

عنوان مقاله:

مدلسازی ترمودینامیکی داده های تعادلی محلول الکترولیت NH₃-CO₂-H₂O

محل انتشار:

دهمین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران (سال: 1384)

تعداد صفحات اصل مقاله: 11

نویسندگان:

یعقوب بهجت - دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی شیمی

شاهرخ شاه حسینی - دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی شیمی

احد قائمی - دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی شیمی

خلاصه مقاله:

تعیین حلالیت همزمان آمونیاک و دی اکسید کربن در فاز آبی به علت وجود واکنش شیمیایی و غی-ای-ده ال بودن محلول همراه با خطای زیاد است. متون علمی شامل مدل‌های متعددی است که در آنها به منظور کاهش خطا از روابط مختلف تجربی - نیمه تجربی استفاده شده است. با این وجود، دقت این مدل‌ها پایین می‌باشد. در این تحقیق با بررسی مدل‌های ارائه شده برای محلول NH₃-CO₂-H₂O، یک مدل ترمودینامیکی جهت پیش بینی داده های تعادلی انتخاب شده است. مطالعه کار محققین دیگر نشان داد که معادله پیت-زر برای تعین ضرایب فعالیت اجزاء در فاز مایع مناسب می‌باشد و معادلات حالت نمی‌توانند رفتار فاز مایع را با دقت مطلوب پیش بینی کنند. بنابراین در این مدل از معادله نیمه تجربی اصلاح شده پیتزر برای تعیین انرژی آزاد گی-بس مازاد و محاسبه ضرایب فعالیت اجزاء یونی و مولکولی استفاده شده است. بعلاوه، به منظور پیش بینی بهتر ای-ن سیستم غیر ایده ال، محاسبه ضرایب فوگاسیته اجزاء فاز گاز توسط معادله حال-ت پن-گ - رابین-سون که قانون اختلاط غیر درجه دوم ونگ - سندلر را بکار می‌گیرد محاسبه شده است. معادلات مدل با در نظر گرفتن واکنشهای شیمیایی موجود در سیستم تعادلی نوش-ته شده و دستگاه معادلات غیر خطی حاصل به صورت همزمان در محیط MATLAB حل گردید. نتایج بدست آمده از مدل نشان داد که در غلظتهای پایین محلول، خطای متوسط برای فشار جزئی آمونیاک، دی اکسید کربن و آب، در مقایسه با مدل‌های ارائه شده از جمله مدل کروپ، به میزان % 1/8 کمتر می‌باشد. در غلظتهای بالای محلول، بع لت پیچیدگی برهم کنشها بین اجزاء در فاز مایع و انحراف از قانون هنری، نتایج بدست آمده مشابه با نتایج سایر مدل‌ها می‌باشد

کلمات کلیدی:

مدل سازی، ترمودینامیک، تعادل، محلول الکترولیت، قانون اختلاط غیر درجه دوم، محلول NH₃-CO₂-H₂O

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/23840>

