

معادله جدید دو پارامتری برای محاسبه ویسکوزیته مایعات خالص

محمود اخوان مهدوی^{۱*} - حمید مدرس^۲

۱- گروه مهندسی شیمی دانشکده مهندسی - دانشگاه فردوسی مشهد

۲- دانشکده مهندسی شیمی - دانشگاه صنعتی امیرکبیر

مقدمه

یکی از پارامترهای مهم و اساسی در محاسبات مهندسی شیمی ویسکوزیته می باشد. روابط زیادی به صورت تجربی و تئوری برای محاسبه ویسکوزیته پیشنهاد شده است [۴، ۳، ۲، ۱]. تعداد زیادی از روابط تجربی در این زمینه توسط Reid et al [۵] جمع آوری شده است. اغلب مدل‌های پیشنهاد شده براساس تئوری سرعت مطلق واکنش [۶] قانون حالت‌های متناظر [۹، ۸، ۷] و روش‌های مشارکت گروهی [۱۲] می باشند. اخیراً Cao [۱۱] مدلی ارائه نموده است که بر اساس تئوری سرعت مطلق واکنش، مفهوم ترکیب موضعی (Local Composition) و مدل UNIFAC است و دارای نقایصی می باشد.

تئوری

براساس تئوری سرعت مطلق واکنش Eyring [۶]، نشان داده است که با توجه به قانون ویسکوزیته نیوتنی و تفسیر آماری پدیده حرکت مایع، می توان رابطه‌ای به صورت زیر برای ویسکوزیته مایعات نوشت:

$$\eta = \frac{N}{V} (2\pi mkT)^{1/2} V_f^{1/3} \exp\left(\frac{\epsilon_0}{kT}\right) \quad (1)$$

که در این رابطه N عدد آووگادرو V حجم مولی، m جرم مولکول، V_f حجم آزاد، ϵ_0 انرژی مولکول در صفر درجه کلوین می باشد. این انرژی فعالیت انرژی برای عبور یک مولکول مایع از سد انرژی تغییر حالت تعادلی می باشد. با توجه به اینکه اطلاعاتی جزئی در مورد توابع انرژی پتانسیل برای مایعات در دسترس نیست می توان حجم آزاد را به صورت زیر نشان داد:

$$V_f = V \cdot V_f^*(T) = V \cdot \exp\left(\frac{RT \ln V_f^*(T)}{RT}\right) \quad (2)$$

$$\ln V_f^*(T) = \ln V_f^{*hs} + \frac{1}{RT} \ln V_{f1}^* + \dots \quad (3)$$

در صورتی که معادله (۱) برای یک مول از مایع نوشته شود و معادله (۳) در معادله (۲) و سپس معادله (۱) قرار

داده شود:

$$E_0 + \frac{1}{3} \ln V_{f1}^* + \left(\frac{R}{3} \ln V_f^{*hs} \right) T = E \quad (4)$$

معادله (۴) کل انرژی فعالیت یک مول از مایع را نشان می دهد. دو جمله اول این معادله مقادیر ثابت بوده و جمله آخر تابع درجه حرارت است. لذا می توان معادله (۴) را به صورت زیر نشان داد:

$$E = a + bT \quad (5)$$

که در اینجا a, b به صورت زیر هستند:

$$a = E_0 + \frac{1}{3} \ln V_{f1}^* \quad (6)$$

$$b = \left(\frac{R}{3} \ln V_f^{*hs} \right) \quad (7)$$

لذا با نوشتن معادله (۱) برای یک مول از مایع و ترکیب آن با معادله (۵) داریم:

$$\eta = \frac{1}{\sqrt{23}} (2\pi MRT)^{1/2} \exp \left(\frac{a + bT}{RT} \right) \quad (8)$$

در این معادله، η ویسکوزیته مایع، M جرم مولکولی مایع، T درجه حرارت مطلق، V حجم مولی مایع که از روش ریاضی - منصور [۱۳] قابل محاسبه است و a, b دو ثابت هستند که از اطلاعات تجربی بدست می آیند.

نتایج و بحث

برای تعدادی از مایعات خالص ثوابت a, b بدست آمده است و در جدول ۱ جمع آوری شده است. خطای متوسط مدل (Overall Average Error) حدود ۱/۱۲٪ می باشد، که نسبت به مدل های موجود [۵، ۱۰، ۱۱، ۱۴] با توجه محدوده وسیع کاربرد، بسیار کم می باشد. اطلاعات تجربی از مرجع [۱۵] استخراج شده است. با توجه به نتایج و مقایسه آن با مدل های دیگر مشخص می شود که این مدل دارای چند مزیت است:

(۱) تعداد پارامترهای آن کم است. مدل Cao که جدیدترین مدل می باشد دارای شش تا هشت پارامتر است.

(۲) رابطه ساده و به راحتی قابل کاربرد است.

(۳) محدوده وسیعی از مواد و درجه حرارتها را شامل می شود.

(۴) خطای آن در محدوده های دیگر و در بسیاری موارد کمتر است.

مراجع

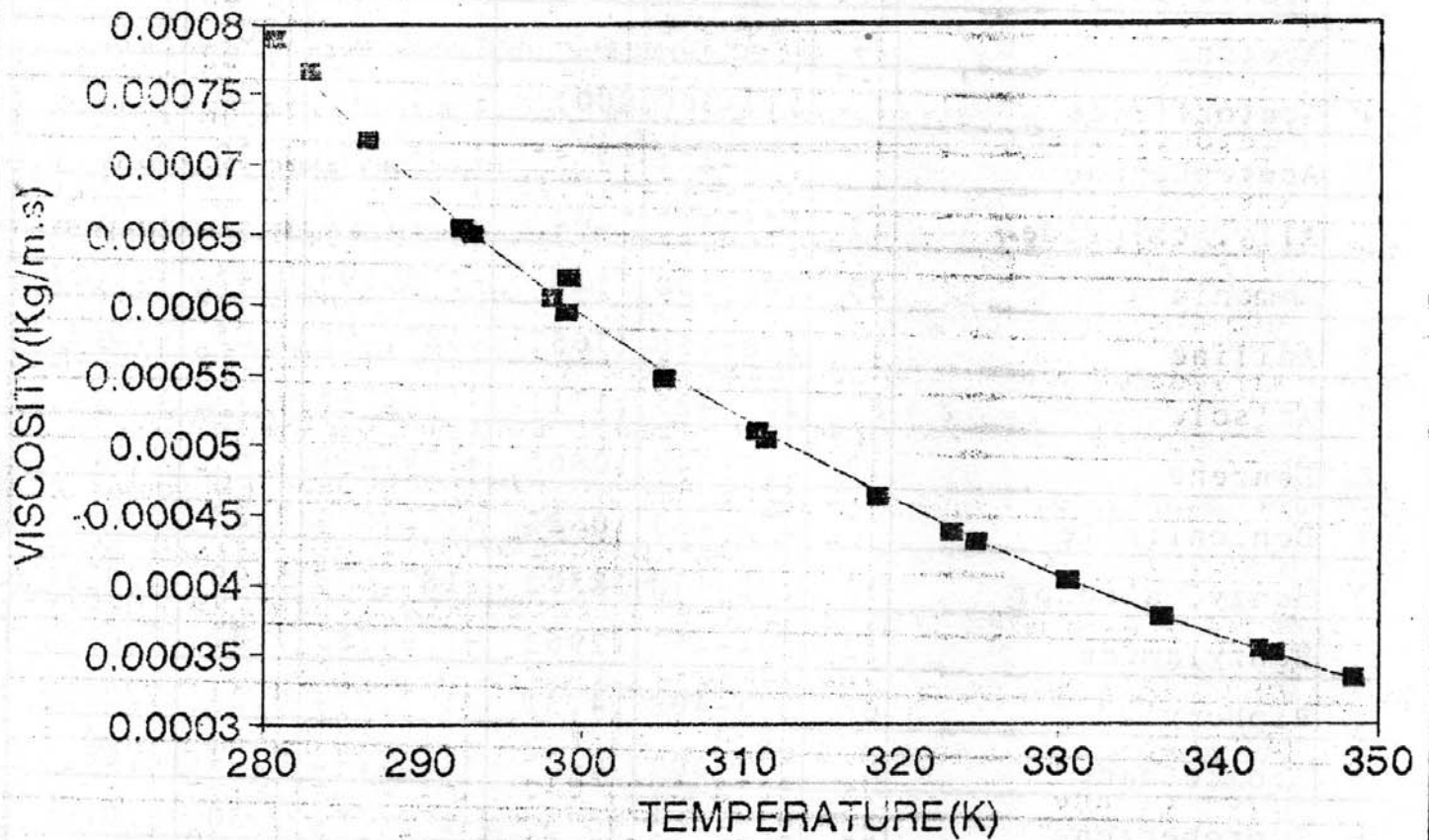
- 1- Chevallier J.L., E. Petrino, P.J. Gaston, Bonhomane Y.H., Viscosity and density of some aliphatic, cyclic, and aromatic hydrocarbon binary liquid mixtures., J. Chem. Eng.Data., 1990, 35, pp.206-212.
- 2- Kouris S., Panayiotou C., Dynamic viscosity of mixtures of benzene, ethanol and n-heptane

- at 298.15 K, J. Chem. Eng. Data., 1989, 34, pp.200-203.
- 3- Schrodtt J.T., Akel R.M., Binary liquid viscosities and their estimation from classical solution thermodynamics., J. Chem. Eng. Data., 1982, 34, pp.8-13.
 - 4- Jayadevappa E.S., Prasad B.R., Aminabhavi T.M., Patel R.C., Bridger K., Viscosity studies of some binary liquid systems., J. Chem. Eng. Data., 1982, 27, pp.125-128.
 - 5- Reid R.C., Prausnitz J.M., Poling B.E., The properties of gases and liquids., 4th Ed. McGraw-Hill: New York. 1987, Chapter 9, pp.338.
 - 6- Glasstone S., Laidler K.J., Eyring H., The theory of rate processes., McGraw - Hill., New York, 1944, Chapter 9, pp.4.
 - 7- Helfand E., Rice S.A., Principle of corresponding states for transport properties., J. Chem. Phys., Vol.32, No.6, June 1960.
 - 8- Teja A.S., Rice P., Generalized corresponding state method for the viscosities of liquid mixtures, Ind. Eng. Chem. Fundam., 1981, 20, pp.77-8.
 - 9- Hwang M.J., Whiting W.B., A corresponding state treatment for the viscosity of polar fluids, Ind.Eng.Chem. Res., 1987, 26, pp.1758-1766.
 - 10- McAtlister R.A, The viscosity of liquid mixtures., J. AIChE., 1960, 6, pp.427-431.
 - 11- Cao W., Fredenslund A., Rasmussen P., Statistical thermodynamic model for viscosity of pure liquids and liquid mixtures., Ind. Eng. Chem. Res., 1992, 34, pp.2603-2619.
 - 12- Wu D.T., Prediction of viscosities of liquid mixtures by group contribution method., Fluid Phase Equilib., 1986, 30, pp.149-156.
 - 13- Riazi M., Mansoori G.A., Simple equation of state accurately predicts hydrocarbon densities., Oil & Gas J., July 12, 1993, Pics.
 - 14- Dymond J.H., Brawn T.A., Viscosity coefficients of liquids under pressure., proceeding of the seventh symposium on thermophysical properties, ASME, New York, 1977, pp.660-667.
 - 15- Viswanath D.S., Natarajan G., Data book on the viscosity of liquids., Hemisphere, New York, 1989.

TABLE(1):(a) and (b) parameters for pure fluids

NO	NAME	POINTS	TEMP. RANGE	a	b	ERROR	MRSO
1	Acetaldehyde	12	273-294	6564	-171.770	0.64	0.0067
2	Acetic acid	17	298-385	11566	-175.899	0.48	0.0061
3	Acetone	24	183-327	7624	-172.750	1.02	0.0163
4	Acetonitrile	7	289-360	8001	-171.100	0.06	0.0008
5	Acetophenone	7	298-474	12157	-175.498	1.30	0.0152
6	Allyl chloride	15	273-315	7464	-173.266	0.19	0.0028
7	Ammonia	20	208-238	7146	-178.199	0.45	0.0056
8	Aniline	15	288-456	17657	-187.495	5.85	0.0661
9	Anisole	8	287-425	11711	-177.745	0.17	0.0020
10	Benzene	19	280-348	10865	-179.249	0.67	0.0074
11	Benzonitrile	17	273-463	10827	-172.974	3.32	0.0410
12	Benzyl alcohol	13	288-478	18502	-187.673	5.99	0.0744
13	Benzylamine	12	294-457	12962	-179.182	1.31	0.0181
14	Biphenyl	6	373-498	14131	-177.914	0.24	0.0029
15	Bromoethane	8	273-309	7040	-173.248	0.04	0.0006
16	Bromobenzene	22	273-415	9673	-172.484	1.30	0.0168
17	Butane	8	183-323	5710	-170.661	1.54	0.0122
18	1-Butanol	26	223-387	19759	-196.307	1.37	0.0182
19	1,3-Butadiene	9	253-333	8267	-181.249	0.96	0.0110
20	Butyl acetate	9	273-373	10495	-176.277	0.47	0.0056
21	Butylamine	10	278-333	11100	-179.535	1.68	0.0189
22	N-Butylaniline	9	372-513	13472	-176.994	0.28	0.0031
23	Butyl benzene	8	283-353	11099	-175.584	0.49	0.0063
24	Butyl ether	8	273-373	10274	-175.461	0.38	0.0047
25	Butyraldehyde	6	291-348	8637	-174.831	0.05	0.0006

Benzene



■ EXP — new model