



۱۱۵ ۴.۶



پرونده دانشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران



دانشگاه رتجان
دانشکده علوم - گروه شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی آلی
(MSc)

عنوان:

دیمریزاسیون اکسایشی متان بر روی کاتالیست‌های تیتانیم
دی‌اکسید-فلزات قلیایی تنگستات تقویت شده با منگنز

و

سنتر چندجزئی تک واکنشگاهی باربیتورات‌های نوین از طریق واکنش
آمین‌های نوع اول با استرهای استیلنی در حضور مشتقات آلوکسان

۱۳۸۸ / ۲ / ۲۳

نگارش:

طیبه عباسی

استاد راهنما
دکتر محمد باقر تیموری

اساتید راهنما:

دکتر محمد باقر تیموری

دکتر علی رضانی

استاد مشاور:

مصطفی محمدپور امینی

بهمن ۱۳۸۷

۱۱۵۴۰۶



دانشگاه زنجان

صورتجلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

شماره: ۳۵۴۳/ع

تاریخ: ۸۷/۱۱/۷

با تأییدات خداوند متعال و با استعانت از حضرت ولی عصر (عج) جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

خانم: طیبه عباسی رشته: شیمی گرایش: آلی

تحت عنوان: دیمریزاسیون اکسایشی متان بر روی کاتالیستهای تیتانیم دی اکسید- فلزات قلیایی تنگستات تقویت شده با منگنز و سنتز چندجزئی تک واکنشگاهی باریتورات های نوین از طریق واکنش آمین های نوع اول با استرهای استیلنی در حضور مشتقات آلوکسان

در تاریخ ۸۷/۱۱/۷ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه زنجان برگزار گردید و نظر هیأت داوران بشرح زیر می باشد:

قبول (با درجه: عالی) امتیاز: (۱۹/۷۳) دفاع مجدد مردود

۱ - عالی (۲۰-۱۸)

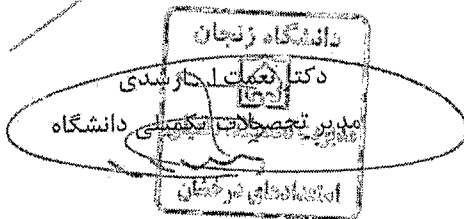
۲ - بسیار خوب (۹۹-۱۷/۱۶)

۳ - خوب (۹۹-۱۵/۱۴)

۴ - قابل قبول (۹۹-۱۳/۱۲)

۱۳۸۸ / ۲ / ۲۳

عضو هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنمای اول	دکتر محمدباقر تیموری	استادیار	
۲- استاد راهنمای دوم	دکتر علی رضانی	استاد	
۳- استاد مشاور	دکتر مصطفی محمدپور امینی	استاد	
۴- استاد ممتحن اول	دکتر بابک کریمی	استاد	
۵- استاد ممتحن دوم	دکتر حسن حسینی منفرد	دانشیار	
۶- نماینده تحصیلات تکمیلی	دکتر عباس جعفرزاده	استادیار	



دکتر محمدعلی اسمحانی
معاون آموزشی و تحصیلات تکمیلی
دانشکده علوم
۸۷/۱۱/۸

تقدیم به تمام وجودم:

پدر دلسوز و مادر مهربانم

به پاس زحمات ارزنده و بی دریغشان

تقدیر و تشکر:

سپاس بیکران خداوند را که به ما توفیق دانش اندوزی و کسب معرفت عطا فرمود تا وجود خویش را به زینت علم بیاراییم. اکنون که به یاری خداوند متعال توفیق انجام این پژوهش را داشته‌ام شایسته است از تمامی عزیزانی که مرا در این راه یاری نموده‌اند تشکر و قدردانی نمایم.

در وهله نخست از اساتید فرهیخته و ارجمندم جناب آقای دکتر تیموری و جناب آقای دکتر رمضانی که در نهایت حسن خلق، لطف و سعه صدر در تمام مراحل اجرا و تنظیم پایان‌نامه و در طول تحصیل مرا ارشاد فرمودند بی نهایت سپاسگذارم.

از استاد فرزانه و گرانمایه جناب آقای دکتر محمدپور امینی که در طی نگارش این پایان‌نامه از رهنمودهای ارزنده خویش مرا بی نصیب نکردند بسیار سپاسگذارم.

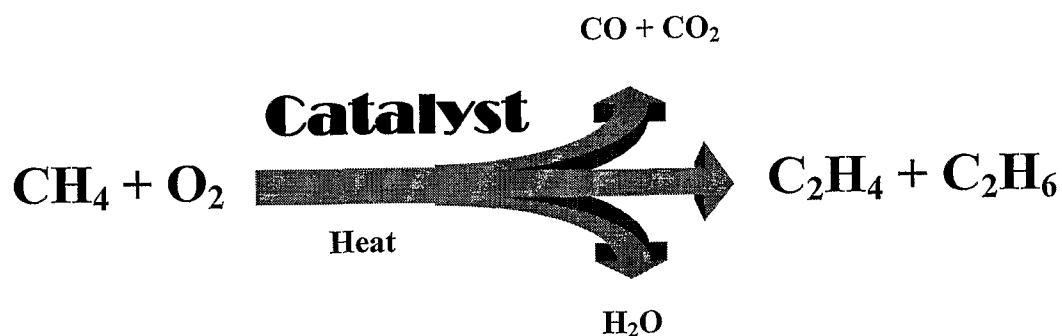
در وهله بعد از خانواده خوبم: پدر و مادر، احمد، محمد، ناهید، مهناز و شیرین به خاطر تمامی زحمات، همفکری‌ها، تشویق‌ها و ارشادشان تشکر و قدردانی می‌کنم. ایشان همواره بالاترین نعمتی بوده‌اند که خداوند به من عطا نموده است.

از ریاست محترم پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران جناب آقای دکتر میرزاده که اجازه استفاده از امکانات پژوهشگاه را برای انجام این پروژه به اینجانب دادند. همچنین کارکنان پژوهشگاه بالاخص دوستان خوبم: ماندانا، ریحانه، نرگس، فاطمه، مریم و ... که در مراحل مختلف با دلگرمی و همراهیشان همواره بر شادمانی و آگاهی‌ام افزوده‌اند کمال تشکر را دارم.

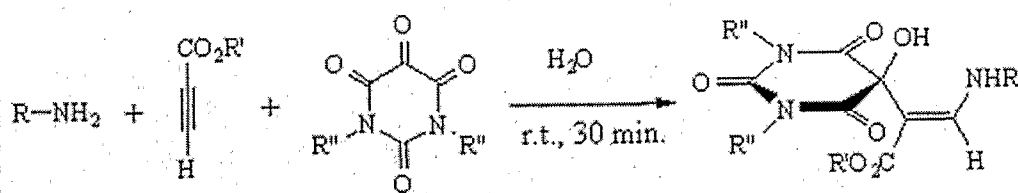
از پیشگاه ایزد منان برای همه این عزیزان آرزوی سلامتی، بهروزی و کامیابی دارم.

Abstract:

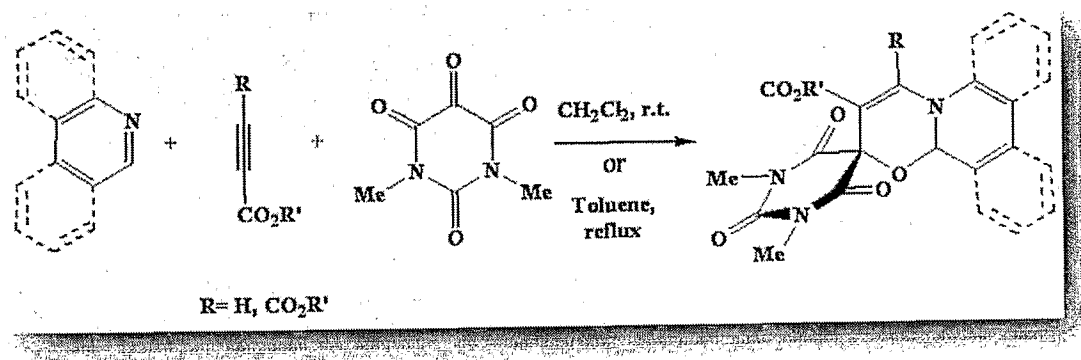
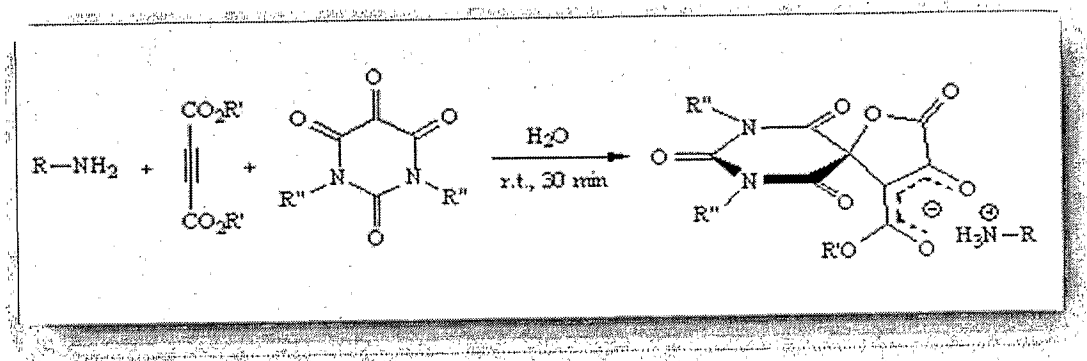
(1) In work Oxidative dimerization of methane over manganese-doped alkaline metal tungstate-titanium dioxide catalysts was studied in a fixed bed reactor at atmospheric. The best results (yiled and selectivity) were obtained for 1% Mn/ 5% Na₂WO₄/ TiO₂. The effect of different parameters such as temptature, GHSV, CH₄/O₂ ratio on catalyst 1% Mn/ 5% Na₂WO₄/ TiO₂ have been evaluated.



(2) The one pot three component reaction of different primary amines, alkyl propiolates in presence of alloxon derivatives in water and at 25°C temperature gives hydroxyl barbiturats in high yiled.



The one pot multi component reaction of different primary amines, dialkyl acetylene dicarboxylate in presence of alloxan derivatives in water and at 25°C temperature gives spiro barbiturats in high yield.



فصل اول: زوج شدن اکسایشی متان

بخش اول: مقدمه

۱-۱-۱- مقدمه ۳

بخش دوم: کاتالیست

۱-۲-۱- کاتالیست	۸
۲-۲-۱- فعالیت و گزینش پذیری	۸
۳-۲-۱- غیر فعال شدن کاتالیست‌ها	۹
۴-۲-۱- جذب	۹
۵-۲-۱- مکان‌های فعال سطح	۱۰
۶-۲-۱- دسته بندی سیستم‌های کاتالیستی	۱۰
۷-۲-۱- مواد لازم در ساخت کاتالیست	۱۱
۱-۷-۲-۱- پایه کاتالیست	۱۱
۲-۷-۲-۱- ارتقا دهنده‌ها	۱۳
۳-۷-۲-۱- تسریع کننده‌ها	۱۴
۴-۷-۲-۱- گیرنده‌ها	۱۵
۸-۲-۱- روش‌های تهیه کاتالیست	۱۵
۱-۸-۲-۱- رسوب دادن (هم رسوبی) و تشکیل ژل	۱۶
۲-۸-۲-۱- مخلوط کردن	۱۸
۳-۸-۲-۱- تلقیح (آغشته سازی)	۱۸
۹-۲-۱- عملیات لازم برای تهیه کاتالیست	۱۹
۱-۹-۲-۱- شستشو دادن	۱۹
۲-۹-۲-۱- خشک نمودن	۲۱
۳-۹-۲-۱- شکل دادن کاتالیست	۲۱
۴-۹-۲-۱- تکلیس و فعال نمودن	۲۲

بخش سوم: روش‌های متداول تبدیل گاز طبیعی

۱-۳-۱- گاز طبیعی	۲۴
۲-۳-۱- ذخایر متان	۲۷



- ۲۹-۳-۳-۱ روش‌های متداول تبدیل گاز طبیعی
- ۳۲-۱-۳-۳-۱ تبدیل غیر مستقیم متان
- ۳۴-۱-۱-۳-۳-۱ تبدیل غیر مستقیم متان به متانول
- ۳۴-۲-۱-۳-۳-۱ تولید بنزین (سنتز فیشر تروپش FT) (GTL)
- ۳۷-۳-۱-۳-۳-۱ تولید محصولات میان تقطیر (سنتز فیشر- تروپش)
- ۳۷-۴-۱-۳-۳-۱ تبدیل گاز طبیعی به بنزین از طریق متانول (MTG)
- ۳۸-۵-۱-۳-۳-۱ تبدیل گاز طبیعی به اولفین ها از طریق متانول (GTO)
- ۳۹-۶-۱-۳-۳-۱ تولید دی متیل اتر (DME)
- ۴۰-۲-۳-۳-۱ تبدیل مستقیم گاز طبیعی
- ۴۰-۱-۲-۳-۳-۱ فرایند تبدیل مستقیم گاز طبیعی به متانول
- ۴۰-۲-۲-۳-۳-۱ پیرولیز متان
- ۴۱-۳-۲-۳-۳-۱ کلریناسیون متان
- ۴۱-۴-۲-۳-۳-۱ زوج شدن اکسایشی متان (OCM)

بخش چهارم: زوج شدن اکسایشی متان

- ۴۳-۱-۴-۱ زوج شدن اکسایشی متان (کاتالیستی)
- ۴۴-۱-۱-۴-۱ کاتالیست‌ها و نتایج کاتالیستی
- ۴۶-۲-۱-۴-۱ روش‌های فرایند زوج شدن اکسایشی متان
- ۴۷-۳-۱-۴-۱ مکانیسم
- ۵۱-۴-۱-۴-۱ تشکیل اتیلن
- ۵۳-۵-۱-۴-۱ محدودیت‌های OCM
- ۵۴-۶-۱-۴-۱ نقش پارامترهای مختلف در زوج شدن اکسایشی متان
- ۵۴-۱-۶-۱-۴-۱ اکسیدکننده‌ها
- ۵۵-۲-۶-۱-۴-۱ اندازه سطح کاتالیست‌ها در OCM
- ۵۶-۳-۶-۱-۴-۱ نقش فلزات قلیایی و هالوژن‌ها
- ۵۷-۴-۶-۱-۴-۱ اثر فشار و دما در OCM
- ۵۸-۷-۱-۴-۱ سیستم‌های کاتالیستی کارآمد
- ۵۸-۱-۷-۱-۴-۱ کاتالیست‌های بدون ساپورت
- ۶۰-۲-۷-۱-۴-۱ کاتالیست‌های ساپورت شده برای فرایند OCM
- ۶۰-۱-۲-۷-۱-۴-۱ برهمکنش‌های ساپورت - کاتالیست OCM
- ۶۱-۳-۷-۱-۴-۱ کاتالیست‌های ساپورت شده روی SiO_2 و TiO_2
- ۶۳-۸-۱-۴-۱ زوج شدن اکسایشی متان روی کاتالیست W-Mn/SiO_2
- ۶۴-۱-۸-۱-۴-۱ عملکرد واکنشی کاتالیست



- ۶۵..... ۱-۴-۸-۲- مشخصات ساختار کاتالیست
- ۶۶..... ۱-۴-۸-۳- نقش سدیم در کاتالیست Na-W-Mn/SiO₂
- ۷۱..... ۱-۴-۸-۴- بررسی پارامترهای مختلف در فشار بالا روی عملکرد کاتالیتیک
- ۷۴..... ۱-۴-۹- کاتالیست‌های ساپورت شده بر TiO₂
- ۷۵..... ۱-۴-۲- زوج شدن اکسایشی متان (غیرکاتالیستی)
- بخش پنجم: ساخت کاتالیست و تست راکتوری**
- ۷۹..... ۱-۵-۱- تجهیزات و مواد شیمیایی مورد استفاده
- ۷۹..... ۱-۵-۲- روش ساخت کاتالیست‌ها
- ۸۰..... ۱-۵-۲-۱- روش عمومی ساخت کاتالیست‌ها
- ۸۱..... ۱-۵-۳- شناسایی ساختار و بررسی ویژگی‌های کاتالیست‌ها
- ۸۱..... ۱-۵-۳-۱- روش BET
- ۸۳..... ۱-۵-۳-۲- روش پراش پرتو اشعه ایکس (XRD)
- ۸۴..... ۱-۵-۴- سیستم تست راکتوری
- ۸۵..... ۱-۵-۴-۱- آماده سازی جریان گازهای خوراک
- ۸۶..... ۱-۵-۴-۲- کنترل کننده‌های جریان ورودی (MFC)
- ۸۷..... ۱-۵-۴-۳- راکتور
- ۸۹..... ۱-۵-۴-۴- کوره
- ۸۹..... ۱-۵-۴-۵- فلومتر صابونی
- ۹۰..... ۱-۵-۴-۶- دستگاه کروماتوگرافی گازی (GC)
- ۹۰..... ۱-۵-۴-۶-۱- ستون‌های HP-PLOT Q
- ۹۰..... ۱-۵-۴-۶-۲- ستون‌های HP-PLOT Molsive
- ۹۳..... ۱-۵-۵- شرح عملیات تست راکتوری کاتالیست‌های ساخته شده
- ۹۳..... ۱-۵-۵-۱- آماده سازی راکتور
- ۹۳..... ۱-۵-۵-۲- بارگذاری کاتالیست
- ۹۳..... ۱-۵-۵-۳- تنظیم نسبت و عبور گازهای خوراک از راکتور
- ۹۳..... ۱-۵-۵-۴- ایجاد شرایط دمایی فرایند و حالت پایدار واکنش
- ۹۴..... ۱-۵-۵-۵- اندازه‌گیری دبی مخلوط گازی فراورده‌ها
- ۹۴..... ۱-۵-۵-۶- آنالیز ترکیب درصد فراورده‌ها
- ۹۴..... ۱-۵-۶- محاسبات
- ۹۴..... ۱-۵-۶-۱- درصد تبدیل مواد اولیه
- ۹۵..... ۱-۵-۶-۲- گزینش‌پذیری واکنش نسبت به محصولات
- ۹۵..... ۱-۵-۶-۳- راندمان



بخش ششم: بحث و نتیجه‌گیری

- ۹۷..... ۱-۶-۱- بحث و نتیجه‌گیری
- ۱۰۵..... ۲-۶-۱- پیشنهادات

فصل دوم: سنتز باربیتورات‌های نوین

بخش اول: مقدمه

- ۱۰۸..... ۱-۱-۲- باربیتورات‌ها
- ۱۱۳..... ۲-۱-۲- بوتنولیدها

بخش دوم: سنتز، بحث و نتیجه‌گیری

- ۱۱۵..... ۱-۲-۲- دستگاه‌ها و مواد شیمیایی مورد نیاز
- ۱۱۵..... ۲-۲-۲- سنتز تک مرحله‌ای هیدروکسی باربیتورات‌ها
- ۱۱۹..... ۱-۲-۲-۲- مکانیسم
- ۱۲۰..... ۲-۲-۲-۲- روش کار برای سنتز ترکیب هیدروکسی باربیتورات 12a (روش عمومی)
- ۱۲۱..... ۴-۲-۲-۲- نتیجه‌گیری
- ۱۲۱..... ۳-۲-۲- سنتز تک مرحله‌ای ترکیبات اسپایرو باربیتورات (اسپایرو بوتنولید)
- ۱۳۰..... ۱-۳-۲-۲- مکانیسم
- ۱۳۷..... ۲-۳-۲-۲- روش کار عمومی برای سنتز ترکیب اسپایرو باربیتورات 22a
- ۱۳۸..... ۳-۳-۲-۲- نام، خصوصیات فیزیکی و اطلاعات طیفی ترکیبات 22a-q
- ۱۴۳..... ۴-۳-۲-۲- روش کار عمومی برای سنتز ترکیب هیدروکسی باربیتورات 23a
- ۱۴۳..... ۵-۳-۲-۲- نام، خصوصیات فیزیکی و اطلاعات طیفی ترکیبات 23a-d
- ۱۴۵..... ۶-۳-۲-۲- روش کار عمومی برای سنتز ترکیب اسپایرو باربیتورات 26a
- ۱۴۵..... ۷-۳-۲-۲- نام، خصوصیات فیزیکی و اطلاعات طیفی ترکیبات 26a-f
- ۱۴۷..... ۸-۳-۲-۲- نتیجه‌گیری
- ۱۴۸..... ۹-۳-۲-۲- پیشنهادات

مراجع

ضمیمه

طیف‌های IR، $^1\text{H NMR}$ و $^{13}\text{C NMR}$ ترکیبات 22a-q

- ۱۵۸..... طیف IR، $^1\text{H NMR}$ و $^{13}\text{C NMR}$ ترکیب 22a
- ۱۵۹..... طیف IR، $^1\text{H NMR}$ و $^{13}\text{C NMR}$ ترکیب 22b
- ۱۶۰..... طیف IR، $^1\text{H NMR}$ و $^{13}\text{C NMR}$ ترکیب 22c
- ۱۶۱..... طیف IR، $^1\text{H NMR}$ و $^{13}\text{C NMR}$ ترکیب 22d
- ۱۶۲..... طیف IR، $^1\text{H NMR}$ و $^{13}\text{C NMR}$ ترکیب 22e



۱۶۳.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 22f
۱۶۴.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 22g
۱۶۵.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 22h
۱۶۶.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 22i
۱۶۷.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 22j
۱۶۸.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 22k
۱۶۹.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 22l
۱۷۰.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 22m
۱۷۱.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 22n
۱۷۲.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 22o
۱۷۳.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 22p
۱۷۴.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 22q

طیف‌های IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیبات 23a-d

۱۷۶.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 23a
۱۷۷.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 23b
۱۷۸.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 23c
۱۷۹.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 23d

طیف‌های IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیبات 26a-f

۱۸۱.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 26a
۱۸۲.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 26b
۱۸۳.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 26c
۱۸۴.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 26d
۱۸۵.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 26e
۱۸۶.....	طیف IR، ^1H NMR و ^{13}C NMR ترکیب 26f



فصل اول

زوج شدن اکسایشی متان

بخش اول

مقدمه

۱-۱- مقدمه

یکی از معضلات کنونی جهان مسئله تأمین انرژی و مواد اولیه است. مدت‌های مدیدی است که بشر در پی توسعه این منابع و دستیابی به منابع جایگزین برای آنهاست. امروزه گاز طبیعی، صدرنشین منابع انرژی جهان یعنی نفت را به چالش طلبیده است و استفاده از آن در سال‌های اخیر رو به افزایش گذاشته‌است. به گونه‌ای که اکنون از آن به عنوان یک منبع مهم انرژی یاد می‌شود که وارد عرصه رقابت با نفت شده‌است. روشن‌ترین دلیل افزایش اهمیت گاز طبیعی و ورود آن به بازار رقابت با دیگر منابع انرژی، آماری است که از وابستگی روز افزون بخش صنعتی جهان به گاز طبیعی حکایت دارد. آمار منابع گاز طبیعی در جهان نشان می‌دهد که منطقه آمریکای شمالی با توجه به ذخایر اثبات شده فعلی و میزان تولید، در این منطقه بیش از ۹ سال دیگر گاز وجود نخواهد داشت [۱]. لذا کشورهای این منطقه سالهاست که به دنبال جایگزینی منابع تأمین انرژی خود از یک طرف و پیدا کردن راهی برای واردات نفت و گاز به صورت خام از سایر کشورها به ویژه خاورمیانه می‌باشند. امروزه بهترین راه برای کشورهای صاحب گاز تغییر سیاست از صادرات گاز چه به صورت خط لوله و یا مایع شده به فرایندهای تبدیل گاز می‌باشد. هم اکنون بسیاری از کشورهای فاقد منابع گازی به تحقیقات بر روی فرایندهای تبدیل گاز روی آورده‌اند تا با فروش تکنولوژی ضمن کسب درآمد سلطه تکنولوژی و سیاسی خود را بر سایر کشورها تداوم بخشند.

ایران در جایگاه طبیعی خود و با کشف میادین فوق بزرگ و بزرگ نفت و گاز دومین دارنده این ذخایر در جهان می‌باشد. ۱۳۲/۴۶ میلیارد بشکه ذخیره نفت و ۲۷/۵۱ تریلیون مترمکعب ذخیره گاز قابل استحصال داراست. میدان گازی پارس جنوبی به عنوان بزرگترین منبع گازی که ۸ درصد کل ذخایر شناخته شده گاز جهان را در خود جای داده است. بر اساس آخرین برآوردها، چنانچه تولید از مخازن نفت و گاز ایران با روال کنونی ادامه یابد و ذخایر جدید کشف نگردد تولید نفت خام، مایعات و میعانات گازی حدود ۹۰ سال و گاز طبیعی نزدیک به ۲۰۰ سال ادامه خواهد یافت. بدین ترتیب

جمهوری اسلامی ایران به همراه سایر اعضای اوپک کماکان از غنی‌ترین تأمین‌کنندگان انرژی برای چرخش بی‌وقفه و مطلوب اقتصاد جهان در آینده به حساب خواهد آمد [۲]. و همین انگیزه‌ای اقتصادی برای توسعه فرایندهایی که متان را به مواد شیمیایی مطلوب و سوخت‌ها تبدیل می‌کند بوجود آورده‌است. جستجو برای چنین فرایندهایی توجه بسیاری از محققین را به خود جلب کرده است، بطوریکه حجم عظیمی از تحقیقات در دهه گذشته برای تبدیل مستقیم متان به اتیلن، متانول، فرمالدئید و غیره انجام شده است.

این تحقیقات روی واکنش‌های فاز گازی (غیر کاتالیستی و معمولاً در فشار بالا) و واکنش‌های کاتالیستی در محلول و روی سطوح جامد متمرکز شده است. اغلب تحقیقات تبدیل مستقیم متان به واکنش زوج شدن اکسایشی متان اختصاص یافته است.

یکی از تکنولوژی‌های ارتقای گاز طبیعی فرایند زوج شدن اکسایشی متان (OCM) است که از دیدگاه‌های مختلفی نظیر رویکرد کاتالیستی، فرایندی و ... قابل کنکاش و پژوهش است [۳]. زوج شدن اکسایشی متان روشی جالب و نوین برای تبدیل مستقیم گاز طبیعی به اتیلن است که ۲۵ سال پیش توسط کلر^۱ و بهازین^۲ انجام و مطرح شد و از آن زمان تا کنون هزاران کاتالیست برای واکنش فرایند OCM در قالب مقاله و پتنت در دنیا گزارش شده است. با اینحال این فرایند هنوز بصورت تجاری در نیامده است. در این فرایند متان و اکسیژن بعنوان واکنشگرهای اصلی به همراه یگ گاز حامل و بی اثر وارد راکتوری با دمای بالا می‌شوند و پس از انجام واکنش بر بستر کاتالیست، مخلوطی از فراورده‌ها عمدتاً شامل اتان، اتیلن (فراورده‌های مطلوب) و اکسیدهای کربن (فراورده‌های نامطلوب) را تولید می‌کنند. افزایش روز افزون مقالات و گزارش‌ها در سال‌های اخیر [۴-۶]، با موضوع زوج شدن اکسایشی متان (OCM) حکایت از رویکرد، اهتمام و تلاش جدی و چشمگیر گروه‌های پژوهشی متعدد

۱. Keller

۲. Bhasin

در مراکز علمی و صنعتی در بسیاری از کشورها به این مقوله در جهت دستیابی به دانش فنی این فرایند و افزایش مقیاس (Scale up) آن دارد. در این فرایند که یک واکنش دما - بالا است سئوالات اساسی که مطرح می‌باشد عبارتند از: ۱- با توجه به اینکه شرایط این واکنش به شرایط سوخت (احتراق) متان بسیار شبیه است چگونه می‌توان از واکنش‌های نامطلوب (واکنش‌های احتراق متان ممانعت کرد؟ ۲- با توجه به لزوم کار در دماهای بالا و شرایط شدیداً اکسایشی (وجود اکسیژن) چه کاتالیست‌هایی می‌توانند تحت این شرایط پایدار و فعال باشند؟ ۳- نظر به اینکه بازده این فرایند حاصلضرب درصد تبدیل متان در گزینش‌پذیری واکنش نسبت به تولید اتیلن است و از طرفی درصد تبدیل با گزینش‌پذیری معمولاً نسبت عکس دارد، حداکثر بازده را چگونه می‌توان بدست آورد؟ ۴- اتیلن به عنوان فراورده واکنش از متان ناپایدار است، چگونه می‌توان از اکسایش اتیلن تحت شرایط اکسایش متان ممانعت نمود؟ به جرأت می‌توان گفت که راه اصلی در پاسخ‌گویی به سئوالات مذکور در یافتن کاتالیست مناسب (پایدار، فعال و کنترل‌کننده) برای این فرایند، نهفته است. البته اگر چه کنترل شرایط فرایندی نیز از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است ولی این پارامتر در مرتبه دوم اهمیت یعنی پس از یافتن کاتالیست مناسب قرار دارد.

با توجه به پتانسیل‌های بالقوه ایران (وجود ذخایر عظیم گاز طبیعی و نیز توانمندی‌های صنعت پتروشیمی) و نظر به اینکه دستیابی به دانش فنی فرایند فوق‌الذکر از جمله زمینه‌های مطلوب در توسعه فنی - اقتصادی کشور می‌تواند باشد، لذا هدف اصلی در پروژه حاضر ساخت کاتالیست‌هایی کارآمد برای فرایند زوج شدن اکسایشی متان به عنوان یکی از اساسی‌ترین ملزومات در راستای صنعتی شدن این فرایند می‌باشد.

پایان‌نامه حاضر در فصل اول شامل شش بخش تئوری و تجربی می‌باشد در بخش دوم کاتالیست‌ها و روش‌های ساخت آنها، بخش سوم گاز طبیعی و فرایندهای تبدیل آن، بخش سوم مکانیسم‌ها و

سیستم‌های کاتالیستی کارآمد مورد بررسی قرار گرفته است، بخش پنجم به ساخت کاتالیست‌ها و تست راکتوری و بخش ششم به بحث و نتیجه‌گیری می‌پردازد.

امید است که این پروژه و دیگر پروژه‌های مشابه بتواند گام مؤثری در جهت پیشبرد علم و تکنولوژی گاز طبیعی در کشور بردارد و روزی برسد که بتوانیم بهترین استفاده را از منابع هنگفت و خدادادی گاز طبیعی در کشورمان داشته باشیم. انشاء ...

بخش دوم

کاتالیزت

۱-۲-۱- کاتالیست [۷]

کاتالیست یک گونه شیمیایی است که سرعت واکنش را افزایش می‌دهد اما معمولاً خود در ساختار فراورده مطلوب واکنش حضور ندارد. اثر کاتالیستی ناشی از کاهش سطح انرژی فعالسازی واکنش است. تئوری مصرف نشدن و عدم تغییر کاتالیست پس از واکنش تنها یک تصور نادرست از نحوه عمل کاتالیست در جریان واکنش است. تقریباً در تمامی موارد کاتالیست در خلال انجام واکنش دستخوش تغییر، فرسوده و یا حتی مصرف شدن است، بجز در موارد بسیار نادر نظیر اثر کاتالیستی یون پروتون در برخی واکنش‌ها در شرایط معتدل در محلول که تقریباً H^+ وارد شده در جریان واکنش تقریباً بطور کامل بازیابی می‌شود.

۱-۲-۲- فعالیت و گزینش پذیری^۱

فعالیت کاتالیست در حقیقت عملکرد آن بر سرعت واکنش تا رسیدن به مرحله تعادل است. بالا بودن فعالیت کاتالیست درصد تبدیل بالایی را در شرایطی که مقرون به صرفه باشد (فشار پایین، دمای پایین) عرضه می‌کند. پارامتر گزینش‌پذیری از مهم‌ترین پارامترهای ارزیابی عملکرد کاتالیست می‌باشد. گزینش‌پذیری یک کاتالیست نسبت به یک فراورده خاص تعریف می‌شود و عبارت است از:

$$\text{گزینش پذیری} = \frac{\text{مقدار محصول مطلوب تشکیل شده}}{\text{مقدار کل محصول}}$$

هر چه نوع کاتالیست مورد استفاده واکنش را بیشتر در جهت تولید محصولات دلخواه سوق دهد، به اصطلاح آن کاتالیست گزینش‌پذیرتر خواهد بود. گزینش‌پذیری معمولاً به فشار، دما، ترکیبات شرکت‌کننده در واکنش و همچنین طبیعت کاتالیست بستگی دارد.

۱. Activity and Selectivity