

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده فنی مهندسی

بخش مهندسی شیمی

پایان نامه تحصیلی برای دریافت درجه کارشناسی ارشد مهندسی شیمی

گرایش محیط زیست

شبیه سازی تولید جاذب های نانولوله ای در راکتور نشست بخار شیمیایی
با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی

مؤلف :

الهام سلیمان

استاد راهنما :

دکتر علی محبی

استاد مشاور :

دکتر حسن هاشمی پوررفسنجانی

بهمن ماه ۱۳۹۱



این پایان نامه به عنوان یکی از شرایط درجه کارشناسی ارشد به

بخش مهندسی شیمی

دانشکده فنی مهندسی

دانشگاه شهید باهنر کرمان

تسلیم شده است و هیچگونه مدرکی به عنوان فراغت از تحصیل دوره مزبور شناخته نمی شود.

دانشجو :

استاد راهنما :

استاد مشاور :

دور ۱ :

دور ۲ :

نماینده‌ی تحصیلات تکمیلی در جلسه دفاع:

معاونت پژوهشی و تحصیلات تکمیلی دانشکده :

حق چاپ محفوظ و مخصوص به دانشگاه شهید باهنر کرمان است

تقدیم به :

از ابتدای این سفر، در لحظه هایی که نمی دانستم کدامین دست بی ادعا دستم را می گیرد فانوس نگاهتان تنها چراغ تاریکی این کوچه های بی انتها بود و اکنون این بهانه ایست کوچک برای تقدیم به :

پدر و مادر عزیزم، آنان که فروغ نگاهشان، گرمی کلامشان و روشنی رویشان سرمایه جاودانی زندگی من است و هر چه دارم بعد از خدا از دعای خیر آن ها است.

همسرم که تا ابد می توان به محبتش تکیه کرد و طی مراحل مختلف انجام این تحقیق صبورانه مرا یاری کرد.

خواهرم فاطمه و برادرم احسان که شادترین قلب ها در موفقیتیم بودند.

تشکر و قدردانی :

در ابتدا لازم می دانم از اساتید بزرگوایم آقایان دکتر محبی و دکتر هاشمی پوررفسنجانی که در تمامی مراحل انجام این پایان نامه با دانش و صبر فراوان مرا یاری دادند و راهنمایی های دلسوزانه ی سرکار خانم دکتر شفیعی و آقای دکتر صادقی کمال تقدیر و تشکر را ابراز نمایم.

همچنین از اساتید محترم آقایان دکتر افصحی و دکتر سلطانی که زحمت خواندن و تصحیح این پایان نامه را تقبل نمودند کمال تشکر را دارم.

چکیده

در این تحقیق عملکرد یک راکتور نشست بخار شیمیایی جهت تولید نانولوله های کربنی به کمک دینامیک سیالات محاسباتی مورد بررسی قرار گرفته است. این شبیه سازی بر اساس مدل دوفازی اولرین-اولرین انجام شده است که در آن حرکت سیال، انتقال جرم، انتقال اجزای شیمیایی، رسوب نانولوله ها مورد بررسی قرار گرفته است، همچنین حرکت ذرات بعد از تولید به وسیله ی روش لاگرانژی مورد مطالعه قرار گرفته است. در این مطالعه ابتدا هندسه ی سیستم ومحدوده ی شرایط عملیاتی مشخص و سپس به شبیه سازی آن پرداخته شده است. مقایسه ی نتایج شبیه سازی با داده های تجربی نشان داد که تطابق خوبی بین آن ها برقرار است. در این شبیه سازی پارامترهای مؤثر روی عملکرد راکتور مشخص و چگونگی تاثیر آن ها روی عملکرد راکتور و نرخ رسوب نانولوله های کربنی بررسی شد. این پارامترها شامل توزیع غلظت محوری منابع کربن، توزیع سرعت و دما در پیش گرم کن و قسمت واکنش، اثر دمای ورودی، دمای پیش گرم کن، فشار، دبی اجزای خوراک، قطر و غیر فعال شدن کاتالیست می باشند. نتایج نشان داد که هر چه دمای ورودی کم تر باشد، نرخ رسوب بیشتر و به هدر رفتن مواد اولیه بیشتر می باشد. الگوی جریان در راکتورهای افقی و عمودی نشان داد که حضور پیش گرم کن جهت یکنواخت کردن میدان سرعت در راکتور الزامی می باشد. اثر دبی اجزای خوراک (گاز حامل و منبع کربنی) به این صورت می باشد که با افزایش دبی زایلن، نرخ رسوب افزایش و توزیع آن غیر یکنواخت تر می شود و با افزایش دبی آرگون و هیدروژن، نرخ رسوب کاهش می یابد. افزایش نسبت دبی آرگون به هیدروژن در صورتی که دبی حجمی کل ثابت است، باعث کاهش نرخ رسوب و افزایش دبی کل باعث افزایش نرخ رسوب می گردد. در نهایت با در نظر گرفتن اثر غیرفعال شدن کاتالیست نشان داده شد که غلظت زایلن، تولوئن، بنزن و متان در طول راکتور با گذشت زمان واکنش در طول راکتور افزایش می یابد.

کلمات کلیدی: تولید نانولوله های کربنی، راکتور نشست بخار شیمیایی، دینامیک سیالات

محاسباتی، شبیه سازی

فهرست مطالب

فصل اول : مقدمه.....	۱
۱-۱-آشنایی با جاذب های نانو ساختار.....	۲
۲-۱-نانولوله های کربنی.....	۳
۳-۱-اهداف پایان نامه.....	۵
فصل دوم: مبانی نظری موضوع.....	۶
۱-۲-نانولوله های کربنی.....	۷
۱-۱-۲-انواع نانولوله های کربنی.....	۸
۲-۱-۲-خواص نانولوله های کربنی.....	۹
۳-۱-۲-زمینه های کاربردی نانولوله های کربنی.....	۱۰
۲-۲-روش های تولید نانولوله های کربنی.....	۱۳
۱-۲-۲-روش تخلیه قوس.....	۱۳
۲-۲-۲-روش تبخیر لیزری.....	۱۴
۳-۲-۲-روش نشست بخار شیمیایی.....	۱۵
۴-۲-۲-مقایسه ی بین روش های مذکور.....	۱۷
۳-۲-تاثیر پارامترهای کلیدی.....	۱۷
۱-۳-۲-کاتالیست.....	۱۷
۲-۳-۲-دمای قسمت واکنش.....	۱۸
۳-۳-۲-منبع کربن.....	۱۹
۴-۳-۲-گاز حامل.....	۱۹
۴-۲-دینامیک سیالات محاسباتی و بهینه سازی.....	۲۱
۵-۲-شبیه سازی جریان گاز در راکتور ومعادلات حاکم.....	۲۱

۲۲۱-۵-۲- معادلات پیوستگی
۲۲۲-۵-۲- معادلات ممنتوم
۲۳۳-۵-۲- معادله ی انرژی
۲۴۴-۵-۲- ترم منبع انرژی به دلیل انجام واکنش
۲۴۵-۵-۲- معادلات انتقال اجزاء
۲۴۱-۵-۵-۲- نفوذ جرمی در جریان های آرام
۲۵۲-۵-۵-۲- تاثیر انتقال اجزاء در معادله ی انرژی
۲۵۳-۵-۵-۲- فورمول بندی سرعت-محدودتعمیم یافته برای مدل کردن واکنش
۲۶۱-۳-۵-۵-۲- مدل آرام سرعت-محدود
۲۷۶-۵-۲- واکنش های سطحی دیواره
۲۹۶-۲- اثر غیر فعال شدن کاتالیست
۳۰۷-۲- شبیه سازی حرکت نانولوله ها در راکتور و معادلات حاکم
۳۰۱-۷-۲- معادله ی ممنتوم ذره
۳۱۲-۷-۲- نیروی براونی
۳۲۳-۷-۲- نیروی برای سافمن

فصل سوم: مروری بر تحقیقات گذشته ۳۳

فصل چهارم: روش تحقیق ۳۸

۳۹۱-۴- مقدمه
۴۰۲-۴- هندسه ی سیستم
۴۱۳-۴- شرایط عملیاتی
۴۱۴-۴- خواص فیزیکی
۴۴۵-۴- شبیه سازی

- ۴۴-۱-۵-۴ تولید شبکه ی محاسباتی.....
- ۴۵-۱-۵-۴ معرفی نرم افزار گمیت.....
- ۴۵-۲-۱-۵-۴ تولید هندسه ی مسئله در نرم افزار گمیت.....
- ۴۸-۲-۵-۴ انتخاب مدل های مناسب و حل آن ها.....
- ۴۸-۱-۲-۵-۴ معرفی نرم افزار فلوئنت.....
- ۴۹-۲-۲-۵-۴ تنظیم پارامترهای لازم در فلوئنت.....
- ۵۳-۳-۲-۵-۴ تحلیل و حل مسئله.....
- ۵۴-۳-۵-۴ نمایش اطلاعات به دست آمده و تحلیل نتایج.....

فصل پنجم: نتایج و بحث..... ۵۶

- ۵۷-۱-۵-۱ مقایسه ی نتایج شبیه سازی با داده های تجربی.....
- ۶۱-۲-۵-۲ توزیع غلظت محوری منابع کربن.....
- ۶۴-۳-۵-۳ توزیع سرعت و دما در پیش گرم کن و قسمت واکنش.....
- ۶۶-۴-۵-۴ عوامل مؤثر بر عملکرد راکتور.....
- ۶۶-۱-۴-۵ اثر دمای ورودی.....
- ۷۱-۲-۴-۵ اثر دمای پیش گرم کن.....
- ۷۲-۱-۲-۴-۵ راکتور افقی.....
- ۷۴-۲-۲-۴-۵ راکتور عمودی (جریان از بالا به پایین).....
- ۷۶-۳-۲-۴-۵ راکتور عمودی (جریان از پایین به بالا).....
- ۷۸-۳-۴-۵ اثر فشار.....
- ۸۰-۴-۴-۵ اثر دبی ورودی.....
- ۸۰-۱-۴-۴-۵ اثر دبی حجمی زایلن.....
- ۸۲-۲-۴-۴-۵ تاثیر دبی حجمی هیدروژن.....

۸۵..... ۳-۴-۴-۵- تاثیر دبی حجمی آرگون

۸۸..... ۴-۴-۴-۵- اثر نسبت آرگون به هیدروژن در نرخ رسوب

۸۹..... ۵-۴-۴-۵- اثر دبی کل جریان ورودی

۹۲..... ۵-۴-۵- اثر قطر

۹۶..... ۵-۵- اثر غیرفعال شدن کاتالیست

فصل ششم: نتیجه گیری و پیشنهادات ۱۰۲

۱۰۳..... ۱-۶- نتیجه گیری

۱۰۵..... ۲-۶- پیشنهاد برای کارهای آینده

منابع ۱۰۷

فهرست جدول‌ها

- جدول ۱-۲- مقایسه ی بین روش های تولید نانولوله های کربنی ۱۷
- جدول ۲-۲- تغییر قطر نانولوله ها با تغییر اندازه ذرات کاتالیست ۱۸
- جدول ۳-۲- محدوده ی تغییرات قطر نانولوله ها با تغییر دمای واکنش ۱۸
- جدول ۱-۴- شرایط عملیاتی اعمال شده در راکتورنشست بخار شیمیایی ۴۱
- جدول ۲-۴- ظرفیت گرمای ویژه مواد بر مبنای گاز ایده آل در دمای ۲۹۸K ۴۲
- ۴۲
$$\left(\frac{J}{kg.K}\right) C_p = a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3 + a_4T^4$$
- جدول ۳-۴- ضریب هدایت مواد بر مبنای گاز ایده آل در دمای ۲۹۸ K ۴۲
- ۴۲
$$\left(\frac{W}{m.K}\right) k = a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3 + a_4T^4$$
- جدول ۴-۴- ویسکوزیته ی مواد بر مبنای گاز ایده آل در دمای ۲۹۸K ۴۳
- ۴۳
$$\left(\frac{kg}{m.sec}\right) \mu = a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3 + a_4T^4$$
- جدول ۵-۴- خواص زایلن ۴۴
- جدول ۶-۴- شرایط مرزی اعمال شده در گمیت ۴۸
- جدول ۷-۴- پارامترهای لازم برای واکنش های ۱-۴ تا ۶-۴ ۵۲
- جدول ۱-۵- مقایسه داده های تجربی با نتایج شبیه سازی برای غلظت های مختلف زایلن ورودی ۶۱
- جدول ۴-۵- مقادیر دبی حجمی، کسر جرمی و سرعت در جریان ورودی ۸۵
- جدول ۵-۵- مقادیر دبی و سرعت ورودی جریان با ثابت نگه داشتن درصد ترکیب مواد ورودی ۸۹

فهرست شکل‌ها

- شکل ۱-۱- مقالات منتشره در زمینه نانولوله های کربنی..... ۳
- شکل ۱-۲- انواع نانولوله های کربنی:(الف) چند جداره (ب) تک جداره ۴
- شکل ۱-۲- عکس الکترون میکروسکوپی گرفته شده از نانولوله های کربنی ساخته شده توسط ایجیما..... ۷
- شکل ۲-۲- انواع نانولوله های کربنی ۸
- شکل ۲-۳- انواع نانولوله های تک جداره:(a)صندلی (b)زیگک زاگک (c) کایرال ۸
- شکل ۲-۴- روش تخلیه ی قوس الکتریکی ۱۴
- شکل ۲-۵- روش تبخیر لیزری..... ۱۵
- شکل ۲-۶- شمایی از راکتور نشست بخار شیمیایی ۱۶
- شکل ۴-۱- شمایی از راکتور نشست بخار شیمیایی شبیه سازی شده ۳۹
- شکل ۴-۲- هندسه ی کامل راکتور نشست بخار شیمیایی..... ۴۶
- شکل ۴-۳- هندسه ی راکتور نشست بخار شیمیایی در نرم افزار گمیت ۴۶
- شکل ۴-۴- ایجاد شبکه های ریز تر به سمت دیواره..... ۴۷
- شکل ۴-۵- کانتور دما..... ۵۴
- شکل ۴-۶- کانتور سرعت..... ۵۵
- شکل ۵-۱- نمودار باقی مانده ها ۵۸
- شکل ۵-۲- تغییرات کسر مولی زایلن در $x = 1.25m$ در تکرار های مختلف ۵۸
- شکل ۵-۳- درصد خطای محاسبه ی غلظت مواد در خروجی در مقایسه با داده های تجربی در تعداد المان های مختلف (a)-زایلن (b)-تولوئن (c)-متان ۵۹

شکل ۴-۵- مقادیر سرعت محوری در تعداد سلول های مختلف در نقاط مشخص (a)

۶۰ $x = 1.3$ (b) $x = 0.6m$

شکل ۵-۵- مقادیر نرخ رسوب کربن در تعداد سلول های مختلف در $x = 1.25m$ ۶۰

شکل ۶-۵- توزیع غلظت حجمی زایلن در طول محور x ۶۲

شکل ۷-۵- توزیع غلظت حجمی تولوئن در طول محور x ۶۲

شکل ۸-۵- توزیع غلظت محوری بنزن در طول محور X ۶۳

شکل ۹-۵- توزیع غلظت محوری متان در طول محور X ۶۳

شکل ۱۰-۵- توزیع غلظت منابع کربنی در طول محور X ۶۴

شکل ۱۱-۵- (a) توزیع عمودی دما در وسط پیش گرم کن (b) توزیع عمودی سرعت در وسط

پیش گرم کن (c) توزیع بردارهای سرعت در ابتدای ورودی (وسط پیش گرم کن) ۶۵

شکل ۱۲-۵- (a) توزیع عمودی سرعت در ابتدای قسمت واکنش (b) توزیع عمودی دما در

ابتدای قسمت واکنش ۶۶

شکل ۱۳-۵- الف-توزیع دما در طول راکتور در دماهای ورودی مختلف ۶۷

شکل ۱۳-۵- ب- اختلاف دمای قسمت واکنش و دمای ورودی در طول محور X ۶۷

شکل ۱۴-۵- توزیع سرعت در طول محور X در دماهای مختلف ورودی ۶۸

شکل ۱۵-۵- نرخ رسوب نانولوله های کربنی در طول قسمت واکنش در دماهای مختلف ورودی ۶۹

شکل ۱۶-۵- توزیع غلظت محوری زایلن در طول محور X در دماهای مختلف ورودی ۶۹

شکل ۱۷-۵- الف- کانتور دما در دمای ورودی 200K ۷۰

شکل ۱۷-۵- ب- کانتور دما در دمای ورودی 300K ۷۰

شکل ۱۷-۵- ج- کانتور دما در دمای ورودی 400K ۷۰

شکل ۱۷-۵- د- کانتور دما در دمای ورودی 500K ۷۰

- شکل ۵-۱۸- نمودار نرخ رسوب کربن و نسبت غلظت مولی زایلن در ورودی قسمت واکنش به غلظت مولی زایلن در خروجی قسمت واکنش در دماهای مختلف ورودی ۷۱
- شکل ۵-۱۹- نرخ رسوب کربن بدون در نظر گرفتن پیش گرم کن و با در نظر گرفتن آن در دماهای مختلف ۷۲
- شکل ۵-۲۰- غلظت مولی زایلن در طول محور X (در دماهای مختلف پیش گرم کن) ۷۳
- شکل ۵-۲۱- ایجاد جریان چرخشی در ابتدای قسمت واکنش بدون حضور پیش گرم کن در راکتور ۷۴
- شکل ۵-۲۲- نرخ رسوب کربن در دماهای مختلف پیش گرم کن در جریان از بالا به پایین ۷۴
- شکل ۵-۲۳- توزیع غلظت مولی زایلن در طول قسمت واکنش در دماهای مختلف پیش گرم کن ۷۵
- شکل ۵-۲۴- توزیع سرعت عمودی در ابتدای قسمت واکنش در دماهای مختلف پیش گرم کن (در جریان از بالا به پایین) ۷۶
- شکل ۵-۲۵- نرخ رسوب کربن در دماهای مختلف پیش گرم کن در جریان از پایین به بالا ۷۷
- شکل ۵-۲۶- توزیع سرعت عمودی در ابتدای قسمت واکنش (در جریان از پایین به بالا) ۷۷
- شکل ۵-۲۷- نرخ رسوب نانولوله های کربنی در فشارهای مختلف راکتور ۷۸
- شکل ۵-۲۸- توزیع غلظت مولی زایلن در طول محور X در فشارهای مختلف راکتور ۷۹
- شکل ۵-۲۹- کانتورهای غلظت مولی زایلن در فشارهای مختلف ۸۰
- شکل ۵-۳۰- نرخ رسوب کربن در دبی های مختلف زایلن ۸۱
- شکل ۵-۳۱- نرخ رسوب کربن در دبی های مختلف هیدروژن ۸۳
- شکل ۵-۳۲- نرخ رسوب کربن یک بار در حضور واکنش ۴-۳ و یک بار بدون واکنش ۴-۳ ۸۳
- شکل ۵-۳۳- نرخ متوسط رسوب کربن در دبی های مختلف هیدروژن ۸۴
- شکل ۵-۳۴- (a) نرخ رسوب کربن در دبی های مختلف آرگون (b) نرخ متوسط رسوب کربن در دبی های مختلف آرگون ۸۶

- شکل ۵-۳۶- نرخ متوسط رسوب کربن در نسبت های مختلف دبی حجمی آرگون به دبی حجمی هیدروژن ۸۸
- شکل ۵-۳۷- نرخ رسوب نانولوله های کربنی در دبی های مختلف جریان ۹۰
- شکل ۵-۳۸- توزیع غلظت مولی زایلن در طول راکتور در سرعت های مختلف ورودی ۹۰
- شکل ۵-۳۹- نرخ رسوب کربن و نسبت غلظت مولی زایلن در ابتدای قسمت واکنش به نسبت غلظت مولی زایلن در انتهای قسمت واکنش در سرعت های مختلف جریان ورودی ۹۱
- شکل ۵-۴۰- نرخ رسوب نانولوله های کربنی در قطرهای مختلف راکتور ۹۲
- شکل ۵-۴۱- توزیع غلظت مولی زایلن در طول محور X در قطرهای مختلف راکتور ۹۳
- شکل ۵-۴۲- توزیع عمودی سرعت در ابتدای قسمت واکنش (در قطرهای مختلف راکتور) ۹۳
- شکل ۵-۴۳- مسیر ذره که در ابتدای قسمت واکنش از دیواره جدا شده است ۹۴
- شکل ۵-۴۴- مسیر ذره در حالتی که از دیواره جدا شده است در طول قسمت واکنش (در اندازه های مختلف نانولوله های کربنی) ۹۵
- شکل ۵-۴۵- متوسط نرخ رسوب در قطر های مختلف راکتور (در دبی های مختلف ورودی) ۹۶
- شکل ۵-۴۶- نرخ رسوب کربن در زمان های مختلف واکنش ۹۷
- شکل ۵-۴۷- توزیع غلظت حجمی زایلن در طول راکتور در زمان های مختلف واکنش ۹۷
- شکل ۵-۴۸- توزیع غلظت حجمی تولوئن در طول راکتور در زمانهای مختلف واکنش ۹۸
- شکل ۵-۴۹- توزیع غلظت حجمی بنزن در طول راکتور در زمان های مختلف واکنش ۹۹
- شکل ۵-۵۰- توزیع غلظت حجمی متان در طول راکتور در زمان های مختلف واکنش ۱۰۰
- شکل ۵-۵۱- جرم کل نانولوله های کربنی در زمان های مختلف واکنش ۱۰۱

فصل اول :

مقدمه

۱-۱- آشنایی با جاذب های نانو ساختار

نانوجاذب ها^۱ ذراتی نانومتری از مواد آلی یا غیر آلی هستند که تمایل بالایی به جذب مواد دارند. جاذب ها به طور گسترده به عنوان فیلتر جداکننده در تصفیه آب و برای حذف آلاینده های معدنی و آلی از آب آلوده مورد استفاده قرار می گیرند. نانوذرات دارای دو ویژگی کلیدی هستند که استفاده از آنها را به عنوان جاذب جاذب می سازد. آنها دارای نواحی سطحی بسیار وسیعتری از ذرات توده هستند. همچنین نانوذرات می توانند با گروه های شیمیایی مختلف برای افزایش میل به حذف ترکیبات هدف ترکیب شوند [۱].

نانو لوله های کربنی^۲ می توانند به عنوان جاذب با ظرفیت بالا و انتخابی برای املاح آلی در محلول های آبی عمل کنند. مطالعات آزمایشگاهی نشان می دهد که جاذب های نانولوله ای می توانند تقریباً همه ی انواع آلودگی های آب را حذف کنند. مطالعات زیادی برای تعیین خواص این نوع جاذب ها، به منظور توسعه ی جاذب های با ظرفیت بالا و انتخابی برای یون های فلزی و آنیون ها انجام گرفته است، به عنوان مثال جذب سرب دو ظرفیتی، کادمیوم دو ظرفیتی بر روی نانولوله های کربنی چند جداره^۳ [۱]، توسعه ی جاذب های شامل اکسید سریم تقویت شده با نانولوله های کربنی [۲]، جذب دی کلروبنزن [۳] نمونه ای از کارهای انجام شده می باشند. همچنین لی و همکاران^۴ [۴] گزارش داده اند که نانولوله های کربنی چند جداره، جاذب های به مراتب بهتری نسبت به کربن سیاه برای ترکیبات آلی فرار در محلول های آبی هستند. فوگستو و همکاران^۵ [۵] با موفقیت نانولوله های کربنی چند جداره را داخل بسته های آلژینات پیوند یافته^۶ به صورت کپسول درآوردند. تصور بر این است که هر چه پیشرفت های بیشتری در تولید نانولوله ها ی مقرون به صرفه تر و سازگارتر با محیط زیست حاصل شود، از این نانو مواد می توان به عنوان اجزاء کلیدی سیستم های تصفیه آب صنعتی و عمومی استفاده نمود.

^۱ - nano adsorbents

^۲ - carbon nanotubes(CNTs)

^۳ - multiwall carbon nanotubes(MWNTs)

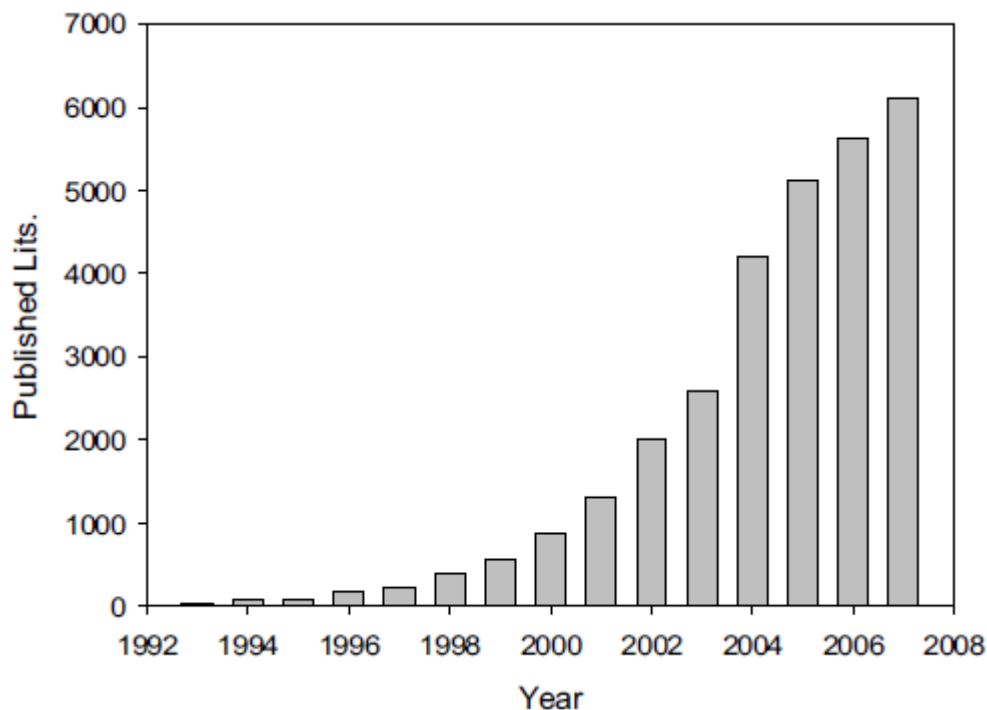
^۴ -Li et al.

^۵ -Fugestu et al.

^۶ - Cross-linked alginate vesicles

۲-۱- نانولوله های کربنی

نانولوله های کربنی که از صفحات کربن به ضخامت یک اتم و به شکل استوانه‌ای توخالی ساخته شده است در سال ۱۹۹۱ توسط سامیو ایجیما^۱ کشف شد. این دانشمند ژاپنی و همکارانش زمانی که روی سنتز فولرن ها با استفاده از تخلیه قوس الکتریکی فعالیت میکردند، به ساختار لوله ای شکل در تصاویر TEM^۲ برخورد کردند. آنها در ابتدا تصور میکردند که این ساختارها هم نوعی فولرن هستند که در یک امتداد کشیده شده اند، اما بعدها متوجه شدند که این ساختارها خواص متفاوتی دارند و از این رو آنها را نانولوله های کربنی نامیدند [۶]. از این پس، به واسطه خواص فوق العاده ای که این ترکیبها داشتند، مورد توجه گسترده دانشمندان قرار گرفتند، که حجم بسیار زیاد متون علمی منتشر شده در زمینه سنتز و کاربردهای آنها گواه این مطلب است (شکل ۱-۱).

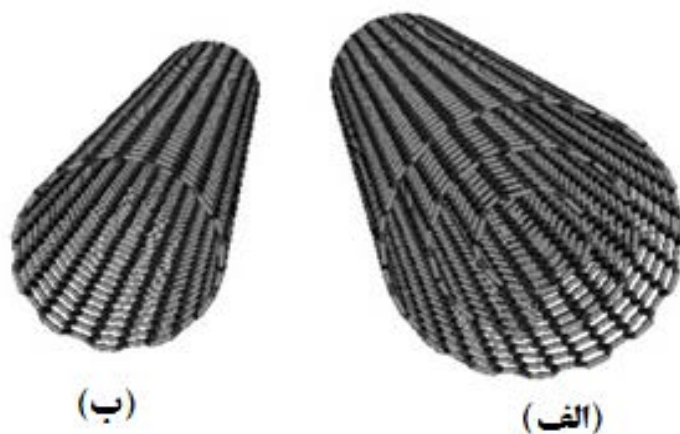


شکل ۱-۱- مقالات منتشره در زمینه نانولوله های کربنی (داده های استفاده شده برای رسم این نمودار از پایگاه داده های [www. scopus. com](http://www.scopus.com) و با استفاده از کلید واژه carbon nanotubes استخراج شده اند) [۷].

^۱ -Sumio Iijima

^۲ -Transmission Electron Microscopy

این مواد به صورت تک جداره^۱ و چندجداره (شکل ۱-۲) می باشند [۶]. خواص ویژه و منحصر به فرد آن از جمله مدول یانگ بالا و استحکام کششی خوب از یک طرف و طبیعت کربنی بودن نانولوله‌ها (به خاطر این که کربن ماده‌ای است کم وزن، بسیار پایدار و ساده جهت انجام فرایندها که نسبت به فلزات برای تولید ارزان تر می باشد) [۷ و ۸] باعث شده است که در دهه گذشته تحقیقات مهمی در کارایی و پرباری روش‌های رشد نانولوله‌ها انجام شود. کارهای نظری و عملی زیادی نیز بر روی ساختار اتمی و ساختارهای الکترونی نانولوله متمرکز شده است. کوشش‌های گسترده‌ای نیز برای رسیدگی به خواص مکانیکی شامل مدول یانگ و استحکام کششی و ساز و کار عیوب و اثر تغییر شکل نانولوله‌ها بر خواص الکتریکی صورت گرفته است. می توان گفت این علاقه ویژه به نانولوله‌ها از ساختار و ویژگی‌های بی نظیر آن‌ها سرچشمه می گیرد [۸].



شکل ۱-۲- انواع نانولوله های کربنی: (الف) چند جداره (ب) تک جداره [۶].

روش های تولید نانولوله ها عبارتند از ۱-روش تخلیه قوس^۲ ۲-روش تابش لیزر^۳ ۳-روش نشست بخار شیمیایی^۴. تمرکز محققان بر روی روش رسوب‌دهی بخار است زیرا تولید انبوه در حد کیلوگرم را میسر می‌سازد و می‌توان کنترل قابل قبولی بر مکانیزم رشد داشت. این روش شامل حرارت دادن مواد کاتالیزوری تا درجه حرارت های بالا در یک کوره لوله‌ای شکل و عبور یک گاز هیدروکربنی در سراسر لوله برای یک مدت زمان معین می‌باشد [۶]. ذرات ریز کاتالیست می‌تواند روی پیش ماده^۵ قرار گیرد [۹-۱۲] یا به صورت در جا، به شکل کاتالیست شناور^۶ وارد

^۱-Single Wall Carbon Nanotube(SWNTs)
^۲-Arc discharge method
^۳-Laser furnace method
^۴-Chemical Vapor Deposition Method
^۵-Substrate
^۶-Floating Catalyst

راکتور شود [۱۳]. منابع کربنی به طور گسترده شامل CO و هیدروکربن های مختلفی چون متان، استیلین، اتیلین، بنزن و زایلن می باشند [۱۲]. مؤثرترین کاتالیست ها، فلزات گذرا از جمله آهن، کبالت و نیکل یا آلیاژهایی شامل کبالت-نیکل می باشند [۱۳]. این فرایند در جریان آرگون، نیتروژن یا هیدروژن، جهت جلوگیری از اکسیداسیون کاتالیست انجام می شود [۱۳].

۱-۳- اهداف پایان نامه

هدف از این پایان نامه استفاده از روش دینامیک سیالات محاسباتی برای پیش بینی نرخ تولید نانولوله های کربنی از تجزیه ی کاتالیزوری زایلن در راکتور نشست بخار شیمیایی می باشد. در این مطالعه سعی بر این است که در ابتدا با بدست آوردن اطلاعاتی از هندسه ی راکتور، شرایط عملیاتی، خواص فیزیکی سیالات مورد استفاده، به وسیله ی دینامیک سیالات محاسباتی به شبیه سازی راکتور و جریان سیال پرداخته شود. سپس با تغییر در پارامترهای مختلف از جمله دما، فشار، دبی جریان ورودی و . . .، شرایط بهینه برای تولید نانولوله های کربنی به دست آید. بنابراین برای درک بهتر این پدیده ها از دینامیک سیالات محاسباتی که هم ارزان و هم سریع است و هم می تواند از بعضی آزمایشات فیزیکی در آزمایشگاه جلوگیری کند در بهینه کردن شرایط عملیاتی استفاده می شود.