

Praca dyplomowa inżynierska

Modelowanie właściwości układów z udziałem płynów w stanie nadkrytycznym



Autor: Andrzej Cecuga

Nr albumu: 289225

Promotor: prof. dr hab. inż. Marek Henczka

Rok akademicki: 2020/2021

Wprowadzenie

Płyny w stanie nadkrytycznym znajdują szerokie zastosowanie w procesach inżynierii chemicznej ze względu na ich szczególne właściwości fizykochemiczne. Modelowanie matematyczne tych właściwości stanowi narzędzie do projektowania i optymalizacji procesów przemysłowych z udziałem płynów w stanie nadkrytycznym pozwalając na odpowiedni dobór parametrów operacyjnych podczas ich realizacji.

Cel i zakres pracy

Celem pracy było opracowanie i weryfikacja użyteczności procedury obliczeniowej umożliwiającej modelowanie wpływu temperatury i ciśnienia na rozpuszczalność substancji chemicznych w ditlenku węgla w stanie nadkrytycznym w układach wieloskładnikowych. Zakres pracy obejmuje:

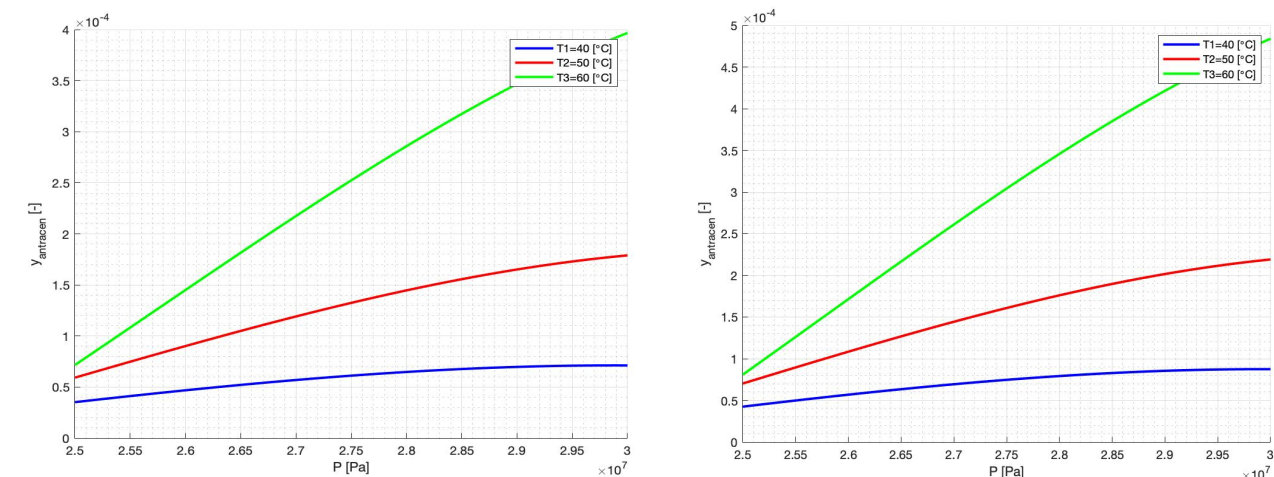
- przegląd literatury opisującej metody modelowania właściwości płynów w stanie nadkrytycznym,
- opracowanie procedury numerycznej do symulacji wpływu ciśnienia i temperatury na rozpuszczalność substancji chemicznych w CO₂ w stanie nadkrytycznym;
- analizę wpływu parametrów procesowych i dodatków współrozpuszczalników na rozpuszczalność;
- analizę informacji dostępnych w literaturze dotyczących wpływu grafenu płatkowego na rozpuszczalność substancji chemicznych,
- sformułowanie wyników końcowych.

Część teoretyczna

W części teoretycznej omówiono właściwości fizykochemiczne ditlenku węgla w stanie nadkrytycznym. Przedstawiono zalety zastosowania tej substancji jako ekologicznej alternatywy dla rozpuszczalników organicznych oraz zaprezentowano przykładowy schemat procesu i aparaturę do ekstrakcji nadkrytycznej. Opisano podstawy termodynamiczne przejścia substancji chemicznych w stan nadkrytyczny oraz dokonano wyboru równania stanu, przy użyciu którego przeprowadzono symulacje matematyczne.

Część obliczeniowa

Wykorzystując rozwiązanie kubicznego równania stanu Penga-Robinsona wykonano obliczenia rozpuszczalności wybranych substancji chemicznych w ditlenku węgla w stanie nadkrytycznym dla różnych wartości temperatur i ciśnienia. Walidację opracowanej procedury obliczeniowej wykonano na podstawie porównania otrzymanych wyników obliczeń rozpuszczalności antracenu w nadkrytycznym CO₂ z dostępnymi danymi literaturowymi. Modelowano również wpływ obecności etanolu jako współrozpuszczalnika na zwiększenie rozpuszczalności rozważanych substancji w CO₂.



Rys.1 Zależność rozpuszczalności w funkcji ciśnienia i temperatury dla układu scCO₂ + antracen (po lewej) i układu scCO₂ + etanol + antracen (po prawej).

Analiza uzyskanych wyników obliczeń pozwoliła na określenie zależności między wielkościami parametrów procesowych oraz efektu dodatku współrozpuszczalnika na zwiększenie rozpuszczalności rozważanych substancji chemicznych (trietylenodiamina, antracen, kwas jabłkowy i kwas maleinowy) w układach dwu- i trójskładnikowych. W pracy dokonano również przeglądu literatury dotyczącej wpływu obecności grafenu płatkowego na rozpuszczalność substancji chemicznych w układach z udziałem płynów w stanie nadkrytycznym.

Wnioski

Opracowano procedurę numeryczną, przy użyciu której modelowano wpływ ciśnienia oraz temperatury na rozpuszczalność wybranych substancji chemicznych w ditlenku węgla w stanie nadkrytycznym. Wykazano, że wzrost obu parametrów zwiększa rozpuszczalność, niezależnie od ilości składników w układzie, a wzrost temperatury w warunkach stałego ciśnienia powoduje większe różnice w rozpuszczalności rozważanych substancji. Dodatek etanolu jako współrozpuszczalnika zwiększał rozpuszczalność składnika w rozpatrywanych układach. Stwierdzono brak w literaturze informacji dotyczących wpływu obecności grafenu płatkowego na rozpuszczalność rozważanych substancji w CO₂.