

# Praca dyplomowa inżynierska

## Opis termodynamiczny dwuskładnikowych równowag ciecż-para układów utworzonych przez pirydynę oraz alkohole

**Autor: Stefania Kaczyńska**

Nr albumu: 298014

Promotor: prof. dr hab. inż. Paweł Gierycz

Rok akademicki: 2021/2022



### Wprowadzenie

Dane opisujące równowagę ciecż-para w układach wieloskładnikowych stanowią niezbędny element przy projektowaniu wielu procesów w inżynierii chemicznej. Ograniczona ilość danych doświadczalnych powoduje konieczność stosowania równań opisujących równowagi ciecż-para, których dokładność najczęściej jest ograniczona do układów tych samych typów, na podstawie których dane równanie zostało wyznaczone. Z tego powodu należy zweryfikować, na ile precyzyjnie dostępne równania opisują układy badane przez projektanta.

### Cel i zakres pracy

Celem pracy jest opis termodynamiczny dwuskładnikowych równowag ciecż-para układów utworzonych przez pirydynę oraz alkohole, czyli zaproponowanie odpowiedniego równania stanu lub równania opartego na koncepcji stężeń lokalnych opisującego równowagi ciecż-para badanych układów z dokładnością zbliżoną do eksperymentalnej.

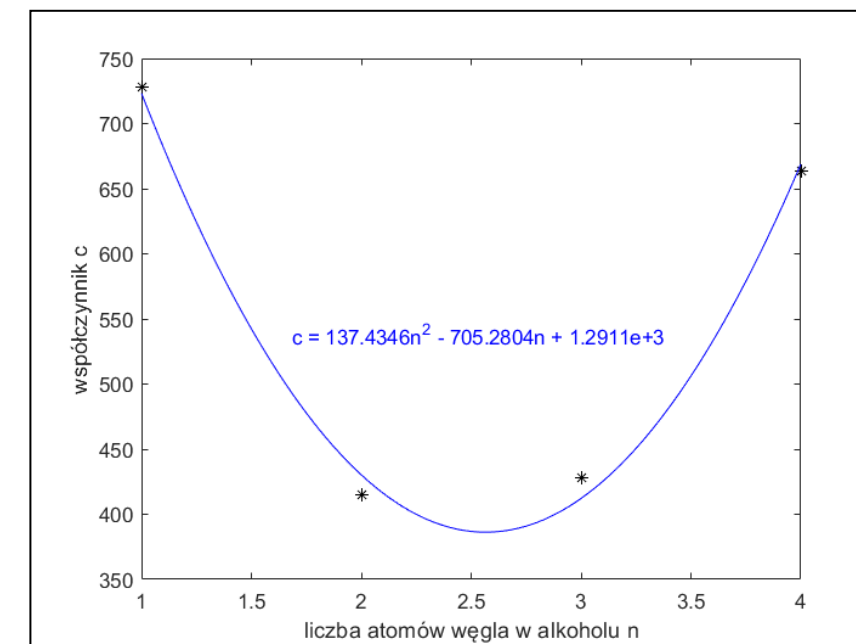
Zakres pracy obejmuje pobranie danych równowag ciecż-para z elektronicznych baz danych, ich analizę oraz wyznaczenie zależności między parametrami równań opisujących badane równowagi i typami układów je tworzących.

### Opis równowagi ciecż-para w układach dwuskładnikowych

Podano metody opisu termodynamicznego równowag ciecż-para układów dwuskładnikowych oraz przedstawiono analizę matematycznego opisu dwuskładnikowych równowag ciecż-para układów utworzonych przez pirydynę oraz alkohole. Obliczenia wykonano przy pomocy programów zawartych we Floppy Book on Binary Vapor-Liquid Equilibria. Sporządzono zestawienie otrzymanych wyników obliczeń.

## Analiza matematycznego opisu równowag ciecż-para w badanych układach dwuskładnikowych

Wskazano na równanie Wilsona jako na najlepiej opisujące wszystkie badane układy. Wymieniono ogólne zależności między typami badanych układów – tj. budową cząsteczek substancji tworzących układ, temperaturą – a wartościami parametrów w tym równaniu. Przy pomocy programu MATLAB R2019a skorelowano równaniami liniowymi lub kwadratowymi niektóre spośród izoterm równowagi, uzależniając wartości współczynników w równaniu Wilsona od liczby atomów węgla w alkoholu lub węglowodorze tworzącym z pirydyną układ dwuskładnikowy.



Rys.1. Przykładowy wykres – zależność współczynnika c w równaniu Wilsona od liczby atomów węgla w alkoholu dla układów pirydyna – alkohole

### Wnioski

Równowagę ciecż-para w układach pirydyna – alkohole i pirydyna – węglowodory najlepiej opisuje dwuparametrowe równanie Wilsona. Dla badanych układów pirydyna – alkohole (o rozgałęzionym łańcuchu węglowym) w temperaturze  $T = 313,15$  K zależność między współczynnikami w równaniu Wilsona a liczbą atomów węgla w alkoholu opisuje wielomian 2. stopnia. Dla układów pirydyna – węglowodory (o prostym, nasyconym łańcuchu węglowym) brakuje jednoznacznej zależności między współczynnikami w równaniu Wilsona a liczbą atomów węgla w węglowodorze.