

عنوان مقاله:

مدل سازی ترمودینامیکی جذب پروپان روی ساختار آلی-فلزی Cu-BTC با استفاده از معادله حالت PHSC

محل انتشار:

چهارمین همایش علمی مهندسی فرآیند (سال: 1394)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

نویسندگان:

فائزه فلاح تبارشاده - دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی گاز دانشگاه صنعتی شیراز

فاطمه سبزی - استادیار دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز دانشگاه صنعتی شیراز

خلاصه مقاله:

احیای الفین های سبک خصوصاً پروپیلن که از کراکینگ پروپان با برشهای سنگین تر (توسط بخار) تهیه می شود یکی از فرآیندهای مهم در صنعت پتروشیمی است. این فرآیند از طرفی شامل جداسازی مخلوط C_3H_6/C_3H_8 نیز می باشد. جداسازی مذکور که معمولاً به روش تقطیر انجام می شود با مصرف بالای انرژی و هزینه زیاد همراه است، بنابراین تلاش های بسیاری برای یافتن روشی جایگزین صورت گرفته است که یکی از این روش ها فرآیند جذب می باشد و به دلیل هزینه عملیاتی پایین، سادگی عملیات و انعطافپذیری در طراحی بسیار مورد توجه قرار گرفته است. در مقاله حاضر، جذب تک جزئی گاز پروپان بر روی ساختار آلی-فلزی Cu-BTC را توسط معادله حالت اختلال یافته زنجیر کره سخت (PHSC EOS) در سه دمای 303، 313 و 323 کلوین مدل سازی کرده ایم. معادله حالت اختلال یافته زنجیره کره سخت شامل سه پارامتر ۲ تعداد واحدهای سازنده مولکول، a نیروهای جاذبه بین واحدهای سازنده غیر پیوندی و b معادل حجم کنار گذاشته شده وندروالسی می باشد که برای به دست آوردن پارامترهای ذکر شده ابتدا مولکول را به گروه های سازنده خود تفکیک کرده و با استفاده از روش هم بخشی گروهی و جمع مقادیر هر گروه پارامترها محاسبه می شوند. سپس با استفاده از قانون تعادل فازها و برابر قرار دادن پتانسیل شیمیایی، مقادیر جذب پروپان بدست می آیند که با مقادیر تجربی مطابقت خوبی دارند

کلمات کلیدی:

جذب، پروپان، Cu-BTC، MOF

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/359831>

