مقایسه مدل‌های ترکیب موضعی برای محاسبه خواص ترمودینامیکی مایعات یونی

مهدی خطیبی[*۱]، مریم رحمانیان[۲]،

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی گرایش جداسازی، دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز

۲- کارشناسی مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی همدان، دانشکده مهندسی شیمی

خلاصه

مدل ترمودینامیکی Segmental-wilson-Non-Random Factor (SNWN) یکی از مدل‌های ترکیب موضعی است، که برای محاسبه خواص ترمودینامیکی محلول‌های دوجزیی مورد استفاده قرار می‌گیرد. قابل ذکر است که این مدل بر اساس جزءهای حجمی توسعه یافته است. مدل جدید برای محاسبه ضرایب فعالیت متشکل از دو بخش است، که شامل ترم Flory-Huggins (F-H) (آنتروپی) و ترم S-wilson-NRF برای محاسبه خواص اضافی (آنتالپی) می‌باشد. این مدل بر مبنای سیستم‌های غیر پلیمری پایه‌گذاری شده‌است و تقلیل یافته مدل‌های غیرالکترولیتی می‌باشد. مدل حاضر به دو پارامتر قابل تنظیم برای انرژی وابسته است، که برای محاسبه ضرایب فعالیت، و فعالیت در رقت بینهایت ۵۷ سامانه مایع یونی در یک دما و جز مولی مشخص به کار گرفته می‌شود. نتایج به دست آمده با چندین مدل ترکیب موضعی دیگر مقایسه شده‌است. در نهایت نتایج مدل حاضر طبق گزارش‌هایی که در جدول مربوط به همراه خطاها ارایه شده است، تطبیق خوبی بین داده‌های آزمایشگاهی و محاسباتی برقرار می‌کند.

کلمات کلیدی: مایعات یونی، خواص اضافی، مدل‌های ترکیب موضعی، ضرایب فعالیت

۱. مقدمه

مایعات یونی[۱] به عنوان یک کلاس جدید و ویژه از حلال‌ها مورد توجه قرار گرفته‌اند. اکثر مایعات یونی یک کاتیون آلی بزرگ و یک آنیون معدنی پلی اتمیک دارند به گونه‌ای که در دمای زیر ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد به صورت مایع هستند. مایعات یونی به صورت شبکه سه‌بعدی از کاتیون‌ها هستند که با نیروهایی مانند پیوندهای هیدروژنی، نیروهای پراکندگی و الکتروستاتیک به هم متصل می‌شوند. مهمترین ویژگی کاتیون این ترکیبات تقارن کم و تمرکز ضعیف بار مثبت است که مانع از تشکیل یک شبکه کریستالی منظم و کاهش نقطه ذوب نمک به وجود آمده می‌شود. این موضوع باعث فراهم شدن محیط مایع غیرآبی در دماهای پایین

[۱] Ionic Liquid