

ABSTRAK

Mekanisme interaksi yang dicadangkan oleh COSMO-RS adalah melalui pengikatan hidrogen, yang menunjukkan keputusan tidak konsisten dengan data-data eksperimen. Penggunaan spektroskopi Raman dalam kajian ini memberi jawapan yang sama menjurus kepada ketumpatan π -elektron boleh dijadikan sebagai penentu dasar kepada proses penyaringan cecair terion yang berpotensi untuk penyingkiran sulfur. Pemilihan dengan menggunakan kaedah penyaringan baru menggunakan pengiraan nilai indeks kearomatikan (AI) untuk kation dan penyamanilaian dua ikatan (DBE) untuk anion memberikan keputusan yang baik di antara data-data pengiraan dan eksperimen. Kaedah penyaringan menggunakan AI dan DBE kemudian dipraktikkan untuk pemilihan kombinasi kation dan anion yang sesuai bagi kajian penyingkiran sulfur melalui proses pengekstrakan.

Sebanyak 407 cecair terion yang berpotensi dipilih daripada pusat data COSMO-RS, yang mana sebanyak 25 cecair terion dikenalpasti melalui proses penyaringan, disintesis untuk kajian seterusnya. Daripada 25 cecair terion itu, sebahagiannya boleh didapati secara komersial, manakala sebahagian lagi yang disintesis dan dicirikan dengan ^1H NMR, ^{13}C NMR, analisa elemen dan kandungan halida termasuk juga kandungan air, ketumpatan dan indeks refraktif. Pengekstrakan satu fasa pada suhu bilik untuk menyingkirkan BT dari model minyak ($n\text{-C}_{12}$) telah dikaji bagi menentukan kelajuan proses pengacauan dan masa pengekstrakan yang optimum. Kesan oleh tiga pembolehubah penting dalam proses pengekstrakan iaitu nisbah jisim, kepekatan BT dan suhu telah dikaji dengan menggunakan Kaedah Respons Permukaan (RSM). Menerusi pendekatan Kajian Penengah Komposit (CCD), model

matematik yang dijana telah menunjukkan keputusan yang setara dengan eksperimen ($R^2 > 0.86$) dan berpandukan model ini, pengekstrakan yang optimum dapat dicapai dengan nisbah jisim 0.92 di antara model minyak dengan cecair terion pada kepekatan BT dan suhu masing-masing adalah 2000 ppm dan 30°C. Aplikasi gambarajah tertiga bagi sistem hidrokarbon-cecair terion-sulfur telah dibangunkan untuk menganggar nilai kebolehpilihan dan kebolehkandungan [bmim][TCM] (agen pengekstrak) dan juga mengkaji keterlarutan tiga jenis hidrokarbon iaitu $n\text{-C}_{12}$, $n\text{-C}_6$ and $p\text{-xylena}$ dalam [bmim][TCM], di mana ketiga-tiga hidrokarbon itu adalah pelarut kepada BT (bahan larut).

Proses penyaringan lain berdasarkan ciri-ciri fizikal cecair terion seperti ketumpatan (ρ), indeks teraktif (RI) dan juga berat molekul (M_w) terhadap prestasi penyingkiran sulfur dicadangkan menggunakan aplikasi pemetaan data. Pemetaan data antara ketumpatan dengan berat molekul dapat mengesan empat kumpulan berbeza iaitu berasaskan fluorik, cyanik, fosfat dan sulfat yang menunjukkan kolerasi linear terhadap prestasi penyingkiran sulfur.

Lima model campuran bahan bakar iaitu benzena/BT, $p\text{-xylena}$ /BT, benzene/DBT, $p\text{-xylena}$ /DBT dan BT/DBT telah dikaji untuk lebih memahami mengenai penyingkiran sulfur melalui proses pengekstrakan sebelum diaplikasi kepada bahan bakar diesel. Lima cecair terion yang menunjukkan prestasi yang baik dalam menyingkirkan BT dari $n\text{-C}_{12}$ telah dipilih di antaranya [bmim][OSO₄], [bmim][DCA], [bmim][SCL], [bmim][BZT] dan [bmim][TCM]. Di antara kelima-lima cecair terion yang dipilih itu, [bmim][TCM] memberi nisbah kebolehpilihan yang tertinggi terhadap kompond sulfur (BT dan DBT) dengan kehadiran hidrokarbon aromatik (benzena dan $p\text{-xylena}$), dan menjadi petunjuk bahawa ia berpotensi sebagai agen pengekstrak bagi proses penyingkiran sulfur. Dalam pada itu, cuma [bmim][OSO₄], [bmim][DCA] dan [bmim][TCM] dipilih untuk dikaji dalam penyingkiran sulfur dari bahan bakar diesel. Analisa menggunakan GC-MS menunjukkan, kompond yang paling diekstrak adalah DBT dan BT diikuti oleh benzena, tolena, $p\text{-xylena}$, $n\text{-C}_6$ dan $n\text{-C}_{12}$. Berdasarkan analisa menggunakan penganalisa jumlah sulfur (TSA), sebanyak lima kitaran pengekstrakan diperlukan

bagi [bmim][TCM] untuk mencapai jumlah kepekatan sulfur di bawah 50 ppm dalam bahan bakar diesel.

Kebolehan untuk cecair terion dikitar semula dikaji secara fizikal (dengan menggunakan air dan *n*-C₇) serta menggunakan kaedah elektrokimia. Kedua-dua kaedah ini menunjukkan keputusan yang positif di mana cecair terion ini boleh dikitar semula.

In compliance with the terms of the Copyright Act 1987 and the IP Policy of the university, the copyright of this thesis has been reassigned by the author to the legal entity of the university,

Institute of Technology PETRONAS Sdn Bhd.

Due acknowledgement shall always be made of the use of any material contained in, or derived from, this thesis.

© Syamsul Bahari Abdullah, 2013

Institute of Technology PETRONAS Sdn Bhd

All rights reserved.