

کاربرد مدل‌های مکانیک آماری و مدل پیتزر در تخمین خواص ترمودینامیکی محلول‌های الکترولیت آبی

غزال عظیمی*، سیروس قطبی، وحید تقی‌خانی

دانشگاه صنعتی شریف، دانشکده مهندسی شیمی و نفت، تهران، ایران

gh.azimi@namvaran.com

چکیده

مدل‌های GV-MSA، BMCSL-MSA و پیتزر (Pitzer) برای تخمین ضرایب فعالیت متوسط و منفرد یونی و محاسبه ضرایب اسمزی محلول‌های الکترولیت آبی متقارن و غیر متقارن مورد استفاده قرار گرفته است. مقادیر ضرایب اسمزی برای محلول‌های الکترولیت مستقیماً با استفاده از مقادیر ضرایب فعالیت متوسط یونی محاسبه شده توسط مدل‌های مذکور به دست آمده است. برای محاسبه ضرایب اسمزی محلول‌های الکترولیت، پارامتر تنظیم شونده جدیدی معرفی نشده است. نتایج مربوط به ضرایب فعالیت متوسط و منفرد یونی و همچنین ضرایب اسمزی تا غلظت اشباع محلول‌های الکترولیت توسط مدل GV-MSA به دست آمده است و با نتایج حاصل از مدل‌های BMCSL-MSA و پیتزر و همچنین در مورد ضرایب منفرد یونی، با مدل خشکبارچی-ورا مقایسه شده است.

واژه‌های کلیدی: محلول الکترولیت؛ کرات صلب؛ تخمین متوسط کروی؛ ضریب فعالیت؛ ضریب اسمزی

مقدمه

محلول‌های الکترولیت نقش مهمی در فرایندهای مهندسی شیمی ایفا می‌نمایند. مطالعه رفتار فازی در طراحی فرایندهای صنعتی که در حضور الکترولیت‌ها انجام می‌پذیرد، از اهمیت خاصی برخوردار است. تا کنون کارهای زیادی در زمینه تخمین ضرایب فعالیت و اسمزی محلول‌های الکترولیت انجام شده است که در میان آن‌ها، مدل پیتزر در چند دهه اخیر بیش از سایر مدل‌ها مورد توجه قرار گرفته است [۱ و ۲].

امروزه کاربرد مدل تخمین متوسط کروی (Mean Spherical Approximation) یا مدل MSA برای محلول‌های الکترولیت، مورد توجه زیادی قرار گرفته است [۳-۵]. ویزمن (Waisman) و لیبوویتز (Lebowitz) [۶]، روشی تحلیلی برای حل مدل MSA بر اساس تئوری

اغتشاش (Perturbation Theory) و تئوری معادلات انتگرالی (Integral Equation Theory) پیشنهاد شده توسط بارکر (Barker) و هندرسون (Henderson) [۷]، ارائه نموده‌اند. مدل MSA بر خلاف مدل دبی-هوکل (Debye-Huckel)، حجم اشغال شده توسط یون‌ها و همچنین اندرکنش‌های برد کوتاه علاوه بر اندرکنش‌های برد بلند را در نظر می‌گیرد و به همین دلیل قادر است خواص ترمودینامیکی الکترولیت‌ها تا غلظت‌های نزدیک به اشباع را پیش‌بینی نماید.

در مدل MSA، اثر حجم اشغال شده توسط یون‌ها به کمک معادله حالت کرات صلب، نشان داده می‌شود. بنابراین، به کار بردن یک معادله حالت مناسب برای مخلوط کرات