

ارائه یک مدل ضریب اکتیویته جدید بر مبنای تئوری شبه شیمیایی گوگنهایم (GEM-QC)

حمید رضا رادفریا ، وحید تقی خانی* ، سیروس قطبی ، بهمن بهزادی

دانشکده مهندسی شیمی و نفت – دانشگاه صنعتی شریف

E-mail: Taghikhani@sharif.ac.ir

چکیده :

در مقاله حاضر شکل جدیدی از معادله اصلاح شده شبه شیمیایی گوگنهایم (GEM-QC) که توسط ونگ و ورا ارائه شده است پیشنهاد می گردد. توسط مدل جدید اثر حجم آزاد بین ملکولهای تشکیل دهنده یک محلول بر رفتار فازی آن مطالعه می شود. این نکته در محلولهایی که اختلاف جرم مولکولی بین اجزاء موجود آن زیاد باشد، از اهمیت بسزایی برخوردار است. محاسبات انجام شده و نتایج حاصل از آن نشان می دهد که مدل جدید توانایی تشخیص ایزومرها و همچنین محاسبه دمای پایینی بحرانی محلول (LCST) در تعادل مایع-مایع در محلولهای پلیمری را دارد. در مدل جدید، اثر حجم آزاد با وارد کردن معادلات ارائه شده توسط البرو و همکارانش و کنتگرگیس و همکارانش در مدل GEM-QC مورد بررسی قرار گرفته است. با استفاده از مدل جدید رفتار فازی بخار-مایع در محلولهای پلیمری دو جزئی مطالعه شده است. همچنین برای پارامترهای مدل جدید تابعیت خطی با دما در نظر گرفته شده است. در نهایت با در نظر گرفتن فرضیاتی ساده کننده تعداد پارامترهای مدل جدید کاهش داده می شود. در نهایت نتایج بدست آمده از کار حاضر با نتایج حاصل از سایر مدلها مقایسه و خطای هر یک گزارش می شود.

واژه های کلیدی : تئوری شبه شیمیایی گوگنهایم ؛ محلولهای پلیمری ؛ حجم آزاد ؛ تعادل بخار-مایع.

مقدمه:

محلولهای پلیمری توسط مدلهای ضریب اکتیویته مناسب، ضروری بنظر می رسد. کلیه مدلهای ارائه شده برای پیش بینی خواص ترمودینامیکی محلولهای پلیمری را میتوان به دو دسته مدلهای شبکه ای و مدلهای وندر والس تقسیم نمود.

از دو تئوری فوق برای بدست آوردن مدلهای ضریب اکتیویته و معادلات حالت استفاده می شود. مدلهای ضریب اکتیویته تابعیت حجم نداشته و بنابراین وابسته به فشار نیستند و برای بررسی اثر فشار بر تعادل از معادلات

- ترمودینامیک محلولهای پلیمری نقش مهمی در فرآیندهای پلیمری و صنایع وابسته ایفا می کند. اکثر محصولات پلیمری بصورت محلول، شامل حلال و سایر مواد با جرم مولکولی کم (مانند پلاستی سائزرها، مونومرها، و غیره) تولید می گردند. یکی از مشکلات موجود در صنایع چگونگی جداسازی ناخالصی ها و حلال از محصول نهایی یعنی پلیمر می باشد. برای انجام این امر، بررسی تعادل فازی بخار-مایع (VLE)