دانشگاه صنعتی شیراز

دانشکده مهندسی شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته مهندسی شیمی (گرایش گاز)

مطالعه تجربی و مدلسازی ترمودینامیکی شرایط تشکیل هیدرات متان در حضور مایعات یونی

بوسیله:

لیلا کشاورز

اساتید راهنما:

دکتر جعفر جوانمردی

دکتر فاطمه سبزی

شهریور ۱۳۹۰

بسمه تعالی

مطالعه تجربی و مدلسازی ترمودینامیکی شرایط تشکیل هیدرات متان در حضور مایعات یونی

پایان نامه ارائه شده به عنوان بخشی از فعالیت های تحصیلی

توسط:

لیلا کشاورز

برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

گروه مهندسی شیمی (گرایش گاز)، دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز

دانشگاه صنعتی شیراز

ارزیابی شده توسط کمیته پایان نامه با درجه: عالی

دکتر جعفرجوانمردی، دانشیار مهندسی شیمی (استاد راهنما)----------

دکتر فاطمه سبزی، استادیار مهندسی شیمی (استاد راهنما)----------

دکترخشایار نصری فر، دانشیار مهندسی شیمی (استاد مشاور)----------

دکتر علیرضا شریعتی، استادیار مهندسی شیمی (استاد مدعو از دانشگاه شیراز)---------

---

مدیر امور آموزشی و تحصیلات تکمیلی دانشگاه: مهندس نصرت الله علی قنبری

شهریور ۱۳۹۰

بسم الله الرحمن الرحیم
الحمد لله رب العالمین الرحمن الرحیم مالک یوم الدین
ایاک نعبد و ایاک نستعین اهدنا الصراط المستقیم
صراط الذین انعمت علیهم غیر المغضوب علیهم
ولا الضالین

تقدیم به:

پدر و مادر عزیز و مهربانم،

که ذره ذره وجودشان را مایه پرورش و پیشرفتم ساختند.

و تقدیم به

همسر عزیزم

سپاسگزاری:

اکنون که این رساله به پایان رسیده است، بر خود فرض می دانم که از اساتید ارجمند، جناب آقای دکتر جوانمردی و سرکار خانم دکتر ســبزی به خاطر زحمات بی دریق و دلسوزانه ایشان در به پایان رساندن این رساله، کمال تشکر را به جا آورم.

چکیده

مطالعه تجربی و مدلسازی ترمودینامیکی شرایط تشکیل هیدرات متان در حضور مایعات یونی

به وسیله:

لیلا کشاورز

در این کار شرایط تشکیل هیدرات متان در حضور مایعات یونی با استفاده از دو روش ترمودینامیکی بررسی شده و با داده‌های آزمایشگاهی سایر محققین مقایسه می شود. علاوه بر این، شرایط تجزیه هیدرات متان در حضور سه مایع یونی شامل ۱- بوتیل-۳- متیل ایمیدازولیوم تترا فلئورو بورات (۱۰، ۱۵و ۲۰ درصد وزنی)، تتراتیل‌آمونیوم‌کلراید (۱۰ درصد وزنی) و ۱- بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم دی‌سیانامید (۱۰ درصد وزنی)، به طور آزمایشگاهی اندازه گیری شده است. داده های آزمایشگاهی در محدوده فشاری ۲۵ تا ۷۰ بار به دست آمده اند. داده های آزمایشگاهی بدست آمده و همچنین داده‌های آزمایشگاهی سایر محققین با مدل های ترمودینامیکی مقایسه شده و تطابق خوبی مشاهده شده است.

فهرست مطالب

عنوان صفحه

فصل اول: مقدمه

۱-۲مقدمه ۲
۱-۲ روند کلی پایان نامه ۵

فصل دوم: معرفی هیدرات گازی و مروری بر تاریخچه آن

۲-۱ مقدمه‌ای بر هیدرات و اهمیت آن ۷
۲-۲ تاریخچه ۷
۲-۳ ساختار مولکولی هیدرات ۸
۲-۳-۱ ساختار I ۱۲
۲-۳-۲ ساختار II ۱۳
۲-۳-۳ ساختار H ۱۴
۲-۳-۴ کریستال‌های غیرمعمول ۱۷
۲-۴ درصد گاز در هیدرات ۱۸
۲-۵ فرآیند تشکیل و تجزیه هیدرات ۱۸
۲-۶ شرایط تشکیل هیدرات و ویژگی‌های عمومی مولکول‌های مهمان ۲۱
۲-۶-۱ طبیعت شیمیایی مولکول‌های مهمان ۲۲
۲-۶-۲ بررسی هندسی مولکول‌های مهمان ۲۲
۲-۷- منابع هیدرات گازی و اهمیت آنها ۲۳

عنوان صفحه

۲-۷-۱ هیدرات های گازی نواحی یخ زده و قطبی ۲۳
۲-۷-۲ هیدرات‌های گازی دریایی ۲۴
۲-۷-۳ تولید گاز از هیدرات‌های گازی ۲۵
۲-۷-۴ ذخیره سازی و انتقال گاز طبیعی توسط هیدرات ۲۶
۲-۸ هیدرات به عنوان معضلی در صنعت نفت و گاز ۲۸
۲-۸-۱ بازدارنده های ترمودینامیکی ۳۰
۲-۸-۲ بازدارنده‌های ویژه ۳۱
۲-۸-۳ روش ضدانباشتگی ۳۱
۲-۸-۴ بازدارنده‌های سینتیکی ۳۱
۲-۸-۵ بازدارنده‌های دو منظوره ۳۲
۲-۹ مایعات یونی ۳۳
۲-۹-۱ مزایای مایعات یونی ۳۴
۲-۹-۲ کاربرد مایعات یونی در فرایندهای شیمیایی ۳۶
۲-۱۰ مروری بر تحقیقات انجام‌شده تا کنون در مورد بازدارنده‌های دو منظوره ۳۶

فصل سوم: تئوری تشکیل هیدرات در حضور مایعات یونی

۳-۱ مقدمه ۴۲
۳-۲ مدل ترمودینامیکی وندروالس – پلاتو ۴۲
۳-۲-۱ محاسبه اختلاف پتانسیل شیمیایی آب در شبکه هیدرات توخالی و شبکه هیدرات پرشده ($\Delta\mu_w^{\beta-H}$) ۴۳
۳-۲-۱-۱ محاسبه فوگاسیته اجزای فاز گاز ۴۷
۳-۲-۲ محاسبه اختلاف پتانسیل شیمیایی آب در فاز مایع و شبکه هیدرات توخالی($\Delta\mu_w^{\beta-\alpha}$) ۴۸
۳-۳ الگوریتم محاسبات پیش‌بینی شرایط تشکیل هیدرات گازی ۵۰
۳-۴ اصلاح مدل ترمودینامیکی در حضور بازدارنده‌ها ۵۳
۳-۴-۱ فعالیت آب در حضور مایعات یونی ۵۳
۳-۴-۱-۱ مدل UNIQUAC برای محاسبه ضریب اکتیویته ۵۳

عنوان صفحه

۳-۴-۱-۲ مدل NRTL برای محاسبه ضریب اکتیویته ۵۵
۳-۴-۱-۳ رابطه تجربی همر و همکارانش (۱۹۷۲) ۵۶
۳-۴-۲ انرژی برخورد مایع یونی با آب ۵۸

فصل چهارم: نتایج

۴-۱ نتایج پیش بینی شرایط تشکیل هیدرات های گازی در حضور مایعات یونی با استفاده از روش های ترمودینامیکی ۶۰
۴-۲ بررسی آزمایشگاهی شرایط تشکیل هیدرات متان در حضور بازدارنده های دو-منظوره (مایعات یونی) ۶۸
۴-۲-۱ تجهیزات آزمایشگاهی و مواد مصرفی ۶۹
۴-۲-۲ آماده سازی سیستم جهت انجام هر آزمایش ۷۲
۴-۲-۳ روش انجام آزمایش های تجربی بررسی شرایط تعادلی تجزیه هیدرات ۷۳
۴-۲-۴ روش انجام آزمایش در این پایان نامه ۷۵
۴-۲-۵ نتایج آزمایشگاهی ۷۷
۴-۲-۵-۱ شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور آب خالص ۷۷
۴-۲-۵-۲ شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱ -بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات ۷۹
۴-۲-۵-۳ شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۱۵ درصد وزنی ۱ -بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات ۸۲
۴-۲-۵-۴ شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۲۰ درصد وزنی ۱- بوتیل-۳- متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات ۸۴
۴-۲-۵-۵ شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱ -بوتیل-۳- متیل ایمیدازولیوم دی سیانامید ۸۶
۴-۲-۵-۶ شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی تترا اتیل آمونیوم کلراید ۸۸
۴-۲-۵-۷ شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۴/۷۶ درصد وزنی ال تایروزین ۹۰

عنوان صفحه

فصل پنجم: جمع بندی و پیشنهادات

۵-۱ بحث و نتیجه گیری ۹۶
۵-۲ پیشنهادات ۹۷
- فهرست منابع ۹۸

فهرست جدول ها

عنوان و شماره صفحه

جدول (۲-۱) مشخصات و ویژگی‌های شبکه‌های مختلف کریستال هیدرات (Sloane, ۲۰۰۸) ۱۱

جدول (۲-۲) نسبت قطر مولکولی به قطر حفره برای اجزای گاز طبیعی (Sloane, ۲۰۰۸) ۲۳

جدول (۲-۳) نام و ساختار شیمیایی مایعات یونی مطالعه شده توسط آدیدهارما و شایو(۲۰۰۹) ۳۷

جدول (۲-۴) نام و ساختار شیمیایی مایعات یونی مطالعه شده توسط آدیدهارما و شایو (۲۰۱۰) ۳۸

جدول (۲-۵) نام و ساختار شیمیایی مایعات یونی مطالعه شده توسط لی و همکارانش (۲۰۱۱) ۴۰

جدول (۳-۱) پارامترهای کیهارا، (Sloan,۱۹۹۸) ۴۵

جدول (۳-۲) پارامترهای رابطه‌ی تجربی ضریب لانگمیور (Prausnitz and Parish,۱۹۷۲) ۴۶

جدول(۳-۳) پارامترهای مورد نیاز برای محاسبه ثابت هنری (Sloan,۱۹۹۸) ۴۹

جدول (۳-۴) پارامترهای تجربی مورد نیاز برای محاسبه اختلاف پتانسیل شیمیایی آب (Sloan,۱۹۹۸) ۵۰

جدول (۴-۱) داده های آزمایشگاهی بررسی شده ۶۱

جدول (۴-۲) پارامتر قطر برخورد بهینه شده در تابع پتانسیل کیهارا ۶۱

جدول(۴-۳) درصد میانگین انحراف مطلق دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور مایعات یونی ۶۸

جدول (۴-۴) درصد خلوص وشرکت فراهم کننده مواد ۷۲

جدول (۴-۵) نقاط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور آب خالص ۷۸

عنوان وشماره صفحه

جدول (۴-۶) نقاط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی
۱ -بوتیل-۳- متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات ۸۰
جدول (۴-۷) نقاط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۱۵ درصد وزنی
۱ -بوتیل-۳- متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات ۸۳
جدول (۴-۸) نقاط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۲۰ درصد وزنی
۱ -بوتیل-۳- متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات ۸۷
جدول(۴-۹) نقاط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی
۱ -بوتیل-۳- متیل ایمیدازولیوم دی سیانامید ۸۷
جدول (۴-۱۰) نقاط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی
ترا اتیل آمونیوم کلراید ۸۹
جدول (۴-۱۱) نقاط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۴/۷۶ درصد وزنی
ال تایروزین ۹۰
جدول (۴-۱۲) درصد میانگین انحراف مطلق دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان
در حضور مایعات یونی ۹۱
جدول (۴-۱۳) پارامتر قطر برخورد بهینه شده در تابع پتانسیل کیهارا ۹۲

فهرست شکل ها

عنوان و شماره | صفحه

شکل (۲-۱) پیوند هیدروژنی میان چهار مولکول آب (Sloane, ۱۹۹۸) ۹

شکل (۲-۲) ساختار کریستالی پایه برای یخ Ih (Sloane, ۱۹۹۸) ۹

شکل (۲-۳) حفره‌های موجود در هیدرات گازی و نحوی قرار گرفتن آن‌ها در سه نوع ساختار مختلف هیدرات (Khokar, ۱۹۹۸) ۱۱

شکل (۲-۴) مقایسه اندازه مولکول میهمان و حفره‌های اشغال شده در ساختارهای متفاوت با استفاده از XRD (Sloane, ۱۹۹۷) ۱۲

شکل (۲-۵) تصویر ساختار I (Sloane, ۱۹۹۸) ۱۳

شکل (۲-۶) تصویر ساختار II (Sloane, ۱۹۹۸) ۱۳

شکل (۲-۷) تصویر تشکیل شده ساختار II توسط لایه‌ای از حفرات 5^{12} و لایه‌ی تشکیل شده توسط حفرات 5^{12} و $5^{12}6^4$ (Sloane, ۲۰۰۸) ۱۴

شکل (۲-۸) تصویر ساختار H (Sloane, ۲۰۰۸) ۱۵

شکل (۲-۹) تصویر از بالای ساختار H (Sloane, ۲۰۰۸) ۱۵

شکل (۲-۱۰) نمای جانبی ساختار H (Sloane, ۲۰۰۸) ۱۶

شکل (۲-۱۱) تصویر تشکیل ساختار H توسط لایه‌ای از حفرات 5^{12} و لایه‌ی تشکیل‌شده توسط حفرات $5^{12}6^8$ و $4^35^66^3$ (Sloane, ۲۰۰۸) ۱۶

شکل (۲-۱۲) هیدرات تترا بوتیل آمونیوم برماید (TBAB) (Sloane, ۲۰۰۸) ۱۷

شکل (۲-۱۳) فرآیند تشکیل هیدرات (Sloane, ۲۰۰۸) ۱۹

شکل (۲-۱۴) میزان مصرف گاز بر حسب زمان در فرآیند تشکیل هیدرات (Sloane, ۲۰۰۸) ۲۰

شکل (۲-۱۵) تغییر فشار برحسب دما در فرآیند تتشکیل هیدرات متان (Sloane, ۲۰۰۸) ۲۱

شکل (۲-۱۶) مخازن هیدرات های گازی در جهان (Kvenvolden, ۲۰۰۵) ۲۵

شکل (۲-۱۷) محدوده مناسب برای هر روش ذخیره سازی براساس مسافت و ظرفیت ۲۸

عنوان و شماره | صفحه

شکل (۲-۱۸) دستگاه بکاررفته توسط لانگ و همکاران برای بررسی بازدارنده‌های سینتیکی (Long,۱۹۹۴) ۳۲
شکل (۳-۱) الگوریتم محاسباتی پیش بینی شرایط تشکیل هیدرات ۵۲
شکل (۴-۱) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- بوتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برماید (داده های آزمایشگاهی Xaio و همکاران (۲۰۱۰)) ۶۲
شکل (۴-۲) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- اتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم تترا فلورو بورات (داده های آزمایشگاهی Xaio و همکاران (۲۰۱۰)) ۶۳
شکل (۴-۳) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- اتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برماید (داده های آزمایشگاهی Xaio و همکاران (۲۰۱۰)) ۶۳
شکل (۴-۴) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- بوتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم کلرید (داده های آزمایشگاهی Xaio و همکاران (۲۰۱۰)) ۶۴
شکل (۴-۵) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- بوتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم یدات (داده های آزمایشگاهی Xaio و همکاران (۲۰۱۰)) ۶۴
شکل (۴-۶) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلورو بورات (داده های آزمایشگاهی Xaio و همکاران (۲۰۱۰)) ۶۵
شکل (۴-۷) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱-اتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم کلرید (داده های آزمایشگاهی Xaio و همکاران (۲۰۱۰)) ۶۵
شکل (۴-۸) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- اتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم اتیل سولفات (داده های آزمایشگاهی Xaio و Adidharma (۲۰۰۹)) ۶۶

عنوان و شماره | صفحه

شکل (۴-۹) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱و ۳- دی متیل ایمیدازولیوم یدات (داده های آزمایشگاهی Li و همکاران (۲۰۱۱)) ۶۶

شکل (۴-۱۰) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی تترا متیل آمونیوم کلراید (داده های آزمایشگاهی Li و همکاران (۲۰۱۱)) ۶۷

شکل (۴-۱۱) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- اتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم اتیل سولفات (داده های آزمایشگاهی Xaio و Adidharma (۲۰۰۹)) ۷۰

شکل (۴-۱۲) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- اتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برماید (داده های آزمایشگاهی Xaio و همکاران (۲۰۱۰)) ۷۰

شکل (۴-۱۳) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- اتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم تری فلورو متان سولفونات.(داده های آزمایشگاهی Xaio و Adidharma (۲۰۰۹)) ۷۱

شکل (۴-۱۴) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلورو بورات (داده های آزمایشگاهی Xaio و همکاران (۲۰۱۰)) ۷۱

شکل (۴-۱۵) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- اتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم تترافلوروبورات (داده های آزمایشگاهی Xaio و همکاران (۲۰۱۰) و Xaio و Adidharma (۲۰۰۹)) ۷۲

شکل (۴-۱۶) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- بوتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم کلرید (داده های آزمایشگاهی Xaio و همکاران (۲۰۱۰)) ۷۲

شکل (۴-۱۷) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱-اتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم کلرید (داده های آزمایشگاهی Xaio و همکاران (۲۰۱۰)) ۷۳

عنوان و شماره | صفحه

شکل (۴-۱۸) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- بوتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برماید (داده های آزمایشگاهی Xaio و همکاران (۲۰۱۰)) ۷۳
شکل (۴-۱۹) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- اتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برماید (داده های آزمایشگاهی Xaio و همکاران (۲۰۱۰)) ۷۴
شکل (۴-۲۰) داده های آزمایشگاهی و مقادیر محاسبه شده دمای تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- بوتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم یدات (داده های آزمایشگاهی Xaio و همکاران (۲۰۱۰)) ۷۴
شکل (۴-۲۱) سلول تعادلی ۷۷
شکل (۴-۲۲) نمای کلی سیستم آزمایشگاه هیدرات ۷۹
شکل (۴-۲۳) نمودار دما-فشار در یک فرآیند حجم ثابت تولید هیدرات ۸۲
شکل (۴-۲۴) تغییرات دما بر حسب زمان ۸۴
شکل (۴-۲۵) تغییرات فشار بر حسب زمان ۸۴
شکل (۴-۲۶) تغییرات فشار بر حسب دما ۸۵
شکل (۴-۲۷) نقاط آزمایشگاهی و روش ترمودینامیکی شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور آب خالص ۸۷
شکل (۴-۲۸) نقاط آزمایشگاهی شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- بوتیل-۳- متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات ۸۹
شکل (۴-۲۹) نقاط آزمایشگاهی و روش ترمودینامیکی شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- بوتیل-۳- متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات ۹۰
شکل (۴-۳۰) نقاط آزمایشگاهی و روش ترمودینامیکی شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۱۵ درصد وزنی ۱- بوتیل-۳- متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات ۹۲

عنوان و شماره صفحه

شکل (۴-۳۱) نقاط آزمایشگاهی و روش ترمودینامیکی شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۲۰ درصد وزنی ۱- بوتیل-۳- متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات ۹۴
شکل (۴-۳۲) نقاط آزمایشگاهی و روش ترمودینامیکی شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱- بوتیل-۳- متیل ایمیدازولیوم دی سیانامید ۹۶
شکل (۴-۳۳) نقاط آزمایشگاهی و روش ترمودینامیکی شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۱۰ درصد وزنی تترا اتیل آمونیوم کلراید ۹۸
شکل (۴-۳۴) نقاط آزمایشگاهی شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور ۱۰،۱۵ و ۲۰ درصد وزنی ۱- بوتیل-۳- متیل ایمیدازولیوم تترا فلورو بورات ۱۰۰
شکل (۴-۳۵) نقاط آزمایشگاهی شرایط تعادلی تجزیه هیدرات متان در حضور مایعات یونی ۱۰۱

فهرست نشانه های اختصاری

a	شعاع ملکول مهمان، (Å)
a_w	فعالیت آب
C_{mi}	ضریب لانگمویر حفره نوع m برای جزء i
f_w^H	فوگاسیته آب در فاز هیدرات
f_w^β	فوگاسیته مولکول‌های آب اگر در یک شبکه خالی هیدرات آرایش یابند
f_w^H	فوگاسیته آب در فاز هیدرات
f_w^{lo}	فوگاسیته‌ی آب خالص
f_i	فوگاسیته جزء i, مولکول مهمان در فاز هیدرات
k	ثابت بولتزمن، $۱/۳۸۰۶۶\times۱۰^{-۲۳}$
m	معرف مولالیته نمک
T	دما
T_0	نقطه انجماد آب (بر حسب درجه حرارت مطلق)
T_m	دما در نقطه ذوب
P	فشار
R	ثابت جهانی گاز ها، $8.314(J/mol.K)$
x_w	جزء مولی در فاز آب
v	حجم مولی، (cm^3/mol)
w	درصد وزنی
$\omega(r)$	تابع پتانسیل حفره متقارن کروی
ω	فاکتور بی مرکزی
Z	عدد همسایگی هر حفره (تعداد مولکول‌های اکسیژن در هر حفره
Z_i	بارهای مثبت و منفی الکترولیت

فهرست حروف یونانی

$\Delta\mu_w^{\beta-H}$	اختلاف پتانسیل شیمیایی آب بین فاز فرضی هیدرات خالی و فاز هیدرات
$\Delta\mu_w^{\beta-l}$	اختلاف پتانسیل شیمیایی آب بین فاز فرضی هیدرات خالی و فاز مایع
$\Delta\mu_w^0$	اختلاف پتانسیل شیمیایی آب در شبکه خالی و آب به صورت آب مایع در ۲۷۳/۱۵ K (حالت مرجع, $P=0$)
$\Delta\upsilon_w^{\beta-l}$	اختلاف حجم مولی بین شبکه خالی هیدرات وآب مایع
$\Delta h_w^{\beta-l}$	اختلاف آنتالپی مولی بین شبکه کریستالی خالی هیدرات و آب مایع
ΔV_i^f	تغییرات حجم در نقطه ی ذوب
ΔC_P	تغییرات آنتالپی در نقطه ی ذوب
ΔC_P	اختلاف ظرفیت گرمایی بین حالت های مایع و جامد
φ_i	ضریب فوگاسیته ماده ی غیر الکترولیتی در فاز محلول
ν_m	تعداد حفره های نوع m به ازاء هر مولکول آب در شبکه کریستالی هیدرات
σ	قطر برخورد، (Å)
ε	عمق چاه انرژی، (Å)

فصل اول

مقدمه