چهارمین همایش شیمی، مهندسی شیمی و نانو ایران، دانشگاه تهران

پیش‌بینی میزان حلالیت‌های ۵ جامد صنعتی در سیال فوق بحرانی کربن دی‌اکسید به کمک معادله حالت بهبودیافته اسماعیل‌زاده-روشنفکر و قاعده اختلاط ونگ- سندلر و مدل مارگولس

رویا آصف جاه[۱]، محمد بنیادی[۲]

[۱]. دانشگاه آزاد اسلامی واحد شیراز، دانشکده فنی و مهندسی شماره ۲؛ (roya.asefjah@gmail.com)

[۲]. دانشگاه یاسوج، دانشکده مهندسی، گروه مهندسی شیمی؛ (bonyadi@yu.ac.ir)

چکیده:

استخراج فوق بحرانی تکنیک جدید و قدرتمندی است که به دمای کمی نیاز دارد و همچنین محصول فرآیند عاری از باقیمانده حلال می‌باشد. روش‌های تجربی جهت تعیین میزان حلالیت مواد جامد مستلزم صرف هزینه و زمان زیاد می‌باشند. به همین خاطر استفاده از مدل‌های ترمودینامیکی برای مدل‌سازی و تعیین میزان حلالیت‌ها با دقت مناسب، رو به گسترش بوده و از اهمیت بسزایی برخوردار هستند. در این مطالعه، برای پیش‌بینی میزان حلالیت ۵ جامد صنعتی در سیال فوق بحرانی کربن دی‌اکسید، از معادله حالت مکعبی و سه پارامتری بهبودیافته‌ی اسماعیل‌زاده-روشنفکر همراه با قاعده اختلاط ونگ-سندلر استفاده‌شده است. این قاعده اختلاط امکان استفاده از معادلات حالت مکعبی و مدل‌های انرژی گیبس اضافی را به‌راحتی هموار می‌کند. در این مطالعه، از مدل انرژی گیبس اضافی مارگولس به‌منظور استفاده در قانون اختلاط ونگ سندلر استفاده‌شده است. پارامترهای مدل، برخلاف مطالعات پیشین برحسب تابعی درجه‌دو از دما محاسبه شدند. مقادیر بهینه‌ی این پارامترها با استفاده از کد نویسی در نرم‌افزار متلب و روش بهینه‌سازی الگوریتم fminsearch به دست آمدند. نتایج مدل‌سازی نشان دادند که به‌طور میانگین مدل مارگولس دارای میزان انحراف کلی ۷/۲۷ درصد برای ۷۸ داده ی آزمایشگاهی است و تطبیق خوبی با داده‌های حلالیت آزمایشگاهی نشان می‌دهد.

کلمات کلیدی:

استخراج فوق بحرانی، معادلات حالت مکعبی، کربن دی اکسید فوق بحرانی، معادله حالت بهبود یافته اسماعیل زاده-روشنفکر، قاعده اختلاط

Prediction of five Solid Solubilities in Supercritical Carbon Dioxide Using The Modified Esmaeilzadeh–Roshanfekr (m-ER) Equation of State With Wong Sandler Mixing Rule and margules model

Roya Asefjah[1], Mohammad Bonyadi[2]

1- Iran, Islamic Azad University of Shiraz, Engineering Department(Roya.asefjah@gmail.com)

2- Iran, Chemical Engineering Department Yasouj University(bonyadi@yu.ac.ir)

Abstract

Supercritical fluid extraction, is a new and powerful technique that requires low temperature and process product is free of solvet residual. Although empirical methods to determine the solubility of solids have high accuracy but requires spending more cost and time. For this reason, the use of thermodynamic models for identifying and modeling the solubility with reasonable accuracy, have increased and are of great importance. In this study, the modified Esmaeilzadeh–Roshanfekr (m-ER) equation of state (EOS) accompanied with the Wong–Sandler (WS), are applied to predict the solubilities of 5 industrial solid compounds in supercritical carbon dioxide. The Wong-Sandler mixing rule, simultaneously allows the use of models of equations of state and excess Gibbs energy equations smoothly and also it is proper for polarized mixtures. In this study, the Margules excess Gibbs energy (G^{ex}) activity model are used in phase equilibrium calculations. The optimal values of the proposed thermodynamic model parameters, are evaluated using the fminsearch Algorithm optimization strategy. The results of modeling, indicate that the Margules excess Gibbs energy leads to accurate predictions (AARD= 7.27%) for 78 experimental datas and matching well with the experimental solubility data.

Keywords:

Supercritical extraxtion, cubic equations of state, supercritical co_2, modified ER EOS, mixing rule