



ارائه شده توسط:

سایت ترجمه فا

مرجع جدیدترین مقالات ترجمه شده

از نشریات معتبر

تفکیک دی اکسید کرب و هیدروژن سولفید با استفاده از مایع یونی دمای اتاق

[bmim] [PF₆]

چکیده :

یک مدل معادله حالت سه تایی (EOS) برای سیستم CO₂/H₂S/1-butyl-3-متیلیمیدازولیوم هگزاfluورسفات برای درک تفکیک گازها با استفاده از مایعات یونی در دمای اتاق توسعه یافت. مدل حاضر بر روی یک RK (ردلیخ کونگ) EOS عمومی، با پارامترهای تعامل تجربی برای هر سیستم دوتایی است. این پارامترها تعامل با استفاده از VLE (تعادل بخار-مایع) داده هایی که قبلا ما اندازه گیری کرده ایم برای [bmim][PF₆]/دی اکسید کربن و برای [bmim][PF₆]/هیدروژن سولفید و هیدروژن سولفید/دی اکسید کربن مشخص می کنند. VLLE (تعادل بخار مایع مایع) اندازه گیری شده است و اعتبار پیش بینی های مدل EOS نشان می دهد که [bmim][PF₆]/دی اکسید کربن و [bmim][PF₆]/هیدروژن سولفید سیستم های با نوع رفتار فاز پنجم، با توجه به طبقه بندی ون کونیونبرگ و اسکات هستند. اعتبار محاسبات مدل EOS سه تایی نیز با انجام آزمایش های VLE برای [bmim][PF₆]/هیدروژن سولفید سیستم گاز دی اکسید کربن بررسی شده است. با مدل EOS، نمودار دما فاز سه تایی و حلالیت (VLE) برای (P, T) و ترکیب خوراک) مختلف محاسبه شده است. انتخاب دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید مستقل از مقدار مایع یونی است و در دامنه 3.2-4.0 مورد استفاده می باشد. برای دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید نسبت های بزرگ (1/9) در 298.15 کلوین می باشد، علاوه بر این مایع یونی، دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید انتخاب گاز را از حدود 1.2-3.7 افزایش می دهد. برای درجه حرارت بالا (333.15 کلوین) و نسبت خوراک دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید بالا، علاوه بر این، مایع یونی تنها با استفاده از جداسازی فراهم می شود، زیرا هیچ VLE برای سیستم دوتایی دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید بدون مایع یونی وجود ندارد.

کلمات کلیدی: دی اکسید کربن، هیدروژن سولفید، حلالیت گاز، مایع های یونی، معادله حالت، تعادل فاز، تفکیک

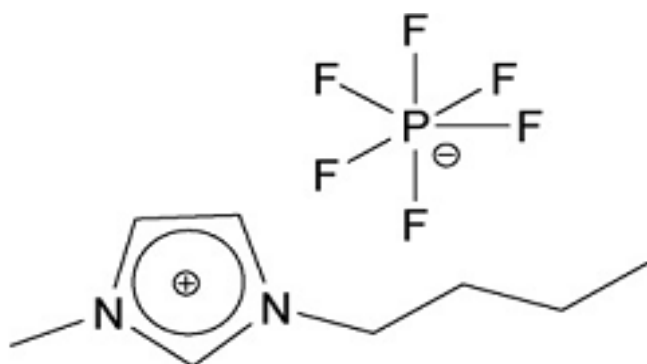
مایع مایع، تفکیک گاز

1. مقدمه

سولفید هیدروژن و دی اکسید کربن معمولاً از گازهای طبیعی هستند و سنتز آن‌ها از طریق جذب مواد شیمیایی با استفاده از محلول‌های آبی از پایگاه‌های آلی مانند آمین تک، مخلوط آمین، یا مخلوطی از یک آمین و یک اسید آمینه می‌باشد [1،2]. دی اتانولامین (DEA) و متیل دیاتانولامین (MDEA) برای درمان گاز طبیعی [13/3] و تحقیقات گسترده توسط چندین گروه در محلول‌های آبی آلکانولامین، به ویژه (MEA) انجام شده است. روند مع شامل جذب رقابتی هیدروژن سولفید و دی اکسید کربن در یک ستون بسته بندی شده در دمای پایین (ترجیحاً دمای محیط) و فشار بالا (تا حدود 4 مگاپاسکال یا بیشتر) است. دفع گاز یا بازسازی حلال در دمای بالا (معمولاً در حدود 350-400 کلوین) و فشار پایین با استفاده از ستون سلب رخ می‌دهد. معایب محلول‌های آبی آلکانولامین شامل اتلاف آمین در طول بازسازی، انتقال آب به جریان گاز، تخریب آمین، دمای پایین و جذب فشار بالا است، همه این موارد باعث می‌شود روند اقتصادی گران شود.

مایع یونی در دمای اتاق (RTILs) برای ضبط گازها از جمله دی اکسید کربن ارائه شده است. چندین مطالعه حلالیت دی اکسید کربن در بسیاری از RTILs گزارش شده است [14-27]. با این حال تنها محققان چند فاز باینری PTX (ترکیب فشار دما) رفتار هیدروژن سولفید در مایعات یونی را بررسی کرده‌اند [28-31]. جو و مدر [28] حلالیت هیدروژن سولفید در هگزاfluorofosfat 1-بوتیل 3-متیل ([bmim] [PF₆]) در درجه حرارت از 298.15 به 403.15 کلوین و فشار تا 9.6 مگاپاسکال را گزارش داده‌اند. پوملی و همکاران [29] حلالیت هیدروژن سولفید در مایعات یونی مختلف مبتنی بر ایمیدازولیوم با آنیون‌های مختلف و در یک سری از BIS‌ها را بر اساس مایعات یونی با کاتیون‌های مختلف در 298.15 کلوین و 1400 کیلو پاسکال اندازه‌گیری کرده‌اند. هاینتر و همکاران [30] برای اندازه‌گیری حلالیت دی اکسید کربن و مخلوطی از نیتروژن / هیدروژن سولفید در یک محلول یونی با کاتیون آمونیوم و آنیون کلرید از 300 تا 500 کلوین و فشار تا 2.3 و 30 بار برای هیدروژن سولفید و دی اکسید کربن تلاش کرده‌اند، به این ترتیب؛ با این حال ساختار مایع یونی ناشناخته بود و فرمول شیمیایی تقریبی برای محاسبه حلالیت کسر در نظر گرفته شد.

به تازگی، جلیلی و همکاران [31] حلالیت هیدروژن سولفید در سه RTIL ($[bmim][PF_6]$ ، $[bmim][BF_4]$ و $[bmim][Tf_2N]$) در درجه حرارت از 303.15 به 343.15 کلوین و فشار تا 1 مگاپاسکال را اندازه گیری کرده اند. در هر مورد حلالیت هیدروژن سولفید در مقایسه با دی اکسید کربن بسیار بالاتر بود. به عنوان مثال، ثابت قانون هنری 51.7 و 1.43 بار در 298 کلوین برای دی اکسید کربن و هیدروژن سولفید در $[bmim][PF_6]$ RTIL است، به ترتیب [17،31]. این تفاوت بزرگ در ثابت قانون هنری نشان می دهد که انتخاب و تفکیک این گازها ممکن است با استفاده از مایعات یونی انجام شود.



شکل 1. ساختار شیمیایی $[bmim][PF_6]$.

در مطالعه حاضر، ما برای اولین بار نمودارهای فاز سه تایی از دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید / $[bmim][PF_6]$ ، با استفاده از روش معادله (EOS) مکعب ساخته ایم [14،32]. دوربین کانن EOS سه تایی بر روی پارامترهای تعامل هر یک از سیستم باینری بر اساس، پارامترهای کنش دوگانه محیط های یادگیری مجازی (تعادل بخار-مایع) نصب ، و اندازه گیری های قبلی ما برای دی اکسید کربن / $[bmim][PF_6]$ [17] تعیین شد، و مقالات برای هیدروژن سولفید / $[bmim][PF_6]$ [28] و دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید [13] داده شد. ما همچنین VLE را برای دی اکسید کربن / $[bmim][PF_6]$ و هیدروژن سولفید / $[bmim][PF_6]$ در سیستم های دوتایی اندازه گیری کرده ایم.

به منظور بررسی اعتبار EOS سه تایی، آزمایش VLE برای هیدروژن سولفید / $[bmim][PF_6]$ / دی اکسید کربن تحت T های مختلف، انجام شد و اعتبار دوربین EOS رضایت بخش تایید شد. پس از آن، انتخاب دی اکسید

کربن / هیدروژن سولفید با و بدون $[PF_6] [bmim]$ RTIL در چند T، و شرایط P محاسبه شده است. مزیت انتخابی با استفاده از این RTIL بر اساس محاسبات فاز سه تایی مورد بحث می باشد.

2. تجربی

1.2. مواد

سولفید هیدروژن (با خلوص کسر < 0.995) و دی اکسید کربن (با خلوص < 0.9999) از MG صنایع (فیلادلفیا، PA) خریداری شد. شکل 1 ساختار شیمیایی را فراهم می کند. نمونه مایع یونی $[PF_6] [bmim]$ خشک شد و گاز زدایی توسط قرار دادن نمونه در یک لوله شیشه ای بوروسیلیکات و کشیدن یک خلاء در نمونه با یک پمپ دیافراگم (فایفر، مدل MVP055-3) برای حدود 3 ساعت انجام شد. در مرحله بعد، نمونه به طور کامل با استفاده از یک توربو پمپ (فایفر، مدل TSH-071) به فشار حدود $4 \times 7/10$ کیلو پاسکال رسید، در حالی که به طور همزمان حرارت و تکان دهنده مایع یونی در دمای حدود 348 کلوین به مدت 5 روز تخلیه شد. مقدار آب نهایی توسط تیتراسیون کارل فیشر (محلول آکوا-استار C3000، کلمات C و A) و مایع یونی 482 ppm آب (بر اساس جرم) اندازه گیری شد.

2.2. اندازه گیری VLE دودویی

در گزارش قبلی، ما قابلیت انحلال گاز دی اکسید کربن از $[PF_6] [bmim]$ را با استفاده از یک ترازوی وزن سنجی (ویبولیتین، IGA 003) اندازه گیری کردیم [17]. شرح تفصیلی از تجهیزات و روش ها برای محیط های یادگیری مجازی در گزارش های قبلی ما [17،33] داده شده است. داده های حلالیت هیدروژن سولفید و $[PF_6] [bmim]$ از جو و مدر [28] گرفته شد. با این حال تمام داده ها استفاده نمی شد. ما از تحلیل ما از مطالعه حذف دو نقطه داده گذشته در 298.15 کلوین و آخرین نقطه داده در دماهای دیگری (مثلا 313.15 و 343.15 کلوین) در کد عکس نشان داده شده است [28]. چرا که این با استفاده از برنامه EOS NIST REFPROP [34] در منطقه VLLE مشخص شده است. داده دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید از بیرلین و کی [13] گرفته شده است.

3.2. اندازه گیری VLLE دودویی

هفت ظرف نمونه با فشار بالا با [PF₆] [bmim] خشک و پس از طرز کار مقالات قبلی ما [35،36] پر شد. دو نمونه با دی اکسید کربن مایع پر شده و حاوی حدود 74.2 و 95.5 درصد دی اکسید کربن است. پنج نمونه با هیدروژن سولفید مایع پر شده و حاوی حدود 89.2، 93.2، 95.4، 98.4 و 99.2 درصد هیدروژن سولفید است. سولفید هیدروژن به عنوان یک گاز بسیار خطرناک طبقه بندی شده و باید هنگام دست زدن به آن با احتیاط عمل شود. سولفید هیدروژن قابل اشتعال است و حد مواجهه مجاز آن 8-12 ساعت است (AEL) از 10 پی پی ام بسیار سمی است. در آزمایش ما، سیلندر هیدروژن سولفید و نمونه همیشه به کار گرفته شده و ذخیره شده در یک هود تهویه شدند. تجهیزات مناسب حفاظت فردی هنگام آماده سازی و جابجایی نمونه فرسوده شد و تمام مواد در معرض سوختن قرار گرفته است. سولفید هیدروژن دارای بوی قوی است که به راحتی قابل تشخیص (آستانه بو 0.0047 ppm) می باشد؛ با این حال، حساسیت پس از مواجهه اولیه از دست می رود؛ بنابراین، تمام کارکنان نیاز به پوشیدن مدال نظارت بر هوا دارند، که می تواند هیدروژن سولفید را در 0.25 ppm زمان کار در آزمایشگاه تشخیص دهد.

آزمایش VLLE با این نمونه ها در دمای ثابت از حدود 283 به 293 کلوین برای دی اکسید کربن + [bmim] [PF₆] و 273 به 342 کلوین برای [PF₆] [bmim] + هیدروژن سولفید با استفاده از روش حجمی [35،36] انجام شده است. VLLE با این روش تنها جرم و اندازه گیری ارزش بدون هیچ روش تحلیلی را برای ترکیب مولر و یا تجزیه و تحلیل شیمیایی تعیین می شود. توجه ویژه باید انجام شود تا اطمینان حاصل شود که هیچ نشستی از ظروف نمونه رخ نمی دهد، سپس با دی اکسید کربن با فشار بالا و هیدروژن سولفید پر شود. وزن ظروف نمونه چند بار قبل از شروع و پس از اتمام آزمایش VLLE برای تعیین کمیت که آیا هر دی اکسید کربن یا هیدروژن سولفید از ظرف نمونه فرار کرده بود مورد بررسی قرار گرفت. نمونه ها در داخل حمام با آب دمای ثابت قرار گرفته و به صورت مکانیکی مخلوط شد است، در حالی که در مخزن [35] قرار دارد. دمای حمام با استفاده از یک دماسنج مقاومت پلاتین استاندارد کالیبره شده (مدل SPRT 5699، محدوده 73-933 کلوین) و بازخوانی (مدل 1560 با ماژول SPRT 2560) انجام شده است. ابزار Blackstack و SPRT استاندارد دمای ثانویه با دقت قابل ردیابی NIST به میزان ± 0.005 کلوین هستند. عدم ثبات در درجه حرارت حمام 0.2 کلوین بود.

یکی از جنبه های مفید روش VLLE توانایی به دست آوردن حجم هر مایع به طور همزمان با کسر هر مایع در هر شرایط هم دما است. سپس، حجم اضافی مولر (یا حجم مخلوط کردن) از هر محلول مایع (V^E و $V^{E'}$) را می توان به دست آورد، با استفاده از حجم های جزء خالص V_1^0 (دی اکسید کربن یا هیدروژن سولفید) و V_2^0 [PF6] [bmim] (استفاده کرده اند):

$$V^{E'} = V'_m - x'_1 V_1^0 - x'_2 V_2^0 \quad \text{or} \quad V^E = V_m - x_1 V_1^0 - x_2 V_2^0, \quad (1)$$

که در آن حجم V_m اندازه گیری مخلوط (V'_m) برای فاز L' پایین تر است یا V_m برای فاز بالا است)، و (x'_1, x'_2) و یا x_1, x_2 کسر گاز دی اکسید کربن و یا هیدروژن سولفید هستند (1) و [PF6] [bmim] (2) در مراحل L' و L بود. حجم های مایع اشباع دی اکسید کربن و هیدروژن سولفید با استفاده از برنامه EOS NIST REFPROP [34] محاسبه شد. حجم برای [PF6] [bmim] از داده چگالی مایع شناخته شده [17] محاسبه شد.

ذکر این مطلب مهم است که چگالی فاز بخار که شامل دی اکسید کربن یا هیدروژن سولفید با سهم ناچیز [bmim] [PF6] می باشد باید به درستی برای معادلات موازنه جرم اختصاص داده شوند. مشاهده ترکیب فاز مایع و حجم های برای [PF6] [bmim] + دی اکسید کربن و [PF6] [bmim] + هیدروژن سولفید در جداول 1 و 2 نشان داده شده است. مجموع عدم قطعیت ($\delta x_{TE} = \sqrt{\delta x_{RE}^2 + \delta x_{SE}^2}$) با محاسبه هر دو اشتباهات کلی تصادفی (δx_{RE}) و سیستماتیک (δx_{SE}) برآورد شد. پارامترهای زیر در آزمایش با یک اثر در خطاهای تصادفی در نظر گرفته شد: ثابت کالیبراسیون ظرف نمونه، جمعی از دی اکسید کربن، هیدروژن سولفید و [PF6] [bmim] می باشد، ارتفاع از مراحل بالا و پایین بدست آمد. ارتفاع بزرگترین اثر کلی بود. خطاهای سیستماتیک شامل درستی برای سطح نمونه، گسترش منطقه، منیسک، و مول فاز بخار اصلاح شده است. برای جزئیات بیشتر در برآورد از کل خطاها منابه [35،36] را ببینید.

جدول 1. مقدار تجربی برای [PF6] [bmim] + دی اکسید کربن.

T/K	$x_1/\text{mol}\%$	$x_1/\text{mol}\%$	$\bar{V}^a/\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$	$\bar{V}^b/\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$	$\bar{V}^{ex}/\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$	$\bar{V}^{ex}/\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$
283.1	61.1 ± 1.0	100.0-0.4	105.1 ± 1.5	51.0 ± 1.0	-6.2 ± 1.5	-0.1 ± 1.0
293.0	59.7 ± 1.0	100.0-0.4	106.2 ± 1.5	57.3 ± 1.0	-9.7 ± 1.5	-0.2 ± 1.0

جدول 2. مقدار تجربی برای [bmim] [PF₆] + هیدروژن سولفید .

T/K	$x_1/\text{mol}\%$	$x_1/\text{mol}\%$	$\bar{V}^a/\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$	$\bar{V}^b/\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$	$\bar{V}^{ex}/\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$	$\bar{V}^{ex}/\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$
273.6	92.3 ± 2.5	98.9 ± 0.5	51.5 ± 2.0	41.0 ± 1.4	-2.1 ± 2.0	-1.8 ± 1.4
282.8	89.8 ± 2.4	99.2 ± 0.5	54.0 ± 2.5	42.0 ± 1.3	-4.7 ± 2.5	-1.3 ± 1.3
294.6	88.5 ± 2.3	99.5 ± 0.5	56.9 ± 2.4	43.5 ± 1.2	-5.5 ± 2.4	-0.9 ± 1.2
309.6	85.8 ± 2.2	99.6 ± 0.4	61.4 ± 2.0	45.7 ± 1.1	-7.5 ± 2.0	-0.7 ± 1.1
325.2	84.0 ± 2.1	99.7 ± 0.3	66.0 ± 1.8	48.8 ± 1.0	-8.7 ± 1.8	-0.4 ± 1.0
342.2	82.1 ± 2.1	100.0-0.4	71.0 ± 1.8	53.3 ± 1.0	-10.9 ± 1.8	0.0 ± 1.0

به منظور درک مرز منحنی VLLE برای [bmim] [PF₆] / دی اکسید کربن و [bmim] [PF₆] / هیدروژن سولفید ، تلاشی برای اندازه گیری ابر نقاط با مخلوط های دوتایی حاوی کسر از 74.2 و 95.5٪ ساخته شده بود. [bmim] [PF₆] + و دی اکسید کربن و [bmim] [PF₆] + هیدروژن سولفید 93.2 و 95.4٪ بود. شروع در دمای محیط 293 کلوین، دو فاز مایع وجود داشته است و درجه حرارت با مخلوط کردن دستی در حمام دمای ثابت متانول و یخ خشک به حدود 198 رسید. یکی از این نمونه ها (93.2 درصد [bmim] [PF₆] + هیدروژن سولفید) تک فاز در 198 کلوین کاهش یافت. درجه حرارت نمونه تک فاز به آرامی (1 کلوین / دقیقه) بیان شد ، تا زمانی که یک لایه قابل مشاهده شد ابر در داخل ظرف نمونه با فشار بالا تبدیل شده است. درجه حرارت، هنگامی که لایه ابر تشکیل شد ثبت شده است. سطح مایع در لوله در دمای نقطه نیز باید به منظور محاسبه حجم فاز بخار اندازه گیری شود. فرض بر این است که بخار تنها شامل هیدروژن سولفید است و با استفاده از یک برنامه EOS [34] چگالی بخار اشباع در دمای نقطه ابر با مقدار هیدروژن سولفید در فاز مایع محاسبه شد.

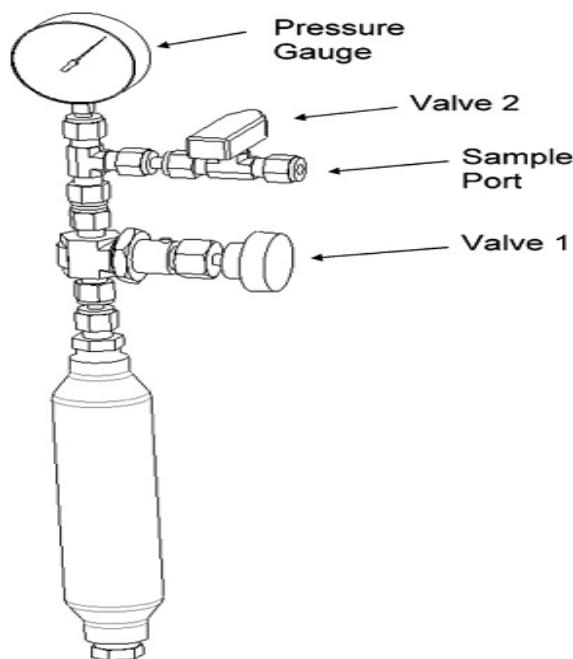
4.2 اندازه گیری VLE ترنری

ما همچنین آزمایش VLE را برای سیستم سه تایی موجود (دی اکسید کربن / [bmim] [PF₆] / هیدروژن سولفید) در شرایط مختلف ترمودینامیکی به منظور تأیید مدل EOS انجام داده ایم.

پنج سلول نمونه ساخته شده است که در شکل 2 نشان داده شده است. هر سلول با استفاده از اتصالات اسویچلوک ساخته شده بود، دو دریچه اسویچلوک (شیر 1 دریچه ساقه، تعداد قسمت SS-4JB1 و شیر 2 شیر توپی، شماره SS-426S4 است) می باشند، و یک استوانه از جنس استنلس استیل، و فشار سنج (پارکر، 0-0.75 مگاپاسکال) وجود دارد. حجم داخلی هر سلول با اندازه گیری جرم متانول مورد نیاز سلول به طور کامل پر شده است و چگالی متانول در دمای پر محاسبه شد. حجم داخلی هر سلول $2.5\text{cm}^3 \pm 90$ (VT) بود. مایع یونی توسط (0.61-7.14 گرم) بارگذاری شد و وزن بر روی یک تعادل تحلیلی با رزولوشن 0.01 گرم در داخل یک جعبه خشک نیتروژن اندازه گیری شد. به منظور بار مایع یونی در سلول، فشار سنج، شیر آلات و اتصالات برداشته شد و یک پیپت شیشه ای (10 میلی لیتر) که از طریق باز کردن سیلندر مناسب برای پر کردن استفاده شد. فشار سنج، شیر آلات و اتصالات جمع شده بودند همانطور که در شکل 2 نشان داده شده است. و سلول نمونه از جعبه خشک برداشته شد. پس از پر کردن با مایع-مایع یونی، همراه نمونه همیشه در یک حالت عمودی عمودی حفظ شد زمانی که شیر 1 باز برای جلوگیری از مایع یونی در تماس با دریچه ها و فشار سنج بود. اگر سلول نمونه به حال به مخلوط شود و یا وزن را در حالت افقی، شیر 1 بسته شود و سپس یک بار در موقعیت عمودی دوباره باز کرد. سلول به پمپ دیافراگم متصل شد، با هر دو سوپاپ باز، به حذف نیتروژن باقی مانده است. پس از سلول تخلیه شد، شیر توپی (شیر 2) بسته شد و سلول برای به دست آوردن جرم مایع یونی اولیه وزن شد.

مخلوط گاز دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید نیز جرم (0.57-0.72 گرم) از یک سیلندر گاز با فشار بالا قرار گرفته است. مخلوط سه دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید گاز (9.5 / 90.5، 54.6 / 45.4، و 90.4 / 9.6 درصد دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید) وزن آماده و به روش کروماتوگرافی گازی (GC) (هیولت پاکارد HP6890) با استفاده از یک دما (80C°) تجزیه و تحلیل شد روش (GS-GASPRO) ستون موئین، طول 60 متر، 0.32 میلی متر ID، مدل 4362-113، فن آوری های Agilent، ورودی انژکتور دما 200C° ، هدایت حرارتی دمای 250C° آشکارساز، حامل گاز هلیوم، جریان 355 سانتی متر نرخ دقیقه 1 با نسبت 1، حجم تزریق 25L). مراقبت های ویژه باید زمانی که آماده دی اکسید کربن گاز هیدروژن سولفید / برای جلوگیری از هیدروژن سولفید متراکم گرفته شود.

فشار بخار اشباع برای دی اکسید کربن در 293 کلوین با 6.0 مگاپاسکال است. با این حال، فشار اشباع برای هیدروژن سولفید در 293 کلوین کمتر از 1.78 مگاپاسکال است. بنابراین، فشار کل برای سه مخلوط گازی (9.5 / 90.5، 54.6 / 45.4، 90.4 / 9.6 درصد دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید) 1.07، 1.07 و 1.03 مگاپاسکال بود.



شکل 2. دیاگرام شماتیک از یک سلول نمونه.

سلول های نمونه در داخل یک مخزن پلکسی گلاس قرار داده شده اند و درجه حرارت با دمای خارجی حمام (VWR بین المللی، مدل S1160) که آب از طریق یک کویل مس در داخل مخزن کنترل می شد. حمام با همزن (شرکت مهندسی اررو، مدل 1750) و درجه حرارت با یک ترموکوپل (دماسنج فلوک II52) اندازه گیری شده. درجه حرارت در ابتدا در حدود 296 کلوین بود. سطح آب در مخزن به طوری بود که تمام سلول زیر آب بود از جمله فشار سنچ 2 سانتی متر پایین تر تنظیم شد. فشار در هر سلول ثبت شد تا زمانی که هیچ تغییر در فشار اندازه گیری نشده است. برای اطمینان از نمونه ها در تعادل و به درستی مخلوط شد، سلول های لحظه ای از آب خارج شدند و به خوبی تکان داده شد. سلول ها در حمام قرار داده شد و روند تکرار شد تا زمانی که هیچ تغییر در فشار اندازه گیری نشده است. در اغلب موارد سلول در 12 تا 24 ساعت به تعادل رسیده است. روند در درجه حرارت بالاتر از حدود 322 کلوین تکرار شد.

ابزار اندازه گیری فشار با استفاده از فشارسنج Paroscientific مدل K1-765 کالیبره شد. دماسنج لیزری Fluke با استفاده از دماسنج با مقاومت پلاتین استاندارد کالیبره شده (مدل SPRT 5699، هارت علمی، محدوده 73-933 K) و بازخوانی با (Blackstack مدل 1560 با ماژول SPRT 2560) انجام شد. عدم قطعیت دما و فشار ± 0.2 کلون و ± 0.005 مگاپاسکال مشاهده شده است.

3 مدل ترمودینامیکی

به منظور مطالعه رفتار فاز یک سیستم سه تایی دی اکسید کربن / [PF6] [bmim] / هیدروژن سولفید، ما برای اولین بار مدل های ترمودینامیکی را بر اساس معادلات حالت (EOS) ارائه می دهیم، که جهت مبرد / روان کننده استفاده و توسعه یافته است [32] و هیدروفلوروکربن های مختلف و مخلوط دی اکسید کربن با مایعات یونی [14]-[17,37] انجام شده است. در نوع کلی ردلیخ کونگ (RK) از EOS مکعب بر اساس روابط زیر محاسبه می شود:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a(T)}{V(V+b)}, \quad (2)$$

$$a(T) = 0.427480 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \alpha(T), \quad (3)$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c}. \quad (4)$$

بخش وابسته به درجه حرارت از یک پارامتر EOS برای ترکیبات خالص توسط فرم تجربی زیر [14]-[17,37] مدل شده است:

$$\alpha(T) = \sum_{k=0}^{\leq 3} \beta_k \left(\frac{1}{T_r} - T_r \right)^k \quad \left(T_r \equiv \frac{T}{T_c} \right). \quad (5)$$

ضرایب، β_k ، به طوری تعیین می شود که برای تولید فشار بخار هر یک از ترکیبات خالص مناسب باشد.

پارامترهای a و b برای N-component از نظر پارامترهای کنش دوگانه مربوطه خود به صورت زیر [14]-[17,37] مدل شده است.

$$a = \sum_{i,j=1}^N \sqrt{a_i a_j} f_{ij}(T) (1 - k_{ij}) x_i x_j, \quad a_i = 0.427480 \frac{R^2 T_{ci}^2}{P_{ci}} \alpha_i(T). \quad (6)$$

$$f_{ij}(T) = 1 + \frac{\tau_{ij}}{T}, \quad \text{where } \tau_{ij} = \tau_{ji} \quad \text{and} \quad \tau_{ii} = 0. \quad (7)$$

$$k_{ij} = \frac{l_{ij} l_{ji} (x_i + x_j)}{l_{ji} x_i + l_{ij} x_j}, \quad \text{where } k_{ii} = 0. \quad (8)$$

$$b = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N (b_i + b_j) (1 - k_{ij}) (1 - m_{ij}) x_i x_j, \quad b_i = 0.08664 \frac{RT_{ci}}{P_{ci}},$$

where $m_{ij} = m_{ji}$ and $m_{ii} = 0$. (9)

TCI: دمای بحرانی گونه i ام؛ PCI: فشار بحرانی گونه i ام؛ R: ثابت گاز جهانی؛ XI: کسر گونه i ام.

در مدل فوق، حداکثر چهار پارامتر کنش دوگانه: l_{ij} ، l_{ji} ، m_{ij} و τ_{ij} برای هر جفت دوتایی وجود دارد. با این حال، اغلب تنها دو یا سه پارامتر برای موارد کافی است. ϕ_i ضریب فوگاسیته از گونه i ام برای مدل EOS است، که برای محاسبه تعادل فاز مورد نیاز است، و عبارت است از:

$$\ln \phi_i = \ln \frac{RT}{P(V-b)} + b'_i \left(\frac{1}{V-b} - \frac{a}{RTb(V+b)} \right) + \frac{a}{RTb} \left(\frac{a'_i}{a} - \frac{b'_i}{b} + 1 \right) \ln \frac{V}{V+b}, \quad (10)$$

که در آن یک $a'_i \equiv (\partial na / \partial n_i)_{n_j \neq i}$ و $b'_i \equiv (\partial nb / \partial n_i)_{n_j \neq i}$: تعداد مول ها و n_i = مول گونه i ام (or $x_i = n_i/n$) است. اشکال صریح از a'_i و b'_i ممکن است برای خوانندگان مفید باشد و به صورت زیر داده می شود:

$$a'_i = 2 \sum_{j=1}^N \sqrt{a_i a_j} f_{ij} x_j \left\{ 1 - k_{ij} - \frac{l_{ij} l_{ji} (l_{ij} - l_{ji}) x_i x_j}{(l_{ji} x_i + l_{ij} x_j)^2} \right\} - a, \quad (11)$$

$$b'_i = \sum_{j=1}^N (b_i + b_j) (1 - m_{ij}) x_j \left\{ 1 - k_{ij} - \frac{l_{ij} l_{ji} (l_{ij} - l_{ji}) x_i x_j}{(l_{ji} x_i + l_{ij} x_j)^2} \right\} - b. \quad (12)$$

حلالیت تعادلی را برای VLE سه تایی را می توان با حل شرایط تعادل زیر بدست آورد:

$$x_i \phi_i^L = y_i \phi_i^V \quad (i = 1, 2, 3), \quad (13)$$

که در آن x_i : کسر مایع گونه i ام ($x_1 + x_2 + x_3 = 1$) است. y_i : کسر بخار گونه i ام ($y_1 + y_2 + y_3 = 1$) می باشد.

ϕ_i^L : ضریب فوگاسیته فاز مایع از گونه i ام؛

ϕ_i^V : ضریب فوگاسیته فاز بخار از گونه i ام.

در مورد سه تعادل فاز (VLLE)، معادلات مربوط به معادله (13) به صورت زیر تبدیل می شوند:

$$x_i^{L1} \phi_i^{L1} = x_i^{L2} \phi_i^{L2} = y_i^V \phi_i^V \quad (i = 1, 2, 3), \quad (14)$$

که در آن علامت، $L1$ و $L2$ ، به معنی یک فاز مایع (1) و فاز مایع دیگری (2) از VLLE بود. راه حل عددی معادله (13) و یا معادله (14) (معادلات غیر خطی همراه) را می توان با استفاده از روش TP-Flash [38] به دست آورد.

جدول 3. EOS ثابت برای ترکیبات خالص مورد استفاده در مطالعه حاضر.

	Hydrogen sulfide	Carbon dioxide	[bmim][PF ₆] ^a
Molar mass/gmol ⁻¹	34.08	44.01	284.18
T _c /K	373.60	304.13	860.5
P _c /MPa	9.0080	7.377	2.645
β_0	0.99879	1.00049	1.0
β_1	0.33206	0.43866	0.62627
β_2	-0.049417	-0.10498	-
β_3	0.0046387	0.06250	-

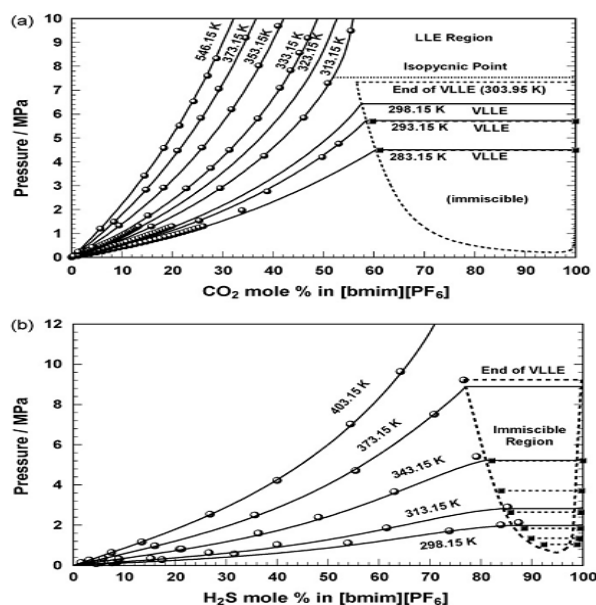
جدول 4. پارامترهای کنش دوگانه بهینه در معادلات (7) - (9).

System (1)/(2)	l_{12}	l_{21}	$m_{12} = m_{21}$	$\tau_{12} = \tau_{21}/K$
CO ₂ /[bmim][PF ₆]	0.2725	0.2498	-0.2988	57.39
H ₂ S/[bmim][PF ₆]	0.2606	0.2170	-0.2400	69.16
CO ₂ /H ₂ S	0.04014	2.7134	0.0	-23.37

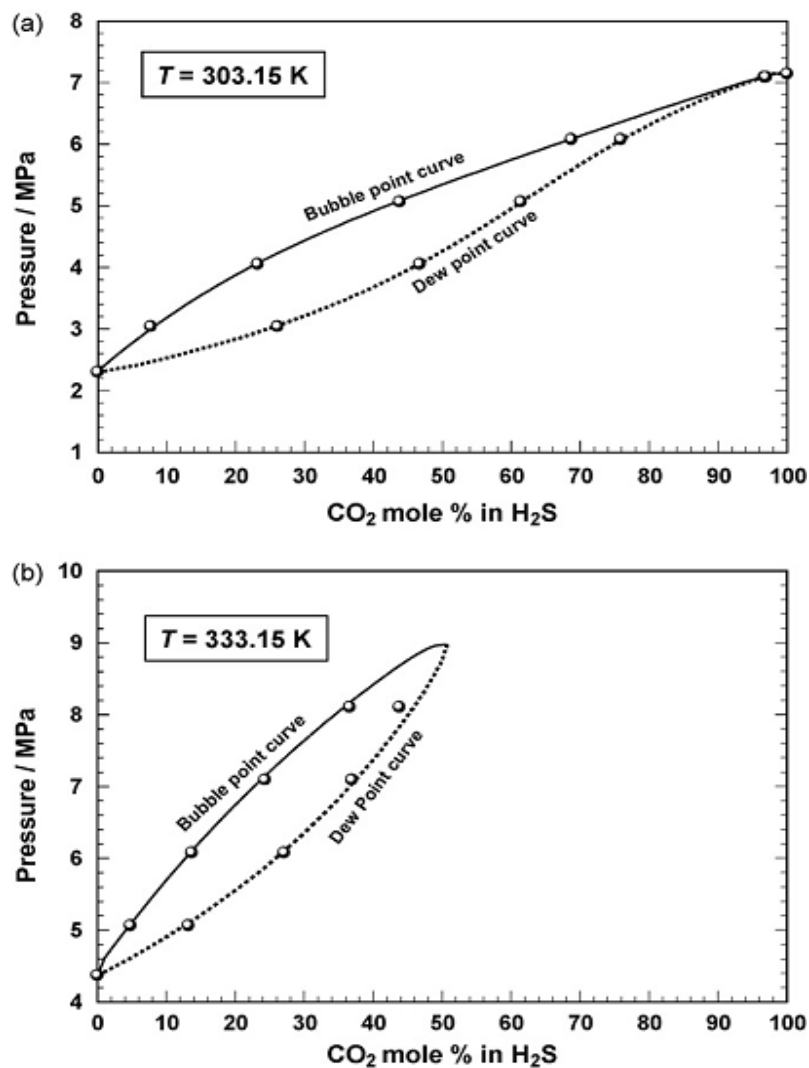
1.3 پارامترهای مدل EOS

اجزاء EOS خالص برای سولفید هیدروژن و دی اکسید کربن بر اساس اطلاعات منابع [34،39] مشخص شد. به ترتیب. برای مایع یونی، پارامترهای بحرانی (Tc و PC) و β_k در معادلات (3) - (5) از کار قبلی ما [37] گرفته شد.

جدول 3 ثابت EOS را برای ترکیبات حاضر نشان می دهد. پارامترهای دودویی تعامل، m_{ij} ، l_{ij} ، l_{ji} و τ_{ij} در معادلات (7) - (9) ارائه شده اند، برای هر جفت باینری با استفاده از رگرسیون غیر خطی به دست آمده را تجزیه و تحلیل از PTX تجربی (ترکیب فشار دما) داده ها را برای دی اکسید کربن [17] [PF6] [bmim] + ، هیدروژن سولفید + [PF6] [bmim] [28] و دی اکسید کربن + هیدروژن سولفید [13] سیستم های. جدول 4 پارامترهای بهینه کنش دوگانه برای جفت سیستم در حال حاضر ارائه شده است.



شکل 3. نمودار فاز ایزوترمال (فشار مایع). (الف) نمودار فاز PX در سیستم دوتایی دی اکسید کربن [bmim] + [PF₆]. (ب) نمودار فاز PX در سیستم دوتایی هیدروژن سولفید + [bmim] [PF₆].



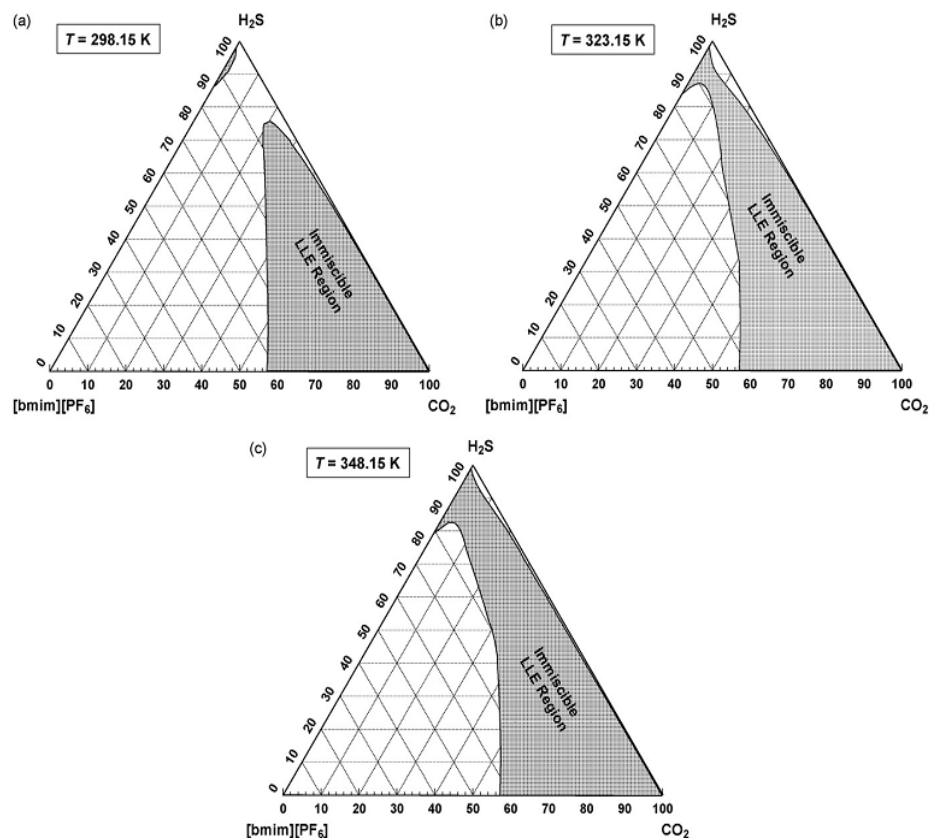
شکل 4. نمودار ایزوترمال VL (ترکیب فشار مایع بخار) از هیدروژن سولفید / دی اکسید کربن. نمادها: داده ها از برنامه REFPROP [34]. (الف) $T = 303.15\text{K}$ و (ب) $T = 333.15\text{K}$.

2.3. اعتبار سنجی مدل EOS

شکل 3A دیاگرام فاز PTX را نشان می دهد که مدل پیش بینی قبلی ما حلالیت دی اکسید کربن در [bmim] [PF₆] با داده VLLE است. انحراف استاندارد برای P مقابل مناسب X₁ بسیار عالی است (DP = 0.017) مگاپاسکال). پیش بینی های مدل EOS نیز با داده VLLE مشاهده شده و در شکل A3 مقایسه شده است. و در شرایط بسیار خوبی با داده های تجربی در 283 و 293 کلوین نشان داده شده که نشان می دهد این سیستم دوتایی رفتار فازی نوع V دارد که با توجه به طبقه بندی فون کونیونبرگ و اسکات [40] هستند. مدل EOS دمای محلول

بحرانی (LCST) در حدود 197 کلوین در 95.6 درصد دی اکسید کربن در $[PF_6][bmim]$ پیش بینی کرده است. با این حال، منحنی VLLE به احتمال زیاد با مرز تعادل جامد و مایع تداخل دارد زیرا مایع غنی از دی اکسید کربن (فاز بالا) در نمونه های حاوی 74.2 و 95.5 درصد $[PF_6][bmim]$ + دی اکسید کربن زمانی که به 198 کلوین می رسد شروع به سفت شدن می کنند.

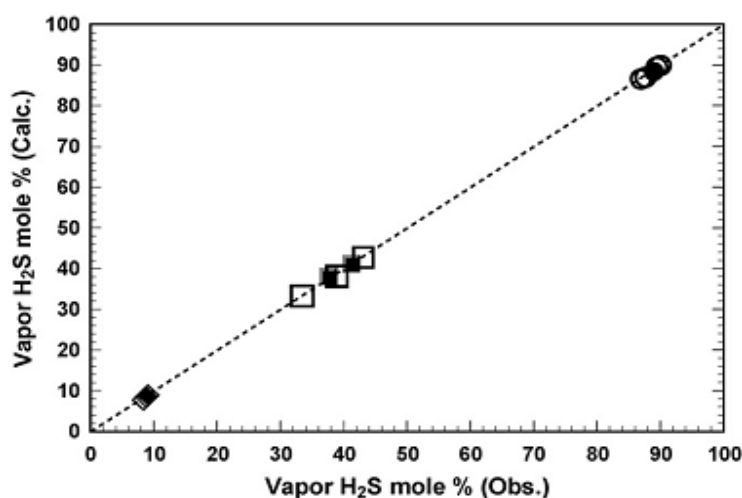
شکل 3B نشان می دهد نمودار فاز PTX مشابه اندازه گیری حلالیت هیدروژن سولفید در $[PF_6][bmim]$ توسط جو و مدر [28] است. انحراف استاندارد برای P مناسب X_1 دوباره بسیار عالی است ($DP = 0.036$ مگاپاسکال). پیش بینی های مدل EOS با داده VLLE در مقایسه 273.6، 282.8، 294.6، 309.6، 325.2 و 342.2 کلوین مشاهده شده است که نشان می دهد این سیستم دوتایی نوع رفتار فاز V را دارا می باشد. نقطه ابر در 254 ± 5 کلوین با نمونه های حاوی 93.1 درصد هیدروژن سولفید در $[PF_6][bmim]$ اندازه گیری شد. نقوش برجسته بر روی مدل EOS و اندازه گیری VLLE در حدود 258 کلوین در 95٪ هیدروژن سولفید در $[PF_6][bmim]$ محاسبه شد. با این حال، عدم وجود یک نقطه ابری برای نمونه های حاوی 95.5 درصد هیدروژن سولفید در $[bmim]$ $[PF_6]$ ممکن است دو مرحله نشان دهد که در یک منطقه باریک در دمای پایین وجود داشته باشد. توضیح احتمالی برای تداوم دو فاز در دمای پایین عبارتند از: $[PF_6][bmim]$ بسیار چسبناک و نمونه مخلوط شده است، سیستم ممکن است شبه پایدار باشد، و یا کاهش سرعت بحرانی در حال وقوع باشد.



شکل 5. نمودار فاز ایزوترمال سه تایی دی اکسید کربن / $[bmim][PF_6]$ / هیدروژن سولفید محاسبه شده توسط مدل EOS است. (الف) $T = 298.15$ کلوین، (ب) $T = 323.15$ کلوین، و (ج) $T = 348.15$ کلوین.

جدول 5. داده های تجربی مخلوط سه تایی VLE.

Feed CO_2 /mol%	Feed H_2S /mol%	Feed $[bmim][PF_6]$ /mol%	T/K	P/MPa	Liquid H_2S calculated/mol%	Liquid $[bmim][PF_6]$ calculated/mol%	Vapor H_2S calculated/mol%	Vapor H_2S measured/mol%
69.3 ± 0.7	7.3 ± 0.1	23.4 ± 0.8	296.1	0.474	3.2 ± 0.1	88.9 ± 0.2	8.8 ± 0.2	9.2 ± 1.0^a
58.9 ± 0.8	6.2 ± 0.1	34.9 ± 0.9	296.1	0.460	2.9 ± 0.1	89.3 ± 0.2	8.3 ± 0.2	8.8 ± 1.0^a
48.5 ± 0.8	5.1 ± 0.1	46.4 ± 0.9	296.4	0.453	2.6 ± 0.1	89.7 ± 0.2	7.7 ± 0.3	8.3 ± 1.0^a
42.6 ± 0.5	35.5 ± 0.4	21.9 ± 0.8	296.2	0.543	18.7 ± 0.2	76.5 ± 0.3	42.2 ± 0.6	43.0 ± 1.0^b
27.9 ± 0.5	23.2 ± 0.4	48.9 ± 0.9	296.0	0.460	14.1 ± 0.1	81.2 ± 0.2	37.0 ± 1.0	38.8 ± 1.0^b
19.1 ± 0.4	15.9 ± 0.3	65.1 ± 0.7	296.3	0.425	11.2 ± 0.1	84.0 ± 0.2	32.1 ± 1.0	33.4 ± 1.0^b
7.6 ± 0.1	71.9 ± 0.7	20.5 ± 0.8	296.1	0.494	33.9 ± 0.6	65.1 ± 0.7	89.4 ± 0.3	89.5 ± 1.0^c
8.4 ± 0.1	79.9 ± 0.7	11.7 ± 0.7	296.0	0.494	34.2 ± 0.4	64.9 ± 0.4	90.0 ± 0.2	90.0 ± 1.0^c
5.1 ± 0.1	48.7 ± 0.8	46.2 ± 0.9	296.0	0.446	30.7 ± 0.4	68.3 ± 0.5	86.4 ± 0.7	87.7 ± 1.0^c
4.3 ± 0.1	40.7 ± 0.7	55.0 ± 0.8	294.8	0.343	25.3 ± 0.6	73.8 ± 0.5	85.7 ± 0.8	86.9 ± 1.0^c
48.5 ± 0.8	5.1 ± 0.1	46.4 ± 0.9	322.7	0.501	1.7 ± 0.2	93.2 ± 0.1	8.5 ± 0.3	8.9 ± 1.0^a
27.9 ± 0.5	23.2 ± 0.4	48.9 ± 0.9	322.7	0.536	9.2 ± 0.1	87.5 ± 0.1	40.9 ± 0.9	41.2 ± 1.0^b
19.1 ± 0.4	15.9 ± 0.3	65.1 ± 0.7	322.5	0.515	8.1 ± 0.1	88.5 ± 0.1	37.5 ± 1.0	37.6 ± 1.0^b
5.1 ± 0.1	48.7 ± 0.8	46.2 ± 0.9	322.4	0.550	20.9 ± 0.3	78.5 ± 0.4	88.6 ± 0.5	88.7 ± 1.0^c
4.3 ± 0.1	40.7 ± 0.7	55.0 ± 0.8	322.3	0.419	16.2 ± 0.3	83.3 ± 0.3	88.4 ± 0.6	89.3 ± 1.0^c



شکل 6. مقایسه داده VLE تجربی و محاسبه شده برای سیستم سه تایی دی اکسید کربن / [PF₆] [bmim] / هیدروژن سولفید. محاسبه ترکیب فاز بخار هیدروژن سولفید با هیدروژن سولفید مشاهده شده در ترکیبات بخار برای شرایط آزمایشی مختلف مقایسه شده است (جدول 5 را ببینید).

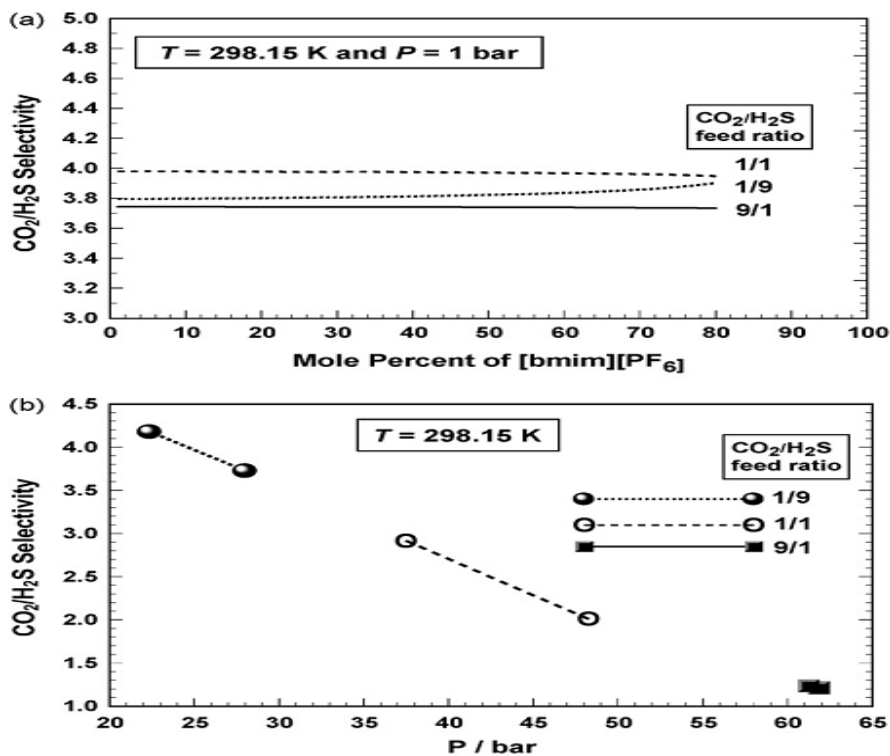
تبادل مایع (VLE) بخار مخلوط دی اکسید کربن + هیدروژن سولفید از [13] به دست آمده. انتخاب ایزوترم (303.15 و 333.15 کلوین)، در مقایسه با محاسبات EOS در شکل A4 و B نشان داده شده است. لازم به ذکر است که VLE در 333.15 کلوین بالاتر از 50 درصد دی اکسید کربن در هیدروژن سولفید است. اگرچه رفتار حلالیت هر یک از سیستم باینری به خوبی با مدل EOS حاضر مرتبط است، که در شکل 3 و 4 نشان داده شده است. پیش بینی رفتار فازی سیستم سه تایی دی اکسید کربن / [PF₆] [bmim] / هیدروژن سولفید ممکن است همیشه بر اساس پارامترهای کنش دوگانه تضمین شود. به ویژه برای سیستم های حاوی سیالات فوق بحرانی و / یا ترکیبات غیر فرار مانند مورد حاضر، اعتبار مدل EOS پیشنهاد شده برای مخلوط سه تایی باید تجربی بررسی شود. نمودار ایزوترمال فاز سه تایی توسط EOS حاضر در 298.15، 323.15 و 348.15 کلوین در شکل 5 نشان داده شده است. که در آن بخش بزرگی از ترکیب سه تایی تفکیک مایع مایع (LLE) که نشان دهنده شکاف مخلوط نشدنی دودویی در دی اکسید کربن + [PF₆] [bmim] و هیدروژن سولفید + [PF₆] [bmim] است؛ به شکل A3 و B نگاه کنید.

4. نتایج و بحث

حالا که مدل EOS تأیید شده است، ما می توانیم رفتار حلالیت سیستم سه تایی حاضر را با اعتماد به نفس پیش بینی کنیم. به منظور ارزیابی امکان جداسازی گاز توسط تقطیر استخراجی و یا روش جذب انتخابی، انتخاب گاز A / B، توانایی جداسازی گازهای A و B در فاز گاز، و یا انتخاب جذب گاز SB / A در فاز مایع وجود دارد و در B تعریف شده است. [43-41]:

$$\alpha_{A/B} = S_{B/A} = \frac{y_A/x_A}{y_B/x_B} \quad (15)$$

که در آن x_A (یا x_B) و y_A (یا y_B) فرaksiون مول A (یا B) در مرحله محلول مایع یونی و بخار فاز می باشند. در اینجا ما دلالت دی اکسید کربن A و هیدروژن سولفید به عنوان B دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید (A / B) در فاز گاز با استفاده از مدل EOS حاضر در P, T مختلف مورد بررسی قرار گرفته است، و نتایج در شکل 7 و 8 نشان داده شده است.

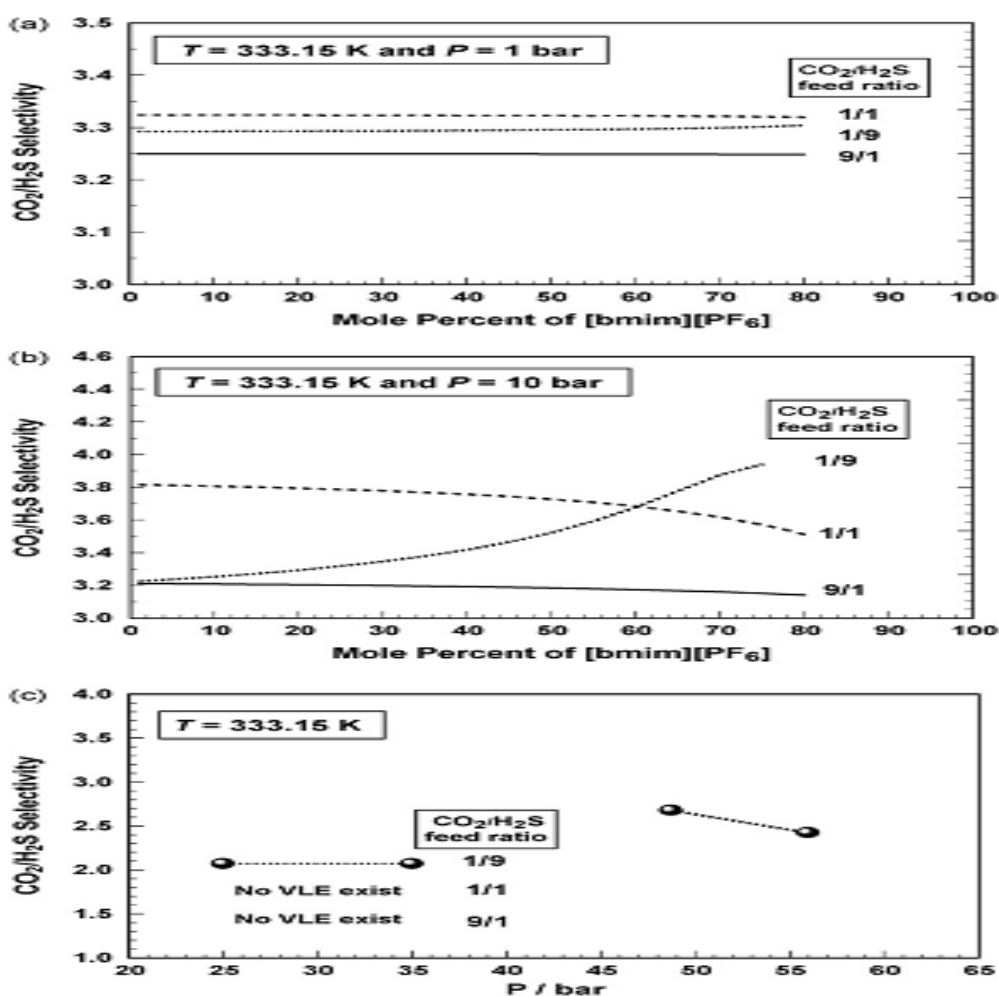


شکل 7. یک قطعه انتخابی تعریف شده توسط معادله (15) در مقابل سه مورد با نسبت دی اکسید کربن / [bmim] [PF₆] / هیدروژن سولفید خوراک های مختلف در T = 298.15 کلوین و P = 1. (ب) قطعه انتخابی

بدون مایع یونی $[PF_6][bmim]$ به عنوان تابعی از فشار کل. سه مورد با نسبت دی اکسید کربن / $[bmim]$

$[PF_6]$ / هیدروژن سولفید با نسبت خوراک $T = 298.15$ خطوط K.

در شکل 7A دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید انتخاب (A / B) به عنوان یک تابع از مایع یونی $[PF_6][bmim]$ رسم شده است. غلظت مخلوط سه تایی با نسبت سه تایی دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید (1/9، 1/1 و 1/9) در $T = 298.15$ کلونین و $P = 1$ برای هر سه مورد، انتخابی (A / B) در مورد 3.7-4.0 با افزایش غلظت مایع یونی نسبتاً ثابت باقی مانده است. به منظور درک تغییر در انتخاب علاوه بر مایع یونی، شکل 7B بینش روشن فراهم می کند، که در آن انتخاب $[PF_6][bmim]$ در 298.15 کلونین به عنوان تابعی از فشار برای دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید نسبت خوراک (1/9، 1/1، 9/1) و رسم شده است. افزایش انتخاب علاوه بر مایعات می تواند به خوبی از مقایسه بین شکل 7 a و b مشاهده می شود. به عنوان مثال، نسبت خوراک 01/09 (دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید) با مایع یونی دارای انتخابگری در مورد 3.7 است، در حالی که در مورد بدون مایع یونی یک انتخاب در حدود 1.2 را نشان می دهد. نسبت خوراک به (1/9 به 1/1 به 9/1 دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید) کاهش می یابد. بهبود انتخاب در حالت با مایع یونی در مقابل حالت بدون مایع یونی نیز کاهش می یابد.



شکل 8. محاسبه قطعه انتخابی توسط معادله (15) تعریف شده است. در مقابل (الف) سه نسبت خوراک مختلف دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید در $T = 333.15$ (a) کلوین و $P = 1$ ، (ب) $T = 333.15$ کلوین و $P = 10$ بار. قطعه (ج) انتخاب بدون مایع یونی $[PF_6][bmim]$ به عنوان تابعی از فشار کل. سه مورد با نسبت دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید غذایی مختلف در $T = 333.15$ کلوین. نشان داده شده است: خط نقطه چین $= 9/1$ دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید نسبت خوراک؛ خط شکسته = نسبت / هیدروژن سولفید $1/1$ دی اکسید کربن. خط جامد $= 1/9$ دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید نسبت خوراک.

ویژگی های انتخاب در درجه حرارت بالاتر از (333.15 کلوین) و فشار (1 و 10 بار) با و بدون مایع یونی در شکل 8 نشان داده شده است. رفتار کلی همانطور که در شکل 8 نشان داده شده است. شبیه به مورد شکل 7 است. با این حال افزایش انتخاب با مایع یونی پایین تر است. این واقعیت در درجه حرارت بالاتر در دی اکسید کربن / هیدروژن

سولفید نسبت خوراک ($1/1$ و $1/9$) بدون مایع یونی VLE وجود دارد و مخلوط های گازی نمی تواند با استفاده از روش تقطیر سنتی از هم جدا شوند همانطور که در شکل 8C نشان داده شده است. بنابراین، تنها حالت با مایع یونی به عنوان شکل 8 A و B نشان داده شده. تفکیک دی اکسید کربن و هیدروژن سولفید امکان پذیر است.

در نهایت، باید ذکر کرد که حجم فزونی منفی در $[PF_6] [bmim]$ راه حل سمت غنی برای هر دو دی اکسید کربن و هیدروژن سولفید سیستم های دوتایی مشاهده شده است. در مورد $[PF_6] [bmim]$ + دی اکسید کربن و $[PF_6] [bmim]$ هیدروژن سولفید سیستم های دوتایی حجم مایع یونی راه حل جانبی منفی هستند. این مقادیر مشابه مطالعات قبلی ما از سیستم های دوتایی دیگر حاوی دی اکسید کربن + مایعات یونی (به عنوان مثال $[hmim]$ [Tf2N] و $[State] [bmim]$) [14،15] و هیدروفلوروکربن (HFCS) + مایعات یونی [35،36] هستند. این امر به وضوح نشان می دهد که RTILs با گازهایی مانند دی اکسید کربن، هیدروژن سولفید و HFCS حجم بسیار بزرگ فزونی منفی در مقایسه با آنچه با مخلوط مایع گزارش شده است [44]. این یک چالش منحصر به فرد و جالب برای طراحان نظری برای توضیح این پدیده می باشد. یک توضیح احتمالی توسط هوانگ و همکاران [45] برای سیستم $[PF_6] [bmim]$ + دی اکسید کربن نشان می دهد که بازآرایی زاویه ای کوچک از آنیون اتفاق می افتد، که ایجاد حفره های موضعی می کند، که اجازه می دهد دی اکسید کربن با تناسب بالا و پایین حلقه ایمیدازولیوم بدون تغییر بسیار از حجم خالص $[PF_6] [bmim]$ بدست آید. بازآرایی مشابه شاید با هیدروژن سولفید و HFCS در RTILs و همچنین به عنوان یک نیروی اضافی مانند پیوند هیدروژنی درگیر شود

5. نتیجه گیری

اگر چه مفهوم تفکیک مخلوط گازی با استفاده در دمای اتاق مایع یونی در گذشته ارائه شده است ، هیچ مقاله ای برای دی اکسید کربن / هیدروژن سولفید گزارش نشده است. در این گزارش، ما برای اولین بار یک مدل سیستم سه تایی EOS قابل اعتماد برای دی اکسید کربن / $[PF_6] [bmim]$ / هیدروژن سولفید ارائه کرده ایم ، و انتخاب گازی از این گازهای اسیدی را ، با استفاده از مایع یونی $[PF_6] [bmim]$ بررسی کرده و توسعه داده ایم.

مایع یونی حاضر لزوماً بهترین انتخاب برای تفکیک گازی و / یا گرفتن دی اکسید کربن و هیدروژن سولفید است. در اینجا روش با یک مایع یونی خاص ارائه شده است. با این حال نشان داده شده است که مایع یونی حاضر، بر حرکت انتخاب گازها اثر دارد و مطالعات آینده به بررسی بیشتر انواع مایعات بهینه خواهند پرداخت.

فهرست علائم

a و b پارامترهای قابل تنظیم، عمومی EOS ردلیخ کونگ، معادله (2)

l_{ij} , l_{ji} و m_{ij} پارامترهای کنش دوگانه، معادلات (8) - (9)

n تعداد کل مول

n_i تعداد مول از گونه i ام (یا $x_i = n_i/n$)

P فشار (مگاپاسکال)

R ثابت گاز ($8.314472 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$)

T دمای مطلق (K)

V_i حجم گونه i ام (cm^3 را مول-1، و یا M^3 مول 1)

x_i و y_i کسر گونه i ام

علائم یونانی

β_k عمومی ردلیخ کونگ ثابت EOS، معادله (5)

ϕ_i ضریب فوگاسیته گونه معادله i ام است. (10)

δ_X کسری عدم قطعیت خط و خال و حجم

$\alpha_{A/B}$ گاز انتخاب فاز، معادله (15)

τ_{ij} پارامتر کنش دوگانه، معادله (7) (K)

زیرنویس

A دی اکسید کربن

B هیدروژن سولفید

i گونه *i* ام

m مخلوط

1 گاز نمونه

2 مایع یونی

c حیاتی

r کاهش

TE خطای کل

RE خطای تصادفی

SE خطای سیستماتیک

علامت

- اموال

E اموال مازاد

' فاز پایین تر، معادله (1)

0 جزء خالص، معادله (1)

L1 مایع 1، معادله (14)

L2 مایع 2، معادله (14)

V بخار، معادلات (13) - (14)

این مقاله، از سری مقالات ترجمه شده رایگان سایت ترجمه فا میباشد که با فرمت PDF در اختیار شما عزیزان قرار گرفته است. در صورت تمایل میتوانید با کلیک بر روی دکمه های زیر از سایر مقالات نیز استفاده نمایید:

لیست مقالات ترجمه شده ✓

لیست مقالات ترجمه شده رایگان ✓

لیست جدیدترین مقالات انگلیسی ISI ✓

سایت ترجمه فا ؛ مرجع جدیدترین مقالات ترجمه شده از نشریات معتبر خارجی