

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه آزاد اسلامی
واحد شاهرود

دانشکده فنی مهندسی، گروه مهندسی شیمی
پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد «M.Sc»
گرایش: مهندسی فرآیند

عنوان:

تعیین پارامترهای سینتیکی دی وینیل بنزن

استاد راهنما:

دکتر محمد ابراهیم زینالی

استاد مشاور:

دکتر صاحبعلی منافی

نگارش:

ملیحه امینی مقدم

زمستان ۱۳۹۱

سپاسگزاری

بعد از حمد و ستایش خداوند متعال که به من توفیق انجام این پژوهش را عطا فرمودند، لازم می‌دانم از جناب آقای دکتر محمدابراهیم زینالی که راهنمایی این پژوهش را بر عهده داشتند و در طول مراحل تحقیق با صبر و حوصله و جدیت، چراغ راه من بودند و در راهنمایی اینجانب از هیچ مساعدتی دریغ نورزیدند، سپاسگزاری نمایم. همچنین، از زحمات جناب آقای دکتر صاحبعلی منافی به عنوان استاد مشاور که از مشاورت ایشان بهره فراوانی بردم، کمال تشکر را دارم. در پایان لازم می‌دانم از تمامی افرادی که به طور مستقیم و غیرمستقیم در به ثمر رسیدن این کار تحقیقی مرا مرهون مساعدت و همکاری خود نمودند، صمیمانه تشکر و قدردانی نمایم.

تقدیم به

پدر و مادر نازنینم به پاس تمامی زحمات بی دریغشان

و

برادران خوبم که مشوقم بودند

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	چکیده.....
۲	مقدمه.....
۴	فصل اول:
۵	۱-۱. هدف
۵	۲-۱. پیشینه تحقیق
۶	۳-۱. روش کار و تحقیق.....
۷	فصل دوم: مروری بر مقالات انجام شده
۸	۱-۲. فرایند تهیه دی وینیل بنزن
۸	۲-۲. کاربردهای دی وینیل بنزن
۹	۳-۲. واکنش های دی هیدروژناسیون
۱۰	۱-۳-۲. بالا بردن سرعت واکنش دی هیدروژناسیون
۱۰	۲-۴. بررسی انتقال جرم کنترل کننده ی سرعت واکنش، در سیستم های کاتالیستی غیر همگن.....
۱۱	۲-۵. مراحل واکنش های کاتالیستی.....
۱۲	۲-۶. پدیده ی نفوذ در کاتالیست های هتروژن
۱۳	۲-۷. تکنولوژی راکتورهای دی هیدروژناسیون
۱۴	۲-۷-۱. طراحی راکتورهای کاتالیتیک
۱۶	۲-۸. غیر فعال شدن کاتالیست.....
۱۶	۲-۸-۱. کک چپست و چگونه تشکیل می شود
۱۷	۲-۹. شیمی دی هیدروژناسیون دی اتیل بنزن.....
۱۸	۲-۹-۱. سینتیک و مکانیسم واکنش دی اتیل بنزن
۱۹	۲-۱۰. سرعت واکنش هایی که با دخالت کاتالیزور جامد انجام میگیرند.....
۱۹	۲-۱۰-۱. معادله سرعت
۲۴	۲-۱۱. اثر دما روی میزان تولید دی وینیل بنزن و اتیل وینیل بنزن.....
۲۵	۲-۱۲. اثر میزان تزریق بخار آب روی میزان تولید
۲۶	۲-۱۳. اثر میزان تزریق گاز خنثی روی میزان تولید.....
۲۸	۲-۱۴. محاسبه ی خواص فیزیکی
۲۸	۲-۱۴-۱. ثابت تعادل ترمودینامیکی

۲۹	فصل سوم: روش انجام آزمایش
۳۰	۱-۳. وسایل مورد نیاز برای انجام این آزمایش
۳۰	۲-۳. فعالیت های آزمایشگاهی و عملی
۳۱	۱-۲-۳. شرح آزمایش
۳۲	۳-۳. کروماتوگرافی گازی-طیف سنجی جرمی (GC MASS)
۳۳	۱-۳-۳. قسمت های مختلف دستگاه
۳۳	۲-۳-۳. اساس کار با دستگاه
۳۶	۴-۳. نتایج آزمایش
۳۸	۵-۳. مشخصات و ویژگی های کاتالیست صنعتی
۳۸	۱-۵-۳. تست آنالیز عنصری (XRD)
۴۰	۲-۵-۳. تست اندازه گیری سطح ویژه (BET)
۴۲	فصل چهارم: نتایج و تحلیل داده ها
۴۳	۱-۴. اثر دما روی میزان تولید
۴۶	۲-۴. اثر وزن کاتالیست روی میزان تبدیل
۵۱	۳-۴. اثر تغییر دبی آب و دی اتیل بنزن روی میزان تبدیل
۵۳	۴-۴. تعیین پارامتر های سینتیکی
۵۳	۵-۴. واکنش های کاتالیتیکی
۵۴	۶-۴. معادلات سرعت واکنش
۵۴	۷-۴. معادلات پیوستگی برای واکنش دهنده ها
۵۴	۱-۷-۴. معادله جرمی
۵۸	۸-۴. روش تجربی برای بدست آوردن سرعت واکنش
۵۹	۹-۴. محاسبات انجام شده برای بدست آوردن ثابت سرعت و ثابت جذب
۶۰	۱۰-۴. میزان تبدیل و زمان ماند
۶۲	۱۱-۴. محاسبه ی ثابت تعادل ترمودینامیکی
۶۲	۱-۱۱-۴. محاسبه ی خواص ترمودینامیکی
۶۳	۲-۱۱-۴. گرمای واکنش
۶۷	فصل پنجم: نتیجه گیری
۶۸	۱-۵. نتیجه گیری
۶۹	5-2 پیشنهادات برای تحقیقات آینده
۷۰	منابع
۷۱	فهرست منابع
۷۴	چکیده انگلیسی

فهرست جدول‌ها

عنوان	صفحه
۱-۳. جدول: نتیجه آنالیز پیک جذب GC مربوط به نمونه بدست آمده از دی هیدروژناسیون دی اتیل بنزن در حضور ۴۰ گرم کاتالیست در دمای 600°C.....	۳۸
۲-۳. جدول: نتایج بدست آمده از تست آنالیز عنصری کاتالیست.....	۳۹
۱-۴. جدول: فشار جزئی و دبی مولی اجزاء خروجی از راکتور با دبی ۱۰ میلی لیتر بر ساعت دی اتیل بنزن.....	۵۷
۲-۴. جدول: فشار جزئی و دبی مولی اجزاء خروجی از راکتور با دبی ۸ میلی لیتر بر ساعت دی اتیل بنزن.....	۵۷
۳-۴. جدول: فشار جزئی و دبی مولی اجزاء خروجی از راکتور با دبی ۶ میلی لیتر بر ساعت دی اتیل بنزن.....	۵۷
۴-۴. جدول: سرعت واکنش.....	۵۹
۵-۴. جدول: ثوابت ظرفیت گرمایی اجزاء.....	۶۳
۶-۴. جدول: گرمای استاندارد تشکیل آنتالپی و انتروپی برای دی اتیل بنزن، اتیل وینیل بنزن، دی وینیل بنزن و هیدروژن.....	۶۴
۷-۴. جدول: آنتالپی تشکیل استاندارد و انتروپی دی اتیل بنزن و اتیل وینیل بنزن.....	۶۴
۸-۴. جدول: آنتالپی و انتروپی واکنش اول.....	۶۴
۹-۴. جدول: آنتالپی و انتروپی واکنش دوم.....	۶۵
۱۰-۴. جدول: تغییرات انرژی گیبس.....	۶۵
۱۱-۴. جدول: ثابت تعادل ترمودینامیکی واکنش‌ها.....	۶۶

فهرست شکل‌ها

عنوان	صفحه
۱-۲. شکل: مراحل واکنش ناهمگن کاتالیستی سیال- جامد $A_1 \rightarrow A_2$ که روی منافذ کاتالیست اتفاق می‌افتد.....	۱۲
۲-۲. شکل: مکانسیم‌های مختلف نفوذ.....	۱۳
۳-۲. شکل: واکنش تولید دی اتیل بنزن و اتیل وینیل بنزن.....	۱۷
۴-۲. شکل: تاثیر دما به ترتیب روی بازده ی اتیل وینیل بنزن، دی وینیل بنزن و تشکیل اتیل وینیل بنزن.....	۱۸
۵-۲. شکل: واکنش دی هیدروژناسیون دی اتیل بنزن.....	۱۹
۶-۲. شکل: سرعت واکنش بر حسب P_D در خوراک.....	۲۳
۷-۲. شکل: سرعت واکنش بر حسب P_E در خوراک.....	۲۳
۸-۲. شکل: اثر دما روی میزان تبدیل دی وینیل بنزن.....	۲۴
۹-۲. شکل: اثر دما روی میزان تبدیل اتیل وینیل بنزن.....	۲۵
۱۰-۲. شکل: اثر تزریق بخار آب روی میزان تبدیل دی وینیل بنزن.....	۲۶
۱۱-۲. شکل: اثر تزریق بخار اب روی میزان تبدیل اتیل وینیل بنزن.....	۲۶
۱۲-۲. شکل: اثر میزان تزریق گاز خنثی روی میزان تولید دی وینیل بنزن.....	۲۷
۱۳-۲. شکل: اثر میزان تزریق گاز خنثی روی میزان تولید اتیل وینیل بنزن.....	۲۷
۱-۳. شکل: سیستم استفاده شده در این آزمایش.....	۳۱
۲-۳. شکل: نحوه انجام آزمایش.....	۳۲
۳-۳. شکل: دستگاه GC/MS.....	۳۶
۴-۳. شکل: گراف مربوط به گاز کروماتوگرافی در ۶۰۰ درجه سانتیگراد.....	۳۷
۵-۳. شکل: گراف بدست آمده از تست عنصری کاتالیست.....	۳۹
۶-۳. شکل: گراف تست اندازه گیری سطح ویژه.....	۴۱
۱-۴. شکل: اثر دما روی میزان تبدیل ایزومر ۱ و ۳ اتیل وینیل بنزن.....	۴۴
۲-۴. شکل: اثر دما روی میزان تبدیل ایزومر ۱ و ۴ اتیل وینیل بنزن.....	۴۴
۳-۴. شکل: اثر دما روی میزان تبدیل ایزومر ۱ و ۳ دی وینیل بنزن.....	۴۵
۴-۴. شکل: اثر دما روی میزان تبدیل ایزومر ۱ و ۴ دی وینیل بنزن.....	۴۵
۵-۴. شکل: اثر دما روی میزان تبدیل اتیل وینیل بنزن و دی وینیل بنزن.....	۴۶
۶-۴. شکل: درصد تبدیل دی وینیل بنزن بر حسب مقدار کاتالیست.....	۴۷

- ۴-۷. شکل: درصد تبدیل اتیل وینیل بنزن بر حسب مقدار کاتالیست..... ۴۸
- ۴-۸. شکل: درصد تبدیل اتیل وینیل بنزن و دی وینیل بنزن بر حسب مقدار کاتالیست..... ۴۸
- ۴-۹. شکل: درصد تبدیل ایزومر ۱ و ۳ اتیل وینیل بنزن..... ۴۹
- ۴-۱۰. شکل: درصد تبدیل ایزومر ۱ و ۴ اتیل وینیل بنزن..... ۵۰
- ۴-۱۱. شکل: درصد تبدیل ایزومر ۱ و ۳ دی وینیل بنزن..... ۵۰
- ۴-۱۲. شکل: درصد تبدیل ایزومر ۱ و ۴ دی وینیل بنزن..... ۵۱
- ۴-۱۳. شکل: اثر تغییر دبی حجمی روی میزان تبدیل اتیل وینیل بنزن در حضور ۲۰ گرم کاتالیست..... ۵۲
- ۴-۱۴. شکل: اثر تغییر دبی حجمی روی میزان تبدیل دی وینیل بنزن در حضور ۲۰ گرم کاتالیست..... ۵۲
- ۴-۱۵. شکل: اثر تغییر دبی حجمی روی میزان تبدیل دی وینیل بنزن و اتیل وینیل بنزن در حضور ۲۰ گرم کاتالیست..... ۵۳
- ۴-۱۶. شکل: تغییرات فشار جزئی دی اتیل بنزن بر حسب تغییرات سرعت..... ۵۹
- ۴-۱۷. شکل: بدست آوردن ثابت سرعت و ثابت جذب..... ۶۰
- ۴-۱۸. شکل: میزان تبدیل دی اتیل بنزن بر حسب ثابت زمانی..... ۶۱
- ۴-۱۹. شکل: میزان تبدیل اتیل وینیل بنزن بر حسب ثابت زمانی..... ۶۱
- ۴-۲۰. شکل: میزان تبدیل دی وینیل بنزن بر حسب ثابت زمانی..... ۶۲
- ۴-۲۱. شکل: ثابت تعادل ترمودینامیکی واکنش دی هیدروژناسیون دی اتیل بنزن به اتیل وینیل بنزن..... ۶۶
- ۴-۲۲. شکل: ثابت تعادل ترمودینامیکی واکنش دی هیدروژناسیون اتیل وینیل بنزن به دی وینیل بنزن..... ۶۶

چکیده

آزمایش های سینتیکی در حضور کاتالیست صنعتی بر پایه ی اکسید آهن در یک راکتور لوله ای بستر ثابت تحت فشار اتمسفریک انجام می شود. آزمایش ها در دماهای ۴۰۰، ۴۵۰، ۵۰۰، ۵۵۰، ۶۰۰ درجه سانتیگراد و نسبت حجمی ۵ به ۱ برای آب و دی اتیل بنزن اما در دبی های مختلف ۴۰، ۵۰، ۳۰، ۲۰ و ۱۰ میلی لیتر بر ساعت برای اب و ۱۰، ۸، ۶، ۴ و ۲ میلی لیتر بر ساعت برای دی اتیل بنزن و دبی ۲۰ میلی لیتر بر دقیقه برای گاز نیتروژن که به عنوان گاز حامل و رقیق کننده می باشد در حضور اوزان مختلف کاتالیست (۴۰، ۳۰، ۲۰ و ۱۰ گرم کاتالیست) انجام شده است. طبق بررسی اثر دما، دمای بهینه برای تولید دی وینیل بنزن و اتیل وینیل بنزن ۶۰۰ درجه سانتیگراد می باشد، در بالاتر از این دما به دلیل انجام واکنش های کراکینگ حرارتی میزان تبدیل اتیل وینیل بنزن و دی وینیل بنزن کاهش می یابد. اثر دما روی میزان تبدیل دی وینیل بنزن و اتیل وینیل بنزن متفاوت است. با مطالعه ی اثر وزن کاتالیست روی میزان تبدیل دی وینیل بنزن و اتیل وینیل بنزن متوجه شدیم که با بالا رفتن وزن کاتالیست حجم موثر راکتور و درصد تبدیل دی وینیل بنزن و اتیل وینیل بنزن افزایش می یابد. و در آخر با استفاده از نتایج حاصل از گاز کروماتوگرافی ثابت سرعت، ضریب جذب و فشار جزئی اجزاء را محاسبه نموده ایم و نیز با تغییر در دبی خوراک ورودی فشار جزئی اجزاء را تغییر دادیم. مدل سینتیکی استفاده شده در این پروژه بر اساس مدل هوگن-واتسن^۱ می باشد.

کلمات کلیدی: دی اتیل بنزن، دی هیدروژناسیون، دی وینیل بنزن، زمان ماند، ثابت تعادل ترمودینامیکی

¹ Hogen-Watson

واکنشهای دی هیدروژناسیون کاربردهایی در تولید هیدروژن، آلکنها، آلدییدها و کتونها دارند. آلکنها مواد شیمیایی واسطه مهمی در تولید پلیمرها، لاستیکها، مواد شوینده، حلالها، مواد دارویی و حشره کشها هستند. از گذشته، منابع اصلی آلکنها شامل کراکینگ بخاری C_2 ، هیدروکربنها (عمدتا برای اتان و پروپن) و کراکینگ کاتالیتیک سیال می باشند. در هر حال اگر نیازی برای یک آلکن ویژه باشد اقتصادی نیست که یک واحد کراکر بخاری برای آن نیاز ویژه ساخته شود. از اینرو دی هیدروژناسیون یک روش منعطف و اقتصادی برای تولید یک آلکن تنها فراهم می کند. در حالی که آلدییدها و کتونها می توانند برآحتی از طریق اکسیداسیون آلکنها و یا الکلهای اولیه تهیه شوند، روشهای دی هیدروژناسیون برای یک محصول مورد نظر ممکن است به بعضی از معایب اکسیداسیون مانند سلکتیویته^۲ محدود و کمبود مواد اولیه فایق شود. دی هیدروژناسیون اتیل بنزن به استایرن و دی اتیل بنزن به دی وینیل بنزن از طرف دیگر به روشنی روش صنعتی مناسب برای این دو مونمر می باشد. از آنجاییکه دی هیدروژناسیون معکوس واکنش هیدروژناسیون است، در هر دو واکنش کاتالیستهای یکسانی استفاده می شود. شیمی واکنش برای این دو واکنش متفاوت است. حقیقت های زیر در مورد واکنشهای دی هیدروژناسیون وجود دارد که باید به آنها توجه کرد.

الف- دی هیدروژناسیون یک فرآیند گرماگیر است از اینرو میزان تعادل و سرعت واکنش در دماهای بالا زیاد می شود. همچنین در فشارهای پایین تبدیل بالاست چونکه حجم محصول از مواد اولیه تجاوز می کند.

ب- دی هیدروژناسیون فاز گازی بوسیله فشار جزئی پایین مواد اولیه تسریع می شود.

ج- خارج کردن هیدروژن از محصولات تعادل را بسمت تبدیلیهای بالا و سرعت دی هیدروژناسیون بالا سوق می دهد.

د- کاتالیستهای دی هیدروژناسیون کمتر به سمی شدن بدلیل جذب بازگشت پذیر در دماهای بالا حساس است. گرماگیری، دمای بالا و فشار پایین با پتانسیل واکنشهای رقیب مشکلاتی را در طراحی فرآیندهای دی هیدروژناسیون اقتصادی و کارا پدید می آورد.

راه های متعددی برای تقسیم بندی واکنش ها وجود دارد. در مورد مهندسی فعل و انفعالات شیمیایی بهترین روش تقسیم بندی بر اساس تعداد فاز های موجود می باشد. بطور کلی واکنش ها را به دو دسته

² Selectivity

ی همگن غیر همگن تقسیم می نمایند. واکنشی را همگن مینامند که تنها در یک فاز صورت بگیرد، و واکنشی را غیر همگن گویند که برای انجام آن حداقل دو فاز لازم باشد.

فصل اول

کلیات

۱-۱ هدف

یکی از فرایندهای مهم شیمیایی تهیه کاتالیست دی ونیل بنزن می باشد برای طراحی راکتور و تعیین ابعاد آن نیاز به پارامترهای سنتیکی می باشد در نشریات موجود این ثابت ها بصورت محدود برای کاتالیست های سنتزی تعیین شده است اما برای کاتالیست های تجاری اطلاعاتی در این زمینه وجود ندارد منظور تحقیق تعیین این پارامترها به قصد استفاده از آن برای طراحی واحد پایلوت دی ونیل بنزن می باشد. پارامترها شامل ثابت های سرعت و ثابت تعادل می باشد. ثابت های تعادل را از محاسبات ترمودینامیکی می توان بدست آورد اما ثابت های سرعت از طریق انجام آزمایش تهیه دی ونیل بنزن و یکسری محاسبات ریاضی قابل دستیابی است. حدود مسئله تعیین ثابت های سرعت و تعادل و همچنین چگونگی تابعیت آنها با دما می باشد. واکنشهای کاتالیتیک از معادلات معمول سینتیکی پیروی نمیکنند و برای سرعت آنها معادلات خاصی تعریف می شود که بستگی به فرآیندهای دیگر نظیر جذب دارد. جنبه های مجهول در حقیقت چگونگی تغییرات ثابت های سرعت با دما برای یک کاتالیست معین می باشد. متغیرها می تواند دما و نوع کاتالیست باشد. در این تحقیق نوع کاتالیست ثابت است. در این تحقیق بمنظور تعیین ثابت های سرعت چندین آزمایش با شرایط فرآیندی مختلف که باید تعریف شوند صورت گیرد و با استفاده از روش ریاضی پارامترها با دقت بالایی تخمین زده شوند.

۲-۱ پیشینه تحقیق

اولینگر^۳ و هاپف^۴ دی هیدروژناسیون دی اتیل بنزن را با رقیق کردن با بخار آب روی کاتالیست Olumozinc در دمای ۶۰۰ تا ۶۱۰ انجام دادند که در هر آزمایش دی ونیل بنزن با بازدهی ۴۰٪ بدست آمد [۲۱].

شارکین^۵ و بلندین^۶ دی هیدروژناسیون کاتالیتیکی دی اتیل بنزن را در دمای ۶۰۰ - ۶۳۰ با سرعت h^{-1} ۰/۲-۰/۲۵ با بخار آب انجام دادند [۲۲]. طبق داده ها توصیه شده است دی هیدروژناسیون دی اتیل بنزن در دمای ۵۰۰-۷۰۰ در حضور

بخار آب یا فشار روی کاتالیست های حاوی اکسید سریم [۲۳-۲۴]، همچنین روی مگنزیت، دولومیت کاهش می یابد [۲۶].

³ Ohlinger

⁴ Hopff

⁵ Sharkin

⁶ Blandin

۱. کی. بدگانوا^۷ و همکارانش آزمایش را با رقیق کردن دی اتیل بنزن با بخار آب به نسبت وزنی ۱ به ۳ انجام دادند، قبل از اینکه بخار آب وارد راکتور شود تا دمای ۳۰۰-۳۵۰ درجه سانتیگراد گرم می شود. بین انجام آزمایش ها مخلوط بخار هوا-هوا به کاتالیست دمیده می شود [۲۶].

۱-۳ روش کار و تحقیق

روش تحقیق در این پروژه از دو بخش مطالعاتی و آزمایشگاهی تشکیل شده است روش مطالعاتی به ما کمک می کند که طراحی آزمایش مناسبی برای موضوع در دست مطالعه انجام دهیم. گرد آوری اطلاعات عمدتاً کتابخانه ایست و آزمایش ها مکمل آن می باشد. سیستم آزمایشگاهی که مخصوص فرایند مورد نظر طراحی و ساخت شده است. از روش های ریاضی برای تجزیه و تحلیل نتایج و اطلاعات بدست آمده استفاده خواهد شد که جزییات آن در طول انجام پروژه مشخص خواهد شد.

⁷ O.K.Badganova

فصل دوم

مروری بر مطالعات انجام شده

۲-۱ فرایند تهیه دی وینیل بنزن

دی وینیل بنزن از طریق دی هیدروژناسیون کاتالیتیک دی اتیل بنزن در دماهای بالا و فشار اتمسفریک تهیه می شود. کاتالیست مورد استفاده در دی هیدروژناسیون اتیل بنزن اکسید آهن همراه با اکسید کروم و یکسری ترکیبات شیمیایی دیگر است. درکنار تولید دی وینیل بنزن اتیل وینیل بنزن و یکسری ترکیبات گازی و مایع دیگر تولید می شود. دی وینیل بنزنی که در صنعت استفاده می شود حاوی مقدار زیادی اتیل وینیل بنزن که بطور مستقیم بدون جداسازی بکار می رود. پارامترهای مختلفی در فرآیند تولید دی وینیل بنزن نقش دارند و فرآیند را تحت تاثیر قرار می دهند. مهمترین این پارامترها دما، مقدار کاتالیست، میزان تزریق بخار آب، نوع کاتالیست، اندازه ذرات قرص کاتالیست، اندازه منافذ قرص کاتالیست، و میزان تزریق گاز خنثی می باشد. از آنجاییکه واکنش دی هیدروژناسیون یک واکنش تعادلی است با بالا رفتن دما در صد تبدیل زیاد می شود. در مقالات منتشر شده در نشریات اطلاعات خیلی کمی در ارتباط با تولد دی وینیل بنزن وجود دارد. واکنش دی هیدروژناسیون دی اتیل بنزن خیلی شبیه واکنش دی هیدروژناسیون اتیل بنزن برای تولید استایرن است. در تهیه دی وینیل بنزن از دی اتیل بنزن، دی وینیل بنزن از طریق دی هیدروژناسیون مستقیم دی اتیل بنزن و همچنین دی هیدروژناسیون اتیل وینیل بنزن تولید می شود. واکنش دی هیدروژناسیون در یک راکتور بستر ثابت انجام می شود [۷].

۲-۲ کاربردهای دی وینیل بنزن

دی وینیل بنزن برای اصلاح خواص طیف وسیعی از مواد بکار می رود. مثلهایی که در اینجا آورده شده است فقط نمونه هایی از کاربردهای گسترده این ماده می باشد. بطور مداوم کاربردهای جدیدی برای این ماده ای شبکه ای کننده پیدا می شود.

الف- چسبها: دی وینیل بنزن برای اصلاح خواص دمایی بالا چسبهایی که برای اتصال آلومینیوم به آلومینیوم استفاده می شوند کاربرد دارد. این ماده در ایروسل آکرلیک برای چسباندن رزین باکلیت و فیلم پلی استر استفاده می شود. در این کاربرد زمان پاره گی خزشی را بطور چشمگیری افزایش می دهد. این ماده کاربردهایی در پلیمرهای شبکه ای استایرن بوتادین که در صنعت ساختمان کاربرد دارند پیدا کرده است.

ب- سرامیکها: در قطعات خاک رس باعث اصلاح خواص مکانیکی و فیزیکی می شود. در تهیه مواد کامپوزیت کربنی از طریق کر بونیزه کردن برای سخت کردن آنها بکار می رود.

ج- رزینهای کروماتوگرافی: دی وینیل بنزن برای تولید بسترهای فاز معکوس در کروماتوگرافی مایع کاربرد دارد. بسترهای پلی استایرن با درجه شبکه خیلی بالا دیده شده است که در شرایط سخت فشار و دمایی بالا بخوبی عمل می کنند. کروماتوگرافی تعویض یونی تقریباً برای جداسازی هر ماده باردار می تواند کاربرد داشته باشد از پروتئینهای بزرگ تا آمینو اسیدها.

د- کاربردهای دارویی: در خمیر دندانسازی و پروتز های دندانی هاردنس، مقاومت در برابر سایش و مقاومت خمشی را افزایش می دهد. در تهیه آنزیمها و اتصال بعضی از داروها به پلیمرها کاربرد دارد.

ه- کاربردهای نوری: پلاستیکها کاربردهای وسیعی در لنز های اپتیکی و فتوکرومیک پیدا کرده اند. این لنزها در بیرون تیره می شوند و در داخل روشن می شوند. دی وینیل بنزن به همراه دیگر منومرها و رنگها در تولید لنز های سبک و نازک بکار می روند.

و- پلاستیکهای کامپوزیت: مواد کامپوزیت معمولاً از یک رزین مانند پلی استر غیر اشباع و الیاف شیشه تشکیل شده اند. دی وینیل بنزن برای تهیه آمیزه های قابل پخت با شیرین کج پایین بکار رفته است و در این موارد سرعت تولید بالا بوده و سطح قطعات بسیار صاف بوده است و خواص اصلاح شده بهتری بدست آمده است [۳].

۲-۳ واکنش های دی هیدروژناسیون

واکنش دی هیدروژناسیون چیست؟ واکنش دی هیدروژناسیون که روی هیدروکربن ها انجام می شود به واکنشی اطلاق می شود که طی این واکنش با جدا شدن یک ملکول هیدروژن از ساختار هیدروکربن یک پیوند دوگانه در آن نقطه تشکیل می شود که این واکنش منتج به تشکیل شدن یک محصول جدید با خواص فیزیکی شیمیایی جدید می شود. پیوند دوگانه یک نقطه فعال شیمیایی محسوب می شود که اجازه می دهد تا یک اتم واسطه با قرار گرفتن روی کربنی که در یک سر این پیوند قرار دارد این پیوند را باز کرده و یک واکنش پلیمریزاسیون آغاز شود. واکنش دی هیدروژناسیون یک واکنش ساده به نظر می آید، در حالیکه بررسی مسائل ترمودینامیکی و سینتیکی این واکنش چنان پیچیدگی هایی دارد که حل هر یک از این مسائل منجر به یک نوع پیشرفت در تکنولوژی و صنایع مختلف می شود.

۲-۳-۱ بالا بردن سرعت واکنش دی هیدروژناسیون

انرژی لازم برای جدا شدن دو اتم هیدروژن (یک ملکول هیدروژن) از هیدروکربن شرکت کننده در واکنش دی هیدروژناسیون معمولاً مستقل از وزن ملکولی هیدروکربن بوده و در بازه 134 KJ/mol - ۱۱۳ قرار دارد. ذات واکنش دی هیدروژناسیون گرماگیر بوده و منجر به کاهش شدید دما در شرایط آدیاباتیک می شود. بعنوان مثال، دی هیدروژناسیون پروپان تا رسیدن به درصد تبدیل ۲۵٪ در شرایط آدیاباتیک منجر به کاهش دمایی برابر با ۲۰۰ درجه سانتیگراد می شود که واضح است هیچ کاتالیزوری نمی تواند برای جبران این افت دمایی و پیشرفت واکنش استفاده شود و بنابراین شرایط آدیاباتیک برای راکتور مناسب نبوده و باید از یک منبع حرارتی نیز برای پیشرفت واکنش دی هیدروژناسیون استفاده کرد [۶]. در بررسی شرایط ترمودینامیکی واکنش دی هیدروژناسیون پارافین ها نقش فشار را نباید نادیده گرفت، چرا که فشار داخل راکتور با پیشرفت واکنش در نتیجه آزاد شدن گاز طی واکنش و افزایش حجم گازهای داخل راکتور افزایش می یابد. بدین ترتیب استفاده از یک رقیق کننده برای کاهش حجم گازهای داخل راکتور و کاهش فشار داخل راکتور می تواند یک نکته مهم در جهت کمک به پیشرفت واکنش باشد.

برای افزایش سرعت واکنش دی هیدروژناسیون کارهایی از قبیل تنظیم دما، فشار و روش دی هیدروژناسیون اکسیداتیو از سیستم کاتالیزوری را می توان استفاده نمود [۱۰۶].

۲-۲ بررسی انتقال جرم کنترل کننده ی سرعت واکنش، در سیستم های کاتالیستی غیر همگن

محدودیت انتقال جرم نقش مهمی را روی سرعت همه ی واکنش ها و همچنین سرعت تبدیل و تشکیل محصولات در واکنش های کاتالیستی دارد. در واکنش های کاتالیستی همگن همه ی مواد (واکنش دهنده ها، محصولات و کاتالیست) در یک فاز می باشند و تاثیر انتقال جرم بین فاز ها را میتوان نادیده گرفت. در یک واکنش کاتالیستی ناهمگن کاتالیست ها معمولاً در فاز های مختلفی از واکنش دهنده ها می باشند و معمولاً کاتالیست ها در فاز جامد و واکنش دهنده ها در فاز گاز یا مایع می باشند، بنابراین سرعت واکنش به انتقال جرم یا نفوذ بین فاز ها وابسته است. تلاش های زیادی برای مشخص شدن نقش تاثیرات انتقال جرم روی سرعت واکنش انجام شده است. از آنجایی که واکنش های کاتالیستی وقتی اتفاق می افتد که مولکول های مواد واکنش دهنده در تماس با مکان فعال قرار می گیرند که معمولاً این مکان های فعال در داخل منافذ کاتالیست قرار دارند، به عبارت دیگر واکنش های کاتالیستی بعد از اینکه مولکول های واکنش دهنده در میان لایه های سیال و ذرات کاتالیست نفوذ می کند (نفوذ خارجی یا نفوذ فیلم) و پس از آن از طریق نفوذ در منافذ در کاتالیست اتفاق می افتد. (نفوذ داخلی). نفوذ داخلی مولکول ها با واکنش رقابت می کنند، و هم زمان انتقال جرم به ضخامت فیلم بدون

حرکت (راکد) و فعالیت در لالی های بیرونی تر وابسته است. اگر چه نفوذ ملکول ها نه تنها بوسیله ی بقیه ی مولکول ها جلوگیری می شود همچنین به وسیله ی موانع فیزیکی نیز جلوگیری می شود.

۲-۵ مراحل واکنش های کاتالیستی

الف- نفوذ واکنش دهند ها از فاز بالک^۸ (لایه مرزی) به سطح خارجی پلت^۹ کاتالیست (نفوذ فیلم یا نفوذ بین فازی)

ب- نفوذ واکنش دهنده ها از دهانه ی منافذ از طریق منافذ کاتالیست به مجاورت سطح داخلی کاتالیست، نقطه ای که تحولات شیمیایی اتفاق می افتد (نفوذ منافذ یا نفوذ بین فازی)

ج- جذب واکنش دهنده ها از روی سطح داخلی کاتالیست

د- واکنش در مکان های فعال خاص روی سطح کاتالیست

ه- دفع محصولات از سطح داخلی

و- نفوذ محصولات از داخل پلت کاتالیست به دهانه ی منافذ در سطح خارجی

ز- نفوذ محصولات از سطح خارجی پلت کاتالیست به بالک سیال (نفوذ بین فازی) [۲].

^۸ Bulk

^۹ Pellet