



دانشکده مهندسی - گروه مهندسی شیمی

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد رشته مهندسی شیمی

(جداسازی و پدیده های انتقال)

مدلسازی ترمودینامیکی فرآیندهای تبلور به شیوه ضد حلال

دانشجو:

داریوش جعفری

اساتید راهنما:

دکتر سید مصطفی نوعی باغبان

دکتر سید حسین نوعی باغبان

شهریور ۱۳۸۹



تعهد نامه

اینجانب **داریوش جعفری** دوره کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد، نویسنده پایان نامه: مدل سازی ترمودینامیکی فرایند تبلور به شیوه ضد حلال، تحت راهنمایی آقایان **دکتر سید مصطفی نوعی باغبان و دکتر سید حسین نوعی باغبان** متعهد می‌شوم:

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از این نتایج محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه فردوسی مشهد می باشد و مقالات مستخرج با نام «دانشگاه فردوسی مشهد» و یا «Ferdowsi University of Mashhad» به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیر گذار بوده‌اند در مقالات مستخرج از رساله رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافت‌های آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده است، اصل رازداری و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

تاریخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه‌های رایانه‌ای، نرم افزارها و تجهیزات ساخته) متعلق به دانشگاه فردوسی مشهد می‌باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شده است.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.
- متن این صفحه نیز باید در ابتدای نسخه‌های تکثیر شده وجود داشته باشد.

تقدیر و تشکر

از خداوند متعال خالصانه سپاسگزاری می کنم که همواره یادش آرامش بخش این بنده می باشد، که بدون عنایت و توجه او انجام کارها میسر نمی باشد.

در ابتدا جا دارد مراتب تشکر و قدردانی خود را نسبت به استاد راهنمای ارجمند خود، جناب آقای دکتر سید مصطفی نوعی ابراز نمایم. ایشان نه تنها اطلاعات و تجربیات ارزشمند خود را در زمینه های مختلف در اختیار اینجانب قرار دادند، بلکه نکات بسیار سودمندی را در زمینه مدل سازی ترمودینامیکی، رفتار سینتیکی بلورها، بهینه سازی مدل و تسلط بر فرآیند تبلور به شیوه ضد حلال را در اختیار اینجانب قرار دادند. راهنمایی های ایشان در مواقع بروز مشکلات تنها راهگشا و گذرگاه جهت عبور از این مشکلات بود. ایشان در همه مراحل این پایان نامه چه در مراحل جستجوی مطالب، انتخاب مدل، انجام مدل سازی، تهیه پارامترهای مورد نیاز مدل، بهینه سازی مدل و در نهایت در هنگام نگارش متن اصلی نهایت همراهی و همکاری را داشتند. از ایشان به خاطر آموزش اینجانب در زمینه آشنایی با برخی از نرم افزارهای کاربردی مرتبط با این پایان نامه کمال تشکر را دارم. ایشان با ایجاد انگیزه و همچنین تشویق اینجانب پس اتمام هر مرحله امکان انجام بهتر مراحل بعدی پایان نامه را فراهم می آورند، که بدون آن عوامل ادامه کار میسر نبود. از مادر و پدر و دیگر اعضای خانواده خود سپاسگزارم که در طول دوران تحصیل کمال همکاری را جهت ایجاد آرامش خاطر برایم داشتند. بدون حمایت ها و تشویق های ایشان انجام این پایان نامه ممکن نبود.

مدل سازی ترمودینامیکی فرآیندهای تبلور به شیوه ضد حلال

چکیده

امروزه در صنایع گوناگون تبلور کاربردهای گوناگونی دارد. تبلور به عنوان مرسوم ترین و شناخته شده ترین روش تولید مواد شیمیایی جامد ارزشمند و دارای خلوص بالا و دارای خواص ویژه جهت کاربرد در موارد خاص، در نظر گرفته می شود. مهمترین مشخصه ذرات جامد اندازه، خواص شکلی و نحوه توزیع اندازه ذرات می باشد، که مورد بررسی قرار می گیرند تا ذره جهت کاربرد های گوناگون، دارای میزان متناسب با آن زمینه کاربردی باشند. اگرچه رشد دانش امروزی رویکردهای علمی و توجیه شده را چه از نظر تئوری و چه از دیدگاه آزمایشگاهی جهت کنترل، بررسی و بهینه سازی عملیات تبلور در دسترس قرار داده است، اما هنوز اکثریت مراکز تولید از همان روش های کنترل تجربی برای بررسی وضعیت عملیات واحد و کیفیت محصول تولیدی خود استفاده می کنند. گویی کاربرد مدلهای علمی را در این زمینه نپذیرفته اند. بر همین اساس و با توجه به نتایج حاصل از استفاده از روش های علمی بر پایه مدل های ریاضی منطبق بر متون علمی جهت بهینه سازی عملیات تولید، کاربرد آنها باید بیش از پیش مورد توجه قرار گیرد. در این پایان نامه در ابتدا به معرفی فرآیند تبلور بسته به نوع، ویژگی و کاربردهای آنها پرداخته می شود. پس از این وارد طبقه بندی جزئی تر شده و بصورت دقیق و تفصیلی به معرفی، بررسی، تعیین شرایط حاکم، تاثیر هر یک از شرایط و روش تعیین حالت بهینه برای روش خاص تبلور یعنی تبلور به شیوه ضد حلال پرداخته می شود. پس از دریافت کلی و ایجاد شناخت در چهارچوب موضوع مورد نظر به سراغ بررسی اهمیت انجام مدلسازی فرآیند در زمینه ترمودینامیک تبلور می رویم. برای این کار ابتدا به بررسی کارهای انجام شده توسط محققان می رویم تا با مطالعه و مقایسه این مدل ها نقاط ضعف و کاستی های آن معلوم شده و به عنوان اساسی برای کار خود استفاده کنیم. با استفاده از این فاکتورها به تعیین عوامل موثر در ایجاد حالت بهینه می پردازیم .

پس از بررسی های تئوری و دقیق و کسب اطلاعات در زمینه موارد زیر که عبارتند از:

- معرفی تبلور

- معرفی شیوه تبلور ضد حلال
- ضرورت مدلسازی ترمودینامیکی فرآیند از دیدگاه های گوناگون
- و کارهای انجام شده در زمینه مدلسازی ترمودینامیکی در ارتباط با شرایط حاکم بر مساله کار وارد فاز جدید می شود. در این قسمت به مطالعه تفصیلی و کاربردی ترمودینامیک مساله می پردازیم. با استفاده از روابط ترمودینامیکی مربوط به تعادل جامد-مایع در یک سیستم سه تایی به بررسی غلظت جامد در مخلوط و همچنین حالت فوق اشباعیت حاصل از افزودن ضد حلال می پردازیم، که از نتایج حاصل از این روابط غلظت را بدست می آوریم. می دانیم غلظت سنگ بنایی است برای بدست آوردن خواص مختلف ذره جامد ایجاد شده از تبلور. از این رو از نتایج بدست آمده از روابط ترمودینامیکی استفاده کرده برای بدست آوردن پارامترهایی چون فوق اشباعیت، نرخ هسته زایی، رشد بلور، اندازه ذره و توزیع اندازه ذرات استفاده می کنیم. در نهایت این نتایج مصور و عددی را با نمونه های موجود و قابل اطمینان در جهت ارزیابی مدل ایجاد شده استفاده می کنیم.

در این تحقیق پس از انجام مدل سازی و تعیین پارامترهای قابل تنظیم مدل یونیکواک گسترده با استفاده از مقایسه با داده های تجربی موجود، غلظت اشباع نمک کلرید سدیم در محلول در هر مرحله پس از افزودن الکل محاسبه می گردد. سپس با استفاده از مقادیر حاصل شده، مدل سازی سینتیکی سیستم تبلور ضد حلال آب-نمک-اتانول انجام گرفت. سه دبی متفاوت از الکل مورد استفاده قرار گرفت و مقادیر مربوط به غلظت حل شونده، فوق اشباعیت، هسته زایی، رشد بلور، توزیع اندازه ذرات و متوسط حجمی ذرات در دبی های مختلف محاسبه شده و با هم مقایسه می شوند.

کلمات کلیدی : مدل سازی، تبلور، توزیع اندازه ذرات، تبلور به شیوه ضد حلال، ترمودینامیک تبلور، فوق اشباعیت، ضد حلال، نرخ هسته زایی، نرخ رشد بلور.

فهرست مطالب

فصل اول: مقدمه ای بر تبلور	۱
۱-۱- مقدمه ای بر تبلور.....	۲
۱-۱-۱- ویژگی های تبلور	۶
۲-۱- سیستم های تبلور	۸
۳-۱- نیرو محرکه برای تبلور	۹
۴-۱- دسته بندی متبلور کننده ها.....	۱۱
۵-۱- طراحی یک متبلور کننده.....	۱۲
۱-۵-۱- انتخاب روش عملیاتی.....	۱۳
۶-۱- سینیتیک تبلور.....	۱۵
۱-۶-۱- هسته زایی.....	۱۶
۱-۶-۱-۱- هسته زایی اولیه	۱۶
۱-۶-۱-۲- هسته زایی ثانویه.....	۲۲
۱-۶-۱-۲-۱- فاکتورهای موثر به هسته زایی ثانویه	۲۶
۱-۶-۲-۱-۲- رشد	۲۸
۷-۱- زمان القا.....	۳۲

فصل دوم: تبلور به شیوه ضد حلال	۳۳

۳۴	۱-۲- مقدمه
۳۵	۲-۲- تبلور همراه با خنک کنندگی
۳۶	۳-۲- تبلور همراه با خنک کنندگی همراه با بذریاشی
۳۶	۴-۲- تبلور به شیوه ضد حلال
۳۷	۱-۴-۲- ویژگی های تبلور به شیوه ضدحلال
۳۸	۵-۲- مروری بر تحقیقات گذشته

۵۱	فصل سوم: ترمودینامیک سیستم های الکتروولیت
۵۲	۱-۳- مقدمه
۵۵	۲-۳- حلالیت
۶۰	۱-۲-۳- حلالیت ایده آل
۶۰	۳-۳- محلول های غیر ایده آل
۶۱	۴-۳- انحلال جامد در مخلوط حلال
۶۱	۵-۳- ترمودینامیک محلول های الکتروولیت
۶۳	۱-۵-۳- انحلال در محلول ایده آل
۶۵	۲-۵-۳- پتانسیل شیمیایی
۶۶	۱-۲-۵-۳- پتانسیل شیمیایی اضافی برای محلول های واقعی
۶۷	۳-۵-۳- ضریب فعالیت منطقی و غیر متقارن
۶۹	۴-۵-۳- ضریب فعالیت مولال
۷۰	۶-۳- مدل های ترمو دینامیکی برای محلول های الکتروولیت

۷۱ ۱-۶-۳- تئوری دبای-هوکل
۷۴ ۲-۶-۳- قانون توسعه یافته دبای هوکل
۷۶ ۷-۳- بررسی بر هم کنش ها کوتاه برد با استفاده از مدل های غلظت موضعی
۷۶ ۱-۷-۳- مدل یونیکواک گسترده
۷۸ ۱-۱-۷-۳- معادلات مدل
۸۱ ۲-۷-۳- محاسبات تعادلی
۸۱ ۱-۲-۷-۳- تعادل تجزیه
۸۳ ۲-۲-۷-۳- محاسبات SLE
۸۴ ۸-۳- پتانسیل شیمیایی استاندارد
۸۴ ۹-۳- واحدهای غلظت و حالات استاندارد

۸۶ فصل چهارم : سینیتیک تبلور ضد حلال
۸۷ ۱-۴- مقدمه
۸۸ ۲-۴- معادله موازنه جمعیت
۹۰ ۳-۴- روش حل مدل
۹۰ ۱-۳-۴- روش گسسته سازی
۹۴ ۲-۳-۴- روش ممان ها
۹۵ ۴-۴- سینیتیک تبلور و مدل های آن
۹۵ ۱-۴-۴- هسته زایی

۹۷ رشد بلور ۲-۴-۴
۹۹ موازنه جرم و انرژی ۵-۴

۱۰۰ فصل پنجم: مدل سازی ترمودینامیکی و سینیتیکی تبلور به شیوه ضدحلال
۱۰۱ ۱-۵-مقدمه
۱۰۱ ۲-۵- مدل سازی ترمودینامیکی
۱۰۳ ۱-۲-۵-مدل سازی محاسبات تعادلی
۱۰۴ ۲-۲-۵-محاسبه ضریب فعالیت حل شونده ها
۱۰۴ ۳-۵-داده های انحلال پذیری کلرید سدیم
۱۰۵ ۴-۵- مدل سازی سینیتیکی

۱۰۷ فصل ششم: نتایج مدل سازی تبلور به شیوه ضدحلال
۱۰۸ ۱-۶-نتایج مدل سازی ترمودینامیکی
۱۱۱ ۲-۶- نتایج مدل سازی سینیتیکی

۱۲۳ فصل هفتم: نتیجه گیری و ارائه پیشنهادات

۱۲۵ مراجع

۱۳۱ پیوست

فهرست اشکال

- شکل (۱-۱) : الگوریتم برای بررسی عملکرد یک متبلور کننده ۸
- شکل (۲-۱) : منحنی انحلال پذیری ۹
- شکل (۳-۱) : استراتژی طراحی فرآیند ۱۳
- شکل (۴-۱) : مکانیسم های هسته زایی ۱۶
- شکل (۵-۱) : نرخ هسته زایی اولیه ۲۱
- شکل (۱-۲) : منطقه فرا پایدار ۳۵
- شکل (۲-۲) : فرآیند تبلور به شیوه ضدحلال نیمه پیوسته در ظرف همزن دار ۳۹
- شکل (۱-۳) : برونمایی فشار بخار مایع در نمودار فشار- درجه حرارت برای ماده خالص (طرحواره) ۵۷
- شکل (۲-۳) : چرخه ترمودینامیکی برای محاسبه مایع خالص مادون سرد ۵۸
- شکل (۱-۴) : نمایش گسسته سازی متغیر پیوسته تابع دانسیته ذره ۹۱
- شکل (۱-۶) : مقایسه بین داده های تجربی و مقادیر حاصل از مدل سازی ۱۱۰
- شکل (۲-۶) : انحلال پذیری کلرید سدیم حاصل از مدل سازی ۱۱۱
- شکل (۳-۶) : منحنی تغییرات غلظت حل شونده با زمان برای دبی های مختلف ۱۱۳
- شکل (۴-۶) : منحنی تغییرات فوق اشباعیت با زمان در دبی های مختلف ۱۱۴
- شکل (۵-۶) : منحنی تغییرات هسته زایی با زمان در دبی های مختلف ۱۱۵
- شکل (۶-۶) : منحنی رشد در دبی های مختلف ۱۱۶
- شکل (۷-۶) : منحنی توزیع اندازه ذرات در دبی 0.000216562 ۱۱۷

- شکل (۶-۸) : منحنی توزیع اندازه ذرات در دبی ۰/۰۰۰۰۱۰۸۲۸۱ ۱۱۸
- شکل (۶-۹) : منحنی توزیع اندازه ذرات در دبی ۰/۰۰۰۰۰۵۴۱۴۰۵ ۱۱۹
- شکل (۶-۱۰) : منحنی متوسط حجمی ذرات در دبی های مختلف ۱۲۰

فهرست جداول

- جدول (۱-۱) : فازهای موجود در فرآیند تبلور ۷
- جدول (۱-۲) : طبقه بندی متبلور کننده ها ۱۲
- جدول (۱-۳) : طبقه بندی اصلی مکانیسم های هسته زایی ۱۷
- جدول (۱-۴) : انواع فرآیندهای هسته زایی ثانویه ۲۳
- جدول (۴-۱) : مدل های گوناگون برای سینیتیک پدیده هسته زایی برای فرآیند تبلور همراه با خنک کنندگی ۹۶
- جدول (۴-۲) : مدل های سینیتیک هسته زایی برای فرآیند تبلور ضدحلال ۹۷
- جدول (۴-۳) : مدل های سینیتیک رشد برای تبلور همراه با خنک کنندگی ۹۸
- جدول (۴-۴) : مدل های سینیتیک رشد برای تبلور ضدحلال ۹۸
- جدول (۶-۱) : پارامترهای تنظیم شده ۱۰۹
- جدول (پ-۱) : مقادیر غلظت حل شونده، متوسط حجمی ذرات، فوق اشباعیت، نرخ رشد و هسته زایی در زمان های مختلف با دبی ۰/۰۰۰۰۲۱۶۵۶۲ ۱۳۲
- جدول (پ-۲) : مقادیر غلظت حل شونده، متوسط حجمی ذرات، فوق اشباعیت، نرخ رشد و هسته زایی در زمان های مختلف با دبی ۰/۰۰۰۰۱۰۸۲۸۱ ۱۳۳

جدول (پ-۳) : مقادیر غلظت حل شونده، متوسط حجمی ذرات، فوق اشباعیت، نرخ رشد و هسته زایی در

زمان های مختلف با دبی ۰/۰۰۰۰۰۵۴۱۴۰۵ ۱۳۴

علائم و نشانه ها

- A - ثابت هسته زایی در معادله هسته زایی از نوع آرنیوس
- A - یک پارامتر دبای - هوکل
- A - انرژی هلمهولتز
- a - آنیون
- a - فعالیت حل شونده در محلول های اشباع
- A^E - تابع هلمهولتز مولی اضافی
- a_e - فعالیت حل شونده در محلول های فوق اشباع
- a_i - شعاع یون i
- a_i - فعالیت متقارن جزء i
- a_i^m - فعالیت بر حسب مولالیته جزء i
- a_i^* - فعالیت منطقی و نا متقارن جزء i
- aq - نشان دهنده حل شونده ها در محلول آبی
- a_w - فعالیت آب
- α_γ - ضریب شکل حجم بلوری
- B - نرخ هسته زایی
- b - توان هسته زایی
- B_0 - نرخ هسته زایی
- B_s - نرخ هسته زایی بر مبنای جرم رسوب حل شونده به ازای واحد جرم حلال به ازای زمان
- C - غلظت حل شونده
- c - کاتیون
- c_e - انحلال پذیری تعادلی حل شونده
- C_m - غلظت آغازین
- C_p - ظرفیت گرمایی
- C^* - غلظت اشباع
- ΔC - فوق اشباعیت
- $\Delta C'$ - مادون اشباعیت
- ΔC_p - اختلاف ظرفیت گرمایی جامد و مایع
- D - نرخ تجزیه ذرات
- D_a - نرخ حذف ذرات

- d - دانستیه حلال
- $\delta(L)$ - تابع دلتای دیراک
- e - بار الکتریکی
- E_g - ثوابت تجربی نرخ رشد
- ex - اضافی
- ε° - تراوش پذیری نسبی در خلا
- ε_r - ثابت دی الکتریک (تراوش پذیری نسبی) حلال
- F - الکترواستاتیکی که یک یون مثبت بر یک یون منفی اعمال می کند.
- f - فوگاسیته
- f° - فوگاسیته حالت استاندارد
- f^l - فوگاسیته مایع مادون سرد
- ϕ_i - پارامتر سطحی مربوط به جزء i
- G - نرخ رشد
- g - توان نرخ رشد
- g_1 - ثوابت تجربی نرخ رشد
- g_2 - ثوابت تجربی نرخ رشد
- G^E - انرژی گیبس مولی اضافی
- G_i - انرژی گیبس مولی برای جزء i
- G_i° - انرژی مولی گیبس حالت استاندارد
- G_i - انرژی گیبس مولی برای جزء i
- G_i^{id} - انرژی گیبس مولی ایده آل برای جزء i
- $G_i^{id,m}$ - انرژی گیبس برای محلول ایده آل بر مبنای مقیاس مولایت
- G_i^m - انرژی گیبس مولی حالت استاندارد بر مبنای مولایت
- Δg - انرژی گیبس مولی
- ΔG - انرژی کلی اضافی آزاد برای تشکیل حل شونده جامد از محلول همگن
- ΔG_a - سد انرژی برای نفوذ از توده محلول به سمت خوشه
- ΔG_c - انرژی اضافی آزاد بحرانی
- $\Delta_f G_{i(aq)}^m$ - انرژی گیبس تشکیل جز i
- ΔG_s - انرژی اضافی آزاد برای ایجاد سطح جدید
- ΔG_v - انرژی آزاد اضافی برای ایجاد یک توده از فاز جامد

- γ - ضریب فعالیت فاز مایع
- γ_{\pm} - ضریب فعالیت میانگین بر مبنای مولالیت
- γ_A^* - ضریب فعالیت منطقی و نامتقارن آنیون
- γ_A^m - ضریب فعالیت آنیون برحسب مولالیت
- γ_C^* - ضریب فعالیت منطقی و نامتقارن کاتیون
- $\gamma_i^{C\infty}$ - بخش ترکیبی ضریب فعالیت یونیکواک در رقت بی نهایت
- γ_C^m - ضریب فعالیت کاتیون برحسب مولالیت
- γ_i - ضریب فعالیت جزء i
- γ_i^* - ضریب فعالیت منطقی و نامتقارن جزء i
- γ_i^{∞} - ضریب فعالیت در رقت بی نهایت جزء i
- γ_i^C - بخش ترکیبی ضریب فعالیت یونیکواک
- γ_i^{*DH} - بخش دبای-هوکل ضریب فعالیت مربوط به جزء i
- γ_i^{*x} - ضریب فعالیت نامتقارن منطقی برای حل شونده i بر اساس مقیاس کسر مولی
- γ_i^m - ضریب فعالیت برحسب مولالیت
- γ_i^R - بخش باقیمانده ضریب فعالیت یونیکواک
- $\gamma_i^{R\infty}$ - بخش باقیمانده ضریب فعالیت یونیکواک در رقت بی نهایت
- γ_w - ضریب فعالیت آب
- γ_w^{DH} - بخش دبای-هوکل ضریب فعالیت مربوط به آب
- h - ثابت پلانک
- H_i - آنتالپی جزء i
- H_i^o - آنتالپی مولی جزء i
- H_i^{id} - آنتالپی جزء i در یک محلول ایده آل
- Δh - تغییرات آنتالپی
- Δh^f - آنتالپی ذوب
- I - قدرت یونی
- i - جزء i
- id - ایده آل
- J - هسته زایی
- K - ثابت تعادل
- k - ثابت بوتنرمان
- k_B - ثابت نرخ هسته زایی

- k_b - ثابت نرخ هسته زایی
- k_G - ثابت نرخ رشد
- k_g - ثوابت تجربی نرخ رشد
- k_n - ثابت نرخ هسته زایی
- K - پارامتر با بعد عکس طول
- L - اندازه مشخصه بلور
- ΔL_i - طول بازه i ام
- m - مولالیت
- m_2 - جرم کل حل شونده موجود در سیستم
- m_{\pm} - مولالیت میانگین
- m_A - مولالیت آنیون
- m_C - مولالیت کاتیون
- $Mean43$ - متوسط حجمی ذرات
- m_i - جرم جزء i ام
- M_k^j - ممان سوم یا غلظت یا چگالی ماگما
- M_w - جرم مولکولی آب
- μ_A - پتانسیل شیمیایی آنیون
- μ_A^m - پتانسیل شیمیایی آنیون بر حسب مولالیت
- μ_C - پتانسیل شیمیایی کاتیون
- μ_C^m - پتانسیل شیمیایی کاتیون بر حسب مولالیت
- μ_i - پتانسیل شیمیایی جزء i
- μ_i° - پتانسیل شیمیایی حالت استاندارد جزء i
- μ_i^{ex} - پتانسیل شیمیایی اضافی جزء i
- $\mu_i^{*,x}$ - پتانسیل شیمیایی استاندارد برای حل شونده i بر اساس قرارداد نامتقارن و مقیاس کسر مولی
- μ_i^{id} - پتانسیل شیمیایی ایده آل جزء i
- μ_i^m - پتانسیل شیمیایی مبتنی بر غلظت مولالیت
- μ_k^j - امین ممان توزیع اندازه ذرات موجود در ظرف متبلور کننده
- μ_s - پتانسیل شیمیایی نمک S
- μ_s^m - پتانسیل شیمیایی حالت استاندارد نمک S بر حسب مولالیت
- μ_w - پتانسیل شیمیایی آب

μ_w° - پتانسیل شیمیایی حالت استاندارد آب

$\Delta\mu$ - اختلاف پتانسیل شیمیایی

n - توان هسته زایی

$n(l, t)$ - معرف دانسیته بلورها بر مبنای زمان و مختصه مشخصه L که همان اندازه می باشد.

$N(l, t)$ - توزیع تعداد ذرات

N_1 - تعداد اجزاء مونومری

N_A - عدد آووگادرو

n_i - تعداد جزء i

\bar{N}_i - تابع دانسیته ذره متوسط برای i امین بازه

n_S - تعداد مول های آب S

n_w - تعداد مول های آب

P - فشار بخار یک مایع درون یک قطره با شعاع r

P° - از فشار بخار اشباع مایع در سطوح جانبی

P^s - فشار بخار

q_i - پارامتر حجمی مربوط به جزء i

q_w - پارامتر حجمی مربوط به آب

R - نرخ افزایش جرم رسوب

R - ثابت جهانی گاز

r - شعاع

r_c - شعاع بحرانی

r_i - پارامتر سطحی مربوط به جزء i

r_w - پارامتر سطحی مربوط به آب

ρ - دانسیته محلول

ρ_i - دانسیته بار اطراف یون i

ρ_c - دانسیته بلور

S - نمک

S - نسبت فوق اشباعیت

s_i - متوسط عددی اندازه i امین بازه

S_i - آنتروپی جزء i

S_i° - آنتروپی مولی استاندارد جز i

S_i^{id} - آنتروپی جزء i در یک محلول ایده آل

- Δs - تغییرات آنتروپی
- Δs^f - آنتروپی ذوب در نقطه سه گانه
- ψ - پتانسیل الکتریکی
- ψ_{iw} - پارامتر برهم کنش بین جزء i و آب
- ψ_{kl} - پارامتر برهم کنش بین k و l
- ψ_{wi} - پارامتر برهم کنش بین آب و جزء i
- σ - تنش سطحی
- T - دمای مطلق
- t - زمان
- T_t - دمای نقطه ی سه گانه
- θ_i - پارامتر حجمی مربوط به جزء i
- U - انرژی داخلی
- u_{kl} - پارامتر برهم کنش بین k و l
- u_{ll} - پارامتر برهم کنش بین l و l
- u_{kl}^θ - پارامتر برهم کنش بین k و l
- u_{kl}° - پارامتر برهم کنش بین l و l
- V - حجم مولی
- V_1 - حجم کلی سیستم و حجم فاز مایع
- v - حجم مولکولی
- v - مجموع ضرایب استوکیومتری اجزاء
- v_a - ضریب استوکیومتری آنیون
- v_c - ضریب استوکیومتری کاتیون
- w - آب
- x - کسر مولی حل شونده در حلال
- x_{\pm} - کسر مولی میانگین
- x_w - کسر مولی آب
- χ - یک تابع توزیع
- Z - عدد کئوردیناسیون
- z_a - بار الکتریکی آنیون
- z_c - بار الکتریکی کاتیون

پیشگفتار

بلورها برای همه شناخته شده هستند، از نمونه های رایج آن نمک و شکر است و از نمونه هایی که کمتر رایج ولی جذابتر هستند الماس ها و سنگ های قیمتی را می توان نام برد. بلور های بی شماری در صنایع شیمیایی و دارویی ساخته شده اند. دامنه کاربرد آنها خیلی وسیع و شامل مواد پیچیده ای است. ظاهراً ارزش جهانی محصول رو به افزایش است. تبلور یک فرآیند جداسازی مهم است که سیالات را به وسیله ایجاد جامدات ناخالص بصورت بلور تصفیه می کند. تبلور یک فرآیند تشکیل ذره است که به وسیله آن انتقال مولکول ها از محلول یا بخار به فاز جامد با ساختار و شبکه منظم انجام می شود.

بلور یک ساختار سه بعدی اتمی، یونی یا مولکولی است که شامل واحدهای سلولی است، که بصورت منظم بر آن ساختار قرار گرفته اند و مبتلور شدن نیز عمل تشکیل بلورها می باشد. براساس گفته شیمیدان ها از تبلور برای خالص سازی یک محصول مطلوب یا تولید ماده اولیه استفاده می شود، چرا که اگر در یک واکنش از یک ماده خالص استفاده شود شانس موفقیت بالاتر می باشد.

فاکتورهای مولکولی و کریستالوگرافی مهمی هستند که روی شکل (رفتار) خلوص و ساختار بلورها اثر می گذارند. ساختار درونی بلورها، و بررسی ویژگی مشخصه بیرونی ذره از قبیل شکل و اندازه نقش مهمی در کیفیت محصول دارد و می تواند بر فرآیندهایی نظیر جداسازی جامد - مایع اثر بگذارند.

با توجه به گستره وسیع کاربرد تکنولوژی تبلور در زمینه تولید، خالص سازی و جداسازی مواد گوناگون، انجام بهینه فرآیند در مراحل مختلف، باید به عنوان یک اصل ضروری همواره مد نظر باشد. این امر با استفاده از روش های سنتی و تجربی حاصل نمی گردد. همچنانکه امروزه در اکثر مراکز تولیدی از روش های تجربی جهت کنترل عملیات واحد خود بهره گیری می کنند. رشد دانش امروزی در زمینه های گوناگون مرتبط با تکنولوژی های جدید، راه را برای بررسی تئوری، جهت بهینه سازی فرآیند های صنعتی هموار نموده است، که تبلور نیز از این قاعده مستثنی نیست.