

موضوع پروژه: مطالعه واکنش متانول به الفین های سبک (MTO) بر روی کاتالیست ZSM-5(MFI) و SAPO-34 با استفاده از روش مونت کارلو و نرم افزار Material studio

با استفاده روش مونت کارلو می توان ایزوترم جذب، انرژی جذب، روند پیشرفت واکنش، شرایط موثر بر واکنش و تاثیر ویژگی های ساختاری کاتالیست را بر واکنش و محصولات آن بررسی کرد. از مقایسه مقالات و پژوهش های انجام شده می توان نتیجه گرفت میزان جذب هیدروکربن ها (متانول، اتیلن و پروپیلن) با استفاده از ایزوترم های جذب به صورت مستقل مقایسه شده است اما مقایسه مقدار جذب و انرژی جذب متانول در حضور الفین های سبک (اتیلن و پروپیلن) برای تعیین میزان تولید هریک از الفین ها (اتیلن و پروپیلن) و تعیین انتخاب پذیری نسبت به هریک از آنها و یا تشکیل کک بررسی نشده است.

از جمله عوامل موثر بر رفتار کاتالیست ها نسبت Si/Al می باشد بنابراین لازم است کاتالیست ZSM-5 با نسبت های Si/Al مختلف ایجاد شده و سپس ایزوترم های جذب و گزینش پذیری الفین های سبک برای دستیابی به ساختار با انرژی حداقل بررسی شوند.

اهداف:

- ایجاد ساختار کاتالیست ZSM-5(MFI) با نسبت های Si/Al مختلف (۲۵، ۵۰ و ۱۵۰). (جهت راهنمایی مقالاتی در این زمینه پیوست شده اند که نشان می دهند بهترین نقاط جهت جایگزین SI با AL سایت های T1 تا T12 هستند و سایت T12 برای ZSM-5(MFI) بهترین سایت است).
- تعیین میزان انرژی جذب و ایزوترم های جذب متانول، دی متیل اتر و اتیلن و پروپیلن بر روی کاتالیست ZSM-5(MFI) و SAPO-34
- تعیین تاثیر شرایط عملیاتی از جمله دما فشار بر گزینش پذیری الفین های سبک

مراجع:

Molecular dynamic simulation studies of adsorption and diffusion behaviors of methanol and ethanol through ZSM-5 zeolite
Zahra Keyvanloo a, Ali Nakhaei Pour a,*, Fatemeh Moosavi a, Seyed Mehdi Kamali Shahri,
<https://doi.org/10.1016/j.jmngm.2021.108048>

Methanol-to-Olefins Process over Zeolite Catalysts with DDR Topology: Effect of Composition and Structural Defects on Catalytic Performance, Irina Prokopyeva,a Joris Goetze,b Canan Gucuyener,a Leonard van Thiel,a Alla Dikhtiarenko,a Javier Ruiz-Martinez,b Bert M. Weckhuysen,b Jorge Gascon,*a and Freek Kapteijn,
DOI: 10.1039/x0xx00000x

Molecular behaviour of methanol and dimethyl ether in H-ZSM-5 catalysts as a function of Si/Al ratio: a quasielastic neutron scattering study, Toyin Omojola, ‡a Ian P. Silverwood b and Alexander J. O'Malley
DOI: 10.1039/d0cy00670j

SAPO-34 synthesis by combinations of structure-directing agents: Experimental and Monte Carlo simulations studies,
Saeedeh Soheili, Ali Nakhaei Pour *, Ali Mohammadi
<https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2021.111003>