

ΠΡΟΒΛΕΨΗ ΙΣΟΡΡΟΠΙΑΣ ΦΑΣΕΩΝ ΣΕ ΧΑΜΗΛΕΣ ΚΑΙ ΥΨΗΛΕΣ ΠΙΕΣΕΙΣ ΜΕ ΕΝΑ ΜΟΝΤΕΛΟ ΒΑΣΙΣΜΕΝΟ ΣΤΗΝ ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ ΚΑΙ ΤΗ ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΗ

N. Πρίνος^{1*}, Ε. Βουτσάς¹

¹Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ, Αθήνα, Ελλάδα

(*prinosnikos@gmail.com)

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η ανάπτυξη και προσομοίωση μεθόδων διαχωρισμού και ανάκτησης συστατικών προϋποθέτουν την επαρκή γνώση της ισορροπίας φάσεων των εμπλεκόμενων μιγμάτων. Η δυσκολία και το κόστος διενέργειας πειραμάτων μέτρησης της ισορροπίας φάσεων, ειδικά πολύπλοκων μιγμάτων, απαιτούν την εφαρμογή θερμοδυναμικών μοντέλων πρόβλεψης υψηλής ακριβείας. Τις τελευταίες δύο δεκαετίες τα λεγόμενα μοντέλα τύπου COSMO, όπως το COSMO-RS και το COSMO-SAC^[1], συνδυάζουν κβαντοχημικούς υπολογισμούς, βασισμένους σε μοριακές προσομοιώσεις, με στατιστική θερμοδυναμική, για την πρόβλεψη θερμοδυναμικών ιδιοτήτων καθαρών ενώσεων και μιγμάτων, όπως η ισορροπία φάσεων. Τα μοντέλα τύπου COSMO έχουν αποδειχτεί αξιόπιστα εργαλεία για την απευθείας πρόβλεψη της ισορροπίας φάσεων και άλλων θερμοδυναμικών ιδιοτήτων ακόμη και σε ιδιαίτερος πολύπλοκα μίγματα, χωρίς την ανάγκη ύπαρξης πειραματικών δεδομένων.

Στην παρούσα εργασία, αναπτύχθηκε μια νέα παραλλαγή του μοντέλου COSMO-SAC με χρήση ενός βελτιωμένου συνδυαστικού όρου και μιας προηγμένης περιγραφής των διαμοριακών αλληλεπιδράσεων που οφείλονται σε δεσμούς υδρογόνου. Το νέο μοντέλο αξιολογείται ως προς την ισορροπία υγρού-ατμού σε χαμηλές πιέσεις καθώς και στην πρόβλεψη συντελεστών ενεργότητας άπειρης αραιώσης, ενώ συγκρίνεται με το αρχικό μοντέλο COSMO-SAC και το μοντέλο COSMO-SAC 2010^[2]. Επιπρόσθετα, το νέο μοντέλο συνδυάζεται με την καταστατική εξίσωση Peng Robinson μέσω των προηγμένων κανόνων ανάμιξης UMR^[3], και εφαρμόζεται για την πρόβλεψη ισορροπίας υγρού-ατμού σε υψηλές πιέσεις. Τέλος, στο πλαίσιο του νέου μοντέλου, παρουσιάζονται αποτελέσματα που αφορούν την ισορροπία φάσεων σε μίγματα που περιλαμβάνουν καινοτόμους διαλύτες, όπως ιοντικά υγρά και βαθέως ευτηκτικούς διαλύτες (DES).

ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: COSMO-SAC, ισορροπία φάσεων, συντελεστής ενεργότητας, UMR

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Lin S.T, Sandler S.I. (2002). *Ind. Eng. Chem. Res.*, 41, 899-913.
- [2] Hsieh C.M, Sandler S.I, Lin S.T. (2010). *Fluid Phase Equilib.*, 297, 90-97.
- [3] Voutsas E, Magoulas K, Tassios D. (2004). *Ind. Eng. Chem. Res.*, 43, 6238-6246.