

عنوان مقاله:

مدل سازی حلالیت CO₂ در مایعات یونی [emim][BF₄] و [bmim][BF₄] با استفاده از معادله حالت PC-SAFT

محل انتشار:

دومین همایش علمی مهندسی فرآیند پالایش و پتروشیمی (سال: 1393)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:

سعیده مرحمتی - دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه خلیج فارس بوشهر

امیرعباس ایزد پناه - استاد یار و عضو هیئت علمی دانشکده مهندسی نفت، گاز و پتروشیمی، دانشگاه خلیج فارس بوشهر

احمد آذری - استاد یار و عضو هیئت علمی دانشکده مهندسی نفت، گاز و پتروشیمی، دانشگاه خلیج فارس بوشهر

خلاصه مقاله:

برای توصیف رفتار ترمودینامیکی سیالات پیچیده و مخلوط آن ها مدل ترمودینامیکی دقیقی نیاز است که اثر نیروهای خاص همانند پیوند هیدروژنی را لحاظ کند. معادله حالت simplified PC-SAFT یکی از مدل های تجمعی بر پایه تئوری آشفته می باشد که برای چنین سیستم هایی به کار می رود. در این کار از این معادله حالت برای بررسی حلالیت کربن دی اکسید در 1-اتیل-3-متیل ایمیدازولیوم تترافلوروبورات ([emim][BF₄]) و 1-بوتیل-3-متیل ایمیدازولیوم تترافلوروبورات ([bmim][BF₄]) استفاده شده که کربن دی اکسید به صورت غیر تجمعی و مایعات یونی مذکور با طرح تجمعی A1 (بر اساس دسته بندی طرح های تجمعی توسط هوانگ و رادوز) در نظر گرفته شدند. در ابتدا پارامترهای معادله حالت SPC-SAFT برای این مایعات یونی از طریق داده های آزمایشگاهی دانسیته مایع در محدوده وسیعی از دما و فشار اتمسفری تنظیم شدند. نتایج حاصل از دانسیته با داده های آزمایشگاهی هم خوانی خوبی در فشار اتمسفری و فشارهای بالا تا 40 مگاپاسکال دارا می باشد. سپس با استفاده از تنظیم پارامترهای برخورد دو جزئی (Kij)، معادله حالت برای مخلوط های دو جزئی فوق در دماهای مختلف به کار برده و نتایج حاصل با مقادیر آزمایشگاهی مقایسه شده که کاملاً رضایت بخش بوده به طوری که میانگین مطلق خطای نسبی (AARE) در محاسبه فشار نقطه حباب برای کربن دی اکسید + 1-بوتیل-3-متیل ایمیدازولیوم تترافلوروبورات 00/6 درصد به دست آمده است.

کلمات کلیدی:

معادله حالت، PC-SAFT، حلالیت، مایعات یونی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/259810>

