**ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΕΝΟΣ ΝΕΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΕΠΙΔΙΑΛΥΤΩΣΗΣ ΣΥΝΕΙΣΦΟΡΑΣ ΤΜΗΜΑΤΩΝ ΤΥΠΟΥ COSMO-SAC**

**Νικόλαος Πρίνος1,\*, Ασημάκης Γραμματάς1, Γεωργία Παππά1, Επαμεινώνδας Βουτσάς1**

1Εργαστήριο Θερμοδυναμικής και Φαινομένων Μεταφοράς, Σχολή Χημικών Μηχανικών,

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ηρώων Πολυτεχνείου 9, Ζωγράφου, Αθήνα, Ελλάδα

*\*prinosnikos@gmail.com*

**ΠΕΡΙΛΗΨΗ**

Οι μέθοδοι διαχωρισμού και ανάκτησης συστατικών μιγμάτων αποτελούν ένα σημαντικό κομμάτι της χημικής βιομηχανίας. Ευρέως χρησιμοποιούμενες μέθοδοι για αυτό το σκοπό, όπως η απόσταξη και η εκχύλιση, απαιτούν μεταξύ άλλων τη γνώση της ισορροπίας φάσεων των μιγμάτων. Η έλλειψη πειραματικών δεδομένων καθώς και η δυσκολία και το κόστος πειραματικού προσδιορισμού της ισορροπίας φάσεων και άλλων θερμοδυναμικών ιδιοτήτων, ιδιαιτέρως σε πολύπλοκα μείγματα, καθιστά αναγκαία την ύπαρξη θερμοδυναμικών μοντέλων πρόβλεψης για τις βιομηχανικές εφαρμογές.

Ένα τέτοιο μοντέλο είναι το COSMO-SAC (COSMO Segment Activity Coefficient) [1], το οποίο συνδυάζει κβαντοχημικούς υπολογισμούς μοριακής προσομοίωσης και στατιστικής θερμοδυναμικής για την πρόβλεψη θερμοδυναμικών ιδιοτήτων καθαρών συστατικών και μιγμάτων. Κύριο πλεονέκτημα του COSMO-SAC σε σχέση με άλλα θερμοδυναμικά μοντέλα, όπως τα μοντέλα συνεισφοράς ομάδων τύπου UNIFAC, αποτελεί το γεγονός πως μπορεί να εφαρμοστεί σε ιδιαίτερα σύνθετες, πολύπλοκες ή/και νέες ενώσεις, χωρίς την απαίτηση παραμέτρων αλληλεπίδρασης.

Σε αυτά τα πλαίσια παρουσιάζεται ένα νέο μοντέλο τύπου COSMO-SAC, το οποίο χρησιμοποιεί έναν βέλτιωμένο συνδυαστικό όρο για τον υπολογισμό του συντελεστή ενεργότητας, σε συνδυασμό με μία βελτιωμένη περιγραφή των αλληλεπιδράσεων δεσμού υδρογόνου μεταξύ των μορίων. Για την ανάπτυξη του μοντέλου πραγματοποιείται αξιολόγηση της επίδρασης τόσο των σημαντικότερων παραμέτρων που χρησιμοποιεί το μοντέλο, όσο και της χρήσης διαφορετικών μεθόδων κβαντοχημικών υπολογισμών για την παραγωγή των σ-profiles των συστατικών.

Το νέο μοντέλο αξιολογείται ως προς την απόδοση του σε υπολογισμούς συντελεστή ενεργότητας σε άπειρη αραίωση και ισορροπίας φάσεων ατμού-υγρού σε χαμηλές πιέσεις και συγκρίνεται με το αρχικό μοντέλο COSMO-SAC και με τις εμφανιζόμενες στη βιβλιογραφία τροποποιήσεις και βελτιώσεις του καθώς επίσης και με τα μοντέλα COSMO-RS και UNIFAC. Επιπρόσθετα το νέο μοντέλο συνδυάζεται με την καταστατική εξίσωση PR μέσω των κανόνων ανάμειξης Universal Mixing Rules (UMR) [2] για την επέκταση του σε υψηλές πιέσεις και αξιολογείται στην απόδοση του στην πρόβλεψη της ισορροπίας φάσεων ατμού-υγρού σε υψηλές πιέσεις σε μίγματα ιδιαίτερου βιομηχανικού ενδιαφέροντος. Τα αποτελέσματα συγκρίνονται με το μοντέλο UMR-PRU [2]. Τέλος παρουσιάζονται προκαταρτικά αποτελέσματα του νέου μοντέλου, όσον αφορά υπολογισμούς διαλυτοτήτων φυσικών αντιοξειδωτικών σε καινοτόμους διαλύτες, όπως τα ιοντικά υγρά και οι βαθείς ευτυκτικοί διαλύτες.

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

**ΑΝΑΦΟΡΕΣ**

[1] Lin, S.T., & Sandler, S.I. (2002). *Ind. Eng. Chem. Res.* 41 (5): 899-913.

[2] Voutsas, E., Magoulas, K., & Tassios, D. (2004). *Ind. Eng. Chem. Res.* 43 (19): 6238-6246.