# UNTITLED

**دانشگاه آزاد اسلامی واحد اراک**

**دانشکده فنی و مهندسی**

**موضوع :**

**شبيه سازی رآکتور سنتز متانول**

**استاد راهنما:**

**دانشجو:**

**فهرست**:

# فصل اول :متانول ،خواص و روشهای توليد

# 1-1-تاريخچه

**1- 2- خصوصيات فيزيكي** Physical properties

# 1-3- واكنشهاي شيميايي

# 1-4- توليد صنعتي و فرآيند آن

# 1-5-ماده خام

# 1-5-1-گاز طبيعي

**1-5-2-باقيمانده هاي نفتي**

# 1-5-3-نفتا

# 1-5-4-ذغال سنگ

# 1-6-كاتاليست

# 1-7-توليد در مقياس تجاري

# 1-8-واكنشهاي جانبي

# 1-9-خالص سازي

**1-10-كاربردهاي متانول:**

**1-10-1-1- توليد اسيد استيك:**

**1-10-1-2-كاربرد اسيد استيك در صنايع:**

**1-10-2-توليد وينيل استات:**

**1-10-3-فرمالدئيد:**

**1-10-4-اتيلن گليكول:**

**1-10-5-متيل آمين:**

**1-10-6-دي متيل اتر:**

**1-10-7- تركيبات كلرومتان :**

**1-10-8-متيل ترشري بوتيل الكل(MTBE)**

**1-10-9-كاربرد متانول در مخلوط با بنزين:**

## فصل دوم: سينتيك و مكانيسم واستوکیومتری

**2-1-اصول واکنشهاي کاتاليستي**

**2-1-1-مراحل مستقل در واکنشهاي کاتاليستي**

**2-1-2-سينيتيک ومکانيسم واکنشهاي کاتاليستي**

**2-1-3-اهميت جذب سطحي در واکنشهاي کاتاليستي هتروژن**

**2-1-4-بررسي سينتيکي**

**2-1-5-مکانيسم واکنشهاي کاتاليستي هتروژن فاز گاز**

**2-1-5-1-مکانيسم Langmuir- Hinshelwood (1421 )**

**2-1-5-2-مکانيسم Eley –Rideal**

# 2-2-ترموديناميك و سينتيك سنتز فشار پائين متانول

**2-1-1- مقدمه**

**2-1-2- استوكيومتري و ترموديناميك**

**2-1-3- سينتيك و مكانيسم**

**Klier**

**Graff**

**Skrzypek**

**2-1-4- مكانيسم**

**فصل سوم: شبيه سازي واكنش كاتاليستي هتروژني توسط Hysys**

**3-1- مدل سینتیکی**

**3-2-مراحل شبيه سازي رآكتور در Hysys**

**3-3--نتايج حاصله از شبيه سازي**

**منابع**

# *فصل اول :متانول ،خواص و روشهای توليد*

# 1-1-تاريخچه [1]

 مصريان باستان جهت موميايي كردن ازمخلوطي استفاده مي كردند كه شامل متانول نيزبود،كه آنرا از پيروليز چوب به دست آورده بودند با اين وجود متانول خالص براي اولين بار توسط رابرت بويل در 1661 جدا سازي شد، كه او آنرا **Spirit of box**  ناميد. زيرا در تهيه آن از چوب صندوق استفاده كرده بود كه بعداً به **Piroxilic Spirit** معروف شد. در سال 1834 ، شيميدانان فرانسوي آقايان**Jean -Baptiste وEugene Peligot** عناصر تشكيل دهندة آنرا شناسايي كردند ،آنها همچنين لغت **methylene** را به شيمي آلي وارد كردند كه واژه **methu** به معناي شراب واژه **hyle** به معناي چوب بود. سپس در سال 1840 واژه **methyl**  از آن مشتق شد و جهت توصيف **Methyl Alcohol** استفاده شد. سپس اين نام در سال 1892 به وسيله كنفرانس بين المللي نامگذاري مواد شيميايي به**Methanol** كوتاه شد.

 در1923،دانشمند آلماني**Mattias Pier** كه براي شركت**BASF**كارمي كرد، طرحي را جهت توليد متانول از گاز سنتز (مخلوطي از اكسيدهاي كربن و هيدروژن كه از زغال به دست مي آمد و در سنتز آمونياك نيز كاربرد دارد ) ارائه كرد. كه در آن از كاتاليست روي- كرم استفاده مي شد و شرايط سختي از نظر فشاري (1000 الي300 اتمسفر) و دما (بالاي ) داشت. توليد مدرن متانول هم اكنون توسط كاتاليست هايي که امكان استفاده از شرايط دمايي كمتر را دارند، ممكن است.

متانول ( متيل الكل ) به فرمول  يك مايع شفاف سفيد رنگ شبيه آب است كه در دماي معمولي بوي ملايم دارد . از زمان كشف آن در اواخر قرن هفدهم تاكنون مصرف آن رشد رو به فزوني داشته به طوري كه اكنون با توليد سالانة‌ تن متريك رتبه 21 را در بين محصولات شيميايي صنعتي داراست متانول گاها با عنوان الكل چوب يا ( برخي مواقع Wood Spirite ) نيز خوانده مي شود كه دليل آن به تقريبا يك قرن توليد تجاري آن از خرده چوب بر مي گردد به هر حال متانولي كه از چوب تهيه شده باشد مواد آلوده كنندة‌ بيشتري ( مانند استيلن ،‌ اسيد استيك ، الكل اليل ) دارد تا الكلهاي صنعتي امروزي .

 براي سالهاي متوالي مصرف كننده اصلي متانول توليدي ، فرمالدئيد با مصرف تقريبا نيمي از متانول توليد شده بود ولي در آينده از اهميت آن كاسته مي شود زيرا مصارف جديدي از جمله توليد اسيد استيك و MTBE (كه جهت بهبود عدد اكتان بنزين به كار مي رود ) در حال افزايش است . از طرفي استفاده از متانول به عنوان سوخت در شرايط ويژه قابل توجه خواهد بود .