

# مدلی جدید برای پیشگویی کشش سطحی مخلوطهای مایع بر مبنای معادله ویلسون

رضا طاهری، حمید مدرس

دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده مهندسی شیمی

Email: Taheri\_Reza2003 @ yahoo.com

## چکیده

در این مقاله براساس تعریف ترمودینامیکی کشش سطحی و بیان انرژی آزاد گیبس معادله‌ای جدید برای محاسبه کشش سطحی مخلوطهای مایعات بدست آمده است. در این مدل انرژی آزاد گیبس بوسیله معادله ویلسون (Wilson) بیان شده و یک معادله دو پارامتری برای بدست آوردن کشش سطحی استخراج شده است. توانایی مدل برای محاسبه کشش سطحی مخلوط مایعات برای ۹ مخلوط دوتائی تست شد. متوسط خطای نسبی (AAD) در حدود ۰/۰۵۳٪ بوده است. نتایج نشان می‌دهد که مدل بدست آمده برای پیشگویی کشش سطحی طیف وسیعی از مخلوطها دقیق می‌باشد.

## واژه‌های کلیدی: کشش سطحی؛ انرژی آزاد گیبس؛ معادله ویلسون

### مقدمه

از آنجا که انتقال جرم و حرارت در سطح تماس، تحت تاثیر کشش سطحی می‌باشد، لذا مطالعه کشش سطحی و داشتن اطلاعاتی در مورد آن همواره مورد توجه بوده است. از آنجا که در اکثر فرایندها نظیر تقطیر چند جزئی و ... با مخلوط چند گانه سرو کار داریم لذا محاسبه کشش سطحی این مخلوطها ضروری است. روشهای محاسبه کشش سطحی مخلوطها به دو دسته تقسیم می‌شود: دسته اول آنهایی که براساس روابط تجربی هستند و دسته دوم آنهایی که از روابط ترمودینامیکی بدست آمده‌اند. روش Macleod-Sugden و روش Corresponding State جزء روشهای تجربی هستند. در دسته دوم روشهای زیادی وجود دارد نظیر روشی که براساس Gradient Theory است [۱]، روشی که براساس تئوری اغتشاش (Perturbation Theory) می‌باشد [۲]، روشی که براساس تابع توزیع شعاعی (Radial Distribution Function) است [۳]. علاوه بر موارد موفق روشهای زیادی براساس روابط ترمودینامیکی جهت محاسبه کشش سطحی مخلوطهای مایع پیشنهاد شده‌اند [۴ و ۵]. هدف اصلی مقاله حاضر نیز بسط و ارزیابی مدلی عمومی برای محاسبه کشش سطحی مخلوطهای مایعات است که علاوه بر دقت خوب، استفاده عملی نیز داشته باشد.

### تئوری

Wang Zihao و همکارانش بر اساس تعریف ترمودینامیکی کشش سطحی و انرژی آزاد گیبس معادله‌ای را برای محاسبه کشش سطحی بدست آوردند. آنها برای بیان انرژی آزاد گیبس از معادله ویلسون استفاده کردند و یک معادله دو پارامتری را برای محاسبه کشش سطحی مخلوطها بدست آوردند [۶].

برای یک مخلوط مایع چند جزئی در دمای  $T$  و فشار  $P$  انرژی آزاد گیبس مولار برای سیستم به شکل زیر بیان می‌شود [۶]:

$$g(T, P) = \sum_i x_i (g_i^o(T, P) + RT \ln x_i) + g^{ex} \quad (1)$$

که  $x_i$  جزء مولی و  $g_i^o(T, P)$  انرژی گیبس آزاد مولار برای جزء  $i$  در دما و فشار سیستم می‌باشند. فرض می‌شود که انرژی گیبس مازاد مولار در فاز مایع،  $g^{ex}$  را بتوان با معادله ویلسون بیان کرد. در اینصورت معادله (۱) به شکل زیر در خواهد آمد:

$$g(T, P) = \sum_i x_i (g_i^o(T, P) + RT \ln x_i) - RT \sum_i x_i \ln \left( \sum_j x_j \Lambda_{ij} \right) \quad (2)$$

که در معادله بالا: