

公告本

申請日期	89 年 8 月 1 日
案 號	89116283
類 別	C10L1/08

A4
C4

(以上各欄由本局填註)

574364

發明專利說明書

一、發明 名稱	中 文	利用 ^{13}C -NMR 光譜以產製最佳 Fischer-Tropsch 柴油機燃料及摻合貯存料之方法
	英 文	Use of ^{13}C NMR spectroscopy to produce optimum fischer-tropsch diesel fuels and blend stocks
二、發明 創作人	姓 名	(1) 布魯斯·庫克 Cook, Bruce Randall (2) 保羅·伯洛威茲 Berlowitz, Paul Joseph (3) 伯納德·席柏那蓋爾 Silbernagel, Bernard George
	國 籍	(1) 美國 (2) 美國 (3) 美國
	住、居所	(1) 美國新澤西州匹茲市凱普隆灣路二號 2 Capoolong Creek Road, Pittstown, NJ 08867, USA (2) 美國紐澤西州葛蘭葛德能尼可泰瑞斯四號 4 Nicole Terrace, Glen Gardner, NJ 08826 U. S. A. (3) 美國新澤西州阿南戴爾達摩斯路七號 7 Dartmouth Road, Annandale, NJ 08801, U. S. A.
	代 表 人 姓 名	(1) 艾克頌工程研究公司 Exxon Research and Engineering Company
三、申請人	(名稱)	
	國 籍	(1) 美國
	住、居所 (事務所)	(1) 美國新澤西州亞南戴爾東二十二路一五四五號 1545 Route 22 East, Annandale, NJ 08801, U. S. A.
	代 表 人 姓 名	(1) 潔西嘉·奈其曼 Nacheman, Jessica R.

裝

訂

線

申請日期	89 年 10 月 3 日
案 號	89116283
類 別	

A4
C4

(以上各欄由本局填註)

發 明 專 利 說 明 書 新 型		
一、發明 名稱	中 文	
	英 文	
二、發明 創作人	姓 名	(4) 戴伯拉·席森 Sysyn, Debra A.
	國 籍	(4) 美國 (4) 美國新澤西州舊橋潔米廣九號 9 Jamie Court, Old Bridge, NJ 08857, U. S. A.
三、申請人	住、居所	
	姓 名 (名稱)	
	國 籍	
	住、居所 (事務所)	
	代 表 人 姓 名	

裝

訂

線

經濟部智慧財產局員工消費合作社印製

(由本局填寫)

承辦人代碼：
大 類：
I P C 分類：

A6
B6

本案已向：

國 (地區) 申請專利，申請日期： 案號： ， ☐有 ☐無主張優先權

美國 1999 年 8 月 13 日 09/373,697 ☒有主張優先權

有關微生物已寄存於： ，寄存日期： ，寄存號碼：

(請先閱讀背面
注意事項再填寫本頁各欄)

裝

訂

線

經濟部智慧財產局員工消費合作社印製

五、發明說明 (1)

發明之背景

本發明係一種用於製造比汽油更重之蒸餾燃料的方法。尤其，其係一種利用氫碳化合物合成法最佳化蒸餾液之製造的方法。在此技藝中單獨使用 Fischer-Tropsch (氫碳化合物合成) 液或當作蒸餾燃料其中之一成份係眾所皆知的。Fischer-Tropsch 合成之產物主要係標準的石蠟烴。商業上希望在最大可能 Schulz-Flory α 位置處進行 Fischer-Tropsch 催化作用，以便降低不想要的輕質石蠟烴。透過高活性鈷觸媒進行高 α 作用，得到一種高沸點的、烷屬烴的蠟質產物其係不適於直接蒸餾液摻合的。高品質的柴油機摻合貯存料通常係由高 Schulz-Flory 產物利用 700°F 石蠟之臨氫異構化及或溫和的加氫裂化製造而成。S i e , S . T . [催化作用文學 1990 年，第 7 卷，253 - 270 頁]，進行了整個氫碳化合物合成產物之加氫轉化。這個加氫轉化得到 100 % 的石蠟烴產物，雖然分支程度可能有變。Fischer-Tropsch 衍化柴油機燃料最大的好處之一在於彼固有的高十六烷值。極大化燃料十六烷最大的鼓舞在於用作柴油機摻合貯存料增加其值，無論如何，製成品柴油也必須符合適當的冷流標準，例如柴油濁點或常溫濾油器堵塞點 (C F P P)。高十六烷值與高分子量及低分支程度有關，而冷流經常必需較低的分子量及高分支程度。這兩種性質之最佳化，因為內燃機十六烷及常溫濾油器堵塞點測定之時間消耗特性故，無論在摻合或在實際設備操作都不易處理。本發明利用 $^{13}\text{C} - \text{NMR}$ 迅速測定

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

裝

訂

線

五、發明說明（ 2 ）

十六烷及冷流性質。這些測定接著用以最佳化產物摻合及單元操作。關於分子結構更詳細的資料也可由

$^{13}\text{C} - \text{NMR}$ 分析得到並且當作重要的製程診斷。

發明總結

本發明係一種用於製造比汽油更重之蒸餾燃料的方法。該方法使用 Fischer-Tropsch（氫碳化合物合成）產物由彼來生產蒸餾燃料。該方法包括臨氫異構化選擇及轉化其通常由觸媒之選擇來控制，以及製程條件例如溫度、壓力、空白流速或氣體處理速率之變化。這些參數之中任何一者都可能造成柴油機性質之寬廣範圍，例如十六烷及冷流性質。因此，以其最廣泛的觀點，本發明包含獲得蒸餾液產物之 $^{13}\text{C} - \text{NMR}$ 及測定在製造一種比汽油重的蒸餾燃料的過程中柴油機十六烷值及冷流性質之代表數值，其中蒸餾燃料係由 Fischer-Tropsch 產物經過臨氫異構化、摻合及分餾而製成。在一個適當的體系中，由 $^{13}\text{C} - \text{NMR}$ 來測定十六烷值及冷流性質以便最佳化蒸餾燃料生產過程。冷流性質包括常溫濾油器堵塞點、濁點、傾注點及低溫流動試驗。所有石蠟烴柴油機燃料之十六烷值及冷流性質基本上都呈反向的關係。高十六烷值對應到高分子量及低分支程度，而冷流經常必需較低的分子量及／或較高的分支程度。沿分子骨幹的分支位置也可能顯著地影響內燃機十六烷值及常溫濾油器堵塞點。這兩種性質之最佳化，由於內燃機十六烷及常溫濾油器堵塞點測定耗時的本質，無論

（請先閱讀背面之注意事項再填寫此頁）

訂

線

五、發明說明（ 3 ）

摻合或實際設備操作都不易處理。本發明利用

$^{13}\text{C} - \text{NMR}$ 迅速測定十六烷值及冷流性質並且利用該測定最佳化產物摻合及單元操作。

本發明有一個適當的體系包括分離及選擇性處理 Fischer-Tropsch 製程產物之步驟。起始分離係較重的部份（a）及較輕的部份（b）。較輕的部份（b）又利用具有可調節溫度之溫度分離器分離成兩個部份以上：（i）一個以上的部份包含輕質的標準石蠟烴，及（ii）一個以上的部份包含重質的標準石蠟烴其中輕質與重質石蠟烴部份之間的分離由溫度決定。然後一個以上較重的部份（a）及一個以上（b）（ii）部份係臨氫異構化並且接著摻合一個以上（b）（i）部份製成摻合液流。然後此摻合液流係蒸餾而且得到該蒸餾產物之 $^{13}\text{C} - \text{NMR}$ 光譜，測定內燃機十六烷值及冷流性質之代表數值。冷流性質可能係常溫濾油器堵塞點、燭點或傾注點。分離器之溫度對應 $^{13}\text{C} - \text{NMR}$ 數據調整以最佳化十六烷值及冷流性質。

圖形之簡單說明

圖 1 展示本發明方法具體實例之分解圖。

圖 2 展示用於本發明之石蠟烴 $^{13}\text{C} - \text{NMR}$ 結構勘定。

圖 3 展示利用實施例 2 之公式得到實驗與預測內燃機十六烷值之間的關係。

圖 4 展示利用實施例 3 之公式得到實驗與預測常溫濾

五、發明說明 (4)

油器堵塞點之間的關係。

圖 5 展示利用實施例 4 之公式得到實驗與預測燭點之間的關係。

圖 6 展示利用實施例 5 之公式得到實驗與預測傾注點之間的關係。

主要元件對照表

- | | |
|-----|------------------|
| 1 | 一氧化碳及氫合成氣 |
| 2 | 碳氫化合物合成單元 |
| 3 | 700 °F + 產生反應器的蠟 |
| 4 | 臨氫異構化單元 |
| 5 | 700 °F 部份 |
| 7 | 較輕的部份 |
| 8 | 較重的部份 |
| 9 | 最後的蒸餾 |
| 1 1 | 柴油機燃料 |
| 1 2 | 萘 |
| 1 3 | 一個碳至四個碳的氣體 |
| 1 4 | 分離器 |

適當體系之說明

本發明包括利用 ^{13}C - NMR 迅速測定十六烷值及冷流性質並且利用這些測定結果最佳化產物摻合及單元操作。有一個這種單元最佳化之不受限實施例如以下。基礎改

五、發明說明 (5)

良的流動方式展示於圖 1 中。在此方式中，一氧化碳及氫合成氣 (1) 係送至碳氫化合物合成 (H C S) 單元 (2)。該碳氫化合物合成反應器組態對本發明並不重要而且可以係此技藝中已知之許多碳氫化合物反應器組態之中的任一種。這些包括但不限於：漿料、固定及流動床組態。觸媒配方對本發明也不重要並且可能包括此技藝中已知之碳氫化合物合成觸媒之中的任一種，雖然鈷為主的觸媒對於本發明而言可能係特佳者，因為其傾向產生較重的蠟質產物。該 7 0 0 °F⁺ 產生反應器蠟 (3) 係送至臨氫異構化 - (H / I) 單元 (4)，其中該 7 0 0 °F⁺ 蠟進行臨氫異構化及溫和的加氫裂化 - (H / C)，所以製成 7 0 0 °F⁺ 蒸餾產物。再次說明臨氫異構化單元用的反應器組態對本發明而言並不重要，而且可以選自那些在此技藝中已知用於重質石蠟烴臨氫異構化及 / 或溫和加氫裂化者。典型的組態包括但不限於固定及漿料床操作。藉著本發明異構化之條件，其包括溫度及壓力得以利用想要的 ¹³C - N M R 共振為指標而加以控制。

碳氫化合物合成在上頭的 7 0 0 °F⁺ 部份 (5) 係迅速送至分離器 (1 4) 以致形成較輕的 (7) 及較重的 (8) 部份。藉由本發明利用想要的 ¹³C - N M R 共振為指標，閃點可以調整使得只有極少量的重質石蠟烴係臨氫異構化以符合冷流性質 (常溫濾油器堵塞點、濁點等等)。接著較重的部份 (液流 8) 係送至臨氫異構化 (4) 其中重質石蠟烴係臨氫異構化成彼之相關異構石蠟烴。較輕的部

五、發明說明 (6)

份通常係直接送至最後的蒸餾 (9) 其中彼與臨氫異構化之產物摻合而且製成適當切入點之最終柴油機燃料。該較輕的部份也可能加氫處理或臨氫異構化，如果適合的話。由最終蒸餾 (9) 得到的產物包括柴油機燃料 (1 1) 、萘 (1 2) 及一個碳至四個碳的氣體 (1 3) 。

^{13}C - N M R 化學偏移

碳 - ^{13}C N M R 具有一個廣大範圍的化學偏移 (0 - 2 5 0 p p m) ，關於不同的碳之化學偏移特性提供了一個良好的時機。對於一個簡單的碳氫化合物系統而言，脂肪族烴的碳之範圍係 $\sim 0 - 5 0$ p p m 。外加法則可以用於測定既定分子結構之預估碳化學偏移。眾多化學偏移與分子結構關係之表格早已有人建立並且有用的 ^{13}C - N M R 參考書係容易取得的，見，例如，E. Breitmaier, W. Voelter，"碳 - ^{13}C 核磁共振光譜學"，V C H，紐約 (1 9 9 0) 。

N M R 軟體 (例如進階化學研發公司生產的) 係有用於模擬不同分子之 N M R 光譜及相關結構之化學偏移趨勢。

由此化學偏移結構分析中引用了幾個 " 守則 "：

1 . 甲基位於 ~ 5 及 2 2 p p m 之間而次甲基則位於 $\sim 2 2$ 及 5 0 p p m 之間。在該區域有小部份重疊其中甲基及次甲基碳可能出現之處。

2 . 甲川及四價碳落於 $\sim 2 0$ 及 4 0 p p m 之間與次

五、發明說明 (7)

甲基碳有一個明顯的重疊之處。

3 · 在標準石蠟烴長鏈末端的碳之記號非常獨特：

1 4 · 2 --- 2 2 · 9 --- 3 2 · 2 --- 2 9 · 6 --- 2 9 · 9 ---
。從標準石蠟烴末端分出來的五個或更多基點之碳原子或者四個或更多從分支分出來的碳之化學偏移接近 2 9 · 9
p p m 。

4 · 石蠟烴之分支將引起三級碳基點及那些從分支分出來具有 1 ~ 3 個原子之碳以新的偏移。與短鏈分支締結之甲基具有特徵偏移。側甲基具有 1 9 · 1 - 1 9 · 7
p p m 左右之甲基偏移，在側乙基上之末端甲基則在
1 0 · 8 p p m 。

5 · 關於側甲基之三級基點具有一個分布於 2 8 -
3 6 p p m 之間的寬廣化學偏移。關於側乙基之三級基點分布於 3 5 - 4 1 p p m 之間。側丙基及丁基之三級基點與側甲基的顯著重疊。

6 · 如果分支靠在一起將會引起多重分支分子的新吸收峰。在碳鄰近的甲基、相連的甲基，具有 1 5 - 1 9
p p m 之偏移。在甲基分支之兩個甲川碳中心之次甲基具有 4 4 - 4 9 p p m 之偏移。

當次甲基、三級及四級基點之間產生相當程度之化學偏移時，這些不同的基點可以由碳質子極化轉移 (D E P T) N M R 實驗分辨之。

在此使用之石蠟烴 ^{13}C - N M R 勘定結構之形式係依上面討論所獲得的並且總整理於圖 2 中。以五種可分辨的

(請先閱讀背面之注意事項再填本頁)

裝

訂

線

五、發明說明 (8)

^{13}C 共振觀察標準的石蠟烴以及未取代的石蠟烴異構物末端。與自由末端甲基末端基締結的碳，亦即，那些不含分支的末端，指的就是 α 其在 14.0 ppm 處有一個共振。在這個研究中自由末端甲基之實際數目藉著減去積分側鏈及末端丁基（見以下）之吸收峰強度計算而得。此形式將可避免重覆計算末端。從甲基末端算起自由末端次甲基的三個碳指的是 β 、 γ 及 δ ，並且共振各位於 22.8 、 32.0 及 29.5 ppm 。連接到分接點之碳原子也有其受到干擾的化學偏移而這些吸收各別指的是 α' 、 β' 及 γ' ，偏移為 19.8 、 37.4 及 27.4 ppm 。排除末端以外超過四個碳的碳或者排除分接點以外三個碳的碳以 ε 表示，並且具有位於或接近 29.9 ppm 之共振。

除了自由末端之 α 、 β 、 γ 、 δ 及 ε 以外，石蠟烴異構物之 $^{13}\text{C}-\text{NMR}$ 顯示出甲基、乙基及丙基中甲基碳之可分辨共振，以及丁基之 β 次甲基碳之可分辨共振。兩類的甲基、乙基、丙基及丁基都可以看得到。這些稱之為側基（P）及末端基（T）。側基係實體的取代基其中甲基（ 19.6 ppm ）、乙基（ 10.8 ppm ）、丙基（ 14.4 ppm ）及丁基（B）次甲基共振（ 23.2 ppm ）係接到連至兩個碳數多於該取代基之烷基之三級碳。末端基則不是實體的取代基但卻係更特定的共振其係由接近鏈末端之甲基取代基所產生。觀察末端對側甲基（ 22.5 對 19.6 ppm ）及乙基（ 11.3 對 10.8 ppm ）顯然不同，然而觀察末端對側丙基（

五、發明說明 (9)

1 4 · 3 對 1 4 · 4 p p m) 及 丁 基 B 次 甲 基 共 振 (2 3 · 1 對 2 3 · 2 p p m) 則 只 有 些 微 不 同 。 乙 基 或 更 大 的 取 代 基 使 末 端 丙 基 及 丁 基 共 振 對 於 相 對 應 的 側 基 偏 移 成 相 同 的 值 。 對 於 二 分 支 物 種 假 定 三 個 自 甲 基 分 支 移 除 的 碳 將 具 有 γ 共 振 並 且 多 於 四 個 移 除 者 將 具 有 ϵ 共 振 。

實驗實施例

實施例 1

在 Varian NMR 光譜儀其質子共振頻率為 5 0 0 M H z 中以 1 2 5 · 7 M H z 之頻率測得用於本研究 F - T 燃料之 ^{13}C - N M R 光譜。實驗分成含有及不含 Cr^{3+} 鬆弛劑進行並且獲得兩個樣品所有成份之光譜幾乎一致的強度。特定碳類型個別吸收峰之勘定以化學偏移為基礎進行，利用 D E P T N M R 順序辨別甲基及次甲基碳在某些例子中化學偏移勘定係模糊不清的。記錄在以下的化學偏移處吸收峰之積分強度。

五、發明說明 (10)

結構類型 化學偏移以 p p m 表示

α^*	1 4 . 0
β	2 2 . 8
χ	3 2 . 0
γ	2 9 . 5
ε	2 9 . 9
末端甲基	2 2 . 5
末端乙基	1 1 . 3
末端丙基	1 4 . 3
末端丁基	2 3 . 1
側甲基	1 9 . 6
側乙基	1 0 . 8
側丙基	1 4 . 4
側丁基	2 3 . 2
加總脂肪族碳	0 - 5 0

每一種類型的碳之莫耳百分比係藉著每種類型碳之積分面積除以加總脂肪族碳之總積分並且乘以 1 0 0 算得。
除了每種結構類型碳之莫耳 % 之外，以下因素係利用數理

(請先閱讀背面之注意事項再填本頁)

裝
訂
線

經濟部智慧財產局員工消費合作社印製

五、發明說明 (11)

方式測定。

α 碳實際的百分比係計算為： $\alpha = \alpha^* - \text{末端丁基} (2.3 \cdot 1 \text{ 滯留的}) - \text{側丁基} (2.3 \cdot 2 \text{ 滯留的})$

平均碳數 (C #) = (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 2

自由碳指數 (FCI) = (莫耳 % ϵ) * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 200

自由碳指數 2 (FCI 2) = (莫耳 % ϵ + 莫耳 % δ) * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 200

自由碳指數 3 (FCI 3) = (莫耳 % ϵ + 莫耳 % δ + 莫耳 % γ) * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 200

側鏈數目 (Ns) = (莫耳 % 側甲基 + 莫耳 % 側乙基 + 莫耳 % 側丙基 + 莫耳 % 側丁基) * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 200

標準化 α (N α) = 莫耳 % α^* * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 2

標準化 β (N β) = 莫耳 % β^* * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 2

標準化 γ (N γ) = 莫耳 % γ^* * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 2

標準化 δ (N δ) = 莫耳 % δ^* * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 2

標準化 ϵ (N ϵ) = 莫耳 % ϵ^* * (莫耳 % α + 末端甲基 +

五、發明說明 (12)

末端乙基 + 末端丙基) / 2

標準化末端甲基 (N 末端甲基) = 莫耳 % 末端甲基 * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 2

標準化末端乙基 (N 末端乙基) = 莫耳 % 末端乙基 * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 2

標準化末端丙基 (N 末端丙基) = 莫耳 % 末端丙基 * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 2

標準化末端丁基 (N 末端丁基) = 莫耳 % 末端丁基 * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 2

標準化側甲基 (N 側甲基) = 莫耳 % 側甲基 * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 2

標準化側乙基 (N 側乙基) = 莫耳 % 側乙基 * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 2

標準化側丙基 (N 側丙基) = 莫耳 % 側丙基 * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 2

標準化側丁基 (N 側丁基) = 莫耳 % 側丁基 * (莫耳 % α + 末端甲基 + 末端乙基 + 末端丙基) / 2

實施例 2

一系列 2 4 種 Fischer-Tropsch 燃料之內燃機十六烷值以實驗方式測定。以下的公式可以從 $^{13}\text{C} - \text{NMR}$ 光譜用於測定燃料之內燃機十六烷值。實驗對此公式預測十六烷值之圖形展示於以下圖 3 中。此預測之均方根剩餘誤差係 1.5 個十六烷值。這個值可與實驗的試驗再現性作比較

五、發明說明 (13)

。

$$\begin{aligned} \text{內燃機十六烷值} = & 42 \cdot 78 * N_{\alpha} - 42 \cdot 36 * N_{\gamma} \\ & - 8 \cdot 14 * N_{\delta} - (3 \cdot 83 \times 10^{-9}) * e^{C\#} + \\ & 36 \cdot 19 * \ln(FCI_3) - 4 \cdot 02 * (1 / FCI \\ &) - 14 \cdot 46 * \ln(N_s) \end{aligned}$$

實施例 3

一系列 47 個 Fischer-Tropsch 燃料之常溫濾油器堵塞點 (CFPP) 係以實驗方式測定。以下的公式可以從 $^{13}\text{C} - \text{NMR}$ 光譜用於測定燃料之內燃機十六烷值。實驗對此公式預測十六烷值之圖形展示於以下圖 4 中。此預測之均方根剩餘誤差係 3.8 度。這個值可與實驗的試驗再現性作比較。

$$\begin{aligned} \text{CFPP} = & -237 \cdot 19 - 134 \cdot 67 * N_{\text{末端丁基}} + 59 \cdot 26 * \ln(C\#) + (4 \cdot 04 \times 10^{-10}) \\ & * e^{C\#} + 40 \cdot 33 * \ln(FCI_2) - (1 \cdot 59 \times \\ & 10^{-4}) * e^{FCI_3} \end{aligned}$$

實施例 4

一系列 44 個 Fischer-Tropsch 燃料之燭點係以實驗方式測定。以下的公式可以從 $^{13}\text{C} - \text{NMR}$ 光譜用於測定燃料之內燃機十六烷值。實驗對此公式預測十六烷值之圖形展示於以下圖 5 中。此預測之均方根剩餘誤差係 3.8 度。這個值可與實驗的試驗再現性作比較。

(請先閱讀背面之注意事項再填本頁)

裝

訂

線

五、發明說明 (14)

$$\text{燭點} = -135 \cdot 39 + 72 \cdot 67 * \text{Ln}(\text{FCI}) \\ + 79 \cdot 78 / (\text{FCI})$$

實施例 5

一系列 34 個 Fischer-Tropsch 燃料之傾注點係以實驗方式測定。以下的公式可以從 $^{13}\text{C} - \text{NMR}$ 光譜用於測定燃料之內燃機十六烷值。實驗對此公式預測十六烷值之圖形展示於以下圖 6 中。此預測之均方根剩餘誤差係 6.1 度。這個值可與實驗的試驗再現性作比較。

$$\text{傾注點} = -16 \cdot 67 + 9 \cdot 38 * \text{N} \varepsilon - \\ 221 \cdot 25 / \text{FCI}^3$$

(請先閱讀背面之注意事項再填
本頁)

裝

訂

結

四、中文發明摘要 (發明之名稱：利用 ^{13}C - NMR 光譜以產製最佳)
Fischer-Tropsch 柴油機燃料及摻合貯
存料之方法

本發明係一種用於製造比汽油更重之蒸餾燃料的方法。
該方法係 Fischer-Tropsch (氫碳化合物合成) 法其包括
利用 ^{13}C - NMR 測量十八烷值及冷流性質以便最佳化該
方法。冷流性質包括常溫濾油器堵塞點、濁點及傾注點。

英文發明摘要 (發明之名稱：)

USE OF ^{13}C NMR SPECTROSCOPY TO PRODUCE OPTIMUM
FISCHER-TROPSCH DIESEL FUELS AND BLEND STOCKS

The present invention is a process for producing a distillate fuel heavier than gasoline. The process is a Fischer-Tropsch (hydrocarbon synthesis) process that includes using ^{13}C NMR to measure cetane number and a cold flow property in order to optimize the process. Cold flow properties include cold filter plugging point, cloud point and pour point.

(請先閱讀背面之注意事項再填寫各欄)

裝

訂

線

公告本
b圖

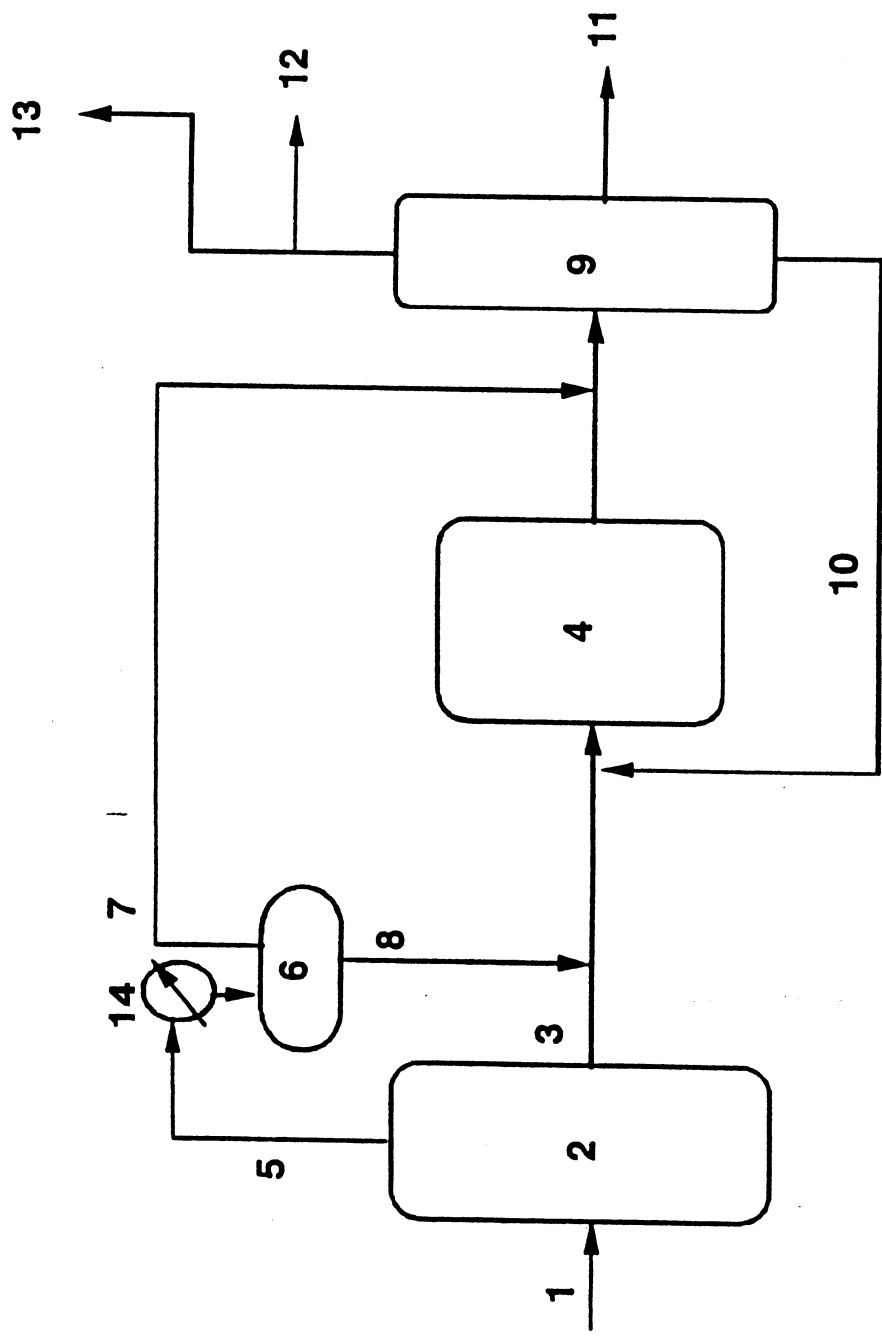


圖 1

不同石臘烴結構類型之 ¹³C NMR 勘定結果

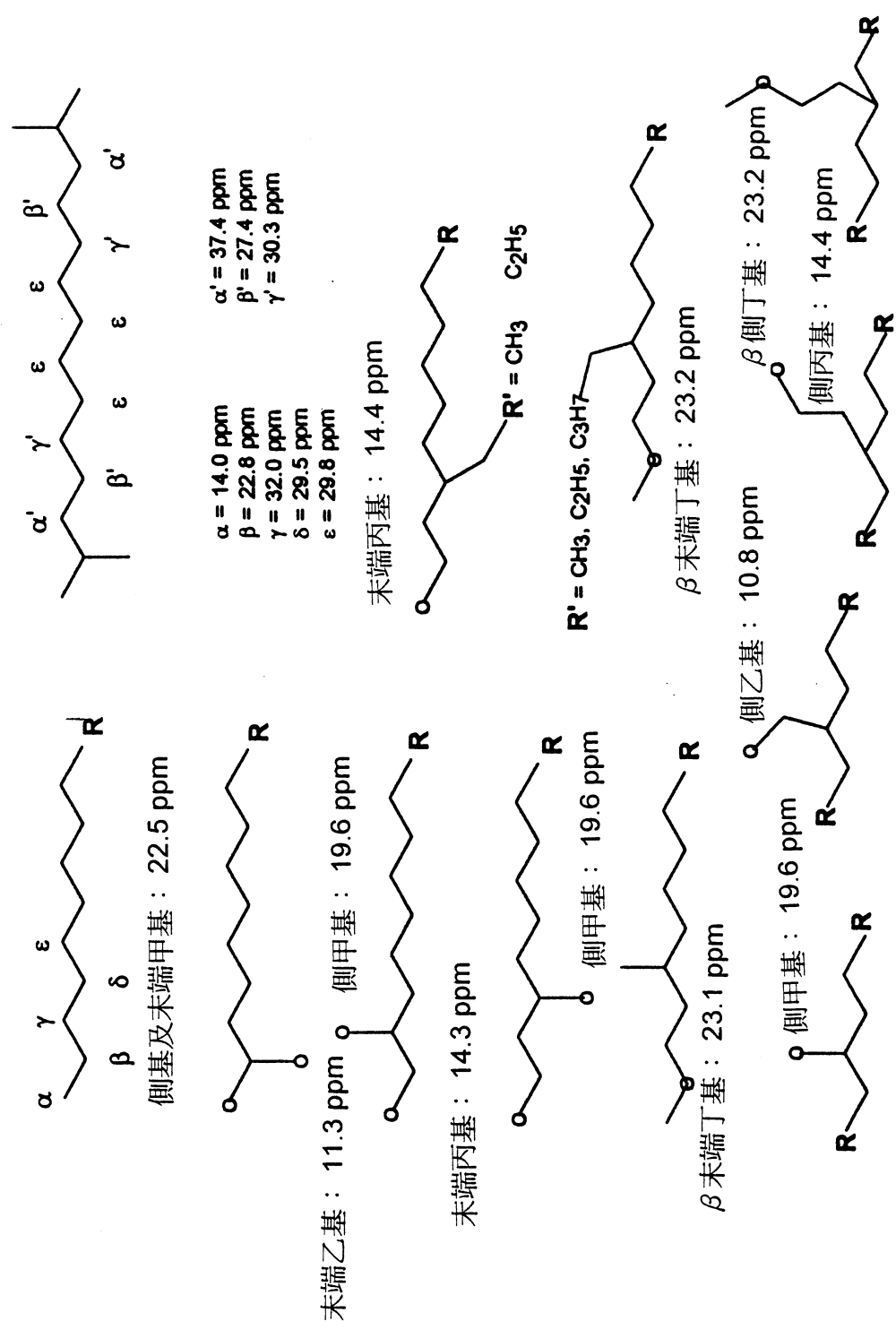


圖 2

從屬的 VS. 預測的
步驟：7

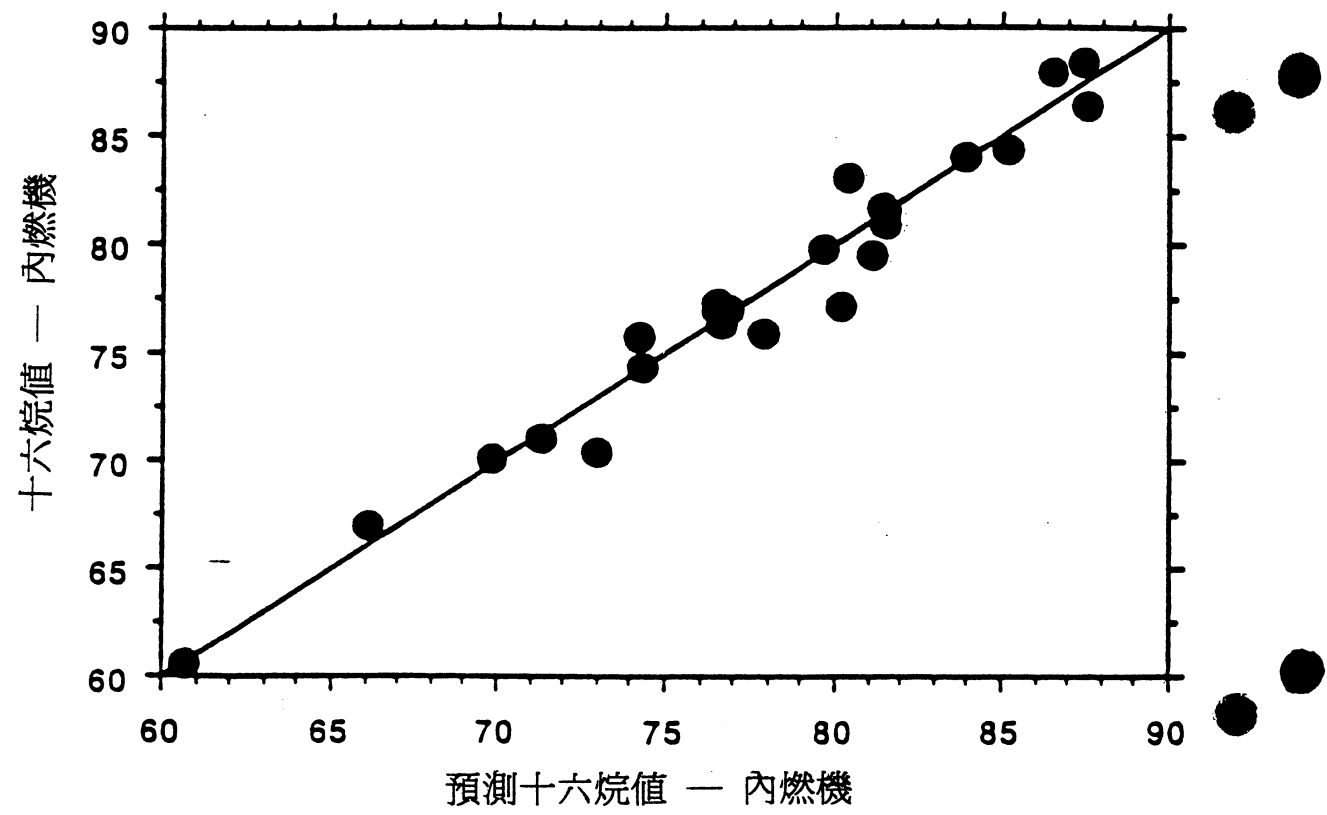


圖 3

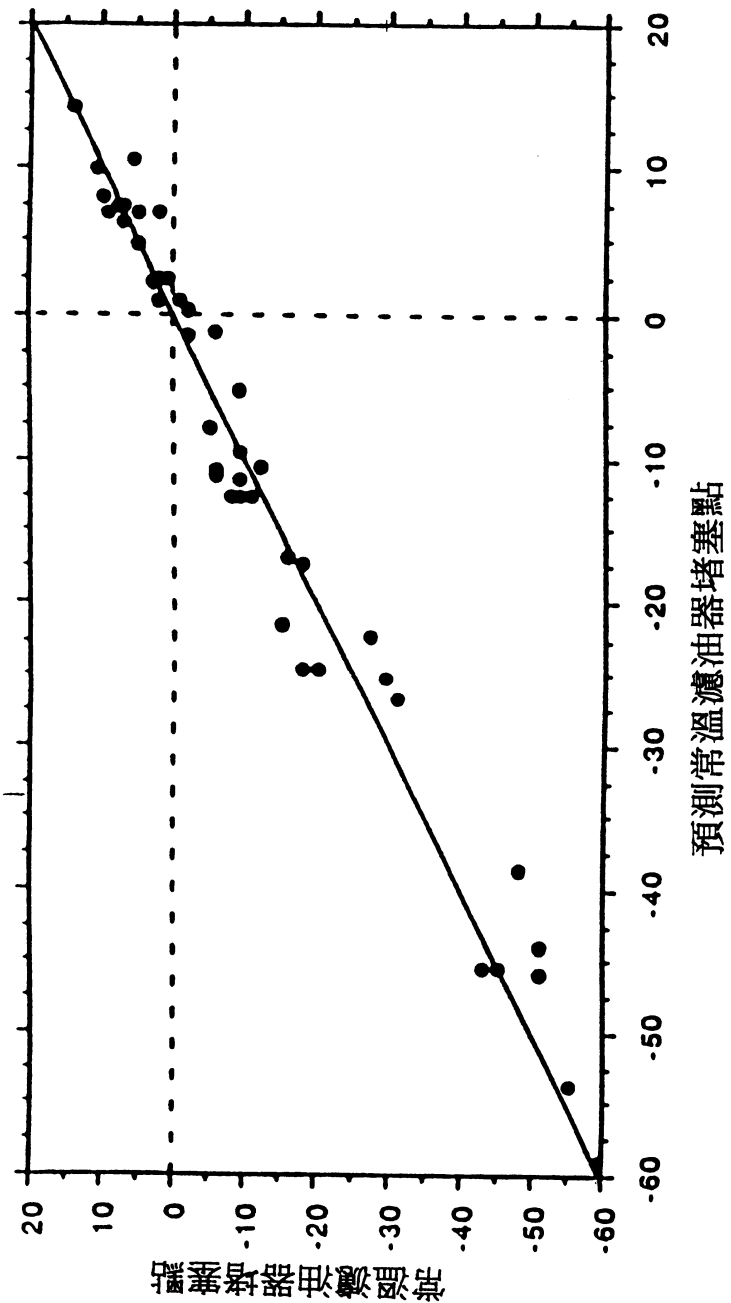


圖 4

從屬的 VS. 預測的

步驟：6

橫排除外：Nm rcloud.svd

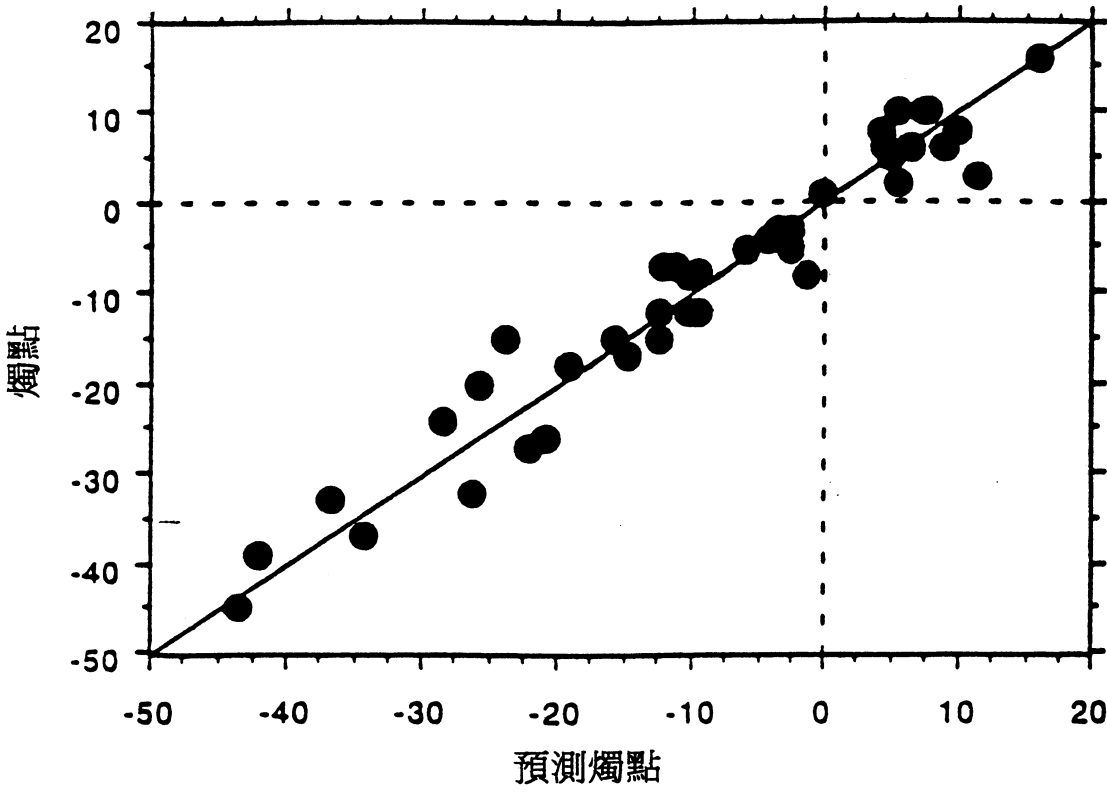


圖 5

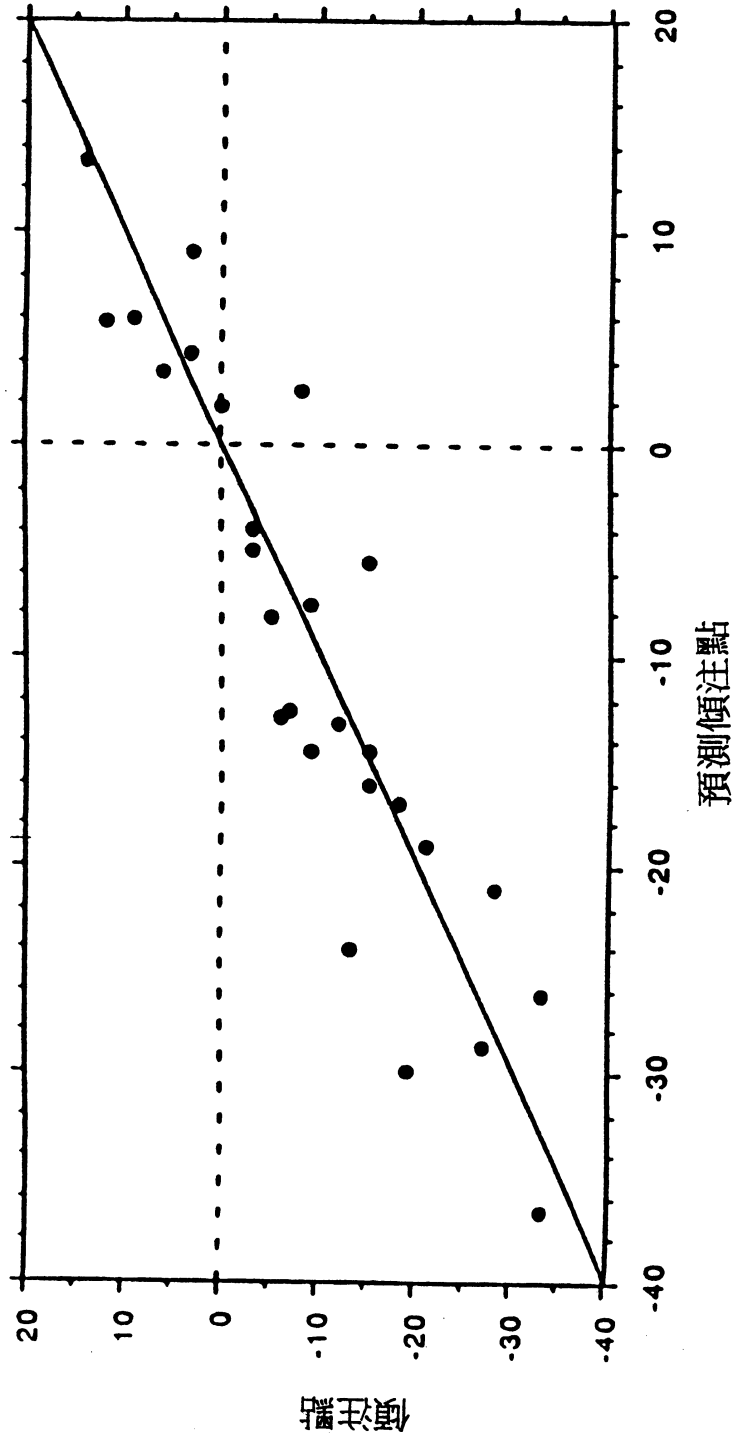


圖 6

六、申請專利範圍

附件 2A : 第 89116283 號專利申請案

中文申請專利範圍替換本

民國 92 年 10 月 2 日修正

1. 一種用於控制生產比汽油更重之蒸餾燃料之製程之方法，其包含：

(a) 將 Fischer-Tropsch 製程產物分成較重的部份及較輕的部份；

(b) 再將較輕的部份利用具有可調節溫度之溫度分離器分成兩個部份以上，(i) 一個以上的部份包含輕質的標準石蠟烴，及(ii) 一個以上的部份包含重質的標準石蠟烴其中輕質與重質石蠟烴部份之間的分離由溫度來判定；

(c) 在臨氫異構化條件下臨氫異構化大部份較重的部份(a)及大部份(b)(ii)部份並且回收臨氫異構化產物；

(d) 摻合大部份(b)(i)部份及大部份臨氫異構化產物製成摻合液流；

(e) 分餾該摻合液流並且回收蒸餾產物；

(f) 得到該蒸餾產物之 ^{13}C -NMR光譜；

(g) 判定內燃機十六烷值及冷流性質之代表數值；

以及

(h) 調整分離器之溫度以最佳化該內燃機十六烷值及該冷流性質。

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

裝

訂

線

六、申請專利範圍

2. 如申請專利範圍第1項之方法，其中該冷流性質包括常溫濾油器堵塞點、燭點及傾注點。

3. 如申請專利範圍第2項之方法，其中該冷流性質係常溫濾油器堵塞點。

4. 如申請專利範圍第2項之方法，其中該冷流性質係燭點。

5. 如申請專利範圍第2項之方法，其中該冷流性質係傾注點。

6. 如申請專利範圍第1項之方法，其中判定該十六烷值係藉由內燃機十六烷值 = $42.78 * N_{\alpha} -$

$$42.36 * N_{\gamma} - 8.14 * N_{\delta} - (3.83 \times 10^{-9}) * e^{C\#} + 36.19 * \ln(FCI_3) - 4.02 * (1 / FCI) - 14.46 * \ln(N_s)。$$

7. 如申請專利範圍第3項之方法，其中判定該常溫濾油器堵塞點係藉由 $CFPP = -237.19 -$

$$134.67 * N_{\text{末端丁基}} + 59.26 * \ln(C\#) + (4.04 \times 10^{-10}) * e^{C\#} + 40.33 * \ln(FCI_2) - (1.59 \times 10^{-4}) * e^{FCI_3}。$$

8. 如申請專利範圍第6項之方法，其中判定該常溫濾油器堵塞點係藉由 $CFPP = -237.19 -$

$$134.67 * N_{\text{末端丁基}} + 59.26 * \ln(C\#) + (4.04 \times 10^{-10}) * e^{C\#} + 40.33 * \ln(FCI_2) - (1.59 \times 10^{-4}) * e^{FCI_3}。$$

9. 如申請專利範圍第4項之方法，其中判定該燭點

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

裝

訂

線

六、申請專利範圍

係藉由燭點 = $-135.39 + 72.67 * L_n (FCI)$
 $+ 79.78 / (FCI)$ 。

10．如申請專利範圍第6項之方法，其中判定該燭點係藉由燭點 = $-135.39 + 72.67 * L_n (FCI)$
 $+ 79.78 / (FCI)$ 。

11．如申請專利範圍第5項之方法，其中判定該傾注點係藉由傾注點 = $-16.67 + 9.38 * N_{\varepsilon} -$
 $221.25 / FCI3$ 。

12．如申請專利範圍第6項之方法，其中判定該傾注點係藉由傾注點 = $-16.67 + 9.38 * N_{\varepsilon} -$
 $221.25 / FCI3$ 。

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

裝

訂

線