

شبیه سازی حالت پایدار پلیمریزاسیون دوغابی پلی اتیلن سنگین (HDPE)

شکوفه حکیم، علیرضا عقیلی

پژوهشگاه پلیمر و پتروشیمی ایران

E-mail: S.hakim@ippi.ac.ir

چکیده

شبیه سازی پلیمریزاسیون اتیلن در فاز دوغابی در حالت پایدار با کاتالیزور زیگلر-ناتا برای تولید پلی اتیلن سنگین (HDPE) انجام شده است. نتایج به دست آمده از این شبیه سازی با داده های مربوط به راکتور اول واحد پلی اتیلن سنگین مجتمع پتروشیمی اراک مقایسه گردیده است. مدل مورد نظر قابلیت پیش بینی میزان تولید محصول، متوسط وزن ملکولی، شاخص پراکندگی، غلظت مونومر، کومونومر و هیدروژن داخل راکتور را دارد.

واژه های کلیدی: پلی اتیلن سنگین، شبیه سازی، پلیمریزاسیون، دوغابی

مقدمه

پلیمریزاسیون الفین ها در راکتورهای متوالی CSTR در فاز دوغابی (Slurry)، یکی از فرایندهای صنعتی و تجاری تولید پلیمرها توسط کاتالیزورهای هتروژن زیگلر-ناتا است. مدلسازیهای سینتیکی مختلفی برای پلیمریزاسیون اتیلن به کار برده شده اند [۱-۳ و ۸]. طبق نظر ری (Ray) [۴]، مدلسازی ریاضی پلیمریزاسیون الفینها با کاتالیزورهای هتروژن در سه مقیاس بررسی می شود: ۱- مقیاس میکرو (microscale) که دیدگاه سینتیک و واکنش های شیمیایی را بیان می کند. ۲- مقیاس ماکرو (macroscale) که بیان کننده معادلات کلی بقای جرم و انرژی است. ۳- مقیاس مزو (mesoscale) که مقیاسی بین دو مقیاس قبلی است و بیان کننده پدیده های انتقال در داخل ذرات است. مدلسازیهای انجام شده تاکنون [۱ و ۳]، در این مقیاس ها انجام گرفته و تأثیر پارامترهای گوناگون روی خواص پلیمر و شرایط عملیاتی فرایند گزارش شده است. در منبع [۱] نشان داده شده است که پدیده های نفوذ در مقیاس مزو (mesoscale) نقش فرعی را در کل فرایند به عهده دارند. بدین ترتیب می توانیم در ساده ترین حالت از پدیده های نفوذ صرف نظر کنیم [۵ و ۲].

در این تحقیق از مقیاس مزو (mesoscale) صرف نظر شده و نتایج این مدلسازی با داده های مربوط به راکتور اول واحد پلی اتیلن سنگین مجتمع پتروشیمی اراک مقایسه گردیده است.

مدلسازی فرایند پلیمریزاسیون در مقیاس ماکرو (macroscale)

راکتورهای پلیمریزاسیون اتیلن می توانند به صورتهای متوالی و یا موازی در کنار یکدیگر قرار گیرند. برای یکی از گریدهای (grade) اکستروژن HDPE در مجتمع پتروشیمی اراک دو راکتور همزن دار به صورت سری هستند و محتویات راکتور اول به راکتور دوم می رود. از آنجا محتویات راکتور دوم به راکتور نهایی (Post reactor) رفته و واکنش پلیمریزاسیون در آن کامل می شود. هیدروژن، مونومر، کاتالیزور، کوکاتالیزور و حلال هگزان به راکتور اول و کومونومر (۱- بوتن)، مونومر و حلال به راکتور دوم خوراند می شوند. به این ترتیب زنجیرهای هموپلیمری با جرم مولکولی نه چندان زیاد در راکتور اول تولید شده و در راکتور دوم با ترکیب با کومونومر به صورت کوپلیمر درمی آیند و جرم مولکولی را