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 گاز دی اکسید کربن در سه ساختار MOF-5, 74 و 177 با استفاده از معادله حالت PHSC

رضا توسلی[۱]، فاطمه سبزی[۲]
دانشگاه صنعتی شیراز، دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز
Rtavasoli.che@gmail.com

چکیده

امروزه به دلیل رشد روز افزون مراکز صنعتی وتولیدی، نیاز بشر به تأمین انرژی از طریق نیروگاه های فسیلی به شدت افزایش یافته که همین امر تولید CO_2 را به مقدار قابل ملاحظه ای افزایش داده است. اخیرا جذب گاز دی اکسید کربن در جاذب های نوظهوری با نام شبکه های آلی-فلزی (MOFs)، به دلیل ویژگی های ساختاری این نوع جاذب ها، از قبیل دارا بودن سطح آزاد بسیار بالا و چگالی پایین، بسیار مورد توجه قرار گرفته است. در این مقاله مدل سازی جذب گاز دی اکسید کربن بر روی جاذب MOF-5 با استفاده از معادله حالت اختلال یافته زنجیر کره سخت (PHSC EOS) در سه دمای ۲۹۵,۷، ۳۰۴,۷ و ۳۱۳,۷ کلوین انجام شده است. معادله حالت اختلال یافته زنجیر کره سخت دارای سه پارامتر بر مبنای واحد سازنده پلیمر است که به صورت r تعداد واحدهای سازنده مولکول، a نیروهای جاذبه بین واحدهای سازنده غیر پیوندی و b معادل حجم کنار گذاشته واندروالسی است. جهت محاسبه پارامترهای مذکور، ابتدا مولکول جاذب را به گروه های سازنده خود تفکیک و سپس با استفاده از روش هم بخشی گروهی، پارامترهای مورد نیاز را بدست اورده و در نهایت با استفاده از قانون تعادل فازها و برابر قرار دادن پتانسیل شیمیایی گاز دی اکسید کربن در هر دو فاز، میزان جذب گاز دی اکسید کربن بر روی جاذب محاسبه شده است.

واژه‌های کلیدی: جذب، دی اکسید کربن، MOF-5

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