مجموعه مقالات چهارمین کنفرانس ملی مهندسی فرآیند، پالایش و پتروشیمی
۷ خرداد ۱۳۹۴، ایران، تهران، مرکز همایش‌های صدا و سیما
مجری: اهم اندیشان انرژی کیمیا ۸۸۶۷۱۶۷۶ – ۰۲۱
www.Processconf.ir

مدل سازی ترمودینامیکی جذب پروپان روی ساختار آلی-فلزی Cu-BTC با استفاده ازمعادله حالت PHSC

فائزه فلاح تبار شیاده[۱]، فاطمه سبزی[۲]
دانشگاه صنعتی شیراز، دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز
Faezeh.falah@yahoo.com

چکیده

احیای الفین های سبک خصوصاً پروپیلن که از کراکینگ پروپان با برشهای سنگین تر (توسط بخار) تهیه می‌شود یکی از فرآیندهای مهم در صنعت پتروشیمی است.این فرایند از طرفی شامل جداسازی مخلوط C3H6/C3H8 نیز می‌باشد. جداسازی مذکور که معمولاً به روش تقطیر انجام می‌شود با مصرف بالای انرژی و هزینه زیاد همراه است، بنابراین تلاش‌های بسیاری برای یافتن روشی جایگزین صورت گرفته است که یکی از این روش‌ها فرآیند جذب می‌باشد و به دلیل هزینه عملیاتی پایین، سادگی عملیات و انعطافپذیری در طراحی بسیار مورد توجه قرار گرفته است.در مقاله حاضر، جذب تک جزئی گاز پروپان بر روی ساختار آلی-فلزی Cu-BTC را توسط معادله حالت اختلال یافته زنجیر کره سخت (PHSC EOS) در سه دمای ۳۰۳، ۳۱۳ و ۳۲۳ کلوین مدل سازی کرده‌ایم. معادله حالت اختلال یافته زنجیره کره سخت شامل سه پارامتر r تعداد واحدهای سازنده مولکول، a نیروهای جاذبه بین واحدهای سازنده غیر پیوندی و b معادل حجم کنار گذاشته شده وندروالسی می‌باشد که برای به دست آوردن پارامترهای ذکر شده ابتدا مولکول را به گروه های سازنده خود تفکیک کرده و با استفاده از روش هم بخشی گروهی و جمع مقادیر هر گروه پارمترها محاسبه می‌شوند.سپس با استفاده از قانون تعادل فازها و برابر قرار دادن پتانسیل شیمیایی ، مقادیر جذب پروپان بدست می آیند که با مقادیر تجربی مطابقت خوبی دارند.

واژه‌های کلیدی: جذب، پروپان، MOF ، Cu-BTC

۱- *دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی گاز دانشگاه صنعتی شیراز*
۲- *استادیار دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز دانشگاه صنعتی شیراز*