

บทที่ 4

บทสรุป

จากการศึกษาสามารถสรุปผลได้ตามจุดประสงค์ ดังนี้

1. หาค่าพารามิเตอร์ (Parameters) ของระบบ สำหรับใช้ในแบบจำลอง UNIQUAC

จากการศึกษาสามารถหาค่าพารามิเตอร์ของแต่ละระบบ สำหรับใช้ในแบบจำลอง UNIQUAC ได้ด้วยการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นข้อมูลสมดุลระหว่างวัฏภาคจากผลการทดลอง และสามารถหาค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองเพื่อหาคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอกติวิตี คำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาค และอุณหภูมิของระบบได้ และยังสามารถกำหนดค่าพารามิเตอร์โครงสร้างขององค์ประกอบที่เป็นสารอเล็กโทรไลต์ได้ด้วยการใช้รัศมีไอออน

ค่าพารามิเตอร์ A_{ij} (cal/mol) ของแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบที่ไม่เป็นสารอเล็กโทรไลต์ และความดันของระบบมีค่าคงที่ ดังนี้

เมทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 101.3 kPa

UNIQUAC parameters	101.3 kPa
$A_{12} = u_{12} - u_{22}$	-356.829
$A_{21} = u_{21} - u_{11}$	565.297

เอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 101.32 kPa

UNIQUAC parameters	101.32 kPa
$A_{12} = u_{12} - u_{22}$	-21.690
$A_{21} = u_{21} - u_{11}$	330.511

1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 30 60 และ 100 kPa

UNIQUAC parameters	30 kPa	60 kPa	100 kPa
$A_{12} = u_{12} - u_{22}$	123.900	79.666	16.567
$A_{21} = u_{21} - u_{11}$	358.036	415.952	491.786

2-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 30 60 และ 100 kPa

UNIQUAC parameters	30 kPa	60 kPa	100 kPa
$A_{12} = u_{12} - u_{22}$	296.778	221.795	357.278
$A_{21} = u_{21} - u_{11}$	119.549	178.861	68.402

2-โพรพานอล(1) + 1-โพรพานอล(2) ที่ความดัน 100 kPa

UNIQUAC parameters	100 kPa
$A_{12} = u_{12} - u_{22}$	-3.799
$A_{21} = u_{21} - u_{11}$	-0.377

ค่าพารามิเตอร์ A_{ij} (cal/mol) ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบสารอิเล็กโทรไลต์ และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยใช้ค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ที่แสดงโดย Sander, Fredenslund และ Rasmusse(1986) ดังนี้

น้ำ(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

Component	Water(1)	Calcium ion(2)	Nitrate ion(3)
Water(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = 493.080$	$A_{13} = -1816.756$
Calcium ion(2)	$A_{21} = -674.305$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = 168.765$
Nitrate ion(3)	$A_{31} = -1956.648$	$A_{32} = 1196.258$	$A_{33} = 0.000$

1-โพรพานอล(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

Component	1-Propanol(1)	Calcium ion(2)	Nitrate ion(3)
1-Propanol(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = 604.835$	$A_{13} = 1415.902$
Calcium ion(2)	$A_{21} = -743.030$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = 616.782$
Nitrate ion(3)	$A_{31} = -1400.929$	$A_{32} = -852.184$	$A_{33} = 0.000$

1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa

Component	1-Propanol(1)	Water(2)	Calcium ion(3)	Nitrate ion(4)
1-Propanol(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = -126.100$	$A_{13} = 3083.649$	$A_{14} = 1718.426$
Water(2)	$A_{21} = 642.922$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = 1709.054$	$A_{24} = 1709.248$
Calcium ion(3)	$A_{31} = 4455.888$	$A_{32} = 2312.270$	$A_{33} = 0.000$	$A_{34} = 4589.671$
Nitrate ion(4)	$A_{41} = -1472.173$	$A_{42} = -2250.374$	$A_{43} = 26.833$	$A_{44} = 0.000$

น้ำ(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

Component	Water(1)	Lithium ion(2)	Nitrate ion(3)
Water(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = 1081.351$	$A_{13} = -3831.815$
Lithium ion(2)	$A_{21} = 1047.627$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = 821.338$
Nitrate ion(3)	$A_{31} = -1927.603$	$A_{32} = 2759.274$	$A_{33} = 0.000$

1-โพรพานอล(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

Component	1-Propanol(1)	Lithium ion(2)	Nitrate ion(3)
1-Propanol(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = 303.584$	$A_{13} = 1022.502$
Lithium ion(2)	$A_{21} = -1356.847$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = -666.749$
Nitrate ion(3)	$A_{31} = -1303.348$	$A_{32} = -1332.167$	$A_{33} = 0.000$

1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa

Component	1-Propanol(1)	Water(2)	Lithium ion(3)	Nitrate ion(4)
1-Propanol(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = -221.201$	$A_{13} = -5397.146$	$A_{14} = -6436.992$
Water(2)	$A_{21} = 826.314$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = -6226.829$	$A_{24} = -6281.409$
Lithium ion(3)	$A_{31} = 3802.595$	$A_{32} = 1925.396$	$A_{33} = 0.000$	$A_{34} = 4254.541$
Nitrate ion(4)	$A_{41} = -1140.819$	$A_{42} = -2032.751$	$A_{43} = 350.974$	$A_{44} = 0.000$

ค่าพารามิเตอร์ A_{ij} (cal/mol) ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบสารอิเล็กโทรไลต์ และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยใช้ค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ที่กำหนดจากรัศมีไอออน ดังนี้

น้ำ(1) + โพแทสเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

Component	Water(1)	Potassium ion(2)	Nitrate ion(3)
Water(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = 1441.575$	$A_{13} = 1601.142$
Potassium ion(2)	$A_{21} = -979.968$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = 751.877$
Nitrate ion(3)	$A_{31} = -1556.103$	$A_{32} = 16.174$	$A_{33} = 0.000$

เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โพแทสเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa

Component	Ethanol(1)	Water(2)	Potassium ion(3)	Nitrate ion(4)
Ethanol(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = -81.9000$	$A_{13} = -1620.489$	$A_{14} = -2072.798$
Water(2)	$A_{21} = 417.037$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = -1996.019$	$A_{24} = -2405.725$
Potassium ion(3)	$A_{31} = -821.615$	$A_{32} = -1696.082$	$A_{33} = 0.000$	$A_{34} = 115.239$
Nitrate ion(4)	$A_{41} = -847.769$	$A_{42} = -1679.632$	$A_{43} = 541.395$	$A_{44} = 0.000$

น้ำ(1) + สตรอนเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

Component	Water(1)	Strontium ion(2)	Nitrate ion(3)
Water(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = 1288.173$	$A_{13} = 1998.728$
Strontium ion(2)	$A_{21} = -670.093$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = 1281.452$
Nitrate ion(3)	$A_{31} = -1964.435$	$A_{32} = -723.444$	$A_{33} = 0.000$

เอทานอล(1) + น้ำ(2) + สตรอนเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa

Component	Ethanol(1)	Water(2)	Strontium ion(3)	Nitrate ion(4)
Ethanol(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = -239.421$	$A_{13} = 2763.069$	$A_{14} = -2552.132$
Water(2)	$A_{21} = 663.731$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = -1758.641$	$A_{24} = -2369.418$
Strontium ion(3)	$A_{31} = 3602.591$	$A_{32} = -1822.270$	$A_{33} = 0.000$	$A_{34} = -173.286$
Nitrate ion(4)	$A_{41} = -1012.219$	$A_{42} = -1732.656$	$A_{43} = 527.105$	$A_{44} = 0.000$

น้ำ(1) + โซเดียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

Component	Water(1)	Sodium ion(2)	Nitrate ion(3)
Water(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = 1629.114$	$A_{13} = 1777.932$
Sodium ion(2)	$A_{21} = 428.549$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = 2362.865$
Nitrate ion(3)	$A_{31} = -1723.090$	$A_{32} = 62.408$	$A_{33} = 0.000$

เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โซเดียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa

Component	Ethanol(1)	Water(2)	Sodium ion(3)	Nitrate ion(4)
Ethanol(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = -170.666$	$A_{13} = 3687.615$	$A_{14} = -4337.066$
Water(2)	$A_{21} = 535.852$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = -4291.993$	$A_{24} = -3915.076$
Sodium ion(3)	$A_{31} = 6513.772$	$A_{32} = -2172.354$	$A_{33} = 0.000$	$A_{34} = -325.174$
Nitrate ion(4)	$A_{41} = 723.551$	$A_{42} = 439.023$	$A_{43} = 1909.286$	$A_{44} = 0.000$

น้ำ(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

Component	Water(1)	Calcium ion(2)	Nitrate ion(3)
Water(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = 1856.714$	$A_{13} = -3212.163$
Calcium ion(2)	$A_{21} = 1233.141$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = -1878.091$
Nitrate ion(3)	$A_{31} = -2065.206$	$A_{32} = -107.560$	$A_{33} = 0.000$

1-โพรพานอล(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

Component	1-Propanol(1)	Calcium ion(2)	Nitrate ion(3)
1-Propanol(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = 898.778$	$A_{13} = 1491.218$
Calcium ion(2)	$A_{21} = -812.991$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = 650.165$
Nitrate ion(3)	$A_{31} = -1473.341$	$A_{32} = -602.625$	$A_{33} = 0.000$

1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa

Component	1-Propanol(1)	Water(2)	Calcium ion(3)	Nitrate ion(4)
1-Propanol(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = -113.918$	$A_{13} = -1239.338$	$A_{14} = 22425.631$
Water(2)	$A_{21} = 609.850$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = 4922.407$	$A_{24} = 2221.750$
Calcium ion(3)	$A_{31} = -1776.410$	$A_{32} = 3661.567$	$A_{33} = 0.000$	$A_{34} = 53.196$
Nitrate ion(4)	$A_{41} = -1380.571$	$A_{42} = -2308.220$	$A_{43} = -3215.935$	$A_{44} = 0.000$

น้ำ(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

Component	Water(1)	Lithium ion(2)	Nitrate ion(3)
Water(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = 1534.559$	$A_{13} = -271.282$
Lithium ion(2)	$A_{21} = 71.469$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = -130.527$
Nitrate ion(3)	$A_{31} = -1991.213$	$A_{32} = -387.368$	$A_{33} = 0.000$

1-โพรพานอล(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

Component	1-Propanol(1)	Lithium ion(2)	Nitrate ion(3)
1-Propanol(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = 581.541$	$A_{13} = 1633.526$
Lithium ion(2)	$A_{21} = -1058.637$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = 473.593$
Nitrate ion(3)	$A_{31} = -1616.537$	$A_{32} = -1136.291$	$A_{33} = 0.000$

1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa

Component	1-Propanol(1)	Water(2)	Lithium ion(3)	Nitrate ion(4)
1-Propanol(1)	$A_{11} = 0.000$	$A_{12} = -237.953$	$A_{13} = -2505.932$	$A_{14} = -5714.676$
Water(2)	$A_{21} = 881.358$	$A_{22} = 0.000$	$A_{23} = -1935.655$	$A_{24} = -6863.870$
Lithium ion(3)	$A_{31} = -2375.095$	$A_{32} = -2924.128$	$A_{33} = 0.000$	$A_{34} = -1188.588$
Nitrate ion(4)	$A_{41} = 1263.671$	$A_{42} = -1004.835$	$A_{43} = 5658.921$	$A_{44} = 0.000$

2. แสดงความสัมพันธ์และทำนายผลของอิเล็กโทรไลต์ที่มีต่อสมมูลของระบบ

จากการศึกษาสามารถแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของเกลือที่มีต่อสมมูลระหว่างวัฏภาคได้ และสามารถใช้อัลกอริทึมคอมพิวเตอร์ในการทำนายผลของอิเล็กโทรไลต์ที่มีต่อสมมูลของระบบได้แก่ผลของค่าพารามิเตอร์โครงสร้างซึ่งเกิดจากรัศมีไอออน ผลของจำนวนประจุของไอออนที่เกิดจากเกลือต่างชนิดกัน ผลของความเข้มข้นของอิเล็กโทรไลต์ในระบบได้ด้วยการเปลี่ยนค่าของตัวแปรในโปรแกรมคอมพิวเตอร์

3. เขียนโปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่ออธิบายระบบ ด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

จากการศึกษาสามารถใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ภาษาฟอร์แทรน สำหรับหาค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองและสำหรับอธิบายระบบได้ด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

ข้อเสนอแนะในการศึกษาเพิ่มเติม ได้แก่

1. การศึกษาการเปรียบเทียบสมมูลระหว่างวัฏภาคจากผลการคำนวณกับระบบจริง ด้วยการเตรียมระบบที่ประกอบด้วย แอลกอฮอล์ + น้ำ + เกลือ เพื่อศึกษาสมมูลระหว่างวัฏภาคและเปรียบเทียบกับการคำนวณด้วยแบบจำลอง ซึ่งจะพบว่ามีความผิดพลาดเกิดขึ้นได้จาก วิธีการวัดความบริสุทธิ์ของสารเคมี ความแม่นยำของอุปกรณ์ และความผิดพลาดจากผู้ทำการทดลอง
2. การออกแบบหอกลิ้นโดยใช้ข้อมูลสมมูลระหว่างวัฏภาคของระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ซึ่งจะพบว่า การออกแบบหอกลิ้นจะต้องใช้ตัวแปรหลายตัวและข้อมูลจำนวนมากประกอบกันและโดยปกติแล้วข้อมูลที่ใส่จะมีความผิดพลาดแฝงอยู่ด้วยเสมอ ซึ่งผู้ที่ใส่ข้อมูลนั้นเพื่อการออกแบบหอกลิ้นจะต้องคำนึงถึงและมีการแก้ไขชดเชยความผิดพลาดเหล่านั้น ทำให้ในท้ายที่สุดความผิดพลาดเนื่องจากการคำนวณสมมูลระหว่างวัฏภาคได้รับการแก้ไข