

METANOL ÉS SZUPERKRITIKUS SZÉN-DIOXID ELEGYEDÉSI TULAJDONSÁGAINAK VIZSGÁLATA SZÁMÍTÓGÉPES SZIMULÁCIÓS MÓDSZEREKKEL

Horváth Réka Anna^a, Horvai György^b, Abdenacer Idrissi^c, Jedlovsky Pál^d

^a*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem Rkp. 3. F ép. I.lh. mfszt.*

^b*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, 1111 Budapest, Szent Gellért tér-Műegyetem 4.*

^c*University of Lille, Faculty of Sciences and Technologies, LASIR (UMR CNRS 8516), 59655 Villeneuve d'Ascq, Franciaország*

^d*Eszterházy Károly Egyetem, Kémia Tanszék, 3300 Eger, Leányka u. 6.*

A metanol és szuperkritikus szén-dioxid elegyítése során extenzív állapotjelzők– térfogat, energia, szabadenergia, entrópia – megváltozását Monte Carlo számítógépes szimulációk és termodinamikusan integrálás segítségével határoztuk meg két szén-dioxid és négy metanol potenciálmodellből alkotott nyolc modell kombináció esetén tizenegy különböző összetétel mellett 313 K-en. A kapott eredményeket kísérleti eredményekkel hasonlítottuk össze, ahol erre lehetőség nyílt.

A vizsgálatunk megmutatta, hogy körülbelül 95 mol% szén-dioxid tartalomnál a rendszer folyadék fázisból szuperkritikus állapotba kerül minden modell kombináció esetében. A szuperkritikus állapotú rendszerekben az elegyedési szabadenergia minden esetben pozitívnak adódott, így ebben a koncentráció tartományban azt találtuk, hogy a két komponens egymással nem elegyedik. Eredmények alapján az is kijelenthető, hogy mind a nem elegyedés a szuperkritikus tartományban, mind pedig az elegyedés a szén-dioxidban szegényebb, folyadék állapotú rendszerekben elsősorban energetikai okokra vezethető vissza, hiszen az elegyedési entrópia értéke minden esetben nagyon közel esik a nullához, és ráadásul a szuperkritikus tartományban ennek kvalitatív viselkedése is jelentősen függ a választott modellektől.

Emellett azt is megmutattuk, hogy a metanol expanziós koefficiense nem függ jelentősen a potenciálmodell megválasztásától, és minden esetben jó egyezést mutat a kísérleti adatokkal. Azonban mind az elegyedési térfogat, mind pedig az elegyedési energia erősen függ a tiszta szén-dioxid moláris térfogatától, és ebben a tekintetben a TraPPE szén-dioxid modell [1] sokkal jobb egyezést mutat a kísérleti értékekkel, mint a Zhang és Duan által fejlesztett modell [2].

[1] J. J. Potoff és J. I. Siepmann, *AIChE J.* 2001, **47**, 1676

[2] Z. Zhang and Z. Duan, *J. Chem. Phys.* 2005, **122**, 214507