

## عنوان مقاله:

مدلسازی خواص بحرانی مواد آلی

## محل انتشار:

دومین کنفرانس بین المللی یافته های نوین پژوهشی در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

## نویسندگان:

سیدابوالفضل سجادی - کارشناسی ارشد مهندسی شیمی گرایش پیشرفته دانشگاه کاشان

ابراهیم نعمتی لای - استادیار مهندسی شیمی دانشگاه کاشان

## خلاصه مقاله:

مشخصات بحرانی برای مواد از قبیل دمای بحرانی، حجم بحرانی و فشار بحرانی مشخصات مهمی برای پیشگویی بسیاری از خواص ترمودینامیکی مواد مختلف هستند. در این تحقیق با در دست داشتن 7000 مشخصه ی بحرانی مواد آلی، مدلهای نیمه تجربی جدید برای خواص بحرانی ارائه شده است. در مدلهای نیمه تجربی ارائه شده با در دست داشتن نقطه جوش نرمال و جرم مولکولی ماده (ورودی های دمای بحرانی)، تعداد اتم و جرم مولکولی ماده (ورودی های حجم بحرانی) و دمای بحرانی و حجم بحرانی ماده (ورودی های فشار بحرانی)، می توانیم خواص بحرانی را تخمین بزنیم. میانگین خطای نسبی مدل نهایی برای دمای بحرانی، حجم بحرانی و فشار بحرانی به ترتیب برابر 3/86، 5/06 و 5/57 می باشد که حاکی از دقت کافی مدل ها می باشد.

## کلمات کلیدی:

دمای بحرانی، فشار بحرانی، حجم بحرانی، مدلسازی، مدلهای نیمه تجربی، میانگین خطای نسبی

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/477726>

