

مدل سازی ترمودینامیکی جذب پروپیلن روی ساختار آلی-فلزی Cu-BTC با استفاده از معادله حالت PHSC

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

چکیده

در حال حاضر جداسازی الفین‌ها از پارافین‌ها به وسیله فرآیندهایی چون تقطیر در دمای پایین، با صرف انرژی و هزینه زیاد انجام می‌شود. در این راستا با توجه به کاربرد وسیع مواد الفینی در صنعت، جداسازی الفین‌ها از پارافین‌ها با تکنولوژی‌هایی چون، جداسازی استخراجی، جذب فیزیکی و شیمیایی، جذب و جداسازی غشایی مورد توجه قرار گرفته است. در میان تکنولوژی‌های بررسی شده جایگزین تقطیر، جذب سطحی به دلیل هزینه عملیاتی پایین، سادگی عملیات و انعطاف‌پذیری در طراحی بسیار مورد توجه قرار گرفته است در مقاله حاضر، جذب تک جزئی گاز پروپیلن 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 کرده ایم. برای به دست آوردن پارامترهای معادله حالت اختلال یافته زنجیر کره سخت که شامل ۲ تعداد واحدهای سازنده مولکول، a نیروهای جاذبه بین واحدهای سازنده غیر پیوندی و b معادل حجم کنار گذاشته شده وندروالسی می باشد ابتدا مولکول را به گروه های سازنده خود تفکیک کرده و با استفاده از روش هم بخشی گروهی و جمع مقادیر هرگروه پارمترها محاسبه می شوند. سپس با استفاده از قانون تعادل فازها و برابر قرار دادن پتانسیل شیمیایی مقادیر جذب پروپیلن بدست می آیند که با مقادیر تجربی مطابقت خوبی دارند.

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

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