

Kezdőlap > Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar > Anyagtudomány és Polimerkémia > Dolgozat

Metanol és szuperkritikus szén-dioxid elegyedési tulajdonságainak vizsgálata számítógépes szimulációs módszerekkel

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

A vizsgálataink megmutatták, hogy körülbelül 95 mol% szén-dioxid tartalomnál a rendszer folyadék fázisból szuperkritikus állapotba kerül minden modell kombináció használata mellett. 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 expansziós 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 [J. J. Potoff és J. I. Siepmann, AIChE J. 2001, 47, 1676] sokkal jobb egyezést mutat a kísérleti értékekkel, mint a Zhang és Duan által fejlesztett modell [Z. Zhang and Z. Duan, J. Chem. Phys. 2005, 122, 214507].

szerző



Horváth Réka Anna
Vegyészmérnöki alapképzési szak,
nappali BSC
alapképzés (BA/BSc)

konzulens



Dr. Jedlovsky Pál
tudományos tanácsadó, Szervetlen és
Analitikai Kémia Tanszék

helyezés

BME VBK Dékáni Hivatal I. helyezett