

اندازه‌گیری و مدل‌سازی حلالیت کربن‌دی‌اکسید در مخلوط دوتایی از چهار حلال

حسن پهلوانزاده* و غلامرضا پازوکی

تهران، دانشگاه تربیت مدرس، دانشکده فنی و مهندسی، بخش شیمی، صندوق پستی ۱۱۱-۱۴۱۵۵

چکیده: در این تحقیق حلالیت گاز کربن‌دی‌اکسید در مخلوط حلال‌های آلی در گستره دمایی (۱۰ تا ۲۵ درجه سانتی‌گراد) و فشار کل یک اتمسفر به روش آزمایشگاهی اندازه‌گیری شده است. با بررسی تأثیر دما و اختلاط حلال‌ها روی حلالیت، یک رابطه تجربی بر حسب دما و درصد اختلاط حلال‌ها در مخلوط پیشنهاد شد که دارای خطای مناسبی می‌باشد. ثابت هنری کربن‌دی‌اکسید در مخلوط حلال‌ها با توجه به نتایج ثابت هنری کربن‌دی‌اکسید در حلال‌های خالص به دست آمد و به کمک آن مدل وانگ جهت تخمین برای محاسبه ثابت هنری توسعه داده شد. همچنین حلالیت نظری کربن‌دی‌اکسید با توجه به مدل‌های ترمودینامیکی نظیر مدل محلول‌های منظم، مارگولس و ویلسون با توجه به نتایج سیستم‌های دو جزئی و روش‌های بهینه‌سازی به دست آمد و مدل محلول‌های منظم توسعه داده شد که مدل جدید دارای خطای مناسبی می‌باشد.

واژه‌های کلیدی: حلالیت، کربن‌دی‌اکسید، مخلوط حلال‌های آلی، مدل‌سازی.

KEY WORDS: Solubility, Carbon dioxide, Mixed organic solvent, Modeling

مقدمه

به هم بوده و جداسازی آنها به روش تقطیر عملی نیست. مناسب‌ترین روش جداسازی گازها در صنعت، استفاده از فرآیند جذب می‌باشد که به کمک حلال مناسب انجام می‌شود. بنابراین داشتن اطلاعات آزمایشگاهی دقیق از مقادیر حلالیت گازها در حلال‌های مختلف اهمیت فراوانی دارد. در اکثر مراجع ترمودینامیکی، حلالیت گازها در گستره‌های مختلف دما و فشار اندازه‌گیری شده است [۱ و ۲]. در بعضی از شرایط استفاده از مخلوط حلال‌ها در جداسازی گازها به دلیل افزایش میزان حلالیت از نقطه نظر اقتصادی به صرفه‌تر است. همچنین به

جذب گازهای اسیدی نظیر CO_2 و H_2S از مخلوط گازها به لحاظ خوردگی، آلودگی محیط زیست یک فرآیند مهم صنعتی است که در فرآیندهایی نظیر جذب، پتروشیمی و جداسازی کاربرد فراوانی دارد. گازهای حاصل از سوخت‌های مصنوعی و گازهای حاصل از تقطیر زغال‌سنگ مخلوط گازهای صنعتی می‌باشند که باید گازهای اسیدی چون CO_2 را از آنها جداسازی نمود. جداسازی این مخلوط‌ها به وسیله عمل تقطیر امکان‌پذیر نمی‌باشد زیرا این مخلوط‌ها دارای نقطه‌جوش پایین یا هیدروکربن‌های هم خانواده می‌باشند که در این صورت دارای نقطه جوش نزدیک

*E-mail :PAHLAVZH@Modares.Ac.IR

*عهدہ‌دار مکاتبات

علت اینکه نتایج حلالیت گازها در مخلوط حلال‌های آلی نسبت به حلال‌های خالص در کتاب‌های مرجع ومقالات کمتر یافت می‌شود، لذا بررسی حلالیت گازها در مخلوط حلال‌ها ضروری به نظر می‌رسد. *Mather* و *Deshmukh* با بررسی حلالیت H_2O و CO_2 در محلول آبی آبکانول آمین یک مدل مناسب ریاضی برای بررسی میزان حلالیت گازهای اسیدی ارائه نمودند [۳]. همچنین *Mather* و *Robert* حلالیت گازهای اسیدی CO_2 و H_2O در مخلوط آبی حلال‌های سولفولان را در گستره دمایی (۴۰ تا ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد) بررسی نمودند [۴]. *Murreta* و *Guevava* حلالیت CO_2 و H_2O در مخلوط سولفولان و منواتانول آمین را بررسی کردند [۵]. *Mather* و همکاران با بررسی میزان جذب شیمیایی CO_2 در مخلوط حلال‌های آلی یک رابطه تجربی برای بررسی سرعت جذب CO_2 در مخلوط حلال‌ها ارائه نمودند [۶].

Mather و *Qian* حلالیت گازهای اسیدی H_2S و CO_2 را در محلول آبی حلال‌های سولفولان و منودی اتانول آمین بررسی نموده و به کمک نتایج به دست آمده معادله پیتزر را برای داده‌های تعادلی بخار-مایع توسعه دادند. [۷] *Mather* و *Li* حلالیت CO_2 و H_2S در محلول آبی تری اتانول آمین را بررسی کردند [۸].

Mather و *Yuan* و *Otto* حلالیت CO_2 و H_2S را در محلول آبی در مخلوط سولفولان و ۲-پیریدین در گستره دمایی (۴۰ تا ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد) و گستره فشار مختلف بررسی نمودند [۹]. *Edwards* و همکاران بررسی روی سیستم سه جزیی دی‌اکسیدکربن-آمونیاک-آب یک مدل ترمودینامیکی برای این سیستم ارائه نمودند [۱۰]. همچنین پهلوانزاده و همکاران با بررسی سیستم مذکور در گستره دمایی (۲۰ تا ۶۰ درجه سانتی‌گراد) و مقایسه نتایج آزمایشگاهی با نتایج به دست آمده از مدل *Edward* به کمک روش بهینه‌سازی پارامترهای حلالیت این سیستم را توسعه دادند [۱۱].

روش اندازه‌گیری و محاسبه حلالیت

اندازه‌گیری حلالیت گاز در مایع در فشار اتمسفریک توسط دستگاهی که توسط پهلوانزاده و *Hayduk* [۱۲] طراحی و ساخته شده است انجام گرفت که در شکل ۱ شمای آن نشان داده شده است. شرح کامل آن و نحوه انجام آزمایش در مرجع [۱۳] آورده شده است. در اینجا به نحوه

شکل ۱- دستگاه اندازه‌گیری حلالیت گازها در مایعات

کار با دستگاه به اختصار پرداخته می‌شود. در این دستگاه حلال با نرخ مشخص توسط پمپ سرنگ وارد لوله ماریپج شده که در آن قبلاً از گاز حل شونده پر شده است. این حلال در تماس با گاز اشباع شده و در لوله U شکل انتهایی لوله ماریپج قرار می‌گیرد. در اثر انحلال گاز در حلال، فشار داخل دستگاه کاهش یافته که با بالا بردن ظرف جیوه فشار داخل لوله ماریپج را با کمک سطح میان در داخل لوله U شکل در یک اتمسفر ثابت نگه‌داشته و در زمان‌های مشخص مقدار گاز مصرف شده از روی جابجایی سطح جیوه قابل اندازه‌گیری می‌باشد.

برای محاسبه میزان گاز حل شده در مخلوط حلال‌ها، باید حجم مولی گاز را در دما و فشار آزمایش با استفاده از یک معادله حالت مناسب به دست آورد. معادله حالتی که در این تحقیق مورد استفاده قرار گرفته است معادله حالت پنگ-رابینسون می‌باشد که یک معادله به فرم درجه سوم می‌باشد. [۱۴].

از حل معادله حالت به روش نیوتن-رافسون و با توجه به اینکه ریشه بزرگتر مربوط به حجم مولی گاز می‌باشد تعداد مول‌های گاز حل شده از رابطه (۱) به دست می‌آید:

$$n_g = \frac{V}{v} \quad (1)$$

مولکول‌های گاز حل شده که دارای انرژی جنبشی بیشتری نسبت به مولکول‌های حلال هستند از محلول خارج می‌شوند. با

جدول ۱- حلالیت آزمایشگاهی CO₂ در مخلوط حلال‌های آلی

مخلوط حلال‌ها	درصد اختلاط	T(°C)	$x_c \times 10000$
اتیل استات استون	۷۵	۱۰	۳۰۰/۰۰۷
		۱۵	۲۲۲/۸۵۲
		۲۵	۲۰۶/۸۰۳
اتیل استات استون	۵۰	۱۰	۱۷۶/۸۲۸
		۱۵	۱۷۲/۴۴۹
		۲۵	۱۳۵/۸۰۳
اتیل استات استون	۲۵	۱۰	۱۶۸/۶۵۳
		۲۵	۱۶۸/۶۰۱
اتیل استات بنزن	۷۵	۱۰	۱۵۷/۱۴۷
		۱۵	۱۸۲/۱۲۲
		۲۵	۱۴۰/۳۶۴
اتیل استات بنزن	۵۰	۱۰	۱۶۹/۳۹۳
		۱۵	۱۴۴/۷۹۴
		۲۵	۱۱۷/۲۲۲
اتیل استات بنزن	۲۵	۱۰	۱۵۰/۲۶۷
		۱۵	۱۲۱/۴۶۹
		۲۵	۱۰۷/۹۴۹
استون تولوئن	۷۵	۱۰	۲۶۸/۸۰۸
		۱۵	۲۰۴/۳۲۵
		۲۵	۸۶/۶۵۸
استون تولوئن	۵۰	۱۰	۱۵۹/۲۱۹
		۱۵	۱۲۸/۶۵۹
		۲۵	۹۳/۷۱۲
استون تولوئن	۲۵	۱۰	۱۵۹/۹۶۸
		۱۵	۱۱۳/۲۷۲
		۲۵	
تولوئن بنزن	۷۵	۱۰	۱۰۸/۶۱۱
		۱۵	۹۵/۵۷۹
		۲۵	۹۱/۴۸۵
تولوئن بنزن	۵۰	۱۰	۹۹/۲۰۲
		۱۵	۹۴/۱۱۶
		۲۵	۷۰/۸۲۹
تولوئن بنزن	۲۵	۱۰	۱۰۲/۶۶۹
		۱۵	۹۳/۲۲۴
		۲۵	۷۴/۸۱۸

توجه به حلالیت کربن‌دی‌اکسید در حلال‌های خالص و نتایج به دست آمده مخلوط حلال‌های مورد نظر انتخاب شد. انتخاب

که در آن V حجم گاز مصرف شده (در شرایط آزمایش ۲ میلی‌لیتر است) و v حجم مولی گاز می‌باشد.

تعدادمول‌های کل حلال مصرفی نیز از رابطه (۲) محاسبه می‌شود:

$$n_s = \frac{fdt}{MW} \quad (2)$$

در معادله بالا f سرعت تزریق حلال، d دانسیته مخلوط حلال‌ها، t زمان حلالیت CO₂ در مخلوط حلال و MW جرم مولکولی مخلوط حلال‌ها می‌باشد. مقادیر d و MW برای مخلوط حلال‌ها از روابط زیر به دست می‌آیند:

$$d = \sum c_i d_i \quad (3)$$

$$MW = \sum c_i MW_i \quad (4)$$

در معادلات (۳) و (۴) c_i درصد غلظت حلال i، d_i دانسیته حلال و i، MW_i جرم مولکولی حلال i می‌باشد. با توجه به روابط (۱) تا (۴) میزان حلالیت گاز بر حسب کسر مولی در مخلوط حلال‌ها از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$x_e = \frac{n_g}{n_g + n_s} \quad (5)$$

نتایج محاسبه شده برای حلالیت CO₂ در مخلوط حلال‌های آلی در جدول ۱ گزارش شده است.

تحلیل نتایج تجربی

گاز کربن‌دی‌اکسید یک مولکول غیر قطبی است که در آن اتم کربن به آرایش گاز بی‌اثر دوره خود رسیده است. بنابراین تمایلی به شرکت در واکنش‌های شیمیایی ندارد. همچنین مولکول کربن‌دی‌اکسید قادر به تشکیل پیوند هیدروژنی با حلال‌های مورد استفاده نیست. بنابراین حلالیت از نوع انحلال فیزیکی بوده و مقدار حلالیت ناچیز می‌باشد. در این تحقیق ابتدا حلالیت کربن‌دی‌اکسید در حلال‌های خالص آلی نظیر اتیل استات، استن، تولوئن و بنزن بررسی شده است [۱۵]. با توجه به نتایج به دست آمده در جدول ۲ نتیجه گرفته می‌شود، حلال‌هایی که دارای گروه کربنیل (CO) هستند، نسبت به حلال‌های دیگر، حلالیت بیشتری از خود نشان می‌دهند و در حلال‌هایی که قطبیت آنها کمتر می‌شود و ساختمان متقارنی داشته باشند، میزان حلالیت آنها کاهش می‌یابد. همچنین نتایج به دست آمده نشان داد حلالیت کربن‌دی‌اکسید با افزایش دما کاهش پیدا می‌کند و این موضوع به این دلیل است که با افزایش دمای محلول، انرژی جنبشی مولکول‌ها افزایش یافته و سبب شکسته شدن پیوند گاز شده و

در مخلوط حلال‌های غیر قطبی- غیر قطبی با افزایش حلال غیرقطبی‌تر و دارای ساختار متقارن‌تر، میزان حلالیت کاهش پیدا می‌کند. همچنین به طور کلی می‌توان بیان داشت حلالیت کربن‌دی‌اکسید در مخلوط حلال‌های آلی بیشتر از حلالیت آن در هر یک از حلال‌های خالص می‌باشد.

نتایج آزمایشگاهی نشان می‌دهد که حلالیت کربن‌دی‌اکسید در حلال‌ها با افزایش دما کاهش پیدا می‌کند که بیانگر گرمازا بودن فرآیند انحلال می‌باشد.

با توجه به نتایج به دست آمده از حلالیت کربن‌دی‌اکسید در مخلوط حلال‌های آلی یک رابطه برای محاسبه حلالیت گازها در مخلوط حلال‌ها پیشنهاد می‌شود. به دلیل اینکه حلالیت گازها در مخلوط چند جزیی حلال‌ها به دما و درصد اختلاف حلال‌ها بستگی دارد، رابطه پیشنهادی شامل تابعی است که اثر غلظت و تأثیر دما را در نظر می‌گیرد. بنابراین رابطه پیشنهادی به صورت معادله زیر بیان می‌شود:

$$x_{\text{mod}} = \phi_1^m \phi_2^n \left(a + \frac{b}{T} + c \ln T \right) \quad (6)$$

در رابطه بالا T بر حسب درجه‌سنتی‌گراد و ϕ_1 و ϕ_2 کسر حجمی هر یک از حلال‌ها در مخلوط حلال‌ها است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\phi_1 = \frac{cv_1}{cv_1 + (1-c)v_2} \quad (7)$$

در این رابطه، e درصد حلال و v_1 و v_2 به ترتیب حجم مولی خالص هر یک از حلال‌ها می‌باشد. ضرایب معادله پیشنهادی و مقدار خطای میانگین در جدول ۳ آورده شده است.

حلال‌ها بر پایه بیشترین و کمترین میزان حلالیت، ساختمان حلال‌ها و اثر قطبیت می‌باشد. بنابراین مخلوط حلال‌ها به صورت

جدول ۲- حلالیت آزمایشگاهی CO₂ در حلال‌های خالص آلی

حلال	T(°C)	$x_e \times 1000$
استیل استات	۱۰	۲۹۸/۰۵۷
	۱۵	۲۸۵/۶۴۴
	۲۵	۲۰۵/۴۱۲
استون	۱۰	۱۵۹/۸۱۸
	۱۵	۱۵۱/۴۹۲
	۲۵	۱۲۲/۳۳۵
تولوئن	۱۰	۱۰۵/۷۴۸
	۱۵	۹۱/۲۳۴
	۲۵	۷۸/۳۳۵
بنزن	۱۰	۷۵/۸۷۱
	۱۵	۶۶/۷۶۱
	۲۵	۵۹/۸۹۹

اتیل استات استون به عنوان حلال‌های قطبی- قطبی، تولوئن-بنزن حلال‌های غیرقطبی- غیرقطبی، اتیل استات- بنزن و استون- تولوئن به عنوان حلال‌های غیرقطبی- قطبی در غلظت‌های ۲۵، ۵۰ و ۷۵ درصد از هر یک از حلال‌ها در مخلوط در نظر گرفته شد. با توجه به نتایج به دست آمده از جدول ۱ می‌توان بیان داشت میزان حلالیت در مخلوط حلال‌هایی که دارای گروه کربنیل است نسبت به حلال‌هایی که فاقد این گروه هستند بیشتر می‌باشد و با کاهش درصد حلالی که دارای این گروه است، میزان حلالیت کربن‌دی‌اکسید در مخلوط کاهش پیدا می‌کند. همچنین در حلال‌های قطبی- غیر قطبی با افزایش غلظت حلال قطبی‌تر میزان حلالیت افزایش و با کاهش آن در مخلوط حلالیت کاهش پیدا می‌کند.

جدول ۳- پارامترهای معادله پیشنهادی حلالیت و مقدار خطای میانگین

مخلوط حلال	m	n	a	b	C	درصد خطای میانگین
اتیل استات استون	-۰/۷۸۳	-۰/۹۳۶۸	-۰/۰۰۱۳	۰/۰۳۹۱	۰/۰۰۱۲۲	۷/۲۵
اتیل استات بنزن	۰/۱۵۰۱	-۰/۰۵۹۹	۰/۰۵۹۵	-۰/۱۳۲۲	-۰/۰۱۲۸	۶/۳۱
استون بنزن	-۰/۴۴۳۸	-۰/۱۲۳۸	۰/۰۱۳۶	۰/۰۰۳۷	-۰/۰۰۳۳	۱۰/۹۲
بنزن تولوئن	-۰/۰۲۰۲۱	-۰/۲۴۳۶	۰/۰۱۵۱	-۰/۰۱۴۲	-۰/۰۰۲۷	۵/۱۸

$$\text{درصد خطای میانگین} = \frac{100}{n} \sum \left| \frac{x_e - x_{\text{mod}}}{x_e} \right|$$

در معادله بالا V_i حجم مولی حلال خالص و x_i جز مولی حلال i است. برای یک مخلوط دو جزیی حلال‌ها، ثابت هنری اضافی به صورت زیر پیشنهاد می‌شود:

$$R_{ij} = \phi_i \phi_j \alpha_{ij} \quad (12)$$

جدول ۴- ثابت‌های و ضریب همبستگی معادله پیشنهادی ثابت هنری CO_2 در حلال‌های خالص

حلال	a	b	ضریب همبستگی
اتیل استات	۰/۰۵۰۹	-۳/۳۴۱۶	۰/۹۹
استون	۰/۰۴۴۳	-۲/۲۹۰۹	۰/۹۹
تولوئن	۰/۰۴۳۶	-۴/۰۷۰۸	۰/۹۹
بنزن	۰/۰۴۳۲	-۳/۰۳۸۸	۰/۹۹

جدول ۵- مقادیر ثابت هنری کربن دی‌اکسید در مخلوط حلال‌ها

مخلوط حلال‌ها	درصد اختلاط	T(°C)	$H_{r,mix}$
اتیل استات استون	۷۵	۱۰	۰/۰۸۱۷
		۱۵	۰/۱۰۱۰
		۲۵	۰/۱۶۴۴
اتیل استات استون	۵۰	۱۰	۰/۱۰۰۵
		۱۵	۰/۱۲۶۶
		۲۵	۰/۲۰۱۵
اتیل استات استون	۲۵	۱۰	۰/۱۲۷۵
		۱۵	۰/۳۰۳۰
		۲۵	۰/۴۱۷۶
اتیل استات بنزن	۷۵	۱۰	۰/۰۶۵۳
		۱۵	۰/۰۸۲۹
		۲۵	۰/۱۳۴۰
اتیل استات بنزن	۵۰	۱۰	۰/۰۶۹۱
		۱۵	۰/۰۸۶۲
		۲۵	۰/۰۴۸۲
اتیل استات بنزن	۷۵	۱۰	۰/۰۷۵۲
		۱۵	۰/۰۹۰۱
		۲۵	۰/۱۴۰۳
استون تولوئن	۷۵	۱۰	۰/۱۰۶۷
		۱۵	۰/۱۳۲۲
		۲۵	۰/۱۹۷۹
استون تولوئن	۵۰	۱۰	۰/۰۶۷۰
		۱۵	۰/۰۳۶۸
		۲۵	۰/۱۲۶۸
استون تولوئن	۲۵	۱۰	۰/۰۴۳۱
		۱۵	۰/۰۵۳۶
		۲۵	۰/۰۸۱۶
تولوئن بنزن	۷۵	۱۰	۰/۰۳۵۲
		۱۵	۰/۰۴۴۱
		۲۵	۰/۰۶۷۰
تولوئن بنزن	۵۰	۱۰	۰/۰۴۵۳
		۱۵	۰/۰۵۶۸

محاسبه ثابت هنری در مخلوط چند جزئی و توسعه مدل Wang برای محاسبه ثابت هنری کربن دی‌اکسید در مخلوط حلال‌ها احتیاج به محاسبه ثابت هنری کربن دی‌اکسید در هر یک از حلال‌های خالص می‌باشد. بنابراین مقادیر ثابت هنری در هر یک از حلال‌های خالص با توجه به روابط ترمودینامیکی [۱۶] محاسبه و یک رابطه تجربی برای پیش‌بینی مقادیر آن پیشنهاد شده است:

$$\ln H_{\text{CO}_2} = aT + b \quad (8)$$

در رابطه بالا، T بر حسب درجه سانتی‌گراد می‌باشد. ثابت‌های a و b و ضریب همبستگی معادله (۸) در جدول ۴ آمده است.

برای محاسبه ثابت هنری در مخلوط حلال‌ها با توجه به معادله مارگولس یک پارامتری و روابط پیشنهادی توسط O'connell [۱۶] از معادله زیر استفاده می‌شود:

$$\ln H_{r,mix} = x_1 \ln H_{r,1} + x_2 \ln H_{r,2} - a_{12} x_1 x_2 \quad (9)$$

در معادله بالا $H_{r,1}$ و $H_{r,2}$ ثابت هنری کربن دی‌اکسید در حلال‌های خالص و a_{12} پارامتر معادله مارگولس است که از رگرسیون نتایج تعادلی بین حلال‌ها محاسبه می‌شود. با توجه به معادله (۹) و نتایج مربوط به ثابت هنری در حلال‌های خالص مقادیر ثابت هنری CO_2 برای مخلوط حلال‌ها محاسبه شد که نتایج آن در جدول ۵ ارائه شده است.

Wang و همکاران [۱۷] برای محاسبه ثابت هنری N_2O در محلول آمین یک رابطه نیمه‌تجربی پیشنهاد کردند که در این بخش رابطه پیشنهادی برای محاسبه ثابت هنری CO_2 در مخلوط حلال‌ها توسعه داده می‌شود. در این روش ثابت هنری اضافی کربن دی‌اکسید در مخلوط حلال‌ها از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$\ln H_{2,m} = R_{ij} + \sum_{i=1}^n \phi_i \ln H_{2,i} \quad (10)$$

در رابطه بالا $H_{r,m}$ ثابت هنری گاز در مخلوط حلال‌ها و $H_{r,i}$ ثابت هنری گاز در حلال خالص i و ϕ_i جز حجمی حلال i می‌باشد که از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$\phi_i = x_i V_i / \sum_{i=1}^n x_i V_i \quad (11)$$

$$\alpha_{ij} = \alpha_1 + \frac{\alpha_2}{T} + \alpha_3 \ln T$$

(۱۳)

		۲۵	-/۰.۸۵۹
تولوئن	۲۵	۱۰	-/۰.۵۸۵
بنزن	۷۵	۱۵	-/۰.۷۳۱
		۲۵	-/۱۱.۰۹

در رابطه بالا α_{ij} یک تابع وابسته به دما است که برای کربن دی اکسید در مخلوط حلال ها به صورت زیر توسعه داده می شود:

جدول ۶- پارامترهای معادله پیشنهاد شده برای مدل Wang و درصد خطای میانگین

مخلوط حلال	a_1	a_2	a_3	درصد خطای میانگین
اتیل استات استون	۲/۴۶۰۵	-۸/۱۴۲۲	-۰/۵۳۵۹	۱۳/۴۲
اتیل استات بنزن	۰/۵۴۱۲	-۰/۲۱۱۴	-۰/۱۲۰۱	۷/۶۴
استون تولوئن	۲۵/۴۲۳۸	-۹۶/۸۱۲۳	-۶/۴۲۱۲	۱۷/۰۴
تولوئن بنزن	۲/۷۸۷۲	-۹/۳۲۸۹	-۰/۶۷۳۶	۱/۲۵

$$\text{درصد خطای میانگین} = \frac{100}{n} \sum \left| \frac{H_{2,m} - H_w}{H_{2,m}} \right|$$

مبنای همبستگی بین نتایج مدل محلول منظم و نتایج آزمایشگاهی می باشد که در آن پارامتر حلالیت بدون بعد برای مخلوط حلال ها ارایه شده است.

$$x_m = a x_{reg}^b \delta_{12}^c \quad (14)$$

$$\delta_{12} = \frac{(V_1 - V_2)(\bar{\delta} - \delta_{CO_2})^2}{RT} \quad (15)$$

$$\bar{\delta} = \phi_1 \delta_1 + \phi_2 \delta_2 \quad (16)$$

در روابط بالا x_m حلالیت محاسبه شده از مدل ۱۴، x_{reg} حلالیت محاسبه شده از مدل محلول منظم، δ_{12} پارامتر حلالیت بدون بعد شده برای مخلوط حلال ها، $\bar{\delta}$ پارامتر حلالیت میانگین مخلوط حلال ها، ϕ_1 و ϕ_2 کسر مولی حلال ها، R ثابت عمومی گازها و T دما بر حسب درجه کلون می باشد. مقادیر حلالیت محاسبه شده بر مبنای مدل پیشنهادی در جدول ۷ و مقادیر a و b و c پارامتر مدل ۱۴ برای مخلوط حلال های مختلف در جدول ۸ ارایه شده اند.

برای تخمین حلالیت کربن دی اکسید در مخلوط حلال ها از مدل های مارگولس و ویلسون استفاده شد، به دلیل اینکه این مدل ها دارای پارامترهای تنظیمی هستند. این پارامترها به کمک روش های بهینه سازی به دست آمده است. برای این کار ابتدا با توجه به نتایج حلالیت کربن دی اکسید در حلال های خالص

T بر حسب درجه سانتی گراد می باشد. پارامترهای α_1 و α_2 و α_3 و درصد خطای نسبی در جدول ۶ آورده شده است.

محاسبه حلالیت نظری

در این بخش به حلالیت کربن دی اکسید در مخلوط حلال ها با توجه به مدل های ترمودینامیکی پرداخته می شود. مدل های محلول منظم، مارگولس و ویلسون مدل هایی هستند که مورد بررسی قرار گرفته اند. مدل محلول های منظم به دلیل داشتن یک پارامتر موسوم به پارامتر حلالیت که در گستره دمای آزمایش به تقریب ثابت است، یکی از ساده ترین مدل ها می باشد.

بنابراین برای محاسبه حلالیت تئوری از این مدل احتیاج به روش های بهینه سازی نمی باشد. نتایج حلالیت کربن دی اکسید در مخلوط حلال های چند جزئی به کمک مدل محلول های منظم در جدول ۷ ارایه شده اند. همانطوری که از نتایج جدول ۷ بر می آید، مقادیر به دست آمده از مدل نظری با مقادیر تجربی اختلاف زیادی دارند. بنابراین با توجه به ساختمان ساده این مدل ضروری به نظر می رسد مدل مذکور، برای نتایج حلالیت کربن دی اکسید در مخلوط چند جزئی توسعه داده شود. مبنای این توسعه بر پایه حداقل کردن اختلاف بین نتایج آزمایشگاهی و مدل پیشنهادی می باشد. رابطه جدید یک رابطه نیمه تئوری- نیمه تجربی بر

$$y_2^P = x_2 \gamma_2^S \quad (18)$$

با جمع دو رابطه (۱۷) و (۱۸) و با توجه به اینکه $y_1, y_2 = 1$ است رابطه زیر حاصل می‌شود:

پارامترهای تنظیمی این مدل‌ها تعیین شده است. برای محاسبه پارامترهای تنظیمی با توجه به برابری فوگاسیته اجزا در دو فاز گاز و مایع و با توجه به ایده‌آل بودن فاز گاز خواهیم داشت:

$$y_1^P = x_1 \gamma_1^S \quad (17)$$

جدول ۷- مقایسه نتایج آزمایشگاهی، مدل محلول‌های منظم توسعه داده شده برای CO₂ در مخلوط حلال‌های آلی

مخلوط حلال	T(°C)	$x_c \times 10000$	$x_{reg} \times 10000$	$x_m \times 10000$	ER×۱۰۰	ER×۱۰۰
اتیل استات ۷۵ درصد استون ۲۵ درصد	۱۰	۳۰۰/۰۰۷	۲۲۲/۳۰۵	۲۴۵/۶۰۱	۲۹/۳۱	۱۸/۱۳
	۱۵	۱۸۲/۱۲۲	۱۹۶/۶۲۵	۲۰۵/۷۰۰	۷/۳۷	۱۲/۹۴
	۲۵	۱۴۰/۳۶۴	۱۵۵/۷۳۶	۱۶۹/۰۴۲	۹/۸۷	۱۶/۹۶
اتیل استات ۵۰ درصد استون ۵۰ درصد	۱۰	۱۶۹/۳۹۳	۲۲۲/۲۱۰	۲۲۸/۴۴۳	۲۳/۷۶	۳۴/۸۵
	۱۵	۱۴۴/۷۹۴	۱۹۶/۵۴۴	۱۹۱/۲۹۳	۲۶/۳۲	۲۴/۳۰
	۲۵	۱۱۷/۲۲۲	۱۵۵/۶۷۴	۱۶۶/۶۶۹	۲۷/۷۰	۲۹/۶۶
اتیل استات ۲۵ درصد استون ۷۵ درصد	۱۰	۱۵۰/۲۶۲	۲۲۲/۱۱۰	۱۹۹/۱۸۰	۴۷/۸۱	۲۴/۵۵
	۱۵	۱۲۱/۴۶۹	۱۹۶/۲۵۷	۱۶۶/۸۵۴	۶۱/۸۷	۲۷/۲۰
	۲۵	۱۰۷/۹۴۹	۱۵۵/۶۰۷	۱۳۷/۱۱۹	۴۴/۱۴	۲۱/۲۷
اتیل استات ۷۵ درصد بنزن ۲۵ درصد	۱۰	۱۵۷/۱۴۷	۲۲۲/۳۰۳	۱۸۰/۰۴۳	۴۱/۴۶	۱۲/۷۱
	۱۵	۱۸۲/۱۲۲	۱۹۶/۶۲۵	۱۶۳/۶۶۱	۷/۳۷	۱۹/۹۲
	۲۵	۱۴۰/۳۶۴	۱۵۵/۷۳۶	۱۳۶/۸۰۸	۹/۸۷	۲/۵۳
اتیل استات ۵۰ درصد بنزن ۵۰ درصد	۱۰	۱۶۹/۳۹۳	۲۲۲/۲۱۰	۱۶۰/۴۴۸	۳۱/۸۰	۵/۲۸
	۱۵	۱۴۴/۷۹۴	۱۹۶/۵۴۴	۱۴۵/۸۲۸	۳۵/۷۴	۵/۷۱
	۲۵	۱۱۷/۲۲۲	۱۵۵/۶۷۴	۱۲۷/۷۸۳	۳۲/۸۰	۹
اتیل استات ۲۵ درصد بنزن ۷۵ درصد	۱۰	۱۵۰/۲۶۷	۲۲۲/۱۱۰	۱۴۱/۹۹۸	۳۲/۳۴	۵/۵۰
	۱۵	۱۲۱/۴۶۹	۱۹۶/۴۵۷	۱۲۹/۰۷۵	۳۸/۱۷	۲/۲۶
	۲۵	۱۰۷/۹۴۹	۱۵۵/۶۰۷	۱۰۷/۹۰۵	۳۰/۶۲	۰/۴۱
استون ۷۵ درصد تولوئن ۲۵ درصد	۱۰	۲۶۸/۸۰۸	۲۲۱/۵۵۰	۲۱۴/۱۰۵	۲۱/۳۳	۲۰/۳۵
	۱۵	۲۰۴/۳۲۵	۱۹۵/۹۷۰	۱۷۰/۸۰۲	۴/۲۶	۱۶/۴
	۲۵	۸۶/۶۵۸	۱۵۵/۲۳۵	۱۱۱/۰۰۱	۴۴/۱۷	۲۸/۰۸
استون ۵۰ درصد تولوئن ۵۰ درصد	۱۰	۱۵۹/۲۱۹	۲۲۱/۹۵۲	۱۸۵/۶۶	۳۹/۴	۱۶/۶۰
	۱۵	۱۲۸/۶۵۹	۱۹۶/۳۲۰	۱۴۸/۱۱۰	۵۲/۵۸	۱۵/۱
	۲۵	۹۳/۷۱۳	۱۵۵/۵۰۲	۹۶/۳۴۱	۶۵/۹۳	۲/۸
استون ۲۵ درصد تولوئن ۷۵ درصد	۱۰	۱۵۹/۹۶۸	۲۲۲/۲۶۳	۱۶۱/۹۱۱	۳۸/۹۴	۱/۲۱
	۱۵	۱۱۳/۲۷۲	۱۹۶/۵۹۰	۱۲۹/۱۶۴	۷۳/۵۵	۱۴
	۲۵	۱۱۴/۲۷۴	۱۵۵/۷۰۹	۸۴/۰۰	۲۶/۶۱	۲/۸
تولوئن ۷۵ درصد بنزن ۲۵ درصد	۱۰	۱۰۸/۶۱۱	۲۲۲/۴۰۴	۱۰۸/۳۸۸	۵۱/۱۶	۰/۲۰
	۱۵	۹۵/۵۷۹	۱۹۶/۷۱۲	۹۸/۵۴۷	۵۱/۴۱	۳/۰۸
	۲۵	۹۱/۴۸۵	۱۵۵/۸۰۳	۸۲/۲۹۰	۴۱/۲۸	۹/۶۲
تولوئن ۵۰ درصد بنزن ۵۰ درصد	۱۰	۹۹/۲۰۲	۲۲۲/۲۸۶	۱۰۳/۶۰۱	۵۵/۳۷	۴/۴۳
	۱۵	۹۴/۱۱۶	۱۹۶/۶۱	۹۴/۱۹۵	۵۲/۱۳	۰/۰۸
	۲۵	۷۰/۸۲۹	۱۵۵/۷۲۵	۷۸/۶۶۱	۵۴/۵۱	۱۱/۰۵
تولوئن ۲۵ درصد بنزن ۷۵ درصد	۱۰	۱۰۲/۶۶۹	۲۲۲/۱۵۳	۹۸/۷۹۶	۵۳/۷۸	۳/۷۷
	۱۵	۹۳/۲۲۴	۱۹۶/۴۹۵	۸۹/۸۲۶	۵۲/۵۵	۳/۶۴
	۲۵	۷۴/۸۱۸	۱۵۵/۶۳۶	۷۵/۰۲۰	۵۱/۹۲	۰/۲۶

$$ER = \frac{|x_e - x_{reg}|}{x_e}$$

$$ER' = \frac{|x_e - x_m|}{x_e}$$

جدول ۸- پارامترهای معادله محلول‌های منظم توسعه داده شده برای مخلوط حلال‌ها

مخلوط حلال‌ها	a	b	C
اتیل استات استون	۰.۰۹۷۸	-۰.۷۸۹۱	-۱/۳۸۴۰
اتیل استات بنزن	$1/19.05 \times 10^{-5}$	۱/۱۳۳۸	-۲/۴۹۶۴
استون تولوئن	-۰.۷۹۶۲	۱/۷۱۰.۱	-۰/۹۲۱۶
تولوئن بنزن	$2/483 \times 10^{-2}$	-۰/۸۷۷۹	-۰/۷۱۶۹

$$P = x_1 \gamma_1 P_1^s + x_2 \gamma_2 P_2^s \quad (19)$$

اگر اندیس ۱ برای حلال و اندیس ۲ برای جز حل شونده فرض شود با توجه به رابطه $x_1 = 1 - x_2$ جز مولی حل شونده به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$x_2 = \frac{p - \gamma_1 P_1^s}{\gamma_2 P_2^s - x_1 \gamma_1 P_1^s} \quad (20)$$

شکل ۲- روند نمای محاسبه پارامترهای انرژی تنظیمی و محاسبات تعادلی چند فاز

مقدار مجذور خطای میانگین برای مقادیر حلالیت به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$RMSD = 100 \times \sqrt{\frac{1}{n} \sum_i \left[\frac{x_{2e} - x_{2c}}{x_{2e}} \right]^2} \quad (22)$$

نتایج به دست آمده برای مدل‌های مارگولس و ویلسون برای حلالیت کربن دی‌اکسید در حلال‌های خالص در جدول ۹ ارائه شده است.

در این تحقیق، چون حلالیت آزمایشگاهی به صورت کسر مولی اندازه‌گیری شده است، بنابراین تابع هدف به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$O.F. = \sum_i^n (x_{2e} - x_{2c})_i^2 \quad (21)$$

در رابطه بالا X_{2e} حلالیت آزمایشگاهی کربن دی‌اکسید و X_{2c} حلالیت تئوری از مدل‌های ترمودینامیکی و n تعداد داده‌های آزمایشگاهی است.

تابع هدف تعریف شده با توجه به یک برنامه کامپیوتری بر پایه روش مارکوارت [۱۸] بهینه شده است. روند نمای جریان بهینه‌سازی پارامترهای تنظیمی و مقدار RMSD در شکل ۲ آورده شده است.

جدول ۹- مقادیر پارامترهای تنظیمی و RMSD مدل‌های مارگولس و ویلسون

حلال	پارامترهای تنظیمی		RMSD	
	مارگولس	ویلسون	مارگولس	ویلسون
اتیل استات	$A_{12} = 0/976$ $A_{21} = -0/774$	$\Lambda_{12} = 0/120$ $\Lambda_{21} = 0/172$	0/158	0/9114
استون	$A_{12} = 0/991$ $A_{21} = -0/112$	$\Lambda_{12} = 0/147$ $\Lambda_{21} = 0/234$	0/259	0/2679
تولوئن	$A_{12} = 3/400$ $A_{21} = 0/125$	$\Lambda_{12} = 0/260$ $\Lambda_{21} = 0/194$	0/0419	0/1437
بنزن	$A_{12} = 5/600$ $A_{21} = 0/230$	$\Lambda_{12} = 0/1909$ $\Lambda_{21} = 0/1752$	0/0394	0/0972

جدول ۱۰- مقایسه نتایج آزمایشگاهی، مدل مارگولس و مدل ویلسون برای CO₂ در مخلوط حلال‌های آلی

مخلوط حلال	T(°C)	$x_c \times 10000$	$x_{mar} \times 10000$	$x_{wil} \times 10000$	ER × 100	ER' × 100
اتیل استات ۷۵ درصد استون ۲۵ درصد	۱۰	300/007	397/6	114/81	24/55	61/72
	۱۵	182/122	354/93	99/934	37/45	58/98
	۲۵	140/364	281/57	78/86	26/55	61/71
اتیل استات ۵۰ درصد استون ۵۰ درصد	۱۰	169/393	343/97	112/40	48/59	36/14
	۱۵	144/794	304/3	99/298	43/33	42/26
	۲۵	281/222	281/57	77/95	43/82	42/25
اتیل استات ۲۵ درصد استون ۷۵ درصد	۱۰	150/267	293/3	12/61	42/51	32/97
	۱۵	121/469	259/3	99/605	34/61	41/06
	۲۵	107/949	205/3	78/84	17/91	53/06
اتیل استات ۷۵ درصد بنزن ۲۵ درصد	۱۰	157/147	372/04	116/754	57/79	25/7
	۱۵	182/122	328/4	103/82	44/56	42/98
	۲۵	140/364	261/2	81/450	46/288	41/96
اتیل استات ۵۰ درصد بنزن ۵۰ درصد	۱۰	169/393	291/73	118/20	41/93	30/18
	۱۵	144/794	258/3	103/87	43/95	28/26
	۲۵	117/222	204/86	81/608	42/78	30/38
اتیل استات ۲۵ درصد بنزن ۷۵ درصد	۱۰	150/267	228/8	119/131	34/34	20/72
	۱۵	121/469	202/4	104/260	39/99	14/16
	۲۵	107/949	160/29	82/149	32/66	23/89
استون ۷۵ درصد تولوئن ۲۵ درصد	۱۰	26/808	235/76	134/058	14/01	50/12
	۱۵	204/325	208/63	116/4	2/06	42/99
	۲۵	86/658	165/405	89/132	47/65	2/86
استون ۵۰ درصد تولوئن ۵۰ درصد	۱۰	159/219	222/84	131/072	28/55	17/76
	۱۵	128/659	197/064	114/72	34/71	10/82
	۲۵	93/713	156/03	90/92	39/93	4/21
استون ۲۵ درصد تولوئن ۷۵ درصد	۱۰	159/968	210/39	132/142	23/97	17/39
	۱۵	113/272	185/94	114/78	39/08	1/33
	۲۵	114/274	147/23	90/92	22/39	20/42
تولوئن ۷۵ درصد بنزن ۲۵ درصد	۱۰	108/611	193/36	136/485	43/82	25/63
	۱۵	95/579	170/932	119/951	44/08	25/49
	۲۱	91/485	135/330	94/799	32/39	3/62
تولوئن ۵۰ درصد بنزن ۵۰ درصد	۱۰	99/202	188/399	136/673	47/34	37/16
	۱۵	94/116	166/582	120/046	43/50	27/55
	۲۵	70/829	131/794	93/993	46/25	32/70
تولوئن ۲۵ درصد بنزن ۷۵ درصد	۱۰	102/669	183/64	136/329	44/09	32/78
	۱۵	93/224	162/344	120/022	42/57	28/74
	۲۵	74/818	128/451	94/194	41/75	25/89

$$ER = \left| \frac{x_e - x_{rey}}{x_e} \right|$$

$$ER' = \left| \frac{x_e - x_m}{x_e} \right|$$

حلالیت بیشتر می‌شود. همچنین با افزایش دما به علت گرمازا بودن، فرآیند انحلال با کاهش حلالیت مواجه می‌شود. در بخش مدل‌سازی با توجه به تابع هدف خطای بین نتایج آزمایشگاهی و مدل بین نتایج حلالیت از مدل محلول‌های منظم که یک مدل ضعیف بود توسعه داده شد و یک مدل مناسب با خطای پایین پیشنهاد داده شد. همچنین با توجه به روش‌های بهینه‌سازی با استفاده از مدل‌های ویلسون و مارگولس که دارای پارامترهای تنظیمی هستند حلالیت محاسبه شده و مدل ویلسون با توجه به پایین بودن مقدار خطای نسبی آن برای پیش‌بینی حلالیت کربن‌دی‌اکسید در مخلوط حلال‌های آلی پیشنهاد شد.

نتایج تکمیلی بررسی مدل‌های ترمودینامیکی برای حلالیت کربن‌دی‌اکسید در حلال‌های خالص در مرجع [۱۵] آورده شده است.

با توجه به پارامترهای تنظیمی محاسبه شده برای مدل‌های مارگولس و ویلسون برای سیستم‌های مختلف، حلالیت کربن‌دی‌اکسید در مخلوط حلال‌های آلی با توجه به مدل‌های بالا محاسبه شد. نتایج به دست آمده از این محاسبات در جدول ۱۰ نشان داده شده است.

با توجه به مقادیر خطای نسبی به دست آمده از مدل‌های مختلف برای حلالیت CO₂ در مخلوط حلال‌های آلی می‌توان نتیجه گرفت مدل ویلسون کمترین مقدار خطا برای پیش‌بینی جدول ۱۱- مقایسه مقادیر خطای مدل‌های مختلف برای حلالیت کربن

دی‌اکسید در مخلوط دوتایی حلال‌های آلی

مدل / مخلوط حلال‌ها	مارگولس	ویلسون	محلول‌های منظم اصلاح شده
اتیل استات - استون	۰/۳۳۸	۰/۴۸۹	۰/۲۲۸
اتیل استات - بنزن	۰/۴۳۲	۰/۳۰۰	۰/۴۱۷
استون - تولوئن	۰/۳۱۰	۰/۲۴۸	۰/۲۹۳
تولوئن - بنزن	۰/۴۲۹	۰/۲۸۱	۰/۵۴۱

حلالیت کربن دی‌اکسید در مخلوط حلال‌های آلی را دارد. بنابراین مدل ویلسون مناسب‌ترین مدل از میان مدل‌های انتخابی برای به حلالیت کربن‌دی‌اکسید در مخلوط حلال‌های آلی می‌باشد. به طور کلی مقدار خطای موجود بین نتایج تجربی و نظری حلالیت برای مدل‌های مختلف در مخلوط دوتایی حلال‌ها در جدول ۱۱ خلاصه شده است.

نتیجه‌گیری

مولکول کربن‌دی‌اکسید به علت دارا بودن ساختمان متقارن، مولکولی پایدار بوده و تمایلی به شرکت در واکنش‌های شیمیایی ندارد، بنابراین حلالیت فقط از نوع فیزیکی می‌باشد. نتایج به دست آمده از مقادیر تجربی نشان داد حلالیت کربن دی‌اکسید در مخلوط حلال‌ها از حالت خالص هر یک از حلال‌ها بیشتر است. همچنین حلال‌هایی که دارای گروه کربنیل هستند، بیشترین میزان حلالیت را دارا می‌باشند و با افزایش قطبیت مخلوط،

فهرست علائم

C _i	غلظت حلال i
d	دانسیته مخلوط
d _i	دانسیته حلال i
ER	خطای مقادیر تجربی و مدل
f	سرعت تزریق حلال
H _{CO2}	ثابت هنری کربن‌دی‌اکسید در حلال‌های خالص
H _{r,m}	ثابت هنری کربن دی‌اکسید در مخلوط حلال‌ها
H _{r,w}	ثابت هنری کربن دی‌اکسید از مدل Wang
H _{v,i}	ثابت هنری کربن دی‌اکسید در حلال خالص
MW	جرم مولکولی میانگین
MW _i	جرم مولکولی حلال i
n	تعداد داده‌های آزمایشگاهی
n _g	تعداد مول‌های گاز
n _s	تعداد مول‌های مخلوط حلال
OF	تابع هدف
P	فشار کل
R	ثابت عمومی گازها
RMSD	خطای انحراف میانگین
R _{ij}	ثابت هنری اضافی
T	درجه حرارت
t	زمان حلالیت
V	حجم گاز

	زیرنویس	v	حجم مولی گاز
g	گاز	x_{vc}	حلالیت تئوری کربن دی‌اکسید در حلال خالص
s	حلال	X_{vc}	حلالیت آزمایشگاهی کربن دی‌اکسید در حلال خالص
e	آزمایشگاهی	x_e	حلالیت آزمایشگاهی کربن دی‌اکسید در مخلوط حلال‌ها
j,i	جزء	x_i	جز مولی حلال i
۱	حلال	x_m	حلالیت مدل محلول‌های منظم توسعه داده شده
۲	گاز	x_{mar}	حلالیت مدل مارگولس
		x_{mod}	حلالیت کربن دی‌اکسید از مدل آزمایشگاهی
	بالانویس	X_{wil}	حلالیت از مدل ویلسون
s	اشباع	y	کسر مولی در فاز گاز
		δ	پارامتر حلالیت
		δ_{12}	پارامتر حلالیت بدون بعد شده
		γ	ضریب فعالیت
		ϕ	کسر حجمی حلال

مراجع

- [1] Battino, Clever, Dacked, Solution and Solubilities, Part. 1(1976)
- [2] Fogg, P.G.T, gerravd, W., Solubility of Gasses in Liquids, John Wiley & Sons Ltd. (1991).
- [3] Deshmukh, R.D., Mather, A.E., A Mathematical Model for Equilibrium solubility of Hydrogen Sulfide and Carbon Dioxide in Aqueous Alkanolamine Solutions, *Chem. Eng. Sci.*, **36** (1981).
- [4] Roberts, B.E., Mather A.E., Solubility of Carbon Dioxide and Hydrogen Sulphide in a Mixed Solvent, *Chem. Eng. Common*, **72**, (1988).
- [5] Murrieta, Guevava, Gas Solubility of Carbon Dioxide and Hydrogen Sulfied in Mixtures of Sulfolane With Monoethanolamine, *Fluid Phase Equilibria*, **86** (1993).
- [6] Mather, A.E., Otto, F.D., Wang, Y.W, Xu, S., Rate of Absorption of CO₂ in a Mixed Solvent, *Ind. Eng. Chem. Res.* **30** (1991).
- [7] Mather, A.E., Li, Y.G., Qian, W.M., Correlation and Prediction of The Solubility of CO₂ and H₂S in an Aqueous Solution of Methyl-diethanol amine and Sulfolane, *Ind. Eng. Chem. Res.* **34**, (1995).
- [8] Li Yi-Gui, Mather, A.E., Correlation and Prediction of the Solubility of CO₂ and H₂S in Aqueous Solutions of Triethanolamine, *Ind. Eng. Chem. Res.* **35** (1996).
- [9] Mather, A.E., Jou, Fang-Yuan, Otto, F.D., Solubility of Hydrogen Sulfide Carbon Dixide and their Mixtures in Aqueous Solution of 2-Pieridneethanol and Sulfolane, *J. Chem Eng. Data*, **43** (1998).
- [10] Edward, T.J., Newman, J., Prausnitz, J.M., Thermodynamic of Aqueous Solutions Containing Volatile Weak Electrolyte, *AICHE. J.*, **21** (1975).
- [11] Pahlevanzadeh, H., Haghtalab, A., Mokhtarany Solubility parameters in NH₃.CO₂.H₂O System, *Iranian Journal of Chemical and Chemical Engineering J.*, **2** (1998).

تاریخ دریافت: ۸۰/۱۲/۹ ، تاریخ پذیرش: ۸۱/۱۱/۱۶

- [12] Pahlevanzadeh, H., Hayduk, W., The Solubility of Sulfur Dioxide and Hydrogen Sulfide in Associating Solvents, *Cand. J. Chem. Eng.*, **65** (1987).
- [13] Pahlevanzadeh H., Motahhari K., The Measurement of CO₂ Solubility in Organic Solvents, *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering* , **16** (2), pp. 190, (1996).
- [14] Stanley M. Walas, Phase Equilibria in Chemical Engineering, U.S.A Butter Worth Publishers (1985).
- [15] Pahlevanzadeh, H., Pazuki, Gh., Prediction of Solubility of CO₂ in polar and Non-polar Organic Solvent in Temp. rang (10-25c), 5th National Iranian and 4th International Chemical Engineering congress, Shiraz university- Iran (2000).
- [16] O'Connell, J.P., Prausnitz, J. M., *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, **3**(1964).
- [17] Wang, Y. W., Xu, S., Otto, F.D. Mather, A. E., Solubility of N₂O in Alkanolamines and in Mixed Solvents. *Chem.. Eng. J.* **48** 1992).
- [18] Edgar, T.F., Himmelblau, D.M., Optimization of Chemical Processes, McGraw-Hill (1989).