สมการสภาวะสำหรับระบบ นอร์มอล-เฮบเทน, เบนซีน และ ไซโคลเฮกเซน จากข้อมูลความหนาแน่น

นางสาวชมพูนุท บุพศิริ

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี
คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
ปีการศึกษา 2542

ISBN 974-333-703-2

EQUATIONS OF STATE FOR N-HEPTANE, BENZENE AND CYCLOHEXANE SYSTEM BASED ON DENSITY DATA

Miss Chompoonut Bupasiri

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Engineering in Chemical Engineering

Department of Chemical Engineering
Faculty of Engineering
Chulalongkorn University

Academic Year 1999

ISBN 974-333-703-2

Thesis Title	Equations of State for n-Heptane, Benzene and Cyclohexane System Based on Density Data
By	Miss Chompoonut Bupasiri
Department	Chemical Engineering
Thesis Advisor	Associate Professor Kroekchai Sukanjanajtee, Ph.D.
Thesis Co-advisor	Khanitta Malayawech

Accepted by the Faculty of Engineering, Chulalongkorn University in Partial Fulfillment of the Requirements for the Master's Degree

Tatchai Sumitra ..... Dean of Faculty of Engineering

(Associate Professor Tatchai Sumitra, Dr. Ing.)

Thesis Committee

Chirakarn Muangnapoh ..... Chairman

(Associate Professor Chirakarn Muangnapoh, Dr. Ing.)

K. Sukanjanajtee ..... Thesis Advisor

(Associate Professor Kroekchai Sukanjanajtee, Ph.D.)

Khanitta Malayaweech ..... Thesis Co-Advisor

(Khanitta Malayawech)

Seeroong Prichanont ..... Member

(Seeroong Prichanont, Ph. D.)

ชมพูนุท บุพศิริ : สมการสภาวะสำหรับระบบ นอร์มอล-เฮบเทน, เบนซีน และไซโคลเฮกเซน จากข้อมูลความหนาแน่น (EQUATIONS OF STATE FOR N-HEPTANE, BENZENE AND CYCLOHEXANE SYSTEM BASED ON DENSITY DATA) อ.ที่ปรึกษา : รศ. ดร. เกริกชัย สุกาญจนัจที, อ.ที่ปรึกษาร่วม : อ.ขนิษฐา มาลยเวช, 160 หน้า, ISBN 974-333-703-2.

ศึกษาสมการสภาวะคิวบิค สำหรับระบบ นอร์มอล-เฮบเทน, เบนซีน และ ไซโคลเฮกเซน จากข้อมูลความหนาแน่น ณ อุณหภูมิ 308.15, 313.15, 323.15 และ 333.15 องศาเคลวิน และความดัน 1.01325, 2, 5 และ 10 บาร์

การทำนายปริมาตรโมลาร์ของระบบสามองค์ประกอบนี้ ด้วยสมการสภาวะมอดอิไฟด์ เรดลิช-กวง (modified Redlich-Kwong) ให้ผลดีกว่า สมการสภาวะเปง-โรบินสัน (Peng-Robinson), สมการสภาวะเปง-โรบินสัน-สไตรเจ็ค-วีระ2 (Peng-Robinson-Stryjek-Vera2) และสมการสภาวะเปง-โรบินสัน-สไตรเจ็ค-วีระ (Peng-Robinson-Stryjek-Vera) ในทุก ๆ อุณหภูมิและความดัน ค่าความหนาแน่นของระบบสององค์ประกอบพร้อมด้วยระบบสามองค์ประกอบวัดโดยใช้เครื่อง DMA512P densitometer รวมทั้งแสดงปริมาตรโมลาร์ (Molar volume), ปริมาตรโมลาร์ส่วนเกิน (Excess molar volume) และปริมาตรโมลาร์ย่อย (Partial molar- volume) ที่ทำนายโดยสมการสภาวะเปง-โรบินสัน สำหรับระบบสององค์ประกอบ

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนิสิต.....Chompoonut Bupasiri.....
สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา.....
ปีการศึกษา 2542 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม.....

3970378421 : MAJOR CHEMICAL ENGINEERING

KEY WORD: DENSITY / EQUATION OF STATE / BENZENE / CYCLOHEXANE / N-HEPTANE

CHOMPOONUT BUPASIRI: EQUATIONS OF STATE FOR N-HEPTANE, BENZENE AND CYCLOHEXANE SYSTEM BASED ON DENSITY DATA. THESIS ADVISOR: ASSOC. PROF. KROEKCHAI SUKANJANAJTEE, Ph.D. THESIS CO-ADVISOR: KHANITTA MALAYAWECH. 160 pp. ISBN 974-333-703-2.

Cubic equations of state were studied for the ternary system of n-heptane, benzene and cyclohexane based on density data at temperature of 308.15, 313.15, 323.15 and 333.15 K and pressure of 1.01325, 2, 5 and 10 bar.

Prediction of molar volume of the ternary system with a modified Redlich-Kwong (MRK) is better than Peng-Robinson (PR), Peng-Robinson-Stryjek-Vera (PRSV2), and Peng-Robinson-Stryjek-Vera (PRSV) equations of state at all temperatures and pressures. The density data of the binary systems as well as the ternary system were measured by DMA512P densitometer. Molar volume, excess molar volume and partial molar volume by PR equation of state for binary systems were presented.

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนิสิต.....Chompoonut Bupasiri.....

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา.....K. Sukanjanajtee.....

ปีการศึกษา 2542 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม.....K. Malayawech.....

ACKNOWLEDGEMENT

The author would like to express her sincere gratitude to her advisor, Associate Professor Kroechai Sukanjanajtee for his inspiring guidance and valuable suggestions throughout the course of this work.

The author wishes to give her gratitude to Mrs. Khanitta Malayawech, the thesis co-advisor, for her kind guidance, helpful suggestions and encouragement.

The author wishes to extend her gratitude to Associate Professor Chirakarn Muangnapoh and Dr. Seeroong Prichanont for their useful comments and participation as the thesis committee.

The author also would like to express her gratitude to Associate Professor Yingyos Khemayodhin for permitting the use of equipment in this work.

Moreover, the author would like to offer her sincere and grateful thanks to her family for their encouragement and warmest support.

Finally, the author would like to thank her friends and all others who have helped her over the years of her study.

CONTENTS

PAGE

PAGE

LIST OF TABLES

TABLE PAGE

TABLE PAGE

TABLE PAGE

PAGE

TABLE

PAGE

TABLE

PAGE

TABLE

PAGE

TABLE

PAGE

TABLE

PAGE

TABLE

PAGE

TABLE

LIST OF FIGURES

PAGE

FIGURE

FIGURE PAGE

PAGE

FIGURE

FIGURE PAGE

FIGURE PAGE

FIGURE PAGE

NOMENCLATURES

A	Helmholtz free energy
a,b	parameters of equation of state
∂, d	partial, total derivative symbols
G	Gibbs free energy
H	enthalpy
k_{ij}	binary interaction parameter
M	molar property
MW	molecular weight, [g/g-mole]
$\overline{M}_i$	partial molar property
N	number of experimental data points
n	number of moles, number of components
n_i	function of acentric factor, equations (3.32)
P	pressure [Pa]
P_c	critical pressure [Pa]
P_r	reduce pressure
R	gas constant [cm^3 Pa /mole K]
S	entropy
T	temperature [K]
T_c	critical temperature [K]
T_r	reduce temperature
U	internal energy
V	molar volume [cm^3/mole]
v	specific volume
V_t	volume of mixture
$V_{t,\,pure}$	sum of pure components volumes
ΔV_{mix}	volume change on mixing [cm^3/mole]

x_i	liquid mole fraction of species i
y_i	vapor-phase mole fraction of species i
Z	compressibility factor

Subscripts

cal	calculated value
c	critical property
expt	experimental value
i	i th component
j	j th component
l	liquid phase
mix	mixing or mixture
pure	pure component
r	reduced property
t	total
v	vapor phase

Superscripts

E	excess property on mixing

Greek letter

ρ	density
ω	acentric factor
Δ	finite change
κ	thermal compressibility, function of reduced temperature and acentric factor, equation (3.39)
κ_0	function of acentric factor, equation (3.40) and (3.48)
κ_1	pure compound parameter, equation (3.39) and (3.47)
κ_2, κ_3	pure compound parameter, equation (3.47)
β	expansion coefficient, coefficient defined by equations (3.22)
α	coefficient defined by equations (3.20), (3.21), (3.31), (3.38) and (3.46)