

استفاده از مدل توسعه یافته UNIQUAC برای بررسی تعادل فازی و پارامترهای برهم کنش در سیستم های آبی حاوی غیرالکترولیت

مریم عابدی*

استادیار، رشته شیمی فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملی مهارت
m.abedi85@gmail.com

واژگان کلیدی: مدل توسعه یافته UNIQUAC، تعادل فازی، سیستم های غیرالکترولیتی، پارامتر برهم کنش

مقدمه

مدلسازی سیستم های الکترولیت به ویژه سیستم های مخلوط الکترولیت-حلال از اهمیت ویژه ای برخوردار است زیرا در بسیاری از فرایندها یافت می شوند. فرایندهای حاوی سیستمهای مخلوط الکترولیت-حلال همانند بازیابی حلال ها، کریستالیزاسیون استخراجی و استخراج مایع-مایع برای مخلوط های نمکی می باشد. با بررسی های دانشمندان تاکنون چندین مدل ترمودینامیکی برای بررسی تعادل بخار-مایع در سیستم های مخلوط الکترولیت-حلال معرفی شدند. در مطالعه حاضر، از مدل توسعه یافته بونیکوآک برای توصیف تعادل جامد-مایع-مایع-بخار سیستم های الکترولیت مخلوط و خالص آبی حاوی غیر الکترولیت و بررسی ویژگی های دمایی سیستم های الکترولیت آبی استفاده شد. نمکهای NaBr، KBr و NH₄Br به عنوان جزء حل شونده الکترولیتی در حلال آب و ۱-پروپانول و ۲-پروپانول به عنوان غیر الکترولیت در این سیستم مورد بررسی قرار گرفتند.[1]

روش

در تعادل های فازی مایع-مایع،بخار-مایع و جامد-مایع، پتانسیل شیمیایی هر جزء در تمام فازها برابر است. پتانسیل شیمیایی یک جزء مجموع پتانسیل شیمیایی حالت استاندارد و عبارتی است که وابستگی غلظت را توصیف می کند که عبارت دوم با استفاده از مدل یونیکوآک توسعه یافته محاسبه می شود. پتانسیل شیمیایی برای حلال آب و جزء حل شونده با استفاده از رابطه های زیر محاسبه شد:

$$\mu_i = \mu_i^* + RT \ln a_i = \mu_i^* + RT \ln(\gamma_i^* x_i) \quad \mu_w = \mu_w^0 + RT \ln a_w = \mu_w^0 + RT \ln(\gamma_w x_w)$$

مدل ترمودینامیکی به کار رفته برای بررسی سیستم مورد مطالعه، مدل یونیکوآک توسعه یافته بود. برای محاسبه پارامتر برهم کنش نیز از مدل زیر استفاده گردید[2]

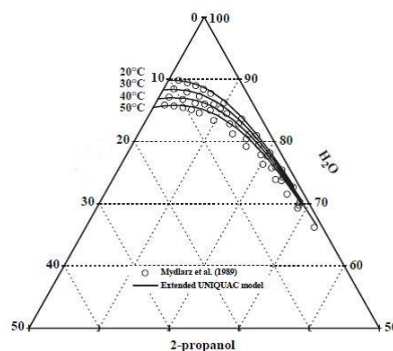
$$S = \sum_{\text{VLE data}} \left[\frac{p^{\text{calc}} - p^{\text{exp}}}{0.05(p^{\text{exp}} + 0.01)} \right]^2 + \sum_{\text{SLE data}} \left[\frac{w^{\text{calc}} - w^{\text{exp}}}{w^{\text{exp}}} \right]^2 \\ + \sum_{\text{LLE data}} \sum_i [(w_i^{\text{calc}} - w_i^{\text{exp}})_I^2 + (w_i^{\text{calc}} - w_i^{\text{exp}})_{II}^2] \\ + \sum_{H^E \text{ data}} \left[\frac{H^{E,\text{calc}} - H^{E,\text{exp}}}{16R} \right]^2$$

بحث و نتیجه گیری

مدل یونیکوآک توسعه یافته یک مدل ترمودینامیکی خوب برای توصیف رفتار فازی پیچیده سیستم های مخلوط حلال حاوی یک یا چند نمک است که تنها به پارامترهای برهم کنش دوتایی نیاز دارد.[3]

جدول ۱- پارامترهای برهم کنش مدل یونیکوآک توسعه یافته برای سیستم آبی ۱-پروپانول و ۲-پروپانول

	H ₂ O	1-propanol	Na ⁺	K ⁺	NH ₄ ⁺	Br ⁻
u ⁰	۵۸۵,۸۴	۷۱۳,۹	۱۶۵۷	۷۵۰,۱	۶۷۰	۱۶۳۰
u ¹	۰,۷۶۳۴	۰,۹۵۵	۰,۶۲۶۷	۱,۴۹	۰,۰	۱۵,۱
	H ₂ O	2-propanol	Na ⁺	K ⁺	NH ₄ ⁺	Br ⁻
u ⁰	۳۷۰,۵	۴۰۸	۱۱۱۰	۱۱۱۹	۳۵۲,۱	۱۵۶۰
u ¹	۰,۷۸۳	۰,۰	۰,۰	۱,۷۴	۱,۴۳	۱۳,۵



شکل ۱- انحلال پذیری آمونیوم برماید در محلول های آبی ۲-پروپانول در دماهای مختلف

منابع

- [1] Abrams, D.S., Prausnitz, J.M., (1975). Statistical thermodynamics of liquid mixtures: a new expression for the excess Gibbs energy of partly or completely miscible systems. A.I.Ch.E. Journal (21), 116–128.
- [2] Thomsen, K., Rasmussen, P., Gani, R., (1996). Correlation and prediction of thermal properties and phase behavior for a class of aqueous electrolyte systems. Chemical Engineering Science (51), 3675–3683.
- [3] Gomis, A., García-Cano, J., Font, A., Gomis, V., (2019) Journal of Chemical Thermodynamics. (131), 33-39.