

ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΙΣΟΡΡΟΠΙΑΣ ΦΑΣΕΩΝ ΔΥΑΔΙΚΩΝ ΜΙΓΜΑΤΩΝ ΑΜΙΝΩΝ ΜΕ ΥΔΡΟΓΟΝΑΝΘΡΑΚΕΣ ΚΑΙ ΑΛΚΟΟΛΕΣ

Ε. Τσέπη¹, Τσιβιντζέλης Ι.^{1,*}

¹ Τμήμα Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ, 54124 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

* tioannis@cheng.auth.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Οι εκπομπές διοξειδίου του άνθρακα, αποτελούν ένα από τα πιο σημαντικά προβλήματα που καλείται να λύσει η επιστημονική κοινότητα. Στην προσπάθεια αυτή, έχουν αναπτυχθεί τεχνικές δέσμευσης, αποθήκευσης και επαναχρησιμοποίησης του. Μέχρι και σήμερα, η τεχνολογικά πιο ώριμη τεχνική είναι η χημειορόφηση διοξειδίου του άνθρακα με χρήση διαλυτικών συστημάτων τα οποία περιέχουν αμίνες. Ωστόσο, αναζητούνται νέοι διαλύτες, οι οποίοι θα μπορούσαν να βελτιώσουν την απόδοση της διεργασίας. Η ύπαρξη ενός επαρκώς παραμετροποιημένου μοντέλου, το οποίο θα είναι σε θέση να προβλέπει με ακρίβεια την ισορροπία φάσεων των εν λόγω μιγμάτων θα έκανε την επιλογή αυτή πιο εύκολη και γρήγορη.

Σε αυτό το πλαίσιο, στην παρούσα εργασία, παραμετροποιήθηκε η καταστατική εξίσωση CPA, ώστε να μπορεί να περιγράψει μίγματα αμινών, τα οποία, εκτός των άλλων, μπορεί να περιέχουν υδρογονάνθρακες και αλκοόλες. Αρχικά υπολογίστηκαν οι παράμετροι καθαρών ρευστών για πρωτοταγείς, δευτεροταγείς και τριτοταγείς αμίνες με προσαρμογή των προβλέψεων του μοντέλου σε πειραματικά δεδομένα. Οι πρωταγείς αμίνες μοντελοποιήθηκαν θεωρώντας ότι μπορούν να συμμετέχουν ταυτοχρόνως σε τρεις (υποθέτοντας δύο δότες και ένα δέκτη πρωτονίων), ή δύο (υποθέτοντας ένα δότη και ένα δέκτη πρωτονίων), δεσμούς υδρογόνου. Οι δευτεροταγείς αμίνες μοντελοποιήθηκαν υποθέτοντάς ότι φέρουν ένα δότη και ένα δέκτη πρωτονίων. Τέλος, οι τριτοταγείς αμίνες μοντελοποιήθηκαν υποθέτοντας ότι φέρουν ένα δέκτη πρωτονίων και συνεπώς δεν μπορούν να συνάψουν δεσμούς υδρογόνου με άλλα μόρια του ίδιου είδους. Σε όλες τις περιπτώσεις παρατηρήθηκε ομαλή μεταβολή των παραμέτρων με το μοριακό βάρος, ενώ οι μέση απόκλιση των προβλέψεων του μοντέλου κυμάνθηκε μεταξύ 1-2% για την τάση ατμών και 0,5-1,5% για τον ειδικό όγκο. Στη συνέχεια, υπολογίστηκαν οι δυαδικές παράμετροι αλληλεπίδρασης, k_{ij} , των αμινών με υδρογονάνθρακες και αλκοόλες, χρησιμοποιώντας πειραματικά δεδομένα ισορροπίας υγρού-ατμών. Στην περίπτωση των μιγμάτων με αλκοόλες, ελήφθη υπόψη η δημιουργία δεσμών υδρογόνου τόσο μεταξύ όμοιων, όσο και μεταξύ ανόμοιων μορίων (αμίνη-αλκοόλη) με χρήση κατάλληλου συνδυαστικού κανόνα. Σε όλες τις περιπτώσεις, με χρήση μιας προσαρμόσιμης παραμέτρου, k_{ij} , οι προβλέψεις του μοντέλου ήταν σε ικανοποιητική συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα.

ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: Καταστατική εξίσωση CPA, Μοντελοποίηση ισορροπίας φάσεων, Μίγματα αμινών, Υδρογονάνθρακες, Αλκοόλες