

عنوان مقاله:

مدلسازی ترمودینامیکی ترکیبات آروماتیکی با معادله حالت SAFT-VR

محل انتشار:

دوازدهمین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران (سال: 1387)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:

احترام پایدار - گروه مهندسی شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد ماهشهر

بهمن بهزادی - گروه مهندسی شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد ماهشهر-دانشکده مهندسی شی

خلاصه مقاله:

در این پژوهش از یک معادله حالت بر پایه نظریه آماری سیالات تجمعی با پتانسیل جذب متغیر چاه مربعی (معادله حالت SAFT-VR) جهت انجام محاسبات تعادلی برای تعدادی از ترکیبات آروماتیکی (بنزنی و آلکیل بنزنی) استفاده شده است. پارامترهای پتانسیل چاه مربعی عبارتند از قطرکره سخت σ ، عمق چاه پتانسیل ϵ و محدوده پتانسیل λ . با توجه به اینکه در تعادل فازی دما، فشار و پتانسیل شیمیایی دوفاز با هم برابرند، برای هر یک از ترکیبات مقدار بهینه پارامترهای بین مولکولی m (تعداد قطعاتی که تشکیل یک زنجیره را میدهند) بدست آمده است. مقایسه ی مقادیر محاسبه شده با مقادیر تجربی فشار بخار و دانسیته مایع دقت خوبی را نشان میدهد بطوریکه میزان درصد انحراف مطلق میانگین برای فشاربخار مواد خالص کمتر از 1% و برای دانسیته مایع کمتر از 4% میباشد

کلمات کلیدی:

پتانسیل SW - ترکیبات آروماتیکی- SAFT

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/58514>

