

## فرآیند تک مرحله ای و بدون کاتالیست تولید فرمالدئید از متان با استفاده از راکتور میکروکانال: تجزیه و تحلیل تئوری

حمید عباسی، فریبرز رشیدی\* و محمد مهدی مشرفی

دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران

تاریخ دریافت: ۶ خرداد ۱۳۹۷، تاریخ اصلاح: ۱۰ آذر ۱۳۹۷، تاریخ پذیرش: ۱۹ آذر ۱۳۹۷

DOI: 10.22078/jpst.2019.3626.1576

### چکیده

عموماً متان به گاز سنتز تبدیل می شود و متعاقباً  $C_1$ -oxygenates (متانول و فرمالدئید) تولید می گردند. یکی از روش های نوظهور، تبدیل مستقیم و بدون کاتالیست متان به  $C_1$ -oxygenates است. این مطالعه به مدل سازی جامع اکسیداسیون جزئی متان به فرمالدئید، به عنوان گونه شیمیایی واسطه، در فرآیند اکسیداسیون متان با استفاده از میکرو راکتورها می پردازد. وابستگی بازدهی  $C_1$ -oxygenates به پارامترهای عملیاتی بسیار مهم است. از این رو یک مدل ریاضی جهت بررسی چگونگی اثر پارامترهای عملیاتی مانند دما، دبی و ترکیب جریان خوراک بر بازدهی فرمالدئید ساخته که منجر به پنجاه و چهار معادله دیفرانسیلی یکپارچه شد و با روش المان محدود حل گردید. علاوه بر این، جهت شبیه سازی فرآیند، مکانیسم GRI-Mech 3.0 به عنوان سنتیک واکنشی انتخاب شد که غلظت فرمالدئید و درصد تبدیل متان حاصل از نتایج مدل سازی از انطباق خوبی با داده های آزمایشگاهی برخوردار بودند. در نهایت، نتایج حاصل از مطالعه بر مبنای مسیرهای اصلی واکنش برای محدوده دماهای پایین اکسیداسیون متان ارائه و تشریح شدند و معیارهای اصلی طراحی فرآیند بیان گردید. بر اساس نتایج حاصل از مدل سازی در شرایط عملیاتی  $O_2/CH_4 = 17$  و  $T = 1000$  K به ازای یک گذر از میکرو راکتور می توان به 5/5 درصد بازدهی فرمالدئید دست یافت.

**کلید واژه:** متان، فرمالدئید، میکرو راکتور، تک مرحله ای، بدون کاتالیست، مطالعه سنتیکی.

\*Corresponding author:

E-mail: rashidi@aut.ac.ir