

Praca dyplomowa inżynierska

Zastosowanie płynów w stanie nadkrytycznym jako rozpuszczalników i nośników substancji chemicznych

Autor: Marcin Słoń

Nr albumu: 244562

Promotor: prof. dr hab. inż. Marek Henczka

Opiekun pomocniczy: mgr inż. Jan Krzysztoforski

Rok akademicki: 2014/2015



Wprowadzenie

Stan nadkrytyczny po raz pierwszy zaobserwowany został w roku 1822 przez C. Cagniard de la Tour'a. Substancje osiągają stan nadkrytyczny po przekroczeniu charakterystycznych dla nich temperatury i ciśnienia zwanych temperaturą krytyczną i ciśnieniem krytycznym. Wzrasta gęstość substancji i współczynnika dyfuzji molekularnej oraz spada jej lepkość. Stąd płyny w stanie nadkrytycznym znajdują wiele zastosowań w przemyśle.

Cel i zakres pracy

Celem pracy jest dokonanie przeglądu literaturowego zastosowań i metod modelowania własności płynów w stanie nadkrytycznym oraz opracowanie programu do obliczeń rozpuszczalności substancji chemicznych i gęstości dwutlenku węgla w stanie nadkrytycznym.

Zakres pracy obejmuje:

- Usystematyzowanie podstawowych informacji o płynach w stanie nadkrytycznym
- Przedstawienie przemysłowych zastosowań płynów w stanie nadkrytycznym
- Prezentacja podstaw termodynamicznych do modelowania własności płynów
- Napisanie programu modelującego właściwości płynów w stanie nadkrytycznym

Przemysłowe zastosowania płynów w stanie nadkrytycznym

Dzięki specyficznym właściwościom transportowym płynów w stanie nadkrytycznym, znajdują one szerokie zastosowanie w procesach przemysłowych. Najlepszy przykład stanowi proces ekstrakcji nadkrytycznej. Jednym z zastosowań ekstrakcji nadkrytycznej jest ekstrakcja α - i β -kwasów z szyszek chmielowych. Innym przykładem jest ekstrakcja kofeiny z ziaren kawy w procesie produkcji kawy bezkofeinowej.

Modelowanie właściwości płynów w stanie nadkrytycznym

Do modelowania właściwości płynów w stanie nadkrytycznym wymagana jest znajomość koncepcji równań stanu. Najprostszym równaniem stanu jest równanie stanu gazu doskonałego:

$$pV = nRT$$

Można je stosować do gazów w wysokiej temperaturze pod niskim ciśnieniem. Ze względu na fakt, iż płyny w stanie nadkrytycznym występują jedynie w wysokich ciśnieniach, ich właściwości opisywane są bardziej skomplikowanymi wersjami równania stanu. Przykładem jest kubiczne równanie stanu Penga-Robinsona wykorzystane w tej pracy.

Warunkiem równowagi termodynamicznej między dwiema lub większą liczbą substancji w układzie jest minimalna wartość potencjału termodynamicznego. Jeżeli potencjał termodynamiczny jest wyższy niż jego minimalna wartość, następować będzie proces transportu masy. W przypadku możemy mówić o rozpuszczaniu się jednej substancji w drugiej. Do obliczeń potencjałów termodynamicznych wykorzystuje się koncepcje aktywności chemicznej i współczynników aktywności chemicznej pozwalających na powiązanie rozpuszczalności substancji z stężeniami oraz parametrami termodynamicznymi.

W praktyce stosowane są korelacje empiryczne wiążące rozpuszczalność z parametrami takimi jak: gęstość, temperatura, ciśnienie i stężenie z rozpuszczalnością przy pomocy stałych doświadczalnych. W tej pracy zastosowana została korelacja Chrastila do obliczeń rozpuszczalności substancji chemicznych w dwutlenku węgla w stanie nadkrytycznym.

Opracowany został program komputerowy służący do obliczeń rozpuszczalności substancji chemicznych w płynach w stanie nadkrytycznym. Program wykorzystuje ciśnienie i temperaturę do wyznaczenia gęstości dwutlenku węgla w stanie nadkrytycznym, następnie na podstawie temperatury, gęstości oraz stałych empirycznych w równaniu Chrastila oblicza rozpuszczalność danej substancji w dwutlenku węgla w stanie nadkrytycznym. Drugą funkcją programu jest obliczanie stałych teoretycznych do korelacji empirycznej na podstawie wyników doświadczalnych.

Wnioski

Przedstawione zostały możliwości zastosowań płynów w stanie nadkrytycznym w przemyśle oraz skuteczne narzędzie dla badaczy badających właściwości płynów w stanie nadkrytycznym. Maksymalny błąd obliczeń programu wynosi między 4 a 8%.