National Congress on
Chemistry and nano-chemistry,
from research to national development

کنگره ملی
شیمی و نانو شیمی، از پژوهش تا توسعه ملی

نمایه سازی پروسدینگ مقالات برتر در پایگاه Thomson Reuters
چاپ ۳۰ مقاله برتر کنگره تحت book chapters در پایگاه Springer

محل برگزاری
۳ شهریور ۱۳۹۶

حضور و مشارکت ۵۰ دانشگاه ،انجمن و رسانه فعال علمی در بزرگترین رویداد داخلی حوزه شیمی و نانو شیمی کشور

Selected papers will be peer-reviewed as accepted book chapters from various themes in one edited volume to be published in one of our Springer Book Series

شماره مجوز ISC
۹۶۱۷۰-۶۰۳۰۱

مدل سازی تعادل بخار –مایع سیستم های دی اکسید کربن –پروپان و دی اکسید کربن –اکتان با استفاده از یک عبارت قطبی در معادله حالت sPC-SAFT-D

الهه ایرجی [۱]، امیرعباس ایزدپناه[۲]،حسین رهیده[۳]،مجتبی رضایی[۴]

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه خلیج فارس ، ایران. f.e.iraji@gmail.com
۲- استادیار مهندسی شیمی، دانشگاه خلیج فارس ، ایران.izadpanah@pgu.ac.ir
۳- استادیار مهندسی شیمی، دانشگاه خلیج فارس ، ایران.rahideh@pgu.ac.ir
۴- شرکت پالایش گاز پارسیان.mrezaey42@gmail.com

خلاصه

در این تحقیق، معادله حالت sPC-SAFT-D برای محاسبه تعادل بخار- مایع سیستم‌های دو جزیی دی اکسیدکربن – پروپان و دی اکسیدکربن – اکتان با استفاده از یک ترم قطبی به کار برده شد. برای توصیف تعادل فازی این سیستم‌ها، پارامتر برهم کنش دو جزیی K_{ij} به کار برده شده و با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی تعیین شده است. برای محاسبه دقت مدل تعادل بخار- مایع سیستم‌های دو جزیی دی اکسید کربن – پروپان و دی اکسید کربن –اکتان در دماهای مختلف مورد بررسی قرار گرفت. نتایج به دست آمده از معادله حالت توسعه یافته با نتایج معادله حالت sPC-SAFT-D بدون در نظر گرفتن ترم قطبی مقایسه شد. نتایج نشان داد که استفاده از ترم قطبی موثر بوده و مدل توسعه یافته سازگاری خوبی با داده‌های آزمایشگاهی دارد و با دقت مطلوبی تعادل فازی سیستم‌های مورد نظر را توصیف می‌کند.

کلمات کلیدی: مدل سازی، تعادل فازی بخار- مایع، معادله حالت sPC-SAFT-D ، عبارت قطبی

۱.مقدمه

تعادلات فازی هیدروکربن‌ها و هم چنین ترکیب‌های مشابه گاز طبیعی، از اهمیت بالایی نزد محققان و صنعتگران برخوردار است. گاز طبیعی مخلوط پیچیده‌ای از چندین هیدروکربن و عناصر گازی همچون دی‌اکسیدکربن، نیتروژن می‌باشد. با توجه به تنوع فراوان هیدروکربن‌ها از نظر ساختار مولکولی و نیروهای بین‌مولکولی، محاسبات رفتار فازی این سیستم‌ها به عوامل متعددی وابسته است. بکارگیری معادلات حالت ترمودینامیکی یکی از مناسب‌ترین روش‌ها برای تعیین رفتارهای فازی به شمار می‌رود.

www.1mrss.ir