด์ มากกว่าสารประกอบ 1,2-ไดคลีเซอไรด์ ซึ่งสอดคล้องกับผลการทดลองในห้องปฏิบัติการที่ว่า ในระหว่างการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันของสารประกอบไตรกลีเซอไรด์นั้น สารประกอบ 1,3-ไดคลีเซอไรด์ มีปริมาณมากกว่าสารประกอบ 1,2-ไดคลีเซอไรด์

สำหรับโครงสร้างทางโมเลกุลของสารประกอบ 1-โมโนกลีเซอไรด์ และ 2-โมโนกลีเซอไรด์ที่วิเคราะห์ได้ แสดงดังภาพที่ 35ก และ 35ข ผลจากการวิเคราะห์ค่าพลังงานโมเลกุลของสารประกอบ 1-โมโนกลีเซอไรด์ ได้เท่ากับ -6.573×10^8 cal/mol ส่วนค่าพลังงานโมเลกุลของสารประกอบ 2-โมโนกลีเซอไรด์ได้เท่ากับ -6.573×10^8 cal/mol เมื่อเปรียบเทียบค่าทางพลังงานของสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์ทั้งสองชนิดแสดงให้เห็นว่าสารประกอบทั้งสองชนิดมีค่าพลังงานโมเลกุลที่เท่ากัน แสดงให้เห็นว่าสารประกอบ 1-โมโนกลีเซอไรด์ และ 2-โมโนกลีเซอไรด์เป็นโครงสร้างที่มีความเสถียรใกล้เคียงกัน



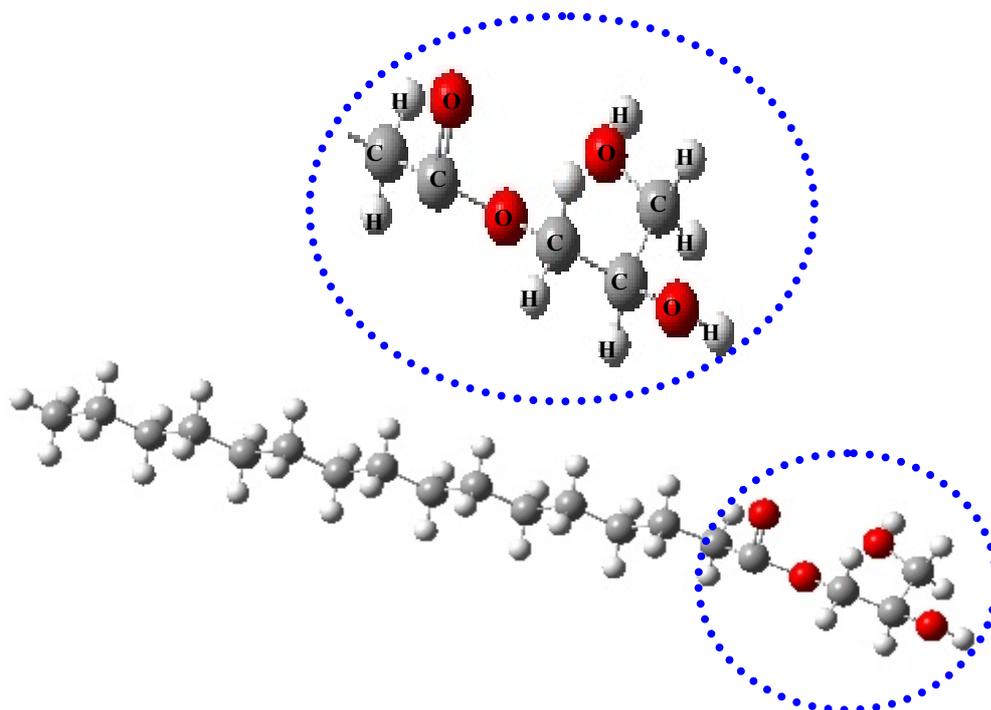
ก) 1,2-ไดคทีเซอไรต์



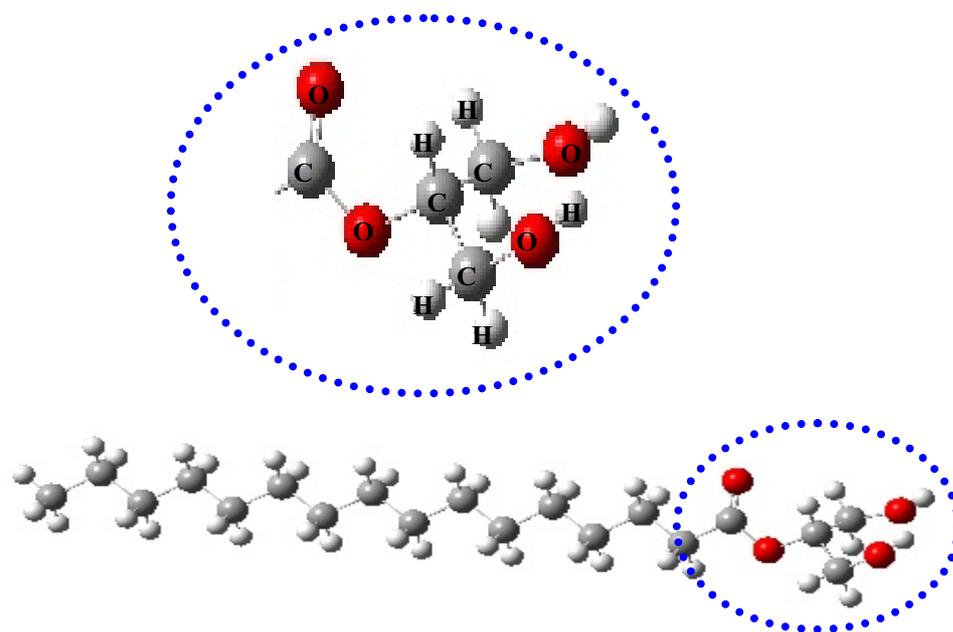
ข) 1,3-ไดคทีเซอไรต์

ภาพที่ 34 โครงสร้างทางโมเลกุลของสารประกอบไดคทีเซอไรต์

ก) 1,2-ไดคทีเซอไรต์ ข) 1,3-ไดคทีเซอไรต์



ก) 1-โมโนกลีเซอไรด์



ข) 2-โมโนกลีเซอไรด์

ภาพที่ 35 โครงสร้างทางโมเลกุลของสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์

ก) 1-โมโนกลีเซอไรด์ ข) 2-โมโนกลีเซอไรด์

เมื่อพิจารณาจากผลการทดลองที่ว่า ในระหว่างการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน สารประกอบ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ มีปริมาณมากกว่าสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ เพราะฉะนั้น วิถีทางของปฏิกิริยาที่เป็นไปได้มากที่สุดคือ เมทอกไซด์ไอออนจะเข้าทำปฏิกิริยาได้ดื่บนตำแหน่งที่ 2 ของกลีเซอรอลคาร์บอนบนโมเลกุลของไตรกลีเซอไรด์ ทำให้ในปฏิกิริยาเกิดผลิตภัณฑ์ที่เป็น สารมัธยันตร์สารของ 1,3-ไดกลีเซอไรด์เป็นส่วนใหญ่ และเมื่อเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ต่อไปเป็นสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์นั้น จะได้ไอโซเมอร์ของสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์ที่เป็นผลิตภัณฑ์เพียงชนิดเดียว คือ 1-โมโนกลีเซอไรด์ แต่สำหรับสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ เมื่อเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันไปเป็นสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์นั้น จะได้ผลิตภัณฑ์เป็นไอโซเมอร์ของสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์ได้ 2 ชนิด คือ 1-โมโนกลีเซอไรด์ และ 2-โมโนกลีเซอไรด์ แต่จากการทดลองพบว่าในระหว่างการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันนั้น สารประกอบ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ มีปริมาณมากกว่าสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ จึงเป็นที่แน่นอนว่าในระหว่างการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันจะเกิดสารประกอบ 1-โมโนกลีเซอไรด์ มากกว่า 2-โมโนกลีเซอไรด์ ความเป็นไปได้ของวิถีทางการเกิดปฏิกิริยาเรียงตามลำดับดังนี้ วิถีทาง 1 > วิถีทาง 2 > วิถีทาง 3 (แสดงดังภาพที่ 36)

สรุปและข้อเสนอแนะ

สรุป

1. วิธีทางของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันของน้ำมันปาล์ม

สารประกอบชนิดต่างๆที่แยกออกมาได้จากน้ำมันตัวอย่างที่เวลา 20 นาที โดยเทคนิค PTLC จะถูกนำไปวิเคราะห์หาชนิดของสารประกอบด้วยเครื่อง แมสสเปกโตรมิเตอร์ จากนั้นจะนำไปวิเคราะห์ชนิดของไอโซเมอร์ที่เกิดขึ้นบนไดกลีเซอไรด์และโมนอกลิเซอไรด์ด้วยเครื่อง นิวเคลียร์ แมกเนติกเรโซแนนซ์ สเปกโตรมิเตอร์ สำหรับการวิเคราะห์สารประกอบแต่ละชนิดด้วยเครื่อง แมสสเปกโตรมิเตอร์ พบว่า นอกจากจะสามารถวิเคราะห์ชนิดของสารประกอบในน้ำมันตัวอย่างได้แล้ว ยังสามารถวิเคราะห์ถึงหมู่เอซิลชนิดต่างๆที่อยู่บนโมเลกุลของสารประกอบ เมทิลเอสเทอร์ ไตรกลีเซอไรด์ ไดกลีเซอไรด์และโมนอกลิเซอไรด์ได้อีกด้วย ส่วนการวิเคราะห์สารประกอบบริสุทธิ์แต่ละชนิดที่แยกได้ด้วยเครื่อง นิวเคลียร์ แมกเนติกเรโซแนนซ์ สเปกโตรมิเตอร์ พบว่าเทคนิคนี้สามารถวิเคราะห์ความแตกต่างสัญญาณของโปรตอนบนเอซิลลิเชอรอลได้ ทำให้ทราบว่าสารที่ทดลองนี้สารมีพันธะที่แยกออกมาได้ คือ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ ส่วนสารประกอบของโมนอกลิเซอไรด์ที่แยกออกมาได้นั้น เป็นสารประกอบโมนอกลิเซอไรด์ที่ประกอบไปด้วยไอโซเมอร์ของ 1-โมนอกลิเซอไรด์และ 2-โมนอกลิเซอไรด์ทั้งสองชนิดรวมกัน ผลจากการทดลองแสดงให้เห็นว่า เทคนิค PTLC นั้น สามารถแยกสารประกอบ เมทิลเอสเทอร์ ไตรกลีเซอไรด์ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ ออกจากกันได้ แต่ยังไม่สามารถแยกสารประกอบโมนอกลิเซอไรด์ทั้งสองไอโซเมอร์ออกจากกันได้

สำหรับสารบริสุทธิ์ของ 1,3-ไดกลีเซอไรด์และ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ ที่นำมาใช้เป็นสารตัวอย่างมาตรฐานในการวิเคราะห์ เพื่อสร้างกราฟความสัมพันธ์ระหว่างอัตราส่วนความสูงของโครมาโทแกรมเทียบกับอัตราส่วน โดยนำหนักของสารประกอบผสมระหว่าง 1,3-ไดกลีเซอไรด์และ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ ผลการทดลองจากการฉีกวิเคราะห์น้ำมันตัวอย่างที่เวลาต่างๆแล้วนำมาเปรียบเทียบกับกราฟมาตรฐานแสดงให้เห็นว่า ที่ตลอดการทดลองนั้น ในน้ำมันตัวอย่างมีสารประกอบของ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ มากกว่า 1,2-ไดกลีเซอไรด์ และเมื่อนำเทคนิคการจำลองโมเลกุลมาเปรียบเทียบกับค่าพลังงานโมเลกุลของสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์แสดงให้เห็นว่าสารประกอบ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ เป็นโครงสร้างที่มีความเสถียร

มากกว่าสารประกอบ 1,2-ไดคลีเซอไรด์ เพราะฉะนั้นจึงมีความเป็นไปได้ที่ว่าการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของสารประกอบไตรกลีเซอไรด์นั้น ปฏิกิริยาเลือกที่จะเกิดเป็นผลิตภัณฑ์ของสารประกอบ 1,3-ไดคลีเซอไรด์ ที่มีความเสถียรกว่าสารประกอบ 1,2-ไดคลีเซอไรด์ จากผลการทดลองทั้งหมดดังที่กล่าวไว้ข้างต้นทำให้สรุปได้ว่า ในการเกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันนั้น เมทอกไซด์ไอออนจะเข้าทำปฏิกิริยาได้คืบหน้าตำแหน่งที่ 2 ของกลีเซอรอลคาร์บอนบนโมเลกุลของไตรกลีเซอไรด์และไดคลีเซอไรด์

ข้อเสนอแนะ

1. ควรทำการทดลองโดยเปลี่ยนชนิดของสารตั้งต้น เพราะอาจเป็นไปได้ว่าวิถีทางการเกิดปฏิกิริยานั้นจะขึ้นอยู่กับชนิดของหมู่เอซิลที่เกาะอยู่บนกลีเซอรอลคาร์บอนทั้งสามตำแหน่ง
2. ควรทำการทดลองโดยนำสารประกอบของ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ มาทำปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันแล้ววิเคราะห์ผลิตภัณฑ์ที่เป็น ไอโซเมอร์ของสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์ ทั้งสองชนิดที่เกิดขึ้น เพื่อเป็นการยืนยันว่า เมทอกไซด์ไอออนจะเข้าทำปฏิกิริยาได้ดีบนตำแหน่งที่ 2 ของกลีเซอรอลคาร์บอนบน โมเลกุลของไดกลีเซอไรด์
3. ควรศึกษาหาวิธีการที่เหมาะสมที่จะทราบถึงปริมาณสารประกอบ 1-โมโนกลีเซอไรด์ และ 2-โมโนกลีเซอไรด์ ที่เกิดขึ้นในระหว่างปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน เพื่อเสนอวิถีทางของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันต่อไป

เอกสารและสิ่งอ้างอิง

- กระทรวงพลังงาน. 2547. ไบโอดีเซล น้ำมันเชื้อเพลิงจากพืช. **Energy Plus**. 1: 16-21.
- กระทรวงพลังงาน. 2550. โครงการศึกษาความเป็นไปได้ของการปลูกพืชน้ำมันและพัฒนารูปแบบการผลิตพลังงานจากพืชแบบครบวงจรในพื้นที่เขตตัวอย่างภาคเหนือ. แหล่งที่มา: <http://www.kasetcity.com/ThaiBioenergy/Palm/QAview.asp?id=47>, 18 มีนาคม 2552.
- บริษัท พาราไซแอนติฟิค จำกัด. 2547. ไบโอดีเซล เชื้อเพลิงชีวภาพของยุคสมัย. แหล่งที่มา: www.barascientific.com/bscnews/forum/Biodiesel/biodiesel.php, 21 สิงหาคม 2551.
- ปฏิมา ไพนุพงศ์, พิมพ์พิมล เพ็ญจำรัส, เวียงชัย จงศรีรัตนกุล, เท็ดทูน คำรงค์ฤทธิสมาตย์ และ ชاکริต ทองอุไร. 2550. การวิเคราะห์ปริมาณร้อยละเมทิลเอสเทอร์ในไบโอดีเซลที่ผลิตจากน้ำมันทอดใช้แล้วและน้ำมันเมล็ดในปาล์ม, 1-3. การประชุมวิชาการวิศวกรรมเคมีและเคมีประยุกต์แห่งประเทศไทย ครั้งที่ 17. มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์.
- ศักดิ์ศิลป์ โชตสกุล, วินาภรณ์ กุฎีรัตน์ และ กิจจารักษ์ วงศ์กุลเดาะ. 2541. ปาล์มน้ำมัน. กองส่งเสริมพืชไร่ฯ กรมส่งเสริมการเกษตร, กระทรวงพลังงาน.
- อาทิตย์ตรา ชมิดท์. 2537. เทคนิคที่สำคัญทางชีวเคมี ในคู่มือทางชีวเคมี. โรงพิมพ์สหมิตรพริ้นติ้ง, กรุงเทพฯ.
- Agarwal, A.K. 2007. Biofuels (alcohols and biodiesel) applications as fuels for internal combustion engines. **Prog. in Energ. Combust. Sci.** 33: 233–271.
- Christie, W.W. 1992. **Lipid Analysis**. Pergamon Press. Oxford. 3-8.
- Cordeiro, C.S., G.G.C. Arizaga, L.P. Ramos and F. Wypych. 2008. A new Zinc hydroxide nitrate heterogeneous catalyst for the esterification of free fatty acids and the transesterification of vegetable oils. **Catal commun.** 9: 2140-2143.

- Darnoko, D. and M. Cheryan. 2000. Kinetic of palm oil transesterification in a batch reactor. **J Am Oil Chem Soc.** 77:1263-1267.
- Doell, R., S.K. Konar and B. Boocock. 2008. Kinetic parameters of a homogeneous transmethylation of soybean oil. **J. Am. Oil Chem Soc.** 85: 271-276.
- Du, W., Y. Y. Xu, D. H. Liu and Z. B. Li. 2005. Study on acyl migration in immobilized lipozyme TL-catalyzed transesterification of soybean oil for biodiesel production. **J. Mol CatB.** 37: 68-71.
- Encinar, J.M., J.F. González and A. Rodríguez-Reinares. 2007. Ethanolysis of used frying oil. Biodiesel preparation and characterization. **Fuel Process Technol.** 88: 513–522.
- Fangrui, M. and A. H. Milford. 1999. Biodiesel production: a review. **Biores. Technol.** 70 :1-15.
- Fukuda, H., A. Kondo and H. Noda. 2001. Biodiesel fuel production by tranesterification of oils. **J. Biol Eng.** 92: 405-416.
- Gelbard, G., O. Bres, R.M. VarGas and U.F. Shuchardt. 1995. ¹H NMR Nuclear magnetic resonance determination of the yield of the transesterification of rapeseed oil with methanol. **J. Am. Oil Chem. Soc.** 72: 1239-1241.
- Goering, E., W. Schwab, J. Daugherty, Pryde , H. and J. Heakin. 1982. Fuel properties of eleven vegetable oils. **J. Am. Soc. Agr. Eng.** 25: 1472-1483.
- Goyal, H.B., S. Diptendu and R.C. Saxena. 2008. Bio-fuels from thermochemical conversion of renewable resources: A review. **Renew. Sust. Energy Rev.** 12: 504-517.
- Graham S. and C. B. Fryhle. 2004. **Organic Chemistry.** VonHoffman Press. Jefferson. 385-389.

- Guillén, M.D. and A. Ruiz. 2001. High resolution ^1H NMR nuclear magnetic resonance in the study of edible oils and fats. **Ital J Food Sci.** 12: 328-338.
- Holčapek, M., P. Jandera J. Fisher and B. Prokeš. 1999. Analytical monitoring of the production of biodiesel by high performance liquid chromatography with various detection methods. **J. Chromatogr. A.** 858: 13-31.
- Jin, F., K. Kawasaki, H. Kishida, K. Toji, T. Moriya. and H. Enomoto. 2007. NMR spectroscopic study on methanolysis reaction of vegetable oil. **Fuel.** 86: 1201-1207.
- Jitputti, J., B. Kitiyanan, P. Rangsunvigit, K. Bunyakiat, L. Attanatho and P. Jenvanitpanjakul. 2006. Transesterification of crude palm kernel oil and crude coconut oil by different solid catalysts. **Chem Eng J.** 116: 61-66.
- Kaieda, M., T. Samukawa, T. Matsumoto, K. Ban, A. Kondo Y. shimada, H. Noda, F. Nomoto, K. Ohtsuka, E. Izumoto. and H. Fukuda . 1999. Biodiesel fuel production from plant oil catalyzed by *Rhizopus oryzae* lipase in a water without an organic solvent. **J. Biol. Eng.** 6: 627-631.
- Keim, G.I. 1945. Process for treatment of fatty glyceride. **US Patent.** 2: 383-601.
- Khan, A.K. 2002. **Research into Biodiesel Kinetics & Catalyst Development.** Available Source:http://www.cheque.uq.edu.au/ugrad/chee4001/CHEE400102/Adam_Khan_Thesis.pdf, January 4, 2008.
- Kyu, W.L., J.X. Yu, J.H. Mei, L. Yam, Y.W. Kim and K.W. Chung. 2007. A Kinetic Study on Transesterification of Glycerol Monooleate and Soybean Used Frying Oil to Biodiesel. **J. Ind. Eng. Chem.** 13: 799-807.

- Liu, Q.T. and J.L. Kinderlerer . 1999. Preparative thin layer chromatographic separation and subsequent gas chromatographic-mass spectrometric analysis of monoacylglycerols derived from butter oil by fungal degradation. **J. Mol CatA**. 855: 617-624.
- Ma, F. and M.A. Hanna. 1999. Biodiesel production : a review. **J. BioTech**. 70: 1-15.
- Maeda, H., H. S. Hagiwara, H. Nabetani, Y. Sagara, T.H. Soerawidjaya, A. H. Tambunan and K. Abdullah. 2008. Biodiesel fuels from palm oil via the non-catalytic tranesterification in a bubble column reactor at atmospheric pressure: A kinetic study. **Rew Energ**. 33: 1629-1626.
- Monteiro, M.R., A. R. P. Ambrozin, M.S. Santos, E.F. Boffo, E. R. Pereira-Filho, L.M. Liao and A.G. Ferreira. 2009. Evaluation of biodiesel-diesel blends quality using ¹H NMR and chemometrics. **J. Am. Oil Chem. Soc**. 78: 660-664.
- Meher, L.C., V.S. Dharmagadda. and S.N. Naik. 2005. Optimization of alkali – catalyzed transesterification of Pongamia pinnata oil for production of biodiesel. **Biores.Technol**. 97: 1392-1397.
- Narvaez, P.C., S.M. Rincon and F.J. Sanchez. 2007. Kinetics of Palm Oil Methanolysis. **J. Am. Oil. Chem. Soc**. 84: 971–977.
- Noureddini, H. and D. Zhu. 1997. Kinetic of transesterification of soybean oil. **J Am Oil Chem Soc**. 74: 457-1463.
- Pavia, D. and G. Lampman. 2001. **Introduction to spectroscopy**. Harcourt Press. Washinton. 13-14.

- Sacchi, R., M. Patumi, G. Fontanazza, P. Barone, P. Fiordiponti, L. Mannina, E. Rosso and A. L. Segre. 1996. A high-field ^1H nuclear magnetic resonance study of minor components in virgin olive oils. **J. Am. Oil Chem Soc.** 73: 747-758.
- Schuchardt, U. F., R. Vargas and G. Gelbard. 1996. Transesterification of soybean oil catalyzed by alkylguanidines heterogenized on different substituted polystyrenes. **J. Mol Catal.** 109: 37-44.
- Schwab, A.W., G.J. Dykstra, E. Selke, S.C. Sorenson and E.H. Pryde. 1988. Diesel fuel from thermal decomposition of soybean oil. **J. Am. Oil. Chem. Soc.** 65: 1781-1786.
- Sonthisawate, T., P. Thongjun and T. Srinophakun 2006. **Investigation on Transesterification of biodiesel by molecular modeling.** M.S. Thesis, Kasetsart University.
- Spyros, A. and A. Drimitrios. 2004. Study of aging in oil painting by 1D and 2D NMR spectroscopy. **J. Anal. Chem.** 76: 4929-4936.
- Srivastava, A. and R. Prasad. 2000. Triglycerides – based diesel fuels. **Renew. Sust. Energy Rev.** 4: 111-133.
- Tapanes, N.C. O., D.A.G. Aranda., J.W.M. Carnerio. and O.A.C. Antunes. 2008. Transesterification of *Jatropha curcas* oil glycerides: Theoretical and experimental studies of biodiesel reaction. **Fuel.** 87: 2286-2295
- Vicente, G., M. Martinez. and J. Aracil. 2006. kinetics of *Brassica carinata* oil methanolysis. **Energy Fuels.** 20:1722-1726.
- Warabi, Y., D. Kusdiana and S. Saka. 2004. Reactivity of triglycerides and fatty acids of rapeseed oil in supercritical alcohols. **Biores. Technol.** 91: 283-287.

Wing, K. Ng., P.K. Lim . and L.B. Boey. 2003. Dietary lipid and palm oil source affects growth, fatty acid composition and muscle α -tocopherol concentration of African catfish. **Aquacult.** 215: 229-243.

ภาคผนวก

ภาคผนวก ก

การคำนวณหาอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล

การคำนวณหาอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอลที่ใช้ในปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันมีวิธีการดังนี้

กำหนด:

มวลโมเลกุลของน้ำมันปาล์ม = 858 กรัมต่อโมล (Maeda *et al.* 2008)

มวลโมเลกุลของเมทานอล = 32 กรัมต่อโมล

สมมติ:

ในการทดลองกระบวนการทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน กำหนดใช้อัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอลเป็น 1:6 โดยใช้น้ำมันเริ่มต้นปริมาณ 0.015 โมล

การคำนวณ:

น้ำมันปาล์ม 0.015 โมล มีน้ำหนัก = $0.015 \times 858 = 0.015$ กรัม

ใช้เมทานอล 6 เท่า = $0.015 \times 6 = 0.09$ โมล

ดังนั้นจะต้องใช้เมทานอลน้ำหนัก = $0.09 \times 32 = 2.88$ กรัม

ภาคผนวก ข

การคำนวณหาปริมาณโมโนกลีเซอไรด์ที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค $^1\text{H NMR}$

พิจารณาได้จากค่าอินทิเกรชันของสัญญาณ $^1\text{H NMR}$ ของสารประกอบโมโนกลีเซอไรด์บริสุทธิ์ ดังนี้

- สัญญาณโปรตอนบนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 1(H-1) ของ 1-โมโนกลีเซอไรด์ที่ตำแหน่ง 4.17 ppm ให้ค่าอินทิเกรชัน เท่ากับ 5.110
- สัญญาณโปรตอนบนกลีเซอรอลคาร์บอนตำแหน่งที่ 1(H-1) หรือ 3(H-3) ของ 2-โมโนกลีเซอไรด์ที่ตำแหน่ง 3.85 ppm ให้ค่าอินทิเกรชัน เท่ากับ 1.000

อัตราส่วนปริมาณของ 1-โมโนกลีเซอไรด์ ต่อ 2-โมโนกลีเซอไรด์คำนวณได้ดังสมการต่อไปนี้

$$\frac{1 - \text{MG}}{2 - \text{MG}} = \frac{4 \times \text{ค่าอินทิเกรชัน H-1 ของ 1-โมโนกลีเซอไรด์}}{2 \times \text{ค่าอินทิเกรชัน H-1(3) ของ 2-โมโนกลีเซอไรด์}}$$

$$\frac{1 - \text{MG}}{2 - \text{MG}} = \frac{4 \times 5.110}{2 \times 1.000} = 10.22$$

ภาคผนวก ก

สร้างกราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างอัตราส่วนความสูงของสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์กับอัตราส่วนความเข้มข้นของสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์

เตรียมสารละลายมาตรฐาน ตามตารางผนวกที่ ข1 ละลายด้วยตัวทำละลาย อะซิโตไนไตรล์ จำนวน 500 ไมโครลิตร ผสมกับ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50% ปริมาตร/ปริมาตร จำนวน 500 ไมโครลิตร จากนั้นสารละลายมาตรฐานที่เตรียมได้ตามตารางผนวกที่ ข1 ปริมาตร 30 ไมโครลิตร จะถูกนำไปวิเคราะห์ด้วยเครื่อง HPLC

ตารางผนวกที่ ค1 สารมาตรฐาน

สารมาตรฐาน	อัตราส่วนความเข้มข้นของ สารมาตรฐาน 1,2 DG : 1,3 DG
1,2-DG 3000 มิลลิกรัม	1:0
1,2-DG 3000 มิลลิกรัม + 1,3-DG 3000 มิลลิกรัม	1:1
1,2-DG 1000 มิลลิกรัม + 1,3-DG 3000 มิลลิกรัม	1:3

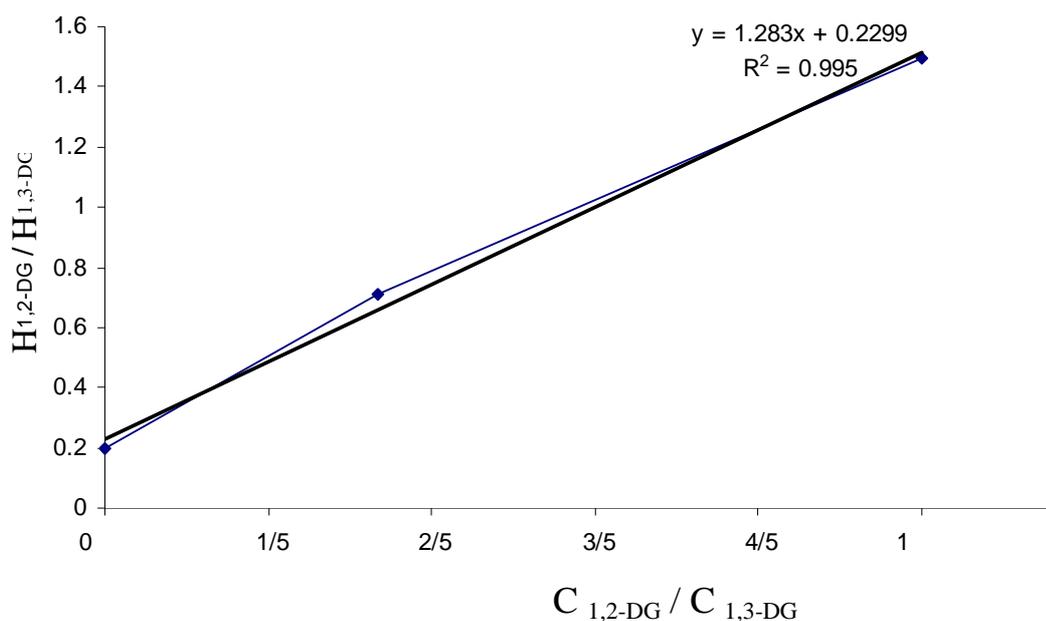
ผลการวิเคราะห์

ในการวิเคราะห์ต้องสร้างกราฟมาตรฐานความสัมพันธ์ระหว่างอัตราส่วนของความสูงพีคระหว่าง 1,2-ไดกลีเซอไรด์ และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ เทียบกับอัตราส่วนโดยน้ำหนักระหว่าง 1,2-ไดกลีเซอไรด์และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ เพื่อหาความชันและจุดตัดแกน ซึ่งจะใช้ในการคำนวณหาปริมาณอัตราส่วน โดยน้ำหนักระหว่าง 1,2-ไดกลีเซอไรด์ และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ ที่เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่ ได้ผลเป็นดังนี้

จากโครมาโทแกรมของสารมาตรฐานทั้งหมดที่วิเคราะห์แล้วแสดงเป็นอัตราส่วนความเข้มข้นเทียบกับความสูงของพีค แสดงได้ดังตารางผนวกที่ ค2

ตารางผนวกที่ ค2 อัตราส่วนความสูงพีคของสารมาตรฐาน

อัตราส่วนความเข้มข้นของสารมาตรฐาน 1,2 DG : 1,3 DG	อัตราส่วนความสูงพีคของสารมาตรฐาน 1,2 DG : 1,3 DG
0:1	1 : 0.1948
1:3	1 : 0.7102
1:1	1 : 1.4953



ภาพผนวกที่ ค1 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างอัตราส่วนความสูงของสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์เทียบกับอัตราส่วนความเข้มข้นของสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ และ 1,3-ไดกลีเซอไรด์

จากกราฟมาตรฐาน ได้ค่าความชัน เท่ากับ 1.422 และจุดตัดแกน y เท่ากับ 0.11 เมื่อ

$C_{1,2-DG}$	ความเข้มข้นของ 1,2-ไดคลอรีเซอไรด์ ในหน่วยมิลลิกรัมต่อมิลลิลิตร
$C_{1,3-DG}$	ความเข้มข้นของ 1,3-ไดคลอรีเซอไรด์ ในหน่วยมิลลิกรัมต่อมิลลิลิตร
$H_{1,2-DG}$	ความสูงพีคของ 1,2-ไดคลอรีเซอไรด์
$H_{1,3-DG}$	ความสูงพีคของ 1,3-ไดคลอรีเซอไรด์

ผลจากโครมาโทแกรมแสดงความสูงพีคของ 1,2-ไดคลอรีเซอไรด์และความสูงพีคของ 1,3-ไดคลอรีเซอไรด์ที่แต่ละเวลาของการทำปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชัน ทำให้สามารถหาอัตราส่วนโดยน้ำหนักระหว่าง 1,2-ไดคลอรีเซอไรด์ และ 1,3-ไดคลอรีเซอไรด์ แสดงได้ดังตารางผนวกที่ ค3

ตารางผนวกที่ ค3 อัตราส่วนโดยน้ำหนักและอัตราส่วนความสูงระหว่างสารประกอบ 1,2-ไดคลอรีเซอไรด์และ 1,3-ไดคลอรีเซอไรด์

เวลา	ความสูงพีค 1,2-ไดคลอรีเซอไรด์	ความสูงพีค 1,3-ไดคลอรีเซอไรด์	$C_{1,2-DG} / C_{1,3-DG}$ (X)	$H_{1,2-DG} / H_{1,3-DG}$ (Y)
2	9261.39	9743.39	0.5613	0.9505
10	33741.85	44694.73	0.4091	0.7549
20	253852.75	369616.70	0.3561	0.6868
30	188861.59	303191.59	0.3063	0.6229
40	193950.03	332675.86	0.2752	0.5830
50	131908.08	270949.38	0.2002	0.4868

ตารางผนวกที่ ค4 ค่า Area และค่า Retention time (RT) ของโมนอกลิเซอไรด์ ไดกลีเซอไรด์ ไตรกลีเซอไรด์และเมทิลเอสเทอร์ ในน้ำมันชั้นบนที่เวลา 2 นาที ที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส อัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6

Peak retention time	Peak area	Peak height	Compound name
200.32001	146553.06	12089.155	
225.44	54009.277	3239.4194	
258.23999	17518.271	1003.6695	
279.19998	6446.4336	525.31708	
301.60001	11713.755	628.02441	
467.04001	460004.75	11011.15	เมทิลเอสเทอร์
526.07996	244830.98	5077.1577	
583.67999	321010.66	9119.3604	เมทิลเอสเทอร์
619.36005	164501.36	5492.0854	เมทิลเอสเทอร์
675.03998	212056.25	4472.8809	
746.56	314698.75	4801.5322	
770.40002	114891.8	4900.4155	
822.24005	255119.38	6112.3979 7661.064	โมนอกลิเซอไรด์
841.12	190706.03	5940.3433 9743.3984	โมนอกลิเซอไรด์
863.67999	93832.742	14300.09	โมนอกลิเซอไรด์
936.32001	476959.69	9261.3887	ไดกลีเซอไรด์
962.40002	267141.56	8517.8115 11259.503	ไดกลีเซอไรด์
990.55994	204600.5	8259.3975	ไดกลีเซอไรด์
1053.9199	424239.16	7278.2451	ไดกลีเซอไรด์
1080	264523.16	7755.1782	ไดกลีเซอไรด์
1107.04	173289.88	7646.3496	ไดกลีเซอไรด์
1120.48,	73162.313	7631.9277	
1215.36	731456.31	6972.3931	
1264.16	422210.91	6975.4775	
1314.88	280540.59	7631.9277	

ตารางผนวกที่ ค4 (ต่อ)

Peak retention time	Peak area	Peak height	Compound name
1375.2	74504.469	6391.5396	
1418.5599	308144.72	6731.8916	
1447.0399	171254.16	7101.5918	
1483.6801	210702.86	6083.52	
1511.84	173113.13	9343.8193	ไตรกลีเซอไรด์
1530.08	666924.38	18918.684	ไตรกลีเซอไรด์
1588.7999	260108.59	12646.289	ไตรกลีเซอไรด์
1604.64	636036.25	39867.145	ไตรกลีเซอไรด์
1621.28	578106.06	33008.004	ไตรกลีเซอไรด์
1675.04	759912.19	22334.393	ไตรกลีเซอไรด์
1713.4399	40110.465	3939.5269	
1732.3199	138594.19	5460.1934	
1767.5199	106817.69	4865.3169	
1800.16	77843.602	3438.2314	
1852.9601	137269.16	3495.4167	
1882.72	15953.462	1622.7213	
1904.48	75422.5	3025.9978	
1939.52	49371.43	2489.9209	
1969.1201	21380.01	1274.0247	
1989.12	12418.569	1082.095	
2004.3201	17966.623	1307.1483	
2022.3999	12068.166	727.81177	
2043.52	4984.061	484.28595	
2068.8	5277.9609	265.97473	

ตารางผนวกที่ ค5 ค่า Area และค่า Retention time (RT) ของโมโนกลีเซอไรด์ ไดกลีเซอไรด์ ไตรกลีเซอไรด์และเมทิลเอสเทอร์ ในน้ำมันชั้นบนที่เวลา 10 นาที ที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส อัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6

Peak retention time	Peak area	Peak height	Compound name
199.0399	136235.78	11364.54	
224.3200	85367.422	3520.3455	
468.9599	801450.9	20527.41	เมทิลเอสเทอร์
586.07996	243697.59	12222.28	เมทิลเอสเทอร์
620.64001	125010.875,	2988.1521	เมทิลเอสเทอร์
814.08002	82456.217	1019.518	โมโนกลีเซอไรด์
836.48004	141403.193	1570.7722	โมโนกลีเซอไรด์
927.83997	94694.738	3481.5134	ไดกลีเซอไรด์
954.71997	391588.531	7303.1641	ไดกลีเซอไรด์
982.71997	93741.852	2488.88	ไดกลีเซอไรด์
1047.680	45071.781	1288.873	ไดกลีเซอไรด์
1074.24	79151.98	3112.430	ไดกลีเซอไรด์
1514.09	279857.08	5811.709	ไตรกลีเซอไรด์
1590.88	371623.91	16730.701	ไตรกลีเซอไรด์
1605.12	355959.28	12902.432	ไตรกลีเซอไรด์
1656.3199	606723.75	9453.426	ไตรกลีเซอไรด์
1706.40	155303.97	3559.35	
1764.1599	87914.313	2944.178	
1820.96	85366.563	3547.2056	
1864.16	45430.82	2342.1653	

ตารางผนวกที่ ๓๖ ค่า Area และค่า Retention time (RT) ของโมนอกลิเซอไรด์ ไดกลีเซอไรด์ ไตรกลีเซอไรด์และเมทิลเอสเทอร์ ในน้ำมันชั้นบนที่เวลา 20 นาที ที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส อัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6

Peak retention time	Peak area	Peak height	Compound name
218.400	62956.125	3780.9761	
249.12	11450.192	887.1571	
266.56	11304.897	845.90039	
289.600	3383.1082	408.286	
304.799	25540.879	2259.3596	
362.88	19704.508	1251.7911	
429.91998	2451225.80	46664.398	
528.47998	551763.31	32379.453	เมทิลเอสเทอร์
554.3999	266986.11	11027.51	เมทิลเอสเทอร์
667.20001	453030.75	4873.646	เมทิลเอสเทอร์
747.52002	251989.88	5853.918	
766.71997	112835.09	6597.111	โมนอกลิเซอไรด์
788.48004	75921.195	5063.396	โมนอกลิเซอไรด์
812.63995	111773.11	4787.705	โมนอกลิเซอไรด์
855.03998	329616.70	10202.79	
878.71997	171923.31	14330.902	ไดกลีเซอไรด์
905.76001	212352.75	8798.4404	ไดกลีเซอไรด์
968.80005	211195.06	8700.3398	ไดกลีเซอไรด์
991.52002	161490.95	10678.03	ไดกลีเซอไรด์
1018.08	172201.19	8144.3682	ไดกลีเซอไรด์
1060.90	243114.63	6848.665	ไดกลีเซอไรด์
1102.8799	270064.25	7314.5527	
1272.3201	1325282.50	7912.8535	
1320.00	379077.34	7971.1987	

ตารางผนวกที่ ค6 (ต่อ)

Peak retention time	Peak area	Peak height	Compound name
1352.64	283848.13	7955.1265	
1423.8401	934487.94	13314.508	ไตรกลีเซอไรด์
1444.96	441987.45	9088.5195	ไตรกลีเซอไรด์
1480.00	385872.61	10500.813	ไตรกลีเซอไรด์
1497.76	338416.44	22209.049	
1512.16	693810.72	18539.193	ไตรกลีเซอไรด์
1568.6399	887058.19	14199.295	ไตรกลีเซอไรด์
1610.5601	113714.07	6306.1821	
1641.76	224618.47	7000.495	
1680.960	142173.41	5702.222	
1712.319	147675.81	4840.603	
1766.4	201744.88	5042.6797	

ตารางผนวกที่ ค7 ค่า Area และค่า Retention time (RT) ของโมโนกลีเซอไรด์ ไดกลีเซอไรด์ ไตรกลีเซอไรด์และเมทิลเอสเทอร์ ในน้ำมันชั้นบนที่เวลา 30 นาที ที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส อัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6

Peak retention time	Peak area	Peak height	Compound name
333.92001	116392.78	3119.0281	
361.44	97215.633	3096.5618	
426.8799	1115559.38	38192.07	เมทิลเอสเทอร์
527.3599	509698.69	19852.41	เมทิลเอสเทอร์
561.599	265584.89	6826.60	เมทิลเอสเทอร์

ตารางผนวกที่ ๗ (ต่อ)

Peak retention time	Peak area	Peak height	Compound name
643.3599	108711.6	3118.5522	
724.959	89519.43	3582.774	
758.079	105980.42	3857.8525	
778.400	90007.68	4551.543	โมนอกลิเซอไรด์
799.0399	142211.89	5818.6934	โมนอกลิเซอไรด์
849.7600	198943.27	4740.054	
900.00	303191.59	7582.226	ไดกลีเซอไรด์
927.199	135482.13	10400.30	ไดกลีเซอไรด์
957.1	188761.59	7551.782	ไดกลีเซอไรด์
1022.72	40104.38	7898.0195	ไดกลีเซอไรด์
1048.6	26612.19	9290.254	ไดกลีเซอไรด์
1077.76	18233.13	7906.086	ไดกลีเซอไรด์
1370.24	185389.75	7411.247	
1395.6801	176595.02	7552.292	
1476.00	561620.00	7144.675	
1497.28	143456.8	7883.745	ไตรกลีเซอไรด์
1517.60	195214.72	10188.43	ไตรกลีเซอไรด์
1546.399	179358.48	7585.808	ไตรกลีเซอไรด์
1595.04	237660.44	15122.68	ไตรกลีเซอไรด์
1609.28	155126.63	13531.639	ไตรกลีเซอไรด์
1661.28	400400.59	10947.839	ไตรกลีเซอไรด์
1694.4	118285.69	7030.917	

ตารางผนวกที่ ๑๘ แสดงค่า Area และค่า Retention time (RT) ของโมนอกลิเซอไรด์ ไดกลีเซอไรด์ ไตรกลีเซอไรด์และเมทิลเอสเทอร์ ในน้ำมันชั้นบนที่เวลา 40 นาที ที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส อัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6

Peak retention time	Peak area	Peak height	Compound name
257.76	18478.07	1336.35	
277.44	27487.814	1769.10	
302.72	13203.84	1253.68	
325.92	49024.40	1895.97	
382.88	58507.44	2170.88	
463.36	2095179	80590.52	เมทิลเอสเทอร์
522.88	1577.99	183.8762	
573.27	869525.00	50259.68	เมทิลเอสเทอร์
608.48	307813.91	15883.557	เมทิลเอสเทอร์
647.35	116520.55	4784.248	
736.00	460156.94	5405.647	
774.56	100831.69	4593.4863	
810.23	194487.80	6684.644	โมนอกลิเซอไรด์
832.00	267933.91	8978.6768	โมนอกลิเซอไรด์
890.56	207338.06	5404.854	
926.72	332773.86	11932.29	ไดกลีเซอไรด์
952.96	239913.28	16846.27	ไดกลีเซอไรด์
981.44	193950.03	9646.228	ไดกลีเซอไรด์
1048.00	441138.97	8341.7422	ไดกลีเซอไรด์
1075.36	217909.03	12143.711	ไดกลีเซอไรด์
1101.60	140936.41	8736.6914	ไดกลีเซอไรด์
1409.92	326118.81	6061.9717	

ตารางผนวกที่ ค8 (ต่อ)

Peak retention time	Peak area	Peak height	Compound name
1443.84	256690.30	6358.4351	
1478.39	146658.88	5851.6055	
1505.12	164134.28,	7136.8667	
1523.68	510630.81	10894.366	ไตรกลีเซอไรด์
1587.36	180987.94	7998.1982	ไตรกลีเซอไรด์
1605.76	378794.84	19516.271	ไตรกลีเซอไรด์
1621.44	393995.41	16117.089	ไตรกลีเซอไรด์
1677.92	567400.38	11210.719	ไตรกลีเซอไรด์
1732.3199	88446.81	4307.8022	
1749.60	108921.58	5478.8872	
1782.5601	131882.06	4254.7905	

ตารางผนวกที่ ค9 ค่า Area และค่า Retention time (RT) ของโมนอกลิเซอไรด์ ไดกลีเซอไรด์ ไตรกลีเซอไรด์และเมทิลเอสเทอร์ ในน้ำมันชั้นบนที่เวลา 50 นาที ที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส อัตราส่วน โมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6

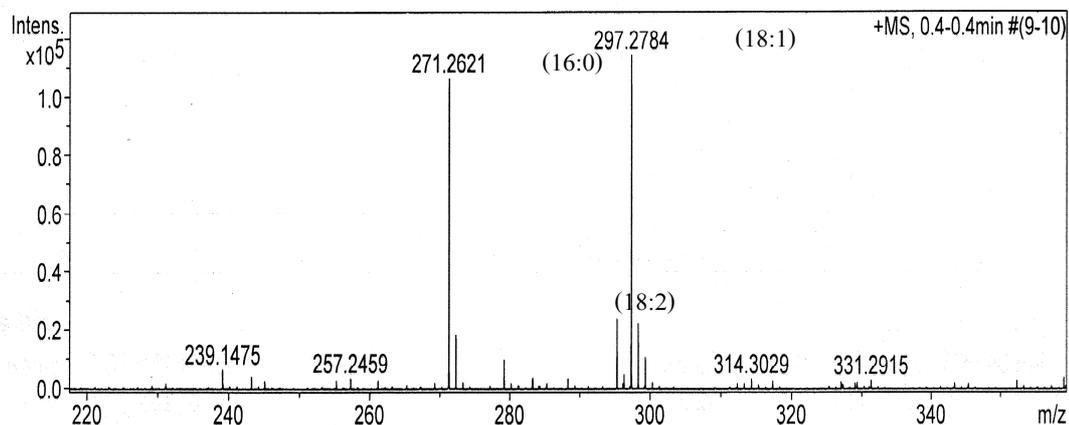
Peak retention time	Peak area	Peak height	Compound name
303.67	62645.28	3113.67	
351.52	103854.74	2886.87	
411.52	1227371.1	45739.45	เมทิลเอสเทอร์
467.67	5318.72	277.04	
504.16	476804.25	25740.24	เมทิลเอสเทอร์
533.59998	209574.08	7311.98,	เมทิลเอสเทอร์
618.88	95383.57	1762.58	
658.56	86768.148	2137.22	

ตารางผนวกที่ ค9 (ต่อ)

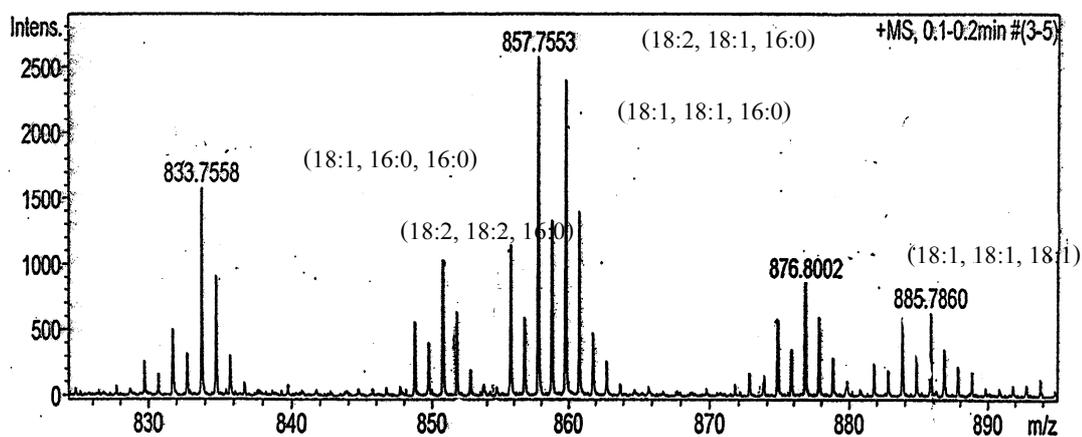
Peak retention time	Peak area	Peak height	Compound name
743.19995	135145.20	2768.34	โมนอกลิเซอไรด์
765.12	106257.42	4842.01	โมนอกลิเซอไรด์
862.72003	120949.38	6002.88	ไดกลีเซอไรด์
889.76001	113729.36	8607.52	ไดกลีเซอไรด์
918.88	131508.08	5357.50	ไดกลีเซอไรด์
959.84003	122190.83	3873.13	
988.16003	146056.27	5055.75	ไดกลีเซอไรด์
1011.84	127120.11	6693.04	ไดกลีเซอไรด์
1040.00	115767.50	5372.79	ไดกลีเซอไรด์
1326.5599	94935.90	5239.33	
1462.8799	355134.97	5386.60	
1482.5601	131729.92	7756.05	ไตรกลีเซอไรด์
1567.2001	156443.42	12754.16	ไตรกลีเซอไรด์
1583.84	201414.25	10970.01	ไตรกลีเซอไรด์
1640.48	308397.09	8212.25	ไตรกลีเซอไรด์
1676.16	30187.77	3192.05	
1696.8	76644.23	3547.7	
1721.4399	111285.80	3972.27	

ภาพผนวก ง

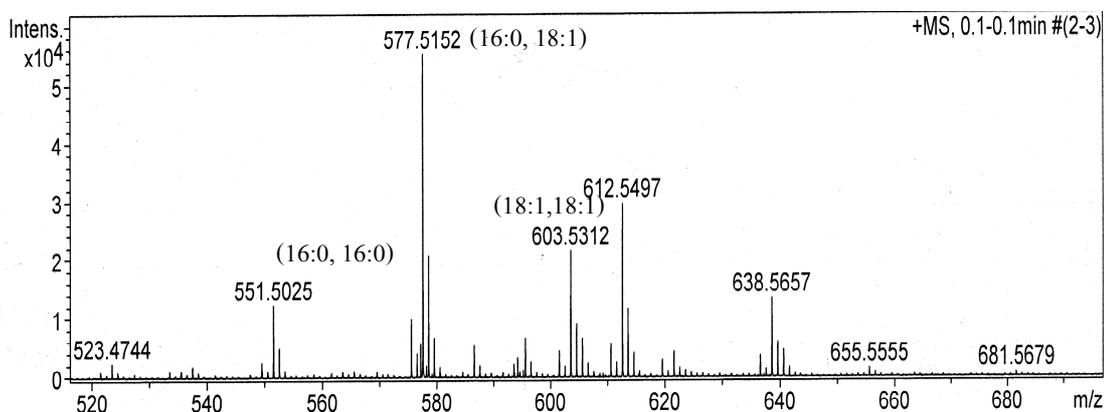
แมสสเปกตรัมของสารประกอบที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค MS



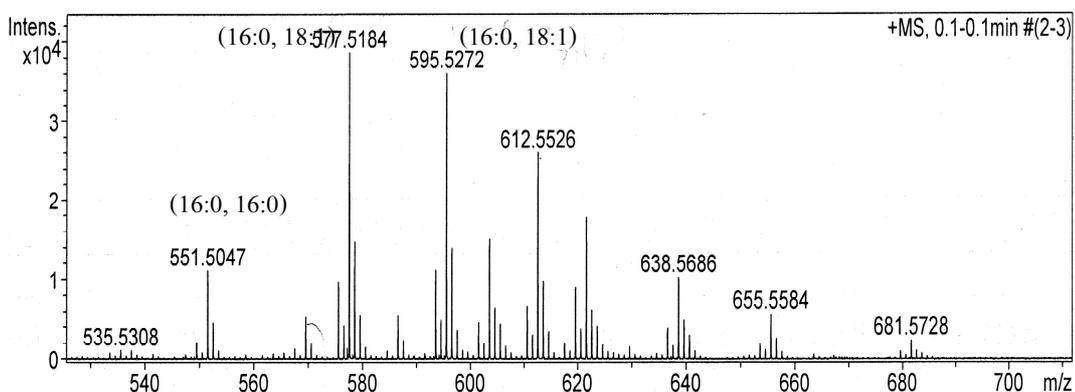
ภาพผนวกที่ ง1 แมสสเปกตรัมของเมทิลเอสเทอร์ที่แยกได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที สภาวะการทดลองดังนี้ อัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส



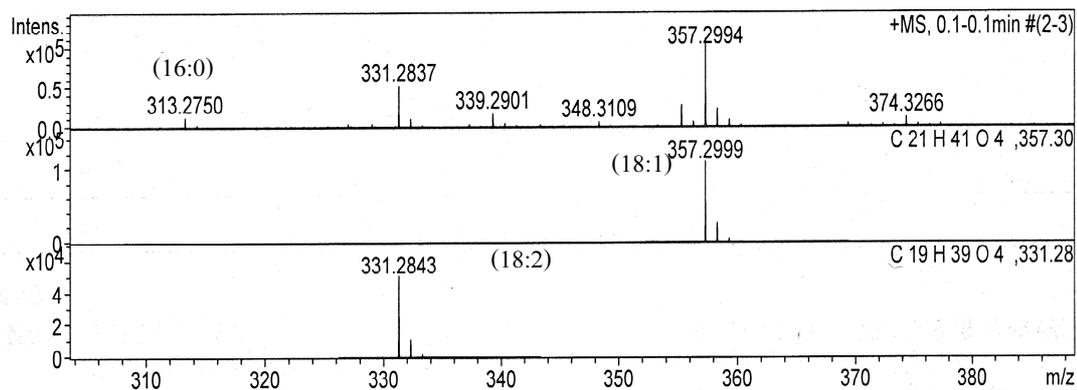
ภาพผนวกที่ ง2 แมสสเปกตรัมของไตรกลีเซอไรด์ที่แยกได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที สภาวะการทดลองดังนี้ อัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส



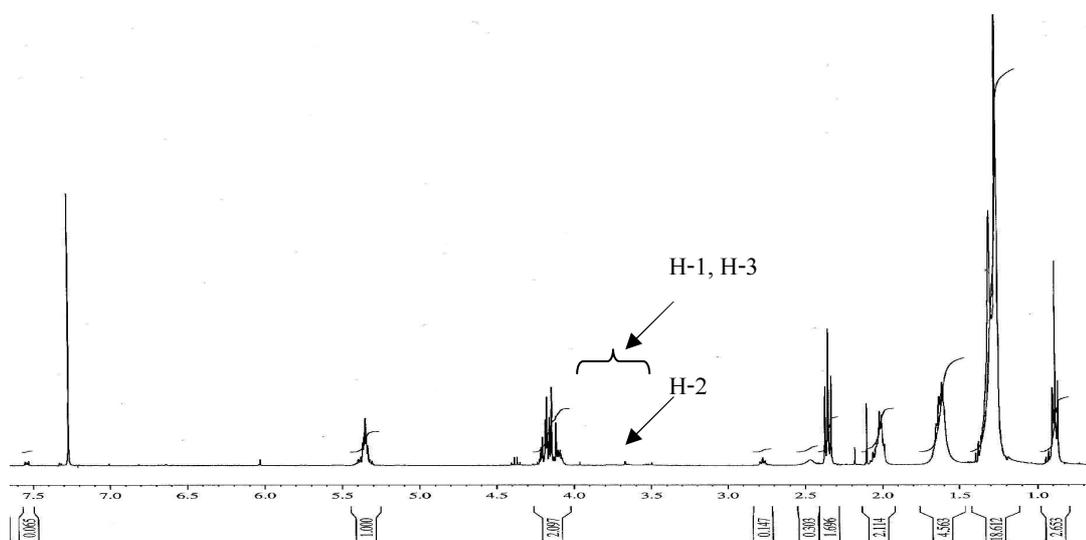
ภาพผนวกที่ 3 แมสสเปกตรัมของสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 3 ที่แยกได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส



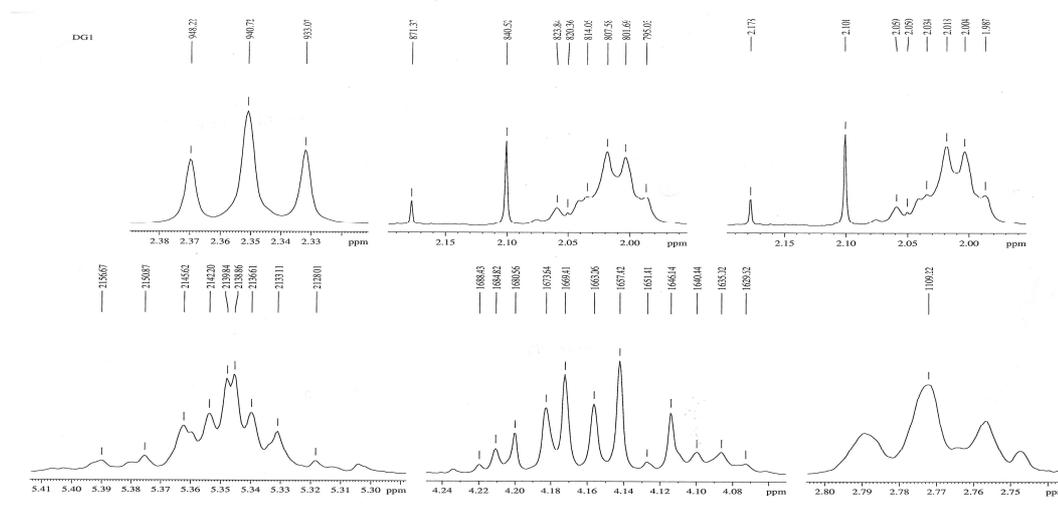
ภาพผนวกที่ 4 แมสสเปกตรัมของสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 4 ที่แยกได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส



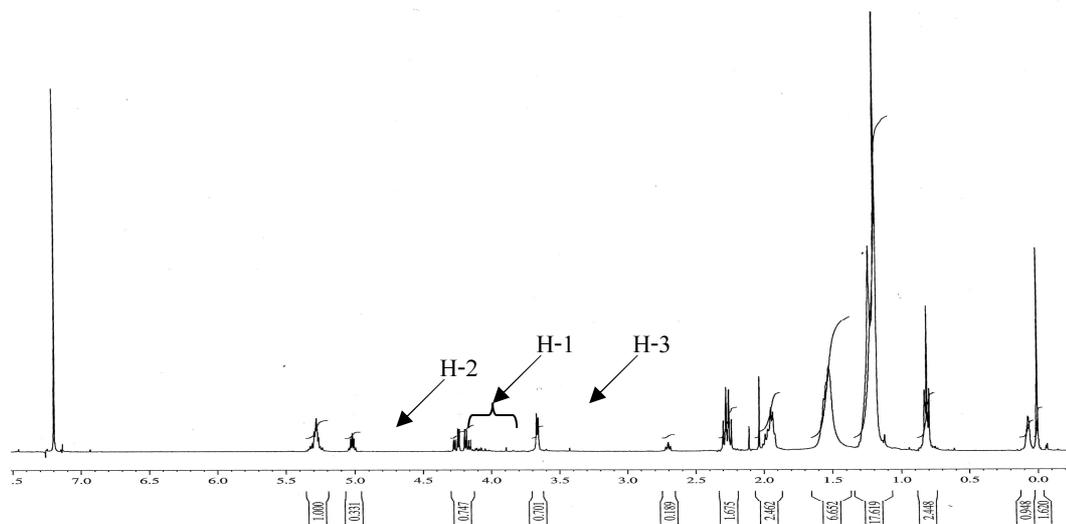
ภาพผนวกที่ 5 แมสสเปกตรัมของสารมัธยันตร์ตำแหน่งที่ 5 ที่แยกได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส



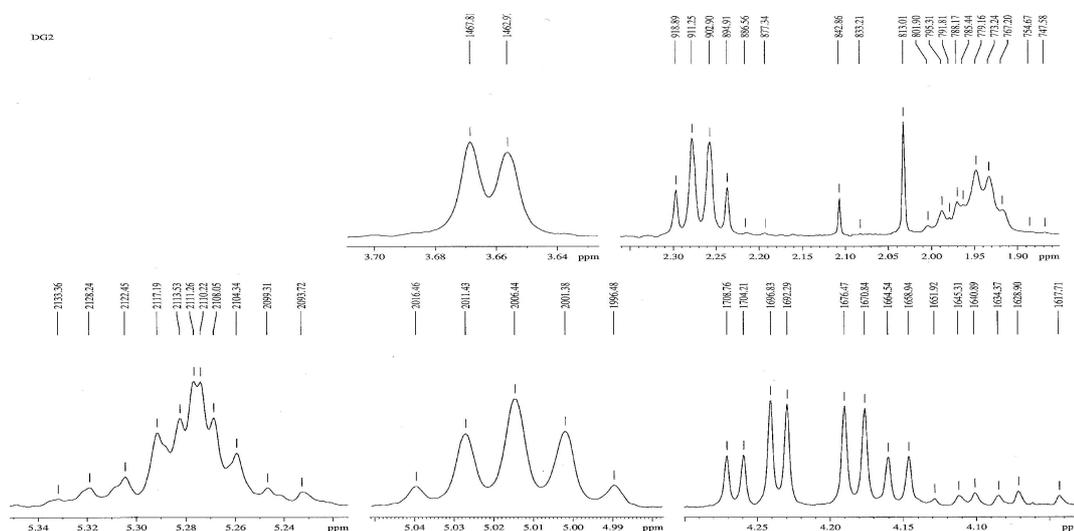
ภาพผนวกที่ จ5 สัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบ 1,3-ไดคทีเซอไรด์ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส



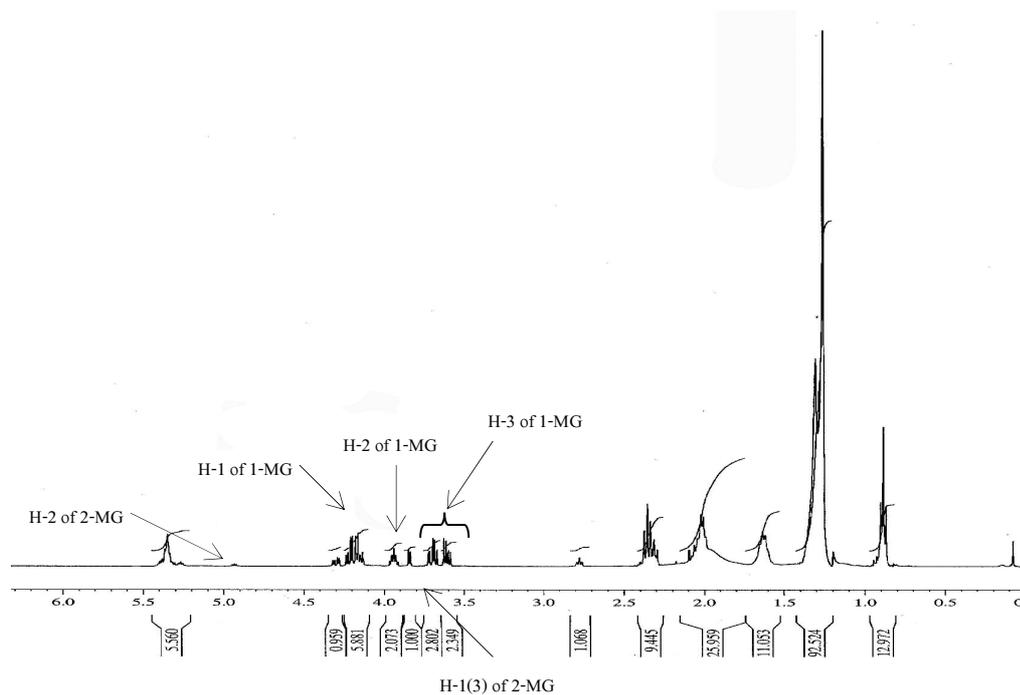
ภาพผนวกที่ จ6 การขยายสัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบ 1,3-ไดคทีเซอไรด์ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส



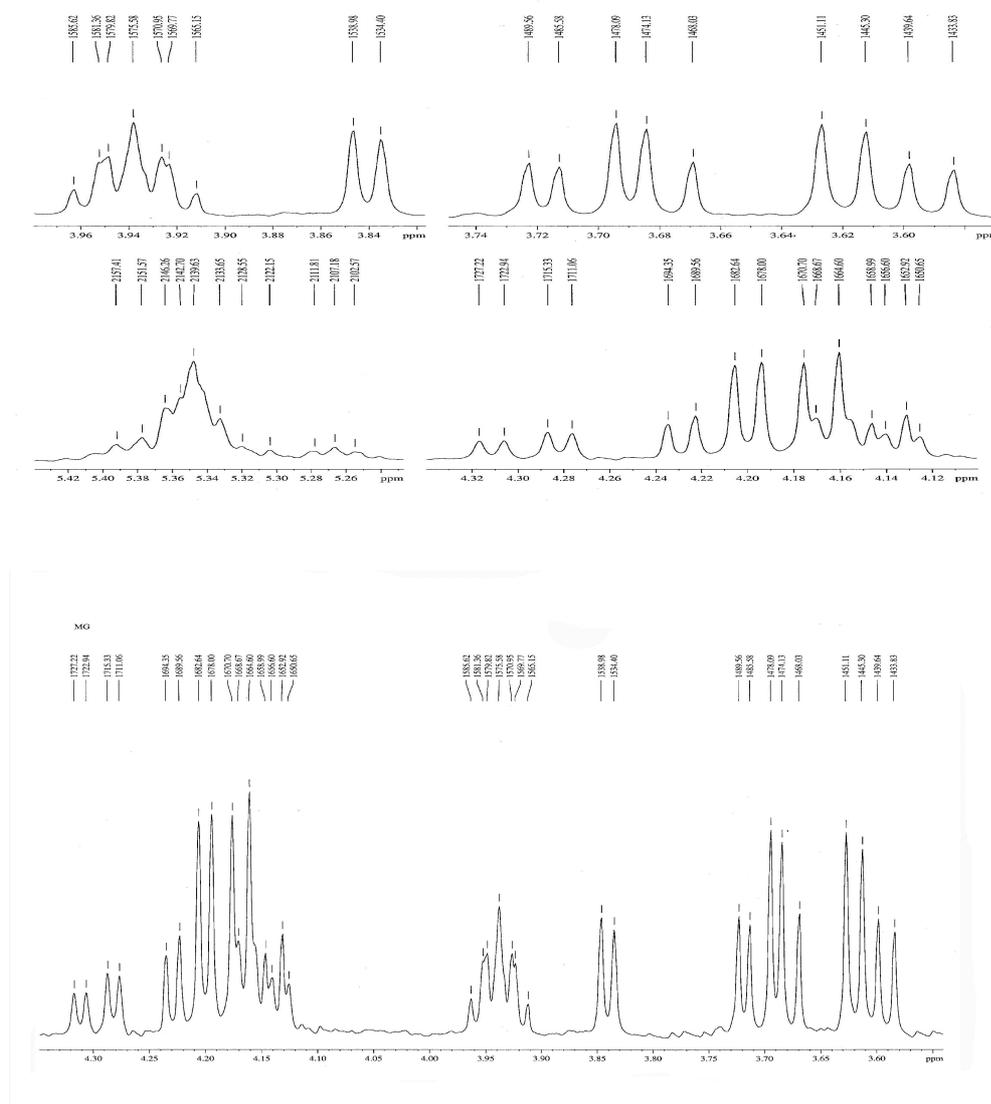
ภาพผนวกที่ จ7 สัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบ 1, 2-ไดกลีเซอไรด์ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส

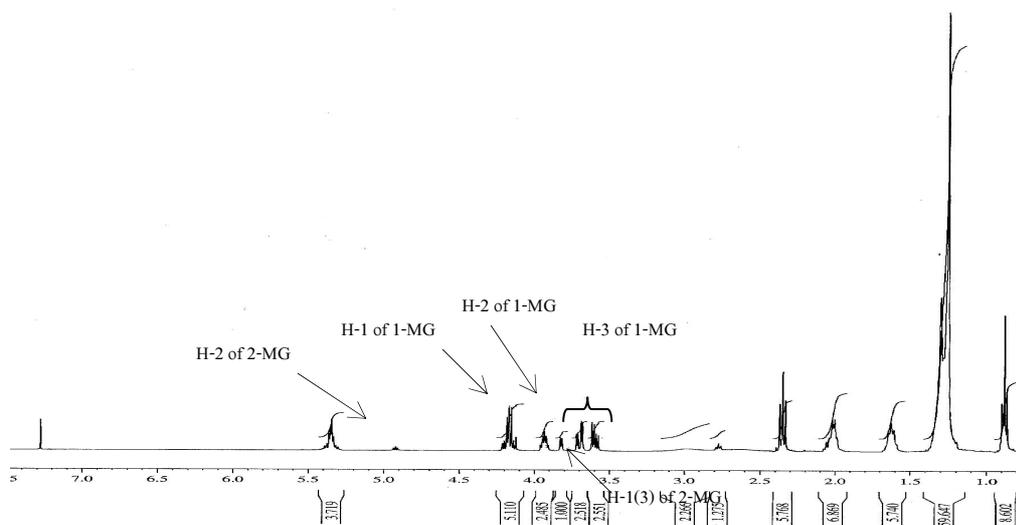


ภาพผนวกที่ จ8 การขยายสัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบ 1,2-ไดกลีเซอไรด์ ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส

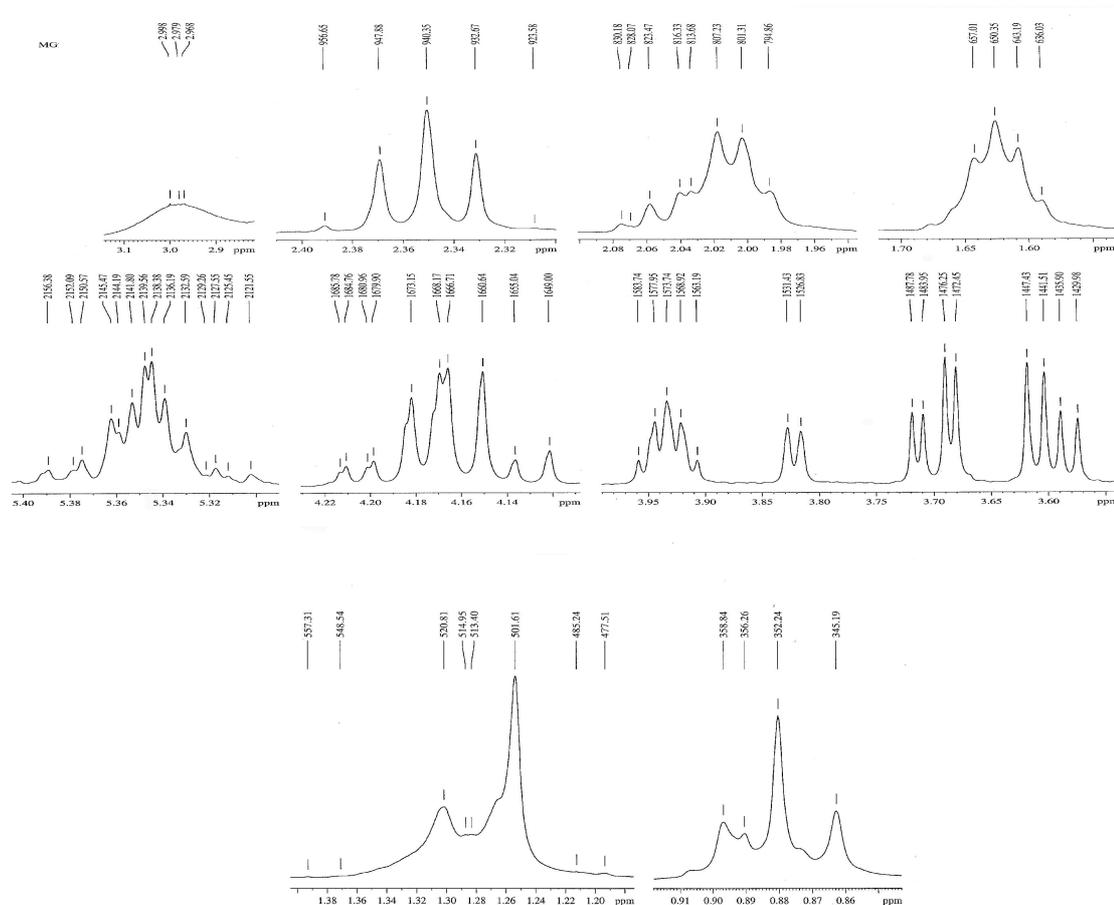


ภาพผนวกที่ ๑๑ สัญญาณ ^1H NMR ของสารประกอบโมโนกลูโคไซด์ ครั้งที่ 1 ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส





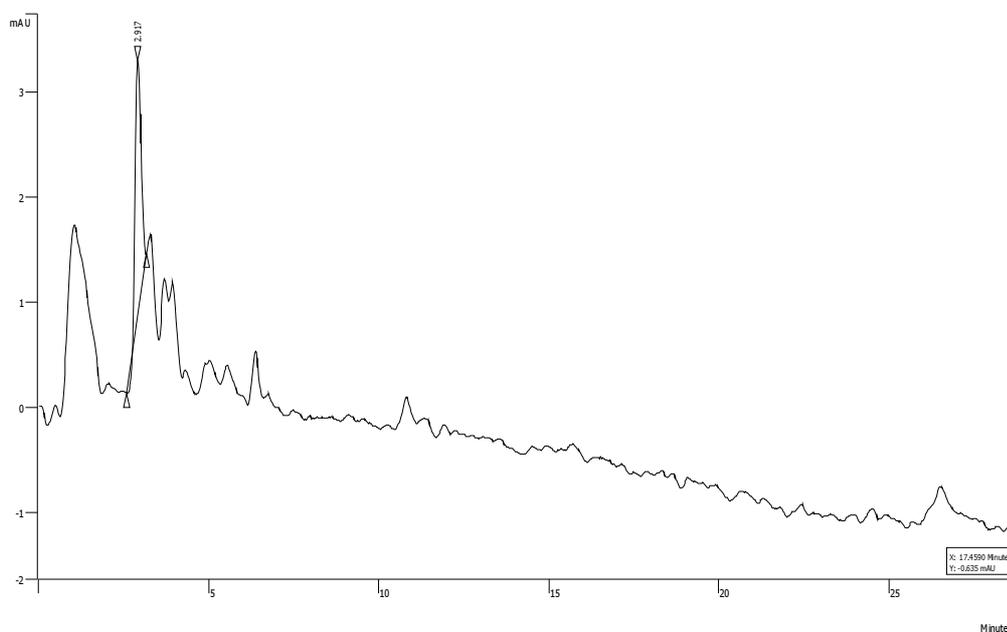
ภาพผนวกที่ จ11 สัญญาณ ^1H NMR ของโมโนกลีเซอไรด์ ครั้งที่ 2 ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส



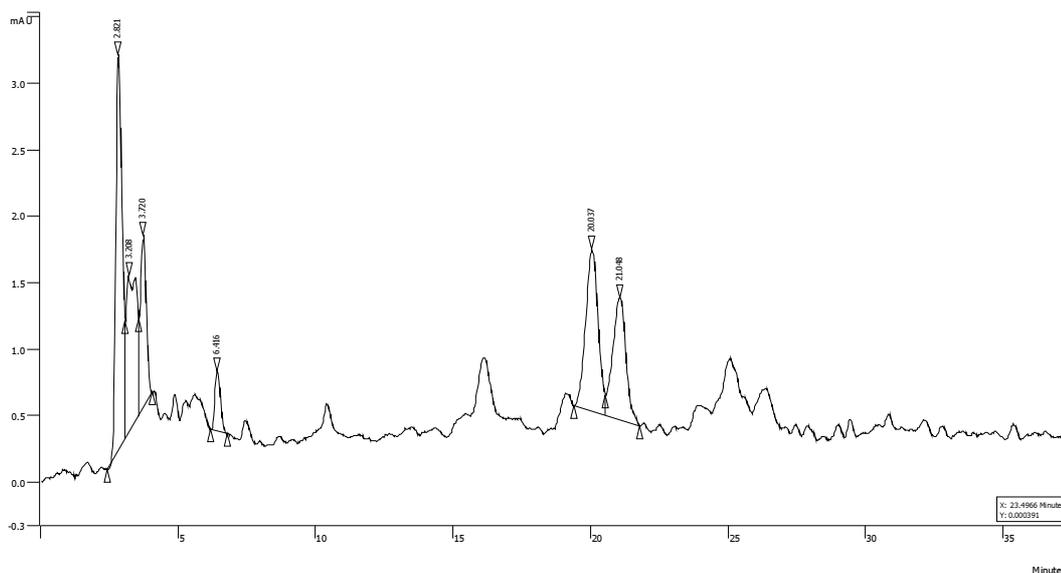
ภาพผนวกที่ ๑๒ การขยายสัญญาณ ^1H NMR ของโมโนกลีเซอไรด์ ครั้งที่ 2 ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส

ภาพผนวก ฉ

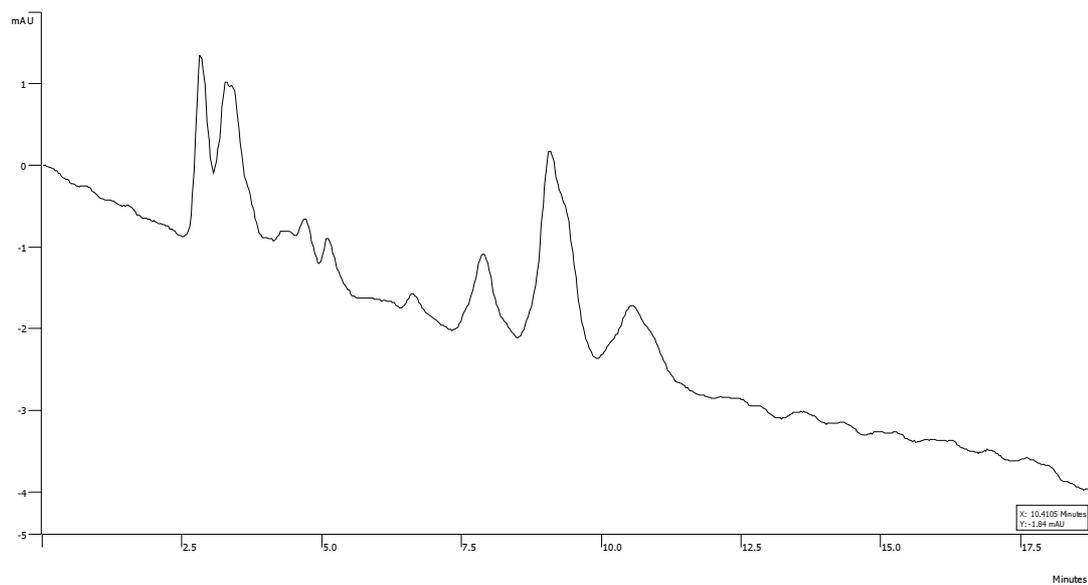
โครมาโทแกรมที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วยเทคนิค HPLC



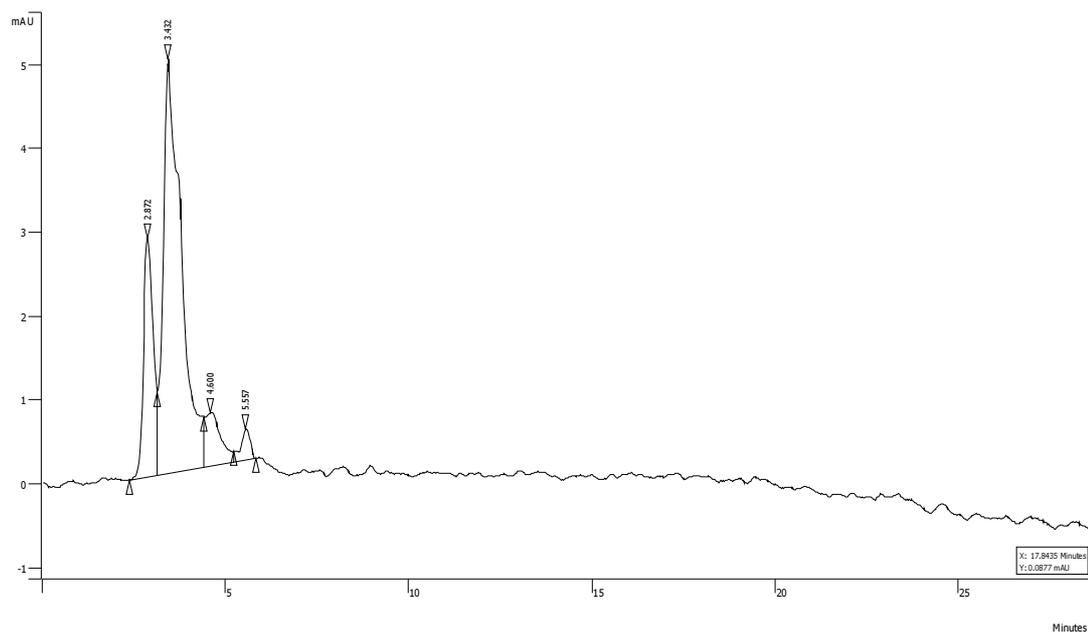
ภาพผนวกที่ ฉ1 โครมาโทแกรมของไตรกลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย A 30 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร ตัวทำละลาย B 70 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร: A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



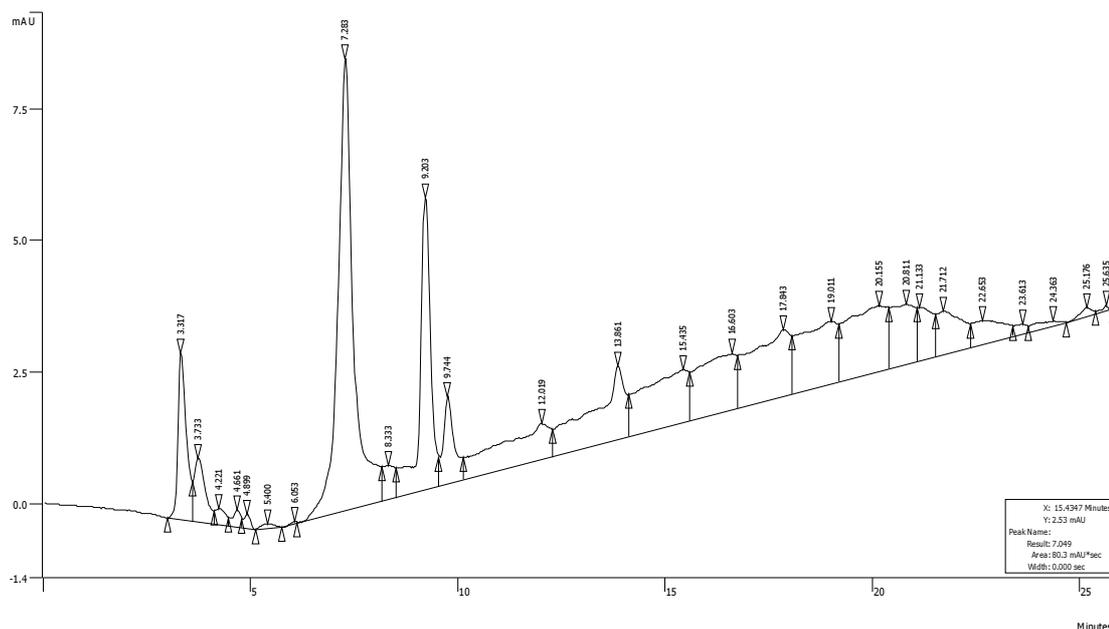
ภาพผนวกที่ ฉ2 โครมาโทแกรมของไตรกลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย A 40 เปอร์เซ็นต์ โดยปริมาตรตัวทำละลาย B 60 เปอร์เซ็นต์ โดยปริมาตร: A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์ โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์ โดยปริมาตร



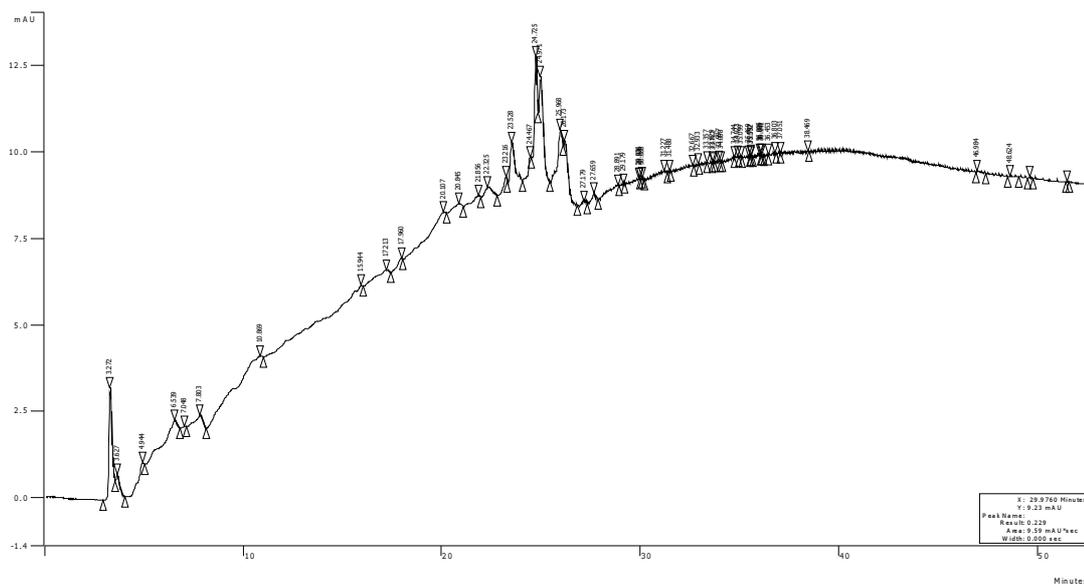
ภาพผนวกที่ ๓3 โครมาโทแกรมของไดรกลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย A 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตรตัวทำละลาย B 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร: A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



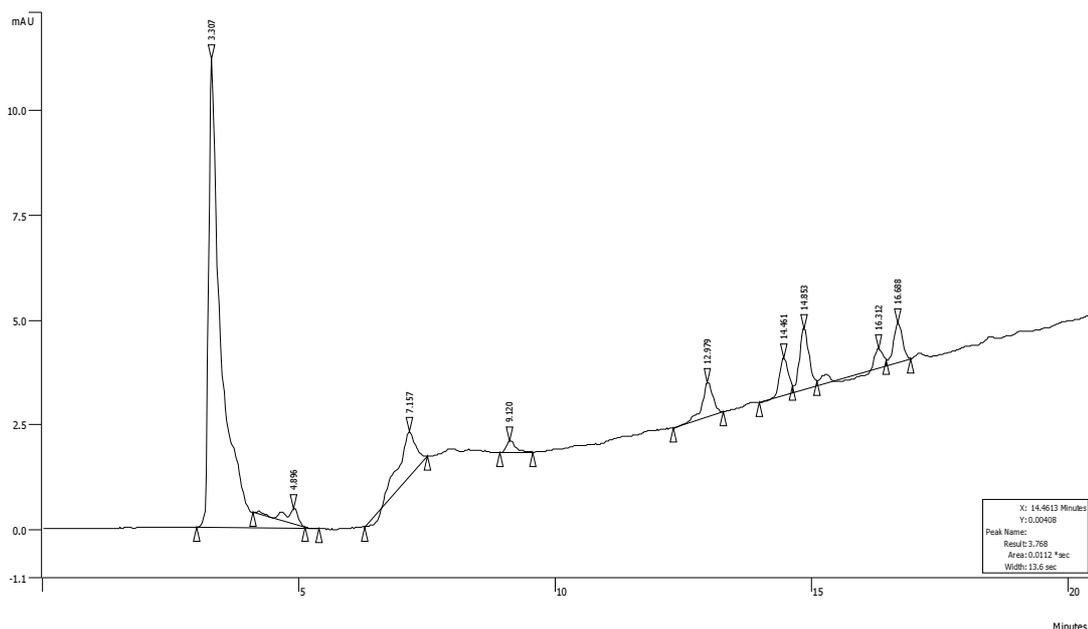
ภาพผนวกที่ ๓4 โครมาโทแกรมของโมนอกลิเซอไรด์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย A 40 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร ตัวทำละลาย B 60 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร: A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



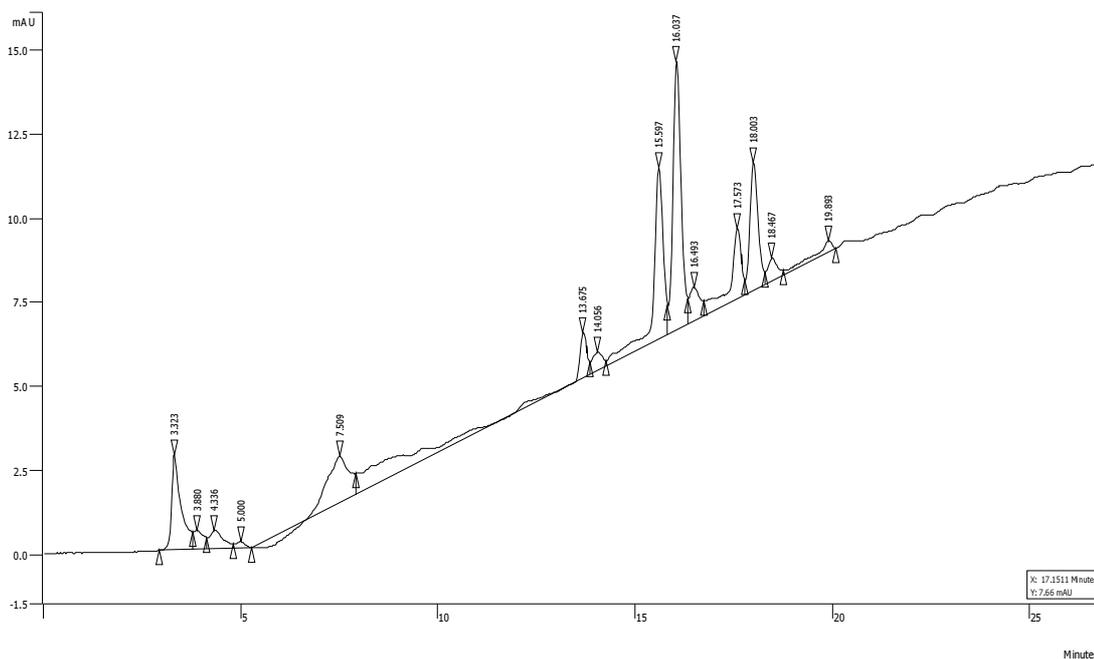
ภาพผนวกที่ ๑5 โครมาโทแกรมของเมทิลเอสเทอร์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คืออะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



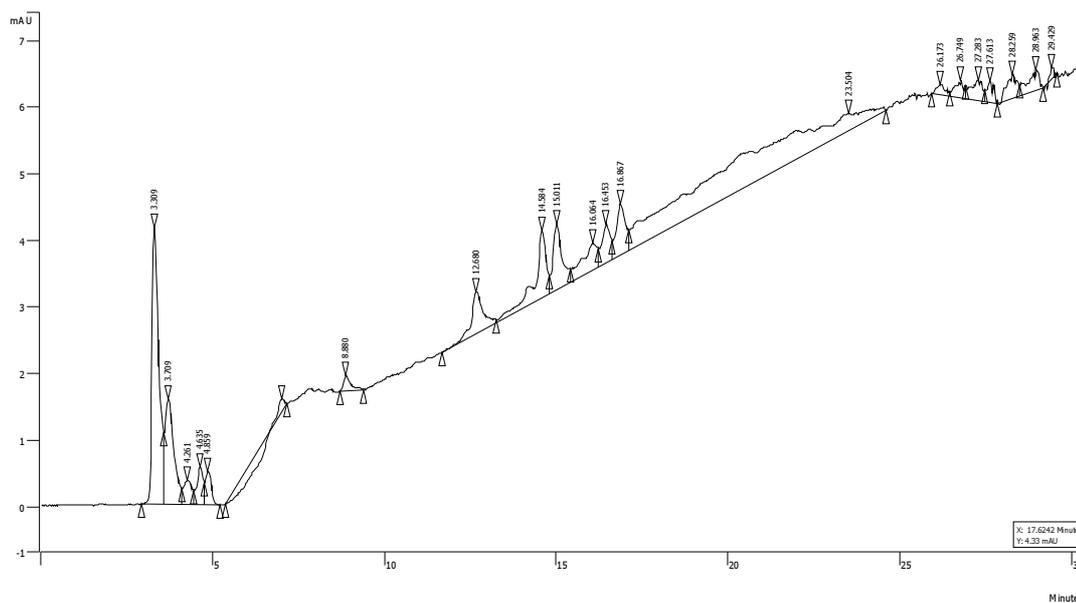
ภาพผนวกที่ ๑๖ โครมาโทแกรมของไตรกลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



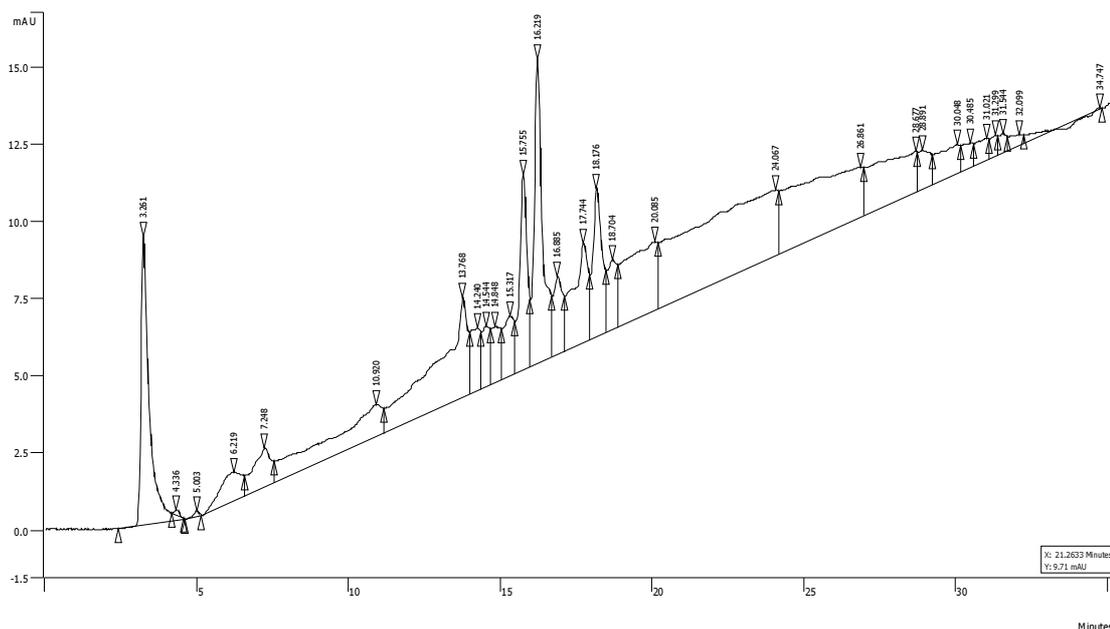
ภาพผนวกที่ ๗ โครมาโทแกรมของ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์ โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



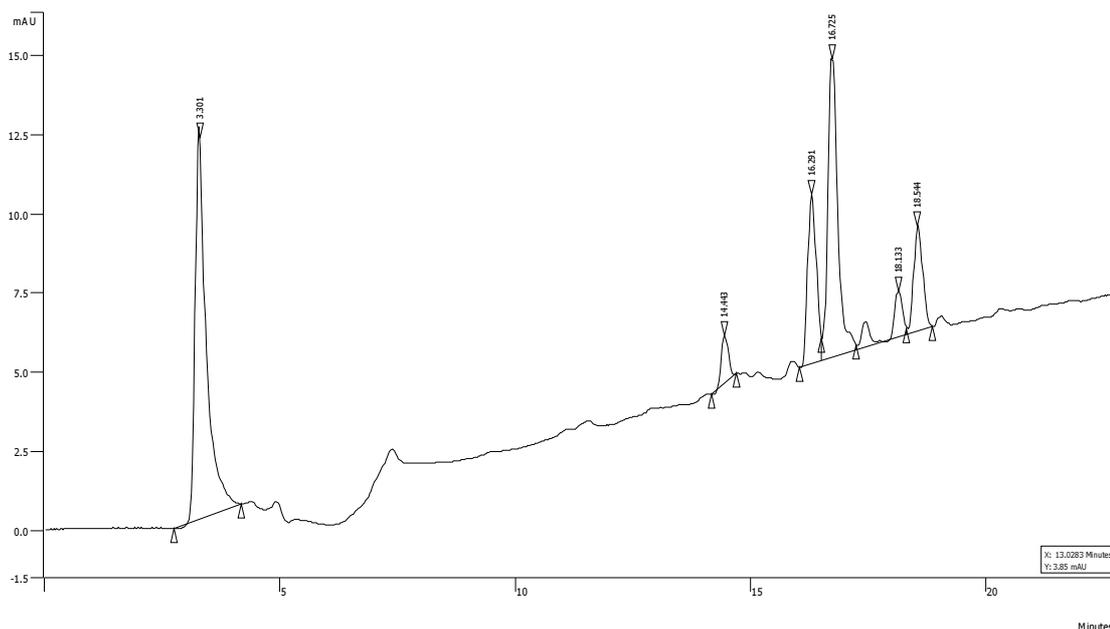
ภาพผนวกที่ ๘ โครมาโทแกรมของ 1,3-ไดกลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 3000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



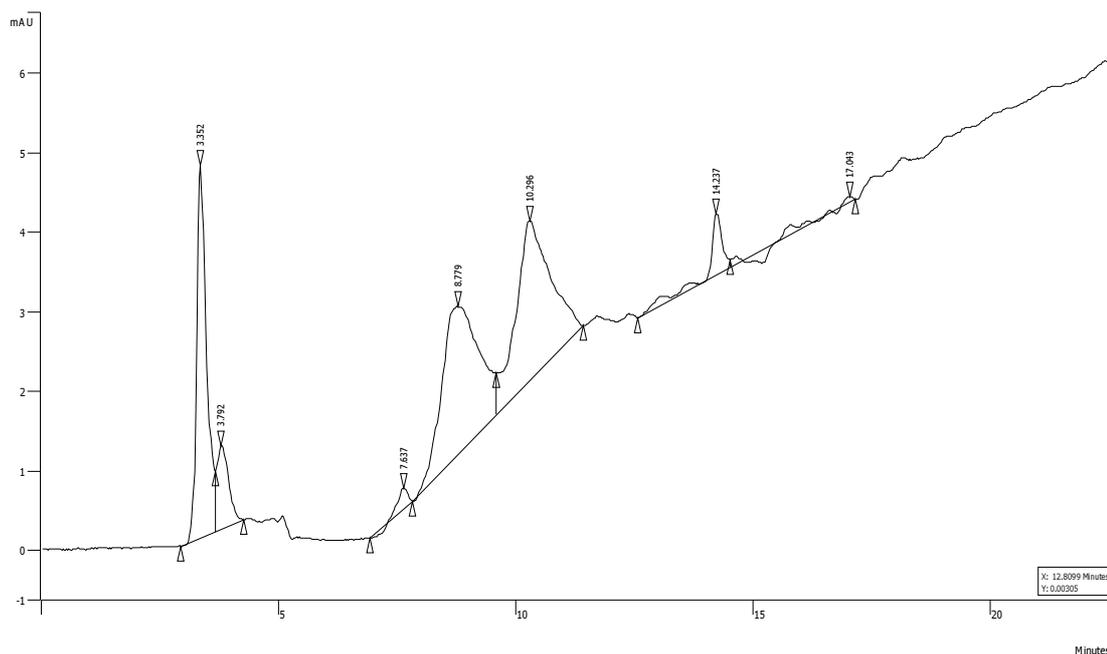
ภาพผนวกที่ ๑๑ โครมาโทแกรมของ 1,2-ไดคลอโรเอทรีล ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คืออะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



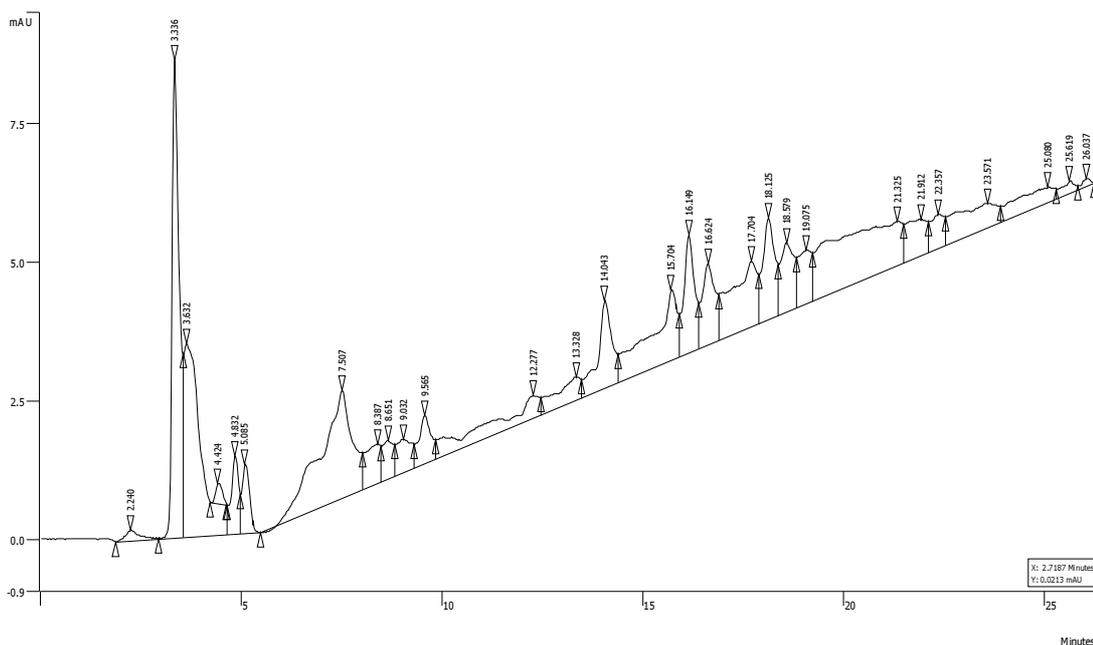
ภาพผนวกที่ ๑๑๐ โครมาโทแกรมของ 1,2-ไดคลิเซอไรด์ ความเข้มข้น 2000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์ โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



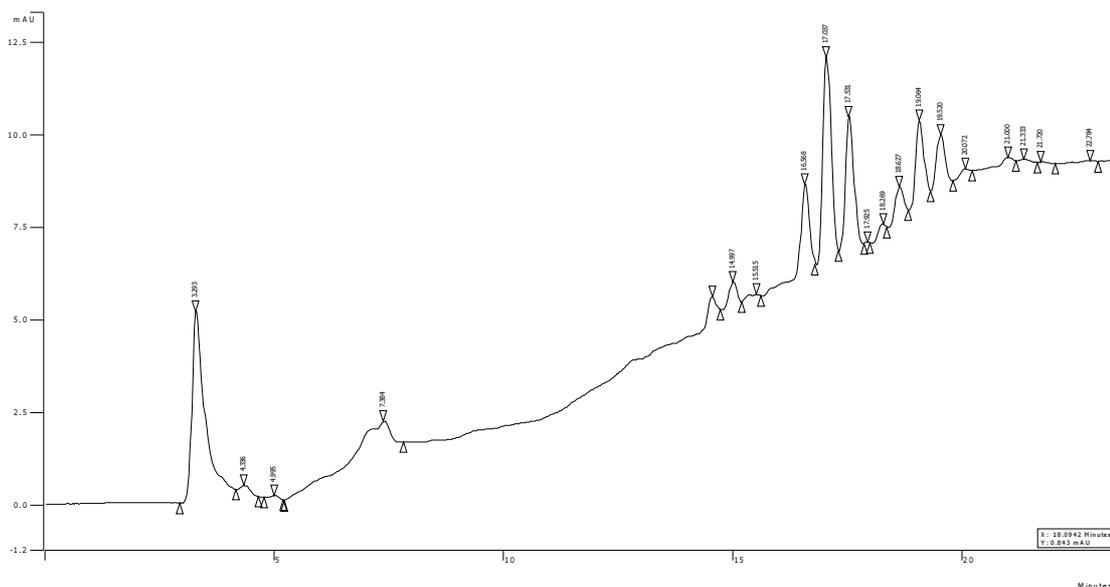
ภาพผนวกที่ ๑1 โครมาโทแกรมของ 1,2-ไดคลิเซอไรด์ ความเข้มข้น 3000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์ โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



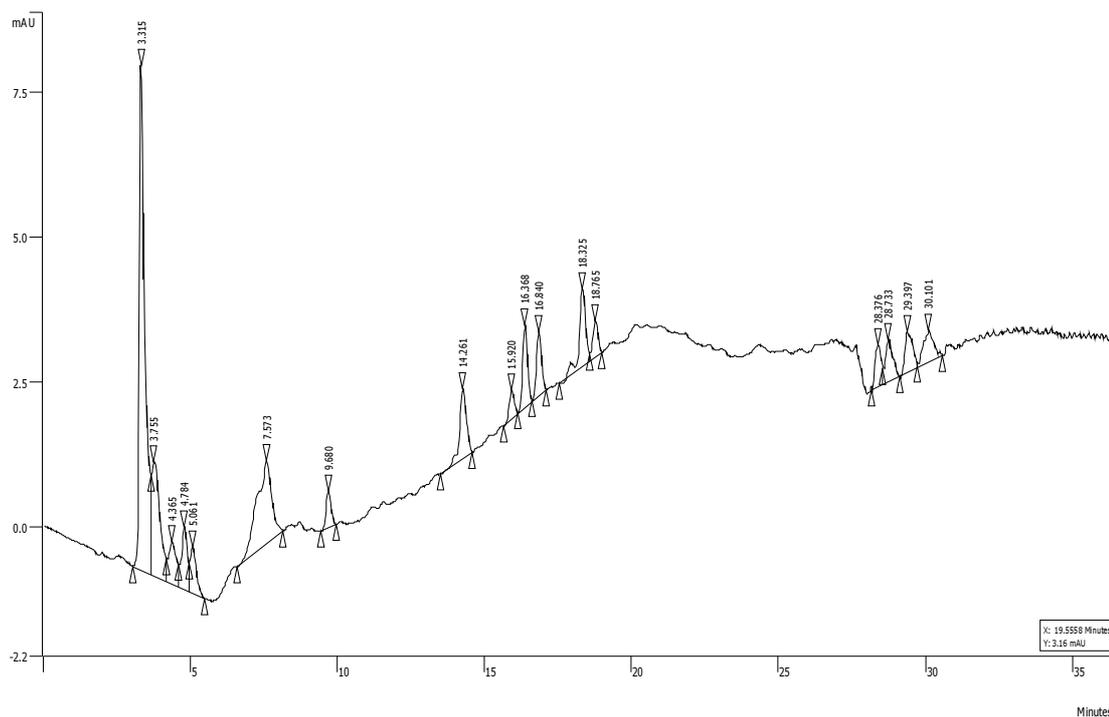
ภาพผนวกที่ ๑๑๒ โครมาโทแกรมของโมนอกลิเซอไรด์ ความเข้มข้น 1200 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์ โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



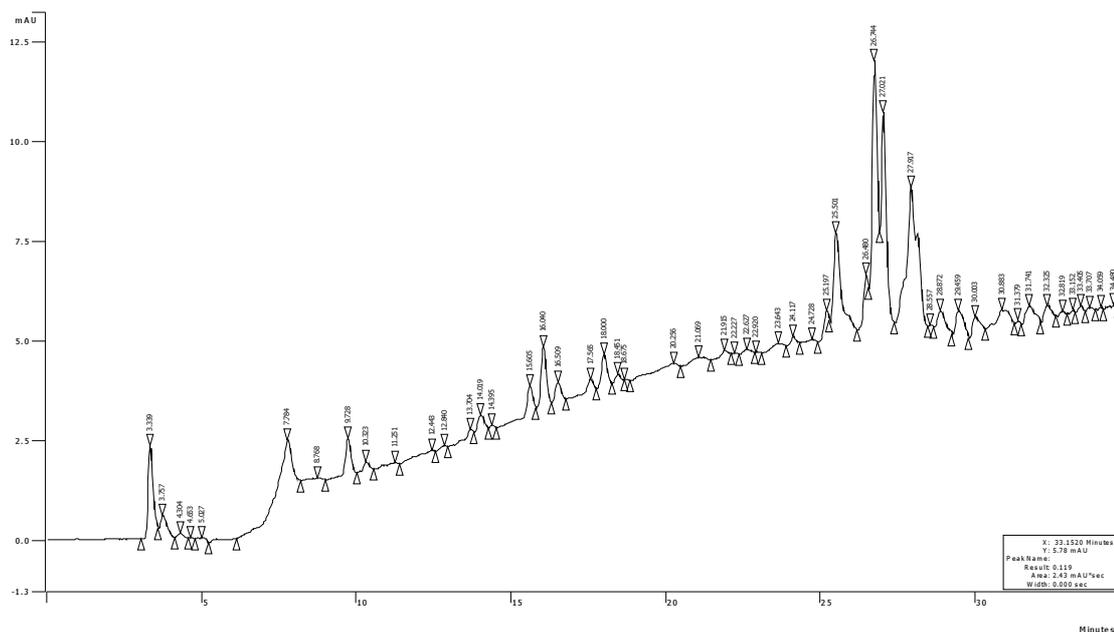
ภาพผนวกที่ ๑๓ โครมาโทแกรมของสารผสมระหว่าง 1,3-ไดคลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1000 ppm และ 1,2-ไดคลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



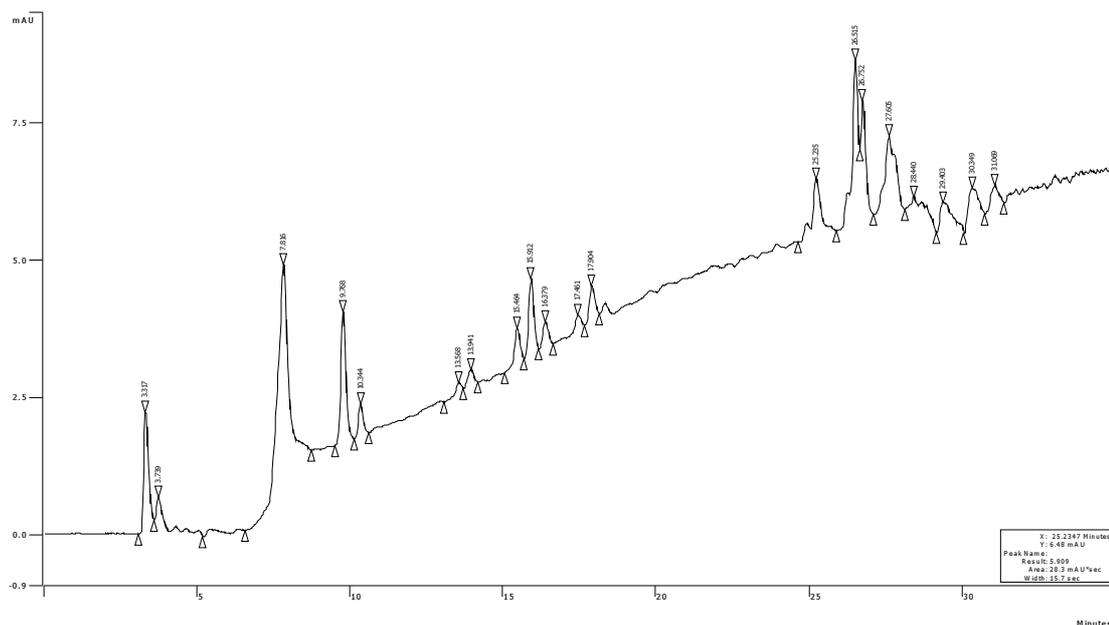
ภาพผนวกที่ ๑๑๔ โครมาโทแกรมของสารผสมระหว่าง 1,3-ไดคลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 3000 ppm และ 1,2-ไดคลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 3000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อ เมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



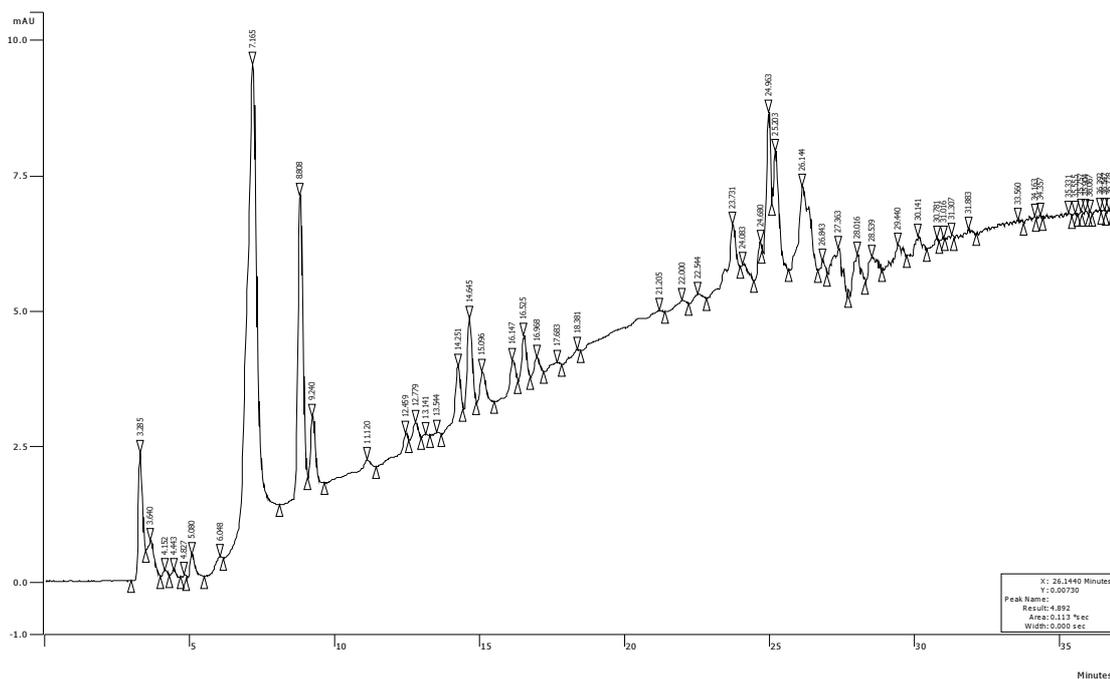
ภาพผนวกที่ ๑15 โครมาโทแกรมของสารผสมระหว่าง 1,3-ไดคลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 3000 ppm และ 1,2-ไดคลีเซอไรด์ ความเข้มข้น 1000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันของน้ำมันปาล์มที่เวลา 20 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์ โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร

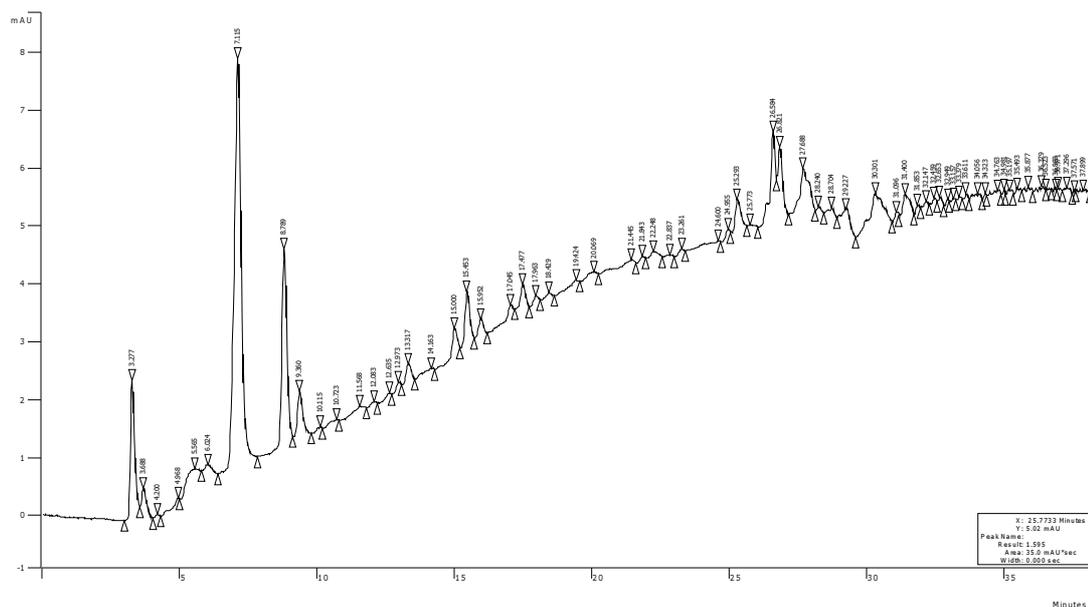


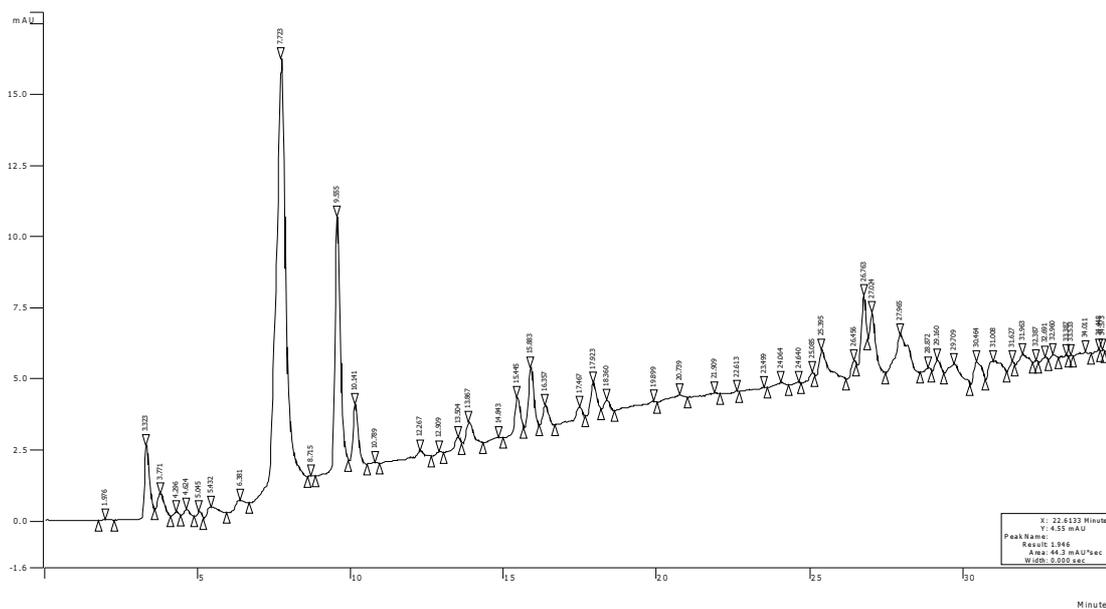
ภาพผนวกที่ ๑16 โครมาโทแกรมของน้ำมันชั้นบน ที่ความเข้มข้น 5000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ที่เวลา 2 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์ โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



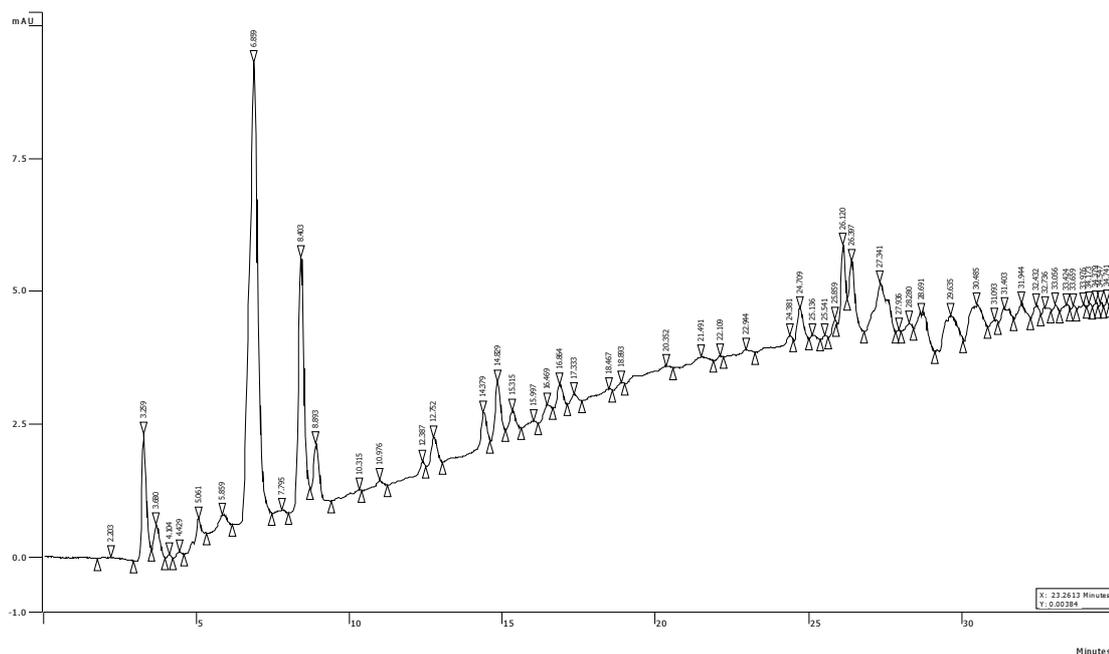
ภาพผนวกที่ ๑17 โครมาโทแกรมของน้ำมันชั้นบน ที่ความเข้มข้น 5000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ที่เวลา 10 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์ โดยปริมาตร B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร







ภาพผนวกที่ ฉ20 โครมาโทแกรมของน้ำมันชั้นบน ที่ความเข้มข้น 5000 ppm ที่ได้จากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ที่เวลา 40 นาที ที่สภาวะอัตราส่วนโมลของน้ำมันต่อเมทานอล 1:6 ปริมาณโพแทสเซียมไฮดรอกไซด์ 1 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ระบบตัวทำละลาย 100 เปอร์เซ็นต์ A-100 เปอร์เซ็นต์ B ภายในเวลา 40 นาที : A คือ อะซิโตไนไตรล์ 100 เปอร์เซ็นต์ B คือ ไอโซโพรพานอลในเฮกเซน 50 เปอร์เซ็นต์โดยปริมาตร



ภาคผนวก ข
การวิเคราะห์โดยใช้เทคนิคการจำลองโมเลกุล

สารประกอบ 1,2- ไดกลีเซอไรด์

Symbolic Z-matrix:

Charge = 0 Multiplicity = 1

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z

1	6	0	-0.632869	0.893509	0.688376
2	1	0	-0.646137	-0.066412	1.160896
3	6	0	0.632070	1.020384	-0.180780
4	1	0	0.629419	0.254849	-0.928342
5	6	0	3.146683	0.994368	-0.163063
6	6	0	4.396356	0.841478	0.723809
7	1	0	4.383096	-0.118438	1.196340
8	1	0	4.399008	1.607010	1.471374
9	8	0	1.881743	0.867494	0.706092
10	8	0	3.164403	2.277242	-0.794586
11	6	0	5.661295	0.968353	-0.145346
12	1	0	5.862694	2.002290	-0.333263
13	1	0	5.508086	0.460227	-1.074451
14	6	0	6.856877	0.338453	0.593172
15	1	0	6.690545	-0.712042	0.710195
16	1	0	6.960564	0.792630	1.556433
17	6	0	8.142621	0.566805	-0.223111
18	1	0	8.316388	1.617336	-0.328412

Number	Number	Type	X	Y	Z
19	1	0	8.033694	0.124498	-1.191305
20	6	0	9.335043	-0.080233	0.505636
21	1	0	9.164070	-1.131755	0.605485
22	1	0	9.440183	0.357768	1.476203
23	6	0	10.622215	0.155742	-0.306216
24	1	0	10.793404	1.207261	-0.405725
25	1	0	10.516923	-0.281913	-1.276923
26	6	0	11.814545	-0.491790	0.422242
27	1	0	11.643769	-1.543452	0.520949
28	1	0	11.919281	-0.054771	1.393295
29	6	0	13.101925	-0.254697	-0.388956
30	1	0	13.272638	0.796965	-0.487764
31	1	0	12.997234	-0.691820	-1.359967
32	6	0	14.294282	-0.902083	0.339588
33	1	0	14.123690	-1.953787	0.438162
34	1	0	14.398811	-0.465146	1.310701
35	6	0	15.581722	-0.664663	-0.471418
36	1	0	15.752274	0.387041	-0.570057
37	1	0	15.477223	-1.101666	-1.442504
38	6	0	16.774097	-1.311955	0.257181
39	1	0	16.603476	-2.363636	0.355954
40	1	0	16.878690	-0.874847	1.228209
41	6	0	18.061502	-1.074723	-0.553935
42	1	0	18.232060	-0.023042	-0.652807
43	1	0	17.956953	-1.511932	-1.524923
44	6	0	19.253903	-1.721872	0.174747
45	1	0	19.083369	-2.773562	0.273571

Number	Number	Type	X	Y	Z
46	1	0	19.358419	-1.284701	1.145756
47	6	0	20.541321	-1.484574	-0.636330
48	1	0	20.711841	-0.432883	-0.735175
49	1	0	20.436815	-1.921767	-1.607329
50	6	0	21.733722	-2.131722	0.092353
51	1	0	21.563192	-3.183414	0.191168
52	1	0	22.628226	-1.966846	-0.471188
53	1	0	21.838232	-1.694558	1.063365
54	6	0	-3.147482	0.875032	0.662990
55	6	0	-4.397238	1.040385	-0.221525
56	1	0	-4.398561	2.017308	-0.658010
57	1	0	-4.385400	0.303260	-0.997030
58	8	0	-1.882542	1.046427	-0.198491
59	8	0	-3.159311	1.865146	1.694705
60	6	0	-5.662129	0.860605	0.638318
61	1	0	-5.871727	1.771443	1.159224
62	1	0	-5.503670	0.073550	1.345661
63	6	0	-6.853418	0.502672	-0.269599
64	1	0	-6.957196	1.246562	-1.031674
65	1	0	-6.682183	-0.451168	-0.723216
66	6	0	-8.141796	0.446909	0.572169
67	1	0	-8.320705	1.404723	1.014304
68	1	0	-8.032659	-0.287018	1.343105
69	6	0	-9.329752	0.068914	-0.331976
70	1	0	-9.433643	0.798317	-1.107913
71	1	0	-9.154703	-0.892647	-0.767473
72	6	0	-10.620125	0.025053	0.507438

Number	Number	Type	X	Y	Z
73	1	0	-10.795141	0.986597	0.942986
74	1	0	-10.516257	-0.704394	1.283336
75	6	0	-11.808096	-0.352854	-0.396725
76	1	0	-11.633946	-1.315227	-0.830788
77	1	0	-11.910793	0.375575	-1.173735
78	6	0	-13.098905	-0.394056	0.442151
79	1	0	-12.996382	-1.122813	1.218878
80	1	0	-13.272806	0.568192	0.876590
81	6	0	-14.286982	-0.771313	-0.462144
82	1	0	-14.113333	-1.733801	-0.896151
83	1	0	-14.389165	-0.042853	-1.239192
84	6	0	-15.577918	-0.811742	0.376577
85	1	0	-15.475872	-1.540460	1.153402
86	1	0	-15.751372	0.150648	0.810879
87	6	0	-16.766079	-1.188487	-0.527822
88	1	0	-16.592818	-2.151060	-0.961795
89	1	0	-16.867865	-0.459996	-1.304894
90	6	0	-18.057110	-1.228325	0.310778
91	1	0	-17.955395	-1.956949	1.087735
92	1	0	-18.230270	-0.265802	0.744903
93	6	0	-19.245314	-1.604805	-0.593674
94	1	0	-19.072270	-2.567438	-1.027602
95	1	0	-19.346874	-0.876318	-1.370779
96	6	0	-20.536403	-1.644291	0.244854
97	1	0	-20.434890	-2.372865	1.021884
98	1	0	-20.709382	-0.681690	0.678881
99	6	0	-21.724635	-2.020598	-0.659633

Number	Number	Type	X	Y	Z
100	1	0	-21.551729	-2.983267	-1.093535
101	1	0	-22.621716	-2.047878	-0.077050
102	1	0	-21.826051	-1.292110	-1.436756
103	1	0	-0.630206	1.659030	1.435953
104	6	0	0.651155	2.401944	-0.860874
105	1	0	1.068540	3.123818	-0.190361
106	1	0	1.246115	2.354138	-1.748926
107	8	0	-0.684070	2.783964	-1.201659
108	1	0	-0.660091	3.540009	-1.792776

สารประกอบ 1,3-ไดคทีเซอไรด์

Symbolic Z-matrix:

Charge = 0 Multiplicity = 1

Center	Atomic	Forces (Hartrees/Bohr)		
Number	Number	X	Y	Z
1	6	-0.010640163	-0.002238826	0.008385509
2	6	0.001832138	0.000984812	-0.001316186
3	1	-0.002706790	0.000866361	0.003683846
4	1	-0.000061992	-0.000653640	-0.000012931
5	6	-0.000853246	-0.001936647	0.002676563
6	1	0.000505445	0.000760766	-0.000561277
7	1	0.000289744	0.000687755	-0.001046136
8	8	0.009754017	0.009526659	-0.004183872
9	8	0.008543673	-0.001281610	-0.007404908

Number	Number	X	Y	Z
10	6	0.002081780	0.001620529	-0.001714696
11	1	-0.000490141	-0.000581975	0.000477565
12	1	-0.000864109	-0.000622197	0.000502445
13	6	-0.001826544	-0.001965263	0.001255330
14	1	0.000578140	0.000665534	-0.000662819
15	1	0.000573244	0.000495095	-0.000338268
16	6	0.002106531	0.001677565	-0.001564792
17	1	-0.000495560	-0.000594790	0.000500460
18	1	-0.000750173	-0.000512721	0.000435285
19	6	-0.001971918	-0.001893234	0.001497618
20	1	0.000629144	0.000471983	-0.000368795
21	1	0.000516923	0.000614984	-0.000550457
22	6	0.002095708	0.001871429	-0.001574163
23	1	-0.000714953	-0.000508993	0.000408451
24	1	-0.000506719	-0.000586194	0.000492438
25	6	-0.002024773	-0.001906896	0.001553785
26	1	0.000509504	0.000603752	-0.000529643
27	1	0.000640046	0.000478013	-0.000372811
28	6	0.002088020	0.001920348	-0.001568097
29	1	-0.000696924	-0.000505671	0.000399433
30	1	-0.000507435	-0.000589607	0.000494560
31	6	-0.002036609	-0.001903265	0.001567371
32	1	0.000507194	0.000601176	-0.000522240
33	1	0.000650462	0.000485225	-0.000376051

Number	Number	X	Y	Z
34	6	0.002046239	0.001933502	-0.001527085
35	1	-0.000689701	-0.000504957	0.000392143
36	1	-0.000506102	-0.000598306	0.000501922
37	6	-0.002017909	-0.001756651	0.001615245
38	1	0.000506152	0.000608089	-0.000532603
39	1	0.000677437	0.000492416	-0.000379532
40	6	0.001972806	0.001928446	-0.001448716
41	1	-0.000713036	-0.000500762	0.000417482
42	1	-0.000521160	-0.000605312	0.000545279
43	6	-0.001798882	-0.001359649	0.001491132
44	1	0.000627953	0.000582472	-0.000583218
45	1	0.000710483	0.000524919	-0.000492771
46	6	0.000076951	0.000609346	0.000199070
47	1	0.000108620	-0.000251722	0.000303439
48	1	0.000002469	0.000582442	0.000308056
49	1	-0.000395966	-0.000030073	-0.000122533
50	6	-0.001937428	0.000749667	0.001387403
51	1	-0.000418345	0.000417470	0.000671216
52	1	0.000459730	0.000393721	0.000986021
53	8	-0.002669087	0.001372704	0.000681693
54	1	0.000319309	0.002790395	0.000457048
55	8	0.006265179	0.000445969	-0.000213930
56	6	-0.008158810	-0.001153655	0.004867361
57	8	0.004007081	0.004770233	-0.001223426

Number	Number	X	Y	Z
58	6	0.004452172	0.001103444	-0.002812382
59	1	0.000573338	-0.000166423	-0.000757460
60	1	-0.002271292	-0.003779554	-0.000467664
61	6	-0.004554245	-0.003003388	0.001093807
62	1	0.001114568	0.000914067	-0.000064579
63	1	0.000694577	-0.000037119	-0.000371327
64	6	0.002510596	0.001565365	-0.002357115
65	1	-0.000938069	-0.000275421	0.000638777
66	1	-0.000623788	-0.000422033	0.000327842
67	6	-0.002207349	-0.001261459	0.001954058
68	1	0.000674224	0.000377994	-0.000385344
69	1	0.000664450	0.000437838	-0.000684686
70	6	0.002334627	0.001291093	-0.001570704
71	1	-0.000844018	-0.000262867	0.000491981
72	1	-0.000569163	-0.000456685	0.000449087
73	6	-0.002295560	-0.001180016	0.001731029
74	1	0.000689024	0.000320427	-0.000356052
75	1	0.000639649	0.000420942	-0.000652909
76	6	0.002369373	0.001211830	-0.001637844
77	1	-0.000820077	-0.000259481	0.000464311
78	1	-0.000564553	-0.000447974	0.000473818
79	6	-0.002332565	-0.001203098	0.001712564
80	1	0.000713266	0.000311069	-0.000371128
81	1	0.000621439	0.000419090	-0.000620063
82	6	0.002373526	0.001193010	-0.001664757

Number	Number	X	Y	Z
83	1	-0.000798897	-0.000260479	0.000443363
84	1	-0.000577386	-0.000447691	0.000500860
85	6	-0.002342638	-0.001206665	0.001683441
86	1	0.000741425	0.000307303	-0.000385274
87	1	0.000606127	0.000418058	-0.000593106
88	6	0.002341779	0.001148476	-0.001671897
89	1	-0.000786441	-0.000266608	0.000424292
90	1	-0.000591825	-0.000444506	0.000532901
91	6	-0.002275733	-0.001282386	0.001553881
92	1	0.000779287	0.000307158	-0.000393284
93	1	0.000595563	0.000430559	-0.000586415
94	6	0.002277067	0.001077287	-0.001654568
95	1	-0.000800383	-0.000312711	0.000401357
96	1	-0.000618964	-0.000472709	0.000564771
97	6	-0.001959876	-0.001278704	0.001223677
98	1	0.000813470	0.000420490	-0.000457829
99	1	0.000700473	0.000519287	-0.000542067
100	6	0.000230897	-0.000464047	-0.000433964
101	1	0.000210194	-0.000451165	-0.000439578
102	1	0.000082475	-0.000124471	0.000340046
103	1	-0.000387347	0.000063241	-0.000119322
104	6	0.006812323	-0.006715332	-0.002797608
105	1	-0.002582045	0.002074550	0.001493858
106	6	-0.015315979	0.000246355	0.010719304
107	1	0.006917940	-0.001438165	-0.003837626
108	1	-0.001183307	-0.006148940	-0.008495689

สารประกอบ 1-โมโนกลีเซอไรด์

Symbolic Z-matrix:

Charge = 0 Multiplicity = 1

Center Number	Atomic Number	Forces (Hartrees/Bohr)		
		X	Y	Z

1	6	0.011549856	-0.008246068	-0.015927434
2	1	-0.001931433	-0.002839849	0.015440244
3	6	-0.005098766	0.020125245	-0.012901960
4	1	0.009406200	-0.012568959	0.008618681
5	8	-0.044606236	-0.026873382	-0.001053607
6	6	-0.020149816	0.110026542	-0.164364867
7	6	-0.003684874	0.008903229	0.049682481
8	1	0.007595447	0.004980921	-0.015320426
9	1	0.009676861	-0.015259943	0.002610077
10	8	-0.031970978	0.009994161	0.080321113
11	8	0.057295606	-0.091242862	0.077490304
12	6	0.015182616	-0.027327806	-0.012943578
13	1	-0.009182355	0.013364177	-0.005645149
14	1	-0.003087706	0.007271697	0.016267165
15	6	-0.019748275	0.034036880	0.011029928
16	1	0.002658823	-0.009292834	-0.017546833
17	1	0.011072734	-0.013271991	0.009374448
18	6	0.023001697	-0.033797295	-0.011843015
19	1	-0.010914717	0.012786776	-0.009636595
20	1	-0.003059342	0.009039374	0.017055433

Number	Number	X	Y	Z
21	6	-0.022420011	0.035000615	0.011443214
22	1	0.003171061	-0.009029251	-0.017099878
23	1	0.010976809	-0.012877755	0.009909447
24	6	0.022991295	-0.034946827	-0.011460331
25	1	-0.010974509	0.012786735	-0.009887304
26	1	-0.003230941	0.009022058	0.017051703
27	6	-0.022896957	0.035194662	0.011461906
28	1	0.010989762	-0.012826015	0.009950009
29	1	0.003230972	-0.009031868	-0.017087554
30	6	0.023003759	-0.035168709	-0.011464241
31	1	-0.003248275	0.009024490	0.017064603
32	1	-0.010976625	0.012802317	-0.009928184
33	6	-0.022996286	0.035210252	0.011472932
34	1	0.010987233	-0.012818542	0.009951471
35	1	0.003248967	-0.009025874	-0.017084928
36	6	0.022966202	-0.035207051	-0.011457769
37	1	-0.003253307	0.009022127	0.017069111
38	1	-0.010974514	0.012809372	-0.009936376
39	6	-0.023018408	0.035088494	0.011455481
40	1	0.010990965	-0.012811455	0.009943617
41	1	0.003268683	-0.009017849	-0.017079576
42	6	0.022613405	-0.035102342	-0.011336364
43	1	-0.003250850	0.009019160	0.017048911
44	1	-0.010954288	0.012805329	-0.009928187
45	6	-0.023643849	0.034168236	0.011499785
46	1	0.010935828	-0.012943272	0.010003896
47	1	0.003188849	-0.009133247	-0.017133927
48	6	0.015657175	-0.033158666	-0.009075263

Number	Number	X	Y	Z
49	1	-0.002963998	0.009571018	0.016627262
50	1	-0.010457370	0.013261875	-0.009601279
51	6	0.000769696	0.023815330	0.003116857
52	1	0.007604673	-0.013087606	0.010425686
53	1	-0.017924411	-0.005419657	0.004344746
54	1	0.000145386	-0.009406478	-0.015798073
55	1	-0.010951534	0.008909374	-0.006163030
56	6	-0.000626783	-0.000659876	0.012880051
57	1	0.000790522	0.020669680	-0.002442612
58	1	0.021106392	-0.003941867	-0.005978204
59	8	-0.004728444	-0.005108466	0.001199969
60	1	-0.000062645	-0.003311046	-0.017739776
61	1	0.016911029	-0.003955415	-0.006944211

สารประกอบ 2-โมโนกลีเซอไรด์

Symbolic Z-matrix:

Charge = 0 Multiplicity = 1

Center	Atomic	Atomic	Coordinates (Angstroms)		
Number	Number	Type	X	Y	Z
1	6	0	-9.328830	-1.316255	-0.002995
2	1	0	-8.885115	-2.167960	-0.522004
3	6	0	-8.406257	-0.102327	-0.141153
4	1	0	-8.375269	0.227355	-1.182764
5	6	0	-5.955962	0.111515	-0.245617
6	6	0	-4.673631	-0.574651	0.154915

Number	Number	Type	X	Y	Z
7	1	0	-4.655360	-1.556290	-0.341122
8	1	0	-4.722782	-0.790005	1.230229
9	8	0	-7.055501	-0.561831	0.257571
10	8	0	-6.057496	1.131952	-0.933853
11	6	0	-3.416245	0.232125	-0.196722
12	1	0	-3.445823	1.198170	0.325090
13	1	0	-3.426757	0.467616	-1.268450
14	6	0	-2.120171	-0.514649	0.163926
15	1	0	-2.094664	-1.479060	-0.366604
16	1	0	-2.120595	-0.755297	1.238374
17	6	0	-0.848840	0.283962	-0.175871
18	1	0	-0.869517	1.244765	0.360695
19	1	0	-0.851969	0.530809	-1.248458
20	6	0	0.451514	-0.463919	0.169766
21	1	0	0.472051	-1.423424	-0.369577
22	1	0	0.452773	-0.714103	1.241975
23	6	0	1.724520	0.333892	-0.166262
24	1	0	1.707062	1.291267	0.376909
25	1	0	1.721063	0.588346	-1.237347
26	6	0	3.024454	-0.418267	0.172070
27	1	0	3.041792	-1.374775	-0.372736
28	1	0	3.027126	-0.674748	1.242792
29	6	0	4.298719	0.378511	-0.161676
30	1	0	4.283748	1.333399	0.386016
31	1	0	4.294481	0.638120	-1.231587
32	6	0	5.597823	-0.377407	0.171457

Number	Number	Type	X	Y	Z
33	1	0	5.612498	-1.331751	-0.377234
34	1	0	5.601594	-0.638290	1.241112
35	6	0	6.873169	0.418207	-0.160942
36	1	0	6.860486	1.371230	0.390078
37	1	0	6.868169	0.681582	-1.229954
38	6	0	8.171380	-0.341039	0.168074
39	1	0	8.183619	-1.293740	-0.383520
40	1	0	8.176113	-0.605191	1.236914
41	6	0	9.447751	0.453266	-0.163615
42	1	0	9.437176	1.404865	0.389975
43	1	0	9.441898	0.719550	-1.231939
44	6	0	10.745218	-0.308566	0.161751
45	1	0	10.756579	-1.260068	-0.392148
46	1	0	10.752092	-0.575490	1.230004
47	6	0	12.022816	0.484502	-0.169539
48	1	0	12.012411	1.434103	0.385766
49	1	0	12.014316	0.753099	-1.236345
50	6	0	13.312647	-0.286009	0.155173
51	1	0	13.363767	-1.224574	-0.411083
52	1	0	14.204078	0.302470	-0.091404
53	1	0	13.362806	-0.538758	1.221885
54	8	0	-10.606020	-1.065770	-0.631671
55	1	0	-9.437476	-1.580587	1.059809
56	6	0	-8.784078	1.064902	0.772766
57	1	0	-8.619665	0.770640	1.817842

Number	Number	Type	X	Y	Z
58	1	0	-8.167569	1.938257	0.536045
59	8	0	-10.200777	1.345041	0.537487
60	1	0	-10.485554	2.158870	0.992286
61	1	0	-10.947200	-0.212282	-0.278847

ประวัติการศึกษา และการทำงาน

ชื่อ –นามสกุล	นางสาวพจนีย์ ครองสินสุข
วัน เดือน ปี ที่เกิด	วันที่ 26 พฤศจิกายน 2528
สถานที่เกิด	จังหวัดกรุงเทพมหานคร
ประวัติการศึกษา	ระดับอุดมศึกษา วท.บ. (วิทยาศาสตร์) ภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ (พ.ศ. 2550)
ทุนการศึกษาที่ได้รับ	ทุนจากโครงการพัฒนาบัณฑิตและวิจัยด้านวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ทุนอุดหนุนการค้นคว้าและวิจัยประเภทวิทยานิพนธ์ ปีการศึกษา 2551 บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์