دانشکده شیمی

گروه شیمی کاربردی

پایاننامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته شیمی کاربردی

عنوان

بررسی حذف برخی از ترکیبات آلی فرار(VOCs) به روش اکسایش کاتالیستی توسط کاتالیست های ZSM-5 اصلاح شده با فلزات واسطه با ساختار نانودر یک راکتور لوله ای بستر ثابت

استاد راهنما

دکتر علیقلی نیایی

استادان مشاور

دکتر داریوش سالاری- دکتر معصومه خاتمیان

پژوهشگر

سید علی حسینی

بهمن ماه 1386

با تقدیر و تشکر از:

- جناب آقای دکتر علیقلی نیایی بخاطر سرپرستی و راهنمایی پایاننامه
- جناب آقای دکتر داریوش سالاری و خانم دکتر معصومه خاتمیان اساتید گرانقدر مشاور، بخاطر راهنماییهای سازنده شان
- جناب آقای دکتر کریمی بخاطر قبول زحمت داوری پایاننامه
- جناب آقای دکتر علی اولاد، مدیریت محترم گروه شیمی کاربردی
- جناب آقای دکتر مجیدی ریاست محترم دانشکده شیمی
- جناب آقای دکتر خاندار معاونت محترم آموزشی دانشکده
- جناب آقای دکتر نیایی معاونت محترم پژوهشی دانشکده
- اساتید محترم گروه شیمی کاربردی که در طول دوره کارشناسی و کارشناسی ارشد از محضر علمی ایشان بهره مند گردیده ام
- اساتید محترم دانشکده شیمی که در مراحل مختلف تحصیل از محضر علمی ایشان بهره مند شده ام
- کارکنان محترم دانشکده در بخشهای مختلف اداری، آموزشی و خدماتی
- دوستان هم آزمایشگاهی آقایان سید رضا نبوی، حیدر رنجبر، پرویز فتحی، رضا عالش زاده و مرتضی درخشانی، پادرا چیت ساز یزدی، خلیل حمیدی
- خانم ها جدایی، آقازاده، شریفی، سلیمانی و قویدل
- تمام دوستان عزیزم درگروه شیمی کاربردی
- و همچنین از تمام کسانی که به نحوی در پیشبرد این کار تحقیقاتی سهیم بوده اند.

با سپاس و قدر دانی فراوان از

آقای دکتر علیقلی نیایی

بخاطر سرپرستی و راهنمایی پایاننامه

تقدیم به

خانوادهٔ عزیزم

که همواره یار و یاور من در تمام مراحل زندگی بوده اند.

نام خانوادگی دانشجو: حسینی **نام**: سید علی

عنوان پایان نامه: بررسی حذف برخی از ترکیبات آلی فرار (VOCs) به روش اکسایش کاتالیستی توسط کاتالیست های ZSM-5 اصلاح شده با فلزات واسطه با ساختار نانودر یک راکتور لوله ای بستر ثابت

استاد راهنما: دکتر علیقلی نیائی

استادان مشاور: دکتر داریوش سالاری، دکتر معصومه خاتمیان

مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد **رشته**: شیمی **گرایش**: کاربردی **دانشگاه** : تبریز

دانشکده: شیمی **تاریخ فارغ التحصیلی**: بهمن 1386 **تعداد صفحه**: 105

کلید واژه ها: اکسایش کاتالیستی،ترکیب آلی فرار ،کاتالیست HZSM-5، شبیه سازی، CFD

چکیده

کاهش انتشار ترکیبات آلی فرار (از اصلی ترین آلاینده های هوا) به هوا از ضروریات بشمار می رود و از بین انواع روشهای تخریبی مورد استفاده برای کاهش این ترکیبات، اکسایش کاتالیستی از مناسبترین روشها محسوب می شود. در این پروژه، ابتدا کاتالیستهای زئولیتی HZSM-5 اصلاح شده بفرم پروتونی و HZSM-5 اصلاح شده با فلزات واسطه کبالت و مس تهیه گردیدند. ساختار زئولیت با استفاده از تکنیک های XRD و TEM مطالعه گردید. این روشها نانو بودن قطر ذرات زئولیت را اثبات کرد. مقدار فلزات بارگیری شده در هر یک کاتالیستها با استفاده از تکنیک ICP-AES تعیین گردید.

فرایند اکسایش کاتالیستی در فاز گازی اتیل استات و تولوئن (از مهمترین ترکیبات آلی فرار و از آلاینده های هوا) بر روی نانوکاتالیست های مذکور بررسی و پارامترهای موثر بر راندمان تبدیل کاتالیتیکی ترکیبات فوق نظیر اثر دما، غلظت ورودی، زمان عملیاتی، اثر فلز واسطه و نوع آن، تاثیر بخار آب و نیز اثر اختلاط آلاینده های فوق مطالعه گردیدند. نتایج نشان داد که افزایش دما باعث افزایش میزان تبدیل می گردد. غلظت بالای ترکیب آلی فرار در خوراک ورودی باعث کاهش میزان تبدیل کاتالیتیکی می گردد. همچنین وارد کردن فلزات کبالت و مس به ساختار زئولیت، باعث افزایش فعالیت کاتالیستی و افزایش راندمان تبدیل می گردد. از بین کاتالیستهای اصلاح شده، کاتالیست اصلاح شده با مس فعالیت کاتالیستی بالاتری را نشان داد. وجود بخار آب در خوراک ورودی، اثر منفی روی راندمان تبدیل نشان داد.

فرایند اکسایش کاتالیستی این آلاینده ها با استفاده از روشCFD شبیه سازی گردید. نتایج حاصل از شبیه سازی مطابقت خوبی را با نتایج تجربی نشان داد و از روی آن مقادیر پارامترهای مدل مارس وان کرولن بکار گرفته شده در شبیه سازی اصلاح گردیدند. همچنین از شبیه سازی برای پیش بینی رژیم حرارتی سیال در داخل راکتور استفاده گردید.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

مقدمه 1

فصل 1: بررسی منابع و مرور موضوع

1-1- ترکیبات آلی فرار 3

2-1- اثرات زیست محیطی ترکیبات آلی فرار 3

3-1- تاثیر روی سلامتی انسان 4

4-1- ضرورت حذف ترکیبات آلی فرار 4

1- 5- روش های حذف ترکیبات آلی فرار از فاز گازی 4

1- 5 – 1 - روش های اکسایشی ترکیبات آلی فرار 6

1 – 5- 1- 1- استفاده از راکتور با جریان معکوس 6

1- 5- 1- 2- استفاده از اکسایش حرارتی 7

1- 5- 1- 3- استفاده از اکسایش کاتالیستی 7

1- 5- 1- 3- 1- مزیت اکسایش کاتالیستی 8

1- 6- کاتالیست 9

1- 6-1- معایب کاتالیست های فلزات نجیب 11

1- 7- انواع پایه برای استفاده در تثبیت فلزات واسطه 13

1- 7-1- کربن فعال 13

1- 7-2- آلومینا 14

1-7-3- زئولیتها 14

1-7-3-1- مزیت استفاده از ZSM-5 بعنوان بستر کاتالیستی در فرایند اکسایش کاتالیستی ترکیبات آلی فرار 22

1-7-3-2- تاثیر افزایش فلزات واسطه روی زئولیت ZSM-5 22

1-7-3-3- فعالیت کاتالیستی کبالت در داخل زئولیت ZSM-5 23

1-7-3-4- طرز قرار گیری و فعالیت کاتالیستی مس در زئولیت ZSM-5 24

1-8-شبیه سازی با استفاده از روش دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) 26

1-8-1- مقدمه ای بر CFD 26

1-8-2- اساس حل مسئله با CFD 26

1-8-3- نحوه کار با برنامه CFD 27

1-8-3-1- پیش پردازنده 27

1-8-3-2- حلگر 27

1-8-3-2-1- روش های اختلاف محدود 28

1-8-3-2-2- روش عناصر محدود 28

1-8-3-2-3- روش های طیفی 28

1-8-3-2- 4- پس پردازنده 28

1-8-4- استفاده از CFD برای شبیه سازی اکسایش ترکیبات آلی فرار 29

1-9- اهداف پروژه حاضر 31

فصل 2: مواد و روش ها

2-1- مواد 34

2-2- وسایل و تجهیزات 35

2-3- سامانه (Set up) مورد استفاده برای مطالعه فرایند اکسایش کاتالیتیکی یک

آلاینده..... 36

2-4- 2-4- سامانه (Set up) مورد استفاده برای مطالعه اکسایش مخلوط آلاینده ها.....37

2-5- اصلاح کاتالیست 38

2-5- 1- اصلاح کاتالیست ZSM-5 بفرم پروتونی (HZSM-5) 38

2-5-2- اصلاح کاتالیست HZSM-5 با فلزات واسطه 38

2-6- تهیه گرانول از پودر کاتالیست HZSM-5 39

2- 7- آماده سازی فیلم کاتالیستی از پودر کاتالیست..... 39

2-8- مشخصات فیزیکی کاتالیست 40

2-9- تعیین مشخصات کاتالیست 40

2- 9- 1- تعیین مقدار فلز با استفاده از روش نشر اتمی با استفاده از پلاسمای جفت شده القایی (ICP) 40

2-9- 2- شناسایی و تعیین اندازه ذرات با استفاده از پراش اشعه ایکس 40

2-9- 3- تعیین اندازه ذرات با استفاده از روش میکروسکپی الکترونی پیمایشی(TEM)..... 41

2-10- نمونه برداری از ورودی و خروجی راکتور 41

2- 11- فرایند اکسایش ترکیبات آلی فرار..... 41

2-11- 1- اکسایش کاتالیستی اتیل استات در فاز گازی با استفاده از کاتالیست های Cu-HZSM-5، Co-HZSM-5 و HZSM-5 42

2-11-2- اکسایش کاتالیستی تولوئن در فاز گازی با استفاده از کاتالیست های CO-HZSM-5 ، Cu-HZSM-5 و HZSM-5 44

2-11-3- اکسایش کاتالیستی مخلوط اتیل استات و تولوئن در فاز گازی با استفاده از کاتالیست های CO-HZSM-5 ، Cu-HZSM-5 و HZSM-5 44

2-12- آنالیز نمونه ها 44

2-13- شبیه سازی فرایند بروش CFD 45

2-13-1- طراحی مدل هندسی 45

2-13-2- ایجاد مش در نرم افزار Gambit 45

2-13-3- تعیین حل کننده 46

2-13-4- تعیین مرزها در راکتور بستر ثابت 46

2-13-5- شبیه سازی فرایند با استفاده از Fluent 47

فصل 3: نتایج و بحث

3-1- روابط شیمیایی مربوط به اصلا ح کاتالیست 49

3-2-شناسایی کاتالیست 49

3-2-1- استفاده از نتایج اسپکتروسکپی پراش اشعه ایکس (XRD) 49

3-2-2- شناسایی کاتالیست های Co-HZSM-5 و Cu-HZSM-5 با استفاده از XRD 52

3-2-3- نتایج آنالیز با ICP 59

3-2-4- آنالیز با TEM 60

3-3- بررسی نتایج مطالعه فرایند اکسایش کاتالیتیکی تولوئن و اتیل استات 61

3-3- 1- اکسایش کاتالیتیکی اتیل استات 61

3-3-1-1- اکسیداسیون اتیل استات بر روی HZSM-5 61

3-3-1-1-1- بررسی اکسایش کاتالیستی اتیل استات بر روی HZSM-5 در دماهای مختلف 61

3-3-1-1-2- بررسی اثر غلظت ورودی اتیل استات روی میزان اکسایش کاتالیتیکی 62

3-3-1-1-3- بررسی تاثیر زمان عملیات روی میزان تاثیر تبدیل اتیل استات 63

3-3-1-2- اکسایش اتیل استات بر روی کاتالیست Cu-ZSM-5..... 63

3-3- 1-2-1- بررسی اثر دما روی میزان تبدیل استات بر روی کاتالیست Cu-ZSM-5 63

3-3-1-2-2- بررسی اثر غلظت ورودی اتیل استات روی میزان تبدیل بر روی کاتالیست Cu-HZSM-5 64

3-3-1-3- اکسایش اتیل استات روی کاتالیست های HZSM-5 اصلاح شده با کبالت 65

3-3-1-3-1- بررسی تبدیل کاتالیستی اتیل استات بر روی (Co-HZSM-5 (2.5 wt%
در دماهای مختلف 65
3-3-1-3-2- بررسی تبدیل کاتالیستی اتیل استات بر روی (Co-HZSM-5 (1.5 wt%
در دماهای مختلف 66
3-3-1-3-3- بررسی تبدیل کاتالیستی اتیل استات بر روی (Co-HZSM-5 (0.5 wt%
در دماهای مختلف 66
3-3-1-3-4- اثر میزان فلز کبالت در کاتالیست روی میزان تبدیل اتیل استات 67
3-3-2- اکسایش کاتالیستی تولوئن 68
3-3-2-1-اکسایش کاتالیستی تولوئن بر روی کاتالیست HZSM-5 68
3-3-2-1-1- بررسی تبدیل کاتالیستی تولوئن در دماهای مختلف 68
3-3-2-2- 2- اکسایش کاتالیستی تولوئن بر روی کاتالیست Cu-HZSM-5 69
3-3-2-2-1- بررسی اثر دما بر روی فعالیت کاتالیستی کاتالیست در تبدیل تولوئن 69
3-3-2-3 - اکسایش کاتالیستی تولوئن بر روی Co-HZSM-5 69
3-3-2-3-1- بررسی میزان تبدیل تولوئن بر روی کاتالیست (CO-HZSM-5(2.5 wt %)..... 69
3-3-2-3-2- بررسی میزان تبدیل تولوئن بر روی کاتالیست (Co-HZSM-5(1.5 wt%)..... 70
3-3-2-3-3- بررسی میزان تبدیل تولوئن بر روی کاتالیست (Co-HZSM-5(0.5 wt% 71
3-3-2-3-4- بررسی اثر میزان فلز کبالت نشانده شده روی میزان تبدیل کاتالیستی تولوئن 71
3-3-2-3-5- تاثیر غلظت ورودی تولوئن روی میزان تبدیل کاتالیستی 72
3-3-3- بررسی اکسایش کاتالیستی مخلوط ترکیبات آلی فرار روی HZSM-5 و Cu-HZSM-5 73
3-4-3- بررسی اثر بخار آب روی میزان تبدیل کاتالیستی اتیل استات 75
3-5-3- تاثیر بخار آب روی میزان تبدیل تولوئن بر روی کاتالیست **(**1.5 wt%) Co-HZSM-5 76
3-4- مقایسه فعالیت کاتالیستی Cu-ZSM-5 و Co-ZSM-5 77

3-5- مقایسه میزان تبدیل کاتالیستی هریک از آلاینده ها بر روی کاتالیست ها 77

3-6 - بررسی میزان تبدیل کاتالیستی مخلوط الاینده ها بر روی کاتالیست 77

3-7 - مکانیسم تاثیر بخار آب بر میزان تبدیل آلاینده ها روی کاتالیست 78

3-8- شبیه سازی فرایند اکسایش کاتالیستی اتیل استات و تولوئن با استفاده از CFD 79

3-8-1- مدلهای سینتیکی موجود برای اکسایش کاتالیستی ترکیبات آلی فرار در فاز گازی 80

3 -8-2- نتایج شبیه سازی..... 83

3-8-2-1-1- بررسی فعالیت کاتالیستی کاتالیست ZSM-5 در دماهای مختلف برای اکسایش اتیل استات 83

3-8-2-1-2- بررسی تاثیر میزان اکسیژن در خوراک ورودی بر میزان تبدیل اتیل استات 84

3-8-2-1-3- بررسی تغییرات درداخل راکتور در انجام فرایند کاتالیستی اتیل استات..... 86

3-8-2-1-3- 1- فشار 86

3-8-2-1-3-2- کسر مولی اتیل استات در روی کاتالیست 87

3-8-2-1-3-3- تغییرات کسر مولی اتیل استات در داخل راکتور 88

3-8-2-1-3-4- تغییرات سرعت نشست اکسیژن بر روی سطح کاتالیست در طول مرحله اکسید شدن کاتالیست 88

3-8-3-1- بررسی فعالیت کاتالیستی در دماهای مختلف برای اکسایش تولوئن 95

3-8-3-2- بررسی تاثیر غلظت اکسیژن در ورودی روی میزان تبدیل تولوئن 96

3-8-3-3- بهره تولید کربن دی اکسید در طول اکسایش تولوئن در دماهای مختلف 97

3-8-3-4- بررسی کانتورهای فشار، دما، غلظت در داخل راکتور در طول اکسایش کاتالیستی تولوئن 98

3-9- نتیجه گیری..... 103

3-10- پیشنهاد برای کارهای آینده 105

فهرست مطالب

مراجع

پیوست ها

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

جدول 1- انواع ترکیبات آلی فرار 3

جدول 2- مشخصات مواد مورد استفاده 34

جدول 3- وسایل و تجهیزات بکار رفته..... 35

جدول 4- مشخصات Set up مورد استفاده برای اکسایش یک ترکیب آلی فرار گازی 36

جدول 5- مشخصات Set up مورد استفاده برای اکسایش مخلوط ترکیبات آلی فرار 37

جدول 6- مشخصات XRD برای کاتالیست H-ZSM-5 51

جدول 7- داده های XRD برای کاتالیست Co-HZSM-5 54

جدول 8- مشخصات طیف XRD برای Cu-HZSM-5 56

جدول 9 - نتایج آنالیز کاتالیست با ICP 59

جدول 10 – مشخصات سینتیکی مورد نیاز برای اکسایش تولوئن در معادله مارس وان کرولن روی ZSM-5 ..... ۸۲

جدول 11– مشخصات سینتیکی مورد نیاز برای اکسایش اتیل استات در معادله مارس وان کرولن روی ZSM-5 ..... ۸۲

جدول12- بهره تولید کربن دی اکسید حاصل از اکسایش اتیل استات در دماهای مختلف 85

جدول 13- بهره کربن دی اکسید حاصل از اکسایش تولوئن در دماهای مختلف 97

فهرست اشکال

عنوان **صفحه**

شکل 1 - انواع روش های مختلف برای حذف ترکیبات آلی فرار از هوای آلوده 5

شکل 2 - شماتیک راکتور با جریان معکوس 7

شکل 3- وابستگی سرعت واکنش کاتالیتیکی در دماهای مختلف 9

شکل 4- ساختار زئولیت FAU 16

شکل 5- ساختار زئولیت هایZSM-5 17

شکل 6- موقعیت انواع کاتیونهای کبالت در شبکه زئولیت ZSM-5 23

شکل 7- موقعیت کبالت نوع آلفا و بتا در روی زئولیت ZSM-5 24

شکل8 : شماتیک Set up مورد استفاده برای اکسایش یک ترکیب آلی فرار در فاز گازی 36

شکل 9 : شماتیک Set up مورد استفاده برای اکسایش مخلوط ترکیبات آلی فرار در فاز گازی37

شکل 10- طیف XRD مربوط به نمونه کاتالیست HZSM-5 50

شکل11 - طیف XRD برای کاتالیست های Co-HZSM-5 53

شکل 12 -طیف XRD مربوط به کاتالیست Cu-HZSM-5 55

شکل 13 - مقایسه طیفهای XRD برای کاتالیست های HZSM-5 و Cu-HZSM-5 57

شکل 14- مقایسه طیفهای XRD برای کاتالیست های Co-HZSM-5 و HZSM-5 58

شکل 15- طیف TEM برای کاتالیست H-ZSM-5 60

شکل 16 - تاثیر دما روی فعالیت کاتالیستی HZSM-5 برای اکسایش کاتالیتیکی اتیل استات 61

شکل17 - بررسی اثر غلظت اتیل استات در فاز گازی روی میزان تبدیل 62

شکل 18- میزان تبدیل کاتالیتیکی اتیل استات در زمانهای عملیاتی مختلف 63

شکل19- تبدیل کاتالیتیکی اتیل استات بر روی کاتالیست Cu-HZSM-5 در دماهای مختلف 64

شکل20- تبدیل کاتالیتیکی اتیل استات در غلظت های متفاوتی از آن بر روی کاتالیست Cu-HZSM-5 64

شکل 21- تبدیل کاتالیتیکی اتیل استات بر روی Co-HZSM-5(2.5 w) در دماهای مختلف 65

شکل 22 - تبدیل کاتالیتیکی اتیل استات بر روی Co-HZSM-5 (1.5 wt در دماهای مختلف..... 66

شکل 23- تبدیل کاتالیتیکی اتیل استات بر روی Co-HZSM-5 در دماهای مختلف 67

شکل 24- مقایسه فعالیت کاتالیتیکی کاتالیستهایCo-HZSM-5 حاوی درصدهای متفاوت کبالت در تبدیل اتیل استات 68

شکل 25- تبدیل کاتالیتیکی تولوئن بر روی کاتالیست H-ZSM-5 در دماهای مختلف..... 69

شکل26- تبدیل کاتالیتیکی تولوئن بر روی Cu-HZSM-5 در دماهای عملیاتی مختلف 69

شکل27- تبدیل کاتالیتیکی تولوئن روی Co-HZSM-5(2.5 wt%) در دماهای مختلف 70

شکل 28- تبدیل کاتالیستی تولوئن روی Co-HZSM-5(1.5 w%) در دماهای مختلف 70

شکل 29- تبدیل کاتالیستی تولوئن روی Co-HZSM-5(1.5 w%) در دماهای مختلف 71

شکل 30- تبدیل کاتالیتیکی تولوئن بر روی مقادیر مختلفی از فلز کبالت مبادله شده در دماهای مختلف 72

شکل 31- تاثیر غلظت ورودی تولوئن بر روی میزان تبدیل کاتالیتیکی آن 72

شکل 32- تبدیل کاتالیتیکی مخلوط ترکیبات آلی فرار بر روی HZSM-5 در دماهای مختلف 73

شکل 33- تبدیل کاتالیستی مخلوط ترکیبات آلی فرار روی(1.5w%) Co-HZSM-5 در دماهای مختلف 74

شکل34 - بررسی اثر اختلاط روی میزان تبدیل هر یک از آلاینده ها 74

شکل 35- تبدیل کاتالیتیکی اتیل استات در حضور بخار آب 75

شکل 36- مقایسه تبدیل کاتالیتیکی اتیل استات در حالت بدون بخار و در حضور بخار آب 75

فهرست اشکال

شکل 37- تبدیل کاتالیتیکی تولوئن بر روی Co-HZSM-5 در حضور بخار آب 76

شکل 38- میزان تبدیل کاتالیستی تولوئن در هر دو حالت بدون و در حضور بخارآب 76

شکل 39- تغییرات عدد پکله شعاعی با N در راکتور بستر ثابت 79

شکل 40- آرایش گرانولهای کاتالیستی در آرایش N=2 80

شکل 41- مقایسه عملکرد کاتالیستی کاتالیتیکی ZSM-5 حاصل از نتایج تجربی و شبیه سازی با CFD 83

شکل 42- تاثیر میزان اکسیژن روی تبدیل اتیل استات 84

شکل 43- بهره تولید کربن دی اکسید حاصل از اکسایش تولوئن 86

شکل 44- نمایش افت فشار فاز گازی عبوری از داخل راکتور در طول فرایند اکسایش کاتالیستی اتیل استات 87

شکل 45- نمایش تغییرات کسر مولی اتیل استات در روی کاتالیست 87

شکل 46- تغییرات کسر مولی اتیل استات در طول راکتور 88

شکل 47- نمایش سرعت نشست اکسیژن بر روی کاتالیست..... 89

شکل48- کانتور تغییرات فشارفاز گازی در داخل..... 90

شکل 49- کانتور دما در داخل راکتور..... 90

شکل 50- کانتور مربوط به تغییرات کسر مولی اتیل استات در داخل راکتور در طول اکسایش کاتالیستی 91

شکل 51- کانتور مربوط به تغییرات کسر مولی اکسیژن در داخل راکتور..... 91

شکل 52- کانتور مربوط به سرعت جذب سطحی اکسیژن بر روی سطح کاتالیست 93

شکل 53- کانتور مربوط به رطوبت نسبی در طول راکتور..... 93

شکل 54- نمایش بردارهای سرعت سیال در روی کاتالیست 94

شکل 55- نمایش بردارهای سرعت سیال در داخل راکتور 94

فهرست اشکال

شکل 56- سرعت نشست اکسیژن بر روی کاتالیست در دماهای مختلف 95

شکل 57- مقایسه نتایج تجربی و شبیه سازی مربوط به اکسایش تولوئن در دماهای مختلف 96

شکل58 - نتایج تاثیر میزان غلظت اکسیژن ورودی روی میزان تبدیل تولوئن شبیه سازی شده با نرم افزار 96

شکل 59 - بهره تولید کربن دی اکسید حاصل از اکسایش کاتالیستی تولوئن 98

شکل 60- کانتور مربوط به فشار استاتیک سیال در داخل راکتور 99

شکل 61: کانتور مربوط به سرعت جذب شیمیایی اکسیژن روی سطح کاتالیست 99

شکل 62- کانتور مربوط به تغییرات کسر مولی تولوئن در داخل راکتور طی فرایند اکسایش کاتالیستی تولوئن 100

شکل 63- کانتور مربوط به تغییرات کسر مولی اکسیژن در داخل راکتور طی فرایند اکسایش تولوئن 100

شکل64- کانتور مربوط به تغییرات کیر مولی کربن دی اکسید در داخل راکتور طی فرایند اکسایش کاتالیستی 101

شکل 65- کانتور مربوط به تغییرات رطوبت نسبی در داخل راکتور طی فرایند اکسایش کاتالیستی 101

شکل66- بردارهای سرعت سیال در طول عبور از داخل راکتور طی فرایند اکسایش کاتالیستی تولوئن 102

شکل 67 - بردارهای سرعت مربوط به عبور سیال از روی کاتالیست طی فرایند اکسایش کاتالیستی تولوئن 102

بشر از زمانیکه زندگی خود را بر روی زمین شروع کرد، باعث آلودگی هوا شده است. انسان اولیه با روشن کردن آتش در واقع آلودگی هوا را باعث شده است. میزان این آلودگی به حدی بوده است که زمین قابلیت تحمل آن را داشته است. با گذشت زمان و متمدن شدن بشر، میزان آلودگی هوا بتدریج افزایش یافته است. با ظهور انقلاب صنعتی و استفاده از سوختهای فسیلی، آلودگی هوا رشد صعودی به خود گرفت و کم کم میزان این آلودگی از ظرفیت زمین فرارتر رفت و این مسئله تبدیل به یک فاجعه گردید. بطوریکه امروزه یکی از مهمترین مسائلی که پیش روی بشر امروزی است و حتی سلامت او را به خطر می اندازد آلودگی هوا می باشد. در پیدایش این آلودگی ترکیبات زیادی نقش دارند. ترکیباتی نظیراکسید های نیتروژن (NOx) ، اکسیدهای گوگود (SOx) و هیدروکربنهای نسوخته حاصل از وسایل نقلیه از آلاینده های مهم هوا بشمار می روند. ترکیبات آلی فرار یکی از مهمترین مواد بوجود آورنده این آلودگی محسوب می شوند. این ترکیبات از صنایع شیمیایی و پترو شیمیایی وارد محیط می شوند و باعث این آلودگی می گردند. این ترکیبات دسته های مختلفی از ترکیبات آلی را شامل می گردند. آلودگی هوا تنها محدود به این ترکیبات نمی شود. مطالعات اخیر در آمریکا نشان داده است که آلودگی هوای منازل حدود 3 برابر آلودگی هوای بیرون می باشد. این آلودگی ها از رایانه ها، پرینترها، وسایل الکتریکی و سایر وسایل مورد استفاده در منازل ناشی می شود که این وسایل به مرور ترکیباتی را از خود به محیط زیست وارد می کنند و باعث ایجاد آلودگی هوا می گردند. اثرات این ترکیبات بر روی زیست محیطی مختلف و سلامتی انسان باعث شده تا مقرراتی مبنی بر کاهش انتشار این ترکیبات به هوا اتخاذ شوند. همچنین روشهایی برای کنترل این ترکیبات به هوا بکار گرفته شوند. از آنجا که غلظت این ترکیبات به حدی است که ارزش بازیابی ندارند، بنابراین از روشهای تخریبی برای کاهش انتشار این ترکیبات به هوا استفاده می شود. از بین روشهای تخریبی مورد استفاده، اکسایش کاتالیستی بعلت دارا بودن یک سری از مزایا نسبت به سایر تکنیکهای آلی فرار مورد توجه قرار گرفته است و امروزه مطالعات گسترده ای در مورد این فرایند صورت می گیرد.

1- 1- ترکیبات آلی فرار

ترکیبات آلی فرار (VOCs) هیدروکربن هایی هستند که در دما و فشار معمولی فشار بخار آنها بیشتر از 10/3 کیلو پاسکال می باشد و براحتی بخار می شوند. ترکیبات آلی فرار در اکثر حلال های مورد استفاده در صنایع شیمیایی و پتروشیمیایی، حلالهای رقیق کننده، چربی زدا و پاک کننده، روان کننده و سوختهای مایع کاربرد دارند[1]. این ترکیبات خانواده های مختلف ترکیبات آلی را شامل می شوند که تعدادی از این ترکیبات در جدول زیر فهرست گردیده اند[2].

جدول 1 : انواع ترکیبات آلی فرار

ترکیب آلی	مثال
1 آروماتیک	بنزن، تولوئن، زایلن، نفتالن، استایرن
2 کتونها	استون ، متیل اتیل کتون
3 آلدئید ها	فرمالدئید، استالدئید
4 الکلها	متانول، اتانول، پروپانول، ایزوپروپیل الکل، اتیلن گلیکول
5 استاتها	متیل استات، اتیل استات، بوتیل استات
6 ترکیبات کلردار	متیل کلرید، پرکلرواتیلن، کربن تتراکلرید، متیل کلراید

2-1 - اثرات زیست محیطی ترکیبات آلی فرار

ترکیبات آلی فرار از مهمترین آلاینده های هوا و محیط زیست محسوب می شوند. برخی از ترکیبات آلی فرار با اکسید های نیتروژن موجود در هوا در حضور تابش خورشید واکنش داده و تولید ازن می کنند. با آنکه وجود ازن در لایه های بالایی بعلت جلوگیری از تابش ماورائ بنفش به سطح زمین مفید است ولی بر اساس گزارشات آژانس حفاظت از محیط زیست، وجود آن در لایه های پایین تر بعلت تاثیر روی عملکرد ششها باعث ایجاد مشکلات تنفسی شده و سلامتی انسان را در معرض خطر قرار می دهد. غلظت های