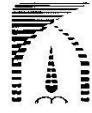


الله
بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِيْمِ



دانشگاه تربیت مدرس
دانشکده مهندسی شیمی

بسم الله الرحمن الرحيم

تاییدیه اعضای هیات داوران حاضر در جلسه دفاع از رساله دکتری

آقای محمد قشقائی چهارده چلیک رساله ۲۲ واحدی خود را با عنوان هیدروژن زدایی اتان
ارائه کردند ۱۳۹۰/۱۲/۹ از طریق کاتالیست های زئولیت صنعتی در تاریخ
اعضای هیات داوران نسخه نهایی این رساله را از نظر فرم و محتوا تایید کرده، پذیرش آنرا
برای اخذ درجه دکتری مهندسی شیمی پیشنهاد می کنند.

عضو هیات داوران	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضا
استاد راهنمای	دکتر رامین کریم زاده	دانشیار	
استاد ناظر	دکتر محمد رضا امیدخواه نسرين	استاد	
استاد ناظر	دکتر عبدالصمد زرین قلم مقدم	دانشیار	
استاد ناظر	دکتر سید محمدعلی موسویان	استاد	
استاد ناظر	دکتر یدالله مرتضوی	استاد	
مدیر گروه (یا نماینده گروه تخصصی)	دکتر عبدالصمد زرین قلم مقدم	دانشیار	

آیین‌نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهش‌های علمی دانشگاه تربیت مدرس

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی و فناوری دانشگاه در راستای تحقق عدالت و کرامت انسانها که لازمه شکوفایی علمی و فنی است و رعایت حقوق مادی و معنوی دانشگاه و پژوهشگران، لازم است اعضای هیأت علمی، دانشجویان، دانش‌آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهش‌های علمی که تحت عنوانین پایان‌نامه، رساله و طرحهای تحقیقاتی با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد زیر را رعایت نمایند:

ماده ۱- حق نشر و تکثیر پایان‌نامه/ رساله و درآمدهای حاصل از آنها متعلق به دانشگاه می‌باشد ولی حقوق معنوی پدیدآورندگان محفوظ خواهد بود.

ماده ۲- انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان‌نامه/ رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجتمع علمی باید به نام دانشگاه بوده و با تأیید استاد راهنمای اصلی، یکی از اساتید راهنمای، مشاور و یا دانشجو مسئول مکاتبات مقاله باشد. ولی مسئولیت علمی مقاله مستخرج از پایان‌نامه و رساله به عهده اساتید راهنمای و دانشجو می‌باشد.

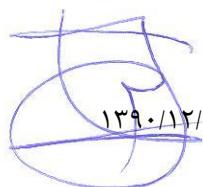
تبصره: در مقالاتی که پس از دانش‌آموختگی بصورت ترکیبی از اطلاعات جدید و نتایج حاصل از پایان‌نامه/ رساله منتشر می‌شود نیز باید نام دانشگاه درج شود.

ماده ۳- انتشار کتاب، نرم‌افزار و یا آثار ویژه (اثری هنری مانند فیلم، عکس، نقاشی و نمایشنامه) حاصل از نتایج پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی کلیه واحدهای دانشگاه اعم از دانشکده‌ها، مراکز تحقیقاتی، پژوهشکده‌ها، پارک علم و فناوری و دیگر واحدها باید با مجوز کتبی صادره از معاونت پژوهشی دانشگاه و براساس آئین‌نامه‌های مصوب انجام شود.

ماده ۴- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه یافته‌ها در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی که حاصل نتایج مستخرج از پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی دانشگاه باید با هماهنگی استاد راهنمای یا مجری طرح از طریق معاونت پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

ماده ۵- این آیین‌نامه در ۵ ماده و یک تبصره در تاریخ ۱۴/۴/۸۷ در شورای پژوهشی و در تاریخ ۲۳/۴/۸۷ در هیئت رئیسه دانشگاه به تأیید رسید و در جلسه مورخ ۱۵/۷/۸۷ شورای دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب در شورای دانشگاه لازم‌الاجرا است.

«اینجانب محمد قشقائی دانشجوی رشته مهندسی شیمی گرایش طراحی فرایند ورودی سال تحصیلی ۱۳۸۶ مقطع دکتری دانشکده مهندسی شیمی متعهد می‌شوم کلیه نکات مندرج در آیین‌نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهش‌های علمی دانشگاه تربیت مدرس را در انتشار یافته‌های علمی مستخرج از رساله تحصیلی خود رعایت نمایم. در صورت تخلف از مفاد آیین‌نامه فوق‌الاعمار به دانشگاه وکالت و نمایندگی می‌دهم که از طرف اینجانب نسبت به لغو امتیاز اختراع بنام بنده و یا هر گونه امتیاز دیگر و تغییر آن به نام دانشگاه اقدام نماید. ضمناً نسبت به جبران فوری ضرر و زیان حاصله بر اساس برآورد دانشگاه اقدام خواهم نمود و بدینوسیله حق هر گونه اعتراض را از خود سلب نمودم.»



امضا:

تاریخ: ۹۰/۱۲/۰۹

آیین نامه چاپ پایان نامه (رساله) های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان نامه (رساله) های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیتهای علمی- پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه، دانشآموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می شوند:

ماده ۱: در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله) خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اطلاع دهد.

ماده ۲: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه) عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان نامه کارشناسی ارشد / رساله دکتری نگارنده در رشته مهندسی شیمی است که در سال ۱۳۹۰ در دانشکده مهندسی شیمی دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی جناب آقای دکتر کریم‌زاده از آن دفاع شده است.»

ماده ۳: به منظور جبران بخشی از هزینه های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت چاپ) را به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر در معرض فروش قرار دهد.

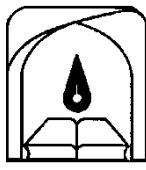
ماده ۴: در صورت عدم رعایت ماده ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت مدرس، تأديه کند.

ماده ۵: دانشجو تعهد و قبول می کند که در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می دهد به منظور استیفادی حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در ماده ۴ را از محل توقیف کتابهای عرضه شده نگارنده برای فروش، تأمین نماید.

ماده ۶: اینجانب محمد قشقائی دانشجوی رشته مهندسی شیمی مقطع دکتری تعهد فوق و ضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.

نام و نام خانوادگی: محمد قشقائی

تاریخ و امضا: ۱۳۹۰/۱۲/۰۹



دانشگاه تربیت مدرس

دانشکده مهندسی شیمی

رساله دکترای رشته مهندسی شیمی گرایش مهندسی فرایند

عنوان رساله

هیدروژن زدایی اتان بر روی کاتالیست های زئولیتی و تحلیل مدل های توزیع اندازه حفرات

نام دانشجو

محمد قشقائی

استاد راهنما

دکتر رامین کریمزاده

اسفند ۱۳۹۰

تقدیم به

پدر، مادر و خواهر عزیزم

و تمام کسانی که در مسیر زندگی به پیشرفت من کمک کرده‌اند.

چکیده

هیدروژن‌زدایی از اتان با استفاده از کاتالیست‌های غربال مولکولی مختلف در حضور یا غیاب دی‌اکسید کربن مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج بدست آمده از کاتالیست‌های اسیدی و حاوی فلزات قلیایی با نتایج حاصل از اکسیدهای کروم و آهن مورد مقایسه قرار گرفت. مکانیزم واقعی فعال‌سازی بر روی سایت‌های اسیدی با حذف مداخله‌ی ماده‌ی اکسیدان مورد بررسی قرار گرفته است. تمام کاتالیست‌های اسیدی در هیدروژن‌زدایی از اتان تأثیر منفی داشتند. حتی حضور اکسیژن نیز به عنوان یک اکسیدکننده‌ی قوی نتوانست مکانیزم غالب را تغییر دهد. اطلاعات تجربی ارائه شده ثابت کردند که یک مکانیزم فعال‌سازی اسید برونشتاد- باز لوئیس نمی‌تواند در این حالت مؤثر باشد. در نتیجه، یک مکانیزم اسید لوئیس- یون هیدرید به عنوان مسیر مناسب از اتان به اتیلن شناخته شد. اثر سایت‌های آلومینیوم در ساختار سیلیکونی در فعال‌سازی اتان نیز مورد بررسی قرار گرفت.

در بخش تئوری این رساله، به ارزیابی ویژگی‌های ساختاری کاتالیست‌های زئولیتی پرداخته شده است. سه نقطه‌ی عطف اصلی در خصوص کاربرد نظریه‌ی هورواٹ و کاوازوئه برای محاسبه‌ی توزیع اندازه‌ی حفرات در ساختار استوانه‌ای شناسایی و معرفی شده و نقاط قوت این مدل‌ها به تفکیک شرح داده شده است. نقايس مدل‌های قدیمی در فرمولاسیون ارائه شده در این رساله برطرف شده و در عین حال از تمام نقاط قوت مدل‌های قبلی نیز بهره گرفته شده است. انرژی‌های پتانسیل محاسبه شده توسط ریگ و ینگ به نحوی تعمیم داده شد که تمام برهمکنش‌های بین لایه‌ای و درون‌لایه‌ای را در بر گرفته و بطور همزمان فواصل انرژی بوجود آمده در فرمولاسیون ناپیوسته‌ی جدید با ترجمه‌ی مدل گستته به معادله‌ی انتگرالی از نوع معادله‌ای که توسط سیتو و فولی ارائه شد حذف گردید. عبارت تصحیح پر شدن حفره که توسط چنگ و ینگ معرفی شده بود نیز در مدل جدید در نظر گرفته شد، اما بجای فرض اصلی بکار رفته مبنی بر برازش معادله‌ی لانگموئر بر داده‌های منحنی ایزوترم ارزیابی مستقیم این عبارت از طریق حل عددی پیشنهاد شده است. صحت مدل پیشنهادی در

کاربرد آن برای چندین غربال مولکولی مورد آزمون قرار گرفته است. اندازه‌ی مجرای حفره‌ی محاسبه شده با مدل جدید با مقادیر متناظر از آنالیز بلورشناسی نمونه‌ها تطابق عالی داشتند.

کلید واژه: اتان، هیدروژن‌زادایی کاتالیستی، زئولیت، اکسایش، توزیع اندازه‌ی حفرات

فهرست مطالب

ج.....	فهرست علائم و نشانه‌ها	
ز.....	فهرست شکل‌ها و نمودارها	
ی.....	فهرست جداول	
۲.....	۱ مقدمه	۱
۴.....	۱-۱ چارچوب رساله	
۷.....	۲ مروری بر مطالعات گذشته	۲
۷.....	۱-۲ مقدمه	۱-۲
۷.....	۲-۲ مرور مدل‌های ترمودینامیکی تعیین توزیع اندازه‌ی حفرات بر مبنای ایزوترم جذب	۲
۷.....	۱-۲-۲ مقدمه	۱-۲-۲
۱۱.....	۲-۲-۲ تعمیم سیتو و فولی	
۱۲.....	۳-۲-۲ تصحیح چنگ و ینگ	
۱۵.....	۴-۲-۲ مدل اصلاحی ریگ و ینگ	
۱۹.....	۳-۲ هیدروژن‌زدایی از اتان در مجاورت کاتالیست‌های زئولیتی	
۱۹.....	۱-۳-۲ مقدمه	۱-۳-۲
۲۲.....	۲-۳-۲ اثر اسیدیتی پایه‌ی کاتالیست	
۲۵.....	۳-۳-۲ نقش دی اکسید کربن	
۲۷.....	۴-۳-۲ مکانیزم واکنش بر روی سایت‌های اسیدی و فلزات واسطه	
۳۳.....	۳ تعیین توزیع اندازه‌ی حفرات در مواد زئولیتی ریزحفره	۳
۳۳.....	۱-۳ مدل پیشنهادی	

۴۶	بحث و نتایج.....	۲-۳
۵۹	مکانیزم مؤثر برای فعالسازی اتان در مجاورت کاتالیست‌های زئولیتی	۴
۵۹	مقدمه	۱-۴
۶۰	بخش آزمایشگاهی.....	۲-۴
۶۰	کاتالیست‌ها.....	۱-۲-۴
۶۲	مجموعه‌ی آزمایشگاهی.....	۲-۲-۴
۶۵	آزمایش‌های کاتالیستی	۳-۲-۴
۶۷	آنالیز محصولات.....	۴-۲-۴
۶۸	بحث و نتایج.....	۳-۴
۶۸	ارزیابی اثر نفوذ حفره	۱-۳-۴
۷۱	فعالسازی بر روی سایت‌های اسیدی و یون‌های قلیایی	۲-۳-۴
۸۰	نقش فلز واسطه.....	۳-۳-۴
۸۵	تأثیر اسیدیته‌ی پایه‌ی کاتالیست.....	۴-۳-۴
۸۸	جمع‌بندی در خصوص مکانیزم مؤثر برای هیدروژن‌زدایی کاتالیستی از اتان ...	۵-۳-۴
۹۱	نتیجه‌گیری	۵
۹۴	پیشنهادها.....	۶
۹۵	فهرست مراجع	۷

فهرست علائم و نشانه‌ها

علامت	واحد	توضیح
<i>a</i>	—	پارامتر در معادلات ناپیوسته‌ی انرژی
<i>A</i>	$\text{J.cm}^6/\text{molecule}^2$	ثابت پراکندگی
<i>b</i>	—	پارامتر در معادلات ناپیوسته‌ی انرژی
<i>c</i>	m/s	سرعت نور در خلا
C_s	mol/m^3	غلظت ماده واکنشگر در سطح کاتالیست
C_{WP}	—	معیار وایز-پریتر
<i>d</i>	\AA	قطر مولکولی
<i>D</i>	m^2/s	نفوذپذیری
<i>E</i>	kcal/mol	انرژی فعالسازی
<i>F</i>	ml/min	شدت جریان حجمی ورودی به راکتور
<i>H</i>	kJ/mol	انتالپی جذب
<i>int</i>	—	تابع ریاضی حذف بخش اعشاری
<i>K</i>	mol/kg/Pa	ثابت تعادلی جذب
K_0	mol/kg/Pa	ضریب ماقبل تابع نمایی
<i>L</i>	—	تعداد کل لایه‌های مولکولی در یک حفره‌ی پر شده

جرم آزاد الکترون	kg	<i>m</i>
چگالی مولکولی به ازای مساحت سطح	molecule/cm ²	<i>N</i>
عدد آووگادرو	molecule/mol	N _{Avo}
تعداد مولکول‌ها در یک لایه	—	<i>N_i</i>
فشار ماده‌ی جذب شونده در فاز گاز	Pa یا bar	<i>P</i>
فشار اشباع بخار جذب شونده	bar	<i>P₀</i>
مقدار ماده‌ی جذب شده بر روی کاتالیست	mol/kg	<i>q</i>
شعاع بین هسته‌ای	Å	<i>r</i>
ثابت عمومی گازها	J/mol/K	R
	bar.ml/mmol/K	
سرعت هیدروژن‌زدایی بر مبنای جرم کاتالیست	mmol/min/g	<i>r_m</i>
سرعت هیدروژن‌زدایی بر مبنای حجم کاتالیست	mol/s/m ³	<i>r_v</i>
گزینش‌پذیری جزئی	—	<i>S</i>
دما مطلق	K	<i>T</i>
حجم ویژه	m ³ /kg	<i>V</i>
جرم کاتالیست	g	<i>W</i>
مقدار ماده‌ی جذب شده	mol/g	<i>w</i>
مقدار ماده‌ی جذب شده در نقطه‌ی اشباع یا کل مقدار	mol/g	<i>w₀</i>

مولکول‌های جذب شده به ازای گرم ماده‌ی جاذب

میزان تبدیل جزئی	—	x
کسر مولی	—	y
بازده جزئی	—	Y
حروف یونانی		
قطبش‌پذیری	$\text{cm}^3/\text{molecule}$	α
ثابت تعریف شده با معادله‌ی ۶-۲	—	a_k
مساحت سطح پوشیده شده توسط یک مولکول جذب شونده	$\text{m}^2/\text{molecule}$	β
ثابت تعریف شده با معادله‌ی ۷-۲	—	β_k
شعاع ذره کاتالیست	m	δ
برهمکنش انرژی پتانسیل	$10^{32} \text{ J/molecule}$	ε
میزان پر شدن حفرات یا کسر پوشش داده شده	—	θ
فشار سطحی	J/m^2	π
فاصله‌ی بین مولکولی در انرژی برهمکنش صفر	\AA	σ
مساحت کل برای سطح فرضی اشغال شده توسط تکلایه‌ای از مولکول‌های ماده‌ی جذب شونده به ازای گرم ماده‌ی جاذب	m^2/g	σ

قابلیت مغناطیسی	$\text{cm}^3/\text{molecule}$	χ
زیرنویس‌ها		
جذب شده یا جذب شده- جذب شده	—	a
آلکان یا ماده‌ی جذب شونده	—	A
مؤثر	—	eff
هِنری	—	H
شمارنده‌ی لایه‌های مولکولی ماده‌ی جذب شونده یا اجزای موجود در مخلوط واکنش	—	i
شمارنده‌ی جمع	—	k
متوسط	—	m
حفره	—	p
ماده‌ی جاذب یا جاذب- جذب شونده	—	s
کل	—	t

فهرست شکل‌ها و نمودارها

- شکل ۱-۲ تابعیت فشار نسبی از اندازه‌ی سطح مقطع مجرای حفره برای دو مدل حفره‌ی استوانه‌ای با تصحیح (سی‌وای) و بدون تصحیح (اس‌اف) معادله‌ی هنری با توجه به غیرایده‌آل بودن ایزوترم. محاسبات در تحقیق حاضر انجام شده است. ۱۳
- شکل ۲-۲ ارتباط بین اندازه‌ی مؤثر حفرات و فشار نسبی ماده‌ی جذب شونده بر اساس معادلات اصلی مدل ناپیوسته‌ی آروای. محاسبات در تحقیق حاضر انجام شده است. ۱۷
- شکل ۲-۳ نمونه‌ای از منحنی توزیع اندازه‌ی حفرات بدست آمده از مدل آروای برای جذب آرگون بر روی یک سطح ایده‌آل. محاسبات در تحقیق حاضر انجام شده است. ۱۸
- شکل ۴-۲ مکانیزم‌های محتمل برای هیدروژن‌زدایی از اتان در مجاورت سایتها کروم (برگرفته از لیلهاگ و همکاران [۸۷]). ۳۰
- شکل ۱-۳ نمای شماتیک مولکول‌های گاز در خصوص برهمکنش‌های محوری در نظر گرفته نشده بدون در نظر گرفتن برهمکنش‌های بین لایه‌ای. ۳۵
- شکل ۲-۳ منحنی توزیع اندازه‌ی حفرات برای AlPO-5 مورد مطالعه بر مبنای مدل جدید با فرض برآش معادله‌ی ایزوترم لانگموئر بر ایزوترم ارائه شده در مرجع [۱۰۷]. ۵۳
- شکل ۳-۳ منحنی توزیع اندازه‌ی حفرات برای AlPO-5 مورد مطالعه بر مبنای مدل جدید با استفاده از داده‌های واقعی ایزوترم ارائه شده در مرجع [۱۰۷]. ۵۴
- شکل ۴-۳ منحنی توزیع اندازه‌ی حفرات بدست آمده برای موردنیت مورد مطالعه بر مبنای مدل جدید با فرض معادله‌ی ایزوترم لانگموئر برای ایزوترم جذب گزارش شده در مرجع [۱۲۹]. ۵۶

- شکل ۳-۳ منحنی توزیع اندازه‌ی حفرات بدست آمده برای موردنیت مورد مطالعه بر مبنای مدل جدید با استفاده از داده‌های واقعی ایزوترم بدست آمده از مرجع [۱۲۹]. ۵۶
- شکل ۴-۱ تصویر شماتیک مجموعه‌ی آزمایشگاهی ساخته شده در آزمایشگاه کراکینگ و کاتالیست برای انجام آزمایش‌های شکست و هیدروژن‌زدایی کاتالیستی. ۶۴
- شکل ۴-۲ آرایش شیرها، ستون‌ها و آشکارسازها در دستگاه آنالیز گازهای پالایشگاهی بکار رفته در این تحقیق. ۶۸
- شکل ۴-۳ مقادیر سرعت بدست آمده برای هیدروژن‌زدایی بر روی کاتالیست‌های مختلف سدیمی و اسیدی. نتایج این آزمایش‌ها با دقت ۵ درصد تکرارپذیری داشته‌اند. ۷۲
- شکل ۴-۴ سیر زمانی نتایج هیدروژن‌زدایی از اتان در دمای ۶۵۰ درجه سانتیگراد بر روی H-SAPO-34 با نیتروژن به عنوان گاز حامل. ۷۴
- شکل ۴-۵ ساختار حالات گذار برای هیدروژن‌ناسیون اتیلن در مجاورت یک گروه اسیدی هیدروکسیل یا یون فلز قلیابی [۱۴۳]. ۷۶
- شکل ۴-۶ داده‌های مربوط به راندمان هیدروژن‌زدایی از اتان بر روی جامدات اسیدی مختلف در حضور اکسیژن به عنوان یک اکسیدان قوی در دمای ۶۵۰ درجه سانتیگراد و با استفاده از نسبت اتان به اکسیژن ۱/۴ در جریان حامل نیتروژن. ۸۰
- شکل ۴-۷ راندمان کاتالیست‌های کاتالیستی کروم و آهن در هیدروژن‌زدایی از اتان در دمای ۶۵۰ درجه سانتیگراد. ۸۲
- شکل ۴-۸ اثر میزان بارگذاری کروم بر روی MCM-41 در واکنش‌های هیدروژن‌زدایی از اتان در درجه‌ی سانتیگراد با دی اکسید کربن به عنوان ماده‌ی همراه. ۸۳

شکل ۹-۴ اثر تغییر زمان تماس بر تولید اتیلن بر روی Cr/MCM-41 در ۶۵۰ درجه سانتیگراد با استفاده از دی اکسید کربن (خط پرنگ) یا نیتروژن (خط کمرنگ) به عنوان ماده‌ی همراه. ۸۴ قسمت‌های الف و ب به ترتیب بازده اتیلن و سرعت هیدروژن‌زادایی را نشان می‌دهند.

فهرست جداول

جدول ۱-۲ خلاصه‌ای از مهم‌ترین پیشرفتهای صورت گرفته در خصوص سیستم کاتالیستی مناسب

برای هیدروژن‌زدایی از اتان. ۲۰.....

جدول ۱-۳ الگوریتم مرحله به مرحله تعیین توزیع اندازه‌ی حفرات میکروی استوانه‌ای شکل. ۴۵.....

جدول ۲-۳ خواص فیزیکی بکار رفته در محاسبه‌ی توزیع اندازه‌ی حفرات. ۴۸.....

جدول ۳-۳ نتایج تخلخل‌سنگی با آرگون برای زئولیت‌ها و مواد زئوتیپ منتخب با ساختار شناخته

شده بر اساس اطلاعات ایزووترم گزارش شده در متون مرتبط از طریق سه مدل نوع اچ‌کی شامل مدل

جدید با استفاده از داده‌های واقعی منحنی ایزووترم (New-A)، مدل جدید یا ایزووترم لانگموئر (New-L)

و مدل اس‌اف با تصحیح سی‌وای (SF-CY). ۵۲.....

جدول ۴-۱ خواص نمونه‌های کاتالیست. ۶۰.....

..... فصل اول ::::

مقدمه

تبديل متان و آلkan‌های سبک به سوخت و مواد شیمیایی واسطه، مسأله‌ای جدی در قرن بیست و یکم محسوب می‌شود [۱]. بطور خاص، اتان به عنوان دومین ترکیب فراوان و ارزان قیمت موجود در گاز طبیعی توجه زیادی را به خود معطوف کرده است. هرچند، محدودیت ترمودینامیکی و دشواری تأمین شرایط مناسب برای فعال‌سازی انتخاب‌پذیر این ماده‌ی هیدروکربنی از تجاری‌سازی روش‌های پیشنهاد شده برای تبدیل این ماده جلوگیری کرده است. بر اساس مطالعات انجام شده می‌توان گفت که در میان تحقیقاتی که تا کنون در خصوص هیدروژن‌زدایی از آلkan‌ها صورت گرفته‌اند، تبدیل اتان و افزایش راندمان آن از پیشرفت نسبی کمتری برخوردار بوده است. بطور خاص، اثر اسیدینگی و ساختار مجرها و قفسه‌ها در زئولیت‌های کوچک‌حفره برای فعال‌سازی اتان به اندازه‌ی کافی مورد مطالعه قرار نگرفته است. این مطالب، انگیزه‌ی اصلی این تحقیق را تشکیل می‌دهند.

هیدروژن‌زدایی کاتالیستی از اتان و سایر آلkan‌های سبک (پروپان و بوتان) به عنوان یک روش جدید و مقرن بصره‌ی تولید اولفین‌ها بطور گسترده موضوع مطالعه‌ی پژوهشگران قرار گرفته است. از سوی دیگر، در حدود ۴۰٪ از کاتالیست‌های مورد استفاده در فرایندهای متنوع کاتالیستی صنایع شیمیایی و پتروشیمیایی را زئولیت‌ها و کاتالیست‌های بر پایه‌ی زئولیت تشکیل می‌دهند [۲]. این کاتالیست‌ها با توجه به گزینش‌پذیری فضایی و دیگر خواص منحصر بفردشان توجه خاصی را به خود معطوف کرده‌اند، به نحوی که رشد ثبت اختراعات در زمینه‌ی استفاده از کاتالیست‌های زئولیتی بین سال‌های ۲۰۰۰ تا ۲۰۰۶ بطرز چشمگیری افزایش یافته است [۳].