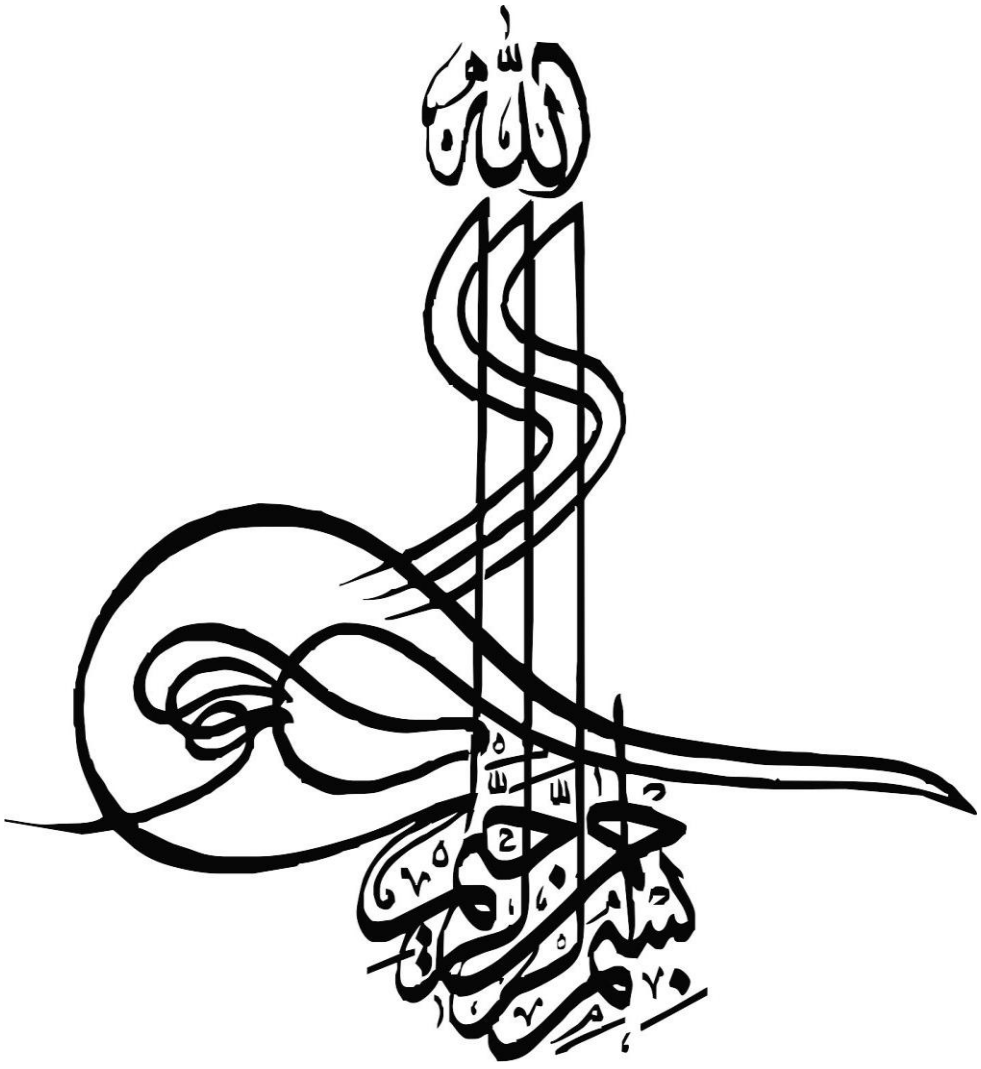
الله
بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه صنعتی شیراز

دانشکده مهندسی شیمی، گروه مهندسی شیمی

پایان‌نامه کارشناسی ارشد

در رشته مهندسی شیمی (گرایش گاز)

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

نگارش:

فاطمه کاظمی

استاد راهنما:

دکتر جعفر جوانمردی

شهریور ماه ۱۳۹۳

دانشگاه صنعتی شیراز

دانشکده مهندسی شیمی، گروه مهندسی شیمی

پایان‌نامه کارشناسی ارشد

در رشته مهندسی شیمی (گرایش گاز)

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

نگارش:

فاطمه کاظمی

استاد راهنما:

دکتر جعفر جوانمردی

شهریور ماه ۱۳۹۳

بسمه تعالی

مطالعه آزمایشگاهی و مدل سازی ترمودینامیکی شرایط تشکیل هیدرات متان در حضور مخلوط مایعات یونی

پایان‌نامه ارائه شده به عنوان بخشی از فعالیت‌های تحصیلی

نگارش:

فاطمه کاظمی

برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

گروه مهندسی شیمی (گرایش گاز)، دانشکده مهندسی شیمی
دانشگاه صنعتی شیراز

ارزیابی پایان‌نامه توسط هیات داوران با درجه: عالی

دکتر جعفر جوانمردی، دانشیار مهندسی شیمی (استاد راهنما).....

دکتر علی اکبر روستا، استادیار مهندسی شیمی (استاد مشاور).....

دکتر فاطمه سبزی، استادیار شیمی فیزیک (استاد داور).....

مدیر امور آموزشی و تحصیلات تکمیلی دانشگاه: دکتر اکبر رهیده.....

حق چاپ محفوظ و مخصوص به دانشگاه صنعتی شیراز است.

تأییدیه‌ی صحت و اصالت نتایج

باسمه تعالی

اینجانب فاطمه کاظمی دانشجوی رشته مهندسی شیمی مقطع تحصیلی کارشناسی ارشد به شماره دانشجویی ۹۱۱۲۴۰۱۰ تأیید می‌نماید کلیه نتایج این پایان نامه، بدون هیچ‌گونه دخل و تصرف، حاصل مستقیم پژوهش صورت گرفته توسط اینجانب است. در مورد اقتباس مستقیم و غیر مستقیم از سایر آثار علمی، اعم از کتاب، مقاله، پایان نامه و ... با رعایت امانت و اخلاق علمی، مشخصات کامل منبع مذکور درج شده است.

در صورت اثبات خلاف مندرجات فوق، به تشخیص مقامات ذی صلاح دانشگاه صنعتی شیراز، مطابق قوانین و مقررات مربوط و آئین نامه‌های آموزشی، پژوهشی و انضباطی و ... عمل خواهد شد و اینجانب حق هرگونه اعتراض و تجدیدنظر را، نسبت به رأی صادره، از خود ساقط می‌کند. همچنین، هرگونه مسئولیت ناشی از تخلف نسبت به صحت و اصالت نتایج مندرج در پایان نامه در برابر اشخاص ذی نفع (اعم از حقیقی و حقوقی) و مراجع ذی صلاح (اعم از اداری و قضایی) متوجه اینجانب خواهد بود و دانشگاه صنعتی شیراز هیچ گونه مسئولیتی دراین زمینه نخواهند داشت.

تبصره ۱- کلیه حقوق مادی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شیراز است.

تبصره ۲- اینجانب تعهد می‌نماید بدون اخذ مجوز از دانشگاه صنعتی شیراز دستاوردهای این پایان نامه را منتشر نکند و یا در اختیار دیگران قرار ندهد.

نام و نام خانوادگی دانشجو:

تاریخ و امضاء

مجوز بهره‌برداری از پایان‌نامه

کلیه حقوق مادی و معنوی مترتب بر نتایج پایان‌نامه متعلق به دانشگاه و انتشار نتایج نیز تابع مقرارت دانشگاهی است و با موافقت استاد راهنما به شرح زیر، بلامانع است:

☐ بهره‌برداری از این پایان‌نامه/ رساله برای همگان بلامانع است.

☐ بهره‌برداری از این پایان‌نامه/ رساله با اخذ مجوز از استاد راهنما، بلامانع است.

☐ بهره‌برداری از این پایان‌نامه/ رساله تا تاریخ ..... ممنوع است.

نام استاد یا اساتید راهنما:

تاریخ:

امضا:

تقدیم به:

مهربان فرشتگانی که لحظات ناب باور بودن، لذت و غرور دانستن، جسارت خواستن، عظمت رسیدن و تمام تجربه های یکتا و زیبای زندگیم مدیون حضور سبز آن هاست؛

تقدیم به خانواده عزیزم

تشکر و قدردانی:

سپاس بی‌کران پروردگار یکتا را که هستی‌یمان بخشید و به طریق علم و دانش رهنمونمان شد و به همنشینی رهروان علم مفتخرمان نمود و خوشه‌چینی از علم و معرفت را روزیمان ساخت.

با تقدیر فراوان از پدر و مادر بسیار عزیز، دلسوز و فداکارم که پیوسته جرعه نوش جام تعلیم و تربیت و انسانیت آن‌ها بوده‌ام و همواره چراغ وجودشان روشنگر راه من در سختی ها و مشکلات بوده است.

به مصداق «من لم یشکر المخلوق لم یشکر الخالق» بسی شایسته است از استاد فرهیخته و ارجمند جناب آقای دکتر جوانمردی که همواره راهنما و راه‌گشای نگارنده در اتمام واکمال پایان‌نامه بوده اند، تقدیر و تشکر نمایم.

از زحمات بی‌دریغ استاد مشاور بزرگوار و شایسته جناب آقای دکتر روستا، که در تمامی مراحل این پایان‌نامه مرا از رهنمود-های گرانقدر خویش بهره‌مند ساختند، کمال تشکر و قدردانی را دارم.

از استاد فرزانه و دلسوز، سرکار خانم دکتر سبزی که زحمت داوری این پایان‌نامه را متقبل شدند، بسیار سپاسگزارم.

و با تشکر صمیمانه از تمامی کسانی که به نوعی مرا در به انجام رساندن این مهم یاری نموده‌اند.

چکیده

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

نگارش:

فاطمه کاظمی

در این پایان‌نامه شرایط تعادلی تشکیل هیدرات متان در حضور مخلوط دو مایع یونی ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات و تترا اتیل آمونیوم کلراید به عنوان بازدارنده‌ی ترمودینامیکی مورد مطالعه‌ی آزمایشگاهی قرار گرفت. علاوه بر آن با استفاده از یک مدل ترمودینامیکی شرایط تعادلی تشکیل هیدرات در حضور مخلوط این دو مایع یونی پیش‌بینی شد. برای این منظور تئوری واندروالس-پلاتیو برای توصیف پتانسیل شیمیایی فاز هیدرات، معادله حالت پنگ-رابینسون برای محاسبه‌ی فوگاسیته‌ی گاز متان در فاز بخار و مدل اکتیویته‌ی NRTL برای محاسبه‌ی اکتیویته‌ی آب در فاز مایع مورد استفاده قرار گرفت. نتایج با داده‌های آزمایشگاهی به دست آمده مقایسه شد و مشاهده شد مطابقت خوبی بین داده‌های پیش بینی شده توسط این مدل با داده‌های آزمایشگاهی وجود دارد. همچنین نتایج به دست آمده نشان داد که در غلظت ثابت، مخلوط دو مایع یونی، اثر بازدارندگی را نسبت به هر یک از مایعات یونی افزایش می‌دهد.

علاوه بر آن توانایی سه مدل اکتیویته برای پیش بینی شرایط تشکیل هیدرات در حضور مایعات یونی مختلف با یکدیگر مقایسه شد. مطابقت خوبی بین داده‌های آزمایشگاهی و نقاط به دست آمده توسط این سه مدل مشاهده شد که این بیانگر توانایی هر سه مدل UNIQUAC، NRTL و UNIFAC در پیش بینی شرایط تعادلی تشکیل هیدرات در حضور مایعات یونی است. این مقایسه نشان داد که مدل UNIQUAC خطای کمتری نسبت به دیگر مدل‌های مورد بررسی داشته است.

واژه‌های کلیدی: هیدرات‌های گازی، بازدارنده‌های دومنظوره، مایعات یونی، مدل‌سازی ترمودینامیکی.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

۱.فصل اول: مقدمه ای بر هیدرات‌های گازی **۱**

۱-۱- هیدرات‌های گازی ۲

۱-۲- تاریخچه‌ی هیدرات‌های گازی ۲

۱-۲-۱- دوره اول ۳

۱-۲-۲- دوره دوم ۴

۱-۲-۳- دوره سوم ۴

۱-۳- ساختارهای هیدرات گازی ۴

۱-۳-۱- حفره‌های تشکیل دهنده‌ی هیدرات ۵

۱-۳-۲- ساختار I (SI) ۶

۱-۳-۳- ساختار II (SII) ۷

۱-۳-۴- ساختار H (SH) ۸

۱-۴- ویژگی‌های ملکول‌های مهمان و نوع ساختار تشکیل دهنده‌ی آن ۹

۱-۵- ساختارهای غیر معمول هیدرات ۱۳

۱-۶- هیدرات‌های نیمه کلاتریت ۱۳

۱-۷- نمودار فازی تشکیل هیدرات ۱۴

۱-۸- کاربردهای هیدرات‌های گازی ۱۶

۱-۸-۱- تامین گاز ۱۶

۱-۸-۲- جداسازی گاز ۱۷

۱-۸-۳- جداسازی CO_2 ..... ۱۸

۱-۸-۴- جداسازی متان ۱۹

۱-۸-۵- جداسازی هیدروژن ۱۹

۱-۸-۶- جداسازی نیتروژن ۱۹

۱-۸-۷- جداسازی نفت و گاز ۲۰

۱-۸-۸- نمک زدایی از آب دریا ۲۰

۱-۸-۹- ذخیره‌سازی و انتقال گاز ۲۰

۱-۹- هیدرات‌های گازی به عنوان معضلی در صنعت ۲۱

۱-۱۰- بازدارنده‌های ترمودینامیکی ۲۲

۱-۱۱- بازدارنده‌های سینتیکی ۲۳

۱-۱۲- بازدارنده‌های ضد تجمعی ۲۴

۱-۱۳- بازدارنده‌های دو منظوره ۲۵

۱-۱۴- مایعات یونی ۲۵

۱-۱۴-۱- خواص فیزیکی مایعات یونی ۲۷
۱-۱۴-۱-۱-نقطه‌ی ذوب..... ۲۷
۱-۱۴-۱-۲-دانسیته..... ۲۷
۱-۱۴-۱-۳-ویسکوزیته..... ۲۷
۱-۱۴-۱-۴-کشش سطحی..... ۲۸
۱-۱۴-۲- ویژگی‌های مایعات یونی ۲۸
۱-۱۴-۳- کاربرد مایعات یونی ۲۹
۱-۱۴-۴- مزایای مایعات یونی ۳۰
۱-۱۵- ضرورت این تحقیق ۳۱

۲.فصل دوم: مروری بر تحقیقات انجام شده ۳۲

۳.فصل سوم: مدل‌سازی ترمودینامیکی ۳۹
۳-۱- مقدمه ۴۰
۳-۲- مدل ترمودینامیکی واندروالس-پلاتیو ۴۱
۳-۲-۱- محاسبه‌ی اختلاف پتانسیل شیمیایی میان آب در شبکه هیدرات توخالی و شبکه هیدرات پایدار شده ۴۲
۳-۲-۲- محاسبه‌ی فوگاسیته در فاز گاز ۴۴
۳-۲-۳- محاسبه‌ی اختلاف پتانسیل آب میان فاز خالی از هیدرات و فاز مایع ۴۵
۳-۳- محاسبه‌ی فعالیت آب در حضور مایعات یونی ۴۷
۳-۳-۱- مدل UNIQUAC برای محاسبه‌ی ضریب اکتیویته‌ی آب ۴۸
۳-۳-۲- مدل NRTL برای محاسبه‌ی ضریب اکتیویته‌ی آب ۵۰
۳-۳-۳- مدل UNIFAC برای محاسبه‌ی ضریب اکتیویته‌ی آب ۵۰

۴.فصل چهارم: نتایج آزمایشگاهی و تفسیر آنها ۵۴
۴-۱- نتایج پیش‌بینی شرایط تشکیل هیدرات متان در حضور مایعات یونی مختلف با استفاده از مدل‌های اکتیویته‌ی UNIQUAC ، NRTL و UNIFAC..... ۵۶
۴-۲- اثر فشار بر روی بازدارندگی مایعات یونی ۶۲
۴-۳- اثر غلظت بر روی بازدارندگی مایعات یونی ۶۳
۴-۴- بررسی آزمایشگاهی شرایط تشکیل هیدرات متان در حضور همزمان دو مایع یونی به عنوان بازدارنده ۶۵
۴-۵- تجهیزات آزمایشگاهی ۶۵
۴-۵-۱- سلول تعادلی ۶۶
۴-۵-۲- حمام الکل ۶۷
۴-۵-۳- سیستم هوشمند کنترل دما ۶۷

۴-۵-۴- سنسورهای دما و فشار ۶۸
۴-۵-۵- کپسول‌های گاز ۶۸
۴-۵-۶- پمپ خلا ۶۸
۴-۵-۷- ترازوی دیجیتال ۶۸
۴-۵-۸- دستگاه تهیه‌ی آب مقطر ۶۸
۴-۵-۹- دستگاه تامین برق اضطراری ۶۹
۴-۵-۱۰- رایانه و نرم افزار ذخیره‌سازی اطلاعات ۶۹
۴-۵-۱۱- مواد مورد استفاده در آزمایش ۶۹
۴-۶- انواع روش‌های تجربی بررسی شرایط تعادلی تشکیل هیدرات ۷۰
۴-۷- نحوه‌ی آماده سازی سیستم ۷۱
۴-۸- روش انجام آزمایش ۷۲
۴-۹- نتایج آزمایشگاهی ۷۴

۵.فصل پنجم: جمع‌بندی و پیشنهادها **۸۹**
۵-۱- جمع‌بندی ۹۰
۵-۲- پیشنهادها ۹۱

مراجع **۹۲**

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل (۱-۱) انواع حفرات موجود در ساختارهای هیدرات (a) دوازده وجهی با سطوح پنج ضلعی 5^{12}، (b) چهارده وجهی $5^{12}6^2$، (c) شانزده وجهی $5^{12}6^4$، (d) دوازده وجهی غیرمنتظم $4^35^66^3$، (e) بیست وجهی $5^{12}6^8$ [۱] ۵

شکل (۱-۲) حفره های چند وجهی هیدرات نوع I [۲] ۷

شکل (۱-۳) حفره های چند وجهی هیدرات نوع II [۲] ۸

شکل (۱-۴) حفره‌های تشکیل دهنده‌ی هیدرات نوع H [۱] ۹

شکل (۱-۵) مقایسه‌ی اندازه‌ی ملکول‌های مهمان و حفره‌های اشغال شده [۱] ۱۲

شکل (۱-۶) سلول واحد هیدرات نیمه کلاتریت تترابوتیل آمونیوم برماید [۱۷] ۱۴

شکل (۱-۷) نمودار فازی تشکیل هیدرات برای چندین هیدروکربن [۱] ۱۵

شکل (۱-۸) مخازن هیدرات گازی کشف شده [۲۲] ۱۷

شکل (۱-۹) مراحل تشکیل هیدرات در خط لوله [۳] ۲۴

شکل (۴-۱) تجزیه‌ی مایع یونی BMIM-BF_4 به گروه‌های سازنده‌ی آن ۵۶

شکل (۴-۲) مقایسه داده‌های آزمایشگاهی با مقادیر محاسبه شده‌ی دمای تشکیل هیدرات متان از مدل‌های UNIQUAC، NRTL و UNIFAC در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱-بوتیل ۳-متیل ایمیدازولیوم تترا فلوئوروبورات ۵۷

شکل (۴-۳) مقایسه داده‌های آزمایشگاهی با مقادیر محاسبه شده‌ی دمای تشکیل هیدرات متان از مدل‌های UNIQUAC و NRTL در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱-بوتیل ۳-متیل ایمیدازولیوم کلراید ۵۸

شکل (۴-۴) مقایسه داده‌های آزمایشگاهی با مقادیر محاسبه شده‌ی دمای تشکیل هیدرات متان از مدل‌های UNIQUAC و NRTL در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱-بوتیل ۳-متیل ایمیدازولیوم متیل سولفات ۵۸

شکل (۴-۵) مقایسه داده‌های آزمایشگاهی با مقادیر محاسبه شده‌ی دمای تشکیل هیدرات متان از مدل‌های UNIQUAC و NRTL و UNIFAC در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱-اتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترا فلوئوروبورات ۵۹

شکل (۴-۶) مقایسه داده‌های آزمایشگاهی با مقادیر محاسبه شده‌ی دمای تشکیل هیدرات متان از مدل‌های UNIQUAC و NRTL در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱-اتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم کلراید ۵۹

شکل (۴-۷) مقایسه داده‌های آزمایشگاهی با مقادیر محاسبه شده‌ی دمای تشکیل هیدرات متان از مدل‌های UNIQUAC و NRTL در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱-اتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم اتیل سولفات ۶۰
شکل (۴-۸) مقایسه داده‌های آزمایشگاهی با مقادیر محاسبه شده‌ی دمای تشکیل هیدرات متان از مدل‌های UNIQUAC و NRTL در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱-اتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم بی سولفات ۶۰
شکل (۴-۹) مقایسه داده‌های آزمایشگاهی با مقادیر محاسبه شده‌ی دمای تشکیل هیدرات متان از مدل‌های UNIQUAC و NRTL و UNIFAC در حضور ۱۰ درصد وزنی ۱-(۲-هیدروکسیل)-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات ۶۱
شکل (۴-۱۰) تغییرات دمای محاسبه شده در اثر حضور مایعات یونی با غلظت ۱۰درصد وزنی و در فشارهای مختلف سیستم ۶۳
شکل (۴-۱۱) شرایط تشکیل هیدرات متان در حضور مایع یونی ۱-بوتیل ۳-متیل ایمیدازولیوم تترا فلوئوروبورات در غلظت‌های ۱۰، ۱۵ و ۲۰ درصد وزنی ۶۴
شکل (۴-۱۲) شرایط تشکیل هیدرات متان در حضور مایع یونی ۱-اتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم کلراید در غلظت‌های ۵، ۱۰، ۲۰ و ۳۰ درصد وزنی ۶۴
شکل (۴-۱۳) نمای کلی آزمایشگاه هیدرات گازی دانشگاه صنعتی شیراز ۶۵
شکل (۴-۱۴) نمایی از سلول تعادلی ۶۶
شکل (۴-۱۵) سلول تعادلی مورد استفاده در آزمایشگاه ۶۷
شکل (۴-۱۶) نمودار دما-فشار تشکیل هیدرات در یک فرایند حجم ثابت [۱] ۷۱
شکل (۴-۱۷) نمونه‌ای از نمودار دما-فشار برای یافتن نقطه‌ی تعادلی تشکیل هیدرات در سیستم مورد مطالعه ۷۳
شکل (۴-۱۸) تغییرات فشار بر حسب زمان در سیستم مورد مطالعه ۷۳
شکل (۴-۱۹) تغییرات دما بر حسب زمان در سیستم مورد مطالعه ۷۴
شکل (۴-۲۰) پیش بینی شرایط تشکیل هیدرات در حضور آب خالص توسط مدل ترمودینامیکی مورد استفاده ۷۵
شکل (۴-۲۱) پیش بینی شرایط تشکیل هیدرات در حضور ۱۰ درصد وزنی مایع یونی ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات ۷۶
شکل (۴-۲۲) پیش بینی شرایط تشکیل هیدرات در حضور ۱۰ درصد وزنی مایع یونی تترا اتیل آمونیوم کلراید ۷۶
شکل (۴-۲۳) نتایج آزمایشگاهی و پیش بینی شده برای مخلوط ۱۰ درصد وزنی دو مایع یونی ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات و تترا اتیل آمونیوم کلراید ۸۰

شکل (۴-۲۴) مقایسه‌ی اثر مخلوط دو مایع یونی بر روی دمای تشکیل هیدرات و مایع یونی $BMIM\text{-}BF_4$ به صورت تنها در غلظت ۱۰ درصد وزنی ۸۱
شکل (۴-۲۵) مقایسه‌ی اثر مخلوط دو مایع یونی بر روی دمای تشکیل هیدرات و مایع یونی TEACl به صورت تنها در غلظت ۱۰ درصد وزنی ۸۱
شکل (۴-۲۶) پیش بینی شرایط تشکیل هیدرات در حضور ۲۰ درصد وزنی مایع یونی ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات ۸۲
شکل (۴-۲۷) نتایج آزمایشگاهی و پیش بینی شده برای مخلوط ۲۰ درصد وزنی دو مایع یونی ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات و تترا اتیل آمونیوم کلراید ۸۴
شکل (۴-۲۸) مقایسه‌ی اثر مخلوط دو مایع یونی با غلظت ۲۰ درصد وزنی بر روی دمای تشکیل هیدرات و مایع یونی $BMIM\text{-}BF_4$ به صورت تنها ۸۵
شکل (۴-۲۹) نتایج آزمایشگاهی و پیش بینی شده برای مخلوط ۲۵ درصد وزنی دو مایع یونی ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات و تترا اتیل آمونیوم کلراید ۸۷
شکل (۴-۳۰) نقاط آزمایشگاهی و مدل سازی ترمودینامیکی با استفاده از مدل NRTL در حضور همزمان مایعات یونی ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات و تترا اتیل آمونیوم کلراید در غلظت‌های ۱۰، ۲۰ و ۲۵ درصد وزنی ۸۸

فهرست جدول‌ها

عنوان **صفحه**

جدول (۱-۱) مشخصات هندسی حفره‌ها [۱] ۶
جدول (۱-۲) نسبت قطر ملکولی به قطر حفره برای ملکول‌های گاز طبیعی و چند گاز دیگر [۱] ۱۱
جدول (۳-۱) پارامترهای مورد نیاز در محاسبات [۱۰۴, ۱۰۶] ۴۳
جدول (۳-۲) پارامترهای کیهارا [۱] ۴۴
جدول (۳-۳) ثوابت لانگمویر [۱۰۶] ۴۴
جدول (۳-۴) پارامترهای تجربی مورد نیاز برای محاسبه‌ی اختلاف پتانسیل شیمیایی آب ... ۴۶
جدول (۳-۵) پارامترهای مورد نیاز برای محاسبه‌ی ثابت هنری [۹۷] ۴۷
جدول (۴-۱) داده‌های آزمایشگاهی مایعات یونی بررسی شده در این پایان‌نامه ۵۵
جدول (۴-۲) مقادیر خطای میانگین مطلق دمای تشکیل هیدرات در حضور مایعات یونی به عنوان بازدارنده برای مدل‌های اکتیویته‌ی UNIQUAC، NRTL و UNIFAC ۶۲
جدول (۴-۳) مواد مورد استفاده در آزمایش ۶۹
جدول (۴-۴) پارامترهای مورد استفاده در مدل NRTL برای مایع یونی $BMIM\text{-}BF_4$ [۱۲۰] ۷۷
جدول (۴-۵) پارامترهای مورد استفاده در مدل NRTL برای مایع یونی TEACL [۱۳۴] .. ۷۷
جدول (۴-۶) مقادیر خطای میانگین مطلق دمای تشکیل هیدرات در حضور مایعات یونی $BMIM\text{-}BF_4$ و TEACl به عنوان بازدارنده با مدل اکتیویته‌ی NRTL ۷۷
جدول (۴-۷) تغییرات دمایی ایجاد شده توسط مایعات یونی مورد استفاده در غلظت ۱۰ درصد وزنی ۷۸
جدول (۴-۸) پارامترهای بهینه شده‌ی برهم کنش بین دو مایع یونی مورد استفاده، در مدل NRTL توسط داده‌های آزمایشگاهی ۷۹
جدول (۴-۹) خطای مدل مورد استفاده مربوط به دمای تشکیل هیدرات متان در حضور همزمان دو مایع یونی ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات و تترا اتیل آمونیوم کلراید با غلظت ۱۰ درصد وزنی ۷۹
جدول (۴-۱۰) تغییرات دمایی ایجاد شده توسط مایعات یونی مورد استفاده در غلظت ۱۰ درصد وزنی به صورت تنها و حضور همزمان دو مایع یونی ۸۲
جدول (۴-۱۱) تغییرات دمایی ایجاد شده توسط مایعات یونی مورد استفاده در غلظت ۲۰ درصد وزنی ۸۳

جدول (۴-۱۲) خطای مدل مورد استفاده مربوط به دمای تشکیل هیدرات متان در حضور همزمان دو مایع یونی ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات و تترا اتیل آمونیوم کلراید با غلظت ۲۰ درصد وزنی ۸۳
جدول (۴-۱۳) تغییرات دمایی ایجاد شده توسط مایعات یونی مورد استفاده در غلظت ۲۰ درصد وزنی به صورت تنها و حضور همزمان دو مایع یونی ۸۵
جدول (۴-۱۴) تغییرات دمایی ایجاد شده توسط هر یک از مایعات یونی مورد استفاده در غلظت ۲۵ درصد وزنی ۸۶
جدول (۴-۱۵) خطای مدل مورد استفاده مربوط به دمای تشکیل هیدرات متان در حضور همزمان دو مایع یونی ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلوئوروبورات و تترا اتیل آمونیوم کلراید با غلظت ۲۵ درصد وزنی ۸۶
جدول (۴-۱۶) تغییرات دمایی ایجاد شده توسط مایعات یونی مورد استفاده در غلظت ۲۵ درصد وزنی به صورت تنها و حضور همزمان دو مایع یونی ۸۷

فهرست نشانه‌های اختصاری

a_w	اکتیویته آب
a	شعاع هسته کروی
f_i	فوگاسیته‌ی جزء i مربوط به ملکول گاز مهمان
C_{mi}	ثابت لانگمویر جزء i در حفره نوع m
N_{cavity}	تعداد حفره‌ها در واحد شبکه هیدرات
nc	تعداد اجزای گاز شرکت کننده در ساختار هیدرات
k	ثابت بولتزمن، $۱/۳۸۰۶۶\times۱۰^{-۲۳}$
N_A	عدد آواگادرو
n	تعداد مول‌ها
P	فشار
P_c	فشار بحرانی
r_i	حجم نسبی برای جزء i
q_i	سطح نسبی برای جزء i
R_g	ثابت جهانی گازها، $۸/۳۱۴\ (j/mol.K)$
R	شعاع متوسط حفره‌ها
r	فاصله شعاعی از مرکز حفره تا مرکز ملکول مهمان
T	دما
T_0	نقطه انجماد آب (بر حسب درجه حرارت مطلق)
T_c	دمای بحرانی
$T_{\exp}$	دمای آزمایشگاهی
T_{cal}	دمای محاسبه شده
v_m	حجم مولی
$\omega(r)$	تابع پتانسیل متقارن کروی
x_w	کسر مولی آب
Z	عدد کئوردینانسیون (تعداد ملکول‌های آبی که یک حفره را تشکیل می‌دهند)

Z	فاکتور تراکم پذیری
N_{data}	تعداد نقاط آزمایشگاهی
g^E	انرژی افزوده‌ی گیبس
R_k	مجموع حجم گروه‌ها
Q_k	مجموع سطح گروه‌ها
X_m	کسر وزنی گروه m در مخلوط

فهرست حروف یونانی

μ_w^H	پتانسیل شیمیایی آب در فاز هیدرات
$\mu_w^{l/\alpha}$	پتانسیل شیمیایی آب در فاز یخ (یا آب مایع)
$\Delta\mu_w^{\beta-H}$	اختلاف پتانسیل شیمیایی آب بین شبکه خالی از هیدرات و فاز هیدرات
$\Delta\mu_w^{\beta-l/\alpha}$	اختلاف پتانسیل شیمیایی آب بین شبکه خالی از هیدرات و فاز یخ (یا آب مایع)
$\Delta\mu_w^0$	اختلاف پتانسیل شیمیایی آب بین شبکه خالی از هیدرات و فاز یخ (یا آب مایع) در دمای K ۲۷۳/۱۵
$\Delta v_w^{\beta-l/\alpha}$	اختلاف حجم مولی آب بین شبکه خالی از هیدرات و فاز یخ (یا آب مایع)
$\Delta h_w^{\beta-l/\alpha}$	اختلاف آنتالپی مولی آب بین شبکه خالی از هیدرات و فاز یخ (یا آب مایع)
Δh_w^0	اختلاف آنتالپی مولی آب بین شبکه خالی از هیدرات و فاز یخ (یا آب مایع) در دمای K ۲۷۳/۱۵
ΔC_{Pw}	اختلاف ظرفیت گرمایی آب بین شبکه خالی از هیدرات و فاز یخ (یا آب مایع)
π	مقدار ثابت برابر با ۳/۱۴
w (r)	تابع پتانسیل حفره‌ی متقارن کروی
ε	عمق چاه انرژی
ϕ_i	ضریب فوگاسیته جزء گازی i
γ_w	ضریب فعالیت آب
ρ	چگالی
v_m	تعداد حفره‌های نوع m به ازای هر ملکول آب در شبکه کریستالی هیدرات
σ	قطر برخورد Å
ω	ضریب بی مرکزی
ψ	پارامتر بر هم کنش در مدل *UNIQUAC* و *UNIFAC*
Φ_i^*	کسر حجمی جزء i
θ_i	کسر سطحی جزء i
τ_{ij}	پارامتر برهم کنش در مدل *UNIQUAC* و *NRTL*
v_k^i	تعداد گروه‌های نوع k
Γ_k	ضریب اکتیویته‌ی باقی‌مانده گروه k