บทที่ 3

ผล และวิจารณ์

ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบ ที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่

1. ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสององค์ประกอบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ ใช้ข้อมูลผลการทดลองจาก Constant-Pressure Liquid-Vapor Equilibrium Data for Selected Binary System Perry's chemical engineers' handbook, 7th ed. (Perry, Green and Maloney, 1997)

ข้อมูลสมดุลระหว่างวัฏภาคจากผลการทดลอง

ในการศึกษาใช้ข้อมูลจากผลการทดลองสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ของระบบสององค์ประกอบที่ประกอบด้วย เมทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 101.3 kPa โดยกำหนดให้ เมทานอล และ น้ำ เป็นองค์ประกอบที่ 1 และ 2 ตามลำดับ ค่าพารามิเตอร์โครงสร้าง (r_i, q_i) ขององค์ประกอบและค่าคงที่ของสมการ Antoine สำหรับคำนวณความดันไออิ่มตัว แสดงในตาราง 3-1 ข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ ความดันรวม $(P_{\text{Total},\exp})$ ของระบบแสดงในตาราง 3-2 แสดงสมดุลระหว่างวัฏภาคในภาพที่ 3-1 และสมดุลระหว่างวัฏภาคกับอุณหภูมิแสดงในภาพที่ 3-2

ผลการหาค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC

ด้วยการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อกำหนดค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างองค์ประกอบในระบบ กล่าวคือเป็นพารามิเตอร์ (A_{ij}) ระหว่าง เมทานอล(1) กับ น้ำ(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 101.3 kPa แสดงในตาราง 3-3

ผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

ด้วยการใช้แบบจำลอง UNIQUAC ร่วมกับค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นเพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) และค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ($y_{i,\mathrm{cal}}$) ของระบบเมทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 101.3 kPa โดยคำนวณตามค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ($x_{i,\mathrm{exp}}$) ที่ได้จากผลการทดลองแสดงในตาราง 3-2 และในภาพที่ 3-1 ซึ่งจะเห็นว่าค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของเมทานอล(1) และน้ำ(2) ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC มีค่าใกล้เคียงกับค่าที่ได้จากผลการทดลองและเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าต่ำ และเมื่อคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอโดยกำหนดให้ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวมีค่าตั้งแต่ 0.00 ถึง 1.00 แสดงในภาพที่ 3-2 จะเห็นว่าทั้งค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ วัฏภาคของเหลวและอุณหภูมิของระบบที่ได้จากการคำนวณมีค่าใกล้เคียงกับผลการทดลอง

ตาราง 3-1 ค่าคงที่ของสมการ Antoine และพารามิเตอร์โครงสร้างของเมทานอลและน้ำ

		ค่าคงที่ Antoine[1]			พารามิเตอร์โครงสร้าง[2]	
องค์ประกอบ	ช่วงอุณหภูมิ(K)	*A*	*B*	*C*	*r*	*q*
Methanol	257 – 364	16.5725	-3626.55	-34.29	1.4311	1.4322
Water	284 – 441	16.2286	-3816.44	-46.13	0.920	1.400

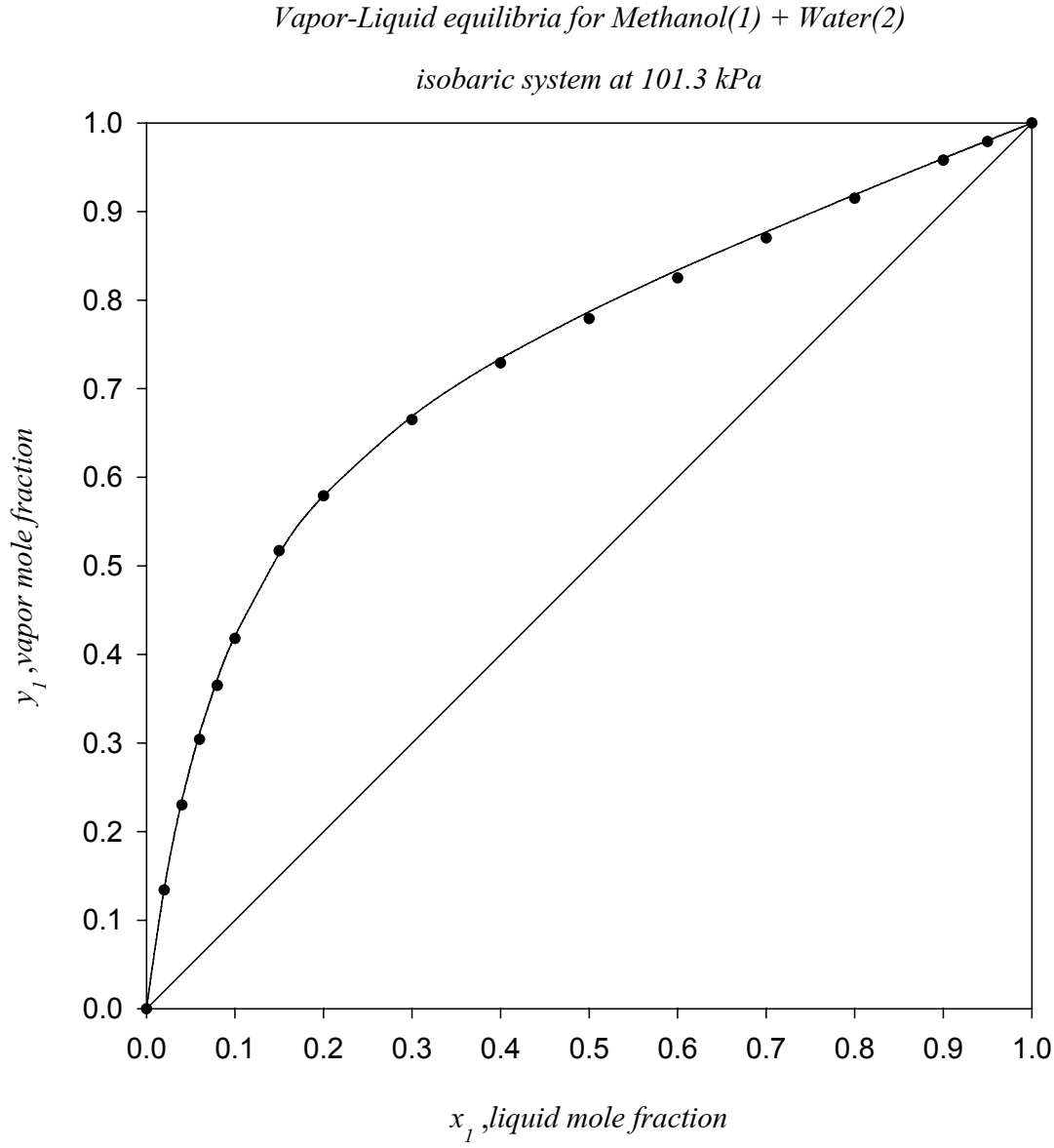
ที่มา : [1](Albert, *et al*, 2001) [2](Sander, Fredenslund and Rasmussen, 1986)

ตาราง 3-2 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เมทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 101.3 kPa

$x_{1,\exp}$	$y_{1,\exp}$	$y_{1,\text{cal}}$	$T_{\exp}(K)$	$\gamma_{1,\text{cal}}$	$\gamma_{2,\text{cal}}$	%Error y_1	%Error y_2
0.000	0.000	0.000	373.15	-	-	-	-
0.020	0.134	0.135	369.55	2.1548	1.0005	0.734	-0.114
0.040	0.230	0.235	366.65	2.0513	1.0020	2.027	-0.605
0.060	0.304	0.311	364.35	1.9582	1.0045	2.368	-1.034
0.080	0.365	0.372	362.45	1.8742	1.0077	1.894	-1.089
0.100	0.418	0.421	360.85	1.7984	1.0118	0.811	-0.583
0.150	0.517	0.514	357.55	1.6383	1.0252	-0.661	0.707
0.200	0.579	0.579	354.85	1.5118	1.0426	-0.021	0.029
0.300	0.665	0.669	351.15	1.3294	1.0875	0.621	-1.233
0.400	0.729	0.734	348.45	1.2089	1.1437	0.663	-1.783
0.500	0.779	0.787	346.25	1.1279	1.2094	0.995	-3.507
0.600	0.825	0.834	344.35	1.0734	1.2838	1.044	-4.921
0.700	0.870	0.877	342.45	1.0375	1.3660	0.839	-5.616
0.800	0.915	0.919	340.65	1.0153	1.4557	0.450	-4.848
0.900	0.958	0.960	339.15	1.0035	1.5528	0.190	-4.325
0.950	0.979	0.980	338.15	1.0009	1.6038	0.100	-4.684
1.000	1.000	1.000	337.65	-	-	-	-

ตาราง 3-3 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย เมทานอล(1) + น้ำ(2) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 101.3 kPa

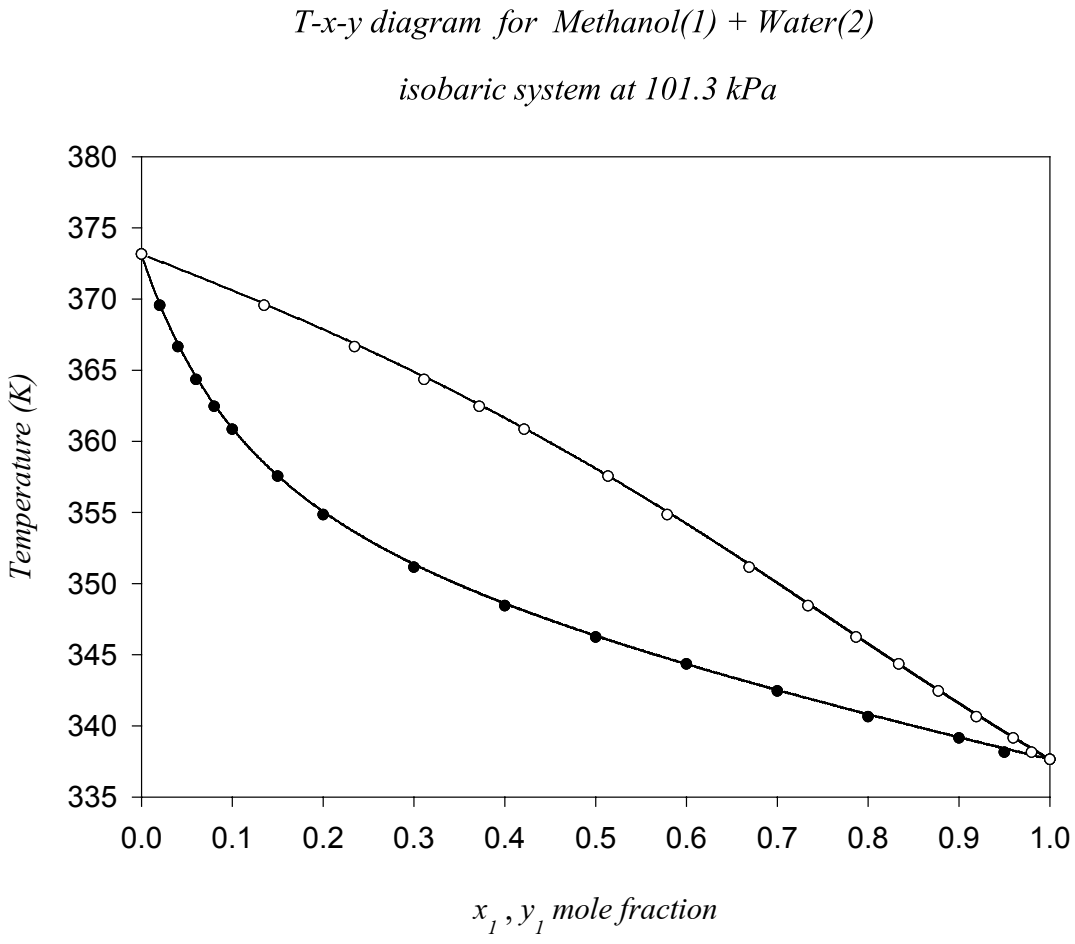
UNIQUAC parameters	101.3 kPa
$A_{12} = u_{12}\text{-}u_{22}$	-356.829
$A_{21} = u_{21}\text{-}u_{11}$	565.297



ภาพที่ 3-1 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1) ของระบบที่ประกอบด้วย เมทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 101.3 kPa

เมื่อ ● คือ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC



ภาพที่ 3-2 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1) และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เมทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 101.3 kPa

เมื่อ ○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของไอ ข้อมูลจากการทดลอง

● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

2. ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสององค์ประกอบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ ใช้ข้อมูลผลการทดลองจากวารสารตีพิมพ์เรื่อง VLE for water + ethanol + 1-octanol mixtures. Experimental measurements and correlations (Arce, Martinez-Ageitos and Soto, 1996)

ข้อมูลสมดุลระหว่างวัฏภาคจากผลการทดลอง

ในการศึกษาใช้ข้อมูลจากผลการทดลองสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ของระบบสององค์ประกอบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 101.32 kPa ค่าพารามิเตอร์โครงสร้าง (r_i, q_i) ขององค์ประกอบและค่าคงที่สมการ Antoine แสดงในตาราง 3-4 ข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ ความดันรวม $(P_{\text{Total,exp}})$ ของระบบ และค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี $(\gamma_{i,\exp})$ แสดงในตาราง 3-5 และสมดุลระหว่างวัฏภาคในภาพที่ 3-3 และสมดุลระหว่างวัฏภาคกับอุณหภูมิแสดงในภาพที่ 3-4

ผลการหาค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC

ด้วยการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อกำหนดค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC ระหว่าง เอทานอล(1) กับ น้ำ(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 101.32 kPa แสดงในตาราง 3-6

ผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

ด้วยการใช้แบบจำลอง UNIQUAC ร่วมกับค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นเพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี $(\gamma_{i,\text{cal}})$ และค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\text{cal}})$ ของระบบเอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 101.32 kPa โดยคำนวณตามค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ ที่ได้จากผลการทดลองแสดงในตาราง 3-5 และในภาพที่ 3-3 ซึ่งจะเห็นว่าค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของเอทานอล(1) และน้ำ(2) ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC มีค่าใกล้เคียงกับค่าที่ได้จากผลการทดลองและเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าต่ำ และเมื่อคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอโดยกำหนดให้ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวมีค่าตั้งแต่ 0.00 ถึง 1.00 แสดงในภาพที่ 3-4 จะเห็นว่าทั้งค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ วัฏภาคของเหลวและอุณหภูมิของระบบที่ได้จากการคำนวณมีค่าใกล้เคียงกับผลการทดลอง

ตาราง 3-4 ค่าคงที่ของสมการ Antoine และพารามิเตอร์โครงสร้างของเอทานอลและน้ำ

		ค่าคงที่ Antoine[1]			พารามิเตอร์โครงสร้าง[2]	
องค์ประกอบ	ช่วงอุณหภูมิ(K)	A	B	C	r	q
Ethanol	293 – 366	8.11220	1592.864	226.184	2.1055	1.9720
Water	273 – 373	8.07131	1730.630	233.426	0.9200	1.4000

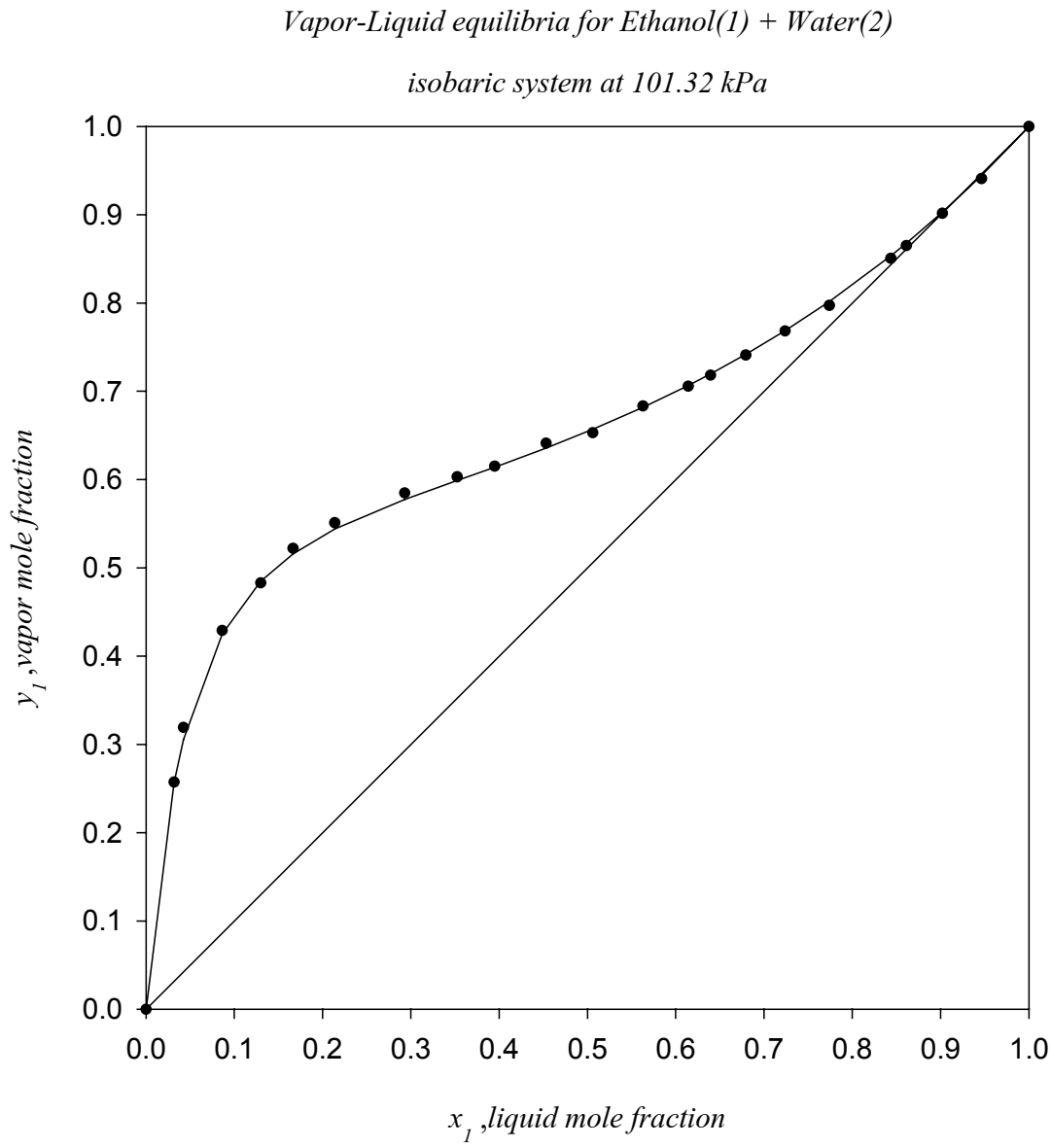
ที่มา : [1](Perry, Green and Maloney, 1997) [2](Sander, Fredenslund and Rasmussen, 1986)

ตาราง 3-5 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 101.32 kPa

$x_{1,exp}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,exp}$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,exp}$	$\gamma_{2,cal}$	%Error y_1	%Error y_2
0.0000	0.0000	0.0000	373.15	-	-	1.0000	-	-	-
0.0317	0.2573	0.2565	366.29	4.7509	4.6986	0.9781	1.0032	-0.320	0.111
0.0424	0.3192	0.3055	364.32	4.7170	4.4283	0.9754	1.0057	-4.299	2.016
0.0863	0.4289	0.4251	360.33	3.5852	3.5263	0.9974	1.0220	-0.892	0.670
0.1300	0.4830	0.4849	358.10	2.9050	2.8982	1.0335	1.0470	0.393	-0.367
0.1666	0.5221	0.5159	357.16	2.5357	2.5115	1.0346	1.0737	-1.190	1.300
0.2137	0.5511	0.5439	356.07	2.1719	2.1428	1.0750	1.1148	-1.311	1.610
0.2930	0.5847	0.5775	354.97	1.7506	1.7296	1.1553	1.1989	-1.233	1.736
0.3525	0.6031	0.5989	354.50	1.5273	1.5259	1.2284	1.2728	-0.698	1.061
0.3950	0.6150	0.6141	353.99	1.4167	1.4167	1.3014	1.3308	-0.152	0.243
0.4531	0.6412	0.6356	353.40	1.3164	1.3019	1.3739	1.4166	-0.868	1.551
0.5060	0.6530	0.6568	353.01	1.2182	1.2230	1.4942	1.5009	0.578	-1.087
0.5629	0.6833	0.6817	352.64	1.1619	1.1584	1.5646	1.5976	-0.232	0.501
0.6142	0.7056	0.7066	352.33	1.1126	1.1138	1.6687	1.6901	0.134	-0.322
0.6395	0.7182	0.7197	352.15	1.0951	1.0957	1.7220	1.7375	0.212	-0.540
0.6794	0.7410	0.7418	351.95	1.0715	1.0715	1.7943	1.8145	0.113	-0.323
0.7240	0.7683	0.7687	351.77	1.0497	1.0500	1.8786	1.9037	0.048	-0.160
0.7740	0.7973	0.8017	351.57	1.0267	1.0315	2.0238	2.0076	0.549	-2.161
0.8436	0.8505	0.8534	351.48	1.0082	1.0139	2.1658	2.1584	0.341	-1.942
0.8612	0.8649	0.8677	351.44	1.0058	1.0107	2.2092	2.1978	0.319	-2.045
0.9020	0.9016	0.9027	351.42	1.0018	1.0051	2.2816	2.2906	0.125	-1.146
0.9464	0.9409	0.9444	351.48	0.9941	1.0015	2.5004	2.3940	0.367	-5.843
1.0000	1.0000	1.0000	351.56	1.0000	-	-	-	-	-

ตาราง 3-6 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1)+ น้ำ(2) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 101.32 kPa

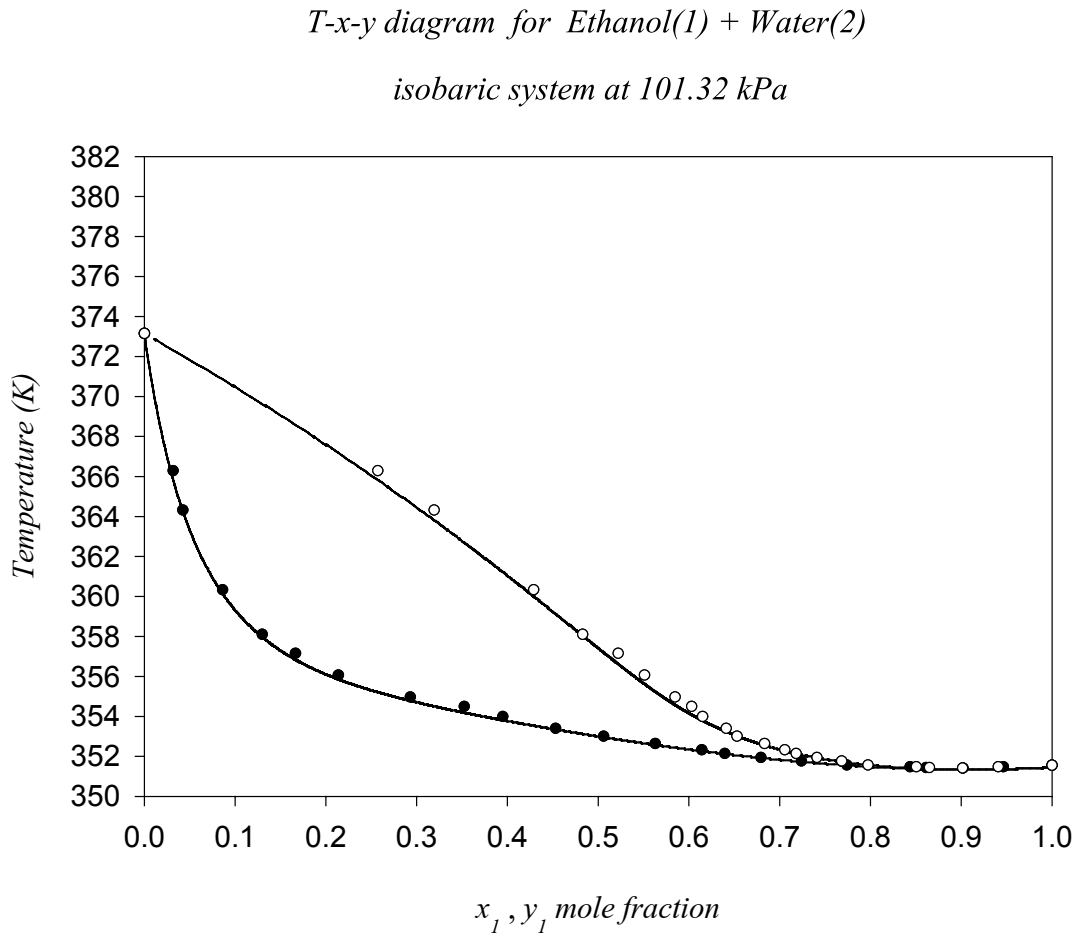
UNIQUAC parameters	101.32 kPa
$A_{12} = u_{12}-u_{22}$	-21.690
$A_{21} = u_{21}-u_{11}$	330.511



ภาพที่ 3-3 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1) ของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 101.32 kPa

เมื่อ ● คือ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC



ภาพที่ 3-4 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1) และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 101.32 kPa

เมื่อ ○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของไอ ข้อมูลจากการทดลอง

● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

3. ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสององค์ประกอบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ ใช้ข้อมูลผลการทดลองจากวารสารตีพิมพ์เรื่อง Isobaric Vapor-Liquid Equilibria of the Water + 1-Propanol System at 30, 60, and 100 kPa (Gabaldon *et al.*, 1996a)

ข้อมูลสมดุลระหว่างวัฏภาคจากผลการทดลอง

ในการศึกษาใช้ข้อมูลจากผลการทดลองสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ของระบบสององค์ประกอบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ ได้แก่ที่ 30 60 และ 100 kPa โดยกำหนดให้ 1-โพรพานอล และ น้ำ เป็นองค์ประกอบที่ 1 และ 2 ตามลำดับ ค่าพารามิเตอร์โครงสร้าง (r_i, q_i) ขององค์ประกอบและค่าคงที่ของสมการ Antoine สำหรับคำนวณความดันไออิ่มตัว แสดงในตาราง 3-7 ข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ ความดันรวม $(P_{\text{Total,exp}})$ ของระบบและค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี $(\gamma_{i,\exp})$ แสดงในตาราง 3-8 ตาราง 3-9 และตาราง 3-10 แสดงสมดุลระหว่างวัฏภาคในภาพที่ 3-5 และสมดุลระหว่างวัฏภาคกับอุณหภูมิแสดงในภาพที่ 3-6

ผลการหาค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC

ด้วยการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อกำหนดค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างองค์ประกอบในระบบ กล่าวคือเป็นพารามิเตอร์ (A_{ij}) ระหว่าง 1-โพรพานอล(1) กับ น้ำ(2) ที่ความดัน 30 60 และ 100 kPa แสดงในตาราง 3-11

ผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

ด้วยการใช้แบบจำลอง UNIQUAC ร่วมกับค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นเพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี $(\gamma_{i,\text{cal}})$ และค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\text{cal}})$ ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 3 ระดับ ได้แก่ 30 60 และ 100 kPa แสดงในตาราง 3-8 ตาราง 3-9 และตาราง 3-10 ตามลำดับ และในภาพที่ 3-5 ซึ่งจะเห็นว่าค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ 1-โพรพานอล(1) และ น้ำ(2) ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC มีค่าใกล้เคียงกับค่าที่ได้จากผลการทดลองและเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าต่ำและเมื่อคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอโดยกำหนดให้ค่า

เศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวมีค่าตั้งแต่ 0.00 ถึง 1.00 แสดงในภาพที่ 3-6 จะเห็นว่าทั้งค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ วัฏภาคของเหลวและอุณหภูมิของระบบที่ได้จากการคำนวณมีค่าใกล้เคียงกับผลการทดลอง

ตาราง 3-7 ค่าคงที่ของสมการ Antoine และพารามิเตอร์โครงสร้างของ 1-โพรพานอลและน้ำ

		ค่าคงที่ Antoine[1]			พารามิเตอร์โครงสร้าง[2]	
องค์ประกอบ	ช่วงอุณหภูมิ(K)	*A*	*B*	*C*	*r*	*q*
1-Propanol	303 – 370	16.0353	3415.56	-70.733	2.7799	2.5120
Water	274 – 373	16.5700	3984.92	-39.724	0.920	1.400

ที่มา : [1](Gabaldon *et al.*, 1996a) [2](Sander, Fredenslund and Rasmussen, 1986)

ตาราง 3-8 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 30 kPa

$x_{1,exp}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,exp}$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,exp}$	$\gamma_{2,cal}$	%Error y_1	%Error y_2
1.000	1.000	1.000	341.08	-	-	-	-	-	-
0.992	0.973	0.975	340.49	1.008	1.000	3.658	3.293	0.250	-9.008
0.934	0.816	0.827	337.88	1.016	1.002	3.393	3.115	1.292	-5.729
0.863	0.685	0.696	335.92	1.015	1.011	3.057	2.891	1.640	-3.566
0.790	0.595	0.601	334.33	1.041	1.030	2.757	2.663	0.980	-1.439
0.696	0.519	0.515	332.82	1.110	1.072	2.425	2.377	-0.700	0.756
0.623	0.486	0.469	332.26	1.194	1.127	2.145	2.163	-3.420	3.233
0.566	0.455	0.443	332.06	1.243	1.188	1.994	2.003	-2.704	2.257
0.490	0.432	0.417	331.93	1.371	1.307	1.780	1.800	-3.412	2.595
0.422	0.417	0.403	331.93	1.537	1.470	1.613	1.632	-3.351	2.397
0.341	0.403	0.395	331.84	1.848	1.785	1.453	1.449	-1.901	1.283
0.275	0.394	0.396	331.94	2.229	2.217	1.335	1.317	0.501	-0.326
0.221	0.388	0.400	331.99	2.725	2.793	1.252	1.220	3.076	-1.950
0.177	0.385	0.404	332.08	3.360	3.531	1.186	1.151	4.880	-3.055
0.143	0.381	0.405	332.17	4.098	4.386	1.141	1.105	6.282	-3.867
0.111	0.378	0.401	332.27	5.211	5.570	1.100	1.067	6.105	-3.710
0.086	0.371	0.390	332.51	6.523	6.898	1.070	1.043	5.218	-3.078
0.064	0.362	0.369	332.83	8.418	8.520	1.044	1.025	1.993	-1.131
0.046	0.339	0.336	333.43	10.646	10.302	1.033	1.013	-0.924	0.474
0.036	0.309	0.306	334.27	11.896	11.514	1.028	1.008	-0.941	0.421
0.023	0.261	0.246	335.90	14.523	13.390	1.007	1.004	-5.665	2.001
0.017	0.204	0.206	337.06	14.519	14.379	1.023	1.002	0.844	-0.216
0.011	0.149	0.153	338.46	15.326	15.457	1.020	1.001	2.391	-0.419
0.006	0.109	0.095	339.50	19.565	16.455	1.015	1.000	-13.278	1.624
0.003	0.065	0.051	340.52	22.240	17.064	1.015	1.000	-20.988	1.459
0.000	0.000	0.000	342.33	-	-	-	-	-	-

ตาราง 3-9 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 60 kPa

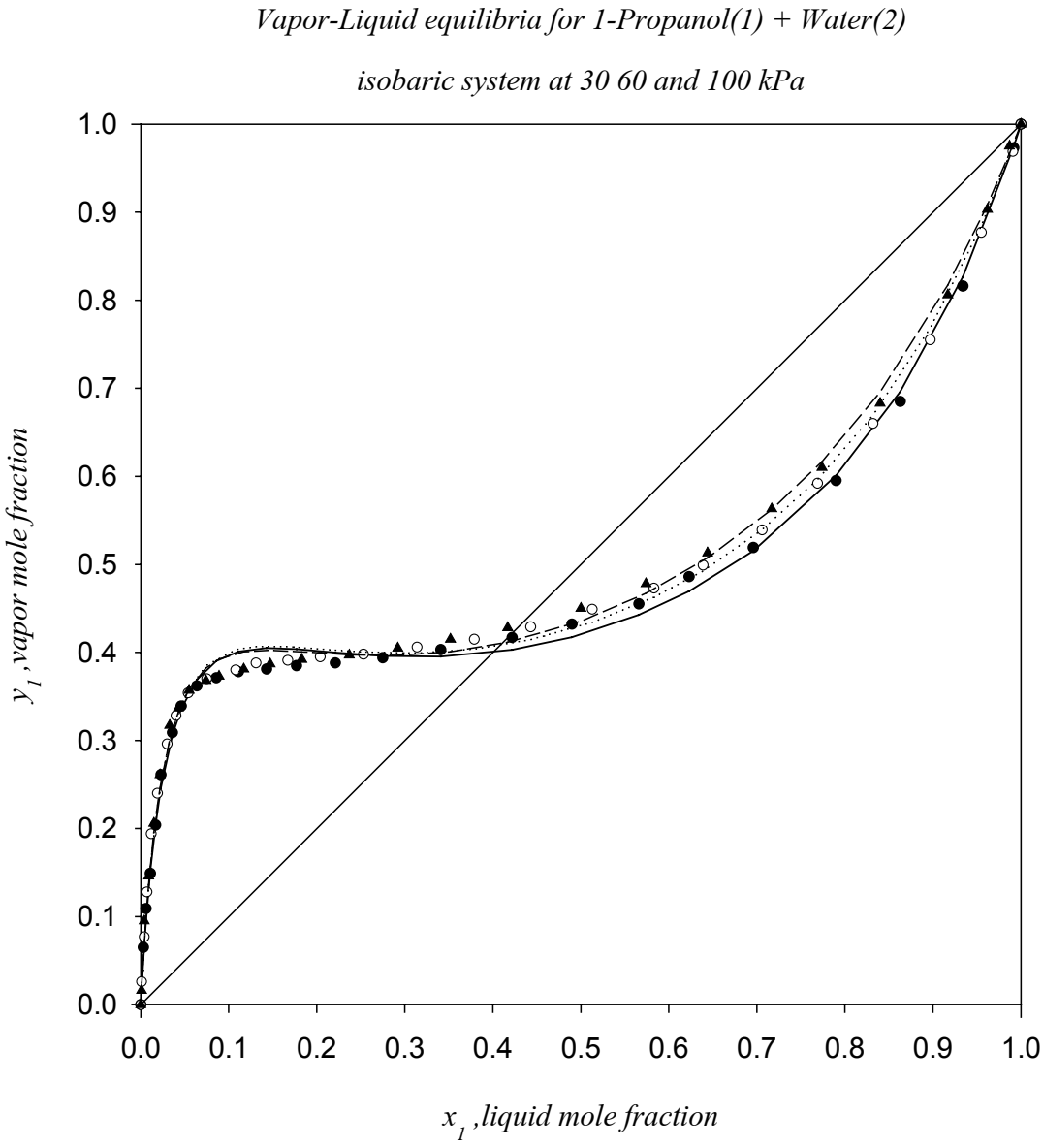
$x_{1,exp}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,exp}$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,exp}$	$\gamma_{2,cal}$	%Error y_1	%Error y_2
1.000	1.000	1.000	356.78	-	-	-	-	-	-
0.991	0.969	0.975	356.35	0.995	1.000	3.845	3.125	0.596	-18.634
0.955	0.877	0.885	354.53	1.009	1.001	3.318	3.030	0.857	-6.108
0.897	0.755	0.768	352.44	1.011	1.006	3.107	2.872	1.759	-5.420
0.832	0.660	0.669	350.70	1.028	1.016	2.839	2.692	1.419	-2.755
0.769	0.592	0.596	349.51	1.051	1.034	2.603	2.518	0.707	-1.025
0.706	0.539	0.539	348.63	1.083	1.061	2.397	2.345	0.072	-0.084
0.639	0.499	0.492	347.63	1.158	1.104	2.212	2.165	-1.315	1.310
0.583	0.473	0.463	347.74	1.197	1.155	2.005	2.017	-2.199	1.973
0.513	0.449	0.434	347.50	1.306	1.247	1.814	1.840	-3.323	2.708
0.443	0.429	0.415	347.52	1.443	1.385	1.642	1.672	-3.360	2.524
0.379	0.415	0.404	347.53	1.631	1.577	1.508	1.527	-2.707	1.920
0.314	0.406	0.399	347.55	1.925	1.880	1.385	1.392	-1.674	1.144
0.253	0.398	0.400	347.73	2.323	2.341	1.279	1.277	0.579	-0.383
0.204	0.395	0.404	347.80	2.850	2.935	1.203	1.194	2.232	-1.457
0.167	0.391	0.407	347.91	3.430	3.618	1.152	1.139	3.978	-2.554
0.131	0.388	0.407	348.14	4.294	4.610	1.099	1.091	4.806	-3.047
0.108	0.380	0.403	348.28	5.070	5.515	1.078	1.065	6.042	-3.703
0.075	0.370	0.385	348.51	7.036	7.420	1.046	1.034	4.137	-2.430
0.054	0.354	0.358	348.99	9.154	9.209	1.028	1.018	1.012	-0.555
0.040	0.328	0.324	349.92	10.992	10.759	1.014	1.011	-1.187	0.579
0.030	0.296	0.287	350.93	12.655	12.094	1.009	1.006	-2.984	1.255
0.019	0.240	0.225	352.78	14.956	13.813	0.998	1.003	-6.232	1.968
0.012	0.194	0.166	354.43	17.840	15.061	0.983	1.001	-14.235	3.426
0.007	0.128	0.110	356.06	18.838	16.019	0.992	1.000	-13.980	2.052
0.004	0.077	0.068	357.30	18.830	16.615	0.996	1.000	-11.284	0.941
0.001	0.026	0.019	358.02	24.684	17.286	1.019	1.000	-28.127	0.751
0.000	0.000	0.000	359.14	-	-	-	-	-	-

ตาราง 3-10 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 100 kPa

$x_{1,exp}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,exp}$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,exp}$	$\gamma_{2,cal}$	%Error y_1	%Error y_2
1.000	1.000	1.000	369.75	-	-	-	-	-	-
0.987	0.975	0.967	369.40	0.994	1.000	2.174	2.924	-0.834	32.532
0.962	0.903	0.908	367.84	1.003	1.001	3.056	2.870	0.575	-5.354
0.917	0.806	0.817	366.07	1.006	1.003	2.989	2.768	1.404	-5.834
0.840	0.683	0.696	363.80	1.018	1.013	2.760	2.588	1.866	-4.020
0.774	0.610	0.617	362.46	1.041	1.029	2.530	2.431	1.100	-1.720
0.717	0.563	0.562	361.63	1.072	1.050	2.337	2.294	-0.116	0.149
0.644	0.513	0.507	360.82	1.124	1.090	2.136	2.120	-1.112	1.171
0.574	0.478	0.467	360.47	1.192	1.149	1.939	1.954	-2.295	2.101
0.500	0.450	0.435	360.33	1.295	1.244	1.750	1.784	-3.245	2.655
0.417	0.428	0.412	360.28	1.480	1.415	1.564	1.601	-3.855	2.885
0.352	0.415	0.401	360.27	1.701	1.631	1.440	1.465	-3.452	2.449
0.292	0.405	0.397	360.32	1.997	1.944	1.338	1.349	-2.083	1.418
0.237	0.397	0.397	360.44	2.400	2.400	1.252	1.251	0.073	-0.048
0.183	0.392	0.401	360.62	3.047	3.142	1.171	1.164	2.223	-1.434
0.147	0.387	0.402	360.78	3.720	3.933	1.124	1.114	3.982	-2.514
0.117	0.381	0.401	360.93	4.574	4.909	1.090	1.077	5.170	-3.182
0.089	0.373	0.392	361.12	5.841	6.248	1.062	1.048	5.144	-3.060
0.074	0.368	0.382	361.43	6.844	7.219	1.041	1.034	3.803	-2.214
0.055	0.357	0.358	361.77	8.812	8.827	1.024	1.020	0.388	-0.215
0.043	0.337	0.333	362.41	10.369	10.124	1.018	1.013	-1.257	0.639
0.033	0.317	0.301	363.30	12.265	11.416	1.003	1.008	-5.154	2.392
0.022	0.261	0.247	365.06	14.126	13.091	1.004	1.003	-5.509	1.946
0.015	0.206	0.196	366.87	15.232	14.304	1.000	1.002	-4.987	1.294
0.009	0.146	0.136	368.71	16.756	15.456	0.999	1.001	-6.822	1.166
0.004	0.095	0.070	370.23	23.145	16.518	0.996	1.000	-26.889	2.823
0.001	0.016	0.019	371.95	24.348	17.142	1.015	1.000	18.703	-0.304
0.000	0.000	0.000	372.87	-	-	-	-	-	-

ตาราง 3-11 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล (1) + น้ำ(2) A_{ij} (cal/mol) 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



ภาพที่ 3-5 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1) ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ 30 60 และ 100 kPa

เมื่อ ● คือ ข้อมูลจากการทดลอง ความดัน 30 kPa

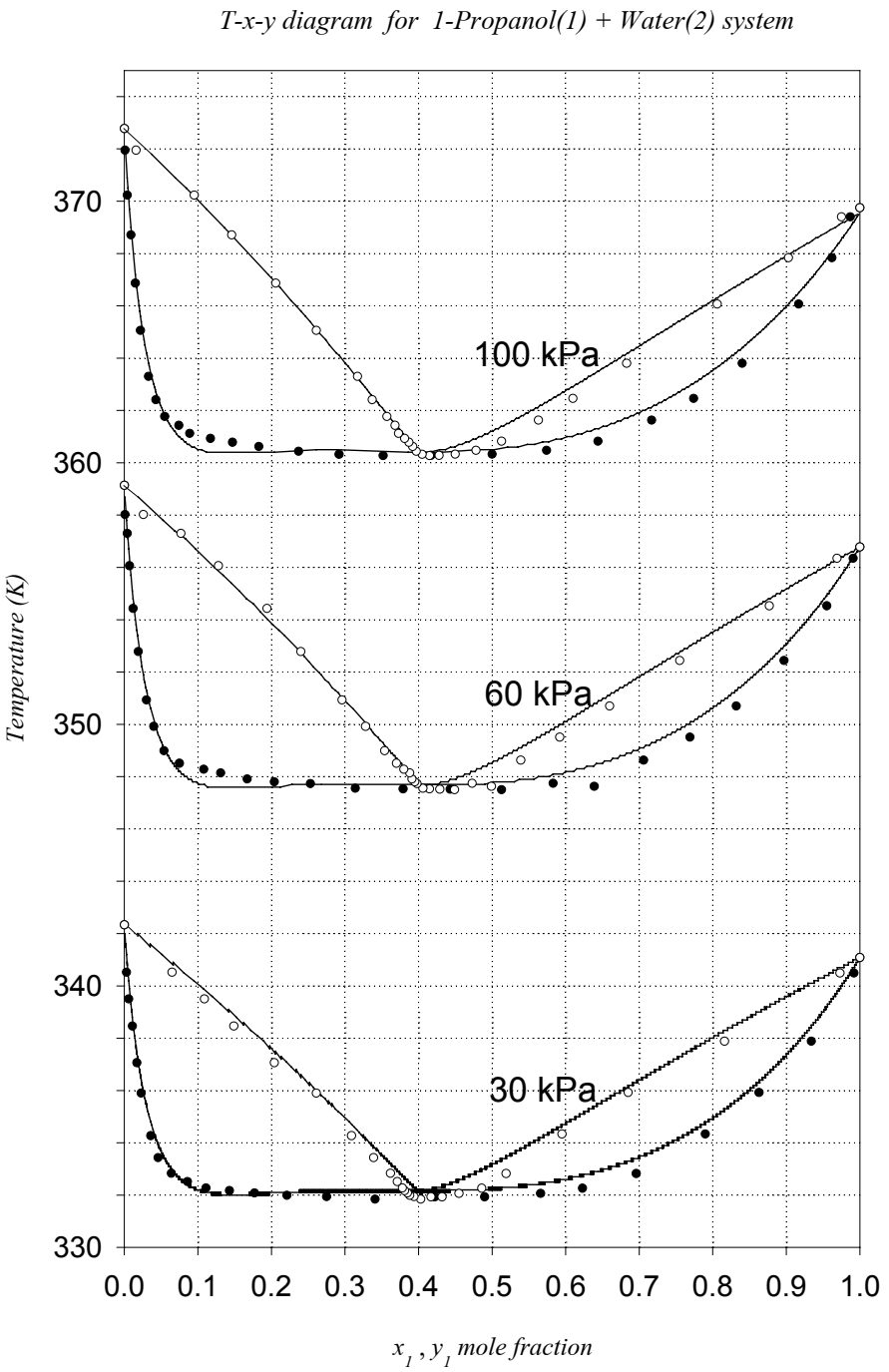
○ คือ ข้อมูลจากการทดลอง ความดัน 60 kPa

▲ คือ ข้อมูลจากการทดลอง ความดัน 100 kPa

——— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ความดัน 30 kPa

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ความดัน 60 kPa

– – – – คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ความดัน 100 kPa



ภาพที่ 3-6 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1) และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 30 60 และ 100 kPa

เมื่อ ○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของไอ ข้อมูลจากการทดลอง

● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

4. ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสององค์ประกอบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ ใช้ข้อมูลผลการทดลองจากวารสารตีพิมพ์เรื่อง Isobaric Vapor-Liquid Equilibria of the Water + 2-Propanol System at 30, 60, and 100 kPa (Marzal, Monton and Rodrigo, 1996)

ข้อมูลสมดุลระหว่างวัฏภาคจากผลการทดลอง

ในการศึกษาใช้ข้อมูลจากผลการทดลองสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ของระบบสององค์ประกอบที่ประกอบด้วย 2-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ ได้แก่ที่ 30 60 และ 100 kPa โดยกำหนดให้ 2-โพรพานอล และ น้ำเป็นองค์ประกอบที่ 1 และ 2 ตามลำดับ ค่าพารามิเตอร์โครงสร้าง (r_i, q_i) ขององค์ประกอบและค่าคงที่ของสมการ Antoine สำหรับคำนวณความดันไออิ่มตัว แสดงในตาราง 3-12 ข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ ความดันรวมของระบบ $(P_{\text{Total,exp}})$ และค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี $(\gamma_{i,\exp})$ แสดงในตาราง 3-13 ตาราง 3-14 และตาราง 3-15 แสดงสมดุลระหว่างวัฏภาคในภาพที่ 3-7 และสมดุลระหว่างวัฏภาคกับอุณหภูมิแสดงในภาพที่ 3-8

ผลการหาค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC

ด้วยการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อกำหนดค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างองค์ประกอบในระบบกล่าวคือเป็นพารามิเตอร์ (A_{ij}) ระหว่าง 2-โพรพานอล(1) กับ น้ำ(2) ที่ความดัน 30 60 และ 100 kPa แสดงในตาราง 3-16

ผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

ด้วยการใช้แบบจำลอง UNIQUAC ร่วมกับค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นเพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี $(\gamma_{i,\text{cal}})$ และค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\text{cal}})$ ของระบบ 2-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 3 ระดับ ได้แก่ 30 60 และ 100 kPa แสดงในตาราง 3-13 ตาราง 3-14 และตาราง 3-15 ตามลำดับ และในภาพที่ 3-7 ซึ่งจะเห็นว่าค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ 2-โพรพานอล(1) และ น้ำ(2) ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC มีค่าใกล้เคียงกับค่าที่ได้จากผลการทดลองและเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าต่ำ และเมื่อคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอโดยกำหนดให้

ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวมีค่าตั้งแต่ 0.00 ถึง 1.00 แสดงในภาพที่ 3-8 จะเห็นว่าทั้งค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ วัฏภาคของเหลวและอุณหภูมิของระบบที่ได้จากการคำนวณมีค่าใกล้เคียงกับผลการทดลอง

ตาราง 3-12 ค่าคงที่ของสมการ Antoine และพารามิเตอร์โครงสร้างของ 2-โพรพานอลและน้ำ

		ค่าคงที่ Antoine[1]			พารามิเตอร์โครงสร้าง[2]	
องค์ประกอบ	ช่วงอุณหภูมิ(K)	*A*	*B*	*C*	*r*	*q*
2-Propanol	300 – 355	16.4089	3439.60	-63.417	2.7791	2.5080
Water	274 – 373	16.5700	3984.92	-39.724	0.920	1.400

ที่มา : [1](Marzal, Monton and Rodrigo, 1996) [2](Sander, Fredenslund and Rasmussen, 1986)

ตาราง 3-13 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 2-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 30 kPa

$x_{1,exp}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,exp}$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,exp}$	$\gamma_{2,cal}$	%Error y_1	%Error y_2
1.000	1.000	1.000	327.85	-	-	-	-	-	-
0.948	0.916	0.916	326.73	1.021	1.002	3.276	3.245	-0.007	0.075
0.909	0.865	0.863	326.34	1.026	1.006	3.069	3.079	-0.198	1.266
0.829	0.784	0.777	325.63	1.055	1.023	2.733	2.760	-0.952	3.456
0.771	0.735	0.728	325.40	1.076	1.044	2.524	2.544	-1.005	2.788
0.712	0.696	0.687	325.37	1.106	1.076	2.303	2.339	-1.267	2.901
0.631	0.655	0.644	325.33	1.176	1.139	2.046	2.082	-1.713	3.252
0.559	0.624	0.615	325.52	1.254	1.222	1.846	1.876	-1.465	2.431
0.490	0.602	0.594	325.67	1.370	1.338	1.679	1.698	-1.314	1.987
0.415	0.583	0.578	325.89	1.549	1.524	1.517	1.526	-0.848	1.186
0.340	0.568	0.568	326.20	1.814	1.810	1.373	1.374	-0.079	0.105
0.280	0.557	0.562	326.42	2.132	2.162	1.278	1.269	0.864	-1.087
0.217	0.541	0.556	326.73	2.633	2.739	1.199	1.174	2.762	-3.255
0.139	0.526	0.539	327.13	3.917	4.039	1.105	1.080	2.495	-2.769
0.113	0.516	0.526	327.58	4.620	4.737	1.071	1.055	1.884	-2.008
0.089	0.499	0.505	328.03	5.533	5.579	1.056	1.036	1.216	-1.211
0.069	0.472	0.477	328.80	6.493	6.477	1.051	1.022	1.014	-0.906
0.054	0.454	0.444	329.84	7.576	7.300	1.018	1.014	-2.213	1.840
0.043	0.412	0.409	331.00	8.201	8.003	1.025	1.009	-0.631	0.442
0.034	0.371	0.371	332.61	8.659	8.640	1.008	1.006	-0.068	0.040
0.022	0.303	0.297	334.70	10.116	9.622	1.001	1.003	-2.123	0.923
0.014	0.227	0.223	336.69	10.937	10.354	1.007	1.001	-1.685	0.495
0.008	0.141	0.147	338.93	9.982	10.933	1.006	1.000	4.465	-0.733
0.005	0.087	0.100	340.26	10.066	11.234	1.004	1.000	14.591	-1.390
0.000	0.000	0.000	342.33	-	-	-	-	-	-

ตาราง 3-14 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 2-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 60 kPa

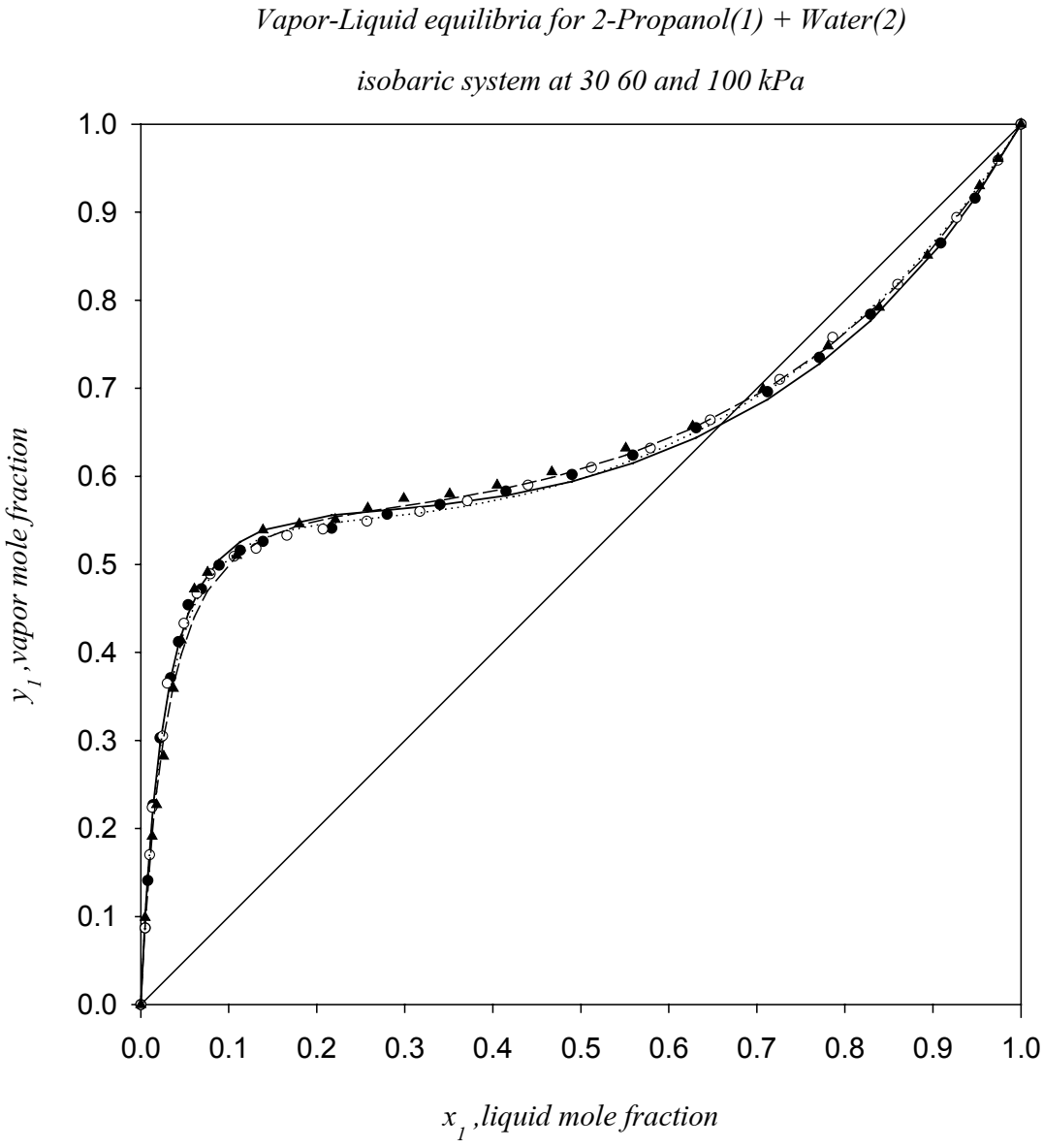
$x_{1,exp}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,exp}$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,exp}$	$\gamma_{2,cal}$	%Error y_1	%Error y_2
1.000	1.000	1.000	342.73	-	-	-	-	-	-
0.974	0.959	0.960	342.12	1.011	1.000	3.219	3.076	0.094	-2.198
0.927	0.894	0.896	341.59	1.015	1.003	2.987	2.917	0.177	-1.489
0.860	0.818	0.819	340.90	1.031	1.013	2.774	2.699	0.123	-0.551
0.786	0.758	0.751	340.60	1.050	1.033	2.510	2.467	-0.918	2.874
0.726	0.710	0.706	340.53	1.078	1.058	2.291	2.289	-0.538	1.317
0.647	0.664	0.658	340.52	1.132	1.109	2.060	2.068	-0.838	1.655
0.579	0.632	0.626	340.64	1.198	1.173	1.882	1.891	-0.942	1.617
0.512	0.610	0.601	340.81	1.299	1.264	1.706	1.729	-1.497	2.341
0.440	0.590	0.580	341.07	1.442	1.407	1.548	1.569	-1.633	2.350
0.371	0.572	0.566	341.42	1.633	1.612	1.415	1.430	-1.002	1.339
0.317	0.560	0.558	341.68	1.851	1.847	1.325	1.331	-0.296	0.376
0.257	0.549	0.552	342.03	2.207	2.233	1.229	1.233	0.470	-0.573
0.207	0.540	0.546	342.36	2.646	2.722	1.159	1.162	1.070	-1.257
0.166	0.533	0.538	342.71	3.210	3.311	1.102	1.111	1.015	-1.158
0.131	0.518	0.527	343.11	3.899	4.032	1.071	1.073	1.714	-1.842
0.106	0.509	0.512	343.63	4.606	4.731	1.038	1.050	0.656	-0.681
0.079	0.489	0.485	344.19	5.804	5.745	1.023	1.029	-0.811	0.776
0.064	0.467	0.460	345.13	6.591	6.458	1.009	1.020	-1.467	1.285
0.049	0.433	0.423	346.48	7.434	7.313	0.998	1.012	-2.275	1.737
0.030	0.365	0.345	348.62	9.451	8.664	1.001	1.005	-5.561	3.197
0.025	0.305	0.313	350.52	8.731	9.044	1.008	1.003	2.733	-1.199
0.013	0.224	0.209	353.14	11.441	10.135	0.998	1.001	-6.871	1.983
0.010	0.170	0.172	354.61	10.184	10.410	1.003	1.001	1.226	-0.251
0.005	0.087	0.098	356.98	9.364	10.900	0.999	1.000	12.411	-1.183
0.000	0.000	0.000	359.14	-	-	-	-	-	-

ตาราง 3-15 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 2-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 100 kPa

$x_{1,exp}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,exp}$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,exp}$	$\gamma_{2,cal}$	%Error y_1	%Error y_2
1.000	1.000	1.000	354.85	-	-	-	-	-	-
0.974	0.961	0.958	354.39	1.003	1.000	3.075	3.243	-0.304	7.482
0.953	0.930	0.927	353.97	1.010	1.002	3.068	3.153	-0.302	4.014
0.894	0.851	0.853	353.33	1.011	1.008	2.955	2.909	0.173	-0.988
0.839	0.792	0.796	353.03	1.015	1.020	2.754	2.696	0.488	-1.857
0.781	0.748	0.747	352.81	1.040	1.040	2.468	2.486	-0.165	0.491
0.707	0.699	0.697	352.65	1.080	1.078	2.217	2.240	-0.355	0.823
0.627	0.657	0.655	352.68	1.143	1.141	1.983	2.001	-0.383	0.733
0.551	0.632	0.624	352.85	1.242	1.230	1.756	1.798	-1.287	2.210
0.467	0.605	0.599	353.12	1.388	1.377	1.570	1.600	-1.081	1.655
0.405	0.590	0.584	353.40	1.544	1.536	1.442	1.470	-0.964	1.387
0.351	0.580	0.574	353.80	1.725	1.727	1.331	1.368	-0.959	1.325
0.299	0.575	0.566	354.03	1.990	1.982	1.236	1.280	-1.507	2.039
0.258	0.564	0.560	354.40	2.226	2.255	1.181	1.218	-0.686	0.887
0.221	0.551	0.554	354.66	2.509	2.582	1.147	1.167	0.512	-0.628
0.180	0.546	0.544	354.97	3.011	3.073	1.089	1.117	-0.303	0.364
0.139	0.539	0.529	355.55	3.768	3.773	1.027	1.074	-1.912	2.235
0.109	0.510	0.509	356.07	4.455	4.488	1.035	1.048	-0.196	0.204
0.076	0.491	0.470	357.03	5.868	5.581	0.999	1.025	-4.290	4.138
0.061	0.472	0.441	358.00	6.789	6.223	0.980	1.016	-6.670	5.962
0.046	0.414	0.398	360.11	7.309	6.972	0.986	1.010	-3.997	2.824
0.037	0.359	0.361	362.12	7.251	7.480	0.989	1.006	0.676	-0.378
0.026	0.282	0.302	364.20	7.372	8.193	1.012	1.003	7.020	-2.757
0.018	0.227	0.242	366.23	8.036	8.770	1.000	1.002	6.369	-1.870
0.013	0.191	0.193	367.55	8.987	9.162	0.992	1.001	1.054	-0.249
0.005	0.099	0.089	370.03	10.707	9.839	1.001	1.000	-9.770	1.074
0.000	0.000	0.000	372.78	-	-	-	-	-	-

ตาราง 3-16 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย 2-โพรพานอล (1) + น้ำ(2) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 30 60 และ 100 kPa

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



ภาพที่ 3-7 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1) ของระบบที่ประกอบด้วย 2-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ 30 60 และ 100 kPa

เมื่อ ● คือ ข้อมูลจากการทดลอง ความดัน 30 kPa

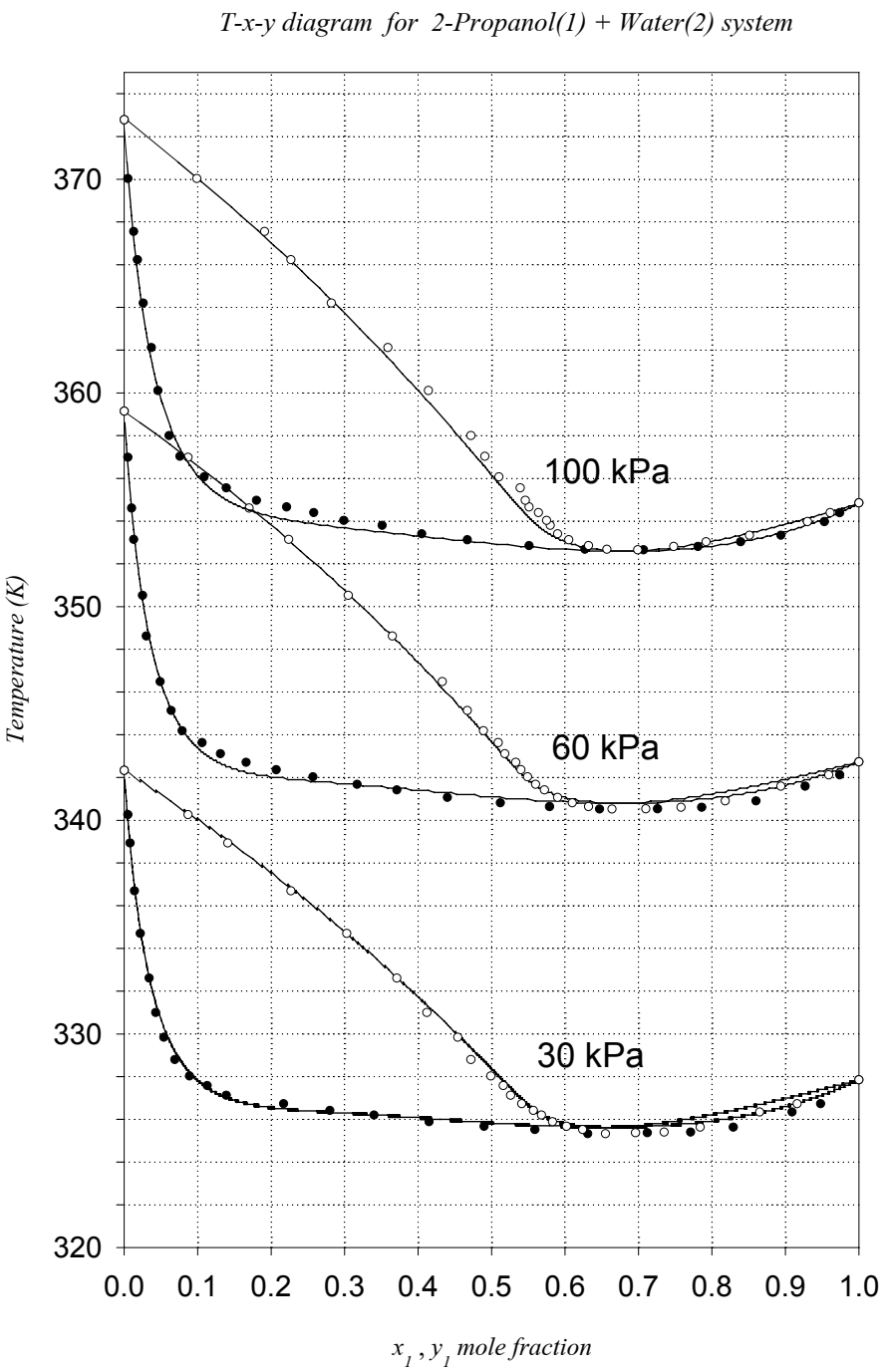
○ คือ ข้อมูลจากการทดลอง ความดัน 60 kPa

▲ คือ ข้อมูลจากการทดลอง ความดัน 100 kPa

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ความดัน 30 kPa

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ความดัน 60 kPa

– – – – คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ความดัน 100 kPa



ภาพที่ 3-8 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1) และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 2-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 30 60 และ 100 kPa

เมื่อ ○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

5. ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสององค์ประกอบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ ใช้ข้อมูลผลการทดลองจากวารสารตีพิมพ์เรื่อง Isobaric Vapor-Liquid Equilibria for Binary and Ternary Systems Composed of Water, 1-Propanol, and 2-Propanol at 100 kPa (Gabaldon *et al.*, 1996b)

ข้อมูลสมดุลระหว่างวัฏภาคจากผลการทดลอง

ในการศึกษาใช้ข้อมูลจากผลการทดลองสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ของระบบสององค์ประกอบที่ประกอบด้วย 2-โพรพานอล(1) + 1-โพรพานอล(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 100 kPa ค่าพารามิเตอร์โครงสร้าง (r_i, q_i) ขององค์ประกอบและค่าคงที่ของสมการ Antoine สำหรับคำนวณความดันไออิ่มตัว แสดงในตาราง 3-17 ข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ ความดันรวมของระบบ $(P_{\text{Total,exp}})$ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี $(\gamma_{i,\exp})$ แสดงในตาราง 3-18 และแสดงสมดุลระหว่างวัฏภาคแสดงในภาพที่ 3-9 และสมดุลระหว่างวัฏภาคกับอุณหภูมิแสดงในภาพที่ 3-10

ผลการหาค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC

ด้วยการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อกำหนดค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC ซึ่งเป็นค่าพารามิเตอร์ระหว่าง 2-โพรพานอล(1) กับ 1-โพรพานอล(2) ที่ความดัน 100 kPa แสดงในตาราง 3-19

ผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

ด้วยการใช้แบบจำลอง UNIQUAC ร่วมกับค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นเพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี $(\gamma_{i,\text{cal}})$ และค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\text{cal}})$ ของระบบ 2-โพรพานอล(1) + 1-โพรพานอล(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 100 kPa แสดงในตาราง 3-18 และในภาพที่ 3-9 ซึ่งจะเห็นว่าค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ 2-โพรพานอล(1) และ 1-โพรพานอล(2) ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC มีค่าใกล้เคียงกับค่าที่ได้จากผลการทดลองและเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าต่ำ และเมื่อคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอโดยกำหนดให้ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวมีค่าตั้งแต่ 0.00 ถึง 1.00 แสดงในภาพที่ 3-10 จะเห็นว่าทั้งค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ วัฏภาคของเหลวและอุณหภูมิของระบบที่ได้จากการคำนวณมีค่าใกล้เคียงกับผลการทดลอง

ตาราง 3-17 ค่าคงที่ของสมการ Antoine และพารามิเตอร์โครงสร้างของ 2-โพรพานอลและ 1-โพรพานอล

		ค่าคงที่ Antoine[1]			พารามิเตอร์โครงสร้าง[2]	
องค์ประกอบ	ช่วงอุณหภูมิ(K)	*A*	*B*	*C*	*r*	*q*
2-Propanol	300-355	16.4089	3439.60	-63.417	2.7791	2.5080
1-Propanol	303-370	16.0353	3415.56	-70.733	2.7799	2.5120

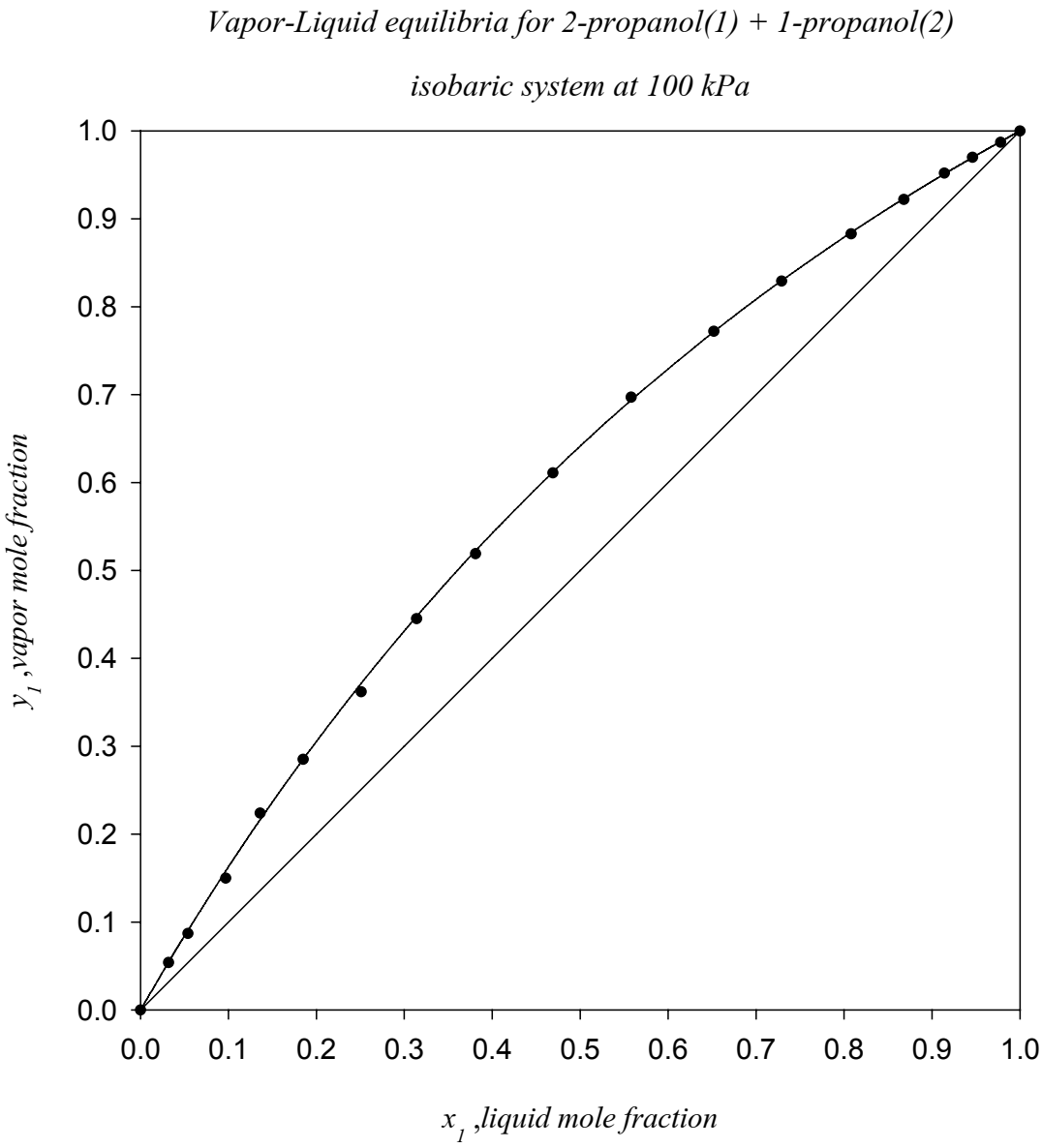
ที่มา : [1](Gabaldon *et al.*, 1996b) [2](Sander, Fredenslund and Rasmussen, 1986)

ตาราง 3-18 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 2-โพรพานอล(1) + 1-โพรพานอล(2) ที่ความดัน 100 kPa

$x_{1,exp}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,exp}$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,exp}$	$\gamma_{2,cal}$	%Error y_1	%Error y_2
0.000	0.000	0.000	369.75	-	-	-	-	-	-
0.032	0.054	0.055	368.83	0.998	0.987	1.004	1.000	0.923	-0.053
0.054	0.087	0.091	368.45	0.966	0.987	1.006	1.000	4.161	-0.396
0.097	0.150	0.158	367.70	0.952	0.988	1.009	1.000	5.487	-0.968
0.136	0.224	0.216	366.84	1.046	0.989	0.995	1.000	-3.403	0.982
0.185	0.285	0.285	366.06	1.006	0.990	1.001	1.000	0.116	-0.046
0.251	0.362	0.372	365.10	0.976	0.992	1.009	0.999	2.663	-1.511
0.314	0.445	0.448	363.96	1.000	0.993	1.001	0.999	0.621	-0.498
0.381	0.519	0.523	362.94	0.998	0.994	1.001	0.998	0.675	-0.729
0.469	0.611	0.612	361.60	1.003	0.996	0.995	0.997	0.175	-0.275
0.558	0.697	0.694	360.28	1.011	0.997	0.981	0.995	-0.455	1.047
0.652	0.772	0.772	359.02	1.006	0.998	0.986	0.994	-0.042	0.141
0.729	0.829	0.830	357.99	1.005	0.999	0.990	0.992	0.086	-0.418
0.808	0.883	0.884	356.93	1.006	0.999	0.998	0.990	0.165	-1.246
0.868	0.922	0.923	356.19	1.006	1.000	0.998	0.989	0.116	-1.369
0.914	0.952	0.951	355.63	1.009	1.000	0.964	0.988	-0.097	1.932
0.946	0.970	0.970	355.22	1.009	1.000	0.976	0.987	-0.022	0.717
0.978	0.987	0.988	354.95	1.004	1.000	1.052	0.986	0.090	-6.833
1.000	1.000	1.000	354.85	-	-	-	-	-	-

ตาราง 3-19 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย 2-โพรพานอล (1) + 1-โพรพานอล(2) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa

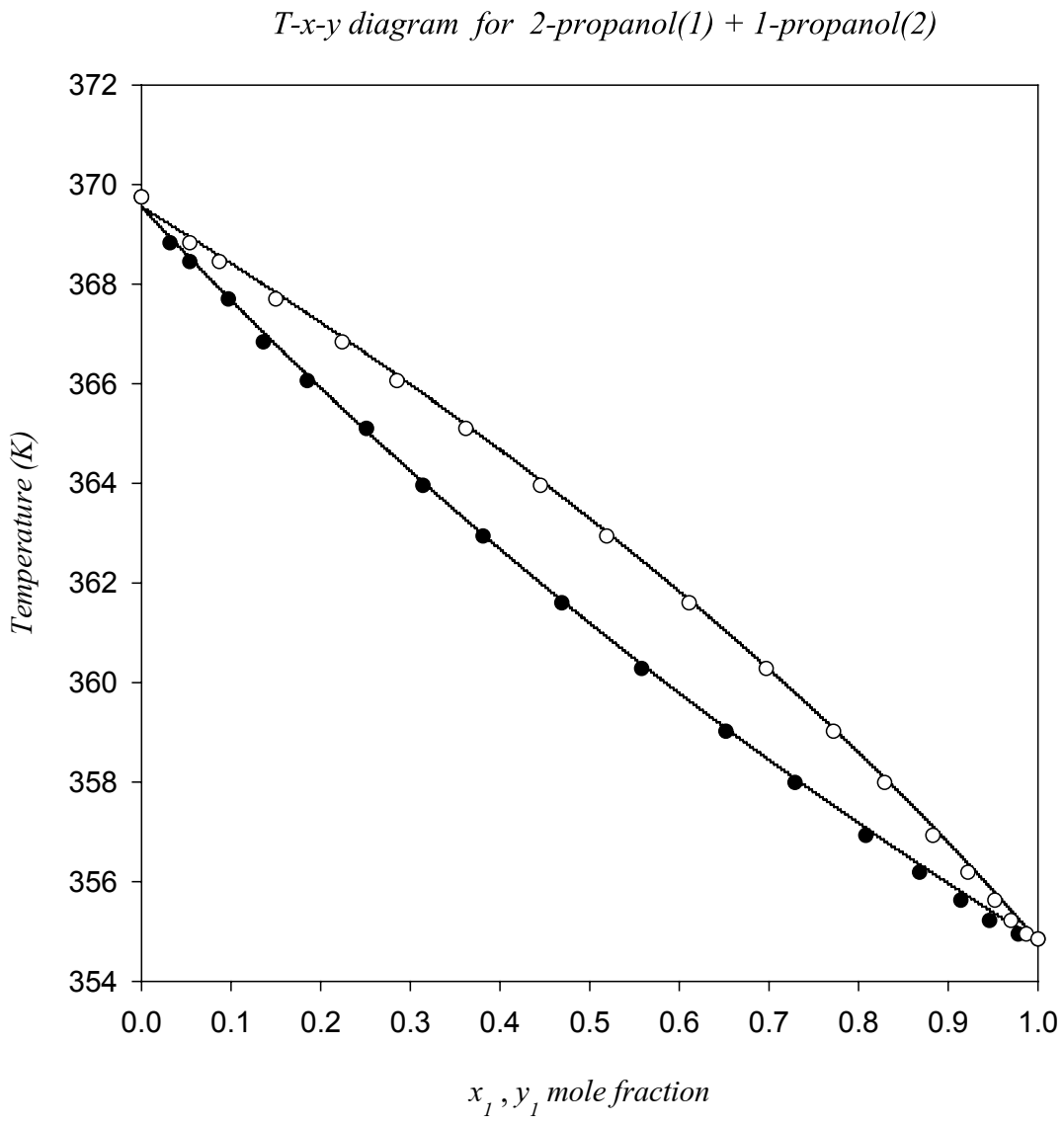
UNIQUAC parameters	100 kPa
$A_{12} = u_{12}\text{-}u_{22}$	-3.799
$A_{21} = u_{21}\text{-}u_{11}$	-0.377



ภาพที่ 3-9 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1) ของระบบที่ประกอบด้วย 2-โพรพานอล(1) + 1-โพรพานอล(2) ที่ 100 kPa

เมื่อ ● คือ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC



ภาพที่ 3-10 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1) และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 2-โพรพานอล(1) + 1-โพรพานอล(2) ที่ 100 kPa

เมื่อ ○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

6. ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสามองค์ประกอบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ ใช้ข้อมูลผลการทดลองจากวารสารตีพิมพ์เรื่อง Isobaric Vapor-Liquid Equilibria for Binary and Ternary Systems Composed of Water, 1-Propanol, and 2-Propanol at 100 kPa (Gabaldon *et al.*, 1996b)

ข้อมูลสมดุลระหว่างวัฏภาคจากผลการทดลอง

ในการศึกษาใช้ข้อมูลจากผลการทดลองสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ของระบบสามองค์ประกอบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + 1-โพรพานอล(2) + 2-โพรพานอล(3) ที่ความดันของระบบมีคงที่ 100 kPa โดยกำหนดให้ น้ำ 1-โพรพานอล และ 2-โพรพานอล เป็นองค์ประกอบที่ 1 2 3 ตามลำดับ ค่าพารามิเตอร์โครงสร้าง (r_i, q_i) ขององค์ประกอบ และค่าคงที่ของสมการ Antoine สำหรับคำนวณความดันไออิ่มตัว แสดงในตาราง 3-20 ข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ ความดันรวมของระบบ $(P_{\text{Total,exp}})$ และค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี $(\gamma_{i,\exp})$ แสดงในตาราง 3-22 แสดงสมดุลระหว่างวัฏภาคในภาพที่ 3-11 และสมดุลระหว่างวัฏภาคกับอุณหภูมิในภาพที่ 3-12

ผลการหาค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC

ในระบบสามองค์ประกอบนี้ไม่มีการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นของระบบสามองค์ประกอบเพื่อหาค่าพารามิเตอร์ แต่ได้ใช้ค่าพารามิเตอร์ (A_{ij}) ที่มีอยู่แล้วจากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นจากระบบสององค์ประกอบ ได้แก่ค่าพารามิเตอร์จากระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ระบบ 2-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) และระบบ 2-โพรพานอล(1) + 1-โพรพานอล(2) ที่ความดัน 100 kPa เพื่อใช้ในการคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีและค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของแต่ละองค์ประกอบของระบบสามองค์ประกอบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + 1-โพรพานอล(2) + 2-โพรพานอล(3) ที่ความดัน 100 kPa แสดงในตาราง 3-21

ผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

ด้วยการใช้แบบจำลอง UNIQUAC ร่วมกับค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นระบบสององค์ประกอบเพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี $(\gamma_{i,\text{cal}})$ และค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\text{cal}})$ ของระบบสามองค์ประกอบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + 1-โพรพานอล(2) + 2-โพรพานอล(3) ที่ความดัน 100 kPa แสดงดังตาราง 3-22 และในภาพที่

3-11 ซึ่งจะเห็นว่าค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของน้ำ(1) 1-โพรพานอล(2) และ 2-โพรพานอล (3) ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC มีค่าใกล้เคียงกับค่าเศษส่วนโมลที่ได้จากผลการทดลองและเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าต่ำ และเมื่อกำหนดอุณหภูมิของระบบโดยความดันของระบบมีค่าคงที่สามารถคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวได้ดังแสดงในภาพที่ 3-12 และภาพที่ 3-13

ตาราง 3-20 ค่าคงที่ของสมการ Antoine และพารามิเตอร์โครงสร้างของ น้ำ 1-โพรพานอล และ 2-โพรพานอล

		ค่าคงที่ Antoine[1]			พารามิเตอร์โครงสร้าง[2]	
องค์ประกอบ	ช่วงอุณหภูมิ(K)	*A*	*B*	*C*	*r*	*q*
Water	274-373	16.5700	3984.92	-39.724	0.920	1.400
1-Propanol	303-370	16.0353	3415.56	-70.733	2.7799	2.5120
2-Propanol	300-355	16.4089	3439.60	-63.417	2.7791	2.5080

ที่มา : [1](Gabaldon *et al.*, 1996b) [2](Sander, Fredenslund and Rasmussen, 1986)

ตาราง 3-21 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC จากระบบสององค์ประกอบเพื่อใช้ในระบบสามองค์ประกอบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + 1-โพรพานอล(2) + 2-โพรพานอล(3) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa

Component	Water(1)	1-Propanol(2)	2-Propanol(3)
Water(1)	A_{11} **= 0.000**	A_{12} **= 491.786**	A_{13} **= 68.402**
1-Propanol(2)	A_{22} **= 16.567**	A_{22} **= 0.000**	A_{23} **= -0.377**
2-Propanol(3)	A_{33} **= 357.278**	A_{32} **= -3.799**	A_{33} **= 0.000**

ตาราง 3-22 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + 1-โพรพานอล(2) + 2-โพรพานอล(3) ที่ความดัน 100 kPa

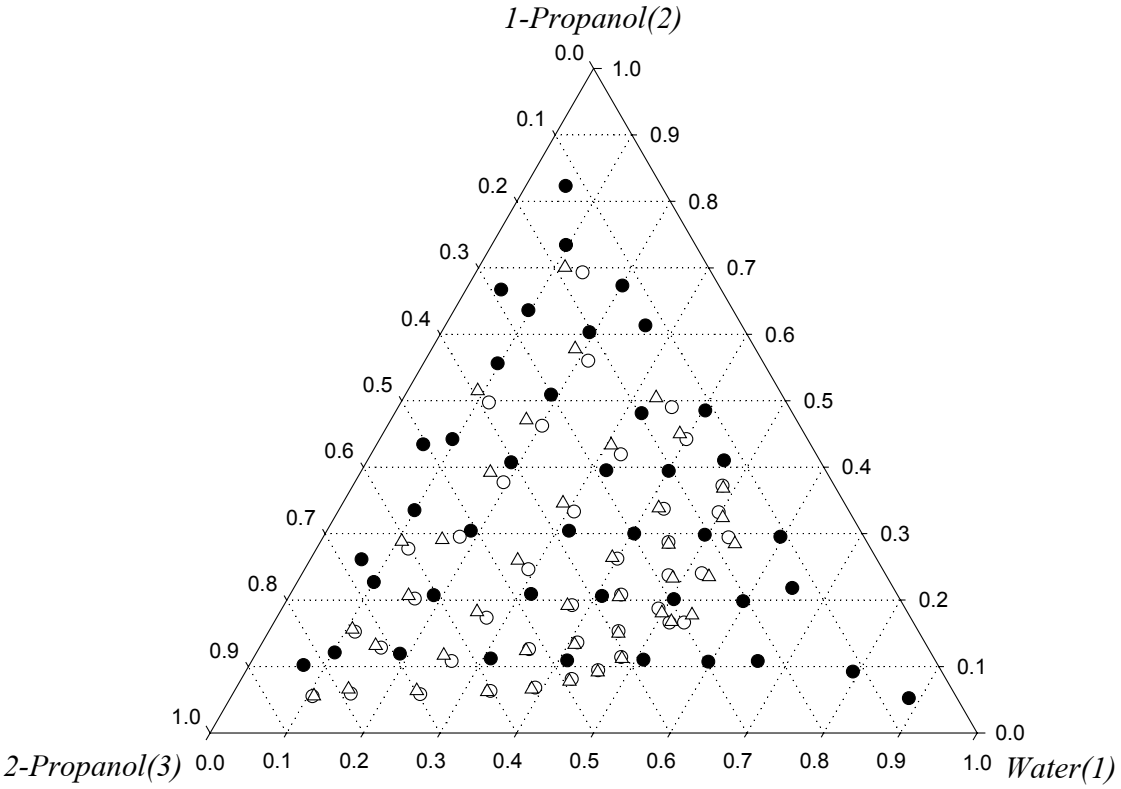
$x_{1,exp}$	$x_{2,exp}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	$y_{3,exp}$	$y_{3,cal}$	$T_{exp}(K)$	%Err y_1	%Err y_2	%Err y_3
0.071	0.102	0.106	0.108	0.055	0.056	0.839	0.837	354.89	1.600	0.920	-0.262
0.067	0.261	0.113	0.107	0.152	0.156	0.735	0.736	356.90	-4.900	2.662	0.203
0.061	0.434	0.120	0.106	0.277	0.288	0.603	0.606	359.20	-11.828	4.029	0.503
0.046	0.667	0.115	0.092	0.497	0.515	0.388	0.394	362.59	-20.347	3.578	1.448
0.052	0.823	0.139	0.112	0.693	0.700	0.168	0.187	365.03	-19.094	1.081	11.337
0.097	0.734	0.213	0.187	0.560	0.578	0.227	0.235	362.73	-12.222	3.188	3.604
0.097	0.636	0.202	0.177	0.462	0.471	0.336	0.352	361.40	-12.497	1.947	4.835
0.097	0.556	0.194	0.169	0.377	0.392	0.429	0.439	360.31	-12.701	3.970	2.255
0.095	0.442	0.178	0.157	0.295	0.291	0.527	0.552	358.92	-11.653	-1.363	4.699
0.099	0.335	0.166	0.155	0.202	0.207	0.632	0.638	357.46	-6.352	2.252	0.949
0.100	0.227	0.159	0.150	0.128	0.131	0.713	0.718	356.02	-5.415	2.474	0.763
0.102	0.121	0.154	0.148	0.059	0.066	0.787	0.787	354.57	-4.103	11.138	-0.032
0.188	0.119	0.245	0.238	0.058	0.063	0.697	0.699	354.03	-2.908	9.325	0.246
0.188	0.207	0.261	0.246	0.108	0.117	0.631	0.637	355.06	-5.609	8.015	0.948
0.188	0.304	0.274	0.257	0.173	0.182	0.553	0.561	356.28	-6.169	5.229	1.421
0.189	0.407	0.292	0.271	0.246	0.260	0.462	0.469	357.54	-7.092	5.556	1.524
0.190	0.509	0.308	0.287	0.333	0.345	0.359	0.367	358.86	-6.730	3.752	2.293
0.193	0.603	0.326	0.306	0.419	0.433	0.255	0.260	360.07	-6.013	3.368	2.154
0.201	0.673	0.357	0.329	0.490	0.504	0.153	0.166	361.09	-7.749	2.919	8.734
0.261	0.613	0.400	0.387	0.442	0.450	0.158	0.163	360.00	-3.188	1.820	2.980
0.322	0.481	0.423	0.416	0.337	0.339	0.240	0.246	358.34	-1.734	0.467	2.400
0.319	0.395	0.400	0.392	0.262	0.264	0.338	0.344	357.29	-1.883	0.692	1.692
0.316	0.304	0.376	0.370	0.192	0.192	0.432	0.438	356.17	-1.541	-0.230	1.444
0.314	0.209	0.353	0.350	0.126	0.124	0.521	0.526	355.06	-0.843	-1.842	1.017
0.310	0.112	0.334	0.330	0.063	0.062	0.603	0.608	353.93	-1.080	-1.783	0.784
0.411	0.109	0.390	0.386	0.068	0.066	0.542	0.548	354.13	-0.955	-2.973	1.060
0.408	0.206	0.411	0.409	0.136	0.133	0.453	0.458	355.31	-0.569	-2.197	1.176
0.403	0.300	0.432	0.431	0.208	0.205	0.360	0.365	356.54	-0.341	-1.593	1.329
0.401	0.394	0.454	0.456	0.287	0.284	0.259	0.261	357.72	0.391	-1.143	0.582
0.403	0.485	0.482	0.485	0.372	0.368	0.146	0.147	358.94	0.587	-1.068	0.783
0.465	0.410	0.497	0.506	0.332	0.324	0.171	0.170	358.44	1.888	-2.434	-0.760
0.496	0.298	0.479	0.487	0.237	0.233	0.284	0.280	357.13	1.659	-1.860	-1.246
0.504	0.201	0.456	0.457	0.153	0.150	0.391	0.393	355.85	0.323	-2.136	0.459
0.510	0.110	0.431	0.430	0.081	0.078	0.488	0.493	354.63	-0.301	-4.099	0.946
0.596	0.107	0.459	0.460	0.094	0.092	0.447	0.449	355.20	0.116	-2.591	0.426
0.596	0.198	0.491	0.499	0.187	0.181	0.322	0.321	356.75	1.570	-3.443	-0.394
0.596	0.295	0.529	0.542	0.294	0.284	0.177	0.174	358.32	2.443	-3.260	-1.886
0.650	0.218	0.521	0.533	0.240	0.235	0.239	0.232	357.46	2.289	-2.125	-2.856
0.660	0.108	0.479	0.481	0.114	0.112	0.407	0.407	355.64	0.410	-1.798	0.021
0.792	0.092	0.516	0.518	0.166	0.167	0.318	0.315	357.11	0.300	0.897	-0.955
0.885	0.052	0.535	0.540	0.166	0.177	0.299	0.283	357.73	0.878	6.824	-5.360

ตาราง 3-22 (ต่อ)

$x_{1,exp}$	$\gamma_{1,exp}$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,exp}$	$\gamma_{2,cal}$	$\gamma_{3,exp}$	$\gamma_{3,cal}$
0.071	2.920	2.980	0.961	0.978	1.012	1.005
0.067	3.048	2.909	0.955	0.988	1.008	1.004
0.061	3.253	2.867	0.954	0.995	1.007	1.001
0.046	3.635	2.863	0.973	0.999	1.003	0.995
0.052	3.548	2.837	1.000	1.001	0.912	0.990
0.097	3.173	2.731	0.991	1.004	0.992	0.995
0.097	3.164	2.734	0.994	1.003	0.977	0.999
0.097	3.167	2.741	0.969	1.001	1.000	1.002
0.095	3.130	2.765	1.009	0.997	0.971	1.005
0.099	2.964	2.779	0.967	0.993	1.007	1.008
0.100	2.973	2.813	0.959	0.986	1.011	1.009
0.102	2.989	2.855	0.880	0.978	1.023	1.010
0.188	2.633	2.557	0.900	0.987	1.038	1.031
0.188	2.693	2.536	0.923	0.997	1.033	1.030
0.188	2.695	2.519	0.958	1.006	1.028	1.028
0.189	2.719	2.505	0.966	1.013	1.029	1.024
0.190	2.711	2.498	0.991	1.017	1.020	1.018
0.193	2.697	2.492	1.003	1.020	1.021	1.012
0.201	2.727	2.477	1.009	1.023	0.954	1.007
0.261	2.452	2.330	1.044	1.043	1.027	1.024
0.322	2.239	2.169	1.085	1.074	1.063	1.059
0.319	2.227	2.167	1.072	1.070	1.074	1.069
0.316	2.208	2.167	1.068	1.063	1.079	1.078
0.314	2.179	2.169	1.067	1.053	1.083	1.085
0.310	2.184	2.181	1.044	1.036	1.081	1.088
0.411	1.908	1.908	1.148	1.126	1.161	1.172
0.408	1.933	1.928	1.157	1.135	1.152	1.155
0.403	1.959	1.953	1.155	1.137	1.134	1.134
0.401	1.976	1.973	1.157	1.136	1.129	1.114
0.403	1.992	1.985	1.159	1.136	1.112	1.095
0.465	1.814	1.835	1.249	1.209	1.190	1.156
0.496	1.725	1.745	1.294	1.263	1.261	1.223
0.504	1.699	1.707	1.305	1.279	1.274	1.266
0.510	1.665	1.675	1.328	1.285	1.295	1.303
0.596	1.483	1.497	1.547	1.518	1.484	1.483
0.596	1.493	1.520	1.561	1.509	1.451	1.429
0.596	1.513	1.545	1.545	1.488	1.419	1.367
0.650	1.413	1.427	1.767	1.707	1.635	1.547
0.660	1.374	1.380	1.826	1.793	1.701	1.680
0.792	1.164	1.176	2.938	2.981	2.510	2.468
0.885	1.054	1.064	5.069	5.408	4.243	3.957

Vapor-Liquid equilibria for water(1) + 1-propanol(2) + 2-propanol(3)

isobaric system at 100 kPa



ภาพที่ 3-11 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_i) และวัฏภาคของเหลว (x_i) ของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + 1-โพรพานอล(2) + 2-โพรพานอล(3) ที่ 100 kPa

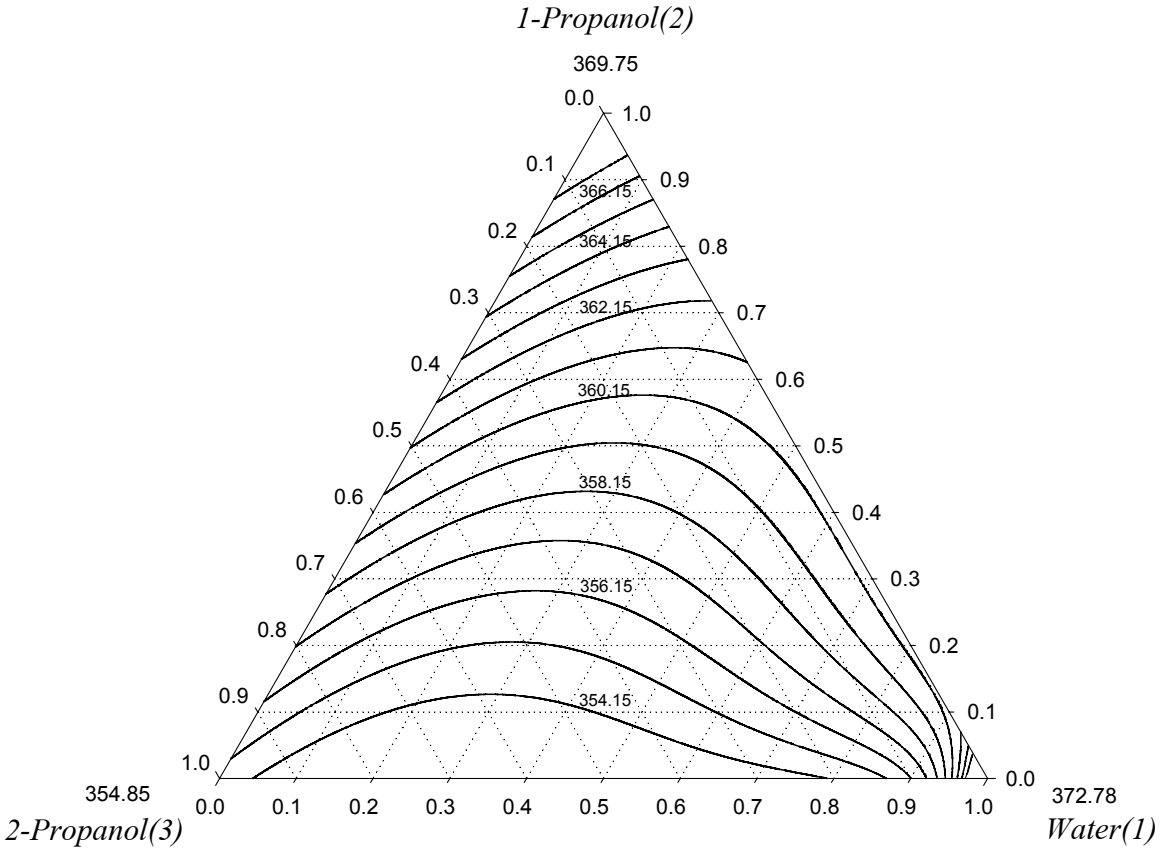
เมื่อ ○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของไอ ข้อมูลจากการทดลอง

● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

Δ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

Vapor-Liquid isotherms for the ternary system

Water(1) + 1-Propanol(2) + 2-Propanol(3) at 100 kPa

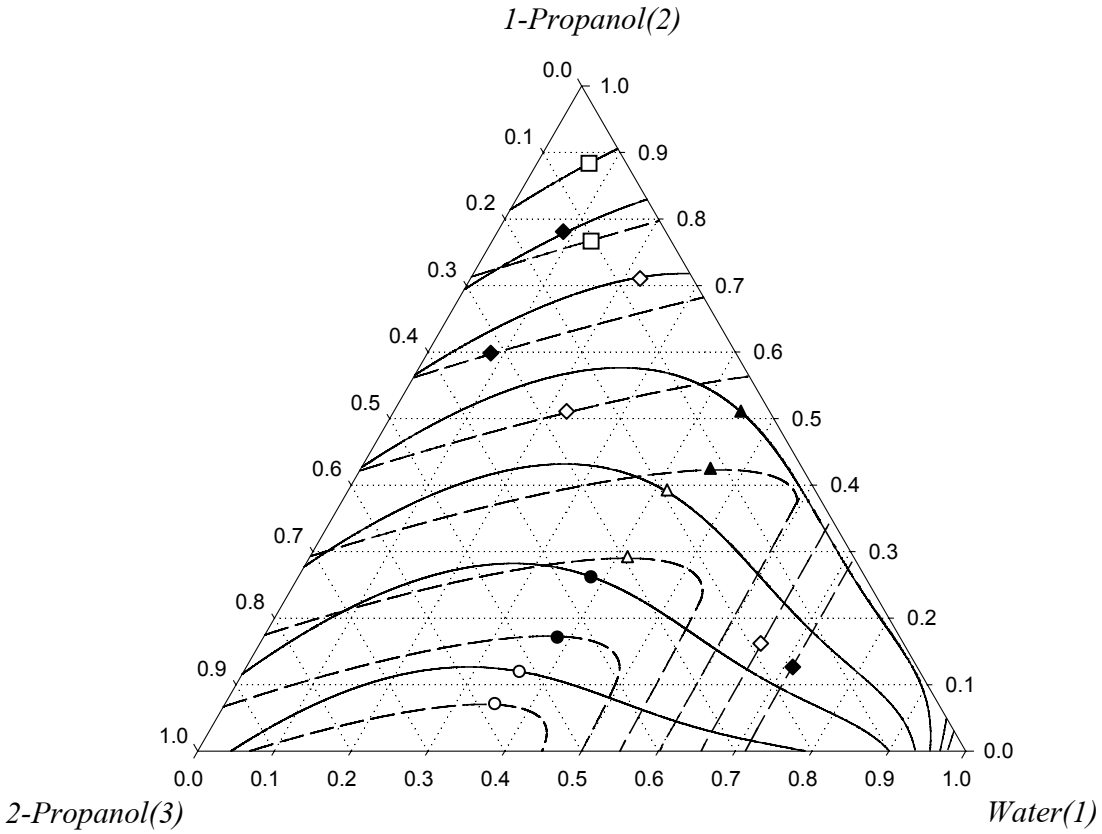


ภาพที่ 3-12 ค่าเศษส่วนโมลวัฏภาคของเหลว (x_i) ของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + 1-โพรพานอล(2) + 2-โพรพานอล(3) ที่ความดัน 100 kPa และอุณหภูมิคงที่ได้แก่ 354.15 355.15 356.15 357.15 ถึง 367.15 K

เมื่อ —— คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

Vapor-Liquid equilibria for water(1) + 1-propanol(2) + 2-propanol(3)

isobaric system at 100 kPa



ภาพที่ 3-13 ค่าเศษส่วนโมลวัฏภาคของเหลว (x_i) และวัฏภาคไอ (y_i) ของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + 1-โพรพานอล(2) + 2-โพรพานอล(3) ที่ความดัน 100 kPa และอุณหภูมิคงที่ในลักษณะเดียวกับที่ปรากฏในภาพที่ 3-12

เมื่อ —— คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

---- คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

○ 354.15 K , ● 356.15 K , Δ 358.15 K , ▲ 360.15 K ,

◊ 362.15 K , ♦ 364.15 K , ■ 366.15 K

วิจารณ์ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่

จากการศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ พบว่าสามารถใช้ข้อมูลจากการทดลองเพื่อใช้ในการหาค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง UNIQUAC และนำค่าพารามิเตอร์ที่ได้ใช้ในการคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีและคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคของระบบที่ประกอบด้วยแอลกอฮอล์ + น้ำ ระบบที่ประกอบด้วยแอลกอฮอล์ต่างชนิดกัน ระบบที่ศึกษาได้แก่ระบบ เมทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันคงที่ 101.3 kPa ระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันคงที่ 101.32 kPa ระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันคงที่ 3 ระดับ ได้แก่ 30 60 100 kPa และระบบ 2-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันคงที่ 3 ระดับ ได้แก่ 30 60 100 kPa และระบบ 2-โพรพานอล(1) + 1-โพรพานอล(2) ที่ความดันคงที่ 100 kPa

พบว่าค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองในแต่ละระบบจะมีค่าแตกต่างกัน อธิบายได้ว่าเกิดจากองค์ประกอบในระบบมีแรงกระทำต่อกันหรือมีแรงปฏิสัมพันธ์แตกต่างกัน ซึ่งมีส่วนที่จะส่งผลให้สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวมีลักษณะที่แตกต่างกัน โดยในระบบเมทานอล(1) + น้ำ(2) และระบบเอทานอล(1) + น้ำ(2) ค่าพารามิเตอร์ A_{12} จะมีค่าต่ำกว่าค่าพารามิเตอร์ A_{21} สำหรับระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) มีแนวโน้มของค่าพารามิเตอร์ A_{12} จะมีค่าลดลงเมื่อความดันของระบบเพิ่มขึ้น กลับกันค่าพารามิเตอร์ A_{21} จะมีค่าเพิ่มขึ้นเมื่อความดันเพิ่มขึ้น แต่สำหรับระบบ 2-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) แนวโน้มของค่าพารามิเตอร์ A_{12} มีค่าลดลงเมื่อความดันของระบบมีค่าเพิ่มขึ้นจาก 30 เป็น 60 kPa และพารามิเตอร์ A_{12} มีค่าเพิ่มขึ้นเมื่อความดันของระบบมีค่าเท่ากับ 100 kPa กลับกันค่าพารามิเตอร์ A_{21} มีค่าเพิ่มขึ้นเมื่อความดันของระบบเพิ่มขึ้นจาก 30 เป็น 60 kPa และค่าพารามิเตอร์ A_{21} มีค่าลดลงเมื่อความดันของระบบมีค่าเท่ากับ 100 kPa อธิบายได้ว่าความดันของระบบมีผลต่อแรงปฏิสัมพันธ์ของระบบและส่งผลต่อเนื่องไปยังสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว สำหรับระบบ 2-โพรพานอล(1) + 1-โพรพานอล(2) ซึ่งองค์ประกอบมีความคล้ายคลึงกันมากทำให้ค่าพารามิเตอร์ A_{12} และ A_{21} มีค่าต่ำมาก

สำหรับตำแหน่งอะซีโอโทรปของระบบสององค์ประกอบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์จากการศึกษาไม่พบในระบบ เมทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 101.3 kPa และไม่พบในระบบ 2-โพรพานอล(1) + 1-โพรพานอล(2) ที่ความดัน 100 kPa แต่พบได้ในระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดัน 101.32 kPa ระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) และระบบ 2-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความ

ดัน 30 60 และ 100 kPa โดยตำแหน่งอะซีโอโทรปของระบบสององค์ประกอบที่เกิดขึ้นจะเห็นได้ว่ามีความสัมพันธ์กับความดันของระบบที่เปลี่ยนแปลงโดยเมื่อความดันของระบบเพิ่มขึ้นตำแหน่งอะซีโอโทรปจะเปลี่ยนแปลงไปในตำแหน่งที่ค่าเศษส่วนโมลของแอลกอฮอล์สูงขึ้น ดังแสดงในตาราง 3-23 ซึ่งประกอบด้วยตำแหน่งค่าเศษส่วนโมลของแอลกอฮอล์และอุณหภูมิที่เกิดอะซีโอโทรป

ตาราง 3-23 ตำแหน่งของค่าเศษส่วนโมลของแอลกอฮอล์และอุณหภูมิที่เกิดอะซีโอโทรปของระบบสององค์ประกอบที่ความดันคงที่ จากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC

ระบบ	ความดัน (kPa)	ตำแหน่งค่าเศษส่วนโมลของแอลกอฮอล์	อุณหภูมิ (K)
เมทานอล(1) + น้ำ(2)	101.3	-	-
เอทานอล(1) + น้ำ(2)	101.32	0.990	351.40
1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2)	30	0.400	332.20
	60	0.408	347.70
	100	0.410	360.40
2-โพรพานอล(1) + น้ำ(2)	30	0.656	325.60
	60	0.673	340.80
	100	0.683	352.60
2-โพรพานอล(1) + 1-โพรพานอล(2)	100	-	-

และจากการศึกษาพบว่าสามารถนำค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง UNIQUAC จากระบบสององค์ประกอบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์ มาใช้ในระบบสามองค์ประกอบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ กล่าวคือ นำค่าพารามิเตอร์จากระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ระบบ 2-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) และระบบ 2-โพรพานอล(1) + 1-โพรพานอล(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 100 kPa มาใช้เพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีและคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคของระบบสามองค์ประกอบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + 1-โพรพานอล(2) + 2-โพรพานอล(3) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 100 kPa จากการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบสามองค์ประกอบไม่พบว่าเกิดอะซีโอโทรป (Ternary azeotrope) กล่าวคือไม่มีตำแหน่งค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวเท่ากับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอพร้อมกันทั้งสามองค์ประกอบ

สำหรับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอที่ได้จากการคำนวณที่เบี่ยงเบนไปจากค่าจากผลการทดลองแสดงในรูปของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาด จากผลการศึกษาพบว่าในการใช้แบบจำลอง

UNIQUAC เพื่อคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของระบบ มีความเบี่ยงเบนทั้งในทิศทางที่มากกว่า (เปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าเป็นบวก) และน้อยกว่า (เปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าเป็นลบ) ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอจากการทดลอง กล่าวคือ ค่าเศษส่วนโมลที่ได้จากการคำนวณมีทั้งค่าสูงกว่าและต่ำกว่าค่าเศษส่วนโมลที่ได้จากการทดลองและจะพบว่าเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของการคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอจะมีปริมาณสูงเมื่อแบบจำลองมีการคำนวณในช่วงที่องค์ประกอบมีปริมาณน้อย

เมื่อพิจารณาค่าเฉลี่ย (Mean) ค่าความแปรปรวน (Variance) และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน (Standard Deviation) ของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ โดยค่าเฉลี่ยของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดจะแสดงปริมาณของความผิดพลาดเฉลี่ยของการคำนวณค่าเศษส่วนโมลด้วยแบบจำลองว่าให้ผลสูงหรือต่ำกว่าค่าจากการทดลอง ส่วนค่าความแปรปรวนและค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานจะไม่นำทิศทางของความเบี่ยงเบนมาพิจารณา แต่จะพิจารณาเฉพาะปริมาณของการเบี่ยงเบนเท่านั้น (กำหนดให้ค่าความเบี่ยงเบนมีค่าเป็นบวกทั้งหมด) เพื่อแสดงให้เห็นขนาดของความแตกต่างของค่าเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดที่เกิดขึ้นในแต่ละชุดข้อมูล ทั้งนี้จะแสดงเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของทุกองค์ประกอบในระบบ อย่างไรก็ตามเพื่อให้ค่าเฉลี่ย ค่าความแปรปรวนและค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดที่ได้มีความถูกต้องจึงนำเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดทั้งหมดในระบบมาพิจารณารวมกันโดยไม่มีการตัดค่าใดทิ้ง

ตาราง 3-24 ค่าเฉลี่ย ค่าความแปรปรวน และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC จากระบบสององค์ประกอบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์

ระบบ	ความดัน	Composition 1			Composition 2		
	(kPa)	Mean	Varience	Std-Dev	Mean	Variance	Std-Dev
เมทานอล(1) + น้ำ(2)	101.32	0.82	0.51	0.71	-0.28	4.32	2.08
เอทานอล(1) + น้ำ(2)	101.3	-0.38	0.84	0.91	-0.25	1.62	1.27
1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2)	30	-0.91	21.30	4.62	-0.79	3.86	1.96
	60	-2.48	37.87	6.15	-0.99	12.72	3.57
	100	-0.89	34.55	5.88	0.98	37.36	6.11
2-โพรพานอล(1) + น้ำ(2)	30	0.60	8.63	2.94	0.43	1.19	1.09
	60	-0.12	7.57	2.75	0.44	0.58	0.76
	100	-0.75	7.20	2.68	1.24	3.25	1.80
2-โพรพานอล(1) + 1-โพรพานอล(2)	100	0.66	2.89	1.70	-0.56	2.46	1.57

ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์แสดงโดย Sander, Fredenslund และ Rasmussen (1986)

7. ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ ใช้ข้อมูลผลการทดลองจากวารสารตีพิมพ์เรื่อง

Isobaric Vapor-Liquid Equilibria for 1-Propanol + Water + Calcium Nitrate (Vercher, Rojo and Martinez-Andreu, 1999)

ข้อมูลสมดุลระหว่างวัฏภาคจากผลการทดลอง

ในการศึกษาใช้ข้อมูลจากผลการทดลองสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ ได้แก่ ระบบน้ำ(1) + แคลเซียมไนเตรท(2) ที่ความดันคงที่ 100 kPa และระบบ 1-โพรพานอล(1) + แคลเซียมไนเตรท(2) ที่ความดันคงที่ 100 kPa และระบบตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ได้แก่ ระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดันคงที่ 100 kPa ค่าพารามิเตอร์โครงสร้าง (r_i, q_i) ขององค์ประกอบและค่าคงที่ของสมการ Antoine สำหรับคำนวณความดันไออิ่มตัวของตัวทำละลายแสดงในตาราง 3-25 ข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ และความดันของระบบ $(P_{\text{Total},\exp})$ ซึ่งค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอจะประกอบด้วยองค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายเท่านั้น ดังแสดงในตาราง 3-29 และตาราง 3-30 สำหรับข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองของระบบตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ และความดัน $(P_{\text{Total},\exp})$ ของระบบ ดังแสดงในตาราง 3-31

ผลการหาค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

ด้วยการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อกำหนดค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC โดยพิจารณาให้ไอออนอิสระที่เกิดจากการแตกตัวของเกลือเป็นองค์ประกอบที่ต่างชนิดกัน ดังนั้นสำหรับระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ จะพิจารณาให้เป็นระบบสามองค์ประกอบ ได้แก่ระบบ น้ำ(1)

+ แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa ระบบ 1-โพรพานอล(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับไอออนและพารามิเตอร์ระหว่างไอออนกับไอออน แสดงในตาราง 3-26 และตาราง 3-27 สำหรับระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ จะพิจารณาให้เป็นระบบสี่องค์ประกอบซึ่งประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับตัวทำละลาย ตัวทำละลายกับไอออน และระหว่างไอออนกับไอออน แสดงในตาราง 3-28

ผลการคำนวณอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ

เนื่องจากเกลือไม่สามารถระเหยได้ในสภาวะปกติ และระบบประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว ดังนั้นค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลายจะมีค่าเท่ากับ 1.00 เสมอ และความดันของระบบคงที่ จึงกำหนดให้ใช้อุณหภูมิของระบบเป็นตัวแปรตามในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นและใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ร่วมกับค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นเพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) ของตัวทำละลาย อุณหภูมิของระบบ (T_{cal}) ได้จากความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีกับค่าความดันไออิ่มตัวของตัวทำละลาย ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-29 และตาราง 3-30 สำหรับอุณหภูมิจากข้อมูลผลการทดลองและอุณหภูมิจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC แสดงในภาพที่ 3-14 และภาพที่ 3-15 จากภาพจะเห็นว่าอุณหภูมิของระบบที่ได้จากผลการคำนวณและจากผลการทดลองมีค่าใกล้เคียงกันและเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าต่ำ

ผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ

ด้วยการใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC และค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นจากระบบเดียวกัน เพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) ของตัวทำละลายและคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลาย ($y_{i,\mathrm{cal}}$) ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดันคงที่ 100 kPa ในการพิจารณาสมดุลระหว่างวัฏภาคจะพิจารณาเฉพาะองค์ประกอบที่อยู่ในทุกวัฏภาคที่ปรากฏในระบบทั้งวัฏภาคของเหลวและวัฏภาคไอ โดยปริมาณขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายในวัฏภาคของเหลวแสดงในพจน์ของค่าเศษส่วนโมลโดยไม่รวมจำนวน

โมลของไอออน (x_i', x_j') ใช้แสดงค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลาย i และ j ตามลำดับ ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-31 ประกอบด้วย ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลาย ($x'_{i,\text{exp}}$) และตัวถูกละลาย (x_{salt}) ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลาย ($y_{i,\text{cal}}$) ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของตัวทำละลาย ($\gamma_{i,\text{cal}}$) อุณหภูมิของระบบ (T_{exp}) สำหรับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ 1-โพรพานอล(1) ที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC แสดงในภาพที่ 3-16 จากภาพจะเห็นว่าค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและผลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC มีค่าใกล้เคียงกันและเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าต่ำ

เมื่อใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นข้อมูลผลการทดลอง ร่วมกับการเปลี่ยนแปลงค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายให้มีค่าตั้งแต่ 0.00 ถึง 1.00 และกำหนดให้ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของเกลือมีค่าคงที่ได้แก่ ที่ 0.02 0.04 0.06 และ 0.08 เพื่อคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบ ของ 1-โพรพานอล(1) แสดงในภาพที่ 3-17 จากภาพจะเห็นว่าเมื่อปริมาณเกลือเปลี่ยนแปลงจะทำให้ตำแหน่งค่าเศษส่วนโมลที่เกิดอะซีโอโทรปเปลี่ยนแปลงไปโดยเมื่อปริมาณเกลือเพิ่มขึ้นจะทำให้อะซีโอโทรปของ 1-โพรพานอล(1) เปลี่ยนแปลงไปในทิศทางที่ค่าเศษส่วนโมลเพิ่มขึ้น อย่างไรก็ตามเมื่อปริมาณเกลือในวัฏภาคของเหลวมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.08 ก็ยังไม่สามารถกำจัดอะซีโอโทรปได้ สำหรับสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดันคงที่ 100 kPa แสดงในภาพที่ 3-18 ถึง ภาพที่ 3-21 โดยเปรียบเทียบกับข้อมูลที่ได้จากการทดลองที่มีค่าเศษส่วนโมลของเกลืออยู่ในช่วง 0.02 ถึง 0.08 และเปรียบเทียบกับผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคของระบบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 100 kPa จากภาพจะเห็นว่าสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบที่ได้จากผลการคำนวณมีลักษณะเหมือนกับผลการทดลอง

ตาราง 3-25 ค่าคงที่ของสมการ Antoine และพารามิเตอร์โครงสร้างของ 1-โพรพานอล น้ำ แคลเซียมไอออนและไนเตรทไอออน

		ค่าคงที่ Antoine[1]			พารามิเตอร์โครงสร้าง[2]	
องค์ประกอบ	ช่วงอุณหภูมิ(K)	A	B	C	r	q
1-Propanol	320-375	15.8040	3300.22	-75.19	2.7799	2.5120
Water	320-375	16.3144	3845.02	-44.42	0.920	1.400
Calcium ion	-	-	-	-	1.00	1.00
Nitrate ion	-	-	-	-	1.64	1.60

ที่มา : [1](Vercher, Rojo and Martinez-Andreu, 1999) [2](Sander, Fredenslund and Rasmussen, 1986)

ตาราง 3-26 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) A_{ij} (cal/mol) 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

ตาราง 3-27 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa

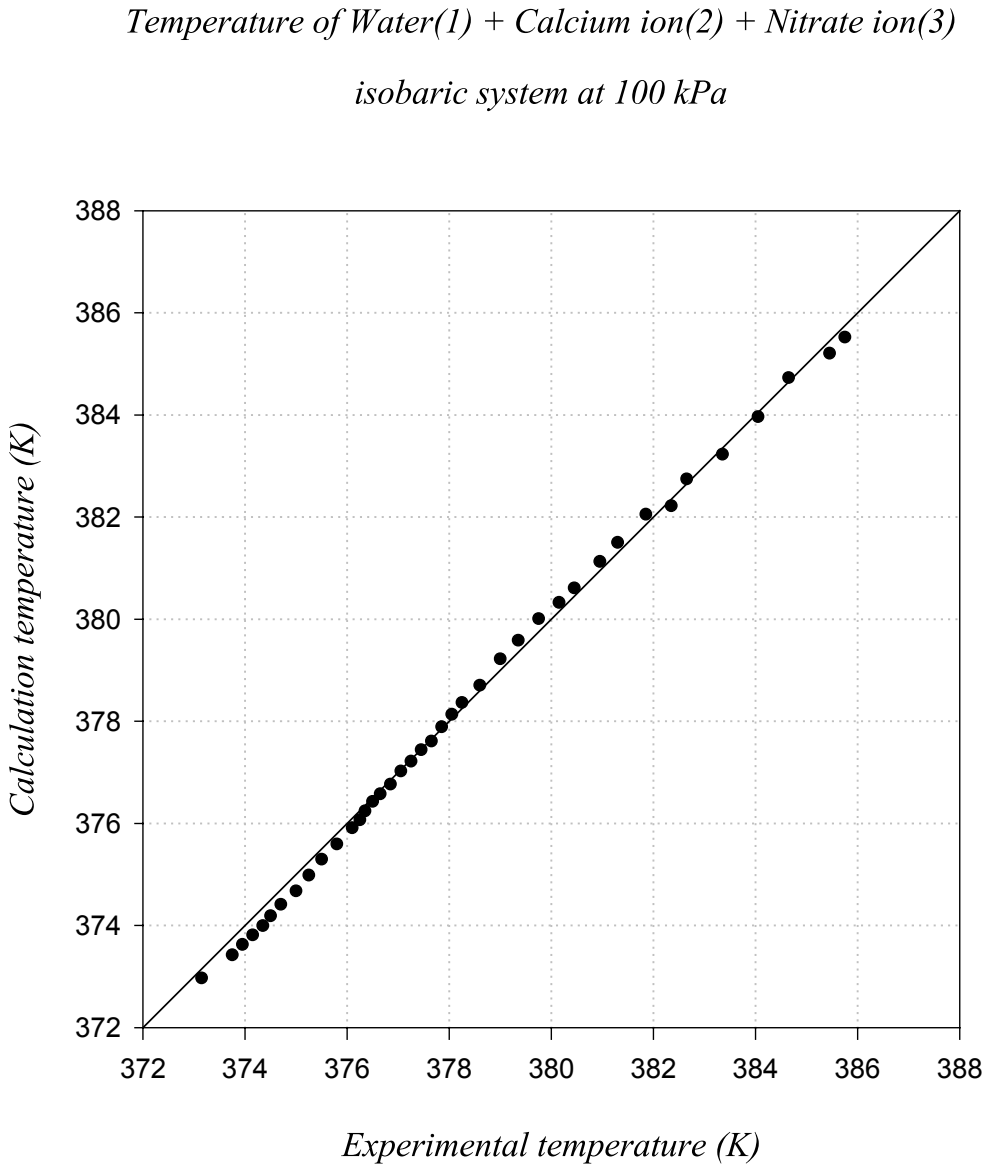
Component	1-Propanol(1)	Calcium ion(2)	Nitrate ion(3)
1-Propanol(1)	A_{11} = 0.000	A_{12} = 604.835	A_{13} = 1415.902
Calcium ion(2)	A_{21} = -743.030	A_{22} = 0.000	A_{23} = 616.782
Nitrate ion(3)	A_{31} = -1400.929	A_{32} = -852.184	A_{33} = 0.000

ตาราง 3-28 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) A_{ij} (cal/mol) 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

ตาราง 3-29 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

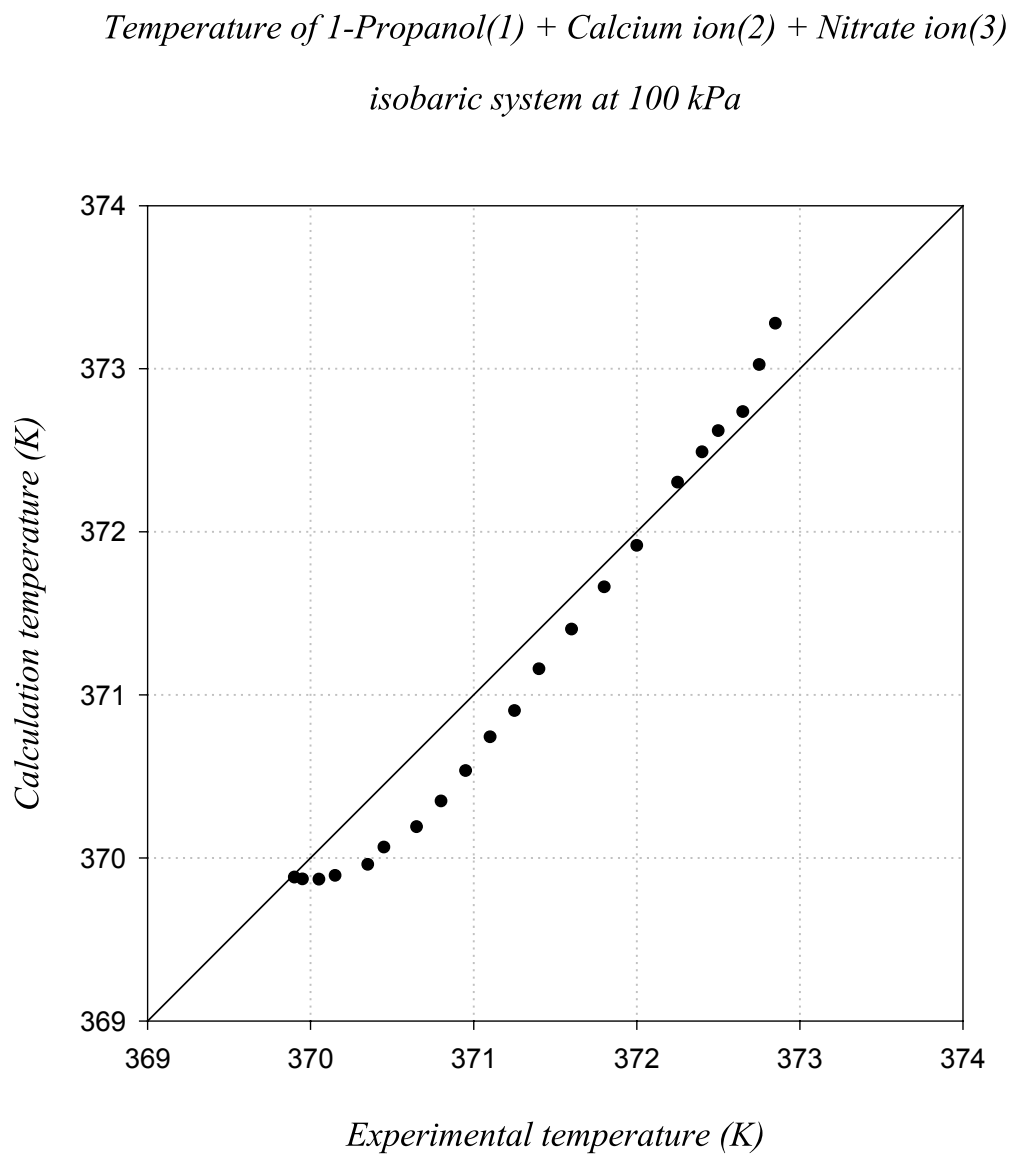
$x_{1,exp}$	$x_{2,exp}$	$x_{3,exp}$	$T_{exp}(K)$	$T_{cal}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	%Err T
0.9949	0.0017	0.0034	373.15	372.97	0.9989	-0.049
0.9871	0.0043	0.0086	373.75	373.42	0.9906	-0.088
0.9844	0.0052	0.0104	373.95	373.63	0.9862	-0.087
0.9821	0.0060	0.0119	374.15	373.81	0.9819	-0.090
0.9800	0.0067	0.0133	374.35	374.00	0.9776	-0.094
0.9779	0.0074	0.0147	374.50	374.19	0.9730	-0.083
0.9756	0.0081	0.0163	374.70	374.41	0.9677	-0.076
0.9730	0.0090	0.0180	375.00	374.68	0.9613	-0.086
0.9701	0.0100	0.0199	375.25	374.99	0.9537	-0.070
0.9673	0.0109	0.0218	375.50	375.30	0.9461	-0.054
0.9647	0.0118	0.0235	375.80	375.60	0.9387	-0.054
0.9620	0.0127	0.0253	376.10	375.91	0.9309	-0.049
0.9607	0.0131	0.0262	376.25	376.07	0.9271	-0.048
0.9593	0.0136	0.0271	376.35	376.24	0.9229	-0.028
0.9578	0.0141	0.0281	376.50	376.43	0.9184	-0.019
0.9566	0.0145	0.0289	376.65	376.58	0.9148	-0.019
0.9551	0.0150	0.0299	376.85	376.77	0.9102	-0.022
0.9531	0.0156	0.0313	377.05	377.03	0.9040	-0.007
0.9516	0.0161	0.0323	377.25	377.22	0.8994	-0.008
0.9499	0.0167	0.0334	377.45	377.44	0.8941	-0.002
0.9486	0.0171	0.0343	377.65	377.61	0.8900	-0.010
0.9465	0.0178	0.0357	377.85	377.89	0.8834	0.011
0.9447	0.0184	0.0369	378.05	378.14	0.8778	0.022
0.9430	0.0190	0.0380	378.25	378.37	0.8724	0.031
0.9405	0.0198	0.0397	378.60	378.71	0.8646	0.028
0.9368	0.0211	0.0421	379.00	379.22	0.8529	0.058
0.9342	0.0219	0.0439	379.35	379.58	0.8448	0.062
0.9312	0.0229	0.0459	379.75	380.01	0.8354	0.068
0.9289	0.0237	0.0474	380.15	380.33	0.8282	0.047
0.9269	0.0244	0.0487	380.45	380.61	0.8220	0.043
0.9233	0.0256	0.0511	380.95	381.13	0.8109	0.047
0.9207	0.0264	0.0529	381.30	381.50	0.8030	0.053
0.9169	0.0277	0.0554	381.85	382.05	0.7915	0.053
0.9156	0.0281	0.0563	382.35	382.22	0.7875	-0.034
0.9121	0.0293	0.0586	382.65	382.75	0.7771	0.025
0.9087	0.0304	0.0609	383.35	383.23	0.7671	-0.032
0.9037	0.0321	0.0642	384.05	383.97	0.7527	-0.022
0.8986	0.0338	0.0676	384.65	384.73	0.7382	0.021
0.8952	0.0349	0.0699	385.45	385.21	0.7287	-0.063
0.8931	0.0356	0.0713	385.75	385.52	0.7229	-0.059



ภาพที่ 3-14 อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

ตาราง 3-30 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

$x_{1,exp}$	$x_{2,exp}$	$x_{3,exp}$	$T_{exp}(K)$	$T_{cal}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	%Err T
0.9944	0.0019	0.0037	369.90	369.88	1.0057	-0.005
0.9901	0.0033	0.0066	369.95	369.87	1.0105	-0.021
0.9840	0.0053	0.0107	370.05	369.87	1.0168	-0.049
0.9765	0.0078	0.0157	370.15	369.89	1.0236	-0.069
0.9674	0.0109	0.0217	370.35	369.96	1.0305	-0.105
0.9585	0.0138	0.0277	370.45	370.07	1.0359	-0.104
0.9504	0.0165	0.0331	370.65	370.19	1.0397	-0.124
0.9420	0.0193	0.0387	370.80	370.35	1.0426	-0.122
0.9336	0.0221	0.0443	370.95	370.54	1.0446	-0.112
0.9253	0.0249	0.0498	371.10	370.74	1.0457	-0.096
0.9194	0.0269	0.0537	371.25	370.90	1.0460	-0.093
0.9108	0.0297	0.0595	371.40	371.16	1.0458	-0.064
0.9032	0.0323	0.0645	371.60	371.40	1.0450	-0.053
0.8956	0.0348	0.0696	371.80	371.66	1.0438	-0.037
0.8885	0.0372	0.0743	372.00	371.92	1.0422	-0.022
0.8784	0.0405	0.0811	372.25	372.30	1.0393	0.014
0.8737	0.0421	0.0842	372.40	372.49	1.0377	0.024
0.8705	0.0432	0.0863	372.50	372.62	1.0366	0.032
0.8676	0.0441	0.0883	372.65	372.74	1.0355	0.023
0.8609	0.0464	0.0927	372.75	373.03	1.0328	0.074
0.8552	0.0483	0.0965	372.85	373.28	1.0303	0.115



ภาพที่ 3-15 อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

ตาราง 3-31 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) +น้ำ(2) + แคลเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa

x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.009	0.518	360.90	1.258	1.633	0.483	0.475	0.517	0.525	-1.678	1.568
0.009	0.449	360.80	1.383	1.521	0.464	0.447	0.536	0.553	-3.605	3.121
0.010	0.950	368.35	1.017	2.285	0.900	0.904	0.100	0.096	0.392	-3.524
0.010	0.376	360.70	1.603	1.395	0.447	0.431	0.553	0.569	-3.671	2.967
0.011	0.705	362.65	1.095	1.903	0.588	0.601	0.412	0.399	2.224	-3.174
0.011	0.583	361.50	1.192	1.711	0.519	0.516	0.481	0.484	-0.652	0.704
0.011	0.479	361.00	1.343	1.546	0.479	0.466	0.521	0.534	-2.757	2.535
0.011	0.399	360.80	1.540	1.421	0.457	0.440	0.543	0.560	-3.720	3.131
0.011	0.221	360.80	2.706	1.163	0.422	0.419	0.578	0.581	-0.751	0.548
0.011	0.138	360.90	4.396	1.065	0.410	0.419	0.590	0.581	2.218	-1.541
0.012	0.675	362.35	1.118	1.842	0.571	0.580	0.429	0.420	1.589	-2.115
0.012	0.307	360.75	1.964	1.274	0.436	0.427	0.564	0.573	-2.052	1.586
0.012	0.959	368.35	1.019	2.259	0.897	0.921	0.103	0.079	2.692	-23.443
0.013	0.889	366.45	1.033	2.143	0.796	0.810	0.204	0.190	1.744	-6.807
0.013	0.843	365.25	1.045	2.078	0.730	0.748	0.270	0.252	2.512	-6.791
0.014	0.591	361.85	1.203	1.684	0.533	0.530	0.467	0.470	-0.515	0.588
0.014	0.527	361.35	1.286	1.586	0.503	0.497	0.497	0.503	-1.219	1.234
0.014	0.164	360.90	3.811	1.078	0.420	0.431	0.580	0.569	2.579	-1.868
0.014	0.122	360.95	5.112	1.036	0.412	0.428	0.588	0.572	3.910	-2.740
0.015	0.940	367.95	1.027	2.179	0.873	0.891	0.127	0.109	2.052	-14.109
0.015	0.433	361.10	1.489	1.433	0.475	0.464	0.525	0.536	-2.250	2.035
0.016	0.089	361.15	6.880	1.001	0.410	0.423	0.590	0.577	3.222	-2.239
0.017	0.686	362.95	1.133	1.786	0.598	0.603	0.402	0.397	0.860	-1.280
0.017	0.938	368.05	1.030	2.142	0.874	0.890	0.126	0.110	1.778	-12.333
0.018	0.848	365.85	1.055	2.003	0.757	0.764	0.243	0.236	0.951	-2.962
0.018	0.784	364.45	1.080	1.913	0.683	0.693	0.317	0.307	1.416	-3.050
0.018	0.248	360.90	2.570	1.153	0.439	0.445	0.561	0.555	1.413	-1.105
0.018	0.053	361.75	10.025	0.972	0.399	0.387	0.601	0.613	-2.975	1.975
0.018	0.937	368.05	1.032	2.124	0.874	0.889	0.126	0.111	1.701	-11.799
0.019	0.915	367.60	1.039	2.079	0.849	0.856	0.151	0.144	0.835	-4.693
0.019	0.506	361.60	1.360	1.499	0.510	0.504	0.490	0.496	-1.149	1.196
0.019	0.404	361.20	1.620	1.353	0.478	0.470	0.522	0.530	-1.676	1.534
0.019	0.322	361.05	1.992	1.241	0.460	0.454	0.540	0.546	-1.226	1.044
0.020	0.558	361.95	1.282	1.563	0.531	0.531	0.469	0.469	0.041	-0.047
0.020	0.146	361.00	4.509	1.030	0.428	0.450	0.572	0.550	5.081	-3.802
0.020	0.537	361.90	1.314	1.533	0.528	0.521	0.472	0.479	-1.323	1.480
0.021	0.224	361.00	2.925	1.106	0.443	0.455	0.557	0.545	2.625	-2.087
0.021	0.929	368.00	1.039	2.065	0.866	0.879	0.134	0.121	1.532	-9.900
0.023	0.880	367.35	1.056	1.971	0.828	0.813	0.172	0.187	-1.837	8.841
0.023	0.801	365.30	1.086	1.865	0.723	0.721	0.277	0.279	-0.295	0.770
0.023	0.715	363.75	1.136	1.747	0.639	0.642	0.361	0.358	0.427	-0.756
0.023	0.639	362.90	1.200	1.642	0.586	0.586	0.414	0.414	0.075	-0.107
0.023	0.362	361.30	1.833	1.263	0.477	0.474	0.523	0.526	-0.677	0.617
0.023	0.110	361.10	5.994	0.985	0.427	0.451	0.573	0.549	5.623	-4.190
0.023	0.913	367.70	1.046	2.014	0.848	0.858	0.152	0.142	1.150	-6.414
0.024	0.535	362.15	1.343	1.487	0.536	0.532	0.464	0.468	-0.734	0.847
0.024	0.463	361.70	1.493	1.389	0.509	0.503	0.491	0.497	-1.098	1.139
0.024	0.289	361.20	2.296	1.163	0.464	0.467	0.536	0.533	0.664	-0.575
0.024	0.909	367.75	1.049	1.994	0.849	0.853	0.151	0.147	0.497	-2.795
0.024	0.595	362.55	1.254	1.570	0.566	0.563	0.434	0.437	-0.602	0.785
0.026	0.906	367.80	1.053	1.961	0.849	0.851	0.151	0.149	0.275	-1.545
0.027	0.169	361.10	4.062	1.015	0.444	0.471	0.556	0.529	5.983	-4.778
0.027	0.082	361.30	7.734	0.948	0.427	0.443	0.573	0.557	3.846	-2.866
0.028	0.857	367.05	1.074	1.871	0.811	0.792	0.189	0.208	-2.385	10.235
0.028	0.314	361.35	2.164	1.166	0.475	0.482	0.525	0.518	1.377	-1.246
0.028	0.631	363.15	1.230	1.574	0.597	0.594	0.403	0.406	-0.425	0.630
0.029	0.798	365.75	1.103	1.782	0.735	0.729	0.265	0.271	-0.761	2.111
0.029	0.488	362.15	1.468	1.376	0.530	0.527	0.470	0.473	-0.612	0.690
0.029	0.426	361.80	1.639	1.296	0.509	0.507	0.491	0.493	-0.480	0.497
0.029	0.955	369.20	1.044	1.980	0.924	0.925	0.076	0.075	0.155	-1.879

ตาราง 3-31 (ต่อ 1/3)

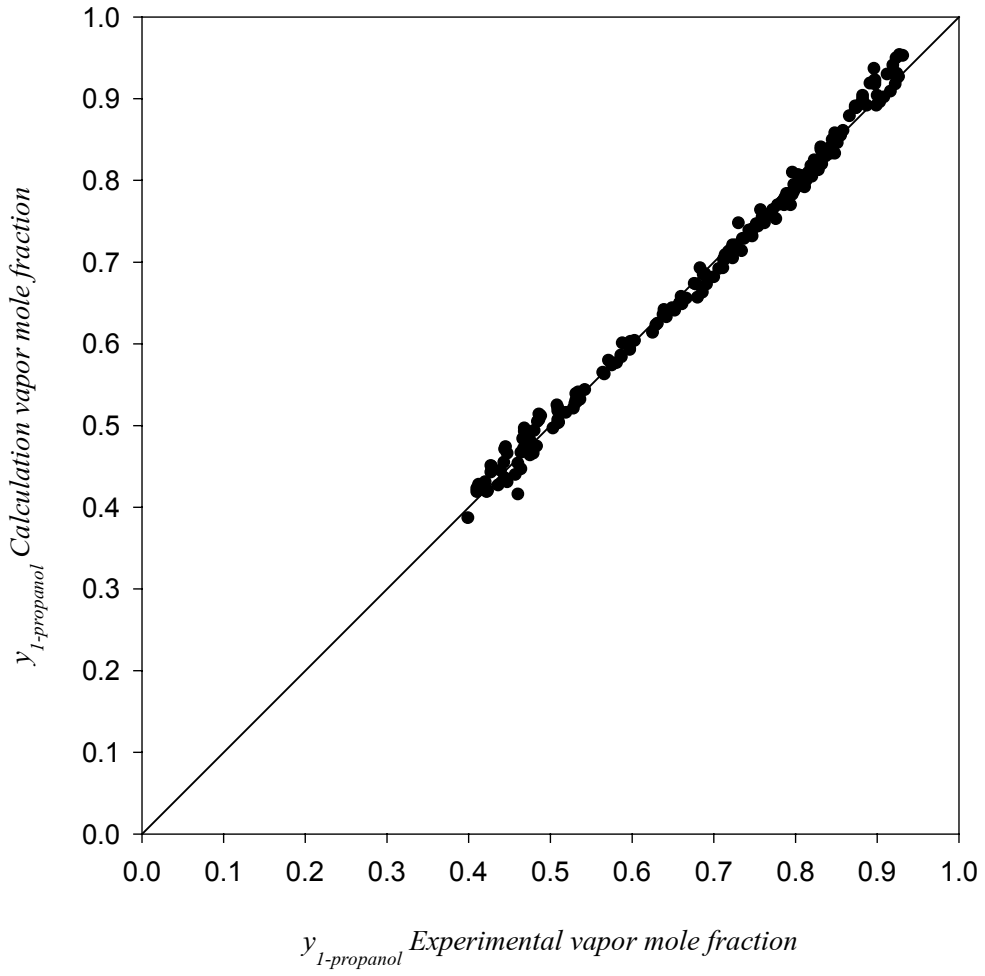
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.030	0.592	362.90	1.287	1.501	0.581	0.577	0.419	0.423	-0.703	0.974
0.030	0.060	361.70	9.578	0.923	0.423	0.420	0.577	0.580	-0.664	0.487
0.031	0.236	361.30	2.938	1.059	0.466	0.484	0.534	0.516	3.783	-3.302
0.032	0.832	366.85	1.092	1.788	0.794	0.770	0.206	0.230	-3.060	11.794
0.032	0.120	361.25	5.733	0.949	0.445	0.474	0.555	0.526	6.449	-5.171
0.032	0.679	364.00	1.196	1.593	0.638	0.636	0.362	0.364	-0.359	0.632
0.033	0.727	364.75	1.158	1.643	0.676	0.674	0.324	0.326	-0.316	0.659
0.033	0.878	367.50	1.074	1.832	0.828	0.824	0.172	0.176	-0.533	2.566
0.033	0.879	367.45	1.074	1.833	0.823	0.825	0.177	0.175	0.218	-1.014
0.033	0.899	367.90	1.067	1.857	0.845	0.850	0.155	0.150	0.566	-3.083
0.034	0.276	361.50	2.535	1.083	0.480	0.494	0.520	0.506	2.880	-2.658
0.035	0.759	365.40	1.141	1.660	0.712	0.704	0.288	0.296	-1.062	2.625
0.035	0.394	361.95	1.802	1.210	0.512	0.515	0.488	0.485	0.495	-0.520
0.035	0.701	364.45	1.185	1.588	0.660	0.658	0.340	0.342	-0.293	0.569
0.036	0.557	363.00	1.367	1.399	0.575	0.574	0.425	0.426	-0.174	0.235
0.036	0.461	362.35	1.579	1.282	0.535	0.536	0.465	0.464	0.134	-0.155
0.036	0.187	361.40	3.799	0.984	0.468	0.493	0.532	0.507	5.268	-4.634
0.036	0.092	361.40	7.178	0.911	0.447	0.466	0.553	0.534	4.225	-3.415
0.036	0.947	369.30	1.055	1.877	0.922	0.918	0.078	0.082	-0.474	5.599
0.037	0.808	366.65	1.115	1.699	0.776	0.753	0.224	0.247	-2.957	10.245
0.038	0.730	365.10	1.169	1.592	0.689	0.686	0.311	0.314	-0.408	0.905
0.039	0.879	367.85	1.083	1.760	0.837	0.832	0.163	0.168	-0.608	3.122
0.040	0.666	364.35	1.233	1.494	0.649	0.644	0.351	0.356	-0.748	1.383
0.040	0.350	362.00	2.050	1.125	0.509	0.518	0.491	0.482	1.738	-1.801
0.040	0.247	361.65	2.900	1.018	0.484	0.505	0.516	0.495	4.425	-4.151
0.040	0.063	361.60	9.236	0.878	0.444	0.436	0.556	0.564	-1.749	1.397
0.042	0.716	365.15	1.191	1.534	0.691	0.683	0.309	0.317	-1.158	2.589
0.042	0.143	361.50	4.972	0.917	0.468	0.497	0.532	0.503	6.251	-5.499
0.042	0.840	367.20	1.106	1.680	0.803	0.793	0.197	0.207	-1.293	5.272
0.042	0.760	365.80	1.156	1.586	0.723	0.718	0.277	0.282	-0.716	1.869
0.043	0.793	366.45	1.135	1.614	0.762	0.748	0.238	0.252	-1.796	5.749
0.043	0.525	363.20	1.457	1.301	0.577	0.576	0.423	0.424	-0.193	0.263
0.043	0.435	362.60	1.697	1.198	0.542	0.544	0.458	0.456	0.431	-0.510
0.044	0.937	369.35	1.068	1.769	0.916	0.909	0.084	0.091	-0.794	8.659
0.045	0.307	362.00	2.364	1.048	0.509	0.522	0.491	0.478	2.603	-2.699
0.045	0.211	361.75	3.437	0.958	0.488	0.512	0.512	0.488	4.958	-4.726
0.045	0.842	367.45	1.110	1.650	0.812	0.799	0.188	0.201	-1.655	7.147
0.045	0.797	366.60	1.136	1.598	0.760	0.755	0.240	0.245	-0.659	2.086
0.046	0.610	364.15	1.320	1.374	0.629	0.623	0.371	0.377	-0.971	1.646
0.046	0.861	367.90	1.102	1.661	0.830	0.820	0.170	0.180	-1.241	6.057
0.047	0.473	363.05	1.599	1.212	0.564	0.565	0.436	0.435	0.167	-0.215
0.048	0.767	366.35	1.162	1.535	0.746	0.733	0.254	0.267	-1.689	4.960
0.048	0.371	362.50	1.985	1.096	0.531	0.539	0.469	0.461	1.564	-1.771
0.048	0.085	361.60	7.509	0.852	0.467	0.472	0.533	0.528	1.176	-1.030
0.048	0.859	367.80	1.106	1.638	0.832	0.820	0.168	0.180	-1.462	7.238
0.049	0.267	362.10	2.737	0.987	0.508	0.525	0.492	0.475	3.365	-3.475
0.049	0.172	361.75	4.207	0.905	0.486	0.514	0.514	0.486	5.686	-5.376
0.049	0.851	367.85	1.111	1.619	0.826	0.813	0.174	0.187	-1.618	7.682
0.050	0.779	366.55	1.157	1.529	0.752	0.747	0.248	0.253	-0.730	2.213
0.051	0.051	361.85	9.970	0.823	0.460	0.416	0.540	0.584	-9.551	8.136
0.051	0.880	368.35	1.099	1.631	0.851	0.846	0.149	0.154	-0.640	3.654
0.052	0.341	362.65	2.167	1.042	0.534	0.541	0.466	0.459	1.364	-1.563
0.052	0.842	367.80	1.120	1.580	0.820	0.807	0.180	0.193	-1.585	7.220
0.053	0.732	366.25	1.199	1.450	0.734	0.714	0.266	0.286	-2.777	7.662
0.053	0.542	364.00	1.456	1.243	0.603	0.604	0.397	0.396	0.083	-0.126
0.053	0.131	361.85	5.351	0.857	0.486	0.507	0.514	0.493	4.389	-4.150
0.053	0.806	367.10	1.143	1.530	0.784	0.774	0.216	0.226	-1.241	4.504
0.054	0.927	369.40	1.082	1.651	0.908	0.902	0.092	0.098	-0.634	6.261
0.054	0.763	366.50	1.175	1.475	0.743	0.739	0.257	0.261	-0.523	1.513
0.055	0.836	367.90	1.128	1.545	0.820	0.805	0.180	0.195	-1.881	8.568
0.056	0.625	364.90	1.324	1.310	0.658	0.650	0.342	0.350	-1.258	2.420
0.056	0.811	367.40	1.144	1.509	0.796	0.783	0.204	0.217	-1.690	6.592
0.059	0.676	365.55	1.266	1.340	0.687	0.685	0.313	0.315	-0.322	0.707
0.059	0.837	367.90	1.132	1.509	0.816	0.810	0.184	0.190	-0.739	3.278
0.059	0.861	368.40	1.118	1.534	0.848	0.833	0.152	0.167	-1.731	9.657

ตาราง 3-31 (ต่อ 2/3)

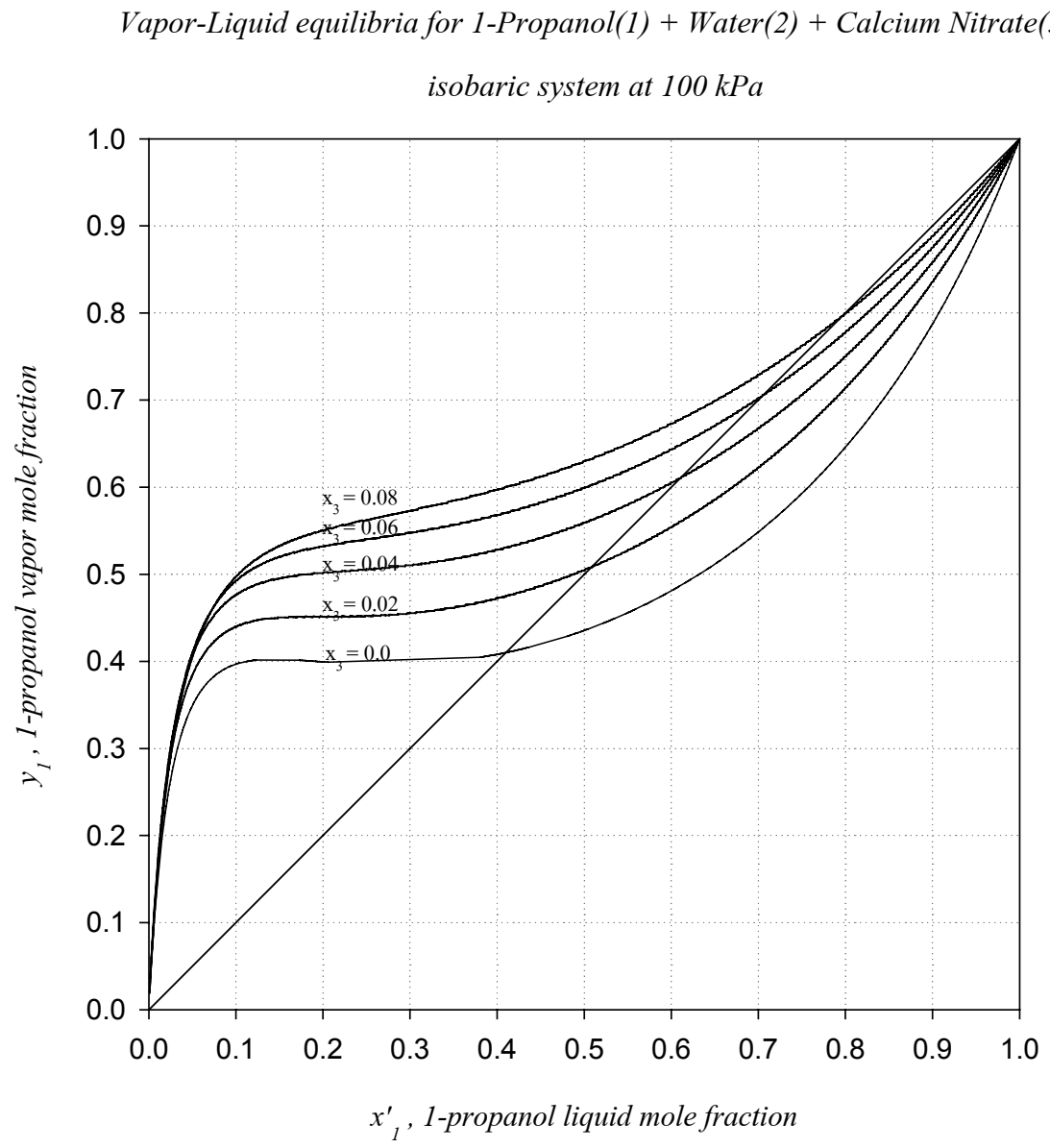
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.059	0.741	366.50	1.201	1.409	0.737	0.729	0.263	0.271	-1.048	2.936
0.060	0.705	366.25	1.237	1.363	0.723	0.705	0.277	0.295	-2.466	6.437
0.060	0.482	363.95	1.615	1.134	0.597	0.593	0.403	0.407	-0.689	1.021
0.062	0.823	367.95	1.144	1.469	0.813	0.800	0.187	0.200	-1.562	6.792
0.062	0.724	366.40	1.221	1.367	0.727	0.721	0.273	0.279	-0.794	2.113
0.063	0.568	364.80	1.430	1.201	0.642	0.633	0.358	0.367	-1.443	2.588
0.064	0.916	369.55	1.096	1.546	0.903	0.896	0.097	0.104	-0.824	7.666
0.065	0.429	363.85	1.793	1.052	0.587	0.584	0.413	0.416	-0.441	0.626
0.065	0.710	366.40	1.239	1.330	0.721	0.716	0.279	0.284	-0.722	1.865
0.066	0.672	366.20	1.282	1.285	0.711	0.693	0.289	0.307	-2.557	6.291
0.066	0.637	365.50	1.326	1.249	0.678	0.673	0.322	0.327	-0.807	1.699
0.066	0.767	367.15	1.189	1.379	0.766	0.758	0.234	0.242	-1.009	3.304
0.067	0.780	367.40	1.180	1.384	0.778	0.770	0.222	0.230	-1.073	3.761
0.067	0.823	368.00	1.149	1.427	0.811	0.806	0.189	0.194	-0.663	2.843
0.068	0.694	366.40	1.260	1.292	0.714	0.709	0.286	0.291	-0.639	1.596
0.070	0.850	368.55	1.135	1.430	0.843	0.833	0.157	0.167	-1.198	6.434
0.071	0.591	365.50	1.403	1.171	0.666	0.656	0.334	0.344	-1.504	2.999
0.071	0.520	364.80	1.542	1.104	0.631	0.625	0.369	0.375	-0.983	1.682
0.071	0.909	369.60	1.104	1.479	0.899	0.892	0.101	0.108	-0.759	6.752
0.073	0.636	366.25	1.338	1.203	0.700	0.682	0.300	0.318	-2.578	6.016
0.074	0.730	367.10	1.231	1.285	0.748	0.741	0.252	0.259	-0.924	2.743
0.076	0.814	368.05	1.164	1.349	0.803	0.807	0.197	0.193	0.485	-1.976
0.077	0.468	364.80	1.684	1.023	0.625	0.614	0.375	0.386	-1.701	2.836
0.077	0.938	370.15	1.094	1.458	0.926	0.927	0.074	0.073	0.058	-0.726
0.078	0.554	365.55	1.478	1.095	0.661	0.649	0.339	0.351	-1.839	3.586
0.078	0.825	368.35	1.158	1.345	0.819	0.818	0.181	0.182	-0.128	0.580
0.078	0.839	368.70	1.149	1.359	0.837	0.830	0.163	0.170	-0.842	4.324
0.080	0.753	367.60	1.215	1.265	0.772	0.764	0.228	0.236	-1.032	3.494
0.080	0.851	368.90	1.142	1.356	0.845	0.842	0.155	0.158	-0.335	1.829
0.081	0.599	366.35	1.401	1.120	0.691	0.673	0.309	0.327	-2.533	5.665
0.081	0.672	366.80	1.300	1.185	0.718	0.713	0.282	0.287	-0.730	1.858
0.081	0.725	367.35	1.242	1.233	0.752	0.746	0.248	0.254	-0.814	2.469
0.081	0.743	367.70	1.225	1.250	0.767	0.758	0.233	0.242	-1.166	3.839
0.084	0.517	365.60	1.562	1.030	0.652	0.641	0.348	0.359	-1.624	3.043
0.084	0.862	369.20	1.138	1.337	0.855	0.855	0.145	0.145	-0.002	0.013
0.086	0.760	368.10	1.213	1.234	0.785	0.775	0.215	0.225	-1.252	4.571
0.087	0.560	366.45	1.474	1.053	0.686	0.663	0.314	0.337	-3.374	7.372
0.089	0.938	370.50	1.100	1.370	0.924	0.931	0.076	0.069	0.764	-9.284
0.091	0.839	369.20	1.156	1.271	0.842	0.840	0.158	0.160	-0.213	1.135
0.092	0.721	367.90	1.253	1.164	0.759	0.755	0.241	0.245	-0.539	1.697
0.092	0.795	368.55	1.188	1.226	0.806	0.806	0.194	0.194	0.036	-0.150
0.092	0.779	368.60	1.201	1.214	0.802	0.794	0.198	0.206	-0.944	3.825
0.093	0.627	367.10	1.367	1.078	0.712	0.702	0.288	0.298	-1.423	3.519
0.094	0.775	368.60	1.205	1.198	0.800	0.793	0.200	0.207	-0.836	3.342
0.095	0.523	366.55	1.553	0.983	0.680	0.657	0.320	0.343	-3.441	7.313
0.097	0.687	367.75	1.292	1.107	0.744	0.739	0.256	0.261	-0.658	1.912
0.099	0.936	370.70	1.105	1.302	0.921	0.932	0.079	0.068	1.239	-14.442
0.099	0.796	369.10	1.190	1.187	0.820	0.813	0.180	0.187	-0.892	4.063
0.100	0.764	368.75	1.217	1.155	0.800	0.791	0.200	0.209	-1.155	4.619
0.101	0.688	368.10	1.292	1.088	0.754	0.744	0.246	0.256	-1.389	4.259
0.103	0.891	370.40	1.129	1.242	0.887	0.892	0.113	0.108	0.565	-4.436
0.104	0.584	367.40	1.436	0.990	0.706	0.692	0.294	0.308	-1.935	4.648
0.106	0.823	369.60	1.173	1.170	0.837	0.838	0.163	0.162	0.118	-0.604
0.109	0.824	369.60	1.172	1.154	0.831	0.841	0.169	0.159	1.171	-5.757
0.110	0.759	369.15	1.223	1.099	0.798	0.795	0.202	0.205	-0.322	1.271
0.111	0.929	370.70	1.110	1.224	0.912	0.930	0.088	0.070	1.926	-19.963
0.112	0.649	368.50	1.340	1.006	0.747	0.732	0.253	0.268	-2.022	5.971
0.113	0.953	371.20	1.099	1.232	0.931	0.953	0.069	0.047	2.329	-31.429
0.113	0.895	370.40	1.128	1.187	0.882	0.900	0.118	0.100	2.048	-15.307
0.115	0.739	369.25	1.242	1.060	0.796	0.786	0.204	0.214	-1.214	4.735
0.115	0.940	370.95	1.105	1.210	0.919	0.941	0.081	0.059	2.382	-27.028
0.116	0.845	370.30	1.159	1.135	0.858	0.861	0.142	0.139	0.335	-2.024
0.119	0.812	369.90	1.182	1.095	0.831	0.838	0.169	0.162	0.861	-4.232
0.121	0.953	371.40	1.100	1.188	0.927	0.954	0.073	0.046	2.947	-37.423
0.121	0.896	370.80	1.129	1.147	0.882	0.904	0.118	0.096	2.510	-18.757

ตาราง 3-31 (ต่อ 3/3)

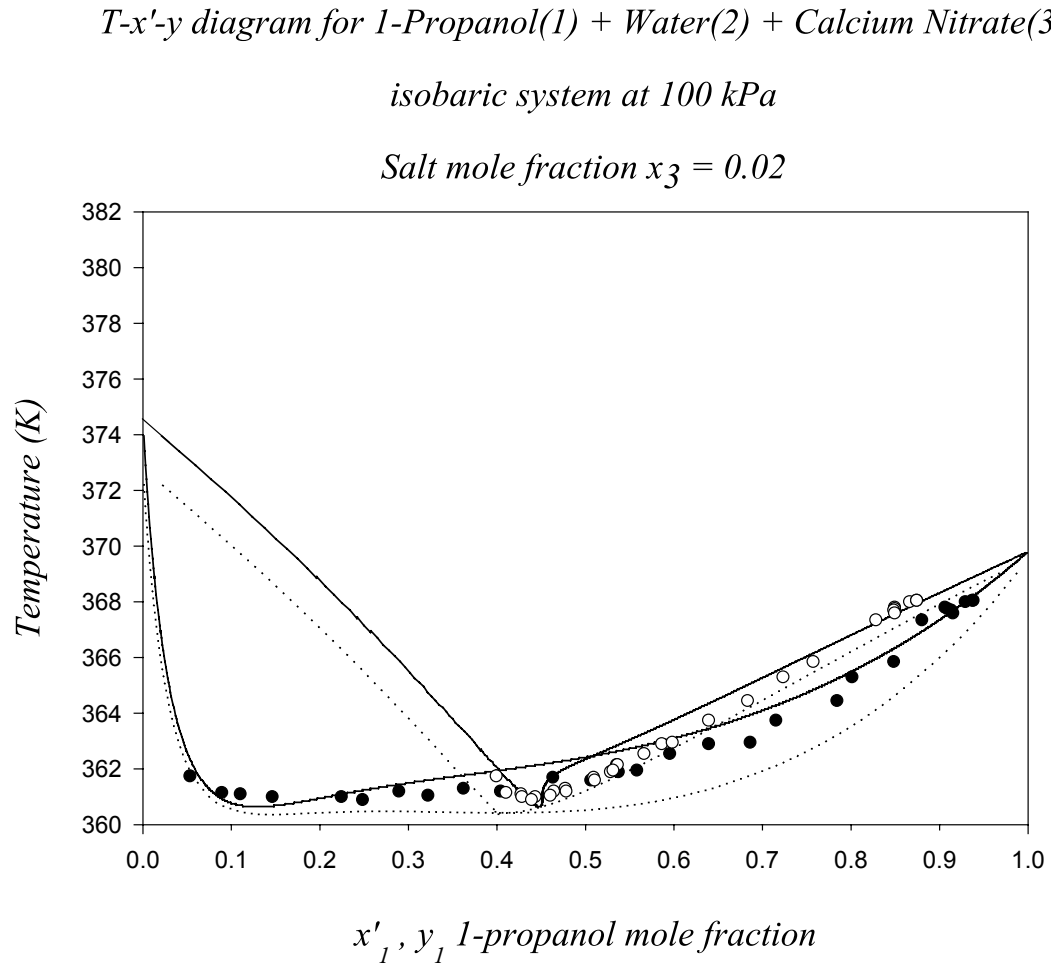
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.122	0.726	369.50	1.254	1.019	0.789	0.784	0.211	0.216	-0.696	2.603
0.124	0.882	370.70	1.137	1.121	0.880	0.894	0.120	0.106	1.578	-11.573
0.125	0.729	369.75	1.251	1.008	0.798	0.787	0.202	0.213	-1.325	5.234
0.128	0.711	369.30	1.267	0.981	0.787	0.779	0.213	0.221	-1.018	3.760
0.128	0.915	371.10	1.118	1.125	0.897	0.923	0.103	0.077	2.843	-24.758
0.129	0.873	370.95	1.142	1.092	0.874	0.889	0.126	0.111	1.698	-11.775
0.130	0.946	371.70	1.103	1.139	0.923	0.950	0.077	0.050	2.900	-34.760
0.130	0.791	370.35	1.197	1.030	0.834	0.830	0.166	0.170	-0.465	2.336
0.132	0.690	370.10	1.288	0.954	0.786	0.770	0.214	0.230	-2.087	7.665
0.135	0.793	370.70	1.195	1.011	0.833	0.834	0.167	0.166	0.151	-0.754
0.136	0.907	371.55	1.123	1.084	0.897	0.918	0.103	0.082	2.378	-20.712
0.141	0.867	371.50	1.144	1.036	0.873	0.889	0.127	0.111	1.843	-12.671
0.142	0.905	371.60	1.122	1.056	0.891	0.919	0.109	0.081	3.093	-25.282
0.144	0.927	371.80	1.111	1.062	0.896	0.937	0.104	0.063	4.545	-39.159



ภาพที่ 3-16 ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ 1-โพรพานอล(1) ที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดันคงที่ 100 kPa



ภาพที่ 3-17 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa ที่ความเข้มข้นของเกลือมีเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.0 0.02 0.04 0.06 และ 0.08 เมื่อ —— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC



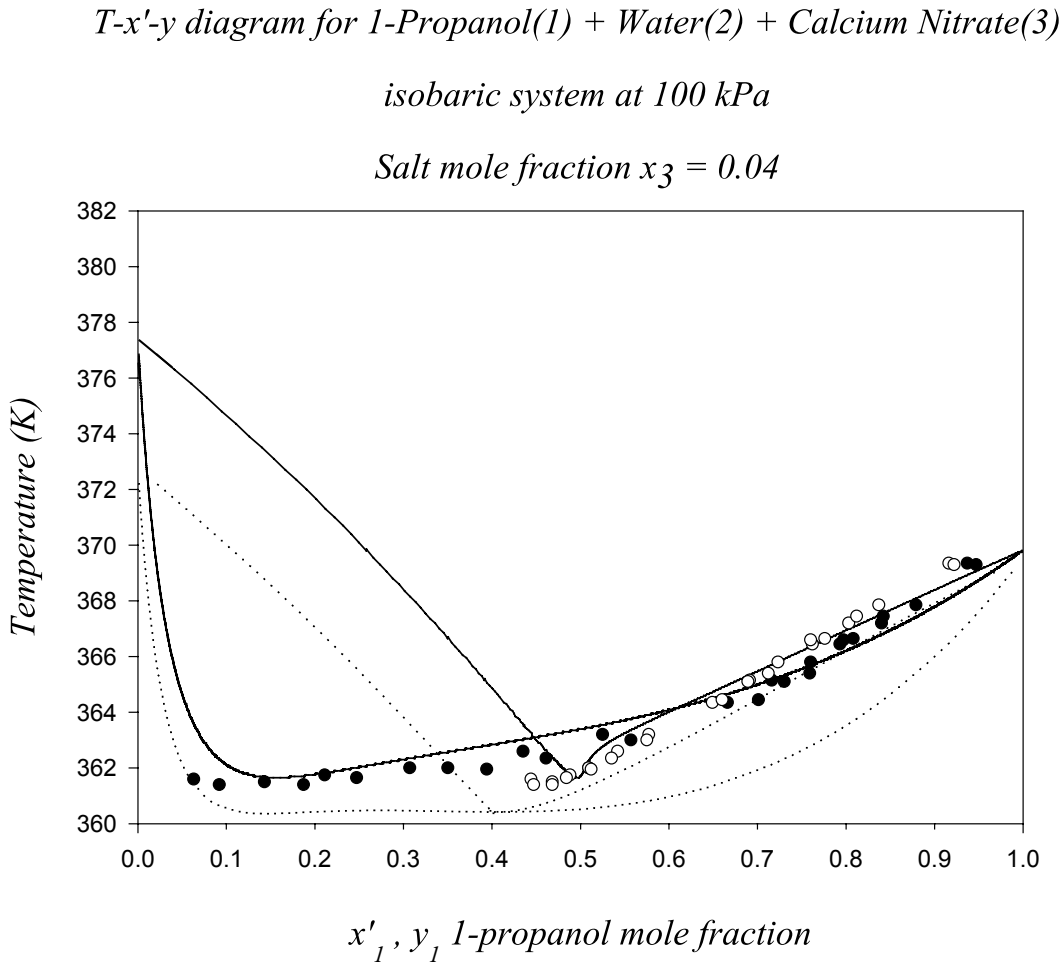
ภาพที่ 3-18 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.02

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



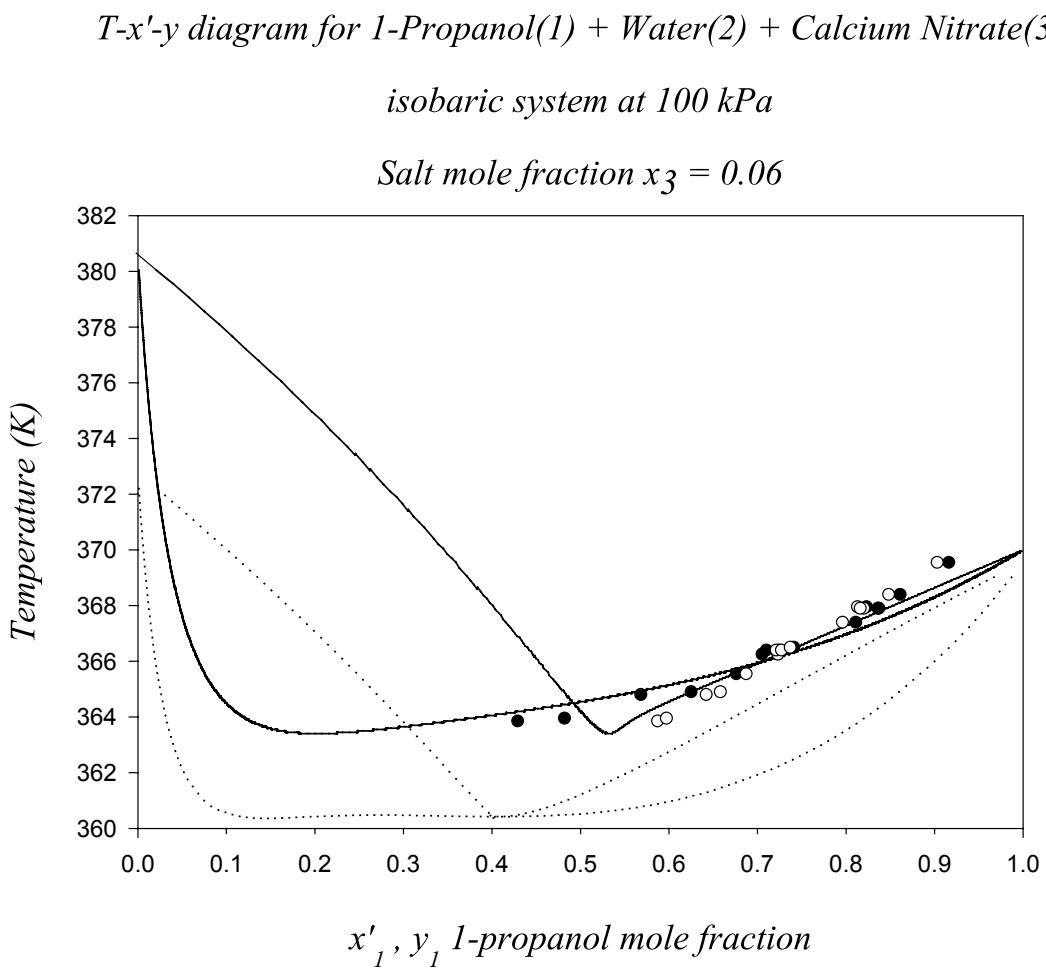
ภาพที่ 3-19 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.04

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



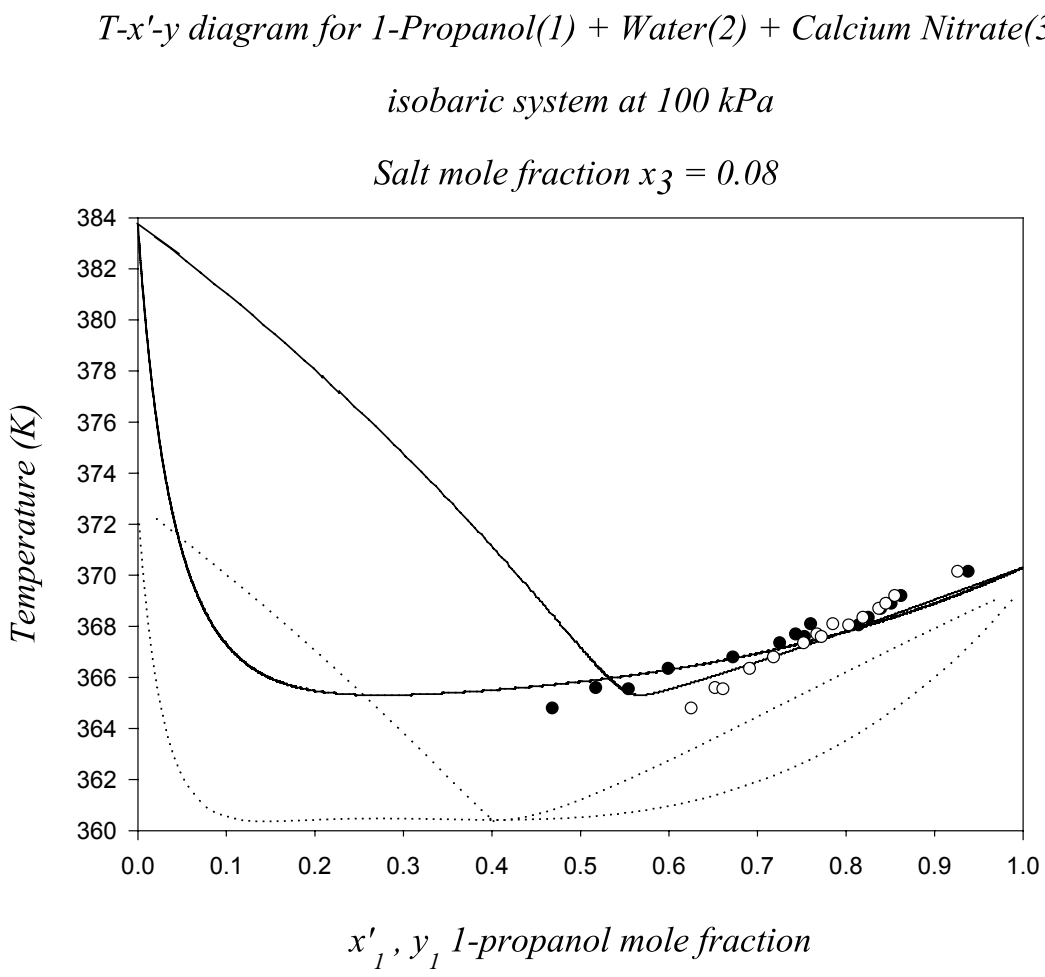
ภาพที่ 3-20 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.06

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



ภาพที่ 3-21 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.08

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ

8. ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ ใช้ข้อมูลผลการทดลองจากวารสารตีพิมพ์เรื่อง

Isobaric Vapor-Liquid Equilibria for 1-Propanol + Water + Lithium Nitrate at 100 kPa (Vercher, Vazquez and Martinez-Andreu, 2002)

ข้อมูลสมดุลระหว่างวัฏภาคจากผลการทดลอง

ในการศึกษาใช้ข้อมูลจากผลการทดลองสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ ได้แก่ ระบบน้ำ(1) + ลิเทียมไนเตรท(2) ที่ความดันคงที่ 100 kPa และระบบ 1-โพรพานอล(1) + ลิเทียมไนเตรท(2) ที่ความดันคงที่ 100 kPa และระบบตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ได้แก่ระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดันคงที่ 100 kPa ซึ่งค่าพารามิเตอร์โครงสร้าง (r_i, q_i) ขององค์ประกอบและค่าคงที่ของสมการ Antoine แสดงในตาราง 3-32 ข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ และความดันของระบบ $(P_{\text{Total,exp}})$ ดังแสดงในตาราง 3-36 และตาราง 3-37 สำหรับข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ และความดัน $(P_{\text{Total,exp}})$ ของระบบ ดังแสดงในตาราง 3-38

ผลการหาค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

ด้วยการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อกำหนดค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC โดยพิจารณาให้ไอออนอิสระที่เกิดจากการแตกตัวของเกลือเป็นองค์ประกอบที่ต่างชนิดกัน ดังนั้นสำหรับระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ จะพิจารณาให้เป็นระบบสามองค์ประกอบได้แก่ระบบ น้ำ(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa และระบบ 1-โพรพานอล(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับไอออน และพารามิเตอร์ระหว่างไอออนกับไอออน แสดงในตาราง 3-33 และตาราง 3-34 สำหรับระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ จะพิจารณาให้เป็นระบบสี่องค์ประกอบซึ่งประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไอออน(3) +

ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับตัวทำละลาย ตัวทำละลายกับไอออน และระหว่างไอออนกับไอออน แสดงในตาราง 3-35

ผลการคำนวณอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ

เนื่องจากเกลือไม่สามารถระเหยได้ในสภาวะปกติและระบบประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว ดังนั้นค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลายจะมีค่าเท่ากับ 1.00 เสมอ และความดันของระบบมีค่าคงที่ จึงกำหนดให้ใช้อุณหภูมิของระบบเป็นตัวแปรตามในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นและใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ร่วมกับค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) ของตัวทำละลาย อุณหภูมิของระบบ (T_{cal}) ได้จากความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีกับค่าความดันไออิ่มตัวของตัวทำละลาย ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-36 และตาราง 3-37 สำหรับอุณหภูมิจากข้อมูลผลการทดลองและอุณหภูมิจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC แสดงในภาพที่ 3-22 และภาพที่ 3-23 จากภาพจะเห็นว่าอุณหภูมิของระบบที่ได้จากผลการคำนวณและจากผลการทดลองมีค่าใกล้เคียงกันและเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าต่ำ

ผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ

ด้วยการใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC และค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นจากระบบเดียวกัน เพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) ของตัวทำละลาย และค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลาย ($y_{i,\mathrm{cal}}$) ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดันคงที่ 100 kPa ในการพิจารณาสมดุลระหว่างวัฏภาคจะพิจารณาเฉพาะองค์ประกอบที่อยู่ในทุกวัฏภาคที่ปรากฏในระบบทั้งวัฏภาคของเหลวและวัฏภาคไอ โดยปริมาณขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายในวัฏภาคของเหลวแสดงในพจน์ของค่าเศษส่วนโมลโดยไม่รวมจำนวนโมลของไอออน (x'_i, x'_j) ใช้แสดงค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลาย i และ j ตามลำดับ ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-38 ประกอบด้วย ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลาย ($x'_{i,\mathrm{exp}}$) และตัวถูกละลาย (x_{salt}) ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลาย ($y_{i,\mathrm{cal}}$) ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของตัวทำละลาย ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) อุณหภูมิ (T_{exp}) ของระบบสำหรับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ 1-โพรพานอล ที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจาก

การคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC แสดงในภาพที่ 3-24 จากภาพจะเห็นว่าค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและผลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC มีค่าใกล้เคียงกัน และเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าต่ำ

เมื่อใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นข้อมูลผลการทดลอง ร่วมกับการเปลี่ยนแปลงค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายให้มีค่าตั้งแต่ 0.00 ถึง 1.00 และกำหนดให้ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของเกลือมีค่าคงที่ได้แก่ ที่ 0.02 0.04 0.06 0.08 0.10 และ 0.12 เพื่อคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบ ของ 1-โพรพานอล(1) แสดงในภาพที่ 3-25 จากภาพจะเห็นว่าเมื่อปริมาณของเกลือเปลี่ยนแปลงจะทำให้ตำแหน่งค่าเศษส่วนโมลที่เกิดอะซีโอโทรปเปลี่ยนแปลงไปโดยเมื่อปริมาณเกลือเพิ่มขึ้นจะทำให้อะซีโอโทรปของ 1-โพรพานอล(1) เปลี่ยนแปลงไปในทิศทางที่ค่าเศษส่วนโมลเพิ่มขึ้น อย่างไรก็ตามเมื่อปริมาณเกลือในวัฏภาคของเหลวมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.12 ก็ยังไม่สามารถกำจัดอะซีโอโทรปได้ สำหรับสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดันคงที่ 100 kPa แสดงในภาพที่ 3-26 ถึง ภาพที่ 3-31 โดยเปรียบเทียบกับข้อมูลที่ได้จากการทดลองที่มีค่าเศษส่วนโมลของเกลืออยู่ในช่วง 0.02 ถึง 0.12 และเปรียบเทียบกับผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคของระบบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 100 kPa จากภาพจะเห็นว่าสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบที่ได้จากผลการคำนวณมีลักษณะเหมือนกับผลการทดลอง

ตาราง 3-32 ค่าคงที่ของสมการ Antoine และพารามิเตอร์โครงสร้างของ 1-โพรพานอล น้ำ ลิเทียมไอออนและไนเตรทไอออน

		ค่าคงที่ Antoine[1]			พารามิเตอร์โครงสร้าง[2]	
องค์ประกอบ	ช่วงอุณหภูมิ(K)	A	B	C	r	q
1-Propanol	320-375	15.8040	3300.22	-75.19	2.7799	2.5120
Water	320-375	16.3144	3845.02	-44.42	0.920	1.400
Lithium ion	-	-	-	-	1.00	1.00
Nitrate ion	-	-	-	-	1.64	1.60

ที่มา : [1](Vercher, Rojo and Martinez-Andreu, 1999) [2](Sander, Fredenslund and Rasmussen, 1986)

ตาราง 3-33 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) A_{ij} (cal/mol) 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

ตาราง 3-34 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa

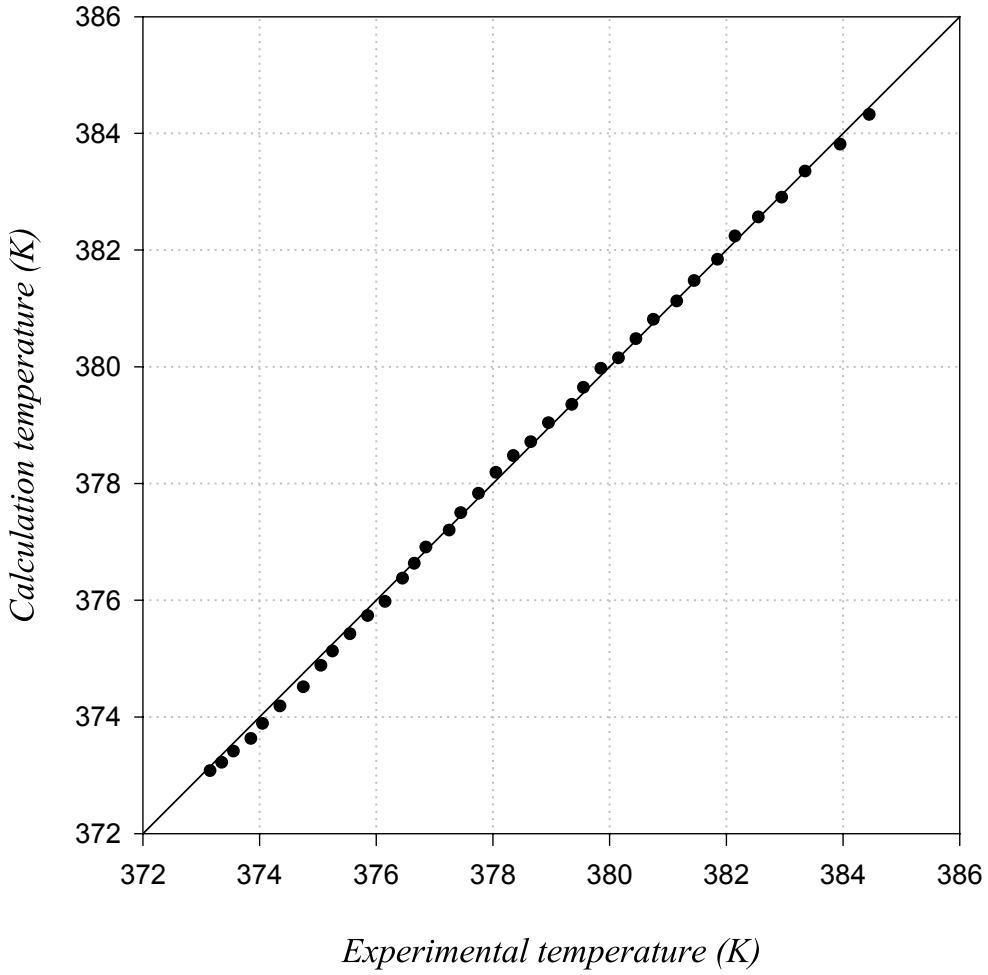
Component	1-Propanol(1)	Lithium ion(2)	Nitrate ion(3)
1-Propanol(1)	A_{11} = 0.000	A_{12} = 303.584	A_{13} = 1022.502
Lithium ion(2)	A_{21} = -1356.847	A_{22} = 0.000	A_{23} = -666.749
Nitrate ion(3)	A_{31} = -1303.348	A_{32} = -1332.167	A_{33} = 0.000

ตาราง 3-35 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) A_{ij} (cal/mol) 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

ตาราง 3-36 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

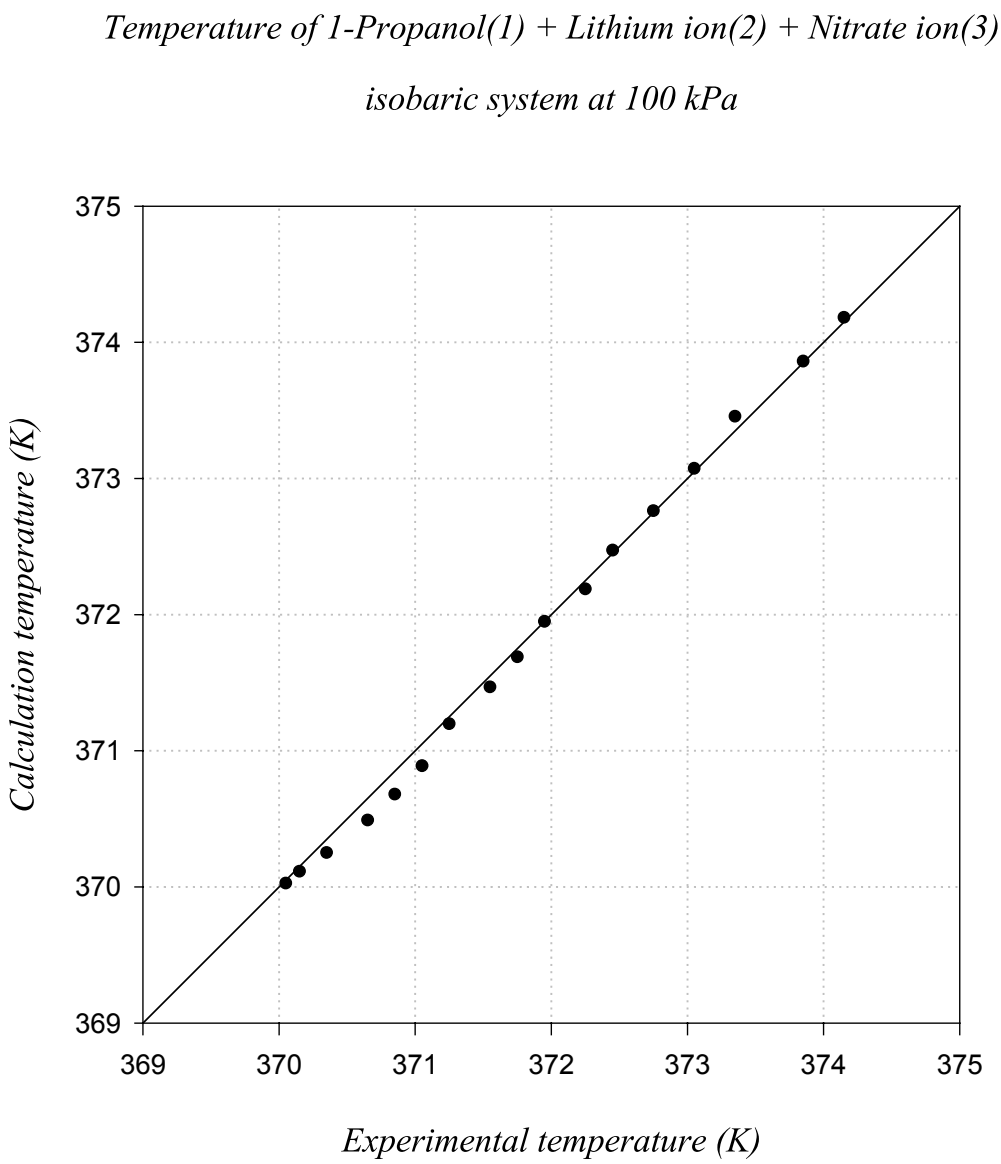
$x_{1,\exp}$	$x_{2,\exp}$	$x_{3,\exp}$	$T_{\exp}(K)$	$T_{\text{cal}}(K)$	$\gamma_{1,\text{cal}}$	%Err T
0.9918	0.0041	0.0041	373.15	373.08	0.9982	-0.020
0.9886	0.0057	0.0057	373.35	373.22	0.9964	-0.035
0.9848	0.0076	0.0076	373.55	373.41	0.9933	-0.037
0.9810	0.0095	0.0095	373.85	373.63	0.9895	-0.059
0.9769	0.0116	0.0116	374.05	373.89	0.9847	-0.044
0.9725	0.0138	0.0138	374.35	374.19	0.9787	-0.044
0.9680	0.0160	0.0160	374.75	374.52	0.9718	-0.063
0.9633	0.0184	0.0184	375.05	374.88	0.9640	-0.045
0.9603	0.0199	0.0199	375.25	375.13	0.9587	-0.033
0.9568	0.0216	0.0216	375.55	375.42	0.9523	-0.034
0.9532	0.0234	0.0234	375.85	375.74	0.9454	-0.030
0.9505	0.0248	0.0248	376.15	375.98	0.9401	-0.046
0.9462	0.0269	0.0269	376.45	376.38	0.9314	-0.020
0.9435	0.0283	0.0283	376.65	376.63	0.9258	-0.005
0.9406	0.0297	0.0297	376.85	376.91	0.9198	0.016
0.9376	0.0312	0.0312	377.25	377.20	0.9134	-0.013
0.9346	0.0327	0.0327	377.45	377.50	0.9070	0.013
0.9313	0.0344	0.0344	377.75	377.83	0.8998	0.021
0.9278	0.0361	0.0361	378.05	378.19	0.8922	0.037
0.9250	0.0375	0.0375	378.35	378.48	0.8860	0.034
0.9227	0.0387	0.0387	378.65	378.71	0.8809	0.017
0.9196	0.0402	0.0402	378.95	379.04	0.8741	0.024
0.9166	0.0417	0.0417	379.35	379.36	0.8674	0.001
0.9139	0.0431	0.0431	379.55	379.65	0.8614	0.026
0.9109	0.0446	0.0446	379.85	379.97	0.8547	0.032
0.9092	0.0454	0.0454	380.15	380.15	0.8510	0.000
0.9062	0.0469	0.0469	380.45	380.48	0.8443	0.008
0.9032	0.0484	0.0484	380.75	380.81	0.8377	0.016
0.9003	0.0499	0.0499	381.15	381.13	0.8313	-0.006
0.8972	0.0514	0.0514	381.45	381.48	0.8245	0.006
0.8939	0.0531	0.0531	381.85	381.84	0.8173	-0.002
0.8904	0.0548	0.0548	382.15	382.24	0.8096	0.024
0.8875	0.0563	0.0563	382.55	382.57	0.8034	0.004
0.8845	0.0578	0.0578	382.95	382.90	0.7969	-0.012
0.8806	0.0597	0.0597	383.35	383.35	0.7885	0.001
0.8765	0.0618	0.0618	383.95	383.82	0.7798	-0.035
0.8721	0.0640	0.0640	384.45	384.32	0.7706	-0.033



ภาพที่ 3-22 อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

ตาราง 3-37 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

$x_{1,\exp}$	$x_{2,\exp}$	$x_{3,\exp}$	$T_{\exp}(K)$	$T_{\text{cal}}(K)$	$\gamma_{1,\text{cal}}$	%Err T
0.9903	0.0049	0.0049	370.05	370.03	1.0043	-0.006
0.9847	0.0076	0.0076	370.15	370.12	1.0067	-0.010
0.9771	0.0115	0.0115	370.35	370.25	1.0092	-0.026
0.9661	0.0170	0.0170	370.65	370.49	1.0115	-0.043
0.9586	0.0207	0.0207	370.85	370.68	1.0121	-0.046
0.9512	0.0244	0.0244	371.05	370.89	1.0120	-0.043
0.9413	0.0294	0.0294	371.25	371.20	1.0109	-0.014
0.9333	0.0334	0.0334	371.55	371.47	1.0091	-0.022
0.9272	0.0364	0.0364	371.75	371.69	1.0074	-0.016
0.9204	0.0398	0.0398	371.95	371.95	1.0050	0.000
0.9144	0.0428	0.0428	372.25	372.19	1.0026	-0.017
0.9076	0.0462	0.0462	372.45	372.47	0.9994	0.006
0.9009	0.0496	0.0496	372.75	372.76	0.9960	0.004
0.8940	0.0530	0.0530	373.05	373.07	0.9921	0.007
0.8859	0.0571	0.0571	373.35	373.46	0.9872	0.028
0.8775	0.0613	0.0613	373.85	373.86	0.9816	0.003
0.8711	0.0645	0.0645	374.15	374.18	0.9772	0.009



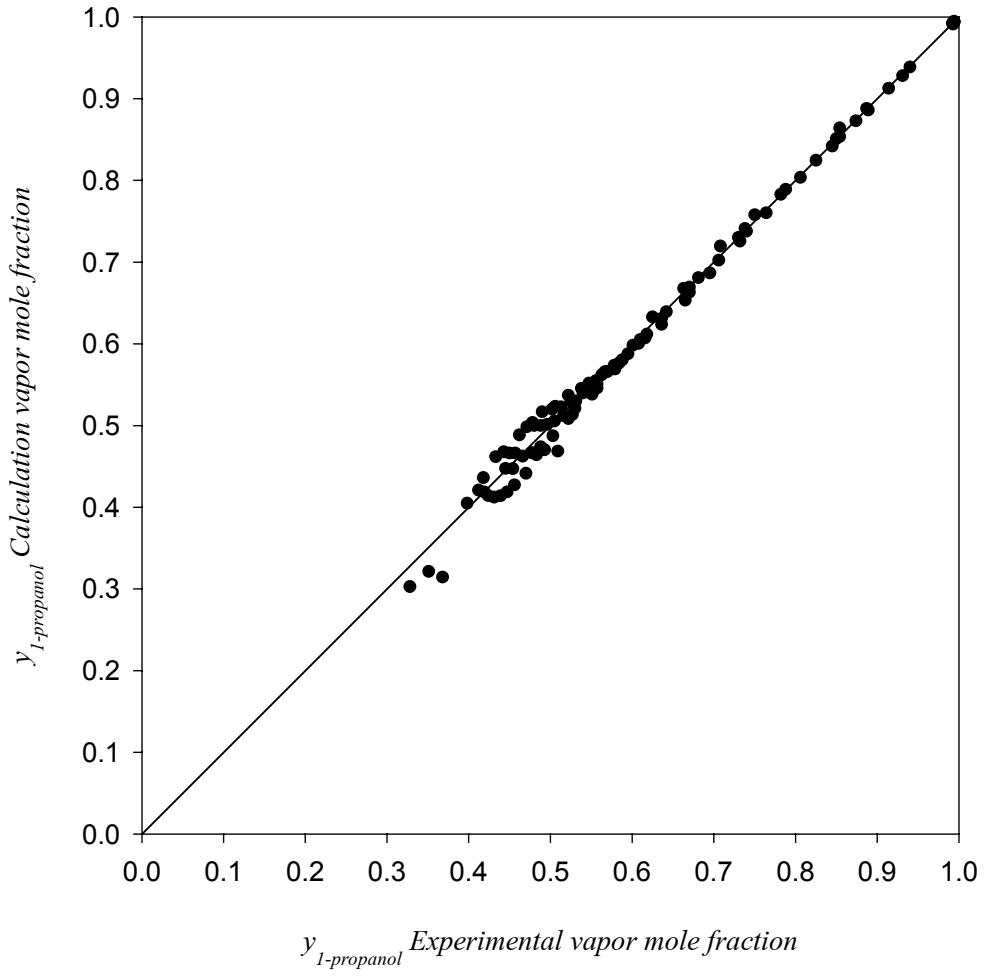
ภาพที่ 3-23 อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa

ตาราง 3-38 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa

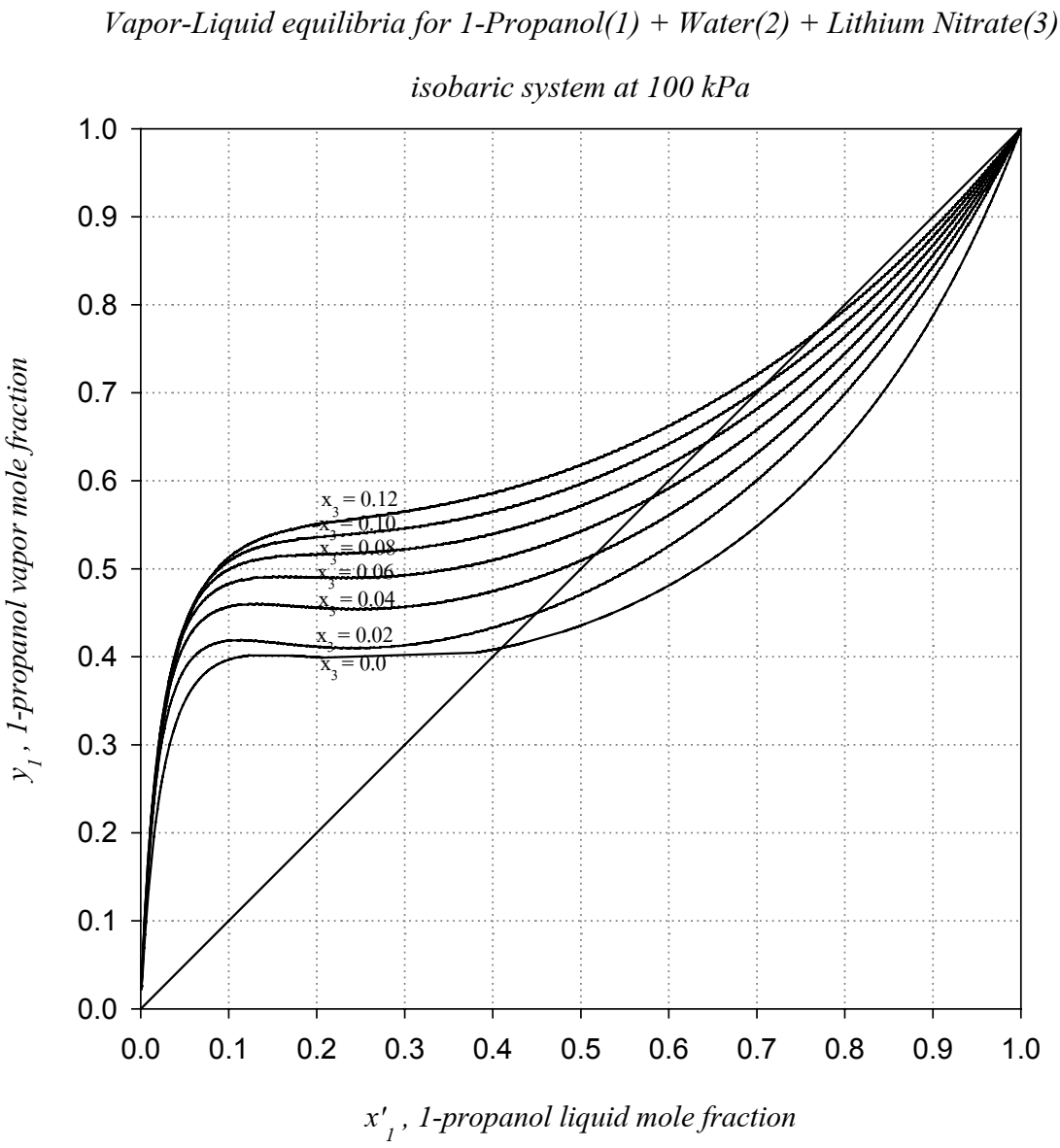
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.020	0.024	364.55	15.8136	0.9848	0.328	0.303	0.672	0.697	-7.690	3.753
0.020	0.066	361.75	8.8473	1.0055	0.398	0.405	0.602	0.595	1.710	-1.131
0.021	0.110	361.35	5.5956	1.0401	0.412	0.421	0.588	0.579	2.153	-1.509
0.021	0.151	361.15	4.0129	1.0832	0.419	0.419	0.581	0.581	-0.108	0.078
0.021	0.196	361.05	3.0198	1.1372	0.424	0.414	0.576	0.586	-2.307	1.698
0.021	0.240	361.05	2.4296	1.1945	0.431	0.412	0.569	0.588	-4.334	3.283
0.021	0.284	361.05	2.0451	1.2548	0.439	0.414	0.561	0.586	-5.725	4.480
0.021	0.325	361.05	1.7971	1.3129	0.447	0.419	0.553	0.581	-6.360	5.141
0.021	0.370	361.15	1.6020	1.3778	0.456	0.427	0.544	0.573	-6.295	5.277
0.021	0.421	361.25	1.4447	1.4520	0.470	0.442	0.530	0.558	-6.061	5.375
0.021	0.495	361.55	1.2913	1.5597	0.493	0.470	0.507	0.530	-4.633	4.505
0.021	0.569	361.85	1.1923	1.6657	0.522	0.508	0.478	0.492	-2.618	2.859
0.022	0.653	362.55	1.1221	1.7747	0.567	0.566	0.433	0.434	-0.194	0.255
0.022	0.733	363.55	1.0762	1.8814	0.625	0.633	0.375	0.367	1.260	-2.100
0.021	0.817	365.15	1.0433	1.9981	0.708	0.720	0.292	0.280	1.644	-3.987
0.021	0.923	367.85	1.0202	2.1264	0.854	0.864	0.146	0.136	1.194	-6.983
0.022	0.996	370.35	1.0117	2.1998	0.992	0.992	0.008	0.008	0.021	-2.544
0.043	0.024	366.15	16.3053	0.9341	0.351	0.321	0.649	0.679	-8.446	4.568
0.044	0.061	362.35	10.2503	0.9428	0.418	0.436	0.582	0.564	4.338	-3.115
0.045	0.094	362.05	7.2578	0.9606	0.433	0.462	0.567	0.538	6.649	-5.077
0.045	0.136	361.95	5.0734	0.9943	0.443	0.468	0.557	0.532	5.594	-4.449
0.045	0.179	361.95	3.7887	1.0349	0.450	0.466	0.550	0.534	3.602	-2.947
0.046	0.215	361.95	3.1155	1.0687	0.457	0.466	0.543	0.534	2.038	-1.715
0.044	0.267	362.05	2.4486	1.1347	0.466	0.462	0.534	0.538	-0.758	0.661
0.044	0.317	362.05	2.0537	1.1938	0.478	0.466	0.522	0.534	-2.435	2.230
0.044	0.319	362.15	2.0406	1.1963	0.477	0.467	0.523	0.533	-2.184	1.992
0.044	0.364	362.15	1.7983	1.2511	0.488	0.474	0.512	0.526	-2.902	2.766
0.044	0.419	362.45	1.5878	1.3197	0.503	0.487	0.497	0.513	-3.122	3.160
0.044	0.493	362.75	1.3979	1.4123	0.527	0.513	0.473	0.487	-2.589	2.885
0.044	0.562	363.15	1.2797	1.4982	0.557	0.546	0.443	0.454	-1.992	2.505
0.044	0.648	363.95	1.1806	1.6036	0.601	0.598	0.399	0.402	-0.461	0.695
0.044	0.737	365.05	1.1134	1.7095	0.663	0.668	0.337	0.332	0.708	-1.393
0.044	0.828	366.55	1.0681	1.8136	0.750	0.758	0.250	0.242	1.047	-3.140
0.044	0.930	369.05	1.0354	1.9256	0.887	0.888	0.113	0.112	0.103	-0.810
0.043	0.995	370.95	1.0213	2.0026	0.993	0.991	0.007	0.009	-0.179	25.428
0.067	0.022	367.35	15.9999	0.8678	0.368	0.314	0.632	0.686	-14.575	8.487
0.066	0.057	363.25	10.7192	0.8777	0.445	0.447	0.555	0.553	0.557	-0.447
0.067	0.099	362.85	7.1215	0.8980	0.462	0.489	0.538	0.511	5.746	-4.934
0.067	0.142	362.85	5.0886	0.9292	0.471	0.498	0.529	0.502	5.812	-5.175
0.067	0.186	362.95	3.8542	0.9664	0.480	0.500	0.520	0.500	4.126	-3.809
0.067	0.228	363.05	3.1035	1.0053	0.488	0.500	0.512	0.500	2.454	-2.339
0.067	0.270	363.15	2.5943	1.0466	0.496	0.501	0.504	0.499	1.089	-1.072
0.067	0.315	363.35	2.2127	1.0930	0.505	0.505	0.495	0.495	0.063	-0.064
0.067	0.359	363.55	1.9450	1.1398	0.516	0.512	0.484	0.488	-0.778	0.830
0.067	0.401	363.75	1.7542	1.1852	0.530	0.521	0.470	0.479	-1.682	1.897
0.066	0.464	364.05	1.5436	1.2593	0.551	0.538	0.449	0.462	-2.304	2.828
0.066	0.540	364.55	1.3744	1.3433	0.579	0.569	0.421	0.431	-1.700	2.338
0.066	0.620	365.15	1.2547	1.4308	0.618	0.612	0.382	0.388	-1.017	1.645
0.066	0.705	366.15	1.1681	1.5224	0.670	0.669	0.330	0.331	-0.123	0.250
0.066	0.790	367.25	1.1085	1.6111	0.738	0.741	0.262	0.259	0.406	-1.143
0.066	0.893	369.25	1.0596	1.7153	0.850	0.851	0.150	0.149	0.137	-0.775
0.065	0.996	371.65	1.0276	1.8223	0.994	0.994	0.006	0.006	-0.036	5.895
0.081	0.054	363.95	10.7400	0.8324	0.454	0.447	0.546	0.553	-1.487	1.236
0.082	0.107	363.55	6.6219	0.8580	0.478	0.504	0.522	0.496	5.390	-4.936
0.083	0.160	363.55	4.5651	0.8924	0.490	0.517	0.510	0.483	5.472	-5.257
0.083	0.217	363.85	3.3450	0.9396	0.502	0.520	0.498	0.480	3.600	-3.629
0.083	0.265	364.05	2.7168	0.9827	0.513	0.523	0.487	0.477	1.897	-1.998
0.084	0.320	364.25	2.2447	1.0306	0.525	0.530	0.475	0.470	0.909	-1.004
0.085	0.370	364.55	1.9509	1.0752	0.540	0.540	0.460	0.460	-0.074	0.087
0.083	0.426	364.85	1.7092	1.1396	0.557	0.551	0.443	0.449	-1.158	1.456

ตาราง 3-38 (ต่อ)

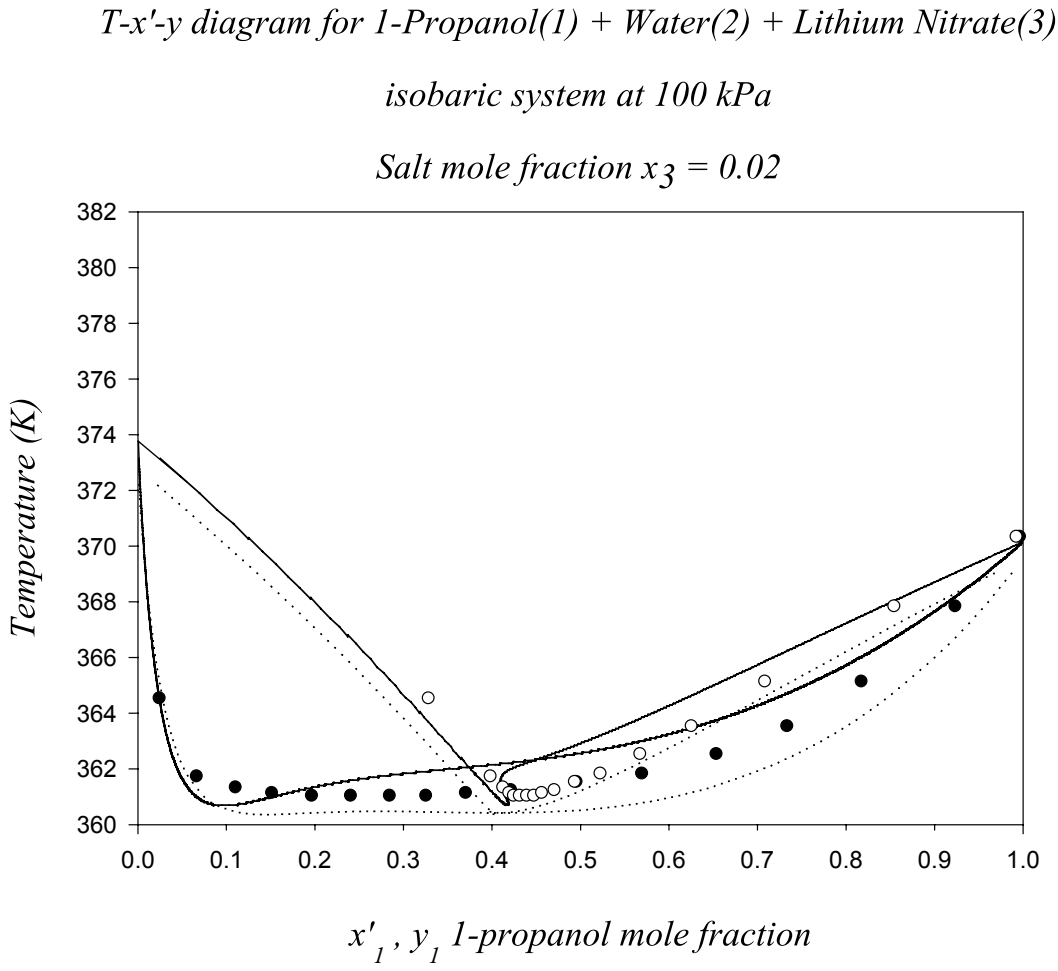
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.083	0.502	365.35	1.4899	1.2165	0.584	0.576	0.416	0.424	-1.326	1.862
0.083	0.567	365.85	1.3605	1.2822	0.610	0.605	0.390	0.395	-0.815	1.275
0.082	0.632	366.35	1.2644	1.3528	0.642	0.639	0.358	0.361	-0.441	0.790
0.082	0.696	366.95	1.1948	1.4162	0.681	0.681	0.319	0.319	-0.013	0.028
0.081	0.761	367.75	1.1402	1.4858	0.730	0.730	0.270	0.270	-0.005	0.013
0.081	0.820	368.65	1.1024	1.5425	0.782	0.783	0.218	0.217	0.125	-0.447
0.080	0.888	369.85	1.0682	1.6130	0.854	0.854	0.146	0.146	-0.049	0.285
0.080	0.937	370.85	1.0489	1.6581	0.914	0.913	0.086	0.087	-0.134	1.420
0.080	0.995	372.15	1.0304	1.7100	0.993	0.993	0.007	0.007	-0.043	6.084
0.102	0.061	364.75	9.3921	0.7748	0.483	0.464	0.517	0.536	-3.892	3.636
0.103	0.125	364.55	5.6429	0.8075	0.506	0.523	0.494	0.477	3.427	-3.510
0.103	0.189	364.85	3.8574	0.8529	0.522	0.537	0.478	0.463	2.876	-3.140
0.104	0.263	365.25	2.7759	0.9089	0.538	0.546	0.462	0.454	1.397	-1.627
0.106	0.319	365.75	2.2934	0.9500	0.556	0.555	0.444	0.445	-0.202	0.253
0.103	0.391	365.95	1.8867	1.0246	0.570	0.566	0.430	0.434	-0.718	0.952
0.103	0.444	366.35	1.6841	1.0731	0.588	0.580	0.412	0.420	-1.298	1.852
0.103	0.502	366.75	1.5206	1.1263	0.608	0.600	0.392	0.400	-1.240	1.923
0.104	0.570	367.35	1.3816	1.1842	0.636	0.631	0.364	0.369	-0.792	1.384
0.103	0.633	367.85	1.2849	1.2462	0.670	0.663	0.330	0.337	-1.037	2.106
0.103	0.696	368.45	1.2120	1.3028	0.706	0.702	0.294	0.298	-0.521	1.252
0.101	0.748	368.95	1.1633	1.3596	0.740	0.738	0.260	0.262	-0.280	0.798
0.101	0.810	369.75	1.1181	1.4139	0.788	0.789	0.212	0.211	0.146	-0.543
0.100	0.849	370.35	1.0944	1.4536	0.825	0.825	0.175	0.175	-0.037	0.176
0.100	0.896	371.15	1.0704	1.4937	0.874	0.873	0.126	0.127	-0.122	0.843
0.101	0.944	372.05	1.0498	1.5275	0.931	0.928	0.069	0.072	-0.309	4.174
0.101	0.996	373.05	1.0311	1.5695	0.994	0.995	0.006	0.005	0.056	-9.222
0.122	0.064	365.95	8.4455	0.7219	0.509	0.469	0.491	0.531	-7.923	8.214
0.122	0.124	365.85	5.4492	0.7544	0.531	0.530	0.469	0.470	-0.201	0.227
0.123	0.197	366.25	3.6378	0.8003	0.547	0.552	0.453	0.448	0.851	-1.028
0.123	0.266	366.65	2.7335	0.8517	0.563	0.562	0.437	0.438	-0.142	0.182
0.123	0.333	366.95	2.2056	0.9045	0.578	0.574	0.422	0.426	-0.772	1.057
0.124	0.393	367.45	1.8929	0.9503	0.595	0.588	0.405	0.412	-1.211	1.780
0.126	0.454	367.95	1.6695	0.9934	0.616	0.607	0.384	0.393	-1.410	2.262
0.126	0.501	368.35	1.5398	1.0325	0.636	0.624	0.364	0.376	-1.915	3.345
0.125	0.573	369.05	1.3897	1.0968	0.665	0.653	0.335	0.347	-1.741	3.457
0.124	0.639	369.35	1.2885	1.1547	0.695	0.687	0.305	0.313	-1.201	2.737
0.124	0.703	370.15	1.2138	1.2075	0.732	0.726	0.268	0.274	-0.886	2.420
0.123	0.754	370.55	1.1660	1.2529	0.764	0.760	0.236	0.240	-0.490	1.587
0.122	0.810	371.15	1.1231	1.3022	0.806	0.804	0.194	0.196	-0.297	1.233
0.120	0.855	371.75	1.0945	1.3482	0.845	0.842	0.155	0.158	-0.346	1.885
0.120	0.900	372.35	1.0702	1.3827	0.889	0.886	0.111	0.114	-0.344	2.758
0.120	0.949	373.25	1.0478	1.4202	0.940	0.939	0.060	0.061	-0.132	2.066
0.121	0.995	373.95	1.0295	1.4476	0.994	0.994	0.006	0.006	-0.028	4.692



ภาพที่ 3-24 ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ 1-โพรพานอล(1) ที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa



ภาพที่ 3-25 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa ที่ความเข้มข้นของเกลือมีเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.0 0.02 0.04 0.06 0.08 0.10 และ 0.12 เมื่อ —— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC



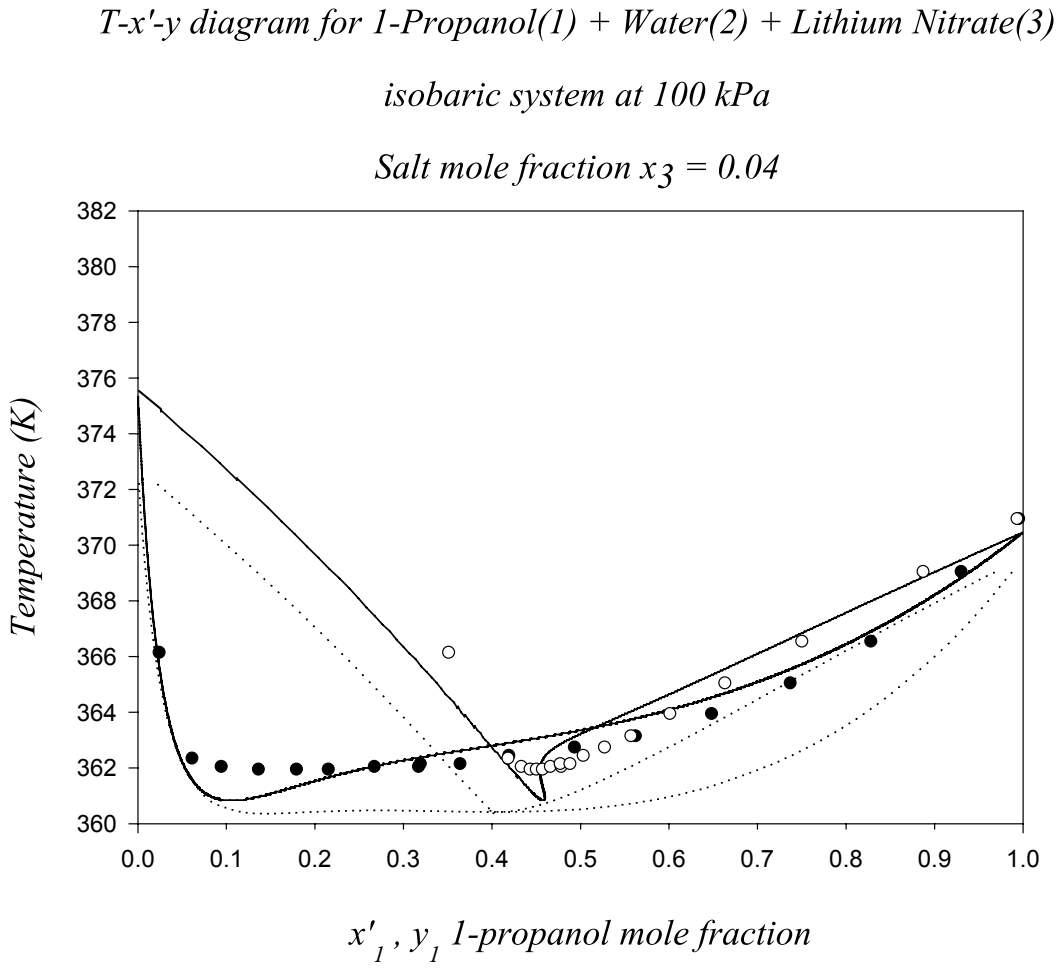
ภาพที่ 3-26 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.02

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



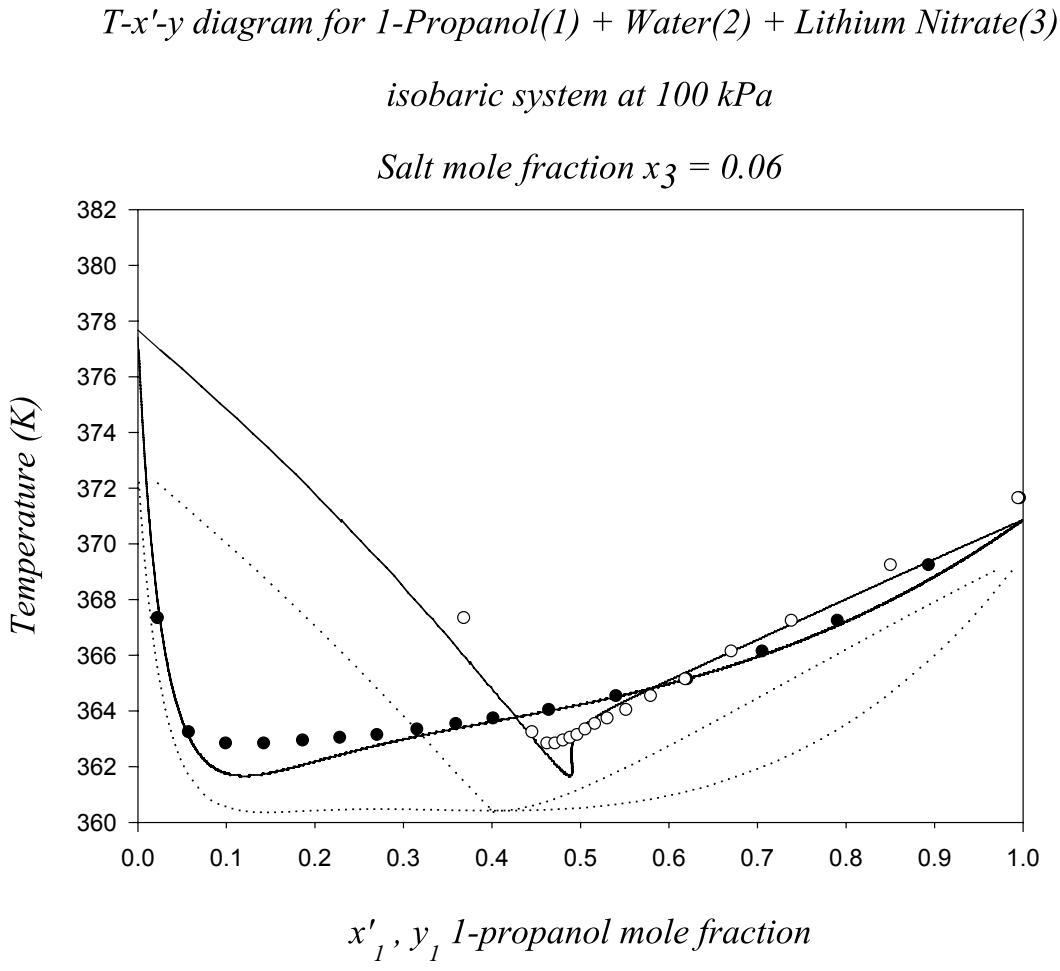
ภาพที่ 3-27 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.04

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



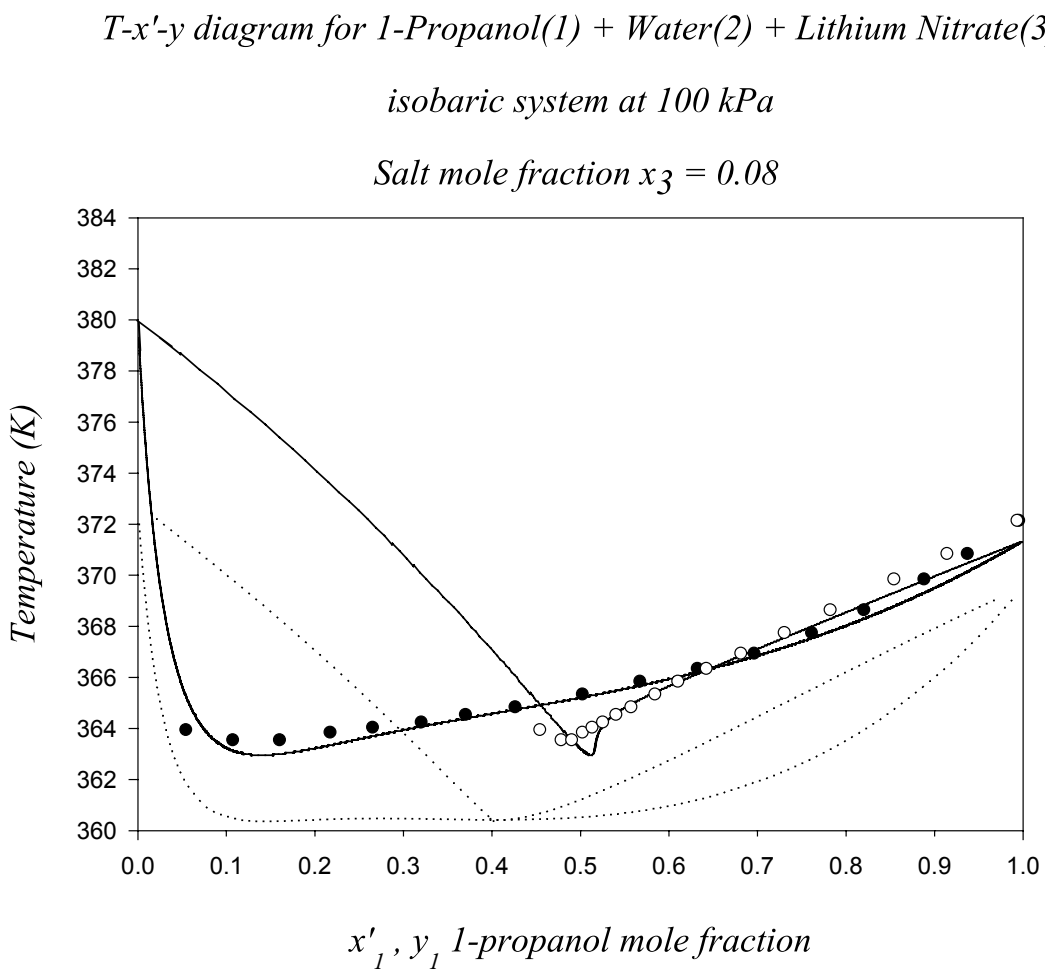
ภาพที่ 3-28 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.06

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



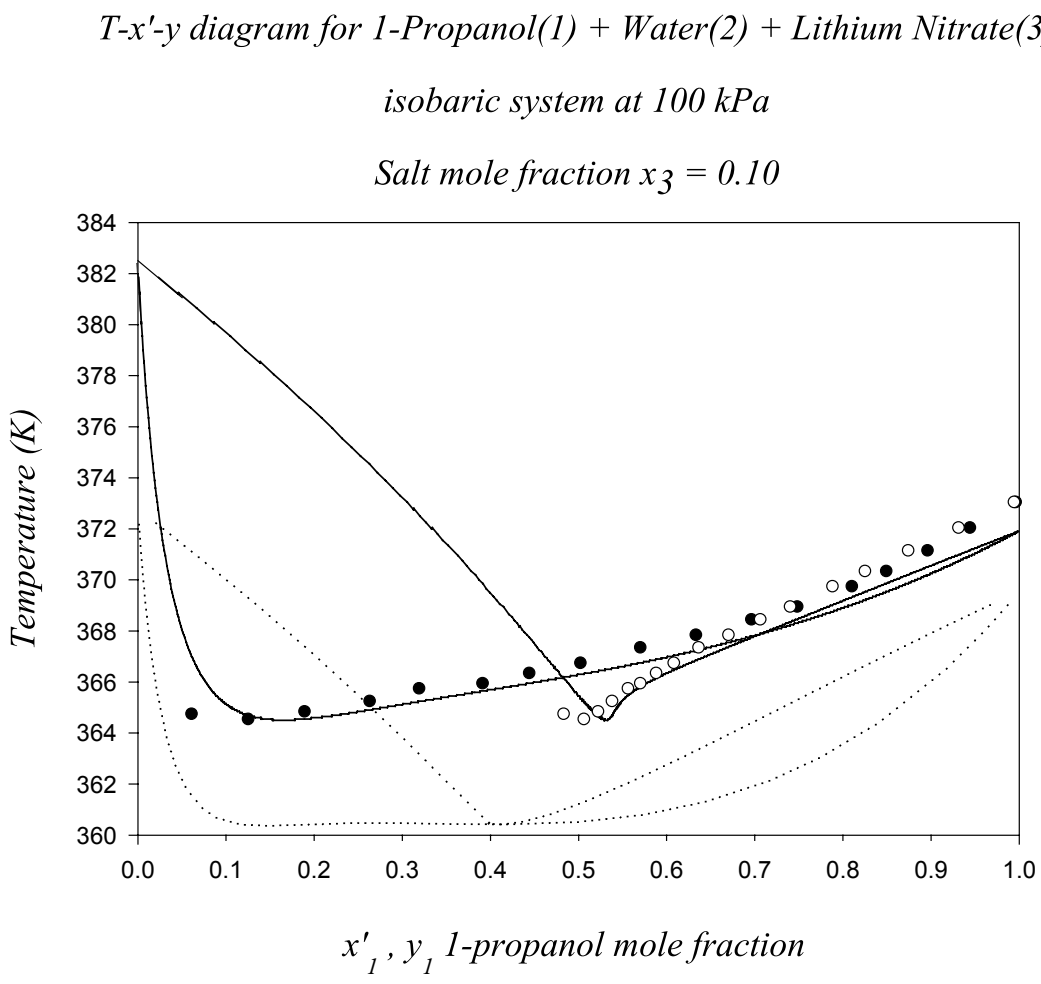
ภาพที่ 3-29 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.08

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



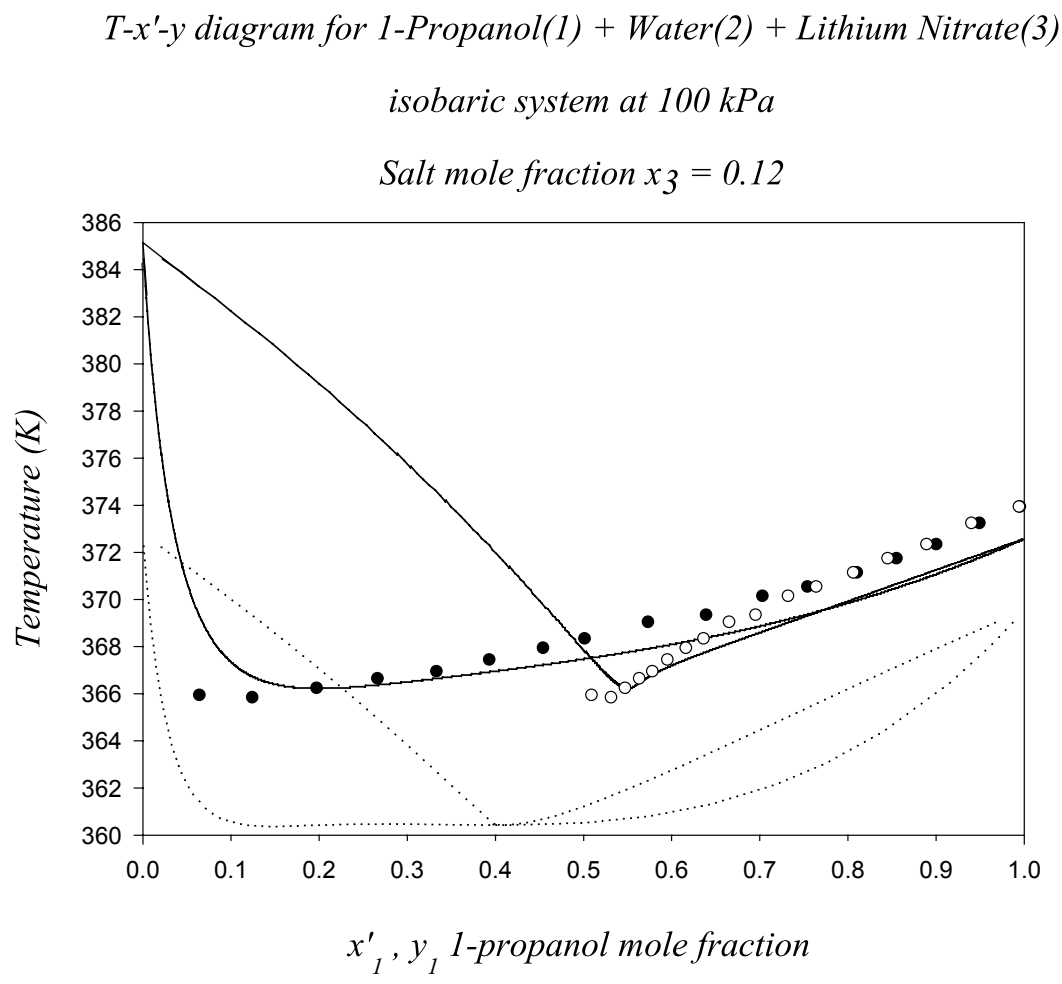
ภาพที่ 3-30 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.10

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



ภาพที่ 3-31 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.12

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ

<u>วิจารณ์ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์แสดงโดย Sander, Fredenslund และ Rasmussen(1986)</u>

จากการศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยใช้ค่าพารามิเตอร์โครงสร้างที่แสดงโดย Sander, Fredenslund และ Rasmussen(1986) พบว่าสามารถใช้ข้อมูลจากการทดลองทุกระดับความเข้มข้นของเกลือในการหาค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC และใช้ค่าพารามิเตอร์ดังกล่าวในการคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี คำนวณอุณหภูมิของระบบ และคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบ ได้แก่ ระบบน้ำ(1) + แคลเซียมไนเตรท(2) ระบบ 1-โพรพานอล(1) + แคลเซียมไนเตรท(2) ระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดันคงที่ 100 kPa เมื่อพิจารณาค่าพารามิเตอร์ระหว่างแคลเซียมไอออน กับ ไนเตรทไอออน (A_{23} และ A_{32}) ในระบบที่มีน้ำเป็นตัวทำละลายจะมีค่าแตกต่างกับในระบบที่มี 1-โพรพานอลเป็นตัวทำละลาย และแตกต่างจากระบบที่เป็นตัวทำละลายผสมทวิภาค ทำนองเดียวกันสำหรับระบบ น้ำ(1) + ลิเทียมไนเตรท(2) ระบบ 1-โพรพานอล(1) + ลิเทียมไนเตรท(2) และระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa พบว่าค่าพารามิเตอร์ระหว่างลิเทียมไอออน กับ ไนเตรทไอออน ในระบบที่มีน้ำเป็นตัวทำละลายจะมีค่าแตกต่างกับในระบบที่มี 1-โพรพานอลเป็นตัวทำละลาย และแตกต่างจากระบบที่เป็นตัวทำละลายผสมทวิภาค อธิบายได้ว่าชนิดขององค์ประกอบทั้งที่เป็นตัวทำละลายและสารอิเล็กโทรไลต์มีผลต่อแรงปฏิสัมพันธ์ของระบบและส่งผลต่อเนื่องไปยังสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว

สำหรับตำแหน่งอะซีโอโทรปที่เกิดขึ้นกับองค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายในระบบสารอิเล็กโทรไลต์ พิจารณาตำแหน่งอะซีโอโทรปของตัวทำละลาย i และ j เมื่อค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว (x_i', x_j') มีค่าเท่ากับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ (y_i, y_j) การหาค่าเศษส่วนโมลที่ทำให้เกิดอะซีโอโทรปจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ซึ่งในการคำนวณกำหนดให้ค่าเศษส่วนโมลของเกลือมีค่าคงที่ได้แก่ ที่ 0.02 0.04 0.06 0.08 0.10 และ 0.12 โดยตำแหน่งอะซีโอโทรปที่เกิดขึ้นจะเห็นได้ว่ามีความสัมพันธ์กับค่าเศษส่วนโมลของเกลือโดยเมื่อค่าเศษส่วนโมลของเกลือเพิ่มขึ้นตำแหน่งอะซีโอโทรปจะเปลี่ยนแปลงไปในตำแหน่งที่ค่าเศษส่วนโมลของแอลกอฮอล์สูงขึ้น (Salting-out) ผลการคำนวณแสดงค่าเศษส่วนโมลและอุณหภูมิที่เกิดอะซีโอโทรปของ 1-โพรพานอล(1) แสดงในตาราง 3-39

ตาราง 3-39 ตำแหน่งของค่าเศษส่วนโมล ($x'_{1,cal}, y_{1,cal}$) และอุณหภูมิ (K) ที่ทำให้เกิดอะซีโอโทรปจากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

ค่าเศษส่วนโมลของเกลือ	ระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) 100 kPa	ระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) 100 kPa
0.02	0.51 (362.50 K)	0.45 (362.35 K)
0.04	0.61 (364.15 K)	0.52 (363.45 K)
0.06	0.71 (366.05 K)	0.58 (364.85 K)
0.08	0.81 (367.90 K)	0.65 (366.35 K)
0.10	-	0.71 (367.95 K)
0.12	-	0.78 (369.65 K)

สำหรับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอที่ได้จากการคำนวณที่เบี่ยงเบนไปจากผลการทดลองแสดงในรูปของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาด โดยพิจารณาเฉพาะตำแหน่งที่มีข้อมูลค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวขององค์ประกอบที่1 (1-โพรพานอล) ตามที่ปรากฏในผลการทดลองเพื่อเปรียบเทียบกับผลการคำนวณด้วยแบบจำลองโดยการคำนวณใช้ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวค่าเดียวกัน เนื่องจากข้อมูลผลการทดลองจะมีความเข้มข้นของเกลือเป็นค่าเศษส่วนโมลที่เพิ่มขึ้นทีละน้อย ดังนั้นในการคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอด้วยแบบจำลองเพื่อหาเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดจะใช้ค่าเศษส่วนโมลของเกลือตามที่ปรากฏในข้อมูลการทดลอง (ได้แก่ 0.09, 0.10, 0.11, 0.12,…) เช่นกัน ส่วนการคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอด้วยแบบจำลองเพื่อวาดกราฟสมดุลระหว่างวัฏภาคกับอุณหภูมิ (*T-x'-y* diagram) นั้นจะใช้ความเข้มข้นของเกลือเป็นค่าคงที่ค่าใดค่าหนึ่ง (ได้แก่ 0.02, 0.04, 0.06, 0.08) ซึ่งจะทำให้ผลการคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของทั้งสองกรณีนี้มีความแตกต่างกัน จากการศึกษาพบว่าการใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC เพื่อคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa มีความเบี่ยงเบนทั้งในทิศทางที่มากกว่าและน้อยกว่าค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอจากการทดลอง

ตาราง 3-40 ค่าเฉลี่ย ค่าความแปรปรวน และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ 1-โพรพานอล(1) ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) และระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท (3) ที่ความดัน 100 kPa

	1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3)	1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3)
Mean	0.030	-0.486
Variance	2.018	5.899
Std-Dev	1.421	2.429

เมื่อพิจารณาค่าเฉลี่ย ค่าความแปรปรวน และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ 1-โพรพานอล(1) พบว่าระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) จะมีค่าเฉลี่ยเป็นค่าบวก อธิบายได้ว่าผลการคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ให้ผลสูงกว่าค่าที่ได้จากการทดลอง และมีค่าความแปรปรวนของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดต่ำ อธิบายได้ว่าเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดที่เกิดขึ้นมีความแตกต่างกันน้อย สำหรับระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) จะมีค่าเฉลี่ยเป็นค่าลบ อธิบายได้ว่าการคำนวณค่าเศษส่วนโมลให้ผลต่ำกว่าค่าที่ได้จากการทดลอง และมีค่าความแปรปรวนของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดสูง อธิบายได้ว่าเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดที่เกิดขึ้นมีความแตกต่างกันมาก ดังแสดงในตาราง 3-40

ตาราง 3-41 ค่าเฉลี่ย ค่าความแปรปรวน และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ น้ำ(2) ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) และระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa

	1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3)	1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3)
Mean	-0.764	0.821
Variance	41.046	8.911
Std-Dev	6.407	2.985

เมื่อพิจารณาค่าเฉลี่ย ค่าความแปรปรวน และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ น้ำ(2) พบว่าระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) จะมีค่าเฉลี่ยเป็นค่าลบ อธิบายได้ว่าผลการคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ให้ผลต่ำกว่าค่าที่ได้จากการทดลอง และมีค่าความแปรปรวนของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดสูงมาก อธิบายได้ว่าเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดที่เกิดขึ้นมีความแตกต่างกันอย่างมาก สำหรับระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) จะมีค่าเฉลี่ยเป็นค่าบวก อธิบายได้ว่าการคำนวณค่าเศษส่วนโมลให้ผลสูงกว่าค่าที่ได้จากการทดลอง และมีค่าความแปรปรวนของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดต่ำ อธิบายได้ว่าเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดที่เกิดขึ้นมีความแตกต่างกันน้อย ดังแสดงในตาราง 3-41

ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC จากระบบอื่นที่มีองค์ประกอบเหมือนกัน

9. ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC จากระบบอื่นที่มีองค์ประกอบเหมือนกัน ใช้ข้อมูลผลการทดลองจากวารสารตีพิมพ์เรื่อง

Isobaric Vapor-Liquid Equilibria for 1-Propanol + Water + Calcium Nitrate (Vercher, Rojo and Martinez-Andreu, 1991) และ

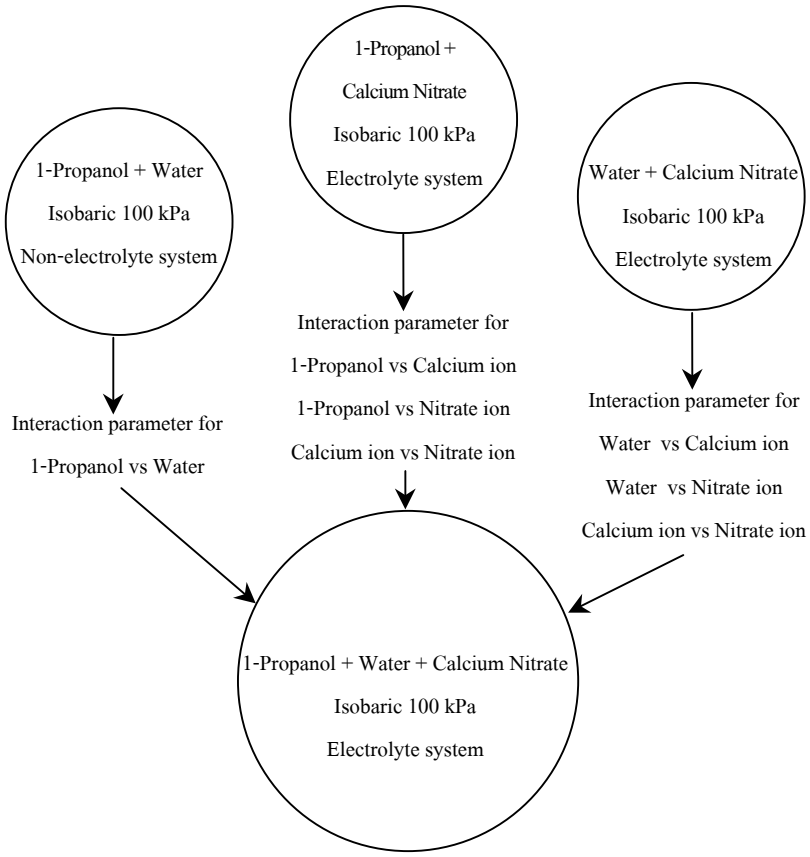
Isobaric Vapor-Liquid Equilibria for 1-Propanol + Water + Lithium Nitrate at 100 kPa (Vercher, Vazquez and Martinez-Andreu, 2002)

การศึกษาในส่วนนี้จะแสดงให้เห็นถึงความพยายามที่จะใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC จากระบบอื่นในการทำนายสมดุลระหว่างวัฏภาคของอีกระบบโดยมีที่มาจากสมมุติฐานที่ว่าในระบบที่มีองค์ประกอบเหมือนกัน อุณหภูมิและความดันเดียวกัน มีความเป็นไปได้ที่แรงปฏิสัมพันธ์ระหว่างองค์ประกอบจะมีค่าเท่ากัน ดังเช่นที่ได้แสดงไว้ในการศึกษาก่อนหน้านี้ คือ การใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง UNIQUAC จากระบบสององค์ประกอบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์ที่อุณหภูมิและความดันเดียวกัน เพื่อใช้ในการทำนายสมดุลระหว่างวัฏภาคของระบบสามองค์ประกอบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์ ได้ผลเป็นที่น่าพอใจ อย่างไรก็ตามระบบที่ประกอบด้วยสารอิเล็กโทรไลต์จะมีความซับซ้อนมากกว่าซึ่งอาจทำให้การใช้ค่าพารามิเตอร์จากระบบอื่นนั้นไม่ได้ผล ในการศึกษาครั้งนี้จึงใช้วิธีการปรับค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง A_{ij} ด้วยค่าคงที่ k_{ij} ซึ่งมีความสัมพันธ์กับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลาย โดยความสัมพันธ์ระหว่างค่าคงที่ k_{ij} กับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายได้จากการเดาสุ่ม และปริมาณของค่าคงที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น กำหนดให้ปรับค่าพารามิเตอร์เฉพาะพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับสารอิเล็กโทรไลต์เท่านั้น ส่วนพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลาย และพารามิเตอร์ระหว่างสารอิเล็กโทรไลต์ไม่มีการปรับค่า

ข้อมูลสมดุลระหว่างวัฏภาคจากผลการทดลอง

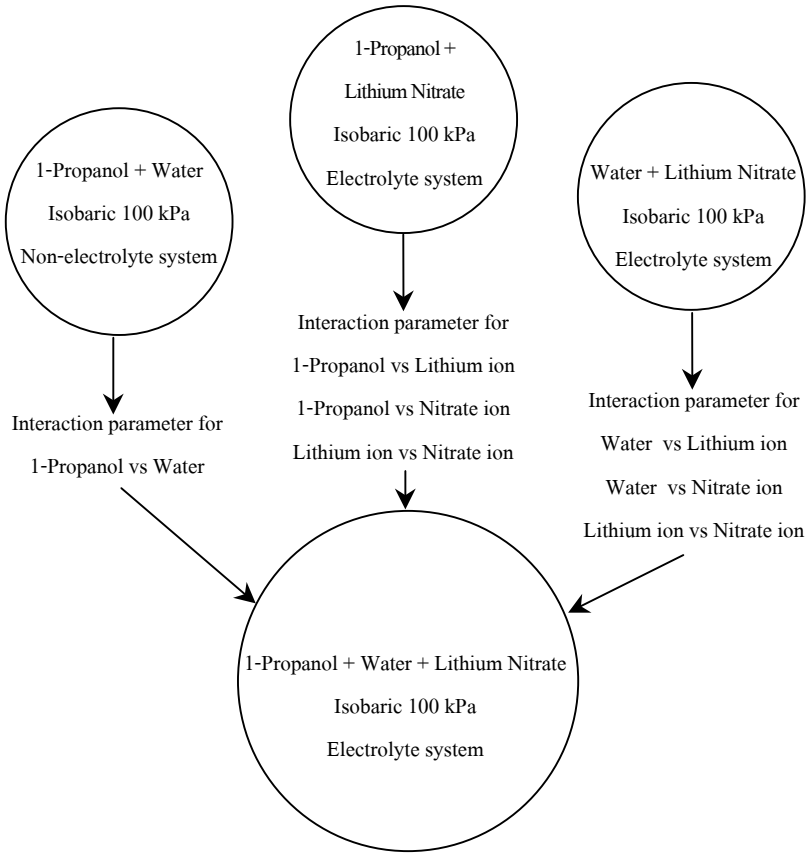
ใช้ข้อมูลจากผลการทดลองสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ระบบ 1-โพรพานอล (1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 100 kPa และใช้ค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นจากระบบอื่นที่ให้ค่าพารามิเตอร์ระหว่างองค์ประกอบในระบบและความดันเดียวกัน กล่าวคือค่าพารามิเตอร์ระหว่าง 1-โพรพานอล + น้ำ ได้จากระบบ 1-โพรพานอล + น้ำ ที่ความดัน 100 kPa ค่าพารามิเตอร์ระหว่าง 1-โพรพานอล + แคลเซียมไอออน และ 1-โพรพานอล + ไนเตรทไอออน ได้จากระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่มีตัวทำละลายชนิดเดียวคือระบบ 1-โพรพานอล + แคลเซียมไนเตรท ที่ความดัน 100 kPa ค่าพารามิเตอร์ระหว่าง น้ำ + แคลเซียมไอออน และ น้ำ + ไนเตรทไอออน ได้จากระบบ น้ำ + แคลเซียมไนเตรท ที่ความดัน 100 kPa ดังแสดงด้วยภาพ 3-32

ทำนองเดียวกันใช้ข้อมูลผลการทดลองสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 100 kPa และใช้ค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นจากระบบอื่นที่ให้ค่าพารามิเตอร์ระหว่างองค์ประกอบในระบบและความดันเดียวกัน ค่าพารามิเตอร์ระหว่าง 1-โพรพานอล + น้ำ ได้จากระบบ 1-โพรพานอล + น้ำ ที่ความดัน 100 kPa ค่าพารามิเตอร์ระหว่าง 1-โพรพานอล + ลิเทียมไอออน และ 1-โพรพานอล + ไนเตรทไอออน ได้จากระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่มีตัวทำละลายชนิดเดียวคือระบบ 1-โพรพานอล + ลิเทียมไนเตรท ที่ความดัน 100 kPa ค่าพารามิเตอร์ระหว่าง น้ำ + ลิเทียมไอออน และ น้ำ + ไนเตรทไอออน ได้จากระบบ น้ำ + ลิเทียมไนเตรท ที่ความดัน 100 kPa ดังแสดงด้วยภาพ 3-33 สำหรับค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ยังคงใช้ของ Sander, Fredenslund และ Rasmussen (1986)



ภาพที่ 3-32 การรวมค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองที่ได้จากระบบอื่นสำหรับคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดันของระบบคงที่ 100 kPa

ดังนั้นจะได้ค่าพารามิเตอร์ระหว่างองค์ประกอบในระบบสำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC เพื่อคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวในระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ที่ความดัน 100 kPa ดังแสดงในตาราง 3-42 และตาราง 3-43 ซึ่งประกอบด้วยค่าพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับตัวทำละลาย ค่าพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับไอออน และค่าพารามิเตอร์ระหว่างไอออนกับไอออน โดยการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคจะพิจารณาคำนวณตามตำแหน่งค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวและความเข้มข้นของเกลือตามที่ปรากฏในข้อมูลผลการทดลอง และพิจารณาคำนวณในลักษณะที่ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลายให้มีค่าเพิ่มขึ้นจาก 0.00 ถึง 1.00



ภาพที่ 3-33 การรวมค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองที่ได้จากระบบอื่นสำหรับคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดันของระบบคงที่ 100 kPa

ตาราง 3-42 ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ระหว่างตัวทำละลายกับตัวทำละลาย สำหรับคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ A_{ij} (cal/mol) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 100 kPa

Component	Water (j)	1-Propanol (j)	2-Propanol (j)
Water (i)	**0.000**	**491.786**	**68.402**
1-Propanol (i)	**16.567**	**0.000**	**-0.377**
2-Propanol (i)	**357.278**	**-3.799**	**0.00**

ตาราง 3-43 ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ระหว่างตัวทำละลายกับไอออนและระหว่างไอออนกับไอออน สำหรับคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ A_{ij} (cal/mol) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 100 kPa

			$Ca(NO_3)_2$		$LiNO_3$	
	Component	Water	Calcium ion	Nitrate ion	Lithium ion	Nitrate ion
	Water	**0.000**	**493.080**	**-1816.756**	**1081.351**	**-3831.815**
$Ca(NO_3)_2$	Calcium ion	**-674.305**	**0.000**	**168.765**	-	-
	Nitrate ion	**-1956.648**	**1196.260**	**0.000**	-	-
$LiNO_3$	Lithium ion	**1047.627**	-	-	**0.000**	**821.338**
	Nitrate ion	**-1927.603**	-	-	**2759.274**	**0.000**

			$Ca(NO_3)_2$		$LiNO_3$	
	Component	1-Propanol	Calcium ion	Nitrate ion	Lithium ion	Nitrate ion
	1-Propanol	**0.000**	**604.835**	**1415.902**	**303.584**	**1022.502**
$Ca(NO_3)_2$	Calcium ion	**-743.030**	**0.000**	**616.781**	-	-
	Nitrate ion	**-1400.929**	**-852.184**	**0.000**	-	-
$LiNO_3$	Lithium ion	**-1356.847**	-	-	**0.000**	**-666.749**
	Nitrate ion	**-1303.348**	-	-	**-1332.167**	**0.000**

จากการศึกษาพบว่าการนำค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC จากระบบอื่นมาใช้โดยตรงนั้นให้ผลการคำนวณไม่เป็นที่น่าพอใจ ดังนั้นเพื่อให้การคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) และระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 100 kPa มีความถูกต้องมากที่สุดจำเป็นจะต้องปรับค่าพารามิเตอร์ด้วยความสัมพันธ์ระหว่างค่าคงที่กับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลาย ดังนี้

$$A_{ij} - k_{ij} x_{solvent}$$

เมื่อ A_{ij} คือ พารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC (cal/mol)

k_{ij} คือ ค่าคงที่สำหรับปรับค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC (cal/mol)

$x_{solvent}$ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลาย

ตาราง 3-44 ค่าคงที่ (k_{ij}) สำหรับปรับค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไอออน หรือ ลิเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa และค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลายที่ใช้ในการปรับค่า

	Constant k_{ij} (cal/mol)	
Adjust	Calcium Nitrate	Lithium Nitrate
A_{13}	3178.539 x_1	-384497.580 x_1
A_{14}	-6885.795 x_1	4680.134 x_1
A_{23}	-810.861 x_1	3932.880 x_2
A_{24}	-4289.525 x_1	-387.012 x_2
A_{31}	1929.270 x_1	-389710.616 x_1
A_{32}	-3587.567 x_1	3053.978 x_2
A_{41}	-659.332 x_1	553.373 x_1
A_{42}	409.503 x_1	-179.640 x_2

ผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคของระบบด้วยการใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC จากระบบอื่นและใช้การปรับค่าพารามิเตอร์ด้วยค่าคงที่ (k_{ij}) โดยพิจารณาในลักษณะที่ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของแต่ละองค์ประกอบมีค่าเท่ากับค่าเศษส่วนโมลที่ได้จากผลการทดลอง สำหรับระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดันคงที่ 100 kPa ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-45 และแสดงดังภาพที่ 3-34 และสำหรับระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดันคงที่ 100 kPa ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-46 และแสดงดังภาพที่ 3-40

ผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคของระบบโดยในลักษณะที่ค่าเศษส่วนโมลของเกลือมีค่าคงที่ค่าใดค่าหนึ่งและค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลายให้มีค่าเพิ่มขึ้นจาก 0.00 ถึง 1.00 ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.02 0.04 0.06 และ 0.08 และความดันคงที่ 100 kPa แสดงดังภาพที่ 3-35 สมดุลระหว่างวัฏภาคกับอุณหภูมิของระบบแสดงดังภาพที่ 3-36 ถึงภาพที่ 3-39 และสำหรับการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.02 0.04 0.06 0.08 0.10 และ 0.12 และความดันคงที่ 100 kPa แสดงดังภาพที่ 3-41 สมดุลระหว่างวัฏภาค

กับอุณหภูมิของระบบ แสดงดังภาพ 3-42 ถึงภาพที่ 3-47 จากภาพจะเห็นว่าสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบที่ได้จากผลการคำนวณมีลักษณะเหมือนกับผลการทดลอง

ตาราง 3-45 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa โดยใช้ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC จากระบบอื่น

x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.009	0.518	360.90	1.3068	1.6954	0.483	0.475	0.517	0.525	-1.670	1.560
0.009	0.449	360.80	1.4477	1.5678	0.464	0.451	0.536	0.549	-2.800	2.424
0.010	0.950	368.35	1.0244	2.4795	0.900	0.897	0.100	0.103	-0.351	3.163
0.010	0.376	360.70	1.6898	1.4292	0.447	0.437	0.553	0.563	-2.138	1.728
0.011	0.705	362.65	1.1184	2.0068	0.588	0.593	0.412	0.407	0.918	-1.311
0.011	0.583	361.50	1.2300	1.7860	0.519	0.513	0.481	0.487	-1.189	1.283
0.011	0.479	361.00	1.3997	1.5991	0.479	0.468	0.521	0.532	-2.343	2.154
0.011	0.399	360.80	1.6178	1.4598	0.457	0.445	0.543	0.555	-2.527	2.127
0.011	0.221	360.80	2.8569	1.1818	0.422	0.428	0.578	0.572	1.461	-1.067
0.011	0.138	360.90	4.5610	1.0795	0.410	0.425	0.590	0.575	3.615	-2.512
0.012	0.675	362.35	1.1455	1.9336	0.571	0.574	0.429	0.426	0.527	-0.702
0.012	0.307	360.75	2.0715	1.3025	0.436	0.435	0.564	0.565	-0.285	0.220
0.012	0.959	368.35	1.0267	2.4509	0.897	0.916	0.103	0.084	2.076	-18.083
0.013	0.889	366.45	1.0442	2.2916	0.796	0.801	0.204	0.199	0.643	-2.511
0.013	0.843	365.25	1.0586	2.2076	0.730	0.739	0.270	0.261	1.271	-3.436
0.014	0.591	361.85	1.2413	1.7537	0.533	0.528	0.467	0.472	-0.923	1.054
0.014	0.527	361.35	1.3347	1.6451	0.503	0.497	0.497	0.503	-1.197	1.212
0.014	0.164	360.90	3.9323	1.0992	0.420	0.434	0.580	0.566	3.300	-2.390
0.014	0.122	360.95	5.1842	1.0553	0.412	0.427	0.588	0.573	3.661	-2.565
0.015	0.940	367.95	1.0359	2.3459	0.873	0.884	0.127	0.116	1.314	-9.035
0.015	0.433	361.10	1.5552	1.4784	0.475	0.467	0.525	0.533	-1.599	1.446
0.016	0.089	361.15	6.7568	1.0218	0.410	0.414	0.590	0.586	0.916	-0.636
0.017	0.686	362.95	1.1624	1.8614	0.598	0.599	0.402	0.401	0.225	-0.334
0.017	0.938	368.05	1.0398	2.2999	0.874	0.883	0.126	0.117	1.068	-7.407
0.018	0.848	365.85	1.0708	2.1104	0.757	0.757	0.243	0.243	0.045	-0.139
0.018	0.784	364.45	1.1007	2.0015	0.683	0.687	0.317	0.313	0.587	-1.265
0.018	0.248	360.90	2.6652	1.1851	0.439	0.447	0.561	0.553	1.933	-1.512
0.018	0.053	361.75	9.4029	0.9941	0.399	0.367	0.601	0.633	-8.090	5.371
0.018	0.937	368.05	1.0418	2.2776	0.874	0.883	0.126	0.117	1.003	-6.957
0.019	0.915	367.60	1.0496	2.2145	0.849	0.849	0.151	0.151	0.056	-0.314
0.019	0.506	361.60	1.4133	1.5501	0.510	0.505	0.490	0.495	-0.931	0.969
0.019	0.404	361.20	1.6901	1.3967	0.478	0.473	0.522	0.527	-1.124	1.029
0.019	0.322	361.05	2.0762	1.2789	0.460	0.457	0.540	0.543	-0.617	0.526
0.020	0.558	361.95	1.3274	1.6166	0.531	0.531	0.469	0.469	0.089	-0.100
0.020	0.146	361.00	4.5143	1.0600	0.428	0.443	0.572	0.557	3.498	-2.617
0.020	0.537	361.90	1.3622	1.5851	0.528	0.522	0.472	0.478	-1.201	1.343
0.021	0.224	361.00	2.9985	1.1408	0.443	0.453	0.557	0.547	2.292	-1.823
0.021	0.929	368.00	1.0488	2.2034	0.866	0.873	0.134	0.127	0.844	-5.454
0.023	0.880	367.35	1.0693	2.0739	0.828	0.807	0.172	0.193	-2.541	12.233
0.023	0.801	365.30	1.1066	1.9379	0.723	0.717	0.277	0.283	-0.852	2.223
0.023	0.715	363.75	1.1644	1.8052	0.639	0.640	0.361	0.360	0.144	-0.255
0.023	0.639	362.90	1.2366	1.6945	0.586	0.586	0.414	0.414	0.023	-0.033
0.023	0.362	361.30	1.9050	1.3053	0.477	0.475	0.523	0.525	-0.407	0.371
0.023	0.110	361.10	5.8117	1.0181	0.427	0.435	0.573	0.565	1.932	-1.440
0.023	0.913	367.70	1.0570	2.1353	0.848	0.852	0.152	0.148	0.446	-2.486
0.024	0.535	362.15	1.3922	1.5343	0.536	0.533	0.464	0.467	-0.498	0.576
0.024	0.463	361.70	1.5518	1.4345	0.509	0.505	0.491	0.495	-0.788	0.817
0.024	0.289	361.20	2.3678	1.2041	0.464	0.466	0.536	0.534	0.473	-0.409

ตาราง 3-45 (ต่อ 1/3)

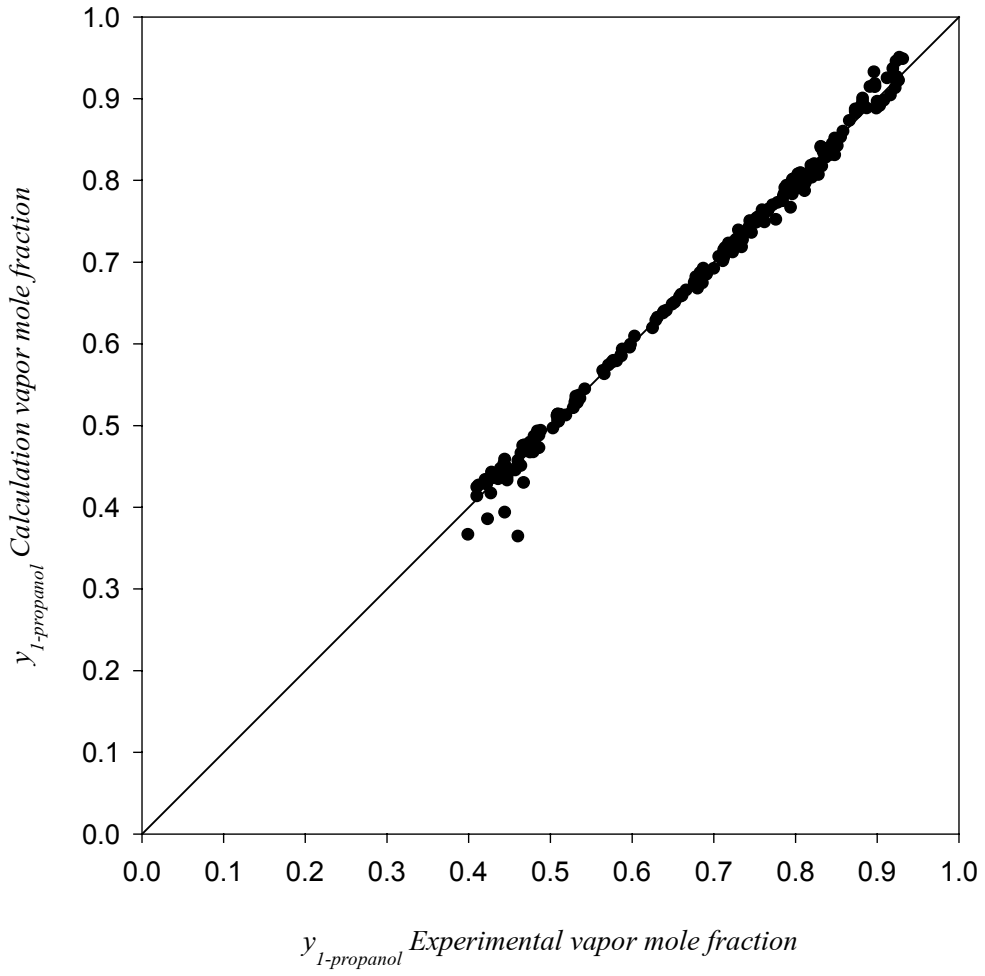
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.024	0.909	367.75	1.0600	2.1099	0.849	0.847	0.151	0.153	-0.191	1.073
0.024	0.595	362.55	1.2965	1.6181	0.566	0.563	0.434	0.437	-0.487	0.635
0.026	0.906	367.80	1.0642	2.0695	0.849	0.846	0.151	0.154	-0.381	2.140
0.027	0.169	361.10	4.0302	1.0559	0.444	0.459	0.556	0.541	3.347	-2.673
0.027	0.082	361.30	7.2307	0.9855	0.427	0.417	0.573	0.583	-2.264	1.687
0.028	0.857	367.05	1.0889	1.9482	0.811	0.787	0.189	0.213	-2.923	12.543
0.028	0.314	361.35	2.2281	1.2100	0.475	0.480	0.525	0.521	0.947	-0.856
0.028	0.631	363.15	1.2690	1.6143	0.597	0.596	0.403	0.404	-0.188	0.278
0.029	0.798	365.75	1.1238	1.8352	0.735	0.727	0.265	0.273	-1.052	2.916
0.029	0.488	362.15	1.5232	1.4181	0.530	0.528	0.470	0.472	-0.290	0.327
0.029	0.426	361.80	1.7003	1.3401	0.509	0.507	0.491	0.493	-0.310	0.322
0.029	0.955	369.20	1.0500	2.1138	0.924	0.921	0.076	0.079	-0.302	3.671
0.030	0.592	362.90	1.3308	1.5386	0.581	0.579	0.419	0.421	-0.323	0.447
0.030	0.060	361.70	8.6731	0.9637	0.423	0.386	0.577	0.614	-8.778	6.435
0.031	0.236	361.30	2.9662	1.1055	0.466	0.475	0.534	0.525	1.995	-1.741
0.032	0.832	366.85	1.1097	1.8445	0.794	0.767	0.206	0.233	-3.407	13.133
0.032	0.120	361.25	5.4660	0.9949	0.445	0.450	0.555	0.550	1.160	-0.930
0.032	0.679	364.00	1.2301	1.6239	0.638	0.638	0.362	0.362	-0.042	0.074
0.033	0.727	364.75	1.1872	1.6739	0.676	0.675	0.324	0.325	-0.129	0.269
0.033	0.878	367.50	1.0865	1.9070	0.828	0.819	0.172	0.181	-1.050	5.055
0.033	0.879	367.45	1.0860	1.9086	0.823	0.820	0.177	0.180	-0.306	1.425
0.033	0.899	367.90	1.0764	1.9444	0.845	0.845	0.155	0.155	0.004	-0.019
0.034	0.276	361.50	2.5765	1.1316	0.480	0.487	0.520	0.513	1.436	-1.326
0.035	0.759	365.40	1.1657	1.6908	0.712	0.705	0.288	0.295	-0.957	2.367
0.035	0.394	361.95	1.8620	1.2541	0.512	0.514	0.488	0.486	0.330	-0.346
0.035	0.701	364.45	1.2172	1.6129	0.660	0.661	0.340	0.339	0.077	-0.149
0.036	0.557	363.00	1.4158	1.4292	0.575	0.577	0.425	0.423	0.402	-0.544
0.036	0.461	362.35	1.6364	1.3210	0.535	0.537	0.465	0.463	0.392	-0.452
0.036	0.187	361.40	3.7393	1.0345	0.468	0.476	0.532	0.524	1.734	-1.525
0.036	0.092	361.40	6.6347	0.9613	0.447	0.433	0.553	0.567	-3.077	2.487
0.036	0.947	369.30	1.0582	1.9889	0.922	0.913	0.078	0.087	-0.933	11.034
0.037	0.808	366.65	1.1339	1.7361	0.776	0.752	0.224	0.248	-3.072	10.643
0.038	0.730	365.10	1.1977	1.6122	0.689	0.689	0.311	0.311	-0.058	0.129
0.039	0.879	367.85	1.0933	1.8236	0.837	0.828	0.163	0.172	-1.057	5.429
0.040	0.666	364.35	1.2699	1.5092	0.649	0.648	0.351	0.352	-0.083	0.154
0.040	0.350	362.00	2.1025	1.1721	0.509	0.514	0.491	0.486	0.959	-0.994
0.040	0.247	361.65	2.9061	1.0707	0.484	0.493	0.516	0.507	1.928	-1.808
0.040	0.063	361.60	8.2273	0.9312	0.444	0.394	0.556	0.606	-11.310	9.032
0.042	0.716	365.15	1.2205	1.5458	0.691	0.687	0.309	0.313	-0.622	1.391
0.042	0.143	361.50	4.7393	0.9734	0.468	0.470	0.532	0.530	0.516	-0.454
0.042	0.840	367.20	1.1201	1.7199	0.803	0.791	0.197	0.209	-1.526	6.218
0.042	0.760	365.80	1.1798	1.6026	0.723	0.720	0.277	0.280	-0.429	1.120
0.043	0.793	366.45	1.1549	1.6366	0.762	0.749	0.238	0.251	-1.709	5.471
0.043	0.525	363.20	1.5090	1.3266	0.577	0.580	0.423	0.420	0.465	-0.634
0.043	0.435	362.60	1.7537	1.2364	0.542	0.545	0.458	0.455	0.507	-0.600
0.044	0.937	369.35	1.0669	1.8591	0.916	0.904	0.084	0.096	-1.257	13.706
0.045	0.307	362.00	2.3983	1.0995	0.509	0.514	0.491	0.486	0.979	-1.015
0.045	0.211	361.75	3.3841	1.0144	0.488	0.494	0.512	0.506	1.210	-1.153
0.045	0.842	367.45	1.1224	1.6861	0.812	0.797	0.188	0.203	-1.865	8.057
0.045	0.797	366.60	1.1548	1.6183	0.760	0.756	0.240	0.244	-0.567	1.796
0.046	0.610	364.15	1.3633	1.3839	0.629	0.629	0.371	0.371	-0.044	0.075
0.046	0.861	367.90	1.1110	1.7044	0.830	0.817	0.170	0.183	-1.551	7.571
0.047	0.473	363.05	1.6538	1.2417	0.564	0.567	0.436	0.433	0.581	-0.751
0.048	0.767	366.35	1.1842	1.5427	0.746	0.736	0.254	0.264	-1.336	3.923
0.048	0.371	362.50	2.0351	1.1400	0.531	0.536	0.469	0.464	0.872	-0.988
0.048	0.085	361.60	6.7855	0.9132	0.467	0.430	0.533	0.570	-7.891	6.914
0.048	0.859	367.80	1.1140	1.6769	0.832	0.817	0.168	0.183	-1.749	8.663
0.049	0.267	362.10	2.7418	1.0422	0.508	0.512	0.492	0.488	0.778	-0.803
0.049	0.172	361.75	4.0514	0.9657	0.486	0.488	0.514	0.512	0.422	-0.399
0.049	0.851	367.85	1.1203	1.6531	0.826	0.811	0.174	0.189	-1.851	8.785
0.050	0.779	366.55	1.1766	1.5365	0.752	0.749	0.248	0.251	-0.435	1.320
0.051	0.051	361.85	8.6523	0.8864	0.460	0.365	0.540	0.635	-20.731	17.660
0.051	0.880	368.35	1.1026	1.6760	0.851	0.842	0.149	0.158	-1.017	5.806
0.052	0.341	362.65	2.2078	1.0890	0.534	0.535	0.466	0.465	0.151	-0.172
0.052	0.842	367.80	1.1292	1.6055	0.820	0.806	0.180	0.194	-1.742	7.934
0.053	0.732	366.25	1.2253	1.4461	0.734	0.719	0.266	0.281	-2.100	5.795
0.053	0.542	364.00	1.5059	1.2555	0.603	0.609	0.397	0.391	1.045	-1.587
0.053	0.131	361.85	5.0070	0.9211	0.486	0.473	0.514	0.527	-2.729	2.581
0.053	0.806	367.10	1.1576	1.5415	0.784	0.775	0.216	0.225	-1.127	4.090
0.054	0.927	369.40	1.0752	1.7192	0.908	0.898	0.092	0.102	-1.093	10.784
0.054	0.763	366.50	1.1963	1.4734	0.743	0.743	0.257	0.257	-0.051	0.148

ตาราง 3-45 (ต่อ 2/3)

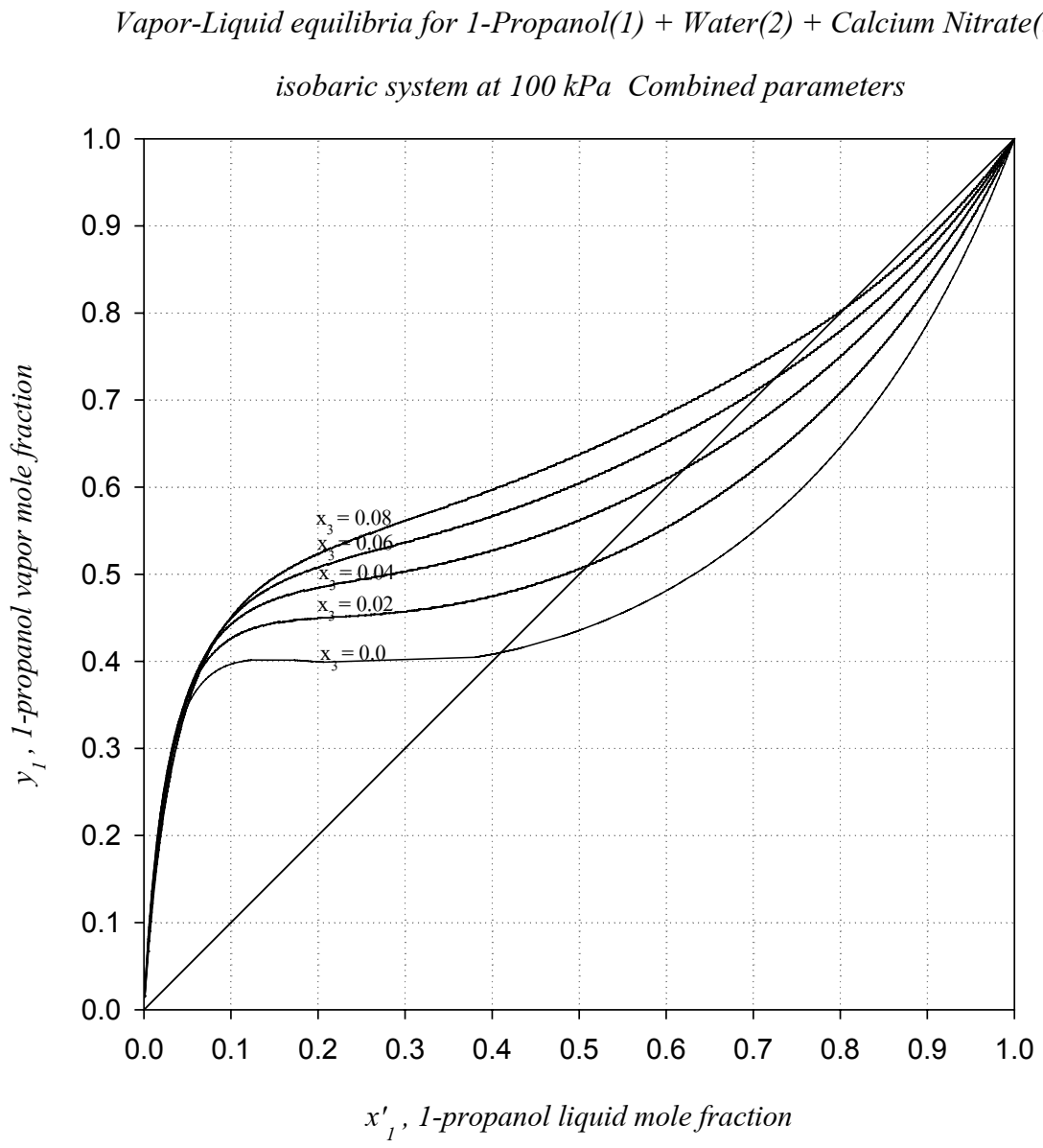
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.055	0.836	367.90	1.1361	1.5644	0.820	0.804	0.180	0.196	-1.977	9.007
0.056	0.625	364.90	1.3650	1.3043	0.658	0.658	0.342	0.343	-0.076	0.147
0.056	0.811	367.40	1.1565	1.5175	0.796	0.783	0.204	0.217	-1.591	6.208
0.059	0.676	365.55	1.2992	1.3264	0.687	0.692	0.313	0.308	0.798	-1.751
0.059	0.837	367.90	1.1379	1.5243	0.816	0.809	0.184	0.191	-0.829	3.674
0.059	0.861	368.40	1.1199	1.5602	0.848	0.831	0.152	0.169	-1.979	11.043
0.059	0.741	366.50	1.2242	1.3976	0.737	0.734	0.263	0.266	-0.342	0.958
0.060	0.705	366.25	1.2652	1.3485	0.723	0.712	0.277	0.288	-1.502	3.920
0.060	0.482	363.95	1.6685	1.1516	0.597	0.597	0.403	0.403	-0.011	0.016
0.062	0.823	367.95	1.1511	1.4755	0.813	0.801	0.187	0.199	-1.527	6.638
0.062	0.724	366.40	1.2460	1.3505	0.727	0.728	0.273	0.272	0.082	-0.217
0.063	0.568	364.80	1.4766	1.1969	0.642	0.641	0.358	0.359	-0.169	0.303
0.064	0.916	369.55	1.0830	1.5947	0.903	0.892	0.097	0.108	-1.270	11.825
0.065	0.429	363.85	1.8442	1.0783	0.587	0.585	0.413	0.415	-0.290	0.412
0.065	0.710	366.40	1.2654	1.3091	0.721	0.723	0.279	0.277	0.295	-0.762
0.066	0.672	366.20	1.3143	1.2633	0.711	0.702	0.289	0.298	-1.318	3.242
0.066	0.637	365.50	1.3639	1.2303	0.678	0.682	0.322	0.318	0.572	-1.205
0.066	0.767	367.15	1.2046	1.3650	0.766	0.763	0.234	0.238	-0.457	1.497
0.067	0.780	367.40	1.1926	1.3724	0.778	0.773	0.222	0.227	-0.634	2.222
0.067	0.823	368.00	1.1536	1.4286	0.811	0.806	0.189	0.194	-0.612	2.625
0.068	0.694	366.40	1.2881	1.2678	0.714	0.718	0.286	0.282	0.527	-1.316
0.070	0.850	368.55	1.1321	1.4395	0.843	0.832	0.157	0.168	-1.355	7.273
0.071	0.591	365.50	1.4461	1.1550	0.666	0.666	0.334	0.334	-0.010	0.020
0.071	0.520	364.80	1.5918	1.1031	0.631	0.632	0.369	0.368	0.218	-0.373
0.071	0.909	369.60	1.0875	1.5167	0.899	0.888	0.101	0.112	-1.195	10.636
0.073	0.636	366.25	1.3739	1.1769	0.700	0.692	0.300	0.308	-1.091	2.546
0.074	0.730	367.10	1.2500	1.2568	0.748	0.748	0.252	0.252	0.027	-0.081
0.076	0.814	368.05	1.1644	1.3394	0.803	0.808	0.197	0.192	0.637	-2.598
0.077	0.468	364.80	1.7345	1.0310	0.625	0.620	0.375	0.380	-0.871	1.452
0.077	0.938	370.15	1.0655	1.5052	0.926	0.922	0.074	0.078	-0.381	4.773
0.078	0.554	365.55	1.5248	1.0802	0.661	0.659	0.339	0.341	-0.311	0.606
0.078	0.825	368.35	1.1549	1.3379	0.819	0.818	0.181	0.182	-0.072	0.327
0.078	0.839	368.70	1.1427	1.3570	0.837	0.829	0.163	0.171	-0.904	4.641
0.080	0.753	367.60	1.2272	1.2360	0.772	0.770	0.228	0.230	-0.258	0.874
0.080	0.851	368.90	1.1323	1.3570	0.845	0.841	0.155	0.159	-0.491	2.678
0.081	0.599	366.35	1.4417	1.0925	0.691	0.685	0.309	0.315	-0.859	1.920
0.081	0.672	366.80	1.3277	1.1492	0.718	0.723	0.282	0.277	0.740	-1.885
0.081	0.725	367.35	1.2596	1.1991	0.752	0.754	0.248	0.246	0.239	-0.726
0.081	0.743	367.70	1.2390	1.2185	0.767	0.765	0.233	0.235	-0.285	0.937
0.084	0.517	365.60	1.6105	1.0194	0.652	0.651	0.348	0.349	-0.184	0.345
0.084	0.862	369.20	1.1227	1.3406	0.855	0.853	0.145	0.147	-0.235	1.387
0.086	0.760	368.10	1.2215	1.2012	0.785	0.781	0.215	0.219	-0.518	1.893
0.087	0.560	366.45	1.5184	1.0290	0.686	0.675	0.314	0.325	-1.666	3.640
0.089	0.938	370.50	1.0606	1.4057	0.924	0.927	0.076	0.073	0.319	-3.877
0.091	0.839	369.20	1.1423	1.2596	0.842	0.840	0.158	0.160	-0.263	1.403
0.092	0.721	367.90	1.2677	1.1208	0.759	0.764	0.241	0.236	0.638	-2.008
0.092	0.795	368.55	1.1846	1.1988	0.806	0.809	0.194	0.191	0.417	-1.731
0.092	0.779	368.60	1.2017	1.1816	0.802	0.799	0.198	0.201	-0.390	1.579
0.093	0.627	367.10	1.3999	1.0367	0.712	0.715	0.288	0.285	0.416	-1.027
0.094	0.775	368.60	1.2058	1.1638	0.800	0.798	0.200	0.202	-0.231	0.924
0.095	0.523	366.55	1.5988	0.9616	0.680	0.668	0.320	0.332	-1.759	3.738
0.097	0.687	367.75	1.3119	1.0590	0.744	0.751	0.256	0.250	0.873	-2.539
0.099	0.936	370.70	1.0568	1.3286	0.921	0.928	0.079	0.072	0.786	-9.167
0.099	0.796	369.10	1.1833	1.1556	0.820	0.816	0.180	0.184	-0.504	2.297
0.100	0.764	368.75	1.2175	1.1144	0.800	0.797	0.200	0.203	-0.408	1.631
0.101	0.688	368.10	1.3107	1.0370	0.754	0.755	0.246	0.245	0.162	-0.496
0.103	0.891	370.40	1.0925	1.2447	0.887	0.889	0.113	0.111	0.176	-1.385
0.104	0.584	367.40	1.4734	0.9476	0.706	0.707	0.294	0.293	0.145	-0.348
0.106	0.823	369.60	1.1541	1.1432	0.837	0.839	0.163	0.161	0.234	-1.201
0.109	0.824	369.60	1.1517	1.1261	0.831	0.842	0.169	0.158	1.280	-6.294
0.110	0.759	369.15	1.2210	1.0514	0.798	0.802	0.202	0.198	0.530	-2.094
0.111	0.929	370.70	1.0548	1.2387	0.912	0.925	0.088	0.075	1.460	-15.128
0.112	0.649	368.50	1.3643	0.9485	0.747	0.747	0.253	0.253	-0.056	0.165
0.113	0.953	371.20	1.0342	1.2561	0.931	0.949	0.069	0.051	1.926	-25.982
0.113	0.895	370.40	1.0830	1.1855	0.882	0.896	0.118	0.104	1.635	-12.221
0.115	0.739	369.25	1.2429	1.0056	0.796	0.795	0.204	0.205	-0.105	0.410
0.115	0.940	370.95	1.0431	1.2272	0.919	0.937	0.081	0.063	1.933	-21.927
0.116	0.845	370.30	1.1287	1.1111	0.858	0.860	0.142	0.140	0.259	-1.565
0.119	0.812	369.90	1.1598	1.0573	0.831	0.840	0.169	0.160	1.118	-5.496
0.121	0.953	371.40	1.0287	1.2073	0.927	0.951	0.073	0.049	2.544	-32.299
0.121	0.896	370.80	1.0779	1.1410	0.882	0.901	0.118	0.099	2.099	-15.692
0.122	0.726	369.50	1.2559	0.9588	0.789	0.794	0.211	0.206	0.618	-2.310
0.124	0.882	370.70	1.0887	1.1082	0.880	0.891	0.120	0.109	1.238	-9.079

ตาราง 3-45 (ต่อ 3/3)

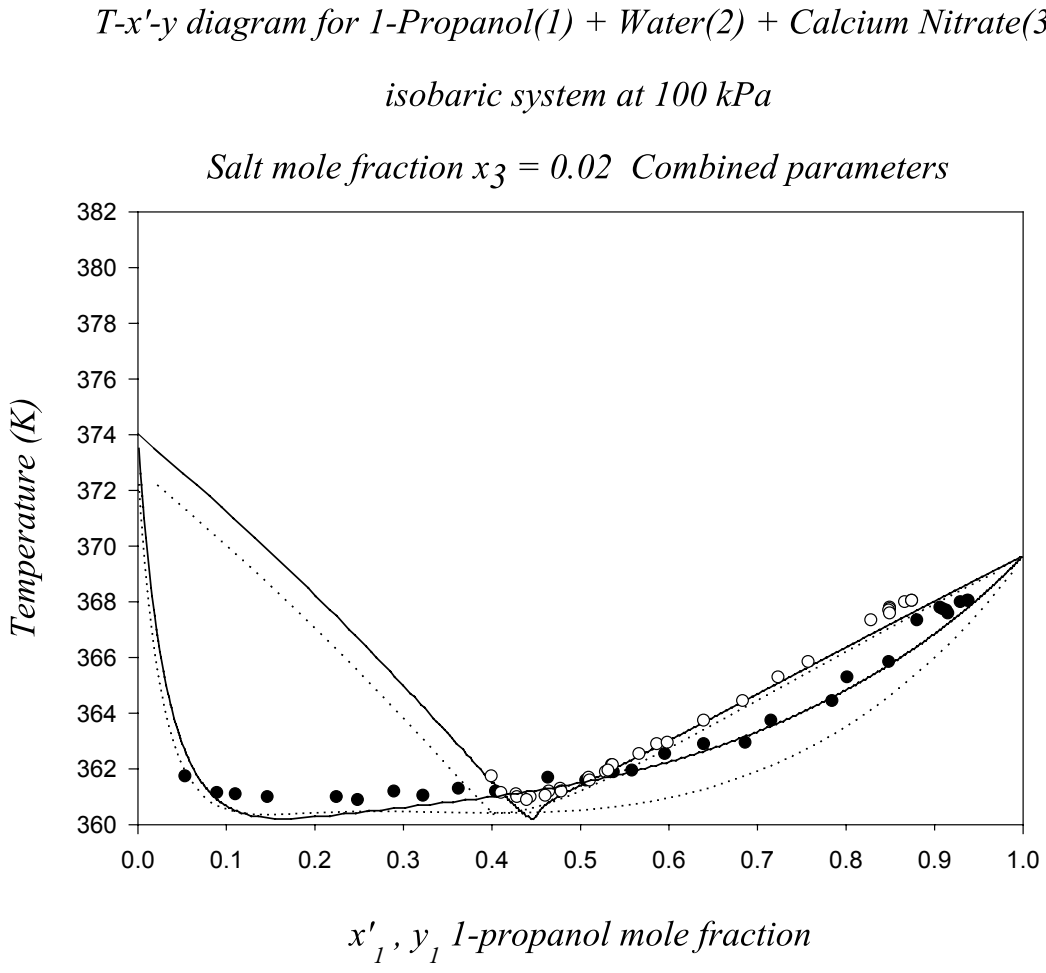
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.125	0.729	369.75	1.2510	0.9474	0.798	0.798	0.202	0.202	-0.035	0.139
0.128	0.711	369.30	1.2706	0.9163	0.787	0.791	0.213	0.209	0.506	-1.870
0.128	0.915	371.10	1.0562	1.1239	0.897	0.918	0.103	0.082	2.387	-20.792
0.129	0.873	370.95	1.0947	1.0726	0.874	0.886	0.126	0.114	1.421	-9.856
0.130	0.946	371.70	1.0287	1.1491	0.923	0.946	0.077	0.054	2.476	-29.682
0.130	0.791	370.35	1.1770	0.9811	0.834	0.835	0.166	0.165	0.071	-0.354
0.132	0.690	370.10	1.2972	0.8850	0.786	0.784	0.214	0.216	-0.288	1.056
0.135	0.793	370.70	1.1723	0.9603	0.833	0.839	0.167	0.161	0.687	-3.426
0.136	0.907	371.55	1.0591	1.0749	0.897	0.915	0.103	0.085	1.955	-17.023
0.141	0.867	371.50	1.0936	1.0084	0.873	0.887	0.127	0.113	1.635	-11.241
0.142	0.905	371.60	1.0565	1.0429	0.891	0.915	0.109	0.085	2.679	-21.903
0.144	0.927	371.80	1.0351	1.0565	0.896	0.933	0.104	0.067	4.097	-35.295



ภาพที่ 3-34 ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ 1-โพรพานอล(1) ที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ร่วมกับพารามิเตอร์ของแบบจำลองจากระบบอื่น ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดันคงที่ 100 kPa



ภาพที่ 3-35 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa ที่ความเข้มข้นของเกลือมีเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.0 0.02 0.04 0.06 และ 0.08 โดยค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองได้จากระบบอื่น
เมื่อ —— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC



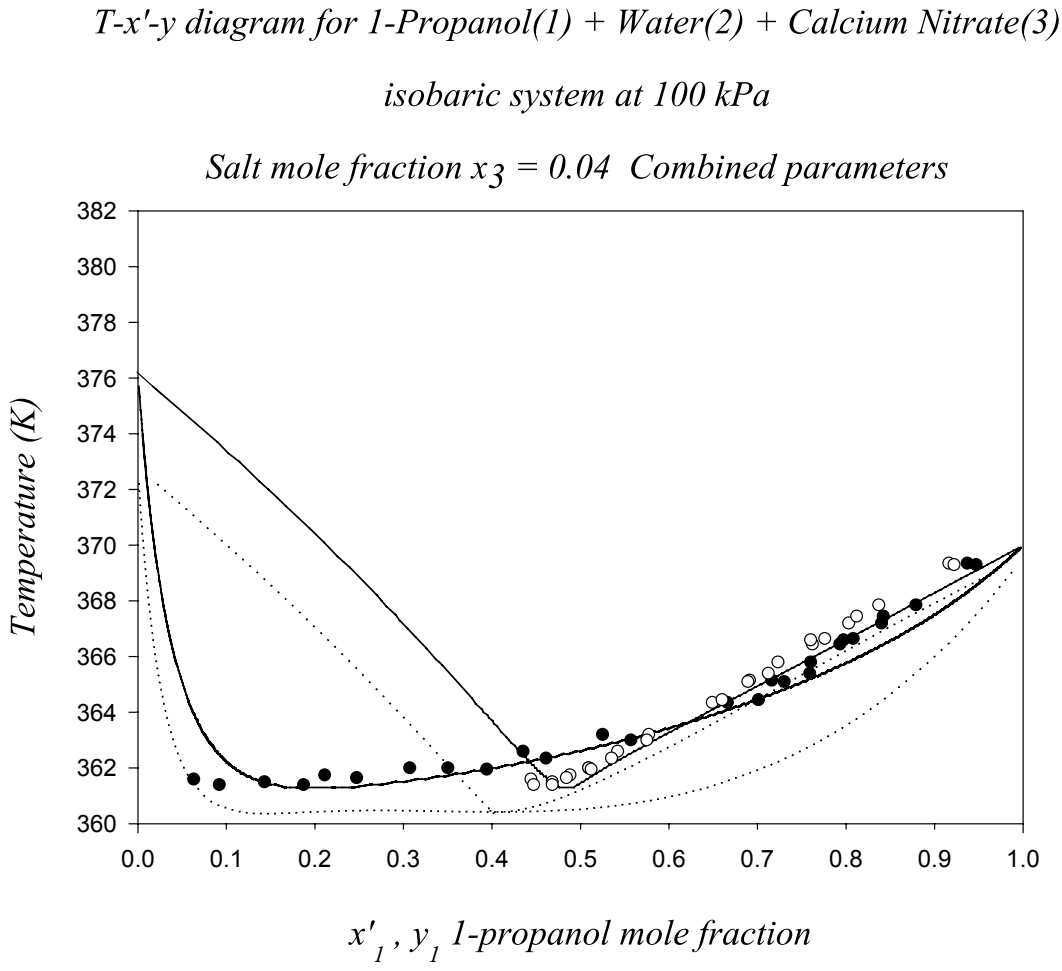
ภาพที่ 3-36 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.02 โดยค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองได้จากระบบอื่น

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



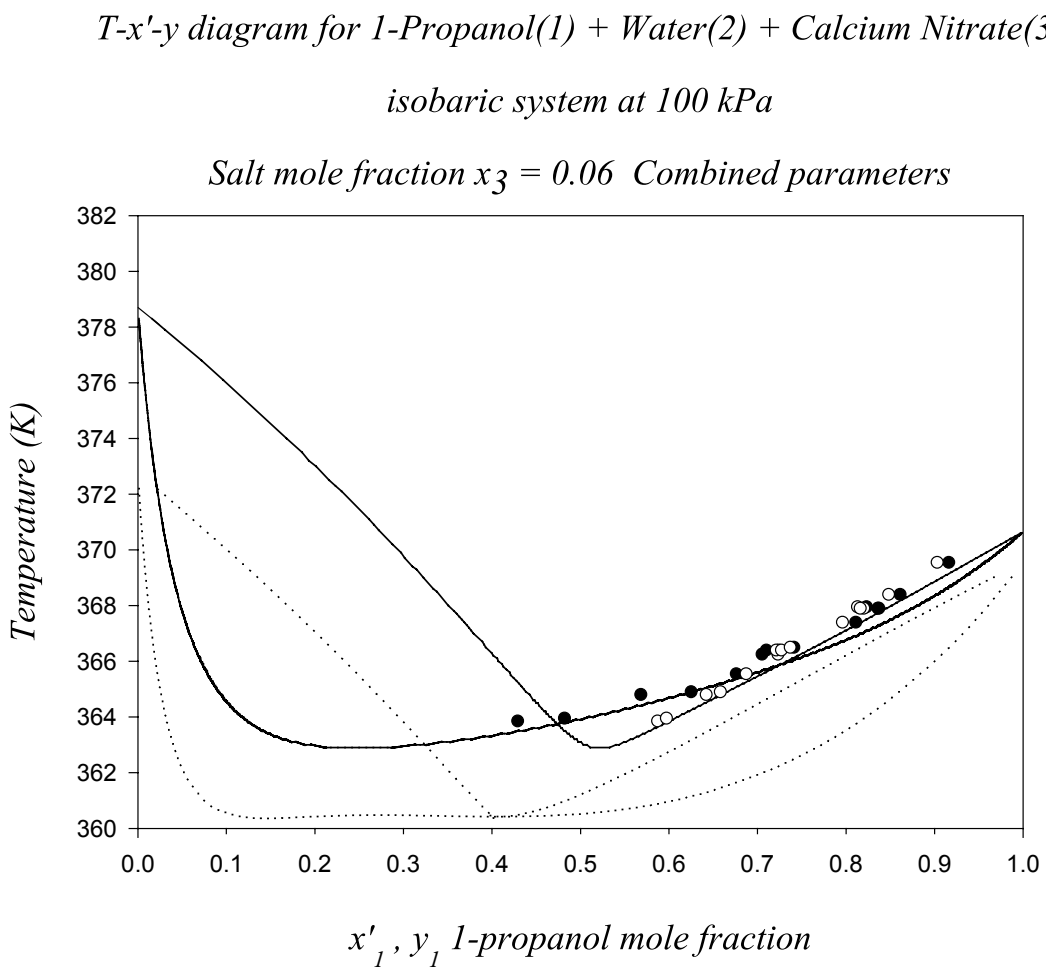
ภาพที่ 3-37 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.04 โดยค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองได้จากระบบอื่น

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



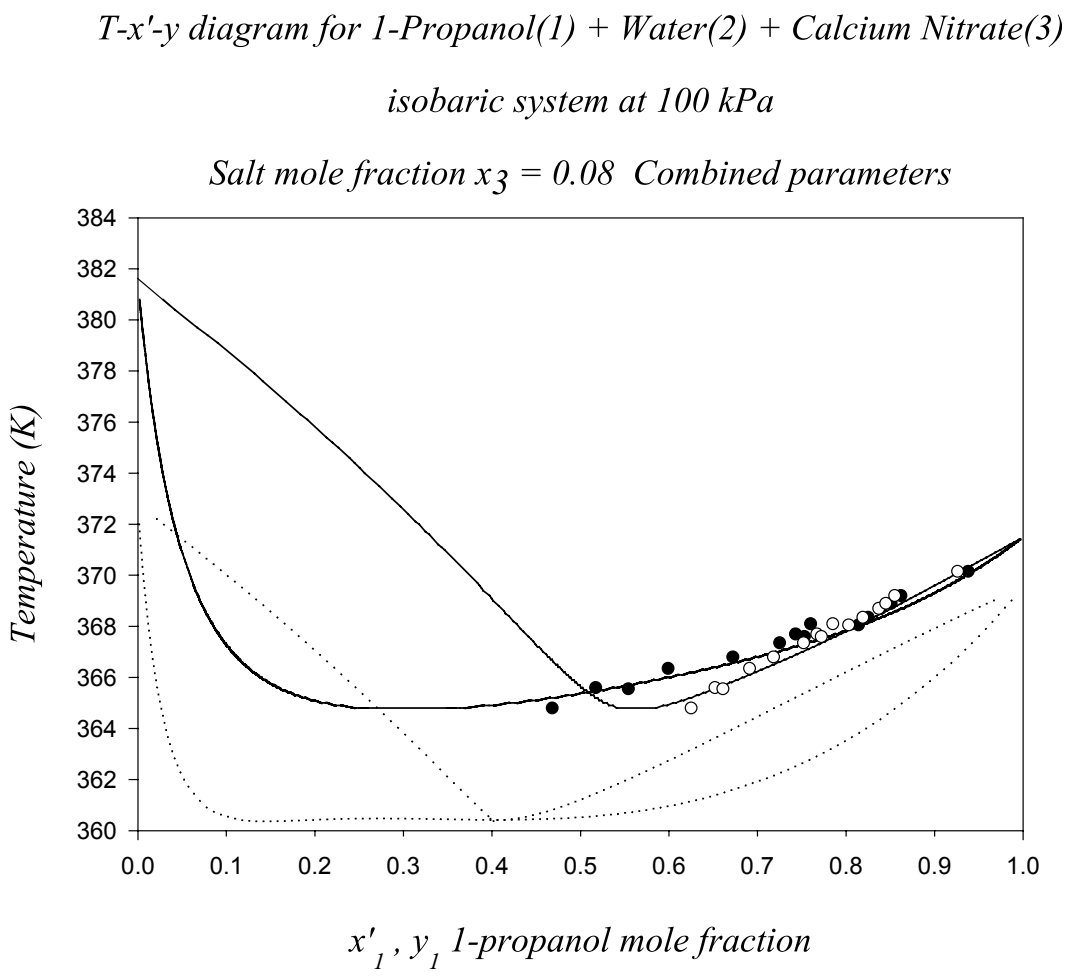
ภาพที่ 3-38 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.06 โดยค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองได้จากระบบอื่น

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



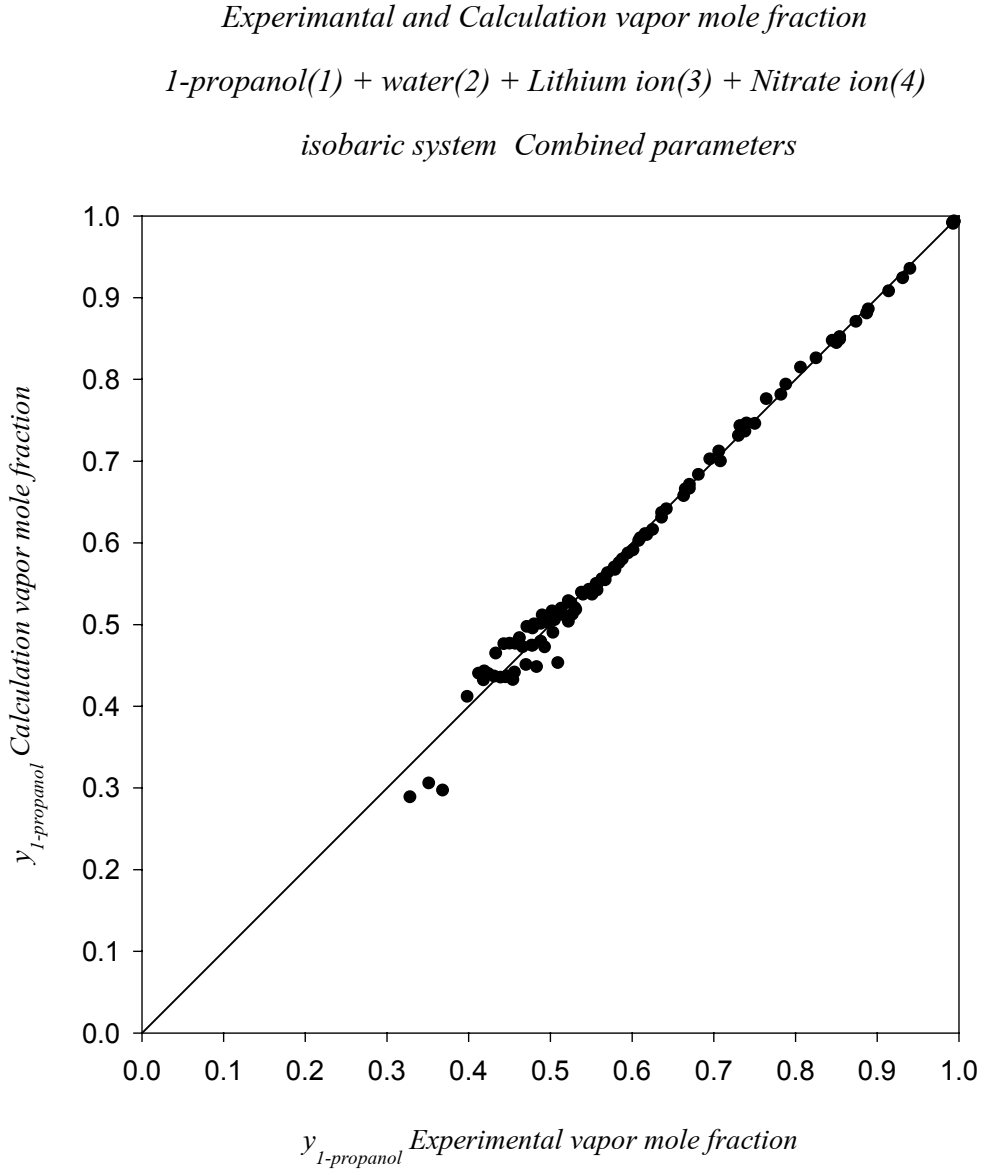
ภาพที่ 3-39 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.08
โดยค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองได้จากระบบอื่น
เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง
○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง
—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC
..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ

ตาราง 3-46 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบ 1-โพรพานอล(1) +น้ำ(2) + ลิเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa โดยใช้ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC จากระบบอื่น

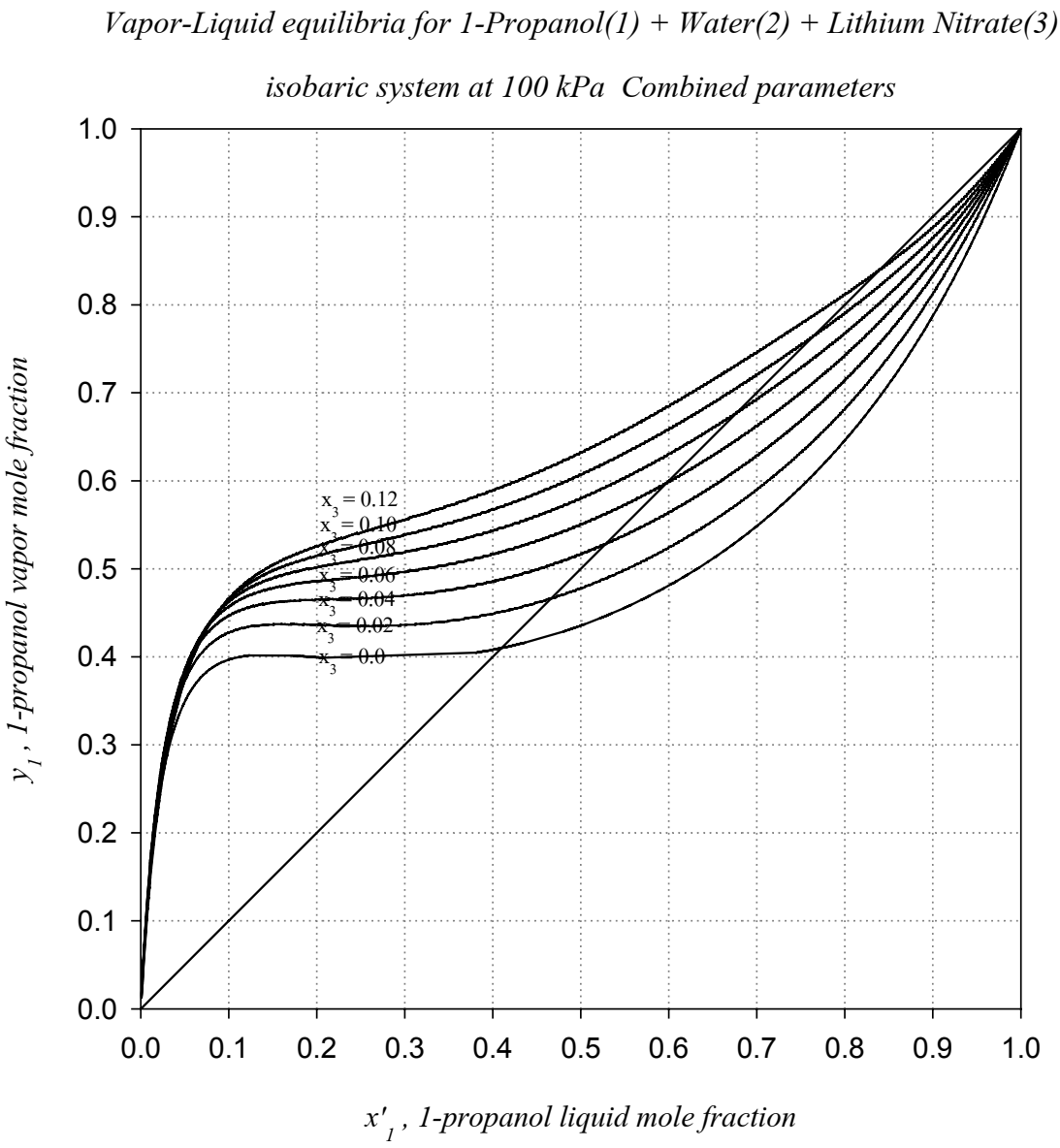
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.020	0.024	364.55	14.6696	0.9763	0.328	0.289	0.672	0.711	-11.903	5.810
0.020	0.066	361.75	9.0281	0.9956	0.398	0.412	0.602	0.588	3.540	-2.340
0.021	0.110	361.35	5.9938	1.0291	0.412	0.440	0.588	0.560	6.877	-4.819
0.021	0.151	361.15	4.3928	1.0727	0.419	0.443	0.581	0.557	5.759	-4.153
0.021	0.196	361.05	3.3323	1.1291	0.424	0.440	0.576	0.560	3.786	-2.787
0.021	0.240	361.05	2.6782	1.1911	0.431	0.437	0.569	0.563	1.347	-1.020
0.021	0.284	361.05	2.2414	1.2584	0.439	0.436	0.561	0.564	-0.783	0.613
0.021	0.325	361.05	1.9550	1.3250	0.447	0.437	0.553	0.563	-2.252	1.820
0.021	0.370	361.15	1.7270	1.4013	0.456	0.442	0.544	0.558	-3.159	2.648
0.021	0.421	361.25	1.5412	1.4908	0.470	0.451	0.530	0.549	-4.048	3.590
0.021	0.495	361.55	1.3582	1.6246	0.493	0.473	0.507	0.527	-4.144	4.030
0.021	0.569	361.85	1.2384	1.7607	0.522	0.504	0.478	0.496	-3.456	3.775
0.022	0.653	362.55	1.1511	1.9056	0.567	0.555	0.433	0.445	-2.178	2.852
0.022	0.733	363.55	1.0933	2.0515	0.625	0.616	0.375	0.384	-1.395	2.324
0.021	0.817	365.15	1.0517	2.2139	0.708	0.700	0.292	0.300	-1.105	2.678
0.021	0.923	367.85	1.0238	2.3508	0.854	0.852	0.146	0.148	-0.184	1.078
0.022	0.996	370.35	1.0156	2.2701	0.992	0.992	0.008	0.008	-0.001	0.160
0.043	0.024	366.15	14.8890	0.9158	0.351	0.306	0.649	0.694	-12.808	6.927
0.044	0.061	362.35	9.9269	0.9284	0.418	0.432	0.582	0.568	3.362	-2.414
0.045	0.094	362.05	7.2679	0.9494	0.433	0.465	0.567	0.535	7.399	-5.651
0.045	0.136	361.95	5.2167	0.9876	0.443	0.476	0.557	0.524	7.541	-5.997
0.045	0.179	361.95	3.9505	1.0334	0.450	0.477	0.550	0.523	5.999	-4.908
0.046	0.215	361.95	3.2603	1.0724	0.457	0.477	0.543	0.523	4.324	-3.639
0.044	0.267	362.05	2.5769	1.1458	0.466	0.473	0.534	0.527	1.447	-1.263
0.044	0.317	362.05	2.1573	1.2138	0.478	0.474	0.522	0.526	-0.736	0.674
0.044	0.319	362.15	2.1435	1.2166	0.477	0.475	0.523	0.525	-0.494	0.451
0.044	0.364	362.15	1.8829	1.2801	0.488	0.480	0.512	0.520	-1.719	1.639
0.044	0.419	362.45	1.6549	1.3592	0.503	0.490	0.497	0.510	-2.530	2.561
0.044	0.493	362.75	1.4471	1.4659	0.527	0.513	0.473	0.487	-2.714	3.024
0.044	0.562	363.15	1.3162	1.5639	0.557	0.542	0.443	0.458	-2.651	3.333
0.044	0.648	363.95	1.2038	1.6829	0.601	0.591	0.399	0.409	-1.618	2.437
0.044	0.737	365.05	1.1240	1.8053	0.663	0.658	0.337	0.342	-0.811	1.595
0.044	0.828	366.55	1.0682	1.9316	0.750	0.746	0.250	0.254	-0.516	1.549
0.044	0.930	369.05	1.0310	2.0505	0.887	0.881	0.113	0.119	-0.670	5.258
0.043	0.995	370.95	1.0187	2.0999	0.993	0.991	0.007	0.009	-0.224	31.791
0.067	0.022	367.35	14.3820	0.8452	0.368	0.297	0.632	0.703	-19.202	11.181
0.066	0.057	363.25	10.0479	0.8618	0.445	0.436	0.555	0.564	-2.013	1.614
0.067	0.099	362.85	6.9165	0.8890	0.462	0.484	0.538	0.516	4.713	-4.047
0.067	0.142	362.85	5.0563	0.9267	0.471	0.497	0.529	0.503	5.621	-5.005
0.067	0.186	362.95	3.8829	0.9702	0.480	0.501	0.520	0.499	4.309	-3.977
0.067	0.228	363.05	3.1505	1.0151	0.488	0.501	0.512	0.499	2.728	-2.600
0.067	0.270	363.15	2.6447	1.0622	0.496	0.503	0.504	0.497	1.314	-1.293
0.067	0.315	363.35	2.2609	1.1143	0.505	0.506	0.495	0.494	0.175	-0.178
0.067	0.359	363.55	1.9890	1.1660	0.516	0.512	0.484	0.488	-0.796	0.849
0.067	0.401	363.75	1.7938	1.2153	0.530	0.520	0.470	0.480	-1.811	2.042
0.066	0.464	364.05	1.5776	1.2936	0.551	0.537	0.449	0.463	-2.536	3.112
0.066	0.540	364.55	1.4004	1.3780	0.579	0.567	0.421	0.433	-1.988	2.735
0.066	0.620	365.15	1.2716	1.4610	0.618	0.610	0.382	0.390	-1.307	2.115
0.066	0.705	366.15	1.1736	1.5464	0.670	0.667	0.330	0.333	-0.486	0.986
0.066	0.790	367.25	1.1014	1.6387	0.738	0.736	0.262	0.264	-0.206	0.579
0.066	0.893	369.25	1.0422	1.7708	0.850	0.845	0.150	0.155	-0.596	3.380
0.065	0.996	371.65	1.0114	1.9330	0.994	0.993	0.006	0.007	-0.085	14.074
0.081	0.054	363.95	9.9320	0.8172	0.454	0.433	0.546	0.567	-4.731	3.934
0.082	0.107	363.55	6.3655	0.8521	0.478	0.496	0.522	0.504	3.681	-3.371
0.083	0.160	363.55	4.4842	0.8948	0.490	0.512	0.510	0.488	4.425	-4.252
0.083	0.217	363.85	3.3325	0.9494	0.502	0.517	0.498	0.483	2.898	-2.921

ตาราง 3-46 (ต่อ)

x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.083	0.265	364.05	2.7255	0.9978	0.513	0.520	0.487	0.480	1.309	-1.378
0.084	0.320	364.25	2.2607	1.0503	0.525	0.527	0.475	0.473	0.347	-0.384
0.085	0.370	364.55	1.9688	1.0969	0.540	0.537	0.460	0.463	-0.570	0.669
0.083	0.426	364.85	1.7298	1.1620	0.557	0.549	0.443	0.451	-1.492	1.876
0.083	0.502	365.35	1.5079	1.2337	0.584	0.576	0.416	0.424	-1.410	1.979
0.083	0.567	365.85	1.3743	1.2894	0.610	0.606	0.390	0.394	-0.638	0.998
0.082	0.632	366.35	1.2724	1.3480	0.642	0.641	0.358	0.359	-0.089	0.160
0.082	0.696	366.95	1.1940	1.3976	0.681	0.684	0.319	0.316	0.386	-0.824
0.081	0.761	367.75	1.1294	1.4625	0.730	0.731	0.270	0.269	0.164	-0.444
0.081	0.820	368.65	1.0822	1.5252	0.782	0.782	0.218	0.218	-0.034	0.122
0.080	0.888	369.85	1.0409	1.6264	0.854	0.849	0.146	0.151	-0.554	3.238
0.080	0.937	370.85	1.0195	1.7062	0.914	0.908	0.086	0.092	-0.642	6.826
0.080	0.995	372.15	1.0023	1.8184	0.993	0.992	0.007	0.008	-0.112	15.901
0.102	0.061	364.75	8.6948	0.7646	0.483	0.448	0.517	0.552	-7.168	6.696
0.103	0.125	364.55	5.4075	0.8076	0.506	0.513	0.494	0.487	1.320	-1.352
0.103	0.189	364.85	3.7713	0.8606	0.522	0.529	0.478	0.471	1.370	-1.496
0.104	0.263	365.25	2.7489	0.9222	0.538	0.539	0.462	0.461	0.275	-0.321
0.106	0.319	365.75	2.2841	0.9640	0.556	0.550	0.444	0.450	-1.033	1.294
0.103	0.391	365.95	1.8905	1.0368	0.570	0.564	0.430	0.437	-1.141	1.512
0.103	0.444	366.35	1.6914	1.0791	0.588	0.580	0.412	0.420	-1.352	1.930
0.103	0.502	366.75	1.5285	1.1212	0.608	0.603	0.392	0.397	-0.854	1.324
0.104	0.570	367.35	1.3867	1.1581	0.636	0.637	0.364	0.363	0.156	-0.272
0.103	0.633	367.85	1.2847	1.1988	0.670	0.672	0.330	0.328	0.242	-0.492
0.103	0.696	368.45	1.2027	1.2322	0.706	0.712	0.294	0.288	0.886	-2.129
0.101	0.748	368.95	1.1453	1.2804	0.740	0.746	0.260	0.254	0.868	-2.471
0.101	0.810	369.75	1.0876	1.3341	0.788	0.794	0.212	0.206	0.785	-2.917
0.100	0.849	370.35	1.0576	1.3890	0.825	0.826	0.175	0.174	0.160	-0.752
0.100	0.896	371.15	1.0274	1.4602	0.874	0.871	0.126	0.129	-0.356	2.469
0.101	0.944	372.05	1.0029	1.5434	0.931	0.924	0.069	0.076	-0.721	9.731
0.101	0.996	373.05	0.9846	1.6639	0.994	0.994	0.006	0.006	-0.004	0.716
0.122	0.064	365.95	7.8784	0.7165	0.509	0.453	0.491	0.547	-10.945	11.346
0.122	0.124	365.85	5.2172	0.7568	0.531	0.518	0.469	0.482	-2.396	2.713
0.123	0.197	366.25	3.5508	0.8088	0.547	0.543	0.453	0.457	-0.726	0.876
0.123	0.266	366.65	2.6980	0.8619	0.563	0.556	0.437	0.444	-1.234	1.590
0.123	0.333	366.95	2.1923	0.9119	0.578	0.570	0.422	0.430	-1.371	1.878
0.124	0.393	367.45	1.8899	0.9497	0.595	0.588	0.405	0.412	-1.249	1.835
0.126	0.454	367.95	1.6711	0.9779	0.616	0.611	0.384	0.389	-0.767	1.230
0.126	0.501	368.35	1.5427	1.0023	0.636	0.631	0.364	0.369	-0.754	1.318
0.125	0.573	369.05	1.3907	1.0382	0.665	0.666	0.335	0.334	0.136	-0.270
0.124	0.639	369.35	1.2827	1.0660	0.695	0.703	0.305	0.297	1.101	-2.508
0.124	0.703	370.15	1.1975	1.0878	0.732	0.743	0.268	0.257	1.535	-4.192
0.123	0.754	370.55	1.1385	1.1177	0.764	0.776	0.236	0.224	1.612	-5.218
0.122	0.810	371.15	1.0821	1.1659	0.806	0.815	0.194	0.185	1.106	-4.596
0.120	0.855	371.75	1.0443	1.2327	0.845	0.848	0.155	0.152	0.315	-1.720
0.120	0.900	372.35	1.0120	1.3034	0.889	0.886	0.111	0.114	-0.309	2.473
0.120	0.949	373.25	0.9850	1.4046	0.940	0.936	0.060	0.064	-0.449	7.040
0.121	0.995	373.95	0.9651	1.5120	0.994	0.993	0.006	0.007	-0.100	16.557

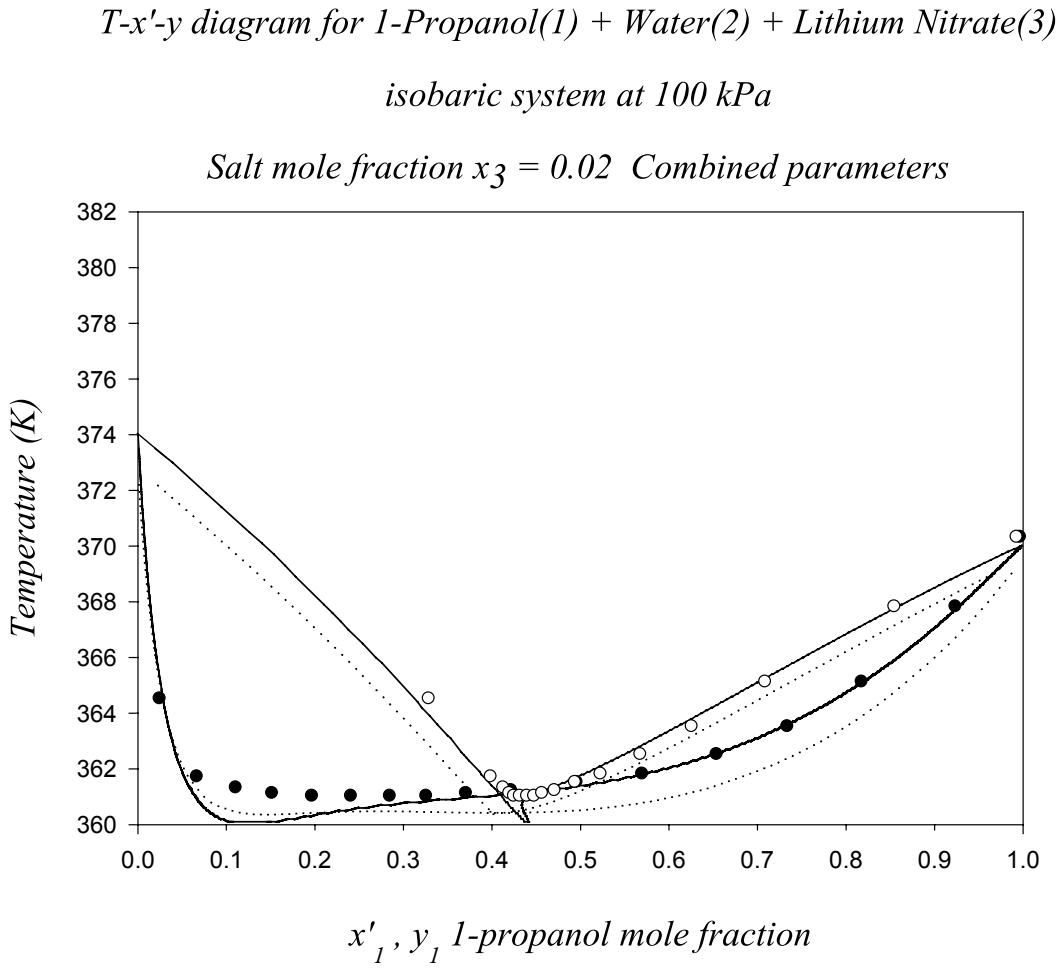


ภาพที่ 3-40 ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ 1-โพรพานอล(1) ที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ร่วมกับพารามิเตอร์ของแบบจำลองจากระบบอื่น ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดันคงที่ 100 kPa



ภาพที่ 3-41 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa ที่ความเข้มข้นของเกลือมีเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.0 0.02 0.04 0.06 0.08 และ 0.12 โดยค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองได้จากระบบอื่น

เมื่อ —— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC



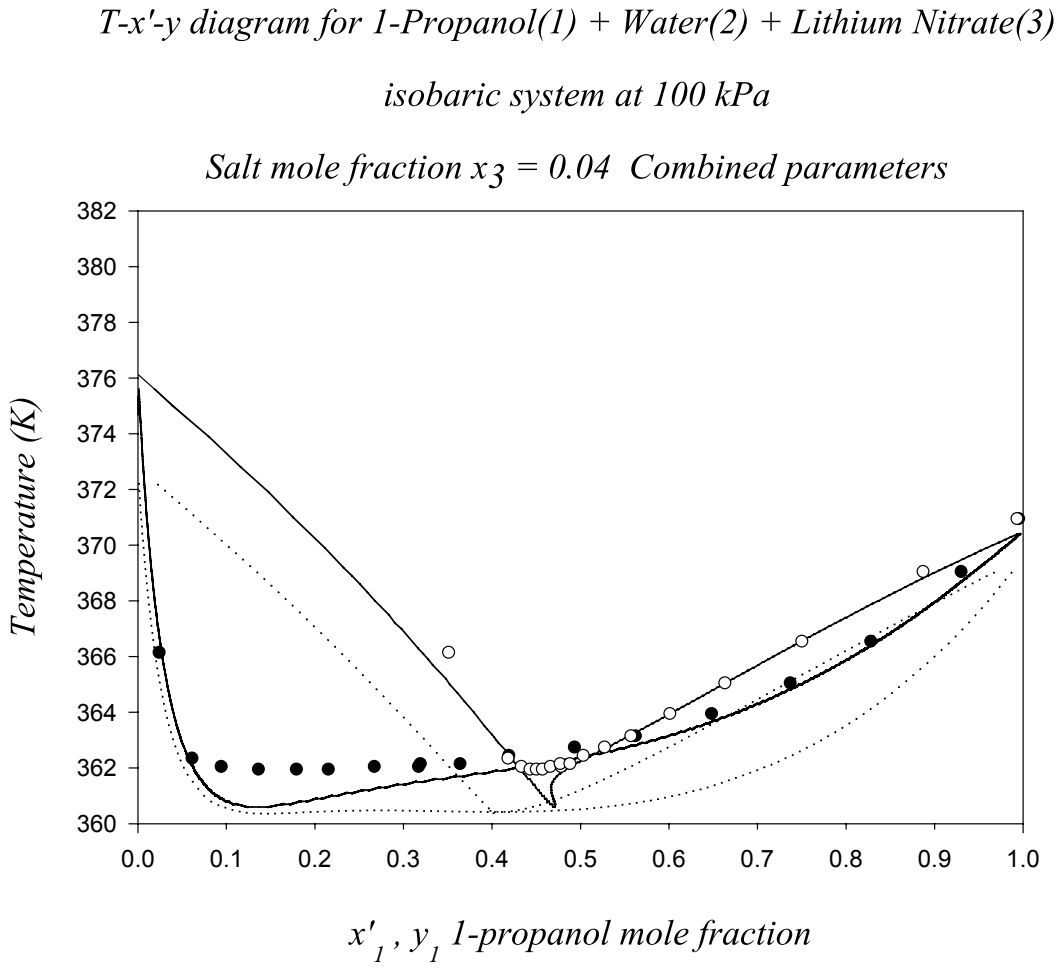
ภาพที่ 3-42 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.02 โดยค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองได้จากระบบอื่น

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



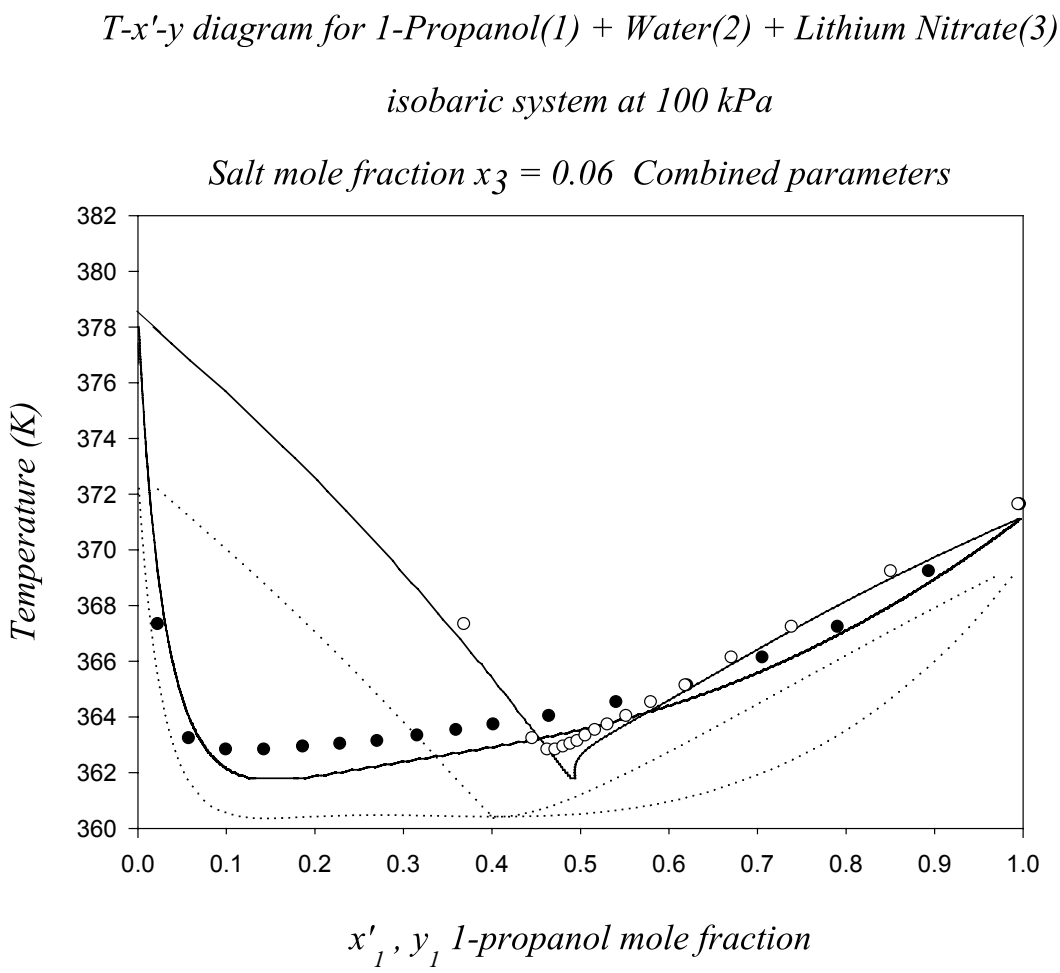
ภาพที่ 3-43 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.04 โดยค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองได้จากระบบอื่น

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



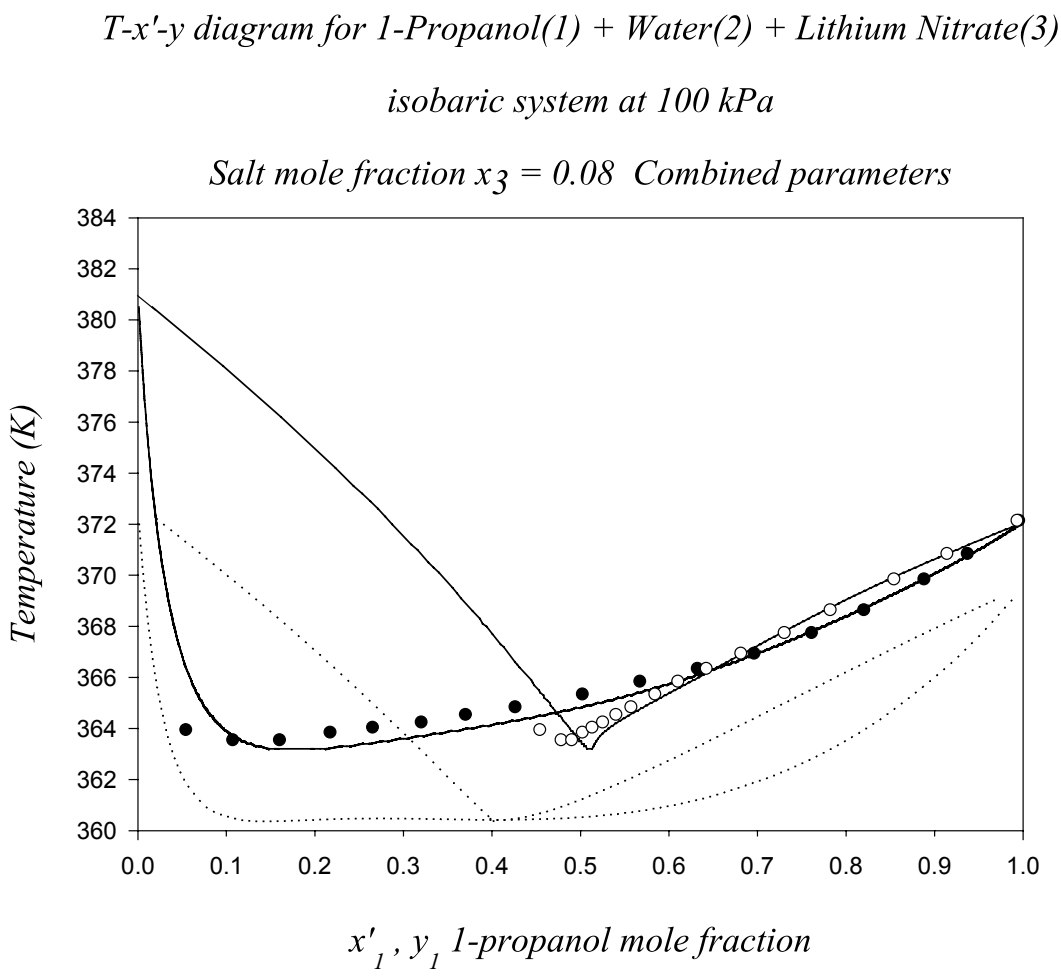
ภาพที่ 3-44 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.06 โดยค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองได้จากระบบอื่น

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



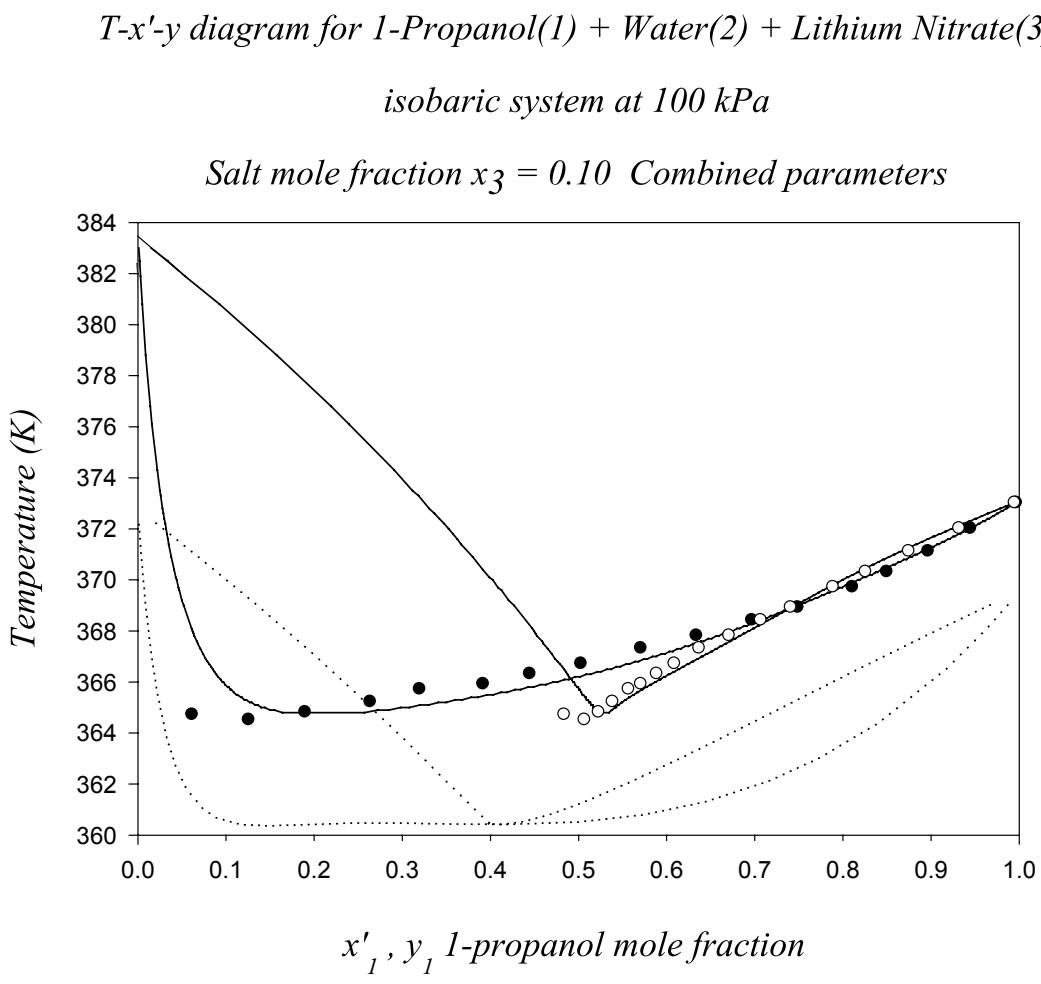
ภาพที่ 3-45 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.08 โดยค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองได้จากระบบอื่น

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



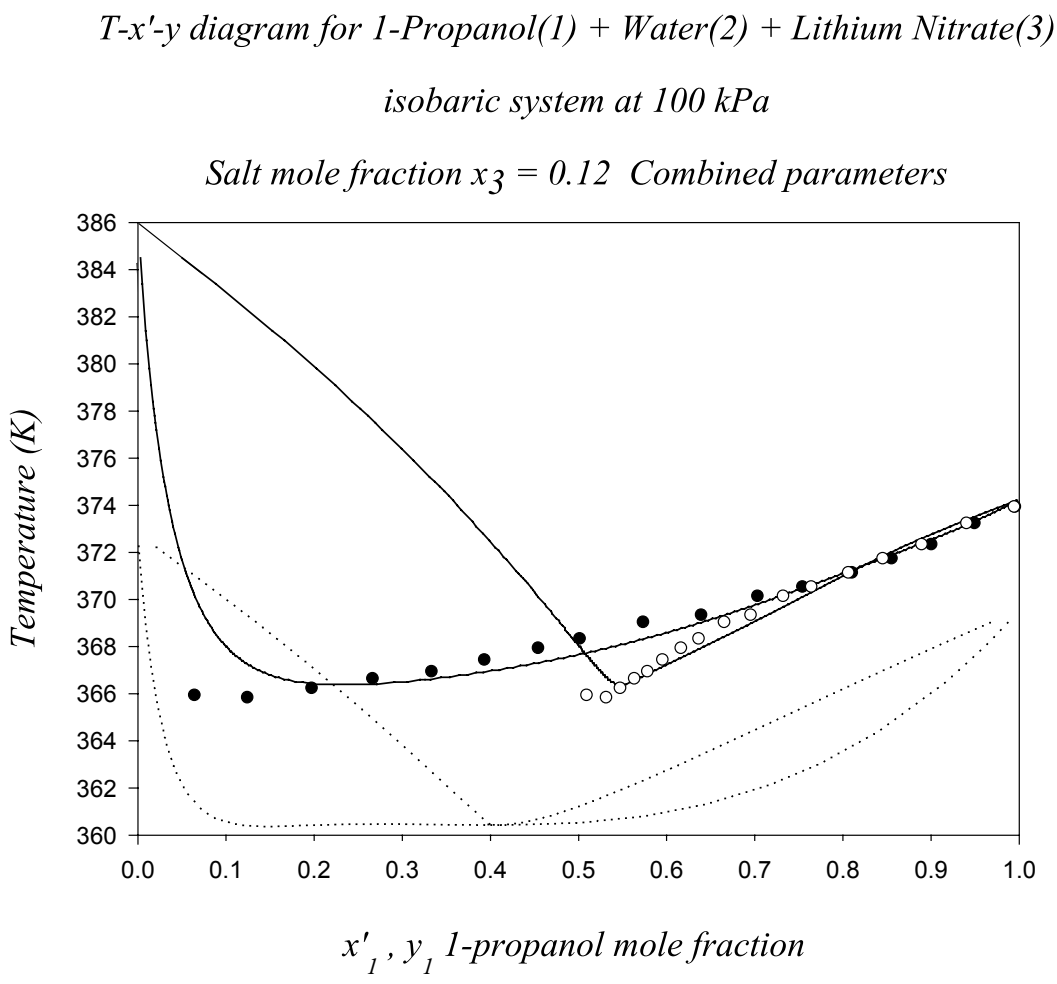
ภาพที่ 3-46 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.10 โดยค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองได้จากระบบอื่น

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



ภาพที่ 3-47 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.12 โดยค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองได้จากระบบอื่น

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ

วิจารณ์ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์ และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC จากระบบอื่นที่มีองค์ประกอบเหมือนกัน

จากการศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC จากระบบอื่นที่มีองค์ประกอบเหมือนกันโดยกำหนดให้ใช้ค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของ Sander ตามที่กล่าวไว้แล้วข้างต้น พบว่าสามารถใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองจากระบบอื่นในการคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี คำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบ ได้แก่ ระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) และระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดันคงที่ 100 kPa โดยใช้ความสัมพันธ์ระหว่างค่าคงที่ k_{ij} กับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลายในการปรับค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ซึ่งมีความจำเพาะกับระบบที่ศึกษา ในลักษณะนี้เป็นการเพิ่มพารามิเตอร์สำหรับการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นอาจจะมีผลทำให้เปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าต่ำลง แต่ยังคงมีความจำเพาะของระบบกับค่าคงที่ k_{ij} สำหรับปรับค่าพารามิเตอร์ซึ่งจะทำให้การใช้ค่าพารามิเตอร์เพื่อทำนายสมดุลระหว่างวัฏภาคกับระบบที่สมมุติองค์ประกอบขึ้นมานั้นใช้ไม่ได้

สำหรับตำแหน่งอะซีโอโทรปที่เกิดขึ้นกับองค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายในระบบสารอิเล็กโทรไลต์ พิจารณาตำแหน่งอะซีโอโทรปของตัวทำละลาย i และ j เมื่อค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว (x_i', x_j') มีค่าเท่ากับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ (y_i, y_j) ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ร่วมกับพารามิเตอร์จากระบบอื่นที่มีองค์ประกอบเหมือนกัน โดยในการคำนวณกำหนดให้ค่าเศษส่วนโมลของเกลือมีค่าคงที่ได้แก่ ที่ 0.02 0.04 0.06 0.08 0.10 และ 0.12 โดยตำแหน่งอะซีโอโทรปที่เกิดขึ้นจะเห็นได้ว่ามีความสัมพันธ์กับค่าเศษส่วนโมลของเกลือโดยเมื่อค่าเศษส่วนโมลของเกลือเพิ่มขึ้นตำแหน่งอะซีโอโทรปจะเปลี่ยนแปลงไปในตำแหน่งที่ค่าเศษส่วนโมลของแอลกอฮอล์สูงขึ้น แสดงตำแหน่งอะซีโอโทรปของ 1-โพรพานอล(1) ในตาราง 3-47

ตาราง 3-47 ตำแหน่งของค่าเศษส่วนโมล ($x'_{1,cal}, y_{1,cal}$) และอุณหภูมิ (K) ที่ทำให้เกิดอะซีโอโทรปของ 1-โพรพานอล(1) จากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ร่วมกับพารามิเตอร์ที่ได้จากระบบอื่น

ค่าเศษส่วนโมลของเกลือ	ระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) 100 kPa	ระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) 100 kPa
0.02	0.51 (361.55 K)	0.46 (361.20 K)
0.04	0.63 (363.70 K)	0.52 (362.50 K)
0.06	0.73 (365.90 K)	0.58 (364.20 K)
0.08	0.81 (367.95 K)	0.65 (366.35 K)
0.10	-	0.74 (368.85 K)
0.12	-	0.83 (371.50 K)

สำหรับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอที่ได้จากการคำนวณที่เบี่ยงเบนไปจากค่าจากการทดลองแสดงในรูปของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาด โดยพิจารณาเฉพาะตำแหน่งที่มีข้อมูลค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวขององค์ประกอบที่1 (1-โพรพานอล) ตามที่ปรากฏในผลการทดลองเพื่อเปรียบเทียบกับผลการคำนวณด้วยแบบจำลองโดยการคำนวณใช้ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวค่าเดียวกัน จากการศึกษาพบว่าการใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ร่วมกับพารามิเตอร์ที่ได้จากระบบอื่น เพื่อคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa มีความเบี่ยงเบนทั้งในทิศทางที่มากกว่าและน้อยกว่าค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอจากการทดลอง

เมื่อพิจารณาค่าเฉลี่ย ค่าความแปรปรวน และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ 1-โพรพานอล(1) พบว่าระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) จะมีค่าเฉลี่ยเป็นค่าลบ อธิบายได้ว่าผลการคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ร่วมกับพารามิเตอร์ที่ได้จากระบบอื่น ให้ผลต่ำกว่าค่าที่ได้จากการทดลอง และมีค่าความแปรปรวนของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดต่ำ อธิบายได้ว่าเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดที่เกิดขึ้นมีความแตกต่างกันน้อย สำหรับระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) จะมีค่าเฉลี่ยเป็นค่าลบ อธิบายได้ว่าการคำนวณค่าเศษส่วนโมลให้ผลต่ำกว่าค่าที่ได้จากการทดลอง และมีค่าความแปรปรวนของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดสูง อธิบายได้ว่าเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดที่เกิดขึ้นมีความแตกต่างกันมาก ดังแสดงในตาราง 3-48

ตาราง 3-48 ค่าเฉลี่ย ค่าความแปรปรวน และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ 1-โพรพานอล(1) ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) และระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท (3) ที่ความดัน 100 kPa โดยใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC จากระบบอื่น

	1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3)	1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3)
Mean	-0.296	-0.398
Variance	3.912	8.988
Std-Dev	1.978	2.998

เมื่อพิจารณาค่าเฉลี่ย ค่าความแปรปรวน และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของน้ำ(2) พบว่าระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) จะมีค่าเฉลี่ยเป็นค่าลบ อธิบายได้ว่าผลการคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ร่วมกับพารามิเตอร์ที่ได้จากระบบอื่น ให้ผลต่ำกว่าค่าที่ได้จากการทดลอง และมีค่าความแปรปรวนของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดสูง อธิบายได้ว่าเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดที่เกิดขึ้นมีความแตกต่างกันมาก สำหรับระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) จะมีค่าเฉลี่ยเป็นค่าบวก อธิบายได้ว่าการคำนวณค่าเศษส่วนโมลให้ผลสูงกว่าค่าที่ได้จากการทดลอง และมีค่าความแปรปรวนของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดสูง อธิบายได้ว่าเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดที่เกิดขึ้นมีความแตกต่างกันมาก ดังแสดงในตาราง 3-49

ตาราง 3-49 ค่าเฉลี่ย ค่าความแปรปรวน และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ น้ำ(2) ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) และระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa โดยใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC จากระบบอื่น

	1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3)	1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3)
Mean	-0.218	1.409
Variance	34.201	17.482
Std-Dev	5.848	4.181

เมื่อพิจารณาเปรียบเทียบการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาค ระหว่างการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC โดยใช้ค่าพารามิเตอร์จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นข้อมูลของระบบ กับ การคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC โดยใช้ค่าพารามิเตอร์จากระบบอื่น พบว่าให้ตำแหน่งอะซีโอโทรปตรงกัน ทั้งของ 1-โพรพานอล และ ของน้ำ ให้ผลใกล้เคียงกัน และเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของการคำนวณค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอให้ผลใกล้เคียงกันโดยการใช้ค่าพารามิเตอร์จากระบบอื่นนั้นให้ค่าเฉลี่ยของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดต่ำกว่า แต่ทั้งสองวิธียังคงมีความแปรปรวนของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดสูง ดังนั้นกล่าวได้ว่าการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ด้วยการใช้ค่าพารามิเตอร์ทั้งสองวิธีให้ผลการคำนวณไม่แตกต่างกัน

ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์กำหนดจากรัศมีไอออน

ในการศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์ด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC จำเป็นต้องใช้ค่าพารามิเตอร์โครงสร้าง (r_i, q_i) โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างใช้ในการคำนวณค่าเศษส่วนของปริมาตรและเศษส่วนของพื้นที่โดยเฉลี่ยขององค์ประกอบ การกำหนดค่าพารามิเตอร์โครงสร้างขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์ โดยการใช้ปริมาตรและพื้นที่ของแวนเดอร์วาลส์ที่มีความสัมพันธ์กับส่วนมาตรฐาน ค่าพารามิเตอร์โครงสร้างขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายแสดงในตาราง 3-50

ตาราง 3-50 ค่าพารามิเตอร์โครงสร้างขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลาย

Solvent	r	q
Water	0.9200	1.4000
Methanol	1.4311	1.4322
Ethanol	2.1055	1.9720
1-Propanol	2.7799	2.5120
2-Propanol	2.7791	2.5080

เพื่อให้ระบบมีสภาวะใกล้เคียงกับความเป็นจริงมากที่สุด การศึกษานี้จึงกำหนดให้ค่าพารามิเตอร์โครงสร้างขององค์ประกอบที่เป็นตัวถูกละลายสารอิเล็กโทรไลต์หรือของไอออน ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออนซึ่งขึ้นกับระดับขั้นออกซิเดชันและจำนวนเลขโคออดิเนชัน โดยเลือกใช้ค่ารัศมีไอออนที่สอดคล้องกับไอออนหรือสารอิเล็กโทรไลต์ที่อยู่ในระบบ โดยสำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIUQAC จะใช้รัศมีไอออนที่มีเลขโคออดิเนชันเท่ากับหรือใกล้เคียง 10 และนำรัศมีไอออนไปคำนวณค่าปริมาตรและพื้นที่ของไอออน และเปรียบเทียบกับปริมาตรและพื้นที่ของส่วนมาตรฐานเพื่อเป็นพารามิเตอร์โครงสร้าง ค่าพารามิเตอร์โครงสร้างขององค์ประกอบที่เป็นตัวถูกละลายสารอิเล็กโทรไลต์แสดงในตาราง 3-51

ตาราง 3-51 ค่าพารามิเตอร์โครงสร้างขององค์ประกอบที่เป็นตัวถูกละลายสารอิเล็กโทรไลต์จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน (www.webelements.com)

Electrolyte	Coordination	Ionic radii (A)	r	q
Lithium ion(1+)	8	1.06	0.1980	0.3400
Sodium ion(1+)	8	1.32	0.3823	0.5272
Potassium ion(1+)	8	1.65	0.7467	0.8238
Calcium ion(2+)	8	1.26	0.3325	0.4804
Strontium ion(2+)	8	1.40	0.4561	0.5931

Electrolyte	coordination	Ionic radii (A)	Electrolyte	r	q
Oxygen ion(-2)	8	1.28	Nitrate ion(1-)	1.0451	1.4660
Nitrogen ion(+5)	6	0.27			

ใช้ค่าพารามิเตอร์โครงสร้าง (r_i, q_i) ที่กำหนดขึ้นในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นเพื่อหาค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC (A_{ij}) และใช้ในการคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของตัวทำละลายและคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่

10. ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยใช้ค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน ใช้ข้อมูลผลการทดลองจากวารสารตีพิมพ์เรื่อง

Isobaric Vapor-Liquid Equilibrium for Ethanol + Water + Potassium Nitrate (Vercher, Pena and Martinez-Andreu, 1996a)

ข้อมูลสมดุลระหว่างวัฏภาคจากผลการทดลอง

ในการศึกษาใช้ข้อมูลจากผลการทดลองสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ ได้แก่ระบบน้ำ(1)+ โพแทสเซียมไนเตรท(2) ที่ความดันคงที่ 100.0 kPa และระบบตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ได้แก่ระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โพแทสเซียมไนเตรท(3) ที่ความดันคงที่ 100.0 kPa ค่าพารามิเตอร์โครงสร้าง (r_i, q_i) ขององค์ประกอบและค่าคงที่ของสมการ Antoine แสดงในตาราง 3-52 ข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ และความดันของระบบ $(P_{\text{Total,exp}})$ ดังแสดงในตาราง 3- 55 สำหรับข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองของระบบตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\exp})$ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของตัวทำละลาย $(\gamma_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ และความดันของระบบ $(P_{\text{Total,exp}})$ ดังแสดงในตาราง 3-56

ผลการหาค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

ด้วยการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อกำหนดค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC โดยพิจารณาให้ไอออนอิสระที่เกิดจากการแตกตัวของเกลือเป็นองค์ประกอบที่ต่างชนิดกัน ดังนั้นสำหรับระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ จะพิจารณาให้เป็นระบบสามองค์ประกอบ ได้แก่ระบบ น้ำ(1) + โพแทสเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100.0 kPa ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับไอออนและไอออนกับไอออน แสดงในตาราง 3-53 สำหรับระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ จะพิจารณาให้เป็นระบบสี่องค์ประกอบซึ่งประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โพแทสเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100.0 kPa ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับตัวทำละลาย ตัวทำละลายกับไอออน และระหว่างไอออนกับไอออน แสดงในตาราง 3-54

ผลการคำนวณอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ

เนื่องจากเกลือไม่สามารถระเหยได้ในสภาวะปกติและระบบประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว ดังนั้นค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลายจะมีค่าเท่ากับ 1.00 เสมอ และความดันของระบบมีค่าคงที่ จึงกำหนดให้ใช้อุณหภูมิของระบบเป็นตัวแปรตามในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นและใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ร่วมกับค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) ของตัวทำละลาย อุณหภูมิของระบบ (T_{cal}) ซึ่งได้จากความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีกับค่าความดันไออิ่มตัวของตัวทำละลาย ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-55 สำหรับอุณหภูมิจากข้อมูลผลการทดลองและอุณหภูมิจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC แสดงในภาพที่ 3-48

ผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ

ด้วยการใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC และค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นจากระบบเดียวกัน เพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) ของตัวทำละลาย และค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลาย ($y_{i,\mathrm{cal}}$) ของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โพแทสเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดันคงที่ 100.0 kPa ในการพิจารณาสมดุลระหว่างวัฏภาคจะพิจารณาเฉพาะองค์ประกอบที่อยู่ในทุกวัฏภาคที่ปรากฏในระบบทั้งวัฏภาคของเหลวและวัฏภาคไอ โดยปริมาณขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายในวัฏภาคของเหลวแสดงในพจน์ของค่าเศษส่วนโมลโดยไม่รวมจำนวนโมลของไอออน (x'_i, x'_j) ใช้แสดงค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลาย i และ j ตามลำดับ ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-56 ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลาย ($x'_{i,\mathrm{exp}}$) และตัวถูกละลาย (x_{salt}) ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลาย ($y_{i,\mathrm{cal}}$) ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของตัวทำละลาย ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) สำหรับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC แสดงในภาพที่ 3-49 ของ เอทานอล(1)

เมื่อใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นข้อมูลผลการทดลอง ร่วมกับการเปลี่ยนแปลงค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายให้มีค่าตั้งแต่ 0.00 ถึง 1.00 และกำหนดให้ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของเกลือมีค่าคงที่ ได้แก่ที่ 0.01 0.02 และ 0.03 เพื่อคำนวณ

สมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบ แสดงในภาพที่ 3-50 แสดงสมดุลระหว่างวัฏภาคของเอทานอล(1) จากภาพจะเห็นว่าเมื่อมีเกลือในระบบที่ความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.01 ก็สามารถกำจัดอะซีโอโทรปของเอทานอล(1) ที่เกิดขึ้นได้ และจากภาพที่ 3-51 ถึง ภาพที่ 3-53 พบว่าสมดุลระหว่างวัฏภาคกับอุณหภูมิของระบบที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC มีลักษณะเดียวกับที่ได้จากผลการทดลอง

ตาราง 3-52 ค่าคงที่ของสมการ Antoine และพารามิเตอร์โครงสร้างของเอทานอล น้ำ โพแทสเซียมไอออนและไนเตรทไอออน จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

		ค่าคงที่ Antoine[1]			พารามิเตอร์โครงสร้าง	
องค์ประกอบ	ช่วงอุณหภูมิ(K)	*A*	*B*	*C*	*r*	*q*
Ethanol	293 – 366	8.11220	1592.864	226.184	2.1055	1.9720
Water	273 – 373	8.07131	1730.630	233.426	0.9200	1.4000
Potassium ion	-	-	-	-	0.7467	0.8238
Nitrate ion	-	-	-	-	1.0451	1.4660

ที่มา : [1](Perry, Green and Maloney, 1997)

ตาราง 3-53 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + โพแทสเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

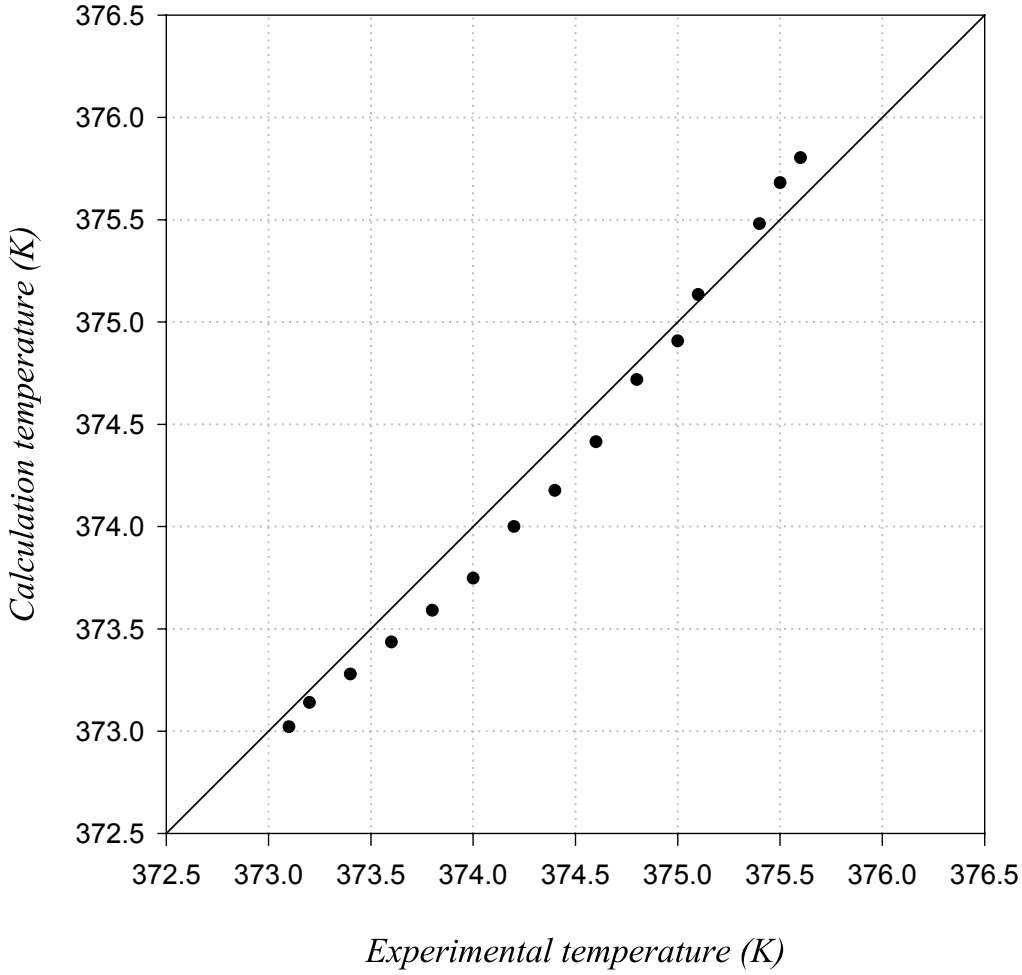
Component	Water(1)	Potassium ion(2)	Nitrate ion(3)
Water(1)	A_{11} = 0.000	A_{12} = 1441.575	A_{13} = 1601.142
Potassium ion(2)	A_{21} = -979.968	A_{22} = 0.000	A_{23} = 751.877
Nitrate ion(3)	A_{31} = -1556.103	A_{32} = 16.174	A_{33} = 0.000

ตาราง 3-54 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โพแทสเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็ก-โทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

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

ตาราง 3-55 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบ ที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + โพแทสเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

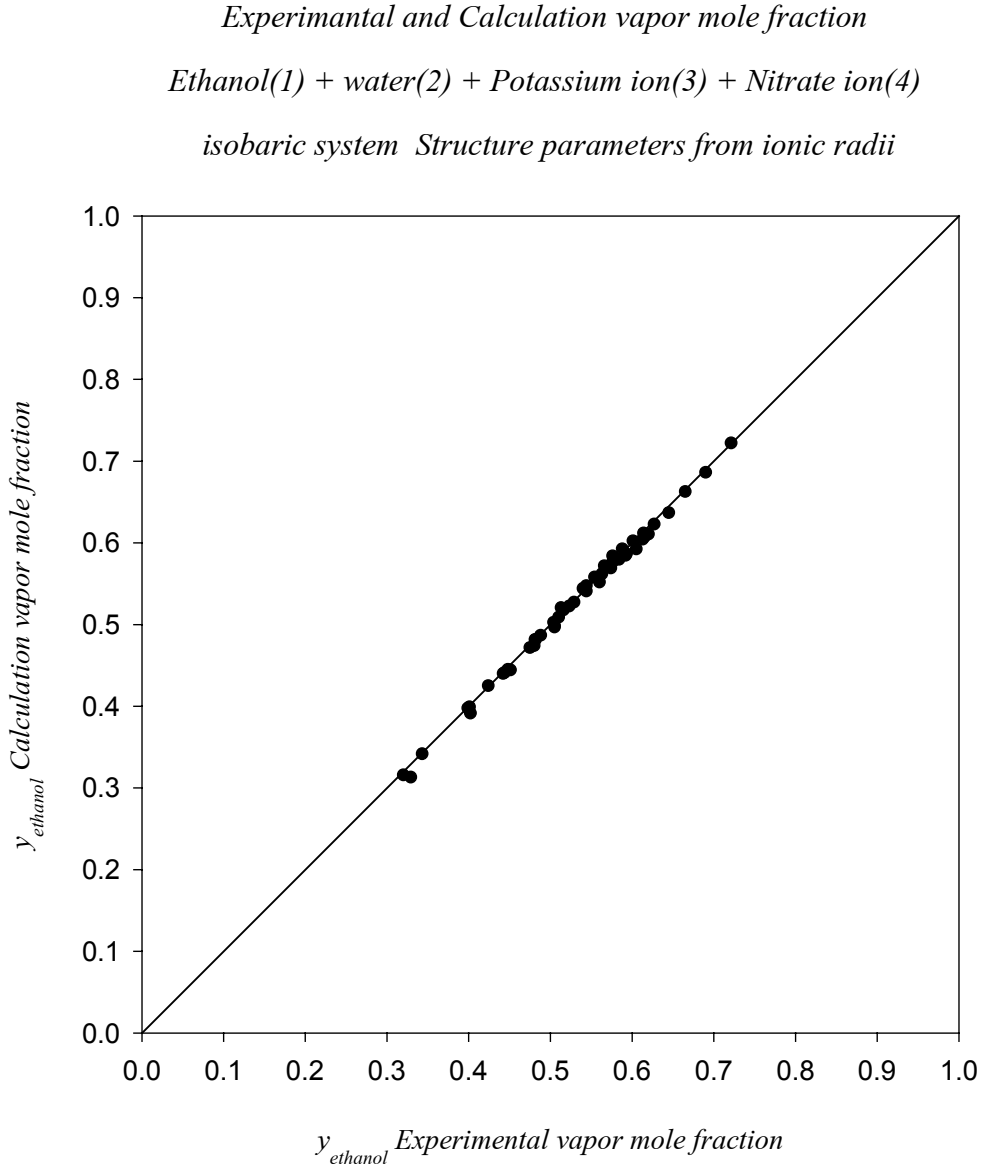
$x_{1,exp}$	$x_{2,exp}$	$x_{3,exp}$	$T_{exp}(K)$	$T_{cal}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	%Err T
0.9319	0.0341	0.0341	375.60	375.80	0.9637	0.054
0.9340	0.0330	0.0330	375.50	375.68	0.9657	0.048
0.9375	0.0313	0.0313	375.40	375.48	0.9689	0.021
0.9437	0.0282	0.0282	375.10	375.13	0.9743	0.009
0.9479	0.0261	0.0261	375.00	374.91	0.9778	-0.025
0.9515	0.0243	0.0243	374.80	374.72	0.9807	-0.022
0.9575	0.0213	0.0213	374.60	374.41	0.9851	-0.050
0.9624	0.0188	0.0188	374.40	374.18	0.9884	-0.060
0.9662	0.0169	0.0169	374.20	374.00	0.9907	-0.053
0.9719	0.0141	0.0141	374.00	373.75	0.9938	-0.067
0.9757	0.0122	0.0122	373.80	373.59	0.9956	-0.056
0.9796	0.0102	0.0102	373.60	373.44	0.9971	-0.044
0.9838	0.0081	0.0081	373.40	373.28	0.9984	-0.032
0.9878	0.0061	0.0061	373.20	373.14	0.9994	-0.016
0.9915	0.0043	0.0043	373.10	373.02	0.9999	-0.021



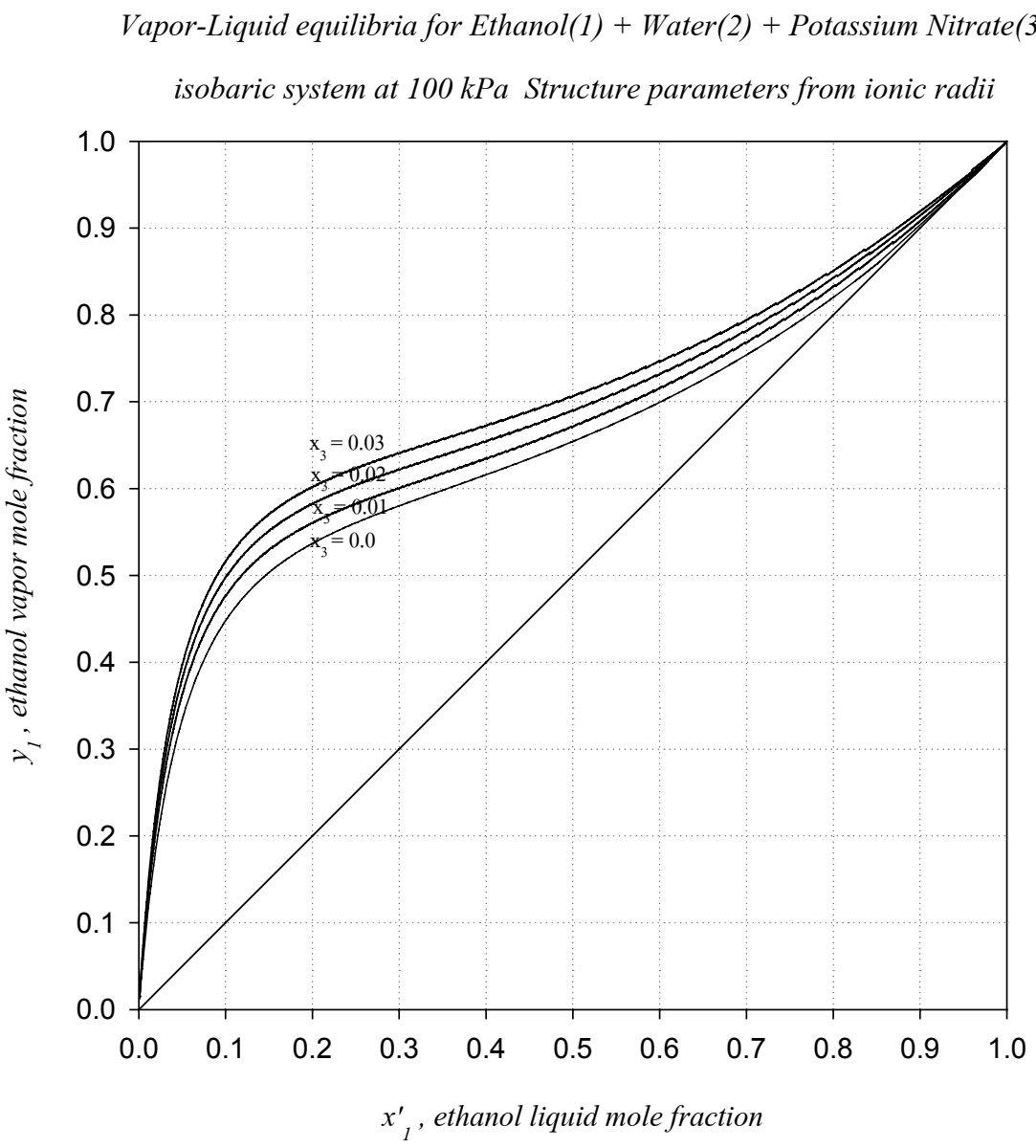
ภาพที่ 3-48 อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + โพแทสเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน (3) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

ตาราง 3-56 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โพแทสเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

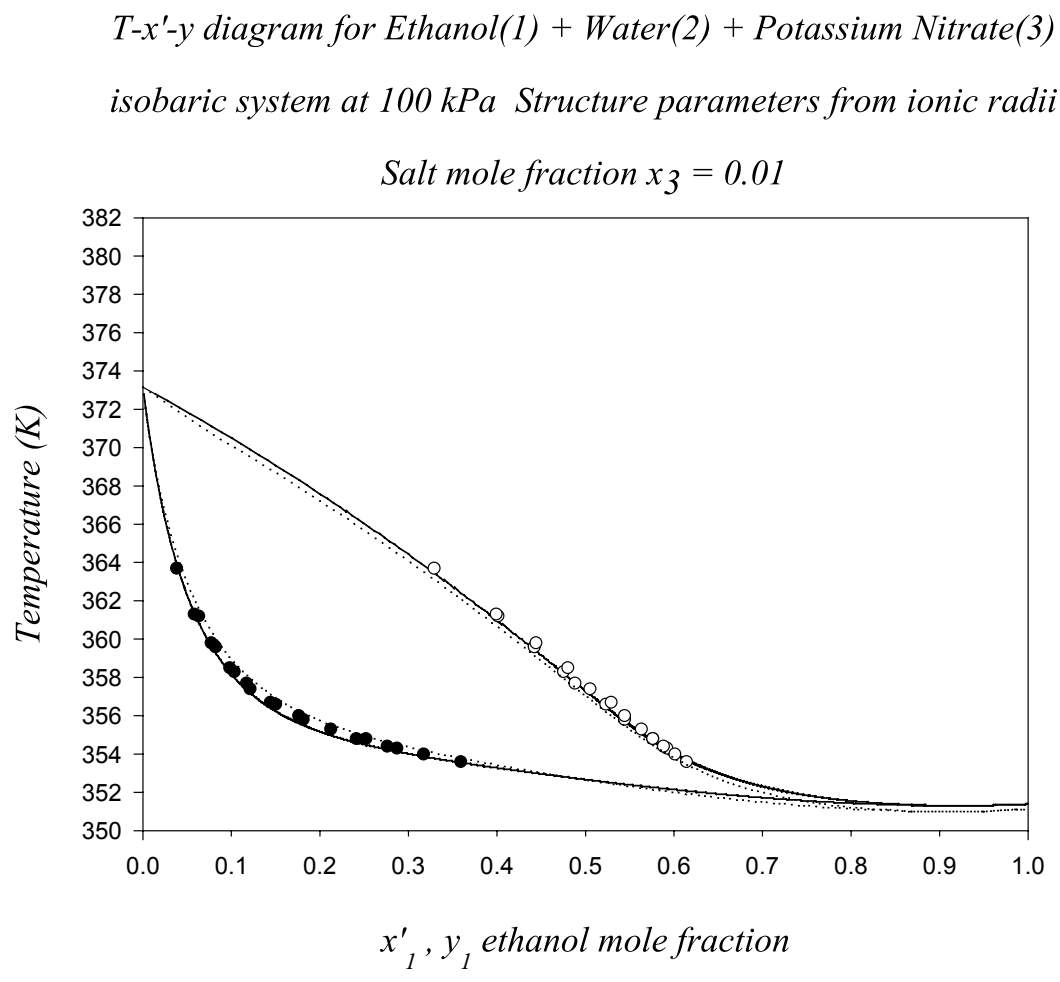
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.016	0.036	364.00	5.428	0.991	0.320	0.316	0.680	0.684	-1.297	0.610
0.026	0.038	363.70	5.673	0.975	0.343	0.342	0.657	0.658	-0.389	0.203
0.009	0.038	363.70	5.109	0.999	0.329	0.313	0.671	0.687	-4.804	2.355
0.023	0.051	361.80	5.189	0.981	0.402	0.391	0.598	0.609	-2.614	1.757
0.035	0.055	361.30	5.366	0.957	0.424	0.425	0.576	0.575	0.257	-0.189
0.014	0.058	361.30	4.718	0.997	0.399	0.398	0.601	0.602	-0.357	0.237
0.032	0.063	360.50	5.073	0.964	0.448	0.445	0.552	0.555	-0.639	0.518
0.008	0.063	361.20	4.386	1.006	0.401	0.399	0.599	0.601	-0.491	0.329
0.020	0.071	360.00	4.567	0.991	0.451	0.444	0.549	0.556	-1.470	1.207
0.012	0.077	359.80	4.193	1.006	0.444	0.441	0.556	0.559	-0.628	0.501
0.029	0.080	359.00	4.574	0.974	0.482	0.481	0.518	0.519	-0.127	0.118
0.007	0.082	359.60	3.928	1.014	0.442	0.44	0.558	0.56	-0.465	0.368
0.017	0.093	358.70	3.995	1.003	0.481	0.482	0.519	0.518	0.112	-0.104
0.010	0.098	358.50	3.709	1.017	0.480	0.474	0.520	0.526	-1.256	1.159
0.006	0.103	358.30	3.505	1.026	0.475	0.472	0.525	0.528	-0.696	0.630
0.026	0.105	357.70	3.973	0.988	0.516	0.518	0.484	0.482	0.365	-0.389
0.024	0.110	357.40	3.838	0.995	0.513	0.521	0.487	0.479	1.510	-1.590
0.005	0.117	357.70	3.252	1.035	0.488	0.487	0.512	0.513	-0.263	0.251
0.014	0.118	357.50	3.470	1.020	0.510	0.509	0.490	0.491	-0.180	0.187
0.008	0.121	357.40	3.273	1.032	0.505	0.499	0.495	0.501	-1.276	1.301
0.004	0.129	357.20	3.054	1.044	0.505	0.497	0.495	0.503	-1.609	1.642
0.020	0.140	356.50	3.271	1.018	0.540	0.544	0.460	0.456	0.760	-0.893
0.003	0.138	356.90	2.911	1.051	0.504	0.503	0.496	0.497	-0.266	0.271
0.011	0.144	356.70	3.026	1.040	0.529	0.527	0.471	0.473	-0.313	0.352
0.007	0.150	356.60	2.862	1.052	0.523	0.523	0.477	0.477	-0.090	0.098
0.018	0.164	356.00	2.924	1.037	0.554	0.558	0.446	0.442	0.751	-0.933
0.010	0.176	356.00	2.643	1.065	0.544	0.548	0.456	0.452	0.654	-0.780
0.006	0.181	355.80	2.516	1.078	0.544	0.541	0.456	0.459	-0.573	0.684
0.015	0.199	355.40	2.517	1.069	0.566	0.572	0.434	0.428	1.053	-1.374
0.008	0.212	355.30	2.293	1.099	0.563	0.562	0.437	0.438	-0.190	0.245
0.004	0.212	355.30	2.224	1.109	0.560	0.552	0.440	0.448	-1.428	1.817
0.012	0.241	354.80	2.152	1.113	0.576	0.584	0.424	0.416	1.392	-1.892
0.007	0.252	354.80	2.013	1.139	0.576	0.576	0.424	0.424	0.082	-0.111
0.004	0.252	354.70	1.969	1.149	0.574	0.569	0.426	0.431	-0.851	1.147
0.010	0.276	354.40	1.924	1.153	0.588	0.593	0.412	0.407	0.793	-1.132
0.003	0.287	354.30	1.782	1.190	0.584	0.580	0.416	0.42	-0.739	1.038
0.005	0.287	354.30	1.808	1.183	0.592	0.585	0.408	0.415	-1.242	1.803
0.002	0.313	354.00	1.664	1.224	0.593	0.586	0.407	0.414	-1.114	1.623
0.008	0.317	354.00	1.718	1.205	0.601	0.602	0.399	0.398	0.214	-0.323
0.004	0.316	354.00	1.677	1.220	0.605	0.592	0.395	0.408	-2.087	3.197
0.003	0.358	353.60	1.527	1.277	0.613	0.604	0.387	0.396	-1.397	2.213
0.006	0.359	353.60	1.554	1.264	0.614	0.612	0.386	0.388	-0.341	0.542
0.002	0.373	353.50	1.476	1.301	0.615	0.607	0.385	0.393	-1.262	2.016
0.001	0.389	353.30	1.427	1.328	0.620	0.611	0.380	0.389	-1.529	2.495
0.004	0.404	353.20	1.418	1.333	0.627	0.623	0.373	0.377	-0.643	1.081
0.003	0.448	352.90	1.321	1.402	0.645	0.637	0.355	0.363	-1.254	2.277
0.002	0.517	352.40	1.212	1.515	0.665	0.663	0.335	0.337	-0.345	0.685
0.001	0.573	352.00	1.146	1.616	0.690	0.686	0.310	0.314	-0.558	1.242
0.001	0.643	351.60	1.092	1.739	0.721	0.722	0.279	0.278	0.153	-0.394



ภาพที่ 3-49 ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ เอทานอล(1) ที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โพแทสเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดันคงที่ 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน



ภาพที่ 3-50 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') ของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โพแทสเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa ที่ความเข้มข้นของเกลือมีเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.0 0.01 0.02 และ 0.03 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน เมื่อ —— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC



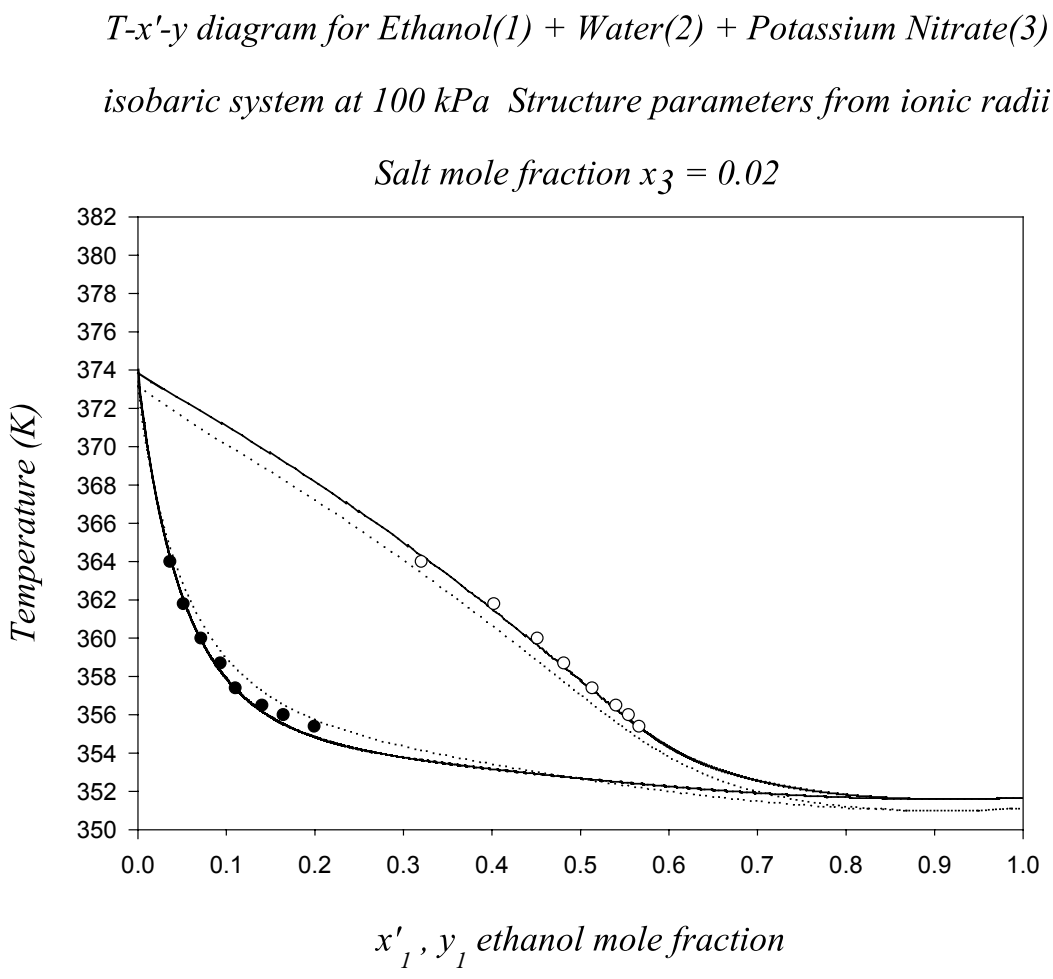
ภาพที่ 3-51 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โพแทสเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.01 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบเอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



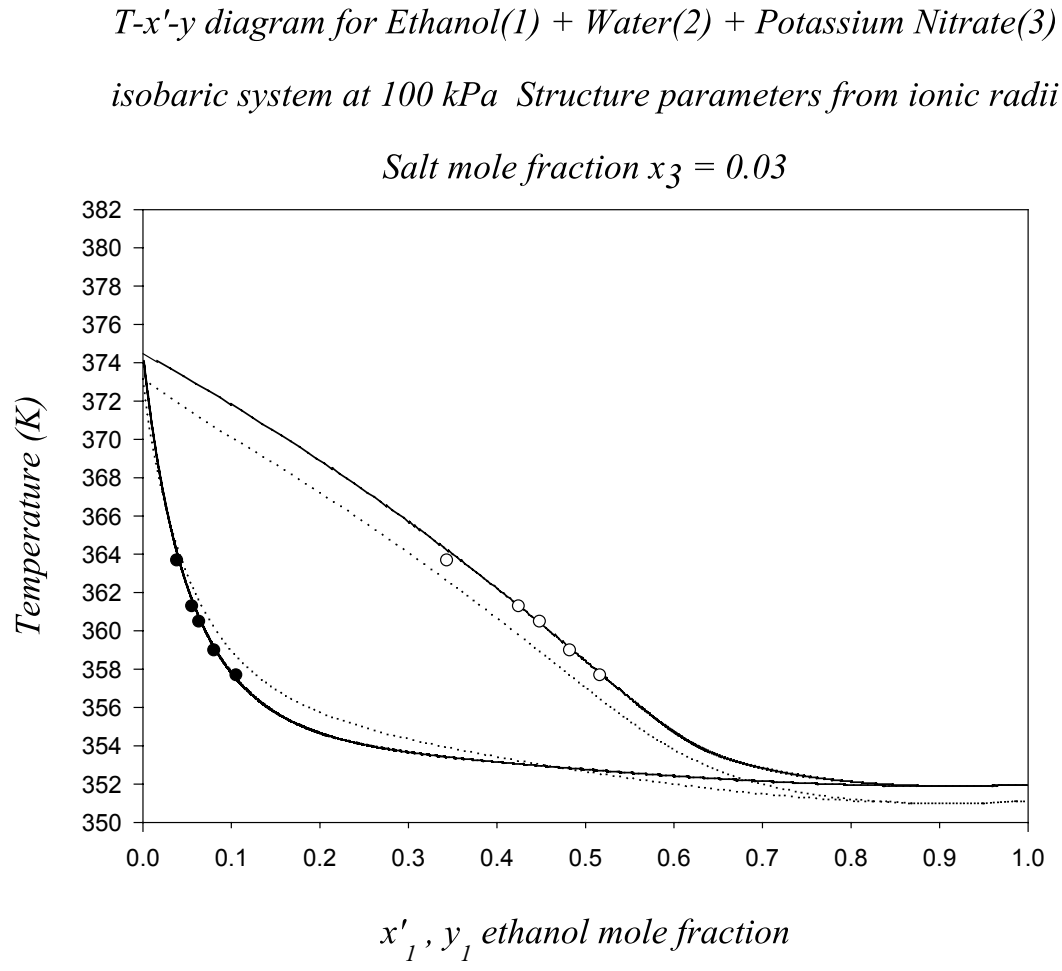
ภาพที่ 3-52 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โพแทสเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.02 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบเอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



ภาพที่ 3-53 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โพแทสเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.03 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบเอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ

11. ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยใช้ค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน ใช้ข้อมูลผลการทดลองจากวารสารตีพิมพ์เรื่อง

Isobaric Vapor-Liquid Equilibrium for Ethanol + Water + Strontium Nitrate (Vercher, Pena and Martinez-Andreu, 1996b)

ข้อมูลสมดุลระหว่างวัฏภาคจากผลการทดลอง

ในการศึกษาใช้ข้อมูลจากผลการทดลองสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ ได้แก่ระบบน้ำ(1)+ สตรอนเทียมไนเตรท(2) ที่ความดันคงที่ 100.0 kPa และระบบตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ได้แก่ระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) + สตรอนเทียมไนเตรท(3) ที่ความดันคงที่ 100.0 kPa ค่าพารามิเตอร์โครงสร้าง (r_i, q_i) ขององค์ประกอบและค่าคงที่ของสมการ Antoine แสดงในตาราง 3-57 ข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ และความดันของระบบ $(P_{\text{Total,exp}})$ ดังแสดงในตาราง 3-60 สำหรับข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองของระบบตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\exp})$ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของตัวทำละลาย $(\gamma_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ และความดันของระบบ $(P_{\text{Total,exp}})$ ดังแสดงในตาราง 3-61

ผลการหาค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

ด้วยการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อกำหนดค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC โดยพิจารณาให้ไอออนอิสระที่เกิดจากการแตกตัวของเกลือเป็นองค์ประกอบที่ต่างชนิดกัน ดังนั้นสำหรับระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ จะพิจารณาให้เป็นระบบสามองค์ประกอบ ได้แก่ระบบ น้ำ(1) + สตรอนเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100.0 kPa ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับไอออนและไอออนกับไอออน แสดงในตาราง 3-58 สำหรับระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ จะพิจารณาให้เป็นระบบสี่องค์ประกอบซึ่งประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + สตรอนเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100.0 kPa ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับตัวทำละลาย ตัวทำละลายกับไอออน และระหว่างไอออนกับไอออน แสดงในตาราง 3-59

ผลการคำนวณอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ

เนื่องจากเกลือไม่สามารถระเหยได้ในสภาวะปกติและระบบประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว ดังนั้นค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลายจะมีค่าเท่ากับ 1.00 เสมอ และความดันของระบบมีค่าคงที่ จึงกำหนดให้ใช้อุณหภูมิของระบบเป็นตัวแปรตามในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นและใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ร่วมกับค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) ของตัวทำละลาย อุณหภูมิของระบบ (T_{cal}) ซึ่งได้จากความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีกับค่าความดันไออิ่มตัวของตัวทำละลาย ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-60 สำหรับอุณหภูมิจากข้อมูลผลการทดลองและอุณหภูมิจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC แสดงในภาพที่ 3-54

ผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ

ด้วยการใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC และค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นจากระบบเดียวกัน เพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) ของตัวทำละลาย และค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลาย ($y_{i,\mathrm{cal}}$) ของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + สตรอนเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดันคงที่ 100.0 kPa ในการพิจารณาสมดุลระหว่างวัฏภาคจะพิจารณาเฉพาะองค์ประกอบที่อยู่ในทุกวัฏภาคที่ปรากฏในระบบทั้งวัฏภาคของเหลวและวัฏภาคไอ โดยปริมาณขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายในวัฏภาคของเหลวแสดงในพจน์ของค่าเศษส่วนโมลโดยไม่รวมจำนวนโมลของไอออน (x'_i, x'_j) ใช้แสดงค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลาย i และ j ตามลำดับ ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-61 ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลาย ($x'_{i,\mathrm{exp}}$) และตัวถูกละลาย (x_{salt}) ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลาย ($y_{i,\mathrm{cal}}$) ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของตัวทำละลาย ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) สำหรับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC แสดงในภาพที่ 3-55 ของ เอทานอล(1)

เมื่อใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นข้อมูลผลการทดลอง ร่วมกับการเปลี่ยนแปลงค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายให้มีค่าตั้งแต่ 0.00 ถึง 1.00 และกำหนดให้ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของเกลือมีค่าคงที่ ได้แก่ที่ 0.01 0.02 0.03 0.04 และ 0.05 เพื่อ

คำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบ แสดงในภาพที่ 3-56 แสดงสมดุลระหว่างวัฏภาคของเอทานอล(1) จากภาพจะเห็นว่าเมื่อมีเกลือในระบบที่ความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.01 ก็สามารถกำจัดอะซีโอโทรปของเอทานอล(1) ที่เกิดขึ้นได้ และจากภาพที่ 3-57 ถึง ภาพที่ 3-61 พบว่าสมดุลระหว่างวัฏภาคกับอุณหภูมิของระบบที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC มีลักษณะเดียวกับที่ได้จากผลการทดลอง

ตาราง 3-57 ค่าคงที่ของสมการ Antoine และพารามิเตอร์โครงสร้างของเอทานอล น้ำ สตรอนเทียมไอออนและไนเตรทไอออน จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

		ค่าคงที่ Antoine[1]			พารามิเตอร์โครงสร้าง	
องค์ประกอบ	ช่วงอุณหภูมิ(K)	*A*	*B*	*C*	*r*	*q*
Ethanol	293 – 366	8.11220	1592.864	226.184	2.1055	1.9720
Water	273 – 373	8.07131	1730.630	233.426	0.9200	1.4000
Strontium ion	-	-	-	-	0.4561	0.5931
Nitrate ion	-	-	-	-	1.0451	1.4660

ที่มา : [1](Perry, Green and Maloney, 1997)

ตาราง 3-58 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + สตรอนเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

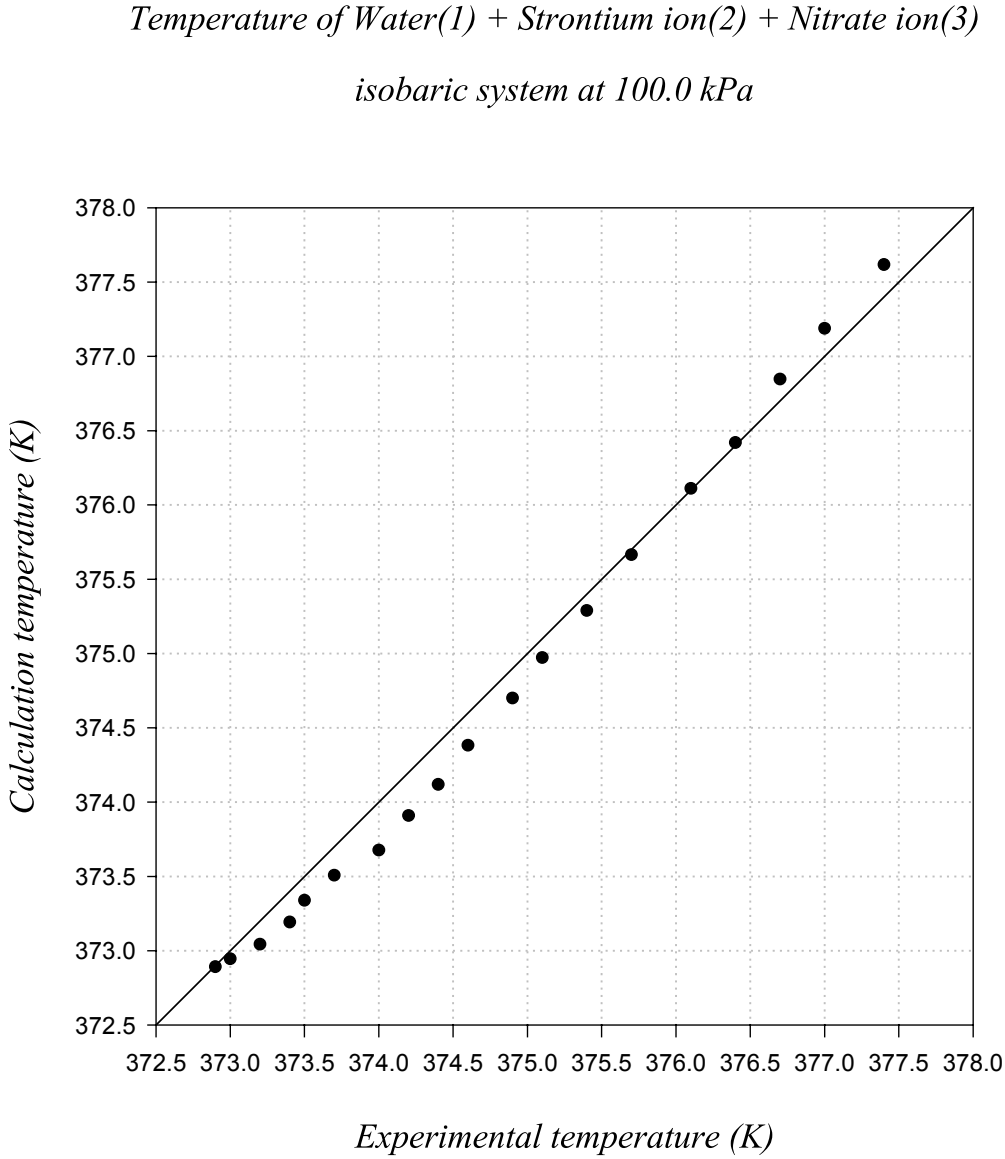
Component	Water(1)	Strontium ion(2)	Nitrate ion(3)
Water(1)	A_{11} = 0.000	A_{12} = 1288.173	A_{13} = 1998.728
Strontium ion(2)	A_{21} = -670.093	A_{22} = 0.000	A_{23} = 1281.452
Nitrate ion(3)	A_{31} = -1964.435	A_{32} = -723.444	A_{33} = 0.000

ตาราง 3-59 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + สตรอนเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

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

ตาราง 3-60 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบ ที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + สตรอนเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

$x_{1,exp}$	$x_{2,exp}$	$x_{3,exp}$	$T_{exp}(K)$	$T_{cal}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	%Err T
0.9379	0.0207	0.0414	377.40	377.62	0.8986	0.058
0.9420	0.0193	0.0387	377.00	377.19	0.9082	0.050
0.9453	0.0182	0.0365	376.70	376.85	0.9158	0.039
0.9495	0.0168	0.0337	376.40	376.42	0.9255	0.005
0.9526	0.0158	0.0316	376.10	376.11	0.9325	0.003
0.9572	0.0143	0.0285	375.70	375.67	0.9427	-0.009
0.9612	0.0129	0.0259	375.40	375.29	0.9513	-0.030
0.9647	0.0118	0.0235	375.10	374.97	0.9585	-0.034
0.9678	0.0107	0.0215	374.90	374.70	0.9647	-0.053
0.9716	0.0095	0.0189	374.60	374.38	0.9718	-0.058
0.9749	0.0084	0.0167	374.40	374.12	0.9776	-0.075
0.9777	0.0074	0.0149	374.20	373.91	0.9822	-0.078
0.9810	0.0063	0.0127	374.00	373.68	0.9871	-0.086
0.9836	0.0055	0.0109	373.70	373.51	0.9905	-0.051
0.9864	0.0045	0.0091	373.50	373.34	0.9936	-0.043
0.9891	0.0036	0.0073	373.40	373.19	0.9962	-0.056
0.9922	0.0026	0.0052	373.20	373.04	0.9984	-0.042
0.9946	0.0018	0.0036	373.00	372.95	0.9995	-0.015
0.9961	0.0013	0.0026	372.90	372.89	0.9999	-0.002



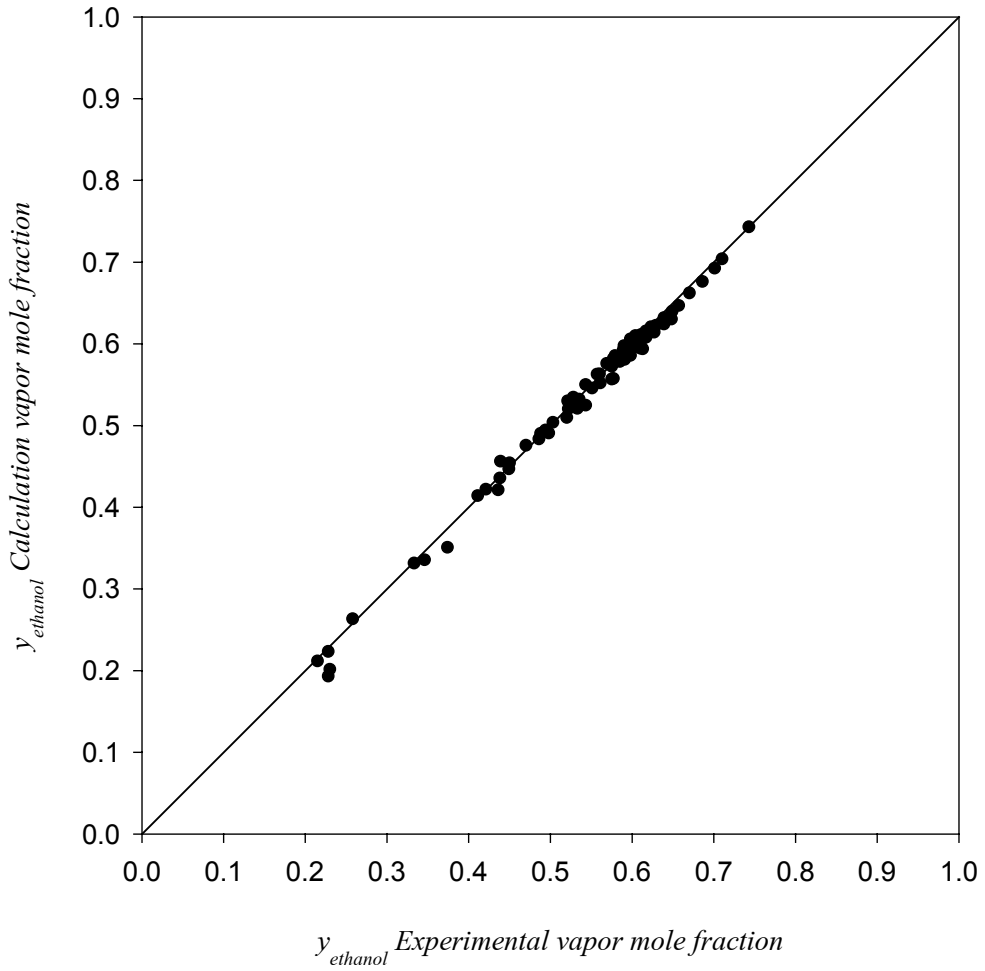
ภาพที่ 3-54 อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + สตรอนเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน (3) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

ตาราง 3-61 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) + สตรอนเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

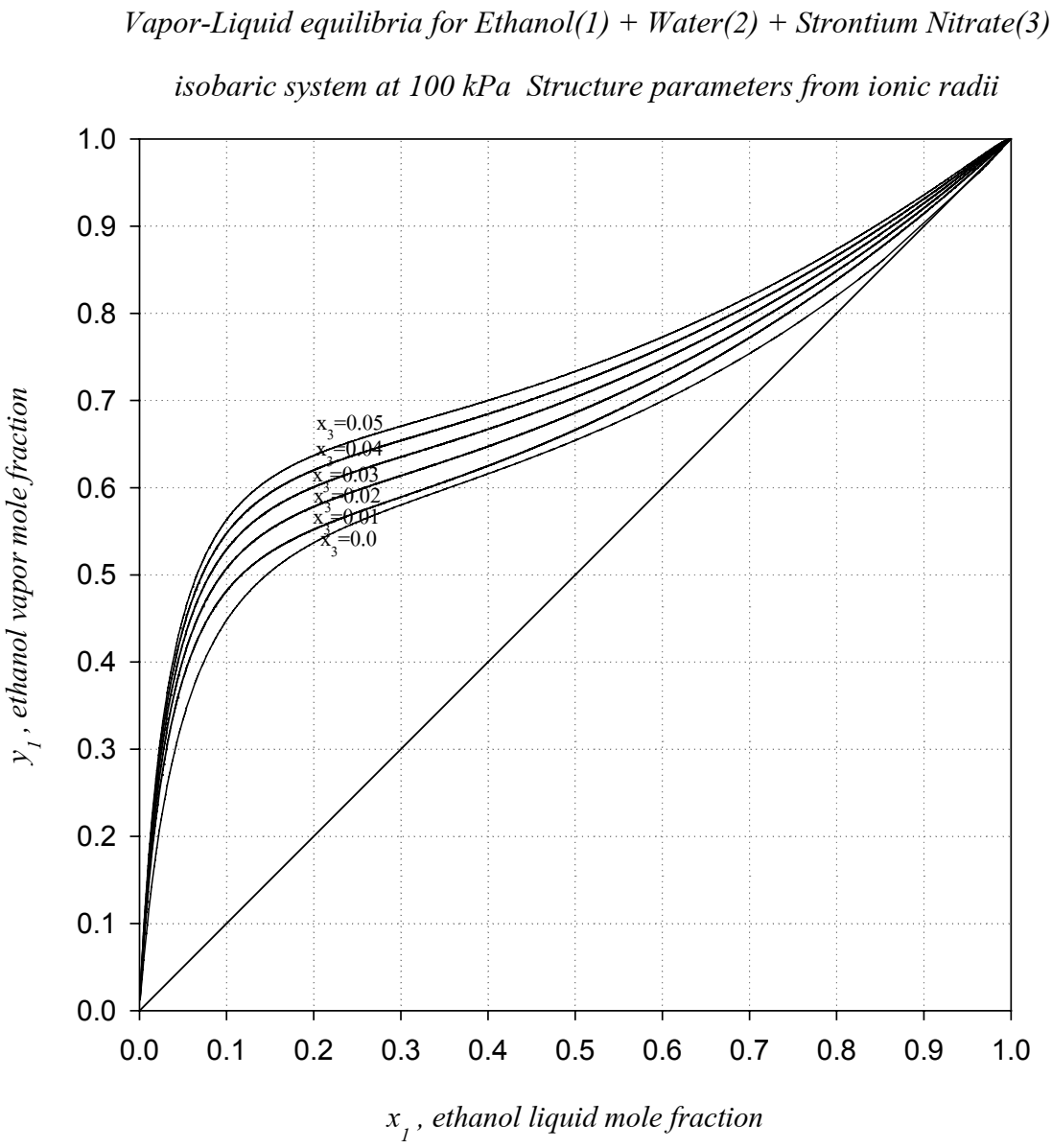
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.053	0.014	369.80	8.237	0.910	0.228	0.223	0.772	0.777	-2.034	0.601
0.021	0.014	367.80	7.374	0.982	0.228	0.193	0.772	0.807	-15.327	4.526
0.029	0.015	368.70	7.620	0.968	0.215	0.212	0.785	0.788	-1.461	0.400
0.013	0.016	367.00	6.862	0.993	0.230	0.202	0.770	0.798	-12.374	3.696
0.050	0.018	368.60	7.977	0.917	0.258	0.263	0.742	0.737	2.080	-0.723
0.047	0.029	364.50	7.393	0.921	0.374	0.351	0.626	0.649	-6.176	3.690
0.026	0.031	364.80	6.688	0.972	0.333	0.332	0.667	0.668	-0.428	0.214
0.019	0.034	363.90	6.266	0.986	0.346	0.336	0.654	0.664	-3.008	1.592
0.053	0.040	362.40	6.969	0.902	0.436	0.421	0.564	0.579	-3.388	2.619
0.044	0.043	362.40	6.666	0.928	0.421	0.422	0.579	0.578	0.241	-0.175
0.017	0.055	361.40	5.319	0.992	0.411	0.414	0.589	0.586	0.752	-0.525
0.024	0.057	361.10	5.520	0.979	0.438	0.436	0.562	0.564	-0.499	0.389
0.033	0.058	361.40	5.763	0.958	0.439	0.456	0.561	0.544	3.930	-3.075
0.047	0.061	359.60	6.001	0.919	0.498	0.491	0.502	0.509	-1.468	1.456
0.040	0.060	360.30	5.884	0.939	0.470	0.476	0.530	0.524	1.210	-1.073
0.014	0.071	359.80	4.668	1.002	0.449	0.447	0.551	0.553	-0.450	0.366
0.029	0.075	359.30	5.071	0.971	0.488	0.490	0.512	0.510	0.497	-0.473
0.046	0.078	358.00	5.392	0.923	0.530	0.529	0.470	0.471	-0.135	0.153
0.022	0.086	358.80	4.529	0.991	0.494	0.494	0.506	0.506	0.081	-0.079
0.006	0.088	359.20	3.880	1.022	0.450	0.454	0.550	0.546	0.936	-0.765
0.036	0.092	357.70	4.759	0.956	0.528	0.535	0.472	0.465	1.248	-1.396
0.026	0.105	357.60	4.171	0.988	0.521	0.530	0.479	0.470	1.748	-1.901
0.018	0.114	357.40	3.746	1.012	0.522	0.520	0.478	0.480	-0.320	0.350
0.012	0.114	357.60	3.556	1.026	0.503	0.504	0.497	0.496	0.182	-0.184
0.004	0.118	357.80	3.207	1.043	0.486	0.484	0.514	0.516	-0.511	0.484
0.032	0.124	356.50	3.909	0.979	0.560	0.563	0.440	0.437	0.579	-0.737
0.039	0.133	355.90	3.874	0.961	0.579	0.585	0.421	0.415	1.102	-1.515
0.023	0.133	356.60	3.525	1.009	0.543	0.550	0.457	0.450	1.293	-1.536
0.015	0.137	356.70	3.246	1.033	0.535	0.532	0.465	0.468	-0.504	0.580
0.007	0.138	356.80	2.996	1.052	0.520	0.510	0.480	0.490	-1.971	2.135
0.029	0.149	355.90	3.395	1.000	0.569	0.576	0.431	0.424	1.193	-1.575
0.036	0.160	355.40	3.358	0.983	0.590	0.598	0.410	0.402	1.319	-1.898
0.021	0.159	355.90	3.072	1.030	0.557	0.563	0.443	0.437	1.049	-1.319
0.005	0.165	356.20	2.596	1.077	0.533	0.521	0.467	0.479	-2.288	2.611
0.026	0.171	355.40	3.018	1.022	0.577	0.582	0.423	0.418	0.847	-1.156
0.012	0.172	355.90	2.697	1.065	0.551	0.546	0.449	0.454	-0.952	1.168
0.033	0.188	355.00	2.932	1.009	0.598	0.606	0.402	0.394	1.325	-1.971
0.003	0.185	355.80	2.344	1.100	0.543	0.525	0.457	0.475	-3.335	3.963
0.018	0.193	355.30	2.604	1.063	0.575	0.573	0.425	0.427	-0.432	0.584
0.009	0.204	355.40	2.316	1.100	0.561	0.552	0.439	0.448	-1.579	2.018
0.023	0.210	354.90	2.532	1.059	0.589	0.592	0.411	0.408	0.581	-0.833
0.030	0.213	354.60	2.618	1.036	0.604	0.610	0.396	0.390	0.996	-1.520

ตาราง 3-61 (ต่อ)

x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.015	0.226	354.90	2.256	1.100	0.579	0.578	0.421	0.422	-0.163	0.224
0.026	0.242	354.40	2.311	1.072	0.611	0.612	0.389	0.388	0.084	-0.132
0.006	0.238	354.90	2.009	1.142	0.575	0.557	0.425	0.443	-3.157	4.271
0.020	0.246	354.50	2.193	1.098	0.601	0.598	0.399	0.402	-0.429	0.646
0.012	0.249	354.60	2.046	1.131	0.585	0.578	0.415	0.422	-1.133	1.597
0.004	0.256	354.70	1.869	1.168	0.577	0.558	0.423	0.442	-3.377	4.607
0.023	0.275	354.00	2.051	1.112	0.617	0.616	0.383	0.384	-0.220	0.355
0.016	0.274	354.20	1.961	1.139	0.606	0.598	0.394	0.402	-1.341	2.063
0.009	0.280	354.40	1.828	1.174	0.591	0.581	0.409	0.419	-1.715	2.478
0.013	0.306	353.90	1.766	1.184	0.610	0.601	0.390	0.399	-1.501	2.348
0.020	0.313	353.80	1.820	1.160	0.623	0.621	0.377	0.379	-0.360	0.594
0.007	0.310	354.00	1.671	1.215	0.598	0.586	0.402	0.414	-2.043	3.039
0.011	0.342	353.70	1.605	1.232	0.617	0.608	0.383	0.392	-1.473	2.373
0.016	0.347	353.50	1.643	1.213	0.629	0.622	0.371	0.378	-1.052	1.783
0.005	0.350	353.70	1.511	1.271	0.610	0.595	0.390	0.405	-2.537	3.968
0.003	0.363	353.50	1.453	1.297	0.613	0.594	0.387	0.406	-3.131	4.959
0.008	0.381	353.40	1.459	1.293	0.627	0.614	0.373	0.386	-2.048	3.442
0.014	0.388	353.20	1.499	1.269	0.639	0.632	0.361	0.368	-1.112	1.969
0.006	0.420	353.10	1.353	1.353	0.639	0.624	0.361	0.376	-2.329	4.122
0.011	0.428	353.00	1.380	1.333	0.649	0.640	0.351	0.360	-1.429	2.642
0.003	0.453	352.80	1.270	1.415	0.648	0.630	0.352	0.370	-2.737	5.038
0.009	0.457	352.80	1.311	1.382	0.657	0.647	0.343	0.353	-1.564	2.996
0.007	0.503	352.40	1.229	1.455	0.670	0.662	0.330	0.338	-1.157	2.350
0.005	0.542	352.20	1.172	1.524	0.686	0.676	0.314	0.324	-1.411	3.082
0.004	0.578	352.00	1.134	1.583	0.701	0.693	0.299	0.307	-1.200	2.814
0.003	0.603	351.80	1.110	1.627	0.710	0.704	0.290	0.296	-0.838	2.051
0.002	0.673	351.50	1.065	1.740	0.743	0.743	0.257	0.257	0.020	-0.057

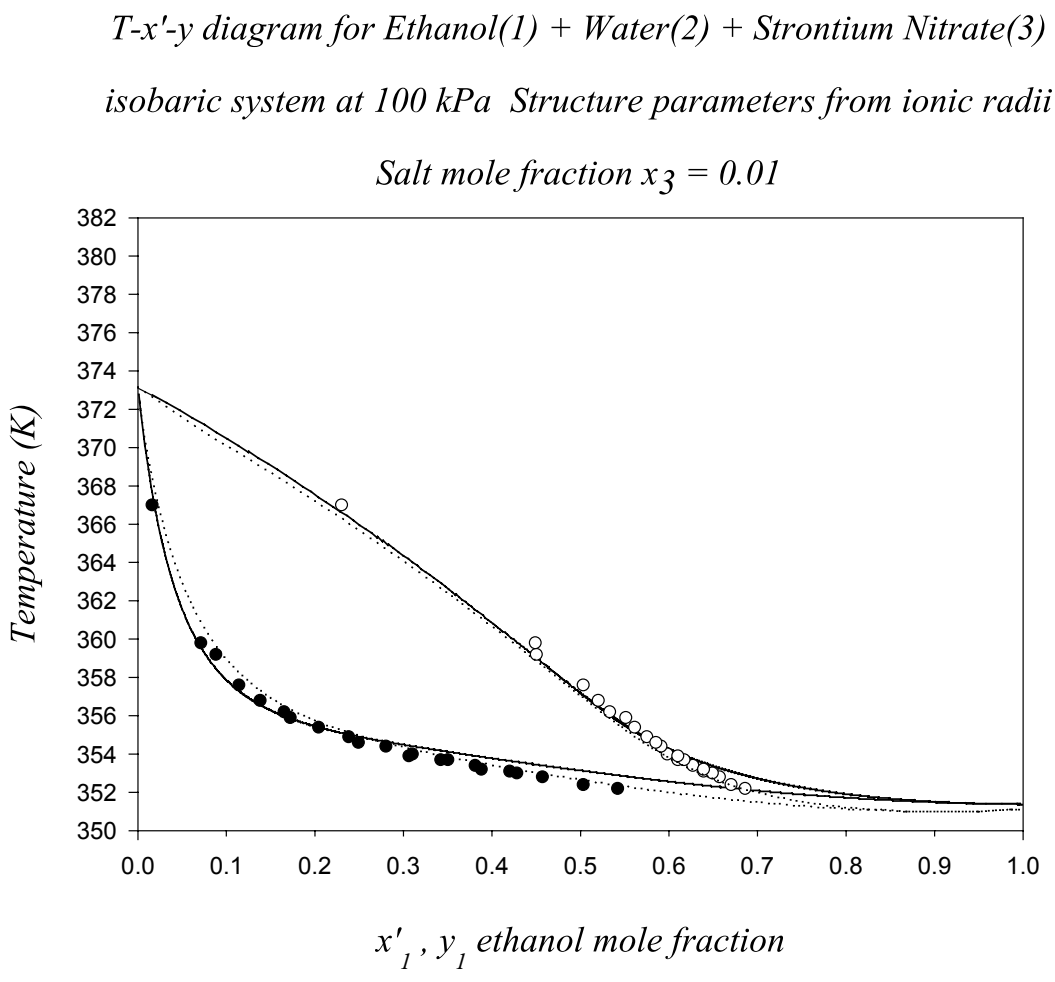


ภาพที่ 3-55 ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ เอทานอล(1) ที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + สตรอนเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดันคงที่ 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน



ภาพที่ 3-56 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') ของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + สตรอนเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa ที่ความเข้มข้นของเกลือมีเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.0 0.01 0.02 0.03 0.04 และ 0.05 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ —— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC



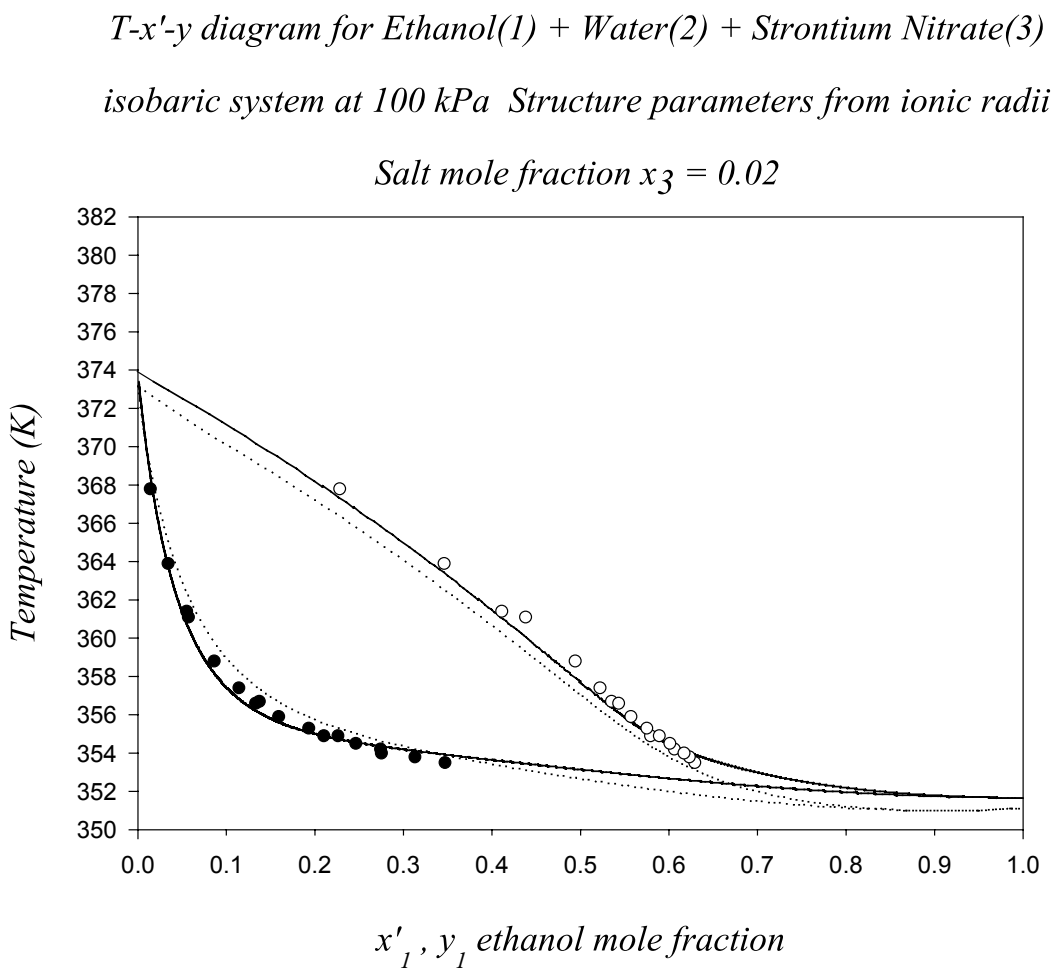
ภาพที่ 3-57 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + สตรอนเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.01 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบเอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



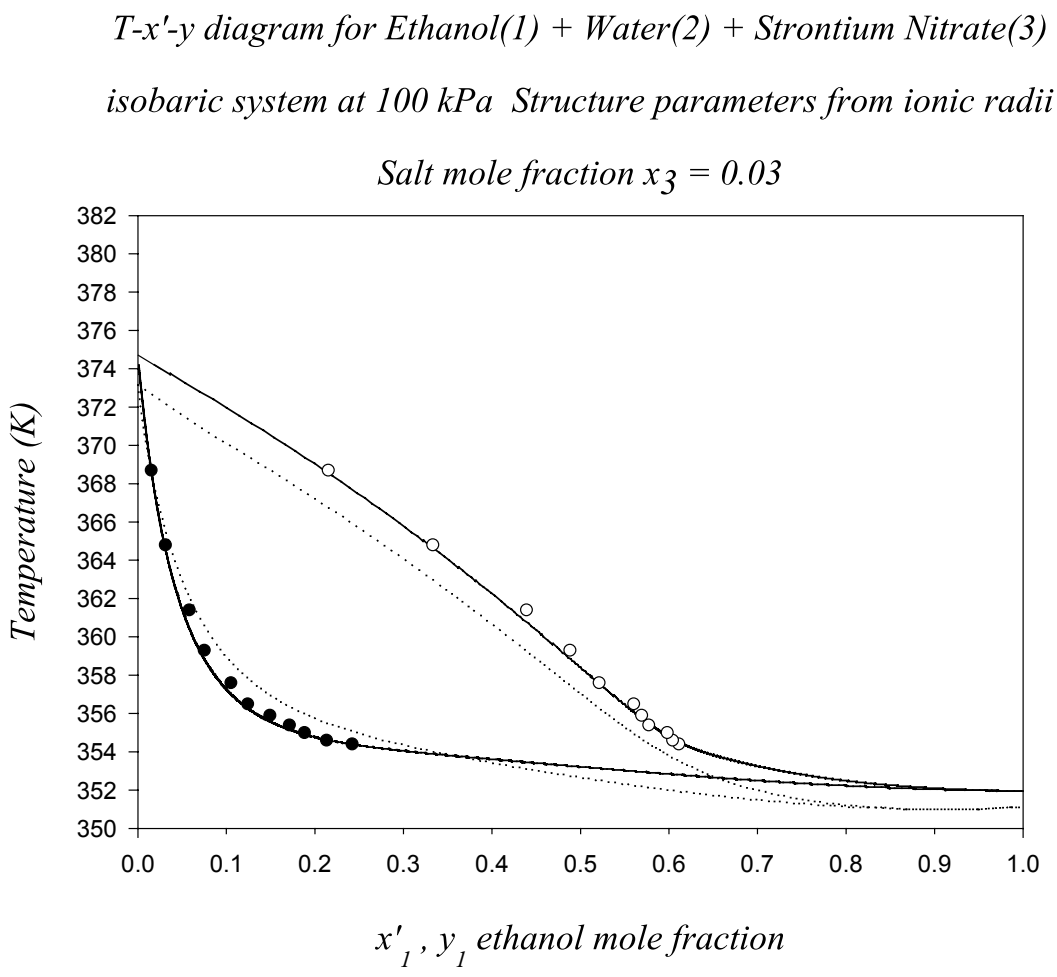
ภาพที่ 3-58 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + สตรอนเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.02 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบเอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



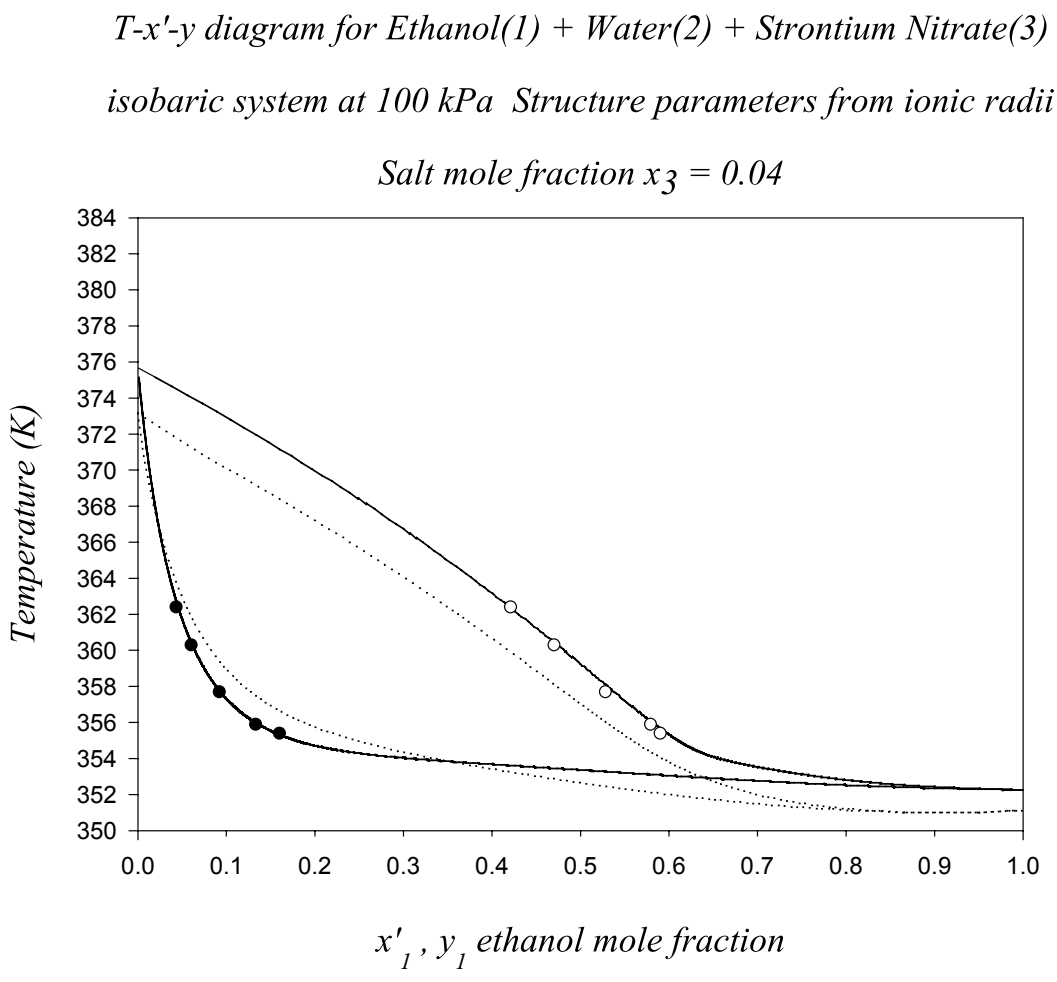
ภาพที่ 3-59 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + สตรอนเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.03 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบเอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



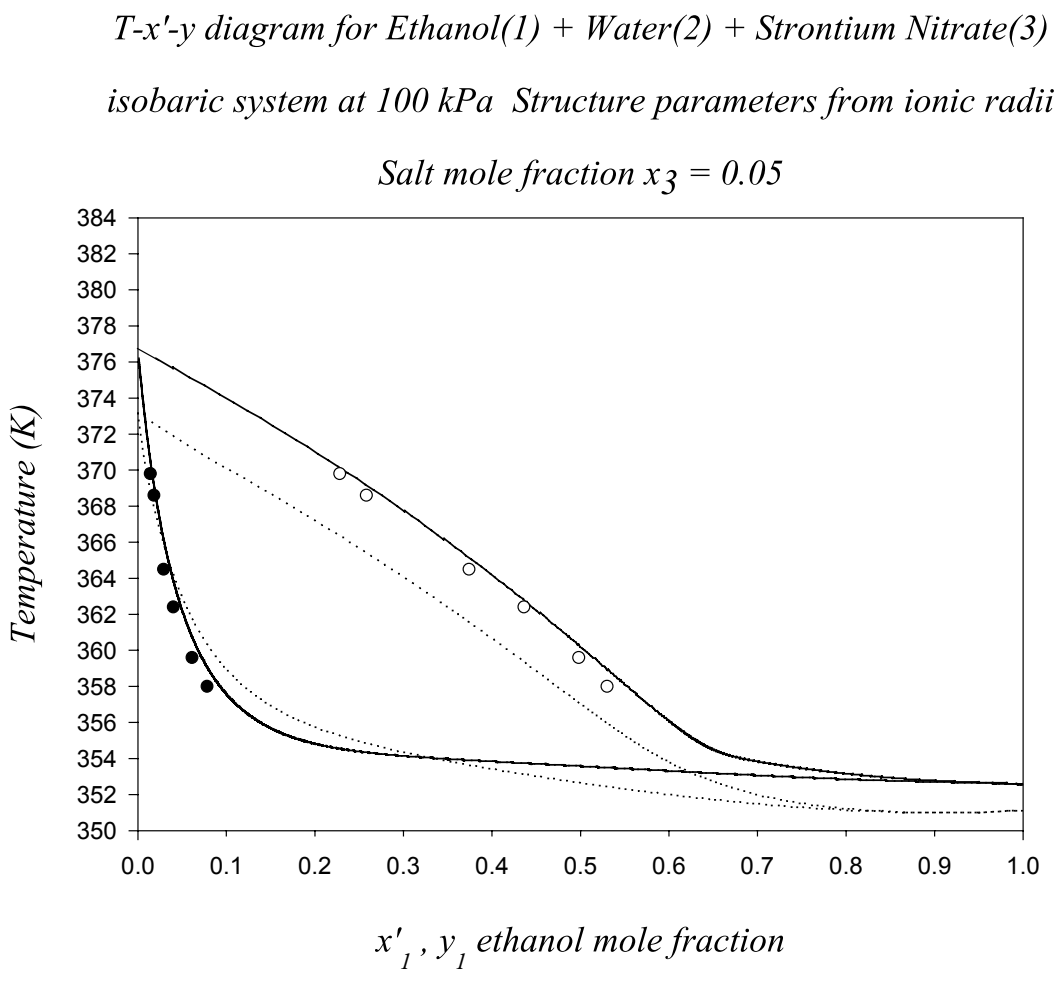
ภาพที่ 3-60 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + สตรอนเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.04 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



ภาพที่ 3-61 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + สตรอนเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.05 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบเอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ

12. ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยใช้ค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน ใช้ข้อมูลผลการทดลองจากวารสารตีพิมพ์เรื่อง

Isobaric Vapor-Liquid Equilibrium for Ethanol + Water + Sodium Nitrate (Pena, Vercher and Martinez-Andreu, 1996)

ข้อมูลสมดุลระหว่างวัฏภาคจากผลการทดลอง

ในการศึกษาใช้ข้อมูลจากผลการทดลองสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ ได้แก่ระบบ น้ำ(1)+ โซเดียมไนเตรท(2) ที่ความดันคงที่ 100.0 kPa และระบบตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ได้แก่ระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โซเดียมไนเตรท(3) ที่ความดันคงที่ 100.0 kPa ค่าพารามิเตอร์โครงสร้าง (r_i, q_i) ขององค์ประกอบและค่าคงที่ของสมการ Antoine แสดงในตาราง 3-62 ข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ และความดันของระบบ $(P_{\text{Total,exp}})$ ดังแสดงในตาราง 3- 65 สำหรับข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองของระบบตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\exp})$ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของตัวทำละลาย $(\gamma_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ และความดันของระบบ $(P_{\text{Total,exp}})$ ดังแสดงในตาราง 3-66

ผลการหาค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

ด้วยการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อกำหนดค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC โดยพิจารณาให้ไอออนอิสระที่เกิดจากการแตกตัวของเกลือเป็นองค์ประกอบที่ต่างชนิดกัน ดังนั้นสำหรับระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ จะพิจารณาให้เป็นระบบสามองค์ประกอบ ได้แก่ระบบ น้ำ(1) + โซเดียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100.0 kPa ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับไอออนและไอออนกับไอออน แสดงในตาราง 3-63 สำหรับระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ จะพิจารณาให้เป็นระบบสี่องค์ประกอบซึ่งประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โซเดียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100.0 kPa ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับตัวทำละลาย ตัวทำละลายกับไอออน และระหว่างไอออนกับไอออน แสดงในตาราง 3-64

ผลการคำนวณอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ

เนื่องจากเกลือไม่สามารถระเหยได้ในสภาวะปกติและระบบประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว ดังนั้นค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลายจะมีค่าเท่ากับ 1.00 เสมอและความดันของระบบมีค่าคงที่ จึงกำหนดให้ใช้อุณหภูมิของระบบเป็นตัวแปรตามในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นและใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ร่วมกับค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) ของตัวทำละลาย อุณหภูมิของระบบ (T_{cal}) ซึ่งได้จากความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีกับค่าความดันไออิ่มตัวของตัวทำละลาย ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-65 สำหรับอุณหภูมิจากข้อมูลผลการทดลองและอุณหภูมิจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC แสดงในภาพที่ 3-62

ผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ

ด้วยการใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC และค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นจากระบบเดียวกัน เพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) ของตัวทำละลาย และค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลาย ($y_{i,\mathrm{cal}}$) ของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โซเดียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดันคงที่ 100.0 kPa ในการพิจารณาสมดุลระหว่างวัฏภาคจะพิจารณาเฉพาะองค์ประกอบที่อยู่ในทุกวัฏภาคที่ปรากฏในระบบทั้งวัฏภาคของเหลวและวัฏภาคไอ โดยปริมาณขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายในวัฏภาคของเหลวแสดงในพจน์ของค่าเศษส่วนโมลโดยไม่รวมจำนวนโมลของไอออน (x_i', x_j') ใช้แสดงค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลาย i และ j ตามลำดับ ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-66 ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลาย ($x'_{i,\mathrm{exp}}$) และตัวถูกละลาย (x_{salt}) ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลาย ($y_{i,\mathrm{cal}}$) ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของตัวทำละลาย ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) สำหรับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC แสดงในภาพที่ 3-63 ของ เอทานอล(1)

เมื่อใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นข้อมูลผลการทดลอง ร่วมกับการเปลี่ยนแปลงค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายให้มีค่าตั้งแต่ 0.00 ถึง 1.00 และกำหนดให้ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของเกลือมีค่าคงที่ ได้แก่ 0.02 0.04 0.06 0.08 0.10 และ 0.12

เพื่อคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบ แสดงในภาพที่ 3-64 แสดงสมดุลระหว่างวัฏภาคของเอทานอล(1) จากภาพที่ 3-65 ถึง ภาพที่ 3-70 พบว่าสมดุลระหว่างวัฏภาคกับอุณหภูมิของระบบที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC มีลักษณะเดียวกับที่ได้จากผลการทดลอง

ตาราง 3-62 ค่าคงที่ของสมการ Antoine และพารามิเตอร์โครงสร้างของเอทานอล น้ำ โซเดียมไอออนและไนเตรทไอออน จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

		ค่าคงที่ Antoine[1]			พารามิเตอร์โครงสร้าง	
องค์ประกอบ	ช่วงอุณหภูมิ(K)	*A*	*B*	*C*	*r*	*q*
Ethanol	293 – 366	8.11220	1592.864	226.184	2.1055	1.9720
Water	273 – 373	8.07131	1730.630	233.426	0.9200	1.4000
Sodium ion	-	-	-	-	0.3823	0.5272
Nitrate ion	-	-	-	-	1.0451	1.466

ที่มา : [1](Perry, Green and Maloney, 1997)

ตาราง 3-63 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วยน้ำ(1) + โซเดียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

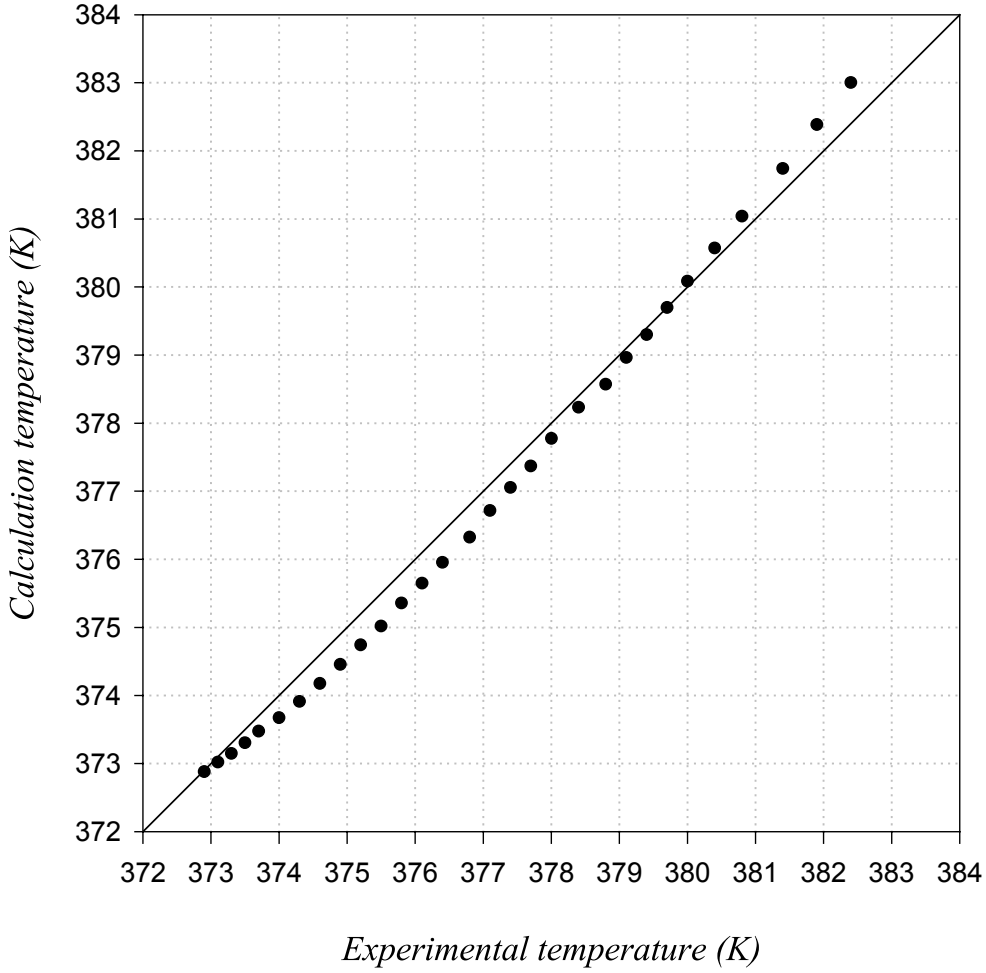
Component	Water(1)	Sodium ion(2)	Nitrate ion(3)
Water(1)	A_{11} = 0.000	A_{12} = 1629.114	A_{13} = 1777.932
Sodium ion(2)	A_{21} = 428.549	A_{22} = 0.000	A_{23} = 2362.865
Nitrate ion(3)	A_{31} = -1723.090	A_{32} = 62.408	A_{33} = 0.000

ตาราง 3-64 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โซเดียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

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

ตาราง 3-65 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบ ที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + โซเดียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

$x_{1,exp}$	$x_{2,exp}$	$x_{3,exp}$	$T_{exp}(K)$	$T_{cal}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	%Err T
0.8313	0.0844	0.0844	382.40	383.00	0.8433	0.158
0.8393	0.0804	0.0804	381.90	382.39	0.8527	0.127
0.8477	0.0762	0.0762	381.40	381.74	0.8627	0.090
0.8570	0.0715	0.0715	380.80	381.04	0.8738	0.063
0.8633	0.0684	0.0684	380.40	380.57	0.8814	0.045
0.8699	0.0651	0.0651	380.00	380.08	0.8893	0.022
0.8752	0.0624	0.0624	379.70	379.70	0.8957	-0.001
0.8807	0.0597	0.0597	379.40	379.30	0.9023	-0.026
0.8854	0.0573	0.0573	379.10	378.97	0.9079	-0.036
0.8910	0.0545	0.0545	378.80	378.57	0.9146	-0.061
0.8959	0.0521	0.0521	378.40	378.23	0.9204	-0.044
0.9026	0.0487	0.0487	378.00	377.77	0.9282	-0.060
0.9086	0.0457	0.0457	377.70	377.37	0.9351	-0.087
0.9134	0.0433	0.0433	377.40	377.05	0.9405	-0.092
0.9186	0.0407	0.0407	377.10	376.72	0.9463	-0.101
0.9248	0.0376	0.0376	376.80	376.32	0.9530	-0.126
0.9308	0.0346	0.0346	376.40	375.96	0.9593	-0.118
0.9359	0.0321	0.0321	376.10	375.65	0.9645	-0.120
0.9409	0.0296	0.0296	375.80	375.36	0.9693	-0.118
0.9469	0.0266	0.0266	375.50	375.02	0.9748	-0.128
0.9520	0.0240	0.0240	375.20	374.74	0.9792	-0.122
0.9575	0.0213	0.0213	374.90	374.45	0.9836	-0.119
0.9631	0.0185	0.0185	374.60	374.18	0.9877	-0.114
0.9687	0.0157	0.0157	374.30	373.91	0.9913	-0.104
0.9741	0.0130	0.0130	374.00	373.67	0.9943	-0.088
0.9789	0.0106	0.0106	373.70	373.47	0.9964	-0.060
0.9833	0.0084	0.0084	373.50	373.30	0.9980	-0.052
0.9877	0.0062	0.0062	373.30	373.15	0.9992	-0.041
0.9916	0.0042	0.0042	373.10	373.02	0.9998	-0.021
0.9963	0.0019	0.0019	372.90	372.88	1.0001	-0.005



ภาพที่ 3-62 อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + โซเดียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

ตาราง 3-66 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โซเดียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

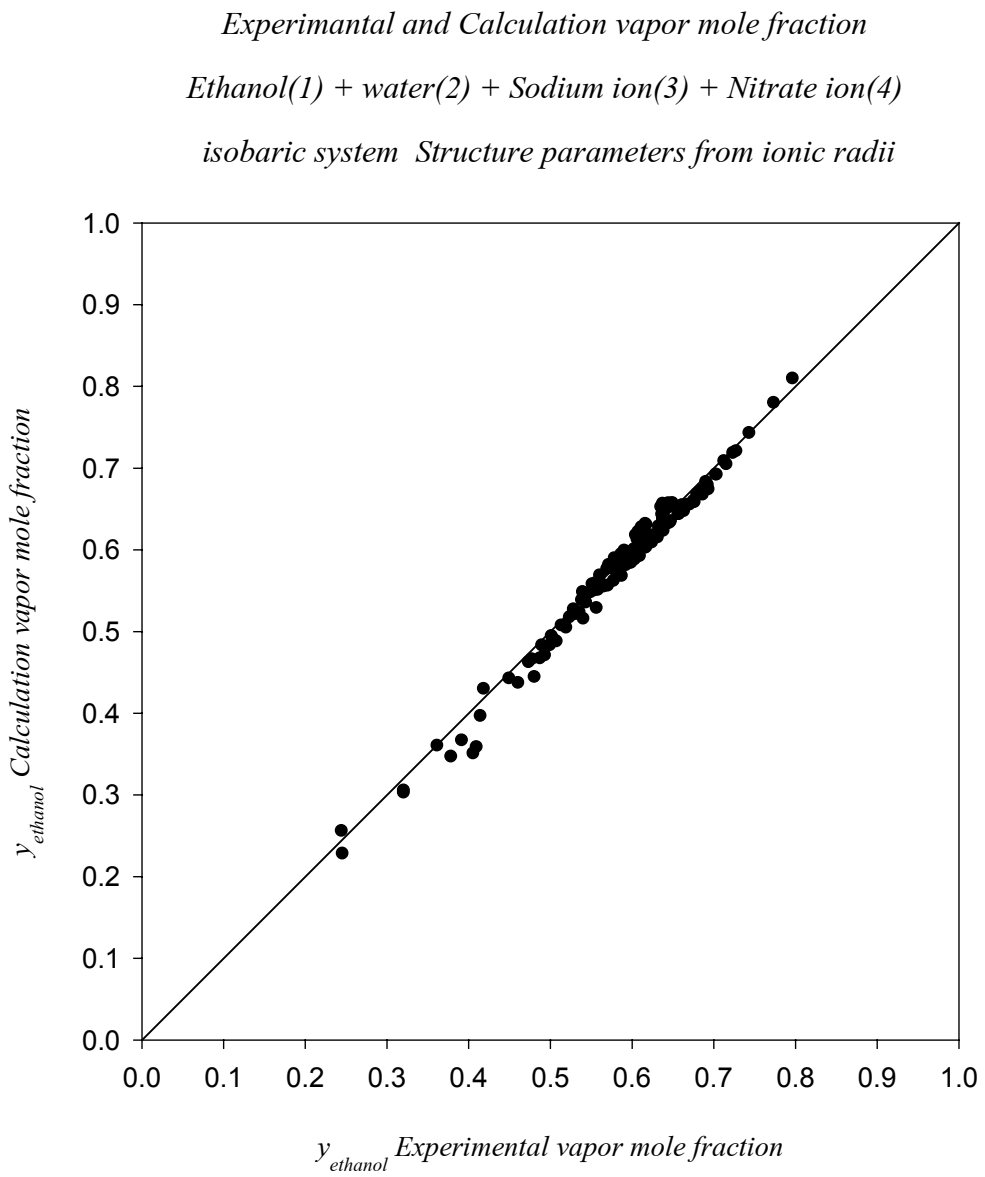
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.153	0.011	373.70	11.888	0.854	0.244	0.256	0.756	0.744	5.116	-1.651
0.117	0.011	371.90	10.801	0.905	0.245	0.229	0.755	0.771	-6.680	2.168
0.137	0.015	370.00	11.272	0.872	0.320	0.306	0.680	0.694	-4.397	2.069
0.110	0.017	368.90	10.213	0.909	0.320	0.303	0.680	0.697	-5.214	2.454
0.143	0.019	368.90	11.179	0.859	0.361	0.361	0.639	0.639	-0.023	0.013
0.128	0.024	366.10	10.445	0.877	0.414	0.397	0.586	0.603	-4.065	2.872
0.085	0.027	365.20	8.698	0.937	0.391	0.367	0.609	0.633	-6.062	3.892
0.136	0.031	364.00	10.266	0.860	0.473	0.463	0.527	0.537	-2.118	1.901
0.068	0.029	363.90	7.949	0.956	0.409	0.359	0.591	0.641	-12.183	8.431
0.052	0.031	364.00	7.177	0.973	0.378	0.348	0.622	0.652	-8.062	4.899
0.121	0.035	362.50	9.567	0.881	0.493	0.471	0.507	0.529	-4.408	4.286
0.101	0.034	363.10	8.918	0.912	0.460	0.438	0.540	0.562	-4.862	4.142
0.036	0.036	362.20	6.324	0.986	0.405	0.351	0.595	0.649	-13.243	9.014
0.079	0.039	363.90	7.770	0.941	0.418	0.431	0.582	0.569	2.997	-2.153
0.128	0.050	359.90	8.882	0.863	0.558	0.552	0.442	0.448	-1.144	1.444
0.094	0.054	360.00	7.592	0.916	0.523	0.518	0.477	0.482	-0.972	1.065
0.115	0.058	359.40	8.036	0.882	0.556	0.560	0.444	0.440	0.778	-0.975
0.048	0.054	361.20	6.005	0.976	0.449	0.443	0.551	0.557	-1.292	1.053
0.073	0.056	360.30	6.793	0.945	0.503	0.492	0.497	0.508	-2.261	2.289
0.119	0.064	358.30	7.861	0.873	0.580	0.583	0.420	0.417	0.583	-0.806
0.061	0.060	360.40	6.212	0.961	0.489	0.483	0.511	0.517	-1.125	1.076
0.032	0.064	359.60	5.121	0.993	0.480	0.445	0.520	0.555	-7.338	6.773
0.087	0.069	358.90	6.671	0.924	0.539	0.549	0.461	0.451	1.799	-2.103
0.108	0.076	357.70	6.977	0.890	0.586	0.595	0.414	0.405	1.510	-2.138
0.068	0.073	358.90	5.940	0.952	0.528	0.528	0.472	0.472	-0.061	0.068
0.055	0.074	359.10	5.509	0.969	0.513	0.508	0.487	0.492	-0.976	1.028
0.042	0.079	359.10	4.957	0.986	0.501	0.495	0.499	0.505	-1.182	1.187
0.027	0.079	359.30	4.513	1.001	0.487	0.468	0.513	0.532	-3.974	3.773
0.080	0.085	357.90	5.847	0.935	0.560	0.569	0.440	0.431	1.685	-2.144
0.063	0.083	358.20	5.446	0.959	0.538	0.539	0.462	0.461	0.183	-0.213
0.050	0.086	358.30	4.984	0.977	0.531	0.522	0.469	0.478	-1.702	1.928
0.111	0.097	356.30	6.206	0.884	0.616	0.632	0.384	0.368	2.677	-4.295
0.099	0.099	356.50	5.848	0.905	0.604	0.618	0.396	0.382	2.380	-3.630
0.015	0.092	358.80	3.862	1.017	0.477	0.467	0.523	0.533	-2.183	1.991
0.074	0.100	357.20	5.199	0.946	0.571	0.582	0.429	0.418	1.919	-2.554
0.058	0.102	357.40	4.744	0.970	0.551	0.559	0.449	0.441	1.382	-1.696
0.036	0.103	357.80	4.166	1.000	0.527	0.521	0.473	0.479	-1.045	1.164
0.091	0.113	356.20	5.215	0.920	0.607	0.622	0.393	0.378	2.536	-3.917
0.068	0.116	356.70	4.615	0.958	0.578	0.590	0.422	0.410	2.140	-2.931
0.044	0.114	357.10	4.115	0.993	0.549	0.549	0.451	0.451	-0.085	0.104
0.022	0.111	357.60	3.658	1.019	0.519	0.505	0.481	0.495	-2.678	2.890

ตาราง 3-66 (ต่อ 1/2)

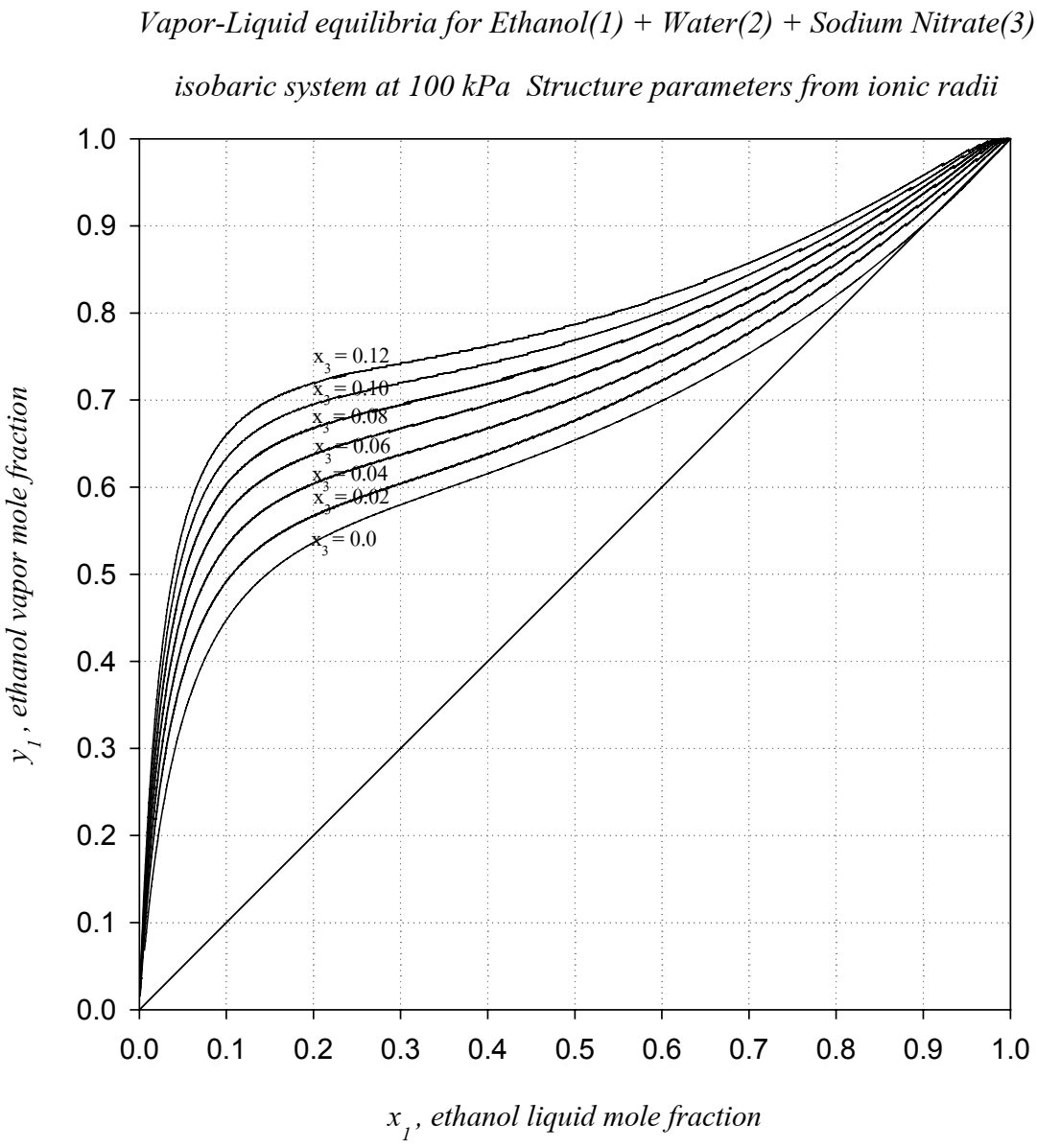
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.011	0.111	357.80	3.397	1.030	0.499	0.484	0.501	0.516	-3.052	3.039
0.084	0.131	355.70	4.588	0.935	0.611	0.628	0.389	0.372	2.797	-4.393
0.053	0.128	356.60	4.014	0.985	0.569	0.577	0.431	0.423	1.401	-1.849
0.007	0.123	357.40	3.113	1.042	0.507	0.488	0.493	0.512	-3.654	3.758
0.030	0.127	356.90	3.545	1.017	0.543	0.536	0.457	0.464	-1.272	1.511
0.097	0.140	355.20	4.622	0.914	0.635	0.653	0.365	0.347	2.810	-4.888
0.039	0.135	356.40	3.593	1.009	0.562	0.559	0.438	0.441	-0.519	0.665
0.017	0.132	356.90	3.190	1.036	0.540	0.516	0.460	0.484	-4.402	5.168
0.061	0.140	356.00	3.936	0.977	0.590	0.600	0.410	0.400	1.613	-2.322
0.076	0.153	355.30	3.963	0.956	0.617	0.631	0.383	0.369	2.291	-3.691
0.090	0.164	354.90	3.988	0.934	0.637	0.657	0.363	0.343	3.128	-5.489
0.012	0.155	356.40	2.784	1.058	0.535	0.524	0.465	0.476	-2.039	2.345
0.025	0.159	356.10	2.965	1.043	0.554	0.551	0.446	0.449	-0.555	0.690
0.048	0.167	355.60	3.248	1.011	0.590	0.595	0.410	0.405	0.899	-1.294
0.081	0.178	354.70	3.605	0.956	0.642	0.651	0.358	0.349	1.430	-2.564
0.034	0.171	355.70	2.964	1.037	0.580	0.574	0.420	0.426	-1.047	1.446
0.067	0.177	353.30	3.425	0.981	0.641	0.632	0.359	0.368	-1.326	2.368
0.055	0.180	355.20	3.179	1.006	0.606	0.613	0.394	0.387	1.190	-1.831
0.007	0.179	355.90	2.447	1.084	0.556	0.529	0.444	0.471	-4.814	6.029
0.020	0.183	355.70	2.607	1.067	0.565	0.555	0.435	0.445	-1.685	2.188
0.061	0.195	353.30	3.085	1.002	0.639	0.631	0.361	0.369	-1.261	2.231
0.041	0.196	355.20	2.778	1.041	0.596	0.598	0.404	0.402	0.319	-0.471
0.078	0.205	354.50	3.173	0.975	0.644	0.658	0.356	0.342	2.102	-3.803
0.028	0.204	355.20	2.518	1.070	0.585	0.580	0.415	0.420	-0.927	1.306
0.065	0.214	352.90	2.913	1.004	0.656	0.644	0.344	0.356	-1.799	3.431
0.055	0.215	353.30	2.773	1.026	0.632	0.629	0.368	0.371	-0.440	0.756
0.014	0.208	355.30	2.296	1.098	0.570	0.557	0.430	0.443	-2.342	3.104
0.048	0.217	354.80	2.655	1.042	0.615	0.618	0.385	0.382	0.422	-0.674
0.064	0.223	354.50	2.790	1.013	0.636	0.644	0.364	0.356	1.237	-2.162
0.036	0.224	354.90	2.443	1.070	0.602	0.601	0.398	0.399	-0.165	0.249
0.070	0.240	354.30	2.690	1.011	0.649	0.658	0.351	0.342	1.354	-2.504
0.023	0.230	354.90	2.240	1.100	0.592	0.582	0.408	0.418	-1.750	2.540
0.010	0.239	354.90	2.030	1.134	0.577	0.562	0.423	0.438	-2.515	3.431
0.055	0.254	354.30	2.410	1.053	0.638	0.641	0.362	0.359	0.420	-0.740
0.041	0.251	354.50	2.287	1.081	0.622	0.619	0.378	0.381	-0.556	0.915
0.029	0.252	354.60	2.154	1.108	0.607	0.600	0.393	0.400	-1.196	1.847
0.063	0.264	354.10	2.412	1.042	0.650	0.655	0.350	0.345	0.795	-1.477
0.018	0.260	354.50	1.991	1.138	0.598	0.584	0.402	0.416	-2.281	3.393
0.035	0.272	354.30	2.087	1.112	0.622	0.616	0.378	0.384	-0.950	1.563
0.048	0.277	354.10	2.178	1.087	0.637	0.637	0.363	0.363	0.070	-0.124
0.006	0.273	354.50	1.805	1.177	0.587	0.568	0.413	0.432	-3.158	4.489
0.014	0.282	354.30	1.837	1.169	0.599	0.585	0.401	0.415	-2.263	3.381
0.054	0.299	353.80	2.097	1.090	0.652	0.653	0.348	0.347	0.097	-0.182
0.023	0.290	354.20	1.879	1.157	0.616	0.603	0.384	0.397	-2.113	3.389
0.041	0.304	353.90	1.962	1.126	0.640	0.635	0.360	0.365	-0.735	1.307
0.028	0.300	354.00	1.874	1.154	0.623	0.614	0.377	0.386	-1.401	2.315
0.011	0.306	354.10	1.706	1.202	0.603	0.589	0.397	0.411	-2.342	3.558

ตาราง 3-66 (ต่อ 2/2)

x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.017	0.321	353.90	1.695	1.204	0.617	0.604	0.383	0.396	-2.132	3.435
0.034	0.330	353.70	1.787	1.169	0.644	0.633	0.356	0.367	-1.711	3.094
0.022	0.327	353.80	1.710	1.197	0.625	0.614	0.375	0.386	-1.797	2.996
0.047	0.342	353.60	1.829	1.146	0.661	0.655	0.339	0.345	-0.867	1.690
0.006	0.340	353.80	1.548	1.255	0.609	0.593	0.391	0.407	-2.665	4.150
0.029	0.356	353.50	1.654	1.209	0.646	0.634	0.354	0.366	-1.865	3.404
0.039	0.366	353.40	1.684	1.191	0.662	0.652	0.338	0.348	-1.584	3.103
0.016	0.360	353.60	1.555	1.251	0.631	0.616	0.369	0.384	-2.426	4.148
0.012	0.360	353.60	1.529	1.262	0.624	0.610	0.376	0.390	-2.323	3.856
0.033	0.393	353.20	1.562	1.238	0.663	0.652	0.337	0.348	-1.669	3.283
0.012	0.399	353.30	1.428	1.310	0.638	0.624	0.362	0.376	-2.245	3.957
0.008	0.399	353.30	1.405	1.323	0.630	0.618	0.370	0.382	-1.959	3.335
0.023	0.411	353.20	1.460	1.290	0.657	0.644	0.343	0.356	-1.966	3.765
0.032	0.416	352.40	1.496	1.266	0.676	0.659	0.324	0.341	-2.543	5.305
0.026	0.432	353.00	1.427	1.305	0.670	0.656	0.330	0.344	-2.100	4.263
0.018	0.440	353.00	1.371	1.342	0.663	0.648	0.337	0.352	-2.285	4.495
0.008	0.445	353.00	1.314	1.384	0.647	0.636	0.353	0.364	-1.756	3.218
0.028	0.456	352.20	1.387	1.327	0.686	0.668	0.314	0.332	-2.636	5.758
0.020	0.465	352.80	1.334	1.367	0.675	0.660	0.325	0.340	-2.163	4.493
0.014	0.474	352.70	1.293	1.401	0.668	0.656	0.332	0.344	-1.805	3.632
0.025	0.483	352.20	1.325	1.371	0.693	0.674	0.307	0.326	-2.678	6.046
0.021	0.509	352.50	1.268	1.420	0.692	0.680	0.308	0.320	-1.751	3.934
0.016	0.508	352.60	1.251	1.439	0.685	0.673	0.315	0.327	-1.753	3.812
0.010	0.516	352.40	1.218	1.476	0.679	0.669	0.321	0.331	-1.505	3.184
0.018	0.546	352.30	1.210	1.483	0.703	0.693	0.297	0.307	-1.481	3.505
0.007	0.556	352.20	1.164	1.547	0.690	0.684	0.310	0.316	-0.909	2.023
0.012	0.562	352.20	1.174	1.533	0.702	0.693	0.298	0.307	-1.306	3.077
0.015	0.580	352.10	1.166	1.544	0.715	0.705	0.285	0.295	-1.362	3.418
0.004	0.612	351.80	1.108	1.648	0.712	0.709	0.288	0.291	-0.420	1.039
0.012	0.618	351.90	1.125	1.615	0.727	0.721	0.273	0.279	-0.776	2.068
0.009	0.620	351.80	1.116	1.633	0.723	0.719	0.277	0.281	-0.543	1.419
0.006	0.669	351.60	1.078	1.726	0.743	0.744	0.257	0.256	0.075	-0.216
0.004	0.731	351.40	1.046	1.838	0.773	0.780	0.227	0.220	0.951	-3.239
0.003	0.776	351.20	1.030	1.920	0.796	0.810	0.204	0.190	1.795	-7.004

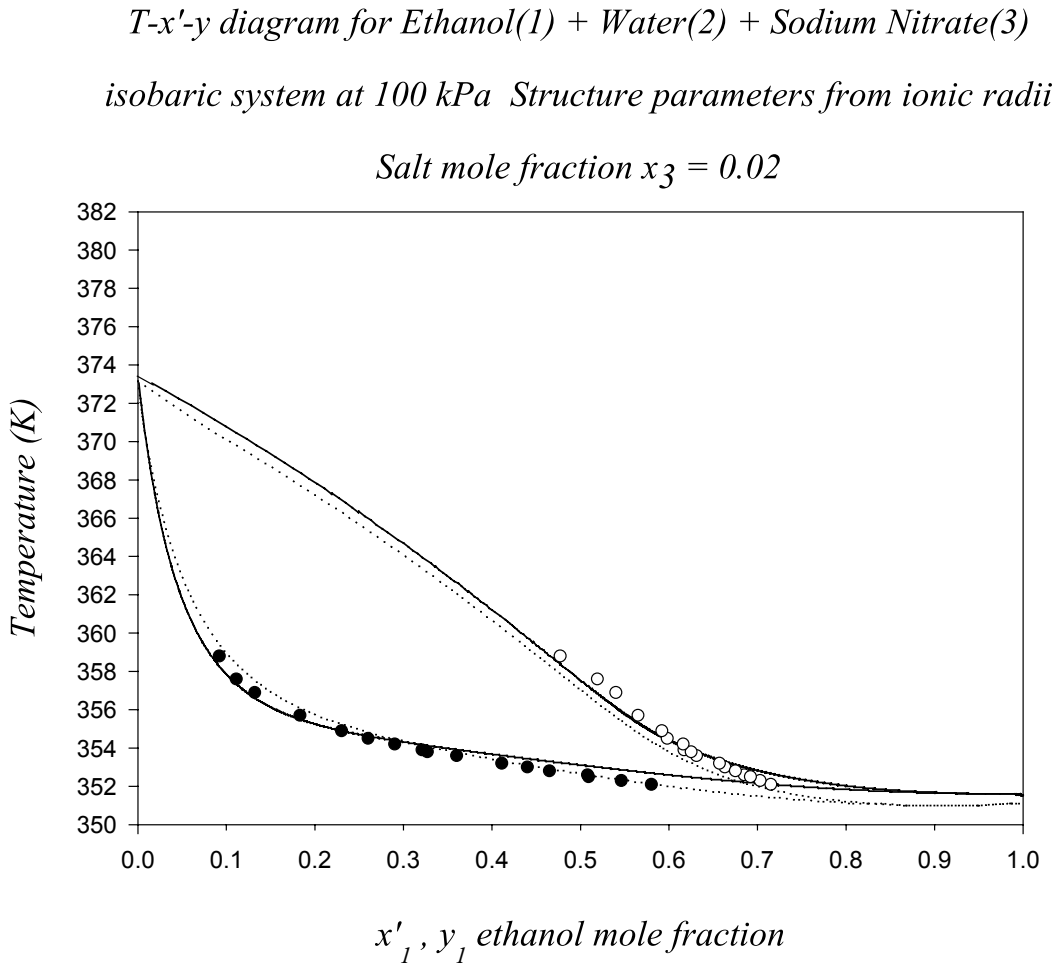


ภาพที่ 3-63 ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ เอทานอล(1) ที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โซเดียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดันคงที่ 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน



ภาพที่ 3-64 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') ของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โซเดียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa ที่ความเข้มข้นของเกลือมีเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.0 0.02 0.04 0.06 0.08 0.10 และ 0.12 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ —— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC



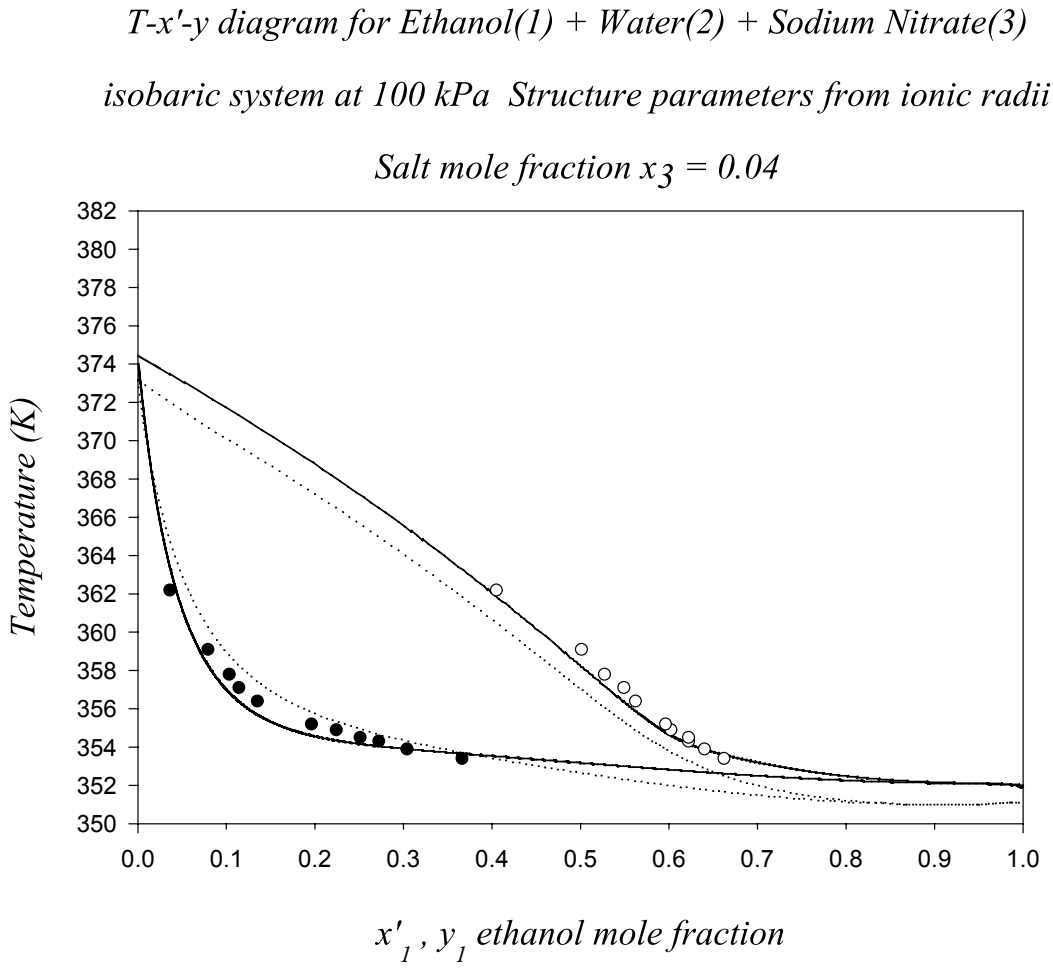
ภาพที่ 3-65 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โซเดียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.02 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



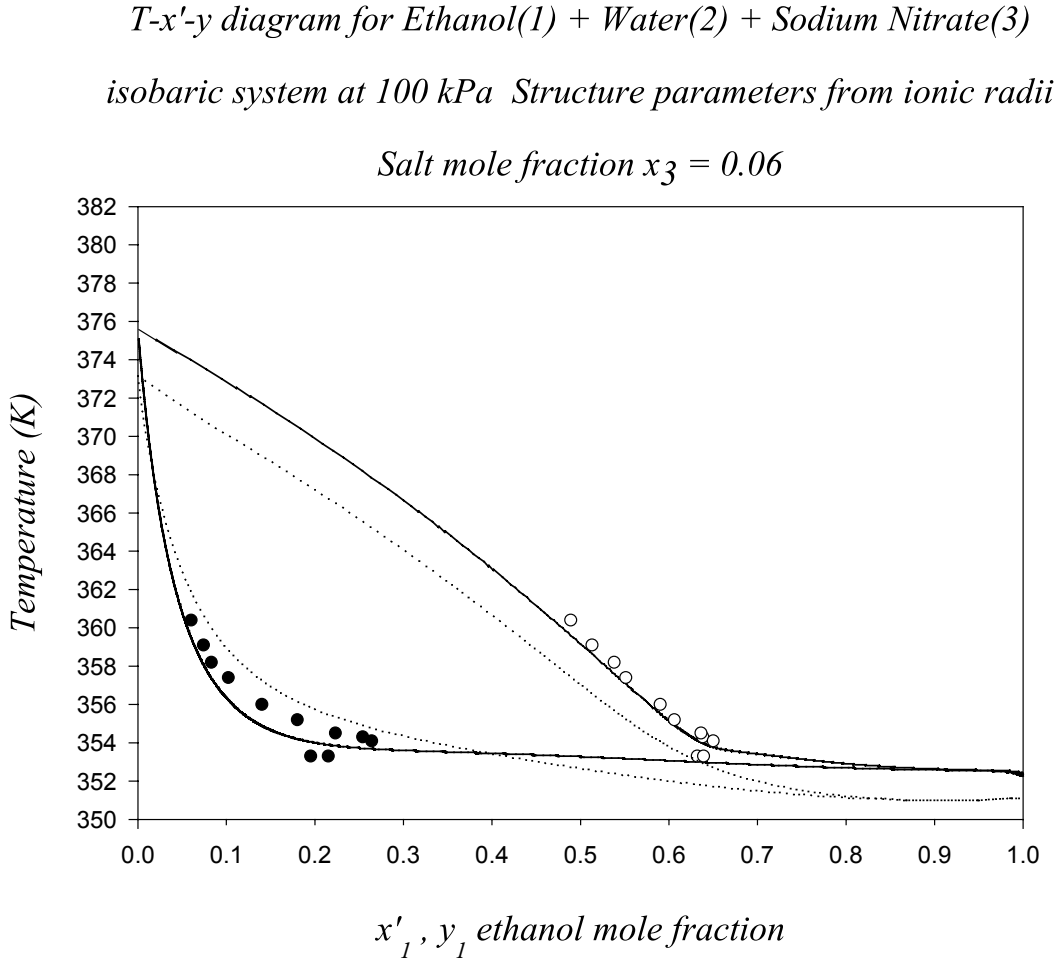
ภาพที่ 3-66 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โซเดียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.04 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



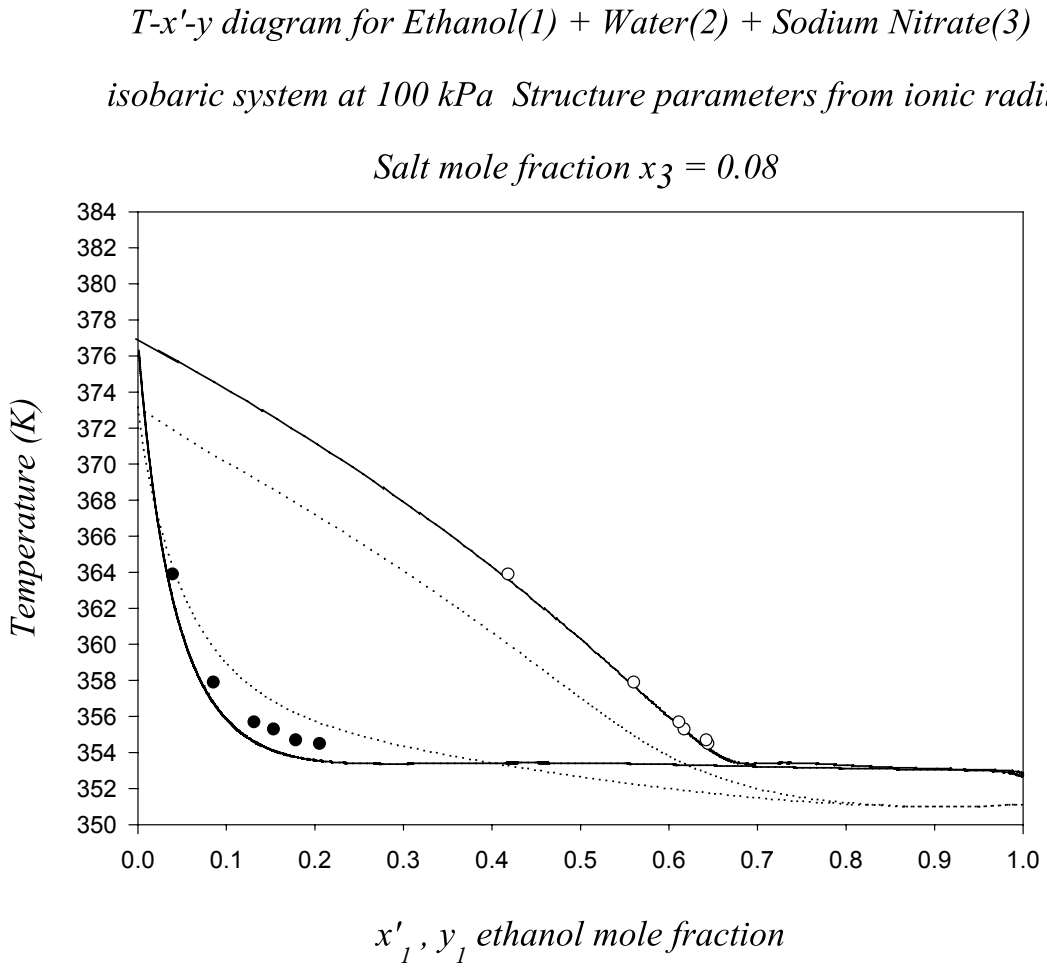
ภาพที่ 3-67 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โซเดียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.06 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



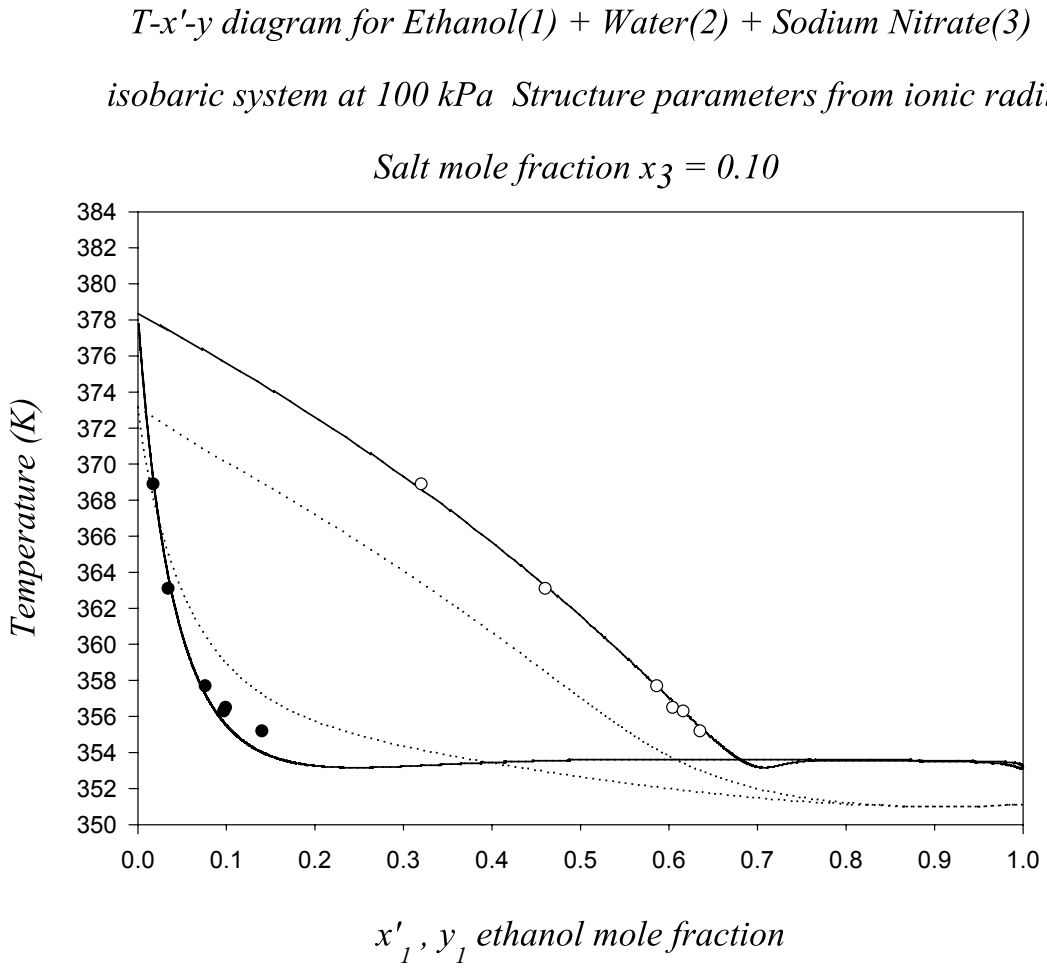
ภาพที่ 3-68 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โซเดียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.08 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



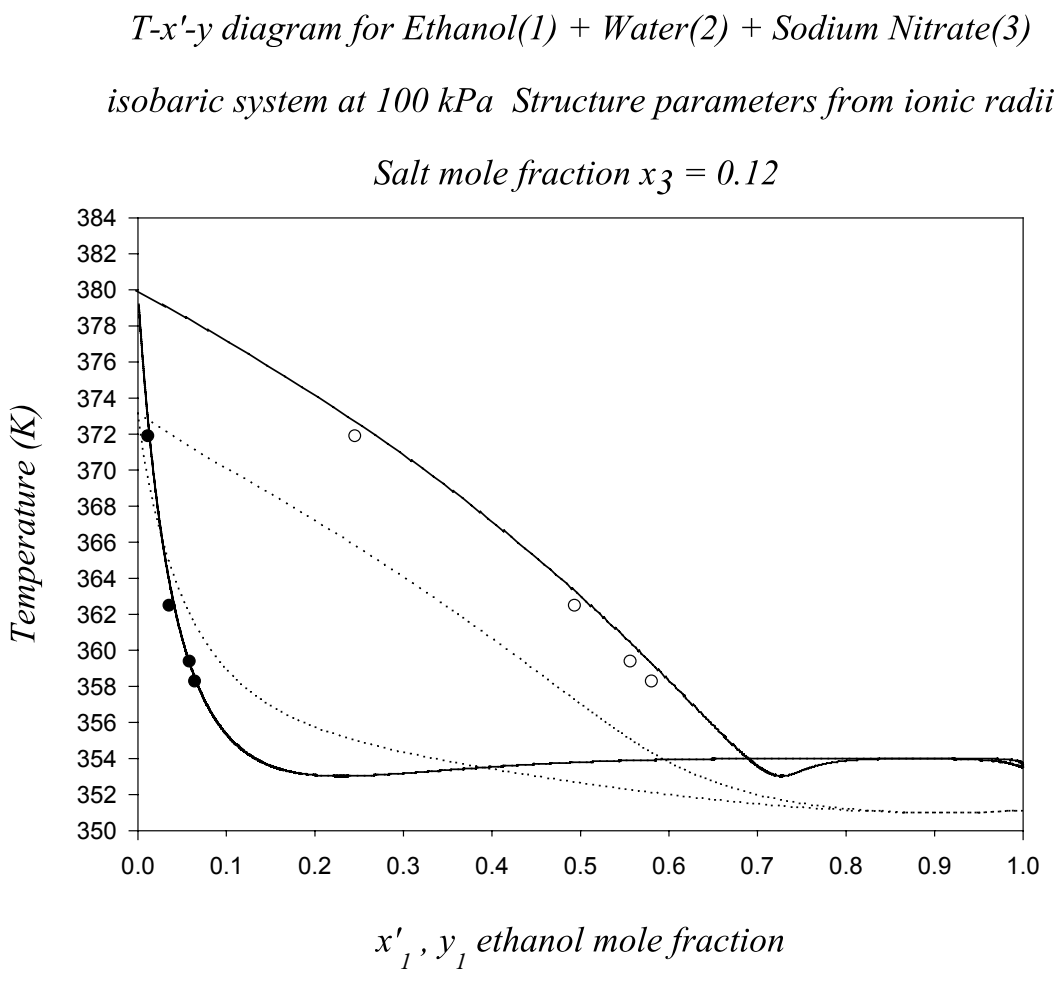
ภาพที่ 3-69 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โซเดียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.10 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



ภาพที่ 3-70 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย เอทานอล(1) + น้ำ(2) + โซเดียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.12 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ

13. ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบคงที่ โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน ใช้ข้อมูลผลการทดลองจากวารสารตีพิมพ์เรื่อง

Isobaric Vapor-Liquid Equilibria for 1-Propanol + Water + Calcium Nitrate (Vercher, Rojo and Martinez-Andreu, 1999)

ข้อมูลสมดุลระหว่างวัฏภาคจากผลการทดลอง

ในการศึกษาใช้ข้อมูลจากผลการทดลองสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ ได้แก่ ระบบน้ำ(1) + แคลเซียมไนเตรท(2) ที่ความดันคงที่ 100 kPa และระบบ 1-โพรพานอล(1) + แคลเซียมไนเตรท(2) ที่ความดันคงที่ 100 kPa และระบบตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ได้แก่ ระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดันคงที่ 100 kPa ค่าพารามิเตอร์โครงสร้าง (r_i, q_i) ขององค์ประกอบและค่าคงที่ของสมการ Antoine สำหรับคำนวณความดันไออิ่มตัวของตัวทำละลายแสดงในตาราง 3-67 ข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ และความดันของระบบ $(P_{\text{Total},\exp})$ ซึ่งค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอจะประกอบด้วยองค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายเท่านั้น ดังแสดงในตาราง 3-71 และตาราง 3-72 สำหรับข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองของระบบตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ และความดัน $(P_{\text{Total},\exp})$ ของระบบ ดังแสดงในตาราง 3-73

ผลการหาค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

ด้วยการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อกำหนดค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC โดยพิจารณาให้ไอออนอิสระที่เกิดจากการแตกตัวของเกลือเป็นองค์ประกอบที่ต่างชนิดกัน ดังนั้นสำหรับระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ จะพิจารณาให้เป็นระบบสามองค์ประกอบ ได้แก่ระบบ น้ำ(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa ระบบ 1-โพรพานอล(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับไอออนและพารามิเตอร์ระหว่างไอออนกับไอออน แสดงในตาราง 3-68 และตาราง 3-69 สำหรับระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ จะพิจารณาให้เป็น

ระบบสี่องค์ประกอบซึ่งประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับตัวทำละลาย ตัวทำละลายกับไอออน และระหว่างไอออนกับไอออน แสดงในตาราง 3-70

ผลการคำนวณอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ

เนื่องจากเกลือไม่สามารถระเหยได้ในสภาวะปกติและระบบประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว ดังนั้นค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลายจะมีค่าเท่ากับ 1.00 เสมอ และความดันของระบบคงที่ จึงกำหนดให้ใช้อุณหภูมิของระบบเป็นตัวแปรตามในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นและใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ร่วมกับค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) ของตัวทำละลาย อุณหภูมิของระบบ (T_{cal}) ได้จากความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีกับค่าความดันไออิ่มตัวของตัวทำละลาย ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-71 และ 3-72 สำหรับอุณหภูมิจากข้อมูลผลการทดลองและอุณหภูมิจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC แสดงในภาพที่ 3-71 และภาพที่ 3-72 จากภาพจะเห็นว่าอุณหภูมิของระบบที่ได้จากผลการคำนวณและจากผลการทดลองมีค่าใกล้เคียงกันและเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าต่ำ

ผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ

ด้วยการใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC และค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นจากระบบเดียวกัน เพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) ของตัวทำละลาย และค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลาย ($y_{i,\mathrm{cal}}$) ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดันคงที่ 100 kPa ในการพิจารณาสมดุลระหว่างวัฏภาคจะพิจารณาเฉพาะองค์ประกอบที่อยู่ในทุกวัฏภาคที่ปรากฏในระบบทั้งวัฏภาคของเหลวและวัฏภาคไอ โดยปริมาณขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายในวัฏภาคของเหลวแสดงในพจน์ของค่าเศษส่วนโมลโดยไม่รวมจำนวนโมลของไอออน (x'_i, x'_j) ใช้แสดงค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลาย i และ j ตามลำดับ ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-73 ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลาย ($x'_{i,\mathrm{exp}}$) และตัวถูกละลาย (x_{salt}) ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลาย ($y_{i,\mathrm{cal}}$) ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของตัวทำละลาย ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) อุณหภูมิของระบบ (T_{exp}) สำหรับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจากการคำนวณ

ด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC แสดงในภาพที่ 3-73 ของ 1-โพรพานอล(1) จากภาพจะเห็นว่าค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและผลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC มีค่าใกล้เคียงกันและเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าต่ำ

ตาราง 3-67 ค่าคงที่ของสมการ Antoine และพารามิเตอร์โครงสร้างของ 1-โพรพานอล น้ำ แคลเซียมไอออนและไนเตรทไอออน จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

		ค่าคงที่ Antoine[1]			พารามิเตอร์โครงสร้าง	
องค์ประกอบ	ช่วงอุณหภูมิ(K)	*A*	*B*	*C*	*r*	*q*
1-Propanol	320-375	15.8040	3300.22	-75.19	2.7799	2.5120
Water	320-375	16.3144	3845.02	-44.42	0.9200	1.4000
Calcium ion	-	-	-	-	0.3325	0.4804
Nitrate ion	-	-	-	-	1.0451	1.4660

ที่มา : [1](Vercher, Rojo and Martinez-Andreu, 1999)

ตาราง 3-68 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

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

ตาราง 3-69 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

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

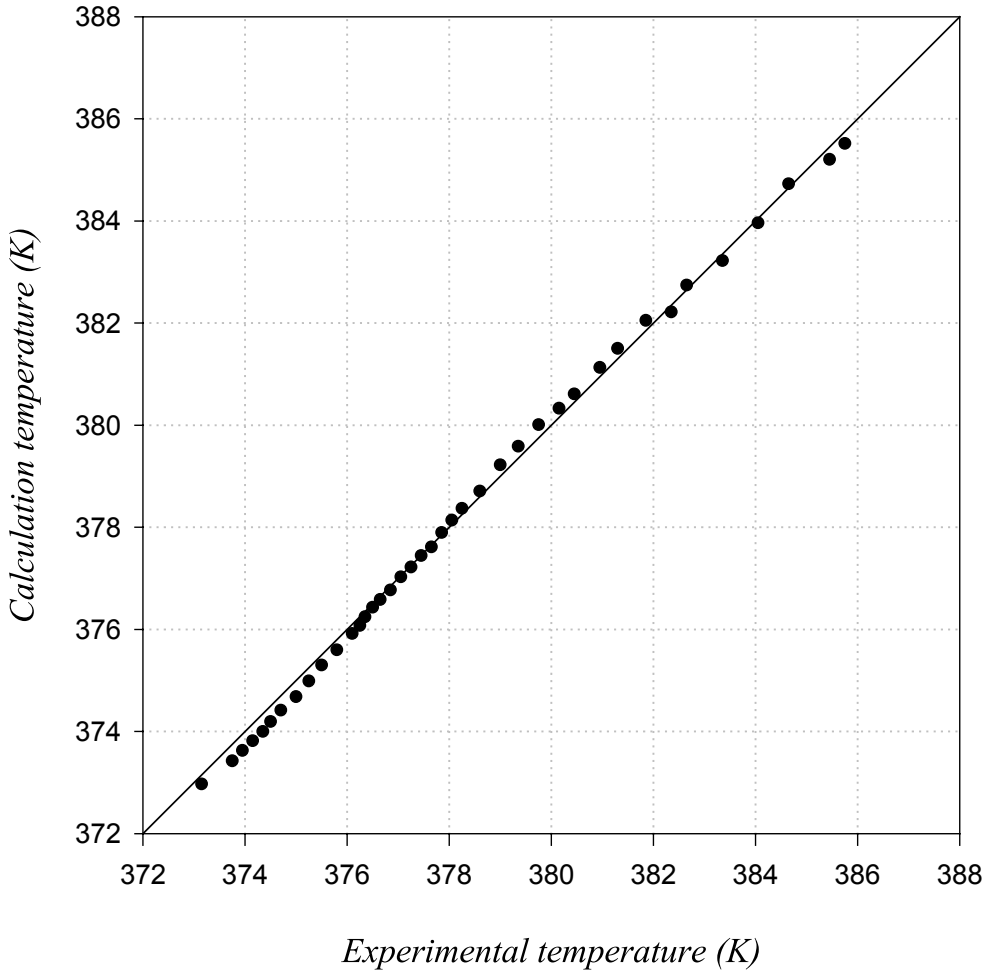
ตาราง 3-70 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

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

เมื่อใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นข้อมูลผลการทดลอง ร่วมกับการเปลี่ยนแปลงค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายให้มีค่าตั้งแต่ 0.00 ถึง 1.00 และกำหนดให้ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของเกลือมีค่าคงที่ได้แก่ ที่ 0.02 0.04 0.06 และ 0.08 เพื่อคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบ แสดงในภาพที่ 3-74 แสดงสมดุลระหว่างวัฏภาคของ 1-โพรพานอล(1) จากภาพจะเห็นว่าเมื่อปริมาณเกลือเปลี่ยนแปลงจะทำให้ตำแหน่งค่าเศษส่วนโมลที่เกิดอะซีโอโทรปเปลี่ยนแปลงไปโดยเมื่อปริมาณเกลือเพิ่มขึ้นจะทำให้อะซีโอโทรปของ 1-โพรพานอล(1) เปลี่ยนแปลงไปในทิศทางที่ค่าเศษส่วนโมลเพิ่มขึ้น สำหรับสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดันคงที่ 100 kPa แสดงในภาพที่ 3-75 ถึง ภาพที่ 3-78 โดยเปรียบเทียบกับข้อมูลที่ได้จากการทดลองที่มีค่าเศษส่วนโมลของเกลืออยู่ในช่วง 0.02 ถึง 0.08 และเปรียบเทียบกับผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคของระบบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 100 kPa จากภาพจะเห็นว่าสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบที่ได้จากผลการคำนวณมีลักษณะเหมือนกับผลการทดลอง

ตาราง 3-71 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

$x_{1,\mathrm{exp}}$	$x_{2,\mathrm{exp}}$	$x_{3,\mathrm{exp}}$	$T_{\mathrm{exp}}(K)$	$T_{\mathrm{cal}}(K)$	$\gamma_{1,\mathrm{cal}}$	%Err T
0.9949	0.0017	0.0034	373.15	372.97	0.9989	-0.049
0.9871	0.0043	0.0086	373.75	373.42	0.9906	-0.087
0.9844	0.0052	0.0104	373.95	373.63	0.9861	-0.086
0.9821	0.0060	0.0119	374.15	373.82	0.9818	-0.089
0.9800	0.0067	0.0133	374.35	374.00	0.9776	-0.094
0.9779	0.0074	0.0147	374.50	374.19	0.9729	-0.082
0.9756	0.0081	0.0163	374.70	374.42	0.9676	-0.076
0.9730	0.0090	0.0180	375.00	374.68	0.9611	-0.085
0.9701	0.0100	0.0199	375.25	374.99	0.9536	-0.069
0.9673	0.0109	0.0218	375.50	375.30	0.9459	-0.053
0.9647	0.0118	0.0235	375.80	375.60	0.9386	-0.054
0.9620	0.0127	0.0253	376.10	375.92	0.9308	-0.048
0.9607	0.0131	0.0262	376.25	376.08	0.9269	-0.047
0.9593	0.0136	0.0271	376.35	376.25	0.9228	-0.027
0.9578	0.0141	0.0281	376.50	376.43	0.9183	-0.018
0.9566	0.0145	0.0289	376.65	376.58	0.9146	-0.018
0.9551	0.0150	0.0299	376.85	376.77	0.9101	-0.021
0.9531	0.0156	0.0313	377.05	377.03	0.9039	-0.006
0.9516	0.0161	0.0323	377.25	377.22	0.8993	-0.007
0.9499	0.0167	0.0334	377.45	377.44	0.8940	-0.002
0.9486	0.0171	0.0343	377.65	377.61	0.8899	-0.010
0.9465	0.0178	0.0357	377.85	377.90	0.8834	0.012
0.9447	0.0184	0.0369	378.05	378.14	0.8777	0.023
0.9430	0.0190	0.0380	378.25	378.37	0.8724	0.031
0.9405	0.0198	0.0397	378.60	378.71	0.8645	0.029
0.9368	0.0211	0.0421	379.00	379.22	0.8529	0.059
0.9342	0.0219	0.0439	379.35	379.59	0.8447	0.062
0.9312	0.0229	0.0459	379.75	380.01	0.8354	0.068
0.9289	0.0237	0.0474	380.15	380.33	0.8282	0.047
0.9269	0.0244	0.0487	380.45	380.61	0.8220	0.043
0.9233	0.0256	0.0511	380.95	381.13	0.8109	0.047
0.9207	0.0264	0.0529	381.30	381.50	0.8030	0.053
0.9169	0.0277	0.0554	381.85	382.05	0.7915	0.053
0.9156	0.0281	0.0563	382.35	382.22	0.7876	-0.034
0.9121	0.0293	0.0586	382.65	382.74	0.7772	0.024
0.9087	0.0304	0.0609	383.35	383.22	0.7672	-0.033
0.9037	0.0321	0.0642	384.05	383.96	0.7527	-0.023
0.8986	0.0338	0.0676	384.65	384.73	0.7383	0.020
0.8952	0.0349	0.0699	385.45	385.20	0.7288	-0.064
0.8931	0.0356	0.0713	385.75	385.52	0.7230	-0.061

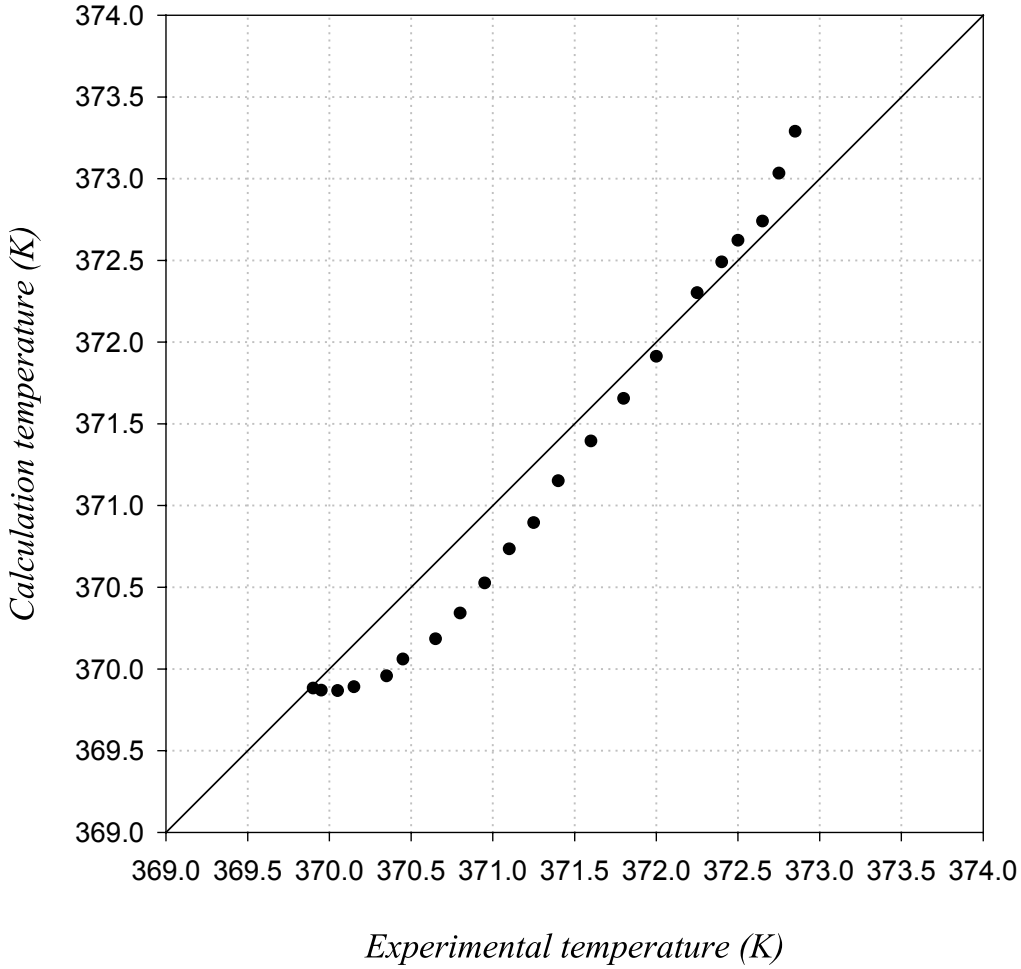


ภาพที่ 3-71 อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

ตาราง 3-72 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

$x_{1,\exp}$	$x_{2,\exp}$	$x_{3,\exp}$	$T_{\exp}(K)$	$T_{\text{cal}}(K)$	$\gamma_{1,\text{cal}}$	%Err T
0.9944	0.0019	0.0037	369.90	369.88	1.0057	-0.005
0.9901	0.0033	0.0066	369.95	369.87	1.0105	-0.022
0.9840	0.0053	0.0107	370.05	369.87	1.0168	-0.049
0.9765	0.0078	0.0157	370.15	369.89	1.0237	-0.070
0.9674	0.0109	0.0217	370.35	369.96	1.0307	-0.106
0.9585	0.0138	0.0277	370.45	370.06	1.0361	-0.105
0.9504	0.0165	0.0331	370.65	370.18	1.0400	-0.126
0.9420	0.0193	0.0387	370.80	370.34	1.0430	-0.124
0.9336	0.0221	0.0443	370.95	370.53	1.0450	-0.114
0.9253	0.0249	0.0498	371.10	370.73	1.0461	-0.099
0.9194	0.0269	0.0537	371.25	370.90	1.0464	-0.096
0.9108	0.0297	0.0595	371.40	371.15	1.0462	-0.067
0.9032	0.0323	0.0645	371.60	371.40	1.0454	-0.055
0.8956	0.0348	0.0696	371.80	371.66	1.0441	-0.039
0.8885	0.0372	0.0743	372.00	371.91	1.0424	-0.024
0.8784	0.0405	0.0811	372.25	372.30	1.0393	0.014
0.8737	0.0421	0.0842	372.40	372.49	1.0377	0.024
0.8705	0.0432	0.0863	372.50	372.62	1.0365	0.033
0.8676	0.0441	0.0883	372.65	372.74	1.0353	0.024
0.8609	0.0464	0.0927	372.75	373.03	1.0324	0.076
0.8552	0.0483	0.0965	372.85	373.29	1.0298	0.118

Temperature of 1-Propanol(1) + Calcium ion(2) + Nitrate ion(3) isobaric system at 100 kPa Structure parameters from ionic radii



ภาพที่ 3-72 อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + แคลเซียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

ตาราง 3-73 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.009	0.518	360.90	1.2582	1.6245	0.483	0.476	0.517	0.524	-1.421	1.327
0.009	0.449	360.80	1.3829	1.5126	0.464	0.449	0.536	0.551	-3.330	2.882
0.010	0.950	368.35	1.0163	2.2865	0.900	0.903	0.100	0.097	0.379	-3.409
0.010	0.376	360.70	1.6025	1.3875	0.447	0.432	0.553	0.568	-3.425	2.768
0.011	0.705	362.65	1.0944	1.8975	0.588	0.602	0.412	0.398	2.324	-3.316
0.011	0.583	361.50	1.1915	1.7040	0.519	0.517	0.481	0.483	-0.460	0.496
0.011	0.479	361.00	1.3424	1.5386	0.479	0.467	0.521	0.533	-2.511	2.309
0.011	0.399	360.80	1.5395	1.4137	0.457	0.441	0.543	0.559	-3.474	2.924
0.011	0.221	360.80	2.6920	1.1589	0.422	0.418	0.578	0.582	-0.849	0.620
0.011	0.138	360.90	4.3377	1.0634	0.410	0.416	0.590	0.584	1.529	-1.062
0.012	0.675	362.35	1.1178	1.8357	0.571	0.581	0.429	0.419	1.702	-2.265
0.012	0.307	360.75	1.9607	1.2687	0.436	0.428	0.564	0.572	-1.899	1.468
0.012	0.959	368.35	1.0183	2.2631	0.897	0.921	0.103	0.079	2.674	-23.285
0.013	0.889	366.45	1.0322	2.1445	0.796	0.810	0.204	0.190	1.721	-6.716
0.013	0.843	365.25	1.0439	2.0767	0.730	0.748	0.270	0.252	2.503	-6.766
0.014	0.591	361.85	1.2021	1.6780	0.533	0.531	0.467	0.469	-0.361	0.412
0.014	0.527	361.35	1.2859	1.5794	0.503	0.498	0.497	0.502	-1.023	1.036
0.014	0.164	360.90	3.7761	1.0763	0.420	0.429	0.580	0.571	2.162	-1.566
0.014	0.122	360.95	5.0388	1.0354	0.412	0.425	0.588	0.575	3.101	-2.173
0.015	0.940	367.95	1.0259	2.1839	0.873	0.891	0.127	0.109	2.021	-13.895
0.015	0.433	361.10	1.4884	1.4266	0.475	0.465	0.525	0.535	-2.033	1.839
0.016	0.089	361.15	6.7491	1.0013	0.410	0.418	0.590	0.582	2.055	-1.428
0.017	0.686	362.95	1.1326	1.7826	0.598	0.603	0.402	0.397	0.918	-1.366
0.017	0.938	368.05	1.0294	2.1478	0.874	0.889	0.126	0.111	1.741	-12.077
0.018	0.848	365.85	1.0545	2.0047	0.757	0.764	0.243	0.236	0.911	-2.838
0.018	0.784	364.45	1.0794	1.9124	0.683	0.693	0.317	0.307	1.402	-3.021
0.018	0.248	360.90	2.5628	1.1497	0.439	0.445	0.561	0.555	1.434	-1.122
0.018	0.053	361.75	9.7673	0.9736	0.399	0.380	0.601	0.620	-4.641	3.081
0.018	0.937	368.05	1.0312	2.1301	0.874	0.889	0.126	0.111	1.661	-11.523
0.019	0.915	367.60	1.0377	2.0837	0.849	0.856	0.151	0.144	0.787	-4.426
0.019	0.506	361.60	1.3601	1.4933	0.510	0.505	0.490	0.495	-0.982	1.022
0.019	0.404	361.20	1.6199	1.3480	0.478	0.471	0.522	0.529	-1.481	1.356
0.019	0.322	361.05	1.9907	1.2366	0.460	0.455	0.540	0.545	-1.071	0.913
0.020	0.558	361.95	1.2813	1.5576	0.531	0.532	0.469	0.468	0.172	-0.195
0.020	0.146	361.00	4.4729	1.0293	0.428	0.448	0.572	0.552	4.662	-3.489
0.020	0.537	361.90	1.3132	1.5275	0.528	0.522	0.472	0.478	-1.180	1.320
0.021	0.224	361.00	2.9165	1.1034	0.443	0.455	0.557	0.545	2.605	-2.072
0.021	0.929	368.00	1.0377	2.0718	0.866	0.879	0.134	0.121	1.483	-9.583
0.023	0.880	367.35	1.0546	1.9758	0.828	0.812	0.172	0.188	-1.897	9.133
0.023	0.801	365.30	1.0853	1.8661	0.723	0.721	0.277	0.279	-0.341	0.889
0.023	0.715	363.75	1.1350	1.7457	0.639	0.642	0.361	0.358	0.427	-0.756
0.023	0.639	362.90	1.1991	1.6389	0.586	0.587	0.414	0.413	0.129	-0.183
0.023	0.362	361.30	1.8332	1.2582	0.477	0.475	0.523	0.525	-0.495	0.452
0.023	0.110	361.10	5.9366	0.9857	0.427	0.448	0.573	0.552	5.030	-3.749
0.023	0.913	367.70	1.0450	2.0199	0.848	0.857	0.152	0.143	1.092	-6.091
0.024	0.535	362.15	1.3422	1.4827	0.536	0.533	0.464	0.467	-0.609	0.704
0.024	0.463	361.70	1.4929	1.3841	0.509	0.504	0.491	0.496	-0.933	0.967
0.024	0.289	361.20	2.2947	1.1598	0.464	0.468	0.536	0.532	0.802	-0.694
0.024	0.909	367.75	1.0477	2.0000	0.849	0.853	0.151	0.147	0.437	-2.455
0.024	0.595	362.55	1.2536	1.5659	0.566	0.563	0.434	0.437	-0.521	0.679
0.026	0.906	367.80	1.0519	1.9674	0.849	0.851	0.151	0.149	0.210	-1.180
0.027	0.169	361.10	4.0524	1.0145	0.444	0.470	0.556	0.530	5.899	-4.711
0.027	0.082	361.30	7.6678	0.9497	0.427	0.441	0.573	0.559	3.223	-2.402
0.028	0.857	367.05	1.0724	1.8755	0.811	0.791	0.189	0.209	-2.457	10.544
0.028	0.314	361.35	2.1652	1.1621	0.475	0.482	0.525	0.518	1.563	-1.414

ตาราง 3-73 (ต่อ 1/3)

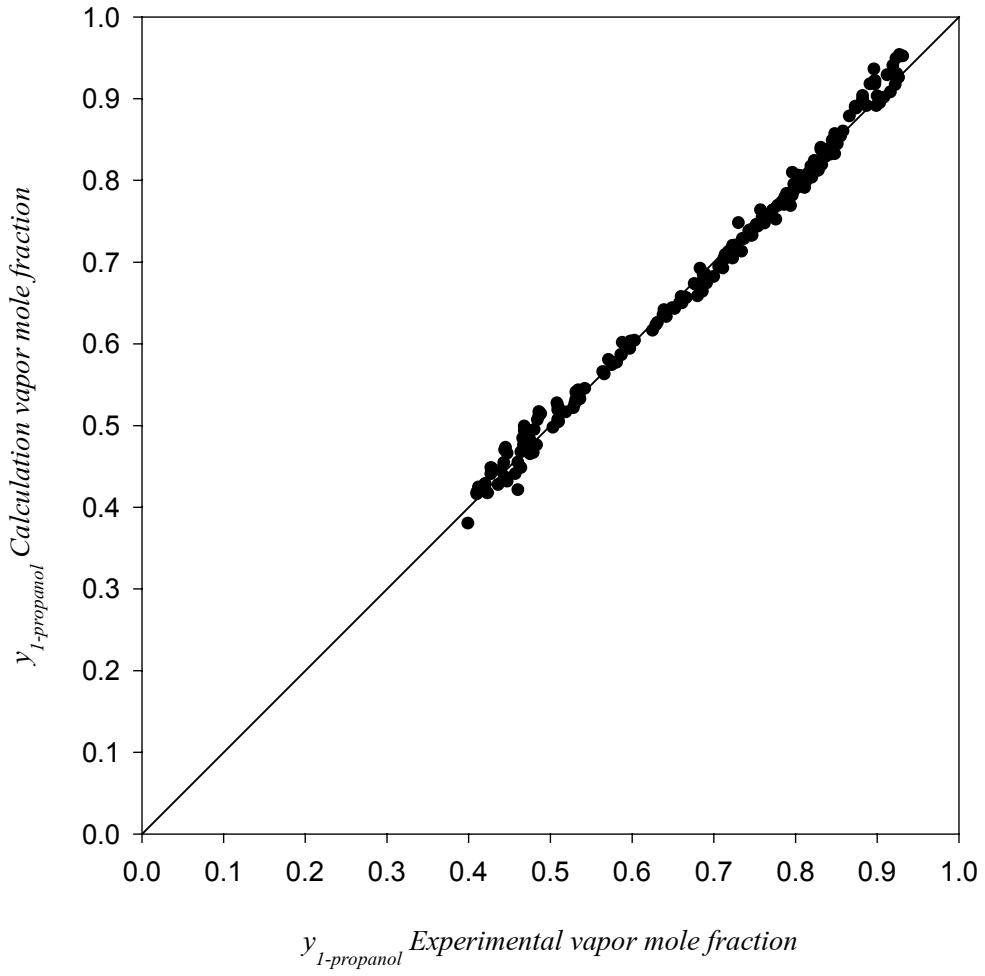
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.028	0.631	363.15	1.2292	1.5714	0.597	0.595	0.403	0.405	-0.387	0.573
0.029	0.798	365.75	1.1015	1.7838	0.735	0.729	0.265	0.271	-0.825	2.289
0.029	0.488	362.15	1.4678	1.3718	0.530	0.528	0.470	0.472	-0.470	0.531
0.029	0.426	361.80	1.6397	1.2921	0.509	0.507	0.491	0.493	-0.303	0.314
0.029	0.955	369.20	1.0428	1.9898	0.924	0.925	0.076	0.075	0.110	-1.339
0.030	0.592	362.90	1.2863	1.4984	0.581	0.577	0.419	0.423	-0.640	0.888
0.030	0.060	361.70	9.5115	0.9260	0.423	0.418	0.577	0.582	-1.274	0.934
0.031	0.236	361.30	2.9419	1.0571	0.466	0.484	0.534	0.516	3.948	-3.445
0.032	0.832	366.85	1.0910	1.7918	0.794	0.769	0.206	0.231	-3.137	12.092
0.032	0.120	361.25	5.7308	0.9502	0.445	0.473	0.555	0.527	6.365	-5.103
0.032	0.679	364.00	1.1948	1.5916	0.638	0.636	0.362	0.364	-0.367	0.647
0.033	0.727	364.75	1.1572	1.6430	0.676	0.674	0.324	0.326	-0.357	0.745
0.033	0.878	367.50	1.0730	1.8376	0.828	0.823	0.172	0.177	-0.614	2.954
0.033	0.879	367.45	1.0726	1.8387	0.823	0.824	0.177	0.176	0.137	-0.638
0.033	0.899	367.90	1.0652	1.8642	0.845	0.849	0.155	0.151	0.489	-2.665
0.034	0.276	361.50	2.5413	1.0808	0.480	0.495	0.520	0.505	3.116	-2.877
0.035	0.759	365.40	1.1393	1.6618	0.712	0.704	0.288	0.296	-1.123	2.776
0.035	0.394	361.95	1.8050	1.2065	0.512	0.516	0.488	0.484	0.705	-0.740
0.035	0.701	364.45	1.1842	1.5877	0.660	0.658	0.340	0.342	-0.323	0.626
0.036	0.557	363.00	1.3672	1.3963	0.575	0.574	0.425	0.426	-0.092	0.125
0.036	0.461	362.35	1.5807	1.2787	0.535	0.537	0.465	0.463	0.298	-0.343
0.036	0.187	361.40	3.8133	0.9831	0.468	0.494	0.532	0.506	5.499	-4.838
0.036	0.092	361.40	7.2013	0.9138	0.447	0.466	0.553	0.534	4.258	-3.442
0.036	0.947	369.30	1.0537	1.8870	0.922	0.917	0.078	0.083	-0.527	6.234
0.037	0.808	366.65	1.1133	1.7021	0.776	0.752	0.224	0.248	-3.037	10.523
0.038	0.730	365.10	1.1680	1.5927	0.689	0.686	0.311	0.314	-0.460	1.019
0.039	0.879	367.85	1.0820	1.7664	0.837	0.831	0.163	0.169	-0.694	3.562
0.040	0.666	364.35	1.2327	1.4935	0.649	0.644	0.351	0.356	-0.760	1.405
0.040	0.350	362.00	2.0564	1.1220	0.509	0.519	0.491	0.481	2.012	-2.086
0.040	0.247	361.65	2.9142	1.0162	0.484	0.507	0.516	0.493	4.768	-4.473
0.040	0.063	361.60	9.3176	0.8816	0.444	0.437	0.556	0.563	-1.515	1.209
0.042	0.716	365.15	1.1895	1.5349	0.691	0.683	0.309	0.317	-1.205	2.694
0.042	0.143	361.50	5.0173	0.9179	0.468	0.499	0.532	0.501	6.685	-5.881
0.042	0.840	367.20	1.1050	1.6850	0.803	0.792	0.197	0.208	-1.383	5.637
0.042	0.760	365.80	1.1543	1.5881	0.723	0.717	0.277	0.283	-0.786	2.053
0.043	0.793	366.45	1.1338	1.6178	0.762	0.748	0.238	0.252	-1.878	6.012
0.043	0.525	363.20	1.4581	1.2985	0.577	0.577	0.423	0.423	-0.079	0.108
0.043	0.435	362.60	1.7007	1.1955	0.542	0.545	0.458	0.455	0.640	-0.757
0.044	0.937	369.35	1.0661	1.7790	0.916	0.908	0.084	0.092	-0.856	9.340
0.045	0.307	362.00	2.3764	1.0460	0.509	0.524	0.491	0.476	2.976	-3.085
0.045	0.211	361.75	3.4668	0.9566	0.488	0.515	0.512	0.485	5.447	-5.192
0.045	0.842	367.45	1.1087	1.6555	0.812	0.798	0.188	0.202	-1.746	7.540
0.045	0.797	366.60	1.1349	1.6020	0.760	0.754	0.240	0.246	-0.744	2.355
0.046	0.610	364.15	1.3202	1.3727	0.629	0.623	0.371	0.377	-0.938	1.591
0.046	0.861	367.90	1.1004	1.6676	0.830	0.819	0.170	0.181	-1.331	6.500
0.047	0.473	363.05	1.6018	1.2092	0.564	0.566	0.436	0.434	0.348	-0.450
0.048	0.767	366.35	1.1609	1.5375	0.746	0.733	0.254	0.267	-1.764	5.182
0.048	0.371	362.50	1.9938	1.0930	0.531	0.541	0.469	0.459	1.885	-2.134
0.048	0.085	361.60	7.6554	0.8548	0.467	0.476	0.533	0.524	2.005	-1.757
0.048	0.859	367.80	1.1042	1.6439	0.832	0.819	0.168	0.181	-1.552	7.688
0.049	0.267	362.10	2.7599	0.9852	0.508	0.528	0.492	0.472	3.862	-3.987
0.049	0.172	361.75	4.2635	0.9052	0.486	0.517	0.514	0.483	6.370	-6.023
0.049	0.851	367.85	1.1097	1.6250	0.826	0.812	0.174	0.188	-1.710	8.117
0.050	0.779	366.55	1.1557	1.5320	0.752	0.746	0.248	0.254	-0.811	2.458
0.051	0.051	361.85	10.2527	0.8278	0.460	0.421	0.540	0.579	-8.397	7.153
0.051	0.880	368.35	1.0976	1.6376	0.851	0.845	0.149	0.155	-0.728	4.158
0.052	0.341	362.65	2.1811	1.0390	0.534	0.543	0.466	0.457	1.771	-2.029
0.052	0.842	367.80	1.1186	1.5850	0.820	0.806	0.180	0.194	-1.677	7.638
0.053	0.732	366.25	1.1984	1.4523	0.734	0.713	0.266	0.287	-2.835	7.822
0.053	0.542	364.00	1.4576	1.2416	0.603	0.604	0.397	0.396	0.198	-0.300
0.053	0.131	361.85	5.4614	0.8583	0.486	0.512	0.514	0.488	5.362	-5.070
0.053	0.806	367.10	1.1419	1.5344	0.784	0.774	0.216	0.226	-1.328	4.822

ตาราง 3-73 (ต่อ 2/3)

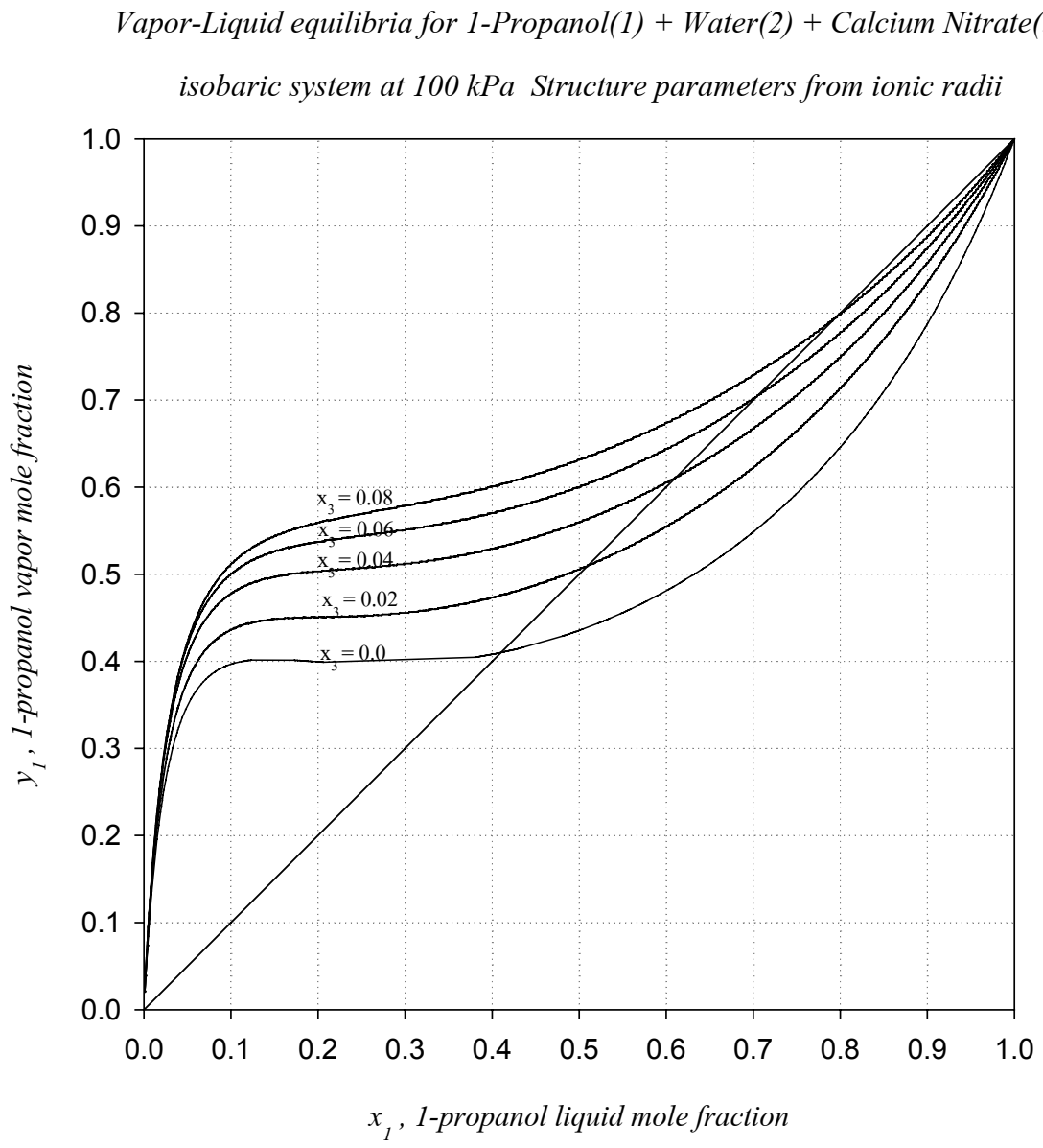
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.054	0.927	369.40	1.0801	1.6605	0.908	0.902	0.092	0.098	-0.703	6.936
0.054	0.763	366.50	1.1743	1.4772	0.743	0.739	0.257	0.261	-0.597	1.727
0.055	0.836	367.90	1.1260	1.5501	0.820	0.804	0.180	0.196	-1.972	8.982
0.056	0.625	364.90	1.3246	1.3089	0.658	0.650	0.342	0.350	-1.230	2.367
0.056	0.811	367.40	1.1428	1.5128	0.796	0.782	0.204	0.218	-1.777	6.934
0.059	0.676	365.55	1.2658	1.3403	0.687	0.685	0.313	0.315	-0.337	0.741
0.059	0.837	367.90	1.1302	1.5141	0.816	0.809	0.184	0.191	-0.830	3.679
0.059	0.861	368.40	1.1165	1.5404	0.848	0.833	0.152	0.167	-1.820	10.153
0.059	0.741	366.50	1.2004	1.4105	0.737	0.729	0.263	0.271	-1.109	3.107
0.060	0.705	366.25	1.2361	1.3645	0.723	0.705	0.277	0.295	-2.503	6.534
0.060	0.482	363.95	1.6205	1.1313	0.597	0.594	0.403	0.406	-0.467	0.692
0.062	0.823	367.95	1.1424	1.4735	0.813	0.800	0.187	0.200	-1.650	7.172
0.062	0.724	366.40	1.2205	1.3681	0.727	0.721	0.273	0.279	-0.842	2.242
0.063	0.568	364.80	1.4319	1.1989	0.642	0.633	0.358	0.367	-1.336	2.397
0.064	0.916	369.55	1.0936	1.5541	0.903	0.895	0.097	0.105	-0.895	8.334
0.065	0.429	363.85	1.8032	1.0492	0.587	0.586	0.413	0.414	-0.089	0.127
0.065	0.710	366.40	1.2387	1.3305	0.721	0.716	0.279	0.284	-0.758	1.958
0.066	0.672	366.20	1.2820	1.2850	0.711	0.693	0.289	0.307	-2.561	6.301
0.066	0.637	365.50	1.3270	1.2480	0.678	0.673	0.322	0.327	-0.775	1.631
0.066	0.767	367.15	1.1879	1.3816	0.766	0.758	0.234	0.242	-1.078	3.528
0.067	0.780	367.40	1.1786	1.3872	0.778	0.769	0.222	0.231	-1.146	4.018
0.067	0.823	368.00	1.1477	1.4313	0.811	0.805	0.189	0.195	-0.747	3.207
0.068	0.694	366.40	1.2597	1.2923	0.714	0.709	0.286	0.291	-0.659	1.646
0.070	0.850	368.55	1.1334	1.4349	0.843	0.832	0.157	0.168	-1.283	6.888
0.071	0.591	365.50	1.4051	1.1698	0.666	0.657	0.334	0.343	-1.406	2.804
0.071	0.520	364.80	1.5468	1.1010	0.631	0.626	0.369	0.374	-0.774	1.323
0.071	0.909	369.60	1.1021	1.4866	0.899	0.892	0.101	0.108	-0.831	7.394
0.073	0.636	366.25	1.3384	1.2016	0.700	0.682	0.300	0.318	-2.533	5.911
0.074	0.730	367.10	1.2297	1.2856	0.748	0.741	0.252	0.259	-0.963	2.859
0.076	0.814	368.05	1.1618	1.3523	0.803	0.806	0.197	0.194	0.408	-1.663
0.077	0.468	364.80	1.6934	1.0196	0.625	0.617	0.375	0.383	-1.356	2.259
0.077	0.938	370.15	1.0920	1.4661	0.926	0.926	0.074	0.074	0.003	-0.039
0.078	0.554	365.55	1.4826	1.0926	0.661	0.650	0.339	0.350	-1.661	3.239
0.078	0.825	368.35	1.1557	1.3487	0.819	0.817	0.181	0.183	-0.205	0.928
0.078	0.839	368.70	1.1465	1.3629	0.837	0.829	0.163	0.171	-0.921	4.728
0.080	0.753	367.60	1.2138	1.2665	0.772	0.764	0.228	0.236	-1.078	3.650
0.080	0.851	368.90	1.1401	1.3596	0.845	0.842	0.155	0.158	-0.413	2.254
0.081	0.599	366.35	1.4038	1.1178	0.691	0.674	0.309	0.326	-2.419	5.409
0.081	0.672	366.80	1.2997	1.1842	0.718	0.713	0.282	0.287	-0.706	1.798
0.081	0.725	367.35	1.2411	1.2336	0.752	0.746	0.248	0.254	-0.840	2.547
0.081	0.743	367.70	1.2238	1.2512	0.767	0.758	0.233	0.242	-1.205	3.967
0.084	0.517	365.60	1.5691	1.0267	0.652	0.643	0.348	0.357	-1.347	2.523
0.084	0.862	369.20	1.1357	1.3415	0.855	0.854	0.145	0.146	-0.077	0.456
0.086	0.760	368.10	1.2119	1.2346	0.785	0.775	0.215	0.225	-1.295	4.728
0.087	0.560	366.45	1.4788	1.0502	0.686	0.664	0.314	0.336	-3.175	6.938
0.089	0.938	370.50	1.0973	1.3765	0.924	0.931	0.076	0.069	0.713	-8.669
0.091	0.839	369.20	1.1538	1.2737	0.842	0.840	0.158	0.160	-0.281	1.497
0.092	0.721	367.90	1.2523	1.1629	0.759	0.755	0.241	0.245	-0.543	1.712
0.092	0.795	368.55	1.1859	1.2275	0.806	0.806	0.194	0.194	-0.018	0.073
0.092	0.779	368.60	1.1989	1.2144	0.802	0.794	0.198	0.206	-0.991	4.012
0.093	0.627	367.10	1.3685	1.0757	0.712	0.703	0.288	0.297	-1.313	3.246
0.094	0.775	368.60	1.2031	1.1987	0.800	0.793	0.200	0.207	-0.877	3.508
0.095	0.523	366.55	1.5604	0.9785	0.680	0.659	0.320	0.341	-3.127	6.645
0.097	0.687	367.75	1.2915	1.1053	0.744	0.739	0.256	0.261	-0.618	1.795
0.099	0.936	370.70	1.1010	1.3070	0.921	0.932	0.079	0.068	1.191	-13.886
0.099	0.796	369.10	1.1879	1.1877	0.820	0.812	0.180	0.188	-0.938	4.273
0.100	0.764	368.75	1.2147	1.1546	0.800	0.791	0.200	0.209	-1.181	4.723
0.101	0.688	368.10	1.2917	1.0856	0.754	0.744	0.246	0.256	-1.342	4.114
0.103	0.891	370.40	1.1256	1.2448	0.887	0.891	0.113	0.109	0.506	-3.969
0.104	0.584	367.40	1.4399	0.9858	0.706	0.694	0.294	0.306	-1.711	4.110
0.106	0.823	369.60	1.1693	1.1703	0.837	0.838	0.163	0.162	0.068	-0.350
0.109	0.824	369.60	1.1688	1.1540	0.831	0.840	0.169	0.160	1.124	-5.527

ตาราง 3-73 (ต่อ 3/3)

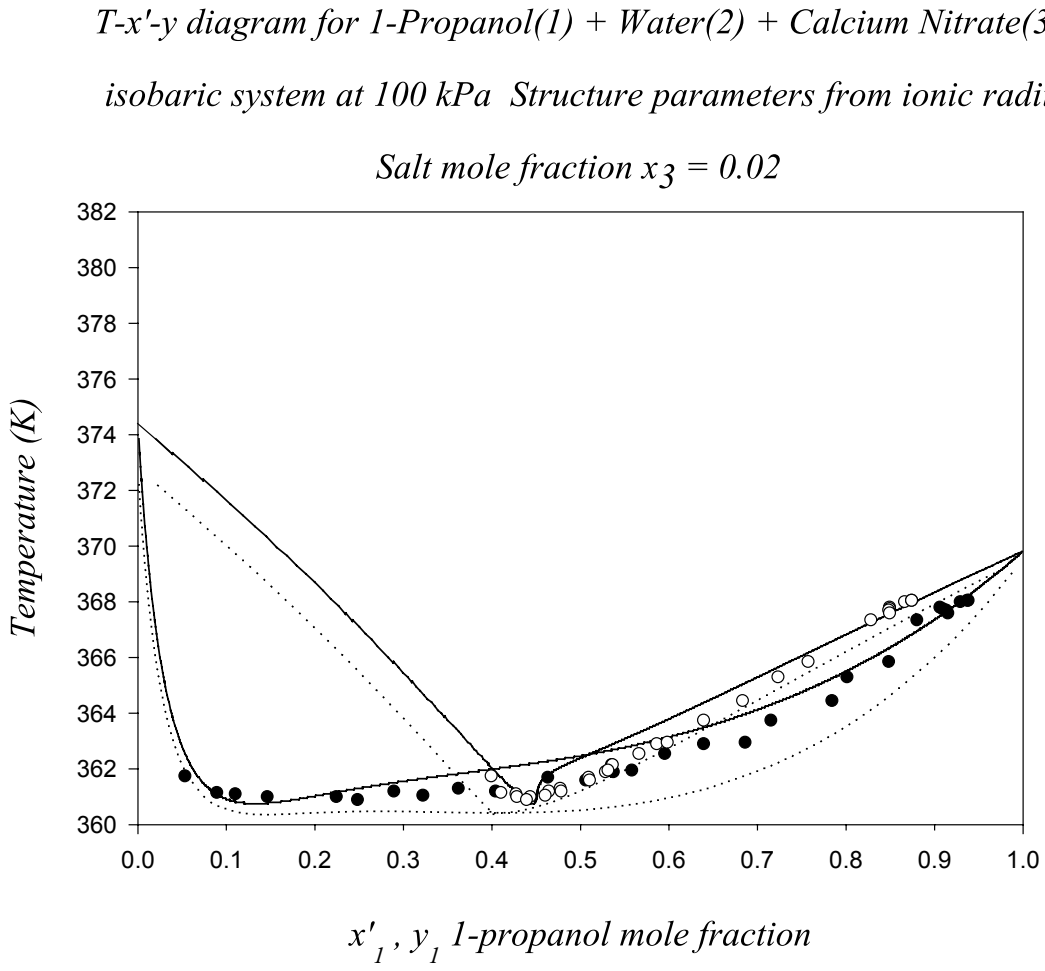
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.110	0.759	369.15	1.2209	1.0971	0.798	0.795	0.202	0.205	-0.329	1.301
0.111	0.929	370.70	1.1058	1.2268	0.912	0.929	0.088	0.071	1.881	-19.492
0.112	0.649	368.50	1.3411	1.0014	0.747	0.733	0.253	0.267	-1.893	5.591
0.113	0.953	371.20	1.0945	1.2353	0.931	0.952	0.069	0.048	2.295	-30.969
0.113	0.895	370.40	1.1240	1.1884	0.882	0.900	0.118	0.100	1.995	-14.914
0.115	0.739	369.25	1.2395	1.0569	0.796	0.786	0.204	0.214	-1.195	4.663
0.115	0.940	370.95	1.1005	1.2128	0.919	0.941	0.081	0.059	2.343	-26.579
0.116	0.845	370.30	1.1551	1.1346	0.858	0.860	0.142	0.140	0.289	-1.744
0.119	0.812	369.90	1.1778	1.0929	0.831	0.838	0.169	0.162	0.831	-4.084
0.121	0.953	371.40	1.0944	1.1906	0.927	0.954	0.073	0.046	2.915	-37.020
0.121	0.896	370.80	1.1236	1.1471	0.882	0.904	0.118	0.096	2.462	-18.401
0.122	0.726	369.50	1.2514	1.0146	0.789	0.784	0.211	0.216	-0.651	2.433
0.124	0.882	370.70	1.1313	1.1209	0.880	0.893	0.120	0.107	1.533	-11.241
0.125	0.729	369.75	1.2480	1.0039	0.798	0.788	0.202	0.212	-1.278	5.047
0.128	0.711	369.30	1.2644	0.9755	0.787	0.780	0.213	0.220	-0.940	3.472
0.128	0.915	371.10	1.1124	1.1252	0.897	0.922	0.103	0.078	2.802	-24.399
0.129	0.873	370.95	1.1363	1.0907	0.874	0.888	0.126	0.112	1.657	-11.491
0.130	0.946	371.70	1.0971	1.1393	0.923	0.949	0.077	0.051	2.868	-34.376
0.130	0.791	370.35	1.1925	1.0266	0.834	0.830	0.166	0.170	-0.468	2.353
0.132	0.690	370.10	1.2866	0.9476	0.786	0.770	0.214	0.230	-1.973	7.247
0.135	0.793	370.70	1.1899	1.0069	0.833	0.834	0.167	0.166	0.153	-0.761
0.136	0.907	371.55	1.1158	1.0825	0.897	0.918	0.103	0.082	2.340	-20.381
0.141	0.867	371.50	1.1375	1.0328	0.873	0.889	0.127	0.111	1.813	-12.460
0.142	0.905	371.60	1.1151	1.0533	0.891	0.918	0.109	0.082	3.058	-24.998
0.144	0.927	371.80	1.1031	1.0592	0.896	0.936	0.104	0.064	4.513	-38.882



ภาพที่ 3-73 ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ 1-โพรพานอล(1) ที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดันคงที่ 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน



ภาพที่ 3-74 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa ที่ความเข้มข้นของเกลือมีเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.0 0.02 0.04 0.06 และ 0.08 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน เมื่อ —— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC



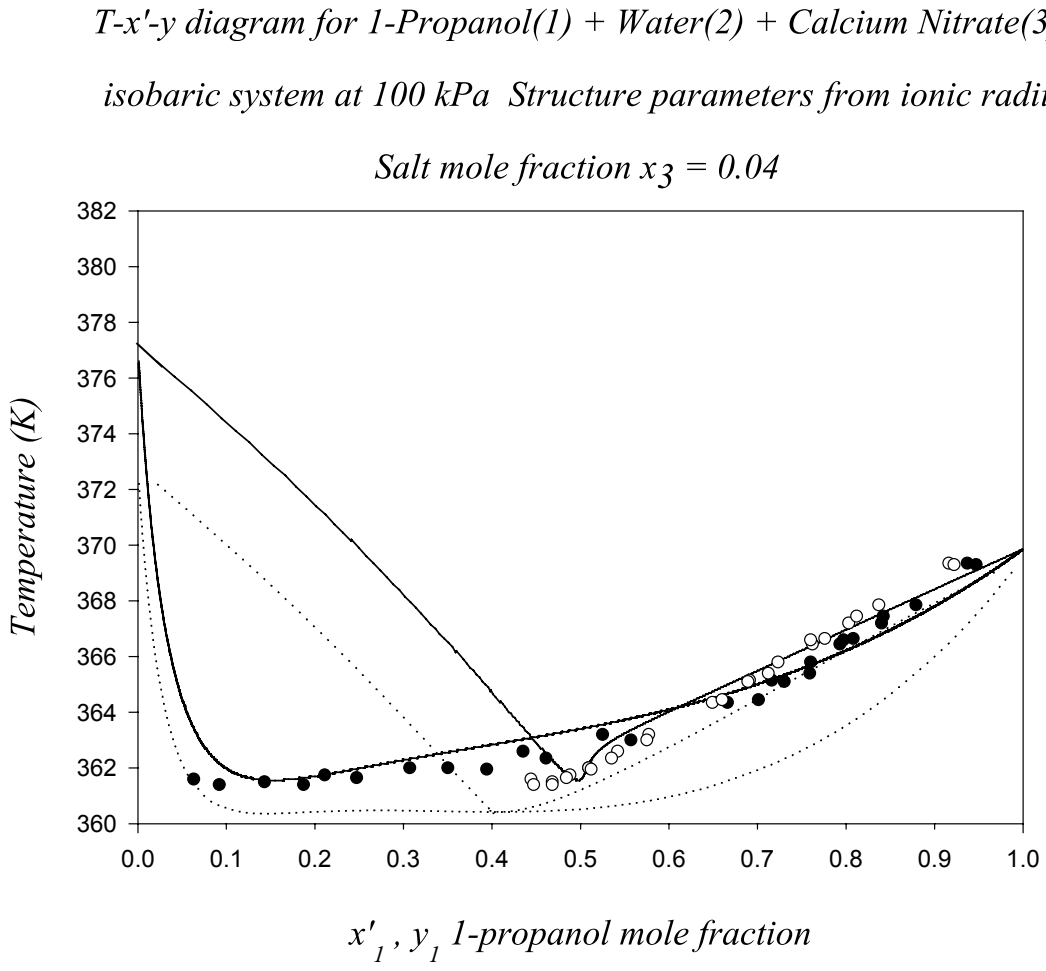
ภาพที่ 3-75 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.02 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



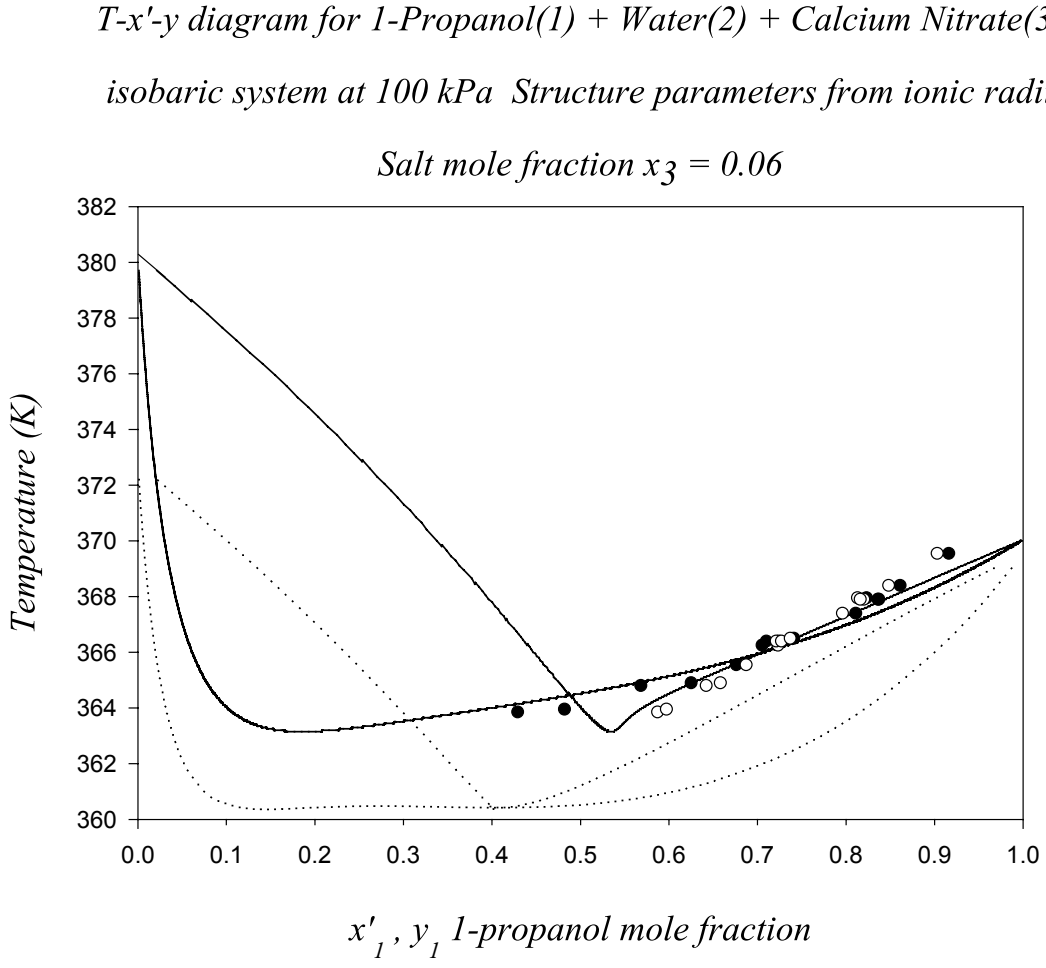
ภาพที่ 3-76 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.04 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



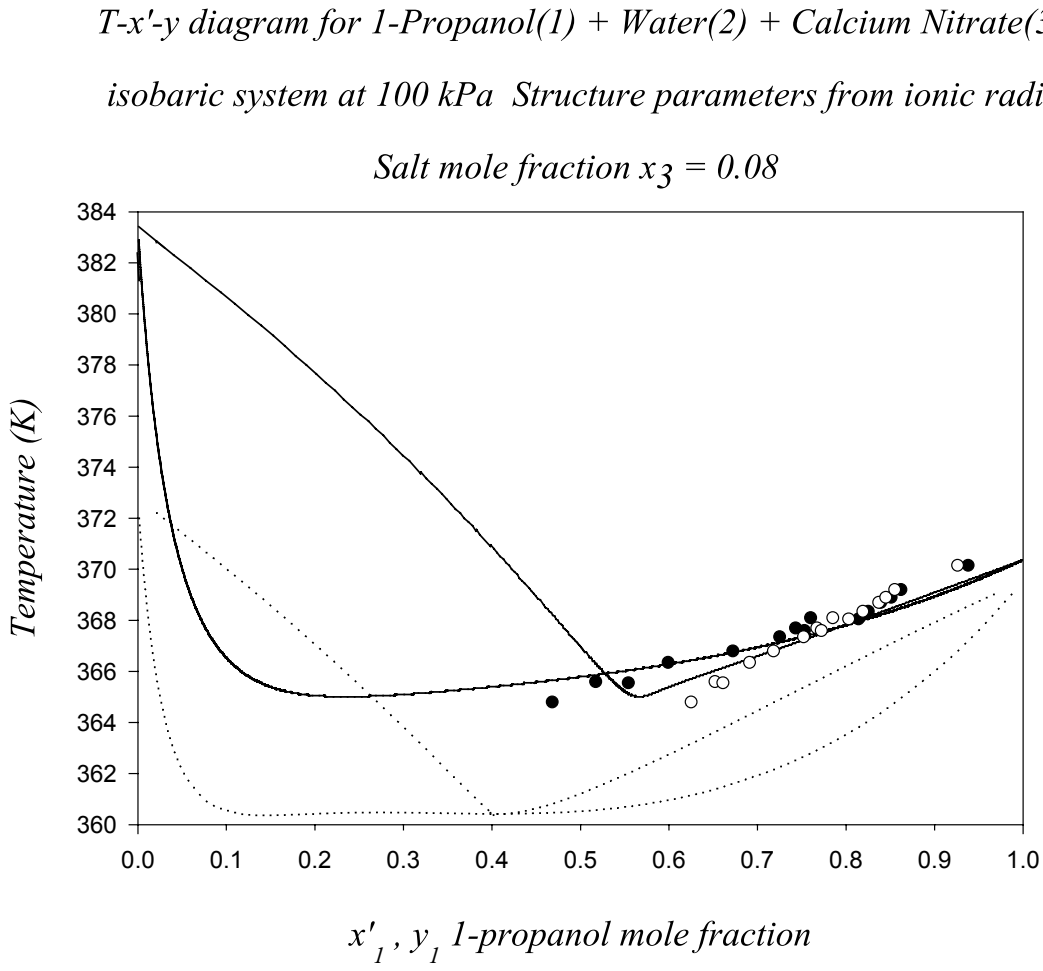
ภาพที่ 3-77 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.06 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

····· คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



ภาพที่ 3-78 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.08 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

····· คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ

14. ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน ใช้ข้อมูลผลการทดลองจากวารสารตีพิมพ์เรื่อง

Isobaric Vapor-Liquid Equilibrium for 1-Propanol + Water + Lithium Nitrate at 100 kPa (Vercher, Vazquez and Martinez-Andreu, 2002)

ข้อมูลสมดุลระหว่างวัฏภาคจากผลการทดลอง

ในการศึกษาใช้ข้อมูลจากผลการทดลองสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ ได้แก่ ระบบน้ำ(1) + ลิเทียมไนเตรท(2) ที่ความดันคงที่ 100 kPa และระบบ 1-โพรพานอล(1) + ลิเทียมไนเตรท(2) ที่ความดันคงที่ 100 kPa และระบบตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ได้แก่ระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดันคงที่ 100 kPa ซึ่งค่าพารามิเตอร์โครงสร้าง (r_i, q_i) ขององค์ประกอบและค่าคงที่ของสมการ Antoine แสดงในตาราง 3-74 ข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ และความดันของระบบ $(P_{\text{Total,exp}})$ ดังแสดงในตาราง 3-78 และตาราง 3-79 สำหรับข้อมูลที่ได้จากผลการทดลองของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ ประกอบด้วยค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว $(x_{i,\exp})$ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ $(y_{i,\exp})$ อุณหภูมิ $(T_{\exp})$ และความดัน $(P_{\text{Total,exp}})$ ของระบบ ดังแสดงในตาราง 3-80

ผลการหาค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

ด้วยการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อกำหนดค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC โดยพิจารณาให้ไอออนอิสระที่เกิดจากการแตกตัวของเกลือเป็นองค์ประกอบที่ต่างชนิดกัน ดังนั้นสำหรับระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ จะพิจารณาให้เป็นระบบสามองค์ประกอบได้แก่ระบบ น้ำ(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa และระบบ 1-โพรพานอล(1)+ ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับไอออน และพารามิเตอร์ระหว่างไอออนกับไอออน แสดงในตาราง 3-75 และตาราง 3-76 สำหรับระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ จะพิจารณาให้เป็นระบบสี่องค์ประกอบซึ่งประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไอออน(3) +

ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa ซึ่งเป็นพารามิเตอร์ระหว่างตัวทำละลายกับตัวทำละลาย ตัวทำละลายกับไอออน และระหว่างไอออนกับไอออน แสดงในตาราง 3-77

ผลการคำนวณอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว + เกลือ

เนื่องจากเกลือไม่สามารถระเหยได้ในสภาวะปกติและระบบประกอบด้วยตัวทำละลายชนิดเดียว ดังนั้นค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลายจะมีค่าเท่ากับ 1.00 เสมอ และความดันของระบบมีค่าคงที่ จึงกำหนดให้ใช้อุณหภูมิของระบบเป็นตัวแปรตามในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นและใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ร่วมกับค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้น เพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) ของตัวทำละลาย อุณหภูมิของระบบ (T_{cal}) ได้จากความสัมพันธ์ระหว่างค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีกับค่าความดันไออิ่มตัวของตัวทำละลาย ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-78 และตาราง 3-79 สำหรับอุณหภูมิจากข้อมูลผลการทดลองและอุณหภูมิจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC แสดงในภาพที่ 3-79 และภาพที่ 3-80 จากภาพจะเห็นว่าอุณหภูมิของระบบที่ได้จากผลการคำนวณและจากผลการทดลองมีค่าใกล้เคียงกันและเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าต่ำ

ผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วยตัวทำละลายผสมทวิภาค + เกลือ

ด้วยการใช้แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC และค่าพารามิเตอร์ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นจากระบบเดียวกัน เพื่อคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) ของตัวทำละลาย และค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลาย ($y_{i,\mathrm{cal}}$) ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดันคงที่ 100 kPa ในการพิจารณาสมดุลระหว่างวัฏภาคจะพิจารณาเฉพาะองค์ประกอบที่อยู่ในทุกวัฏภาคที่ปรากฏในระบบทั้งวัฏภาคของเหลวและวัฏภาคไอ โดยปริมาณขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายในวัฏภาคของเหลวแสดงในพจน์ของค่าเศษส่วนโมลโดยไม่รวมจำนวนโมลของไอออน (x'_i, x'_j) ใช้แสดงค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลาย i และ j ตามลำดับ ผลการคำนวณแสดงในตาราง 3-80 ประกอบด้วย ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของตัวทำละลาย ($x'_{i,\mathrm{exp}}$) และตัวถูกละลาย (x_{salt}) ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของตัวทำละลาย ($y_{i,\mathrm{cal}}$) ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของตัวทำละลาย ($\gamma_{i,\mathrm{cal}}$) อุณหภูมิ (T_{exp}) ของระบบสำหรับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจากการคำนวณด้วย

แบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC แสดงในภาพที่ 3-81 ของ 1-โพรพานอล(1) จากภาพจะเห็นว่าค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและผลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC มีค่าใกล้เคียงกัน และเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดมีค่าต่ำ

ตาราง 3-74 ค่าคงที่ของสมการ Antoine และพารามิเตอร์โครงสร้างของ1-โพรพานอล น้ำ ลิเทียมไอออนและไนเตรทไอออน จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

		ค่าคงที่ Antoine[1]			พารามิเตอร์โครงสร้าง	
องค์ประกอบ	ช่วงอุณหภูมิ(K)	*A*	*B*	*C*	*r*	*q*
1-Propanol	320-375	15.8040	3300.22	-75.19	2.7799	2.5120
Water	320-375	16.3144	3845.02	-44.42	0.9200	1.4000
Lithium ion	-	-	-	-	0.1980	0.3400
Nitrate ion	-	-	-	-	1.0451	1.4660

ที่มา : [1](Vercher, Rojo and Martinez-Andreu, 1999)

ตาราง 3-75 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

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

ตาราง 3-76 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

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

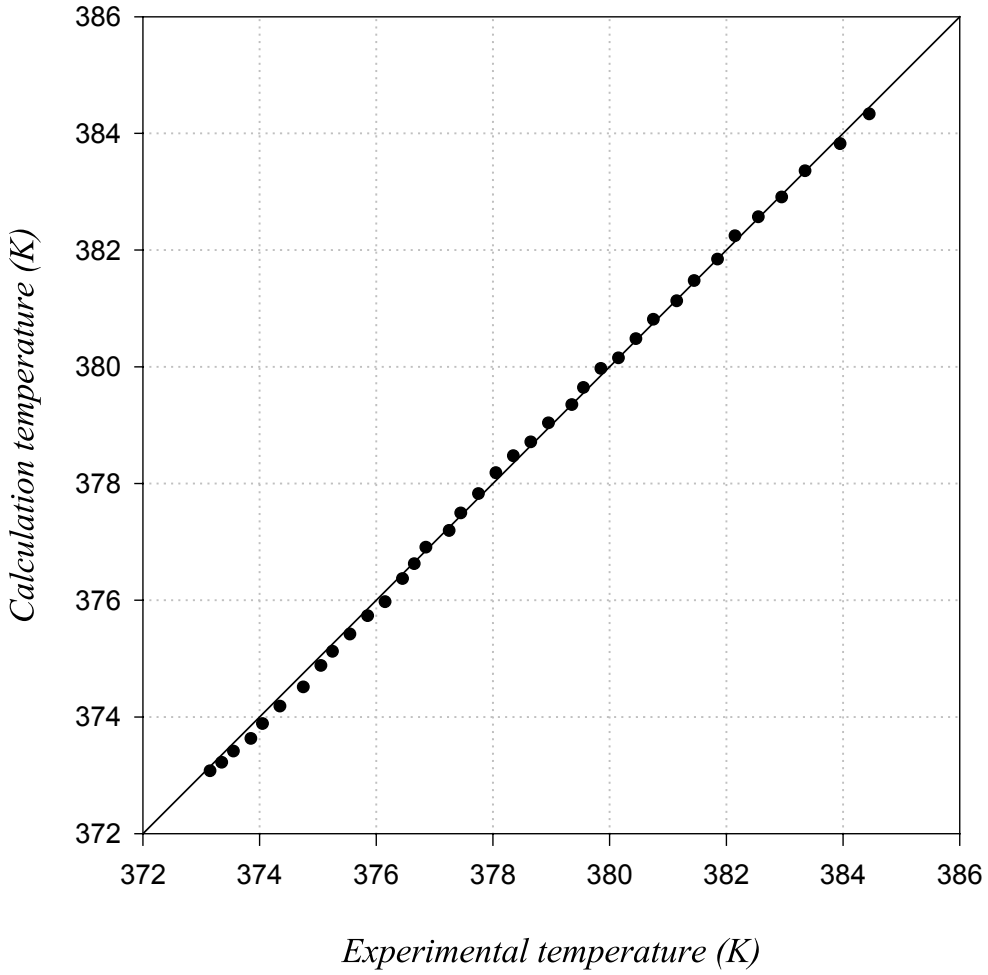
ตาราง 3-77 ค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) A_{ij} (cal/mol) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

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

เมื่อใช้ค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ที่ได้จากการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นข้อมูลผลการทดลอง ร่วมกับการเปลี่ยนแปลงค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวขององค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายให้มีค่าตั้งแต่ 0.00 ถึง 1.00 และกำหนดให้ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลวของเกลือมีค่าคงที่ได้แก่ ที่ 0.02 0.04 0.06 0.08 0.10 และ 0.12 เพื่อคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบ แสดงในภาพที่ 3-82 แสดงสมดุลระหว่างวัฏภาคของ 1-โพรพานอล(1) จากภาพจะเห็นว่าเมื่อปริมาณของเกลือเปลี่ยนแปลงจะทำให้ตำแหน่งค่าเศษส่วนโมลที่เกิดอะซีโอโทรปเปลี่ยนแปลงไปโดยเมื่อปริมาณเกลือเพิ่มขึ้นจะทำให้อะซีโอโทรปของ 1-โพรพานอล(1) เปลี่ยนแปลงไปในทิศทางที่ค่าเศษส่วนโมลเพิ่มขึ้น สำหรับสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดันคงที่ 100 kPa แสดงในภาพที่ 3-83 ถึงภาพที่ 3-88 โดยเปรียบเทียบกับข้อมูลที่ได้จากการทดลองที่มีค่าเศษส่วนโมลของเกลืออยู่ในช่วง 0.02 ถึง 0.12 และเปรียบเทียบกับผลการคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคของระบบที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์ที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันของระบบมีค่าคงที่ 100 kPa จากภาพจะเห็นว่าสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบที่ได้จากผลการคำนวณมีลักษณะเหมือนกับผลการทดลอง

ตาราง 3-78 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตี ของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

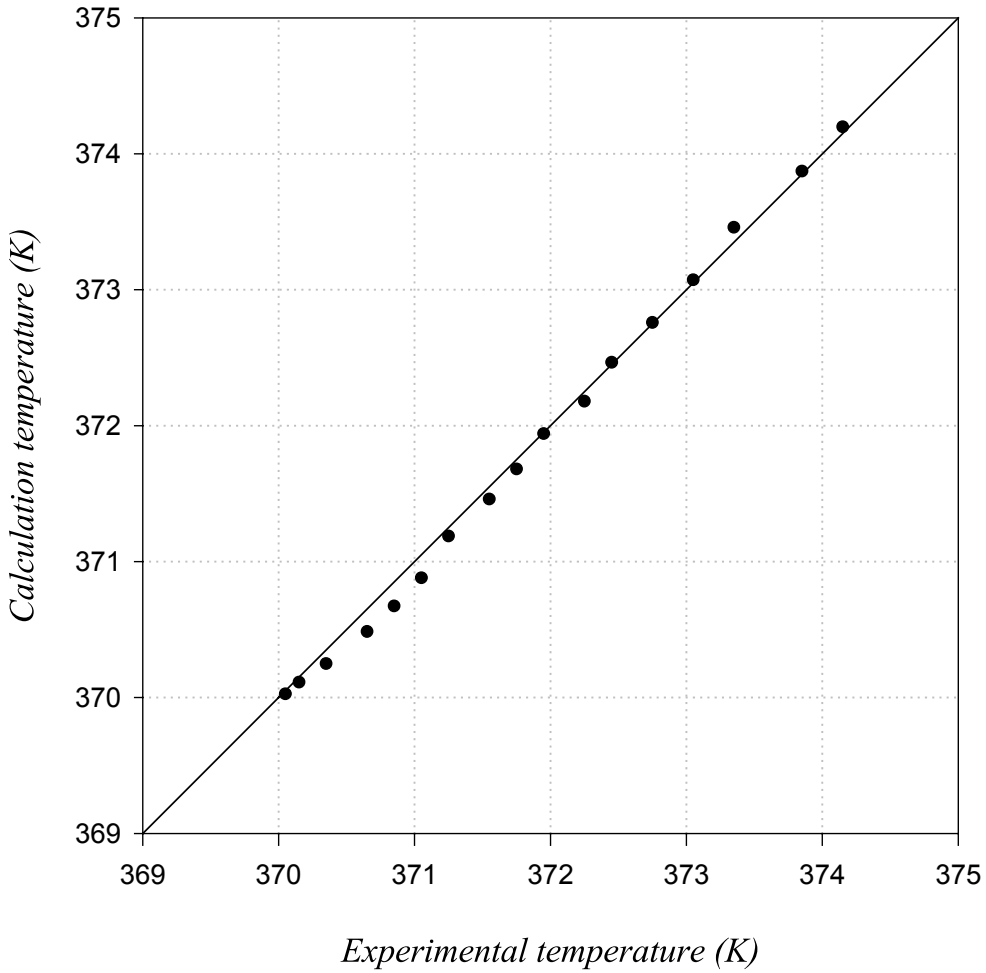
$x_{1,\mathrm{exp}}$	$x_{2,\mathrm{exp}}$	$x_{3,\mathrm{exp}}$	$T_{\mathrm{exp}}(K)$	$T_{\mathrm{cal}}(K)$	$\gamma_{1,\mathrm{cal}}$	%Err T
0.9918	0.0041	0.0041	373.15	373.08	0.9983	-0.020
0.9886	0.0057	0.0057	373.35	373.22	0.9964	-0.035
0.9848	0.0076	0.0076	373.55	373.41	0.9934	-0.037
0.9810	0.0095	0.0095	373.85	373.63	0.9896	-0.060
0.9769	0.0116	0.0116	374.05	373.88	0.9848	-0.044
0.9725	0.0138	0.0138	374.35	374.18	0.9788	-0.045
0.9680	0.0160	0.0160	374.75	374.51	0.9720	-0.064
0.9633	0.0184	0.0184	375.05	374.88	0.9642	-0.046
0.9603	0.0199	0.0199	375.25	375.12	0.9589	-0.034
0.9568	0.0216	0.0216	375.55	375.42	0.9524	-0.035
0.9532	0.0234	0.0234	375.85	375.73	0.9456	-0.031
0.9505	0.0248	0.0248	376.15	375.97	0.9403	-0.047
0.9462	0.0269	0.0269	376.45	376.37	0.9316	-0.021
0.9435	0.0283	0.0283	376.65	376.63	0.9260	-0.007
0.9406	0.0297	0.0297	376.85	376.91	0.9199	0.015
0.9376	0.0312	0.0312	377.25	377.19	0.9136	-0.015
0.9346	0.0327	0.0327	377.45	377.49	0.9071	0.012
0.9313	0.0344	0.0344	377.75	377.83	0.9000	0.020
0.9278	0.0361	0.0361	378.05	378.19	0.8923	0.036
0.9250	0.0375	0.0375	378.35	378.47	0.8861	0.033
0.9227	0.0387	0.0387	378.65	378.71	0.8810	0.016
0.9196	0.0402	0.0402	378.95	379.04	0.8742	0.023
0.9166	0.0417	0.0417	379.35	379.35	0.8675	0.001
0.9139	0.0431	0.0431	379.55	379.65	0.8615	0.025
0.9109	0.0446	0.0446	379.85	379.97	0.8548	0.032
0.9092	0.0454	0.0454	380.15	380.15	0.8510	0.000
0.9062	0.0469	0.0469	380.45	380.48	0.8444	0.008
0.9032	0.0484	0.0484	380.75	380.81	0.8377	0.016
0.9003	0.0499	0.0499	381.15	381.13	0.8313	-0.006
0.8972	0.0514	0.0514	381.45	381.48	0.8245	0.007
0.8939	0.0531	0.0531	381.85	381.84	0.8172	-0.002
0.8904	0.0548	0.0548	382.15	382.25	0.8096	0.025
0.8875	0.0563	0.0563	382.55	382.57	0.8032	0.005
0.8845	0.0578	0.0578	382.95	382.91	0.7968	-0.011
0.8806	0.0597	0.0597	383.35	383.36	0.7884	0.002
0.8765	0.0618	0.0618	383.95	383.82	0.7796	-0.033
0.8721	0.0640	0.0640	384.45	384.33	0.7704	-0.030



ภาพที่ 3-79 อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย น้ำ(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

ตาราง 3-79 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

$x_{1,\exp}$	$x_{2,\exp}$	$x_{3,\exp}$	$T_{\exp}(K)$	$T_{\text{cal}}(K)$	$\gamma_{1,\text{cal}}$	%Err T
0.9903	0.0049	0.0049	370.05	370.03	1.0043	-0.006
0.9847	0.0076	0.0076	370.15	370.11	1.0067	-0.010
0.9771	0.0115	0.0115	370.35	370.25	1.0093	-0.027
0.9661	0.0170	0.0170	370.65	370.49	1.0117	-0.044
0.9586	0.0207	0.0207	370.85	370.67	1.0123	-0.047
0.9512	0.0244	0.0244	371.05	370.88	1.0123	-0.046
0.9413	0.0294	0.0294	371.25	371.19	1.0112	-0.017
0.9333	0.0334	0.0334	371.55	371.46	1.0095	-0.025
0.9272	0.0364	0.0364	371.75	371.68	1.0077	-0.019
0.9204	0.0398	0.0398	371.95	371.94	1.0053	-0.003
0.9144	0.0428	0.0428	372.25	372.18	1.0028	-0.019
0.9076	0.0462	0.0462	372.45	372.47	0.9997	0.004
0.9009	0.0496	0.0496	372.75	372.76	0.9962	0.002
0.8940	0.0530	0.0530	373.05	373.07	0.9922	0.006
0.8859	0.0571	0.0571	373.35	373.46	0.9871	0.029
0.8775	0.0613	0.0613	373.85	373.87	0.9814	0.006
0.8711	0.0645	0.0645	374.15	374.20	0.9767	0.013



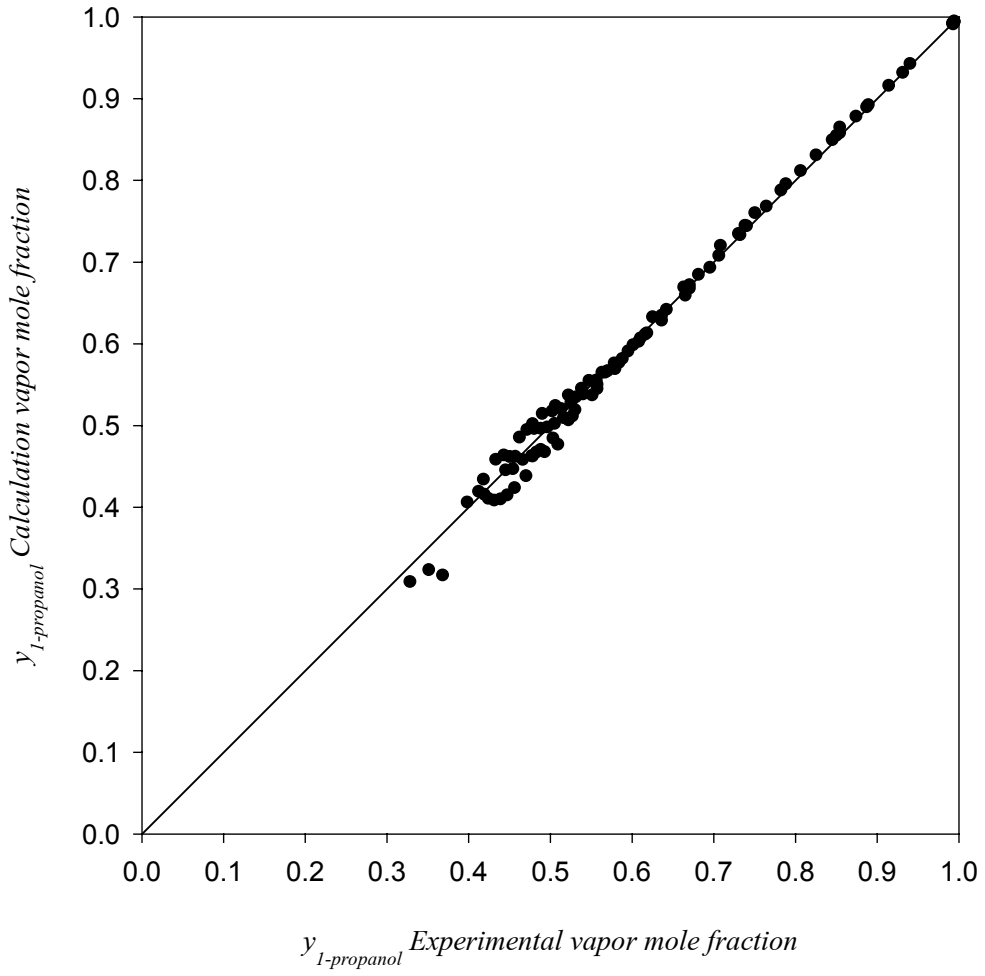
ภาพที่ 3-80 อุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + ลิเทียมไอออน(2) + ไนเตรทไอออน(3) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

ตาราง 3-80 สมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลว อุณหภูมิ ค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดัน 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

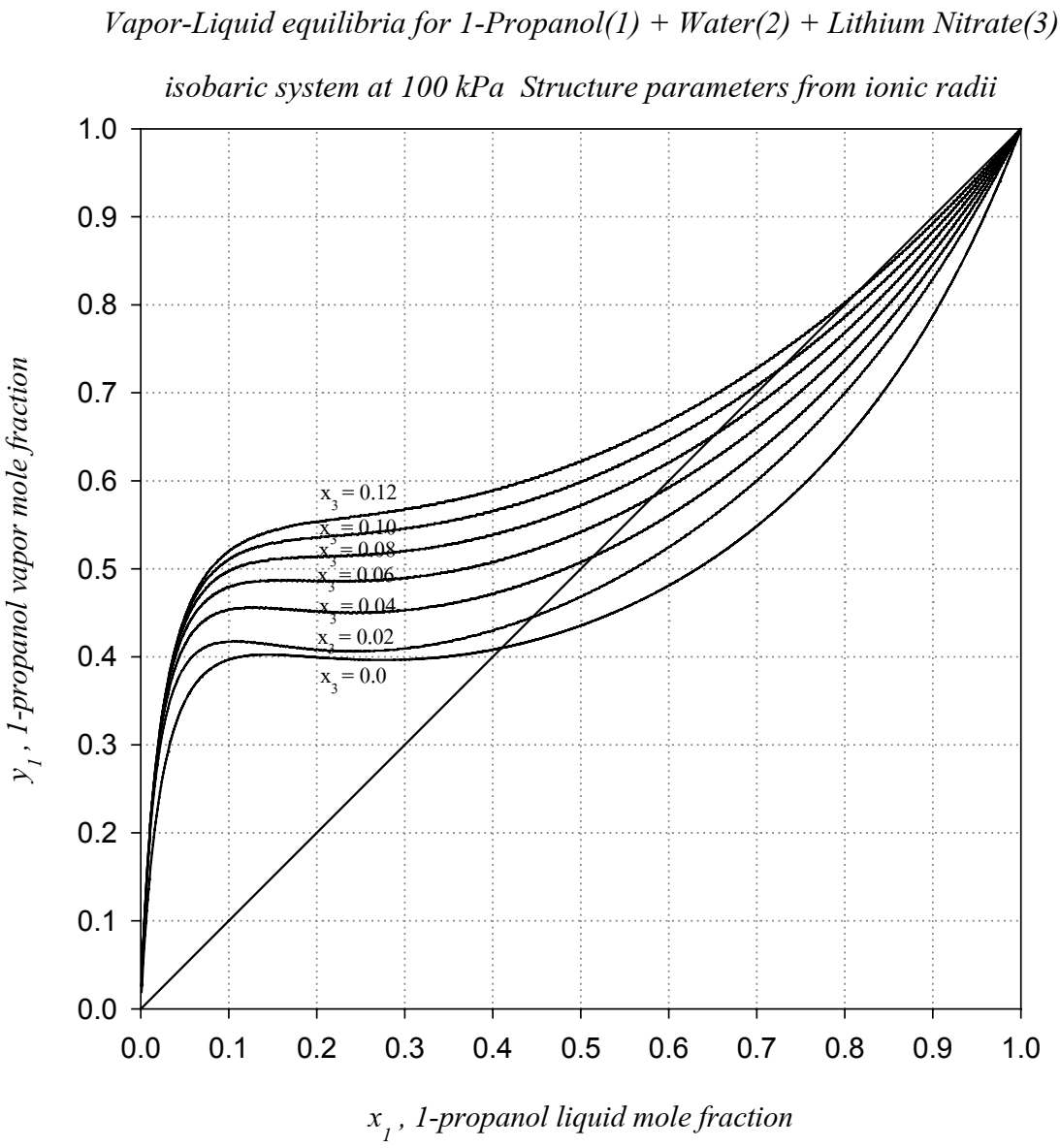
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.020	0.024	364.55	16.3255	0.9876	0.328	0.309	0.672	0.691	-5.809	2.835
0.020	0.066	361.75	8.9465	1.0102	0.398	0.406	0.602	0.594	2.101	-1.389
0.021	0.110	361.35	5.6014	1.0469	0.412	0.420	0.588	0.580	1.832	-1.284
0.021	0.151	361.15	3.9994	1.0915	0.419	0.416	0.581	0.584	-0.743	0.536
0.021	0.196	361.05	3.0029	1.1468	0.424	0.411	0.576	0.589	-3.108	2.288
0.021	0.240	361.05	2.4143	1.2051	0.431	0.409	0.569	0.591	-5.186	3.928
0.021	0.284	361.05	2.0323	1.2662	0.439	0.410	0.561	0.590	-6.565	5.138
0.021	0.325	361.05	1.7867	1.3246	0.447	0.415	0.553	0.585	-7.156	5.785
0.021	0.370	361.15	1.5941	1.3896	0.456	0.424	0.544	0.576	-7.020	5.885
0.021	0.421	361.25	1.4389	1.4635	0.470	0.439	0.530	0.561	-6.685	5.928
0.021	0.495	361.55	1.2880	1.5700	0.493	0.468	0.507	0.532	-5.097	4.956
0.021	0.569	361.85	1.1907	1.6738	0.522	0.507	0.478	0.493	-2.916	3.185
0.022	0.653	362.55	1.1218	1.7788	0.567	0.565	0.433	0.435	-0.306	0.401
0.022	0.733	363.55	1.0767	1.8807	0.625	0.633	0.375	0.367	1.289	-2.149
0.021	0.817	365.15	1.0440	1.9914	0.708	0.720	0.292	0.280	1.758	-4.262
0.021	0.923	367.85	1.0205	2.1091	0.854	0.865	0.146	0.135	1.311	-7.667
0.022	0.996	370.35	1.0113	2.1717	0.992	0.992	0.008	0.008	0.030	-3.744
0.043	0.024	366.15	16.5753	0.9402	0.351	0.324	0.649	0.676	-7.829	4.234
0.044	0.061	362.35	10.2464	0.9498	0.418	0.434	0.582	0.566	3.885	-2.790
0.045	0.094	362.05	7.2259	0.9683	0.433	0.459	0.567	0.541	5.934	-4.532
0.045	0.136	361.95	5.0391	1.0029	0.443	0.464	0.557	0.536	4.728	-3.760
0.045	0.179	361.95	3.7595	1.0442	0.450	0.462	0.550	0.538	2.681	-2.194
0.046	0.215	361.95	3.0912	1.0783	0.457	0.462	0.543	0.538	1.123	-0.945
0.044	0.267	362.05	2.4309	1.1447	0.466	0.458	0.534	0.542	-1.614	1.408
0.044	0.317	362.05	2.0407	1.2037	0.478	0.463	0.522	0.537	-3.196	2.927
0.044	0.319	362.15	2.0279	1.2063	0.477	0.463	0.523	0.537	-2.941	2.682
0.044	0.364	362.15	1.7889	1.2606	0.488	0.471	0.512	0.529	-3.555	3.388
0.044	0.419	362.45	1.5816	1.3281	0.503	0.485	0.497	0.515	-3.631	3.675
0.044	0.493	362.75	1.3948	1.4183	0.527	0.512	0.473	0.488	-2.896	3.226
0.044	0.562	363.15	1.2786	1.5009	0.557	0.545	0.443	0.455	-2.111	2.654
0.044	0.648	363.95	1.1811	1.6004	0.601	0.599	0.399	0.401	-0.367	0.553
0.044	0.737	365.05	1.1146	1.6978	0.663	0.669	0.337	0.331	0.972	-1.912
0.044	0.828	366.55	1.0691	1.7902	0.750	0.760	0.250	0.240	1.388	-4.163
0.044	0.930	369.05	1.0354	1.8844	0.887	0.890	0.113	0.110	0.343	-2.693
0.043	0.995	370.95	1.0198	1.9478	0.993	0.991	0.007	0.009	-0.156	22.197
0.067	0.022	367.35	16.3704	0.8769	0.368	0.317	0.632	0.683	-13.843	8.061
0.066	0.057	363.25	10.7453	0.8859	0.445	0.446	0.555	0.554	0.174	-0.140
0.067	0.099	362.85	7.1057	0.9063	0.462	0.486	0.538	0.514	5.130	-4.406
0.067	0.142	362.85	5.0662	0.9376	0.471	0.495	0.529	0.505	5.104	-4.544
0.067	0.186	362.95	3.8335	0.9747	0.480	0.496	0.520	0.504	3.400	-3.139
0.067	0.228	363.05	3.0862	1.0134	0.488	0.497	0.512	0.503	1.755	-1.673
0.067	0.270	363.15	2.5805	1.0544	0.496	0.498	0.504	0.502	0.447	-0.440
0.067	0.315	363.35	2.2024	1.1001	0.505	0.503	0.495	0.497	-0.489	0.499
0.067	0.359	363.55	1.9375	1.1459	0.516	0.510	0.484	0.490	-1.225	1.306
0.067	0.401	363.75	1.7489	1.1901	0.530	0.519	0.470	0.481	-2.016	2.273
0.066	0.464	364.05	1.5408	1.2618	0.551	0.537	0.449	0.463	-2.472	3.034
0.066	0.540	364.55	1.3740	1.3413	0.579	0.569	0.421	0.431	-1.651	2.271
0.066	0.620	365.15	1.2557	1.4222	0.618	0.613	0.382	0.387	-0.756	1.223
0.066	0.705	366.15	1.1698	1.5044	0.670	0.672	0.330	0.328	0.318	-0.646
0.066	0.790	367.25	1.1099	1.5802	0.738	0.745	0.262	0.255	0.941	-2.652
0.066	0.893	369.25	1.0596	1.6632	0.850	0.855	0.150	0.145	0.591	-3.349
0.065	0.996	371.65	1.0244	1.7414	0.994	0.994	0.006	0.006	-0.009	1.544
0.081	0.054	363.95	10.8531	0.8412	0.454	0.447	0.546	0.553	-1.491	1.240
0.082	0.107	363.55	6.6429	0.8660	0.478	0.502	0.522	0.498	5.067	-4.640
0.083	0.160	363.55	4.5640	0.8998	0.490	0.515	0.510	0.485	5.038	-4.841

ตาราง 3-80 (ต่อ)

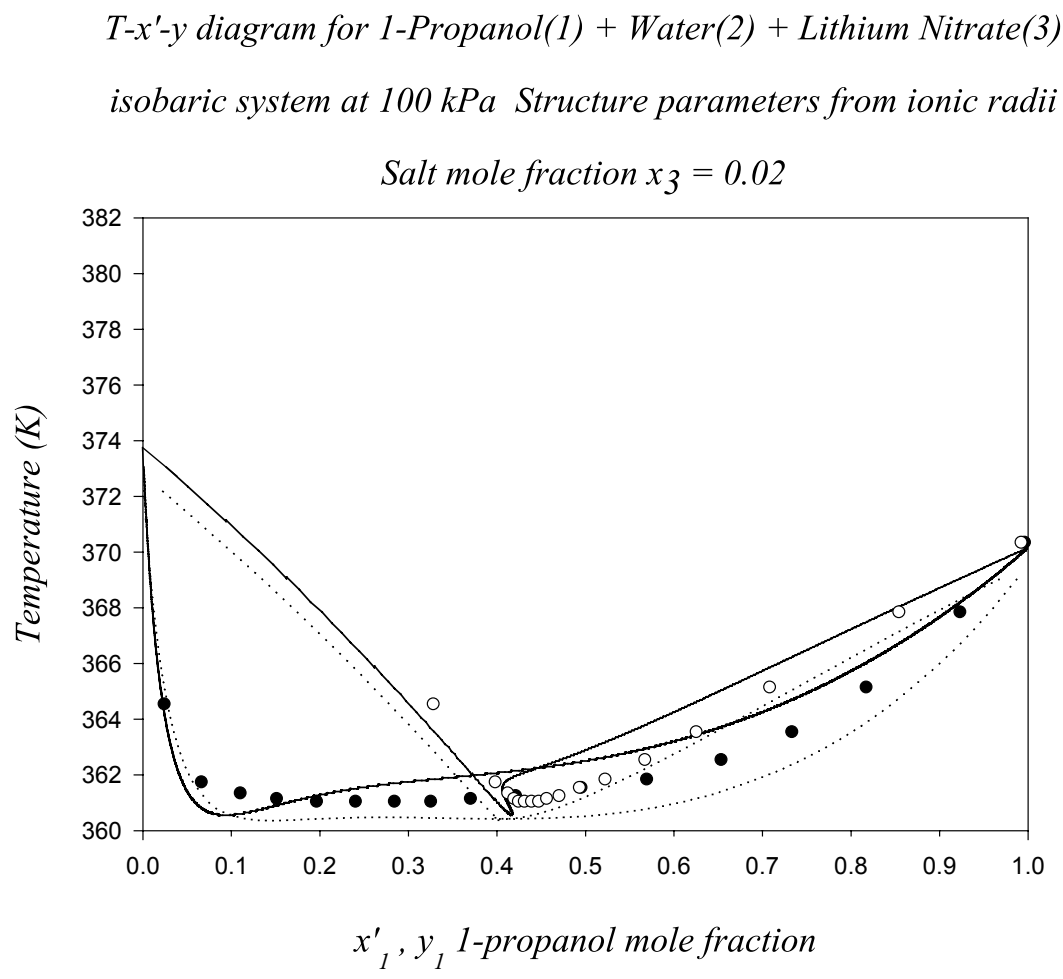
x_{salt}	$x'_{1,exp}$	$T_{exp}(K)$	$\gamma_{1,cal}$	$\gamma_{2,cal}$	$y_{1,exp}$	$y_{1,cal}$	$y_{2,exp}$	$y_{2,cal}$	%Err y_1	%Err y_2
0.083	0.217	363.85	3.3390	0.9463	0.502	0.518	0.498	0.482	3.157	-3.183
0.083	0.265	364.05	2.7107	0.9886	0.513	0.521	0.487	0.479	1.496	-1.576
0.084	0.320	364.25	2.2401	1.0351	0.525	0.528	0.475	0.472	0.609	-0.673
0.085	0.370	364.55	1.9482	1.0778	0.540	0.539	0.460	0.461	-0.249	0.293
0.083	0.426	364.85	1.7078	1.1402	0.557	0.550	0.443	0.450	-1.218	1.531
0.083	0.502	365.35	1.4904	1.2125	0.584	0.577	0.416	0.423	-1.177	1.653
0.083	0.567	365.85	1.3621	1.2731	0.610	0.607	0.390	0.393	-0.489	0.764
0.082	0.632	366.35	1.2666	1.3373	0.642	0.642	0.358	0.358	0.034	-0.062
0.082	0.696	366.95	1.1971	1.3923	0.681	0.685	0.319	0.315	0.589	-1.257
0.081	0.761	367.75	1.1421	1.4518	0.730	0.735	0.270	0.265	0.661	-1.787
0.081	0.820	368.65	1.1036	1.4968	0.782	0.788	0.218	0.212	0.794	-2.849
0.080	0.888	369.85	1.0678	1.5515	0.854	0.858	0.146	0.142	0.508	-2.970
0.080	0.937	370.85	1.0469	1.5821	0.914	0.916	0.086	0.084	0.251	-2.668
0.080	0.995	372.15	1.0258	1.6135	0.993	0.993	0.007	0.007	-0.004	0.592
0.102	0.061	364.75	9.6292	0.7838	0.483	0.468	0.517	0.532	-3.198	2.988
0.103	0.125	364.55	5.7180	0.8144	0.506	0.525	0.494	0.475	3.659	-3.748
0.103	0.189	364.85	3.8856	0.8583	0.522	0.537	0.478	0.463	2.925	-3.194
0.104	0.263	365.25	2.7875	0.9121	0.538	0.546	0.462	0.454	1.425	-1.659
0.106	0.319	365.75	2.3018	0.9510	0.556	0.556	0.444	0.444	-0.087	0.109
0.103	0.391	365.95	1.8911	1.0229	0.570	0.567	0.430	0.433	-0.545	0.722
0.103	0.444	366.35	1.6884	1.0683	0.588	0.582	0.412	0.418	-1.007	1.437
0.103	0.502	366.75	1.5249	1.1172	0.608	0.603	0.392	0.397	-0.809	1.255
0.104	0.570	367.35	1.3861	1.1683	0.636	0.635	0.364	0.365	-0.181	0.317
0.103	0.633	367.85	1.2891	1.2231	0.670	0.668	0.330	0.332	-0.307	0.623
0.103	0.696	368.45	1.2156	1.2701	0.706	0.708	0.294	0.292	0.314	-0.755
0.101	0.748	368.95	1.1661	1.3183	0.740	0.744	0.260	0.256	0.581	-1.653
0.101	0.810	369.75	1.1196	1.3591	0.788	0.796	0.212	0.204	0.999	-3.714
0.100	0.849	370.35	1.0947	1.3893	0.825	0.831	0.175	0.169	0.749	-3.532
0.100	0.896	371.15	1.0690	1.4155	0.874	0.879	0.126	0.121	0.532	-3.687
0.101	0.944	372.05	1.0461	1.4318	0.931	0.932	0.069	0.068	0.117	-1.581
0.101	0.996	373.05	1.0240	1.4523	0.994	0.995	0.006	0.005	0.093	-15.393
0.122	0.064	365.95	8.8388	0.7307	0.509	0.477	0.491	0.523	-6.286	6.516
0.122	0.124	365.85	5.6083	0.7604	0.531	0.535	0.469	0.465	0.776	-0.878
0.123	0.197	366.25	3.7053	0.8036	0.547	0.555	0.453	0.445	1.497	-1.808
0.123	0.266	366.65	2.7679	0.8524	0.563	0.565	0.437	0.435	0.369	-0.476
0.123	0.333	366.95	2.2258	0.9021	0.578	0.576	0.422	0.424	-0.274	0.375
0.124	0.393	367.45	1.9080	0.9444	0.595	0.591	0.405	0.409	-0.633	0.930
0.126	0.454	367.95	1.6820	0.9826	0.616	0.612	0.384	0.388	-0.701	1.125
0.126	0.501	368.35	1.5506	1.0176	0.636	0.629	0.364	0.371	-1.123	1.961
0.125	0.573	369.05	1.3985	1.0744	0.665	0.660	0.335	0.340	-0.826	1.639
0.124	0.639	369.35	1.2955	1.1234	0.695	0.694	0.305	0.306	-0.189	0.430
0.124	0.703	370.15	1.2193	1.1652	0.732	0.733	0.268	0.267	0.199	-0.543
0.123	0.754	370.55	1.1700	1.2003	0.764	0.769	0.236	0.231	0.599	-1.940
0.122	0.810	371.15	1.1251	1.2362	0.806	0.812	0.194	0.188	0.737	-3.062
0.120	0.855	371.75	1.0945	1.2704	0.845	0.850	0.155	0.150	0.571	-3.113
0.120	0.900	372.35	1.0679	1.2898	0.889	0.893	0.111	0.107	0.401	-3.214
0.120	0.949	373.25	1.0424	1.3083	0.940	0.943	0.060	0.057	0.323	-5.053
0.121	0.995	373.95	1.0203	1.3139	0.994	0.994	0.006	0.006	0.025	-4.072



ภาพที่ 3-81 ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ 1-โพรพานอล(1) ที่ได้จากข้อมูลผลการทดลองและจากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไอออน(3) + ไนเตรทไอออน(4) ที่ความดันคงที่ 100 kPa โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน



ภาพที่ 3-82 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') ของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa ที่ความเข้มข้นของเกลือมีเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.0 0.02 0.04 0.06 0.08 0.10 และ 0.12 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน เมื่อ —— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC



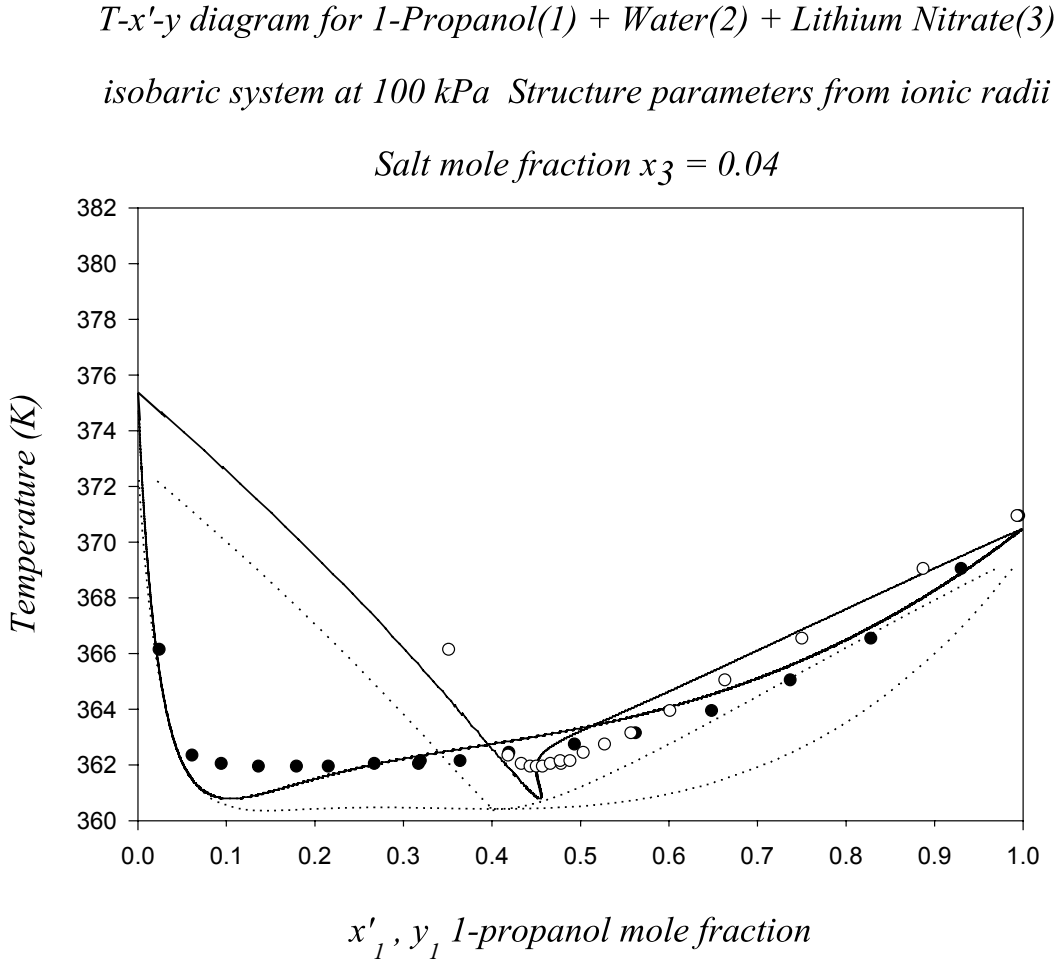
ภาพที่ 3-83 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.02 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



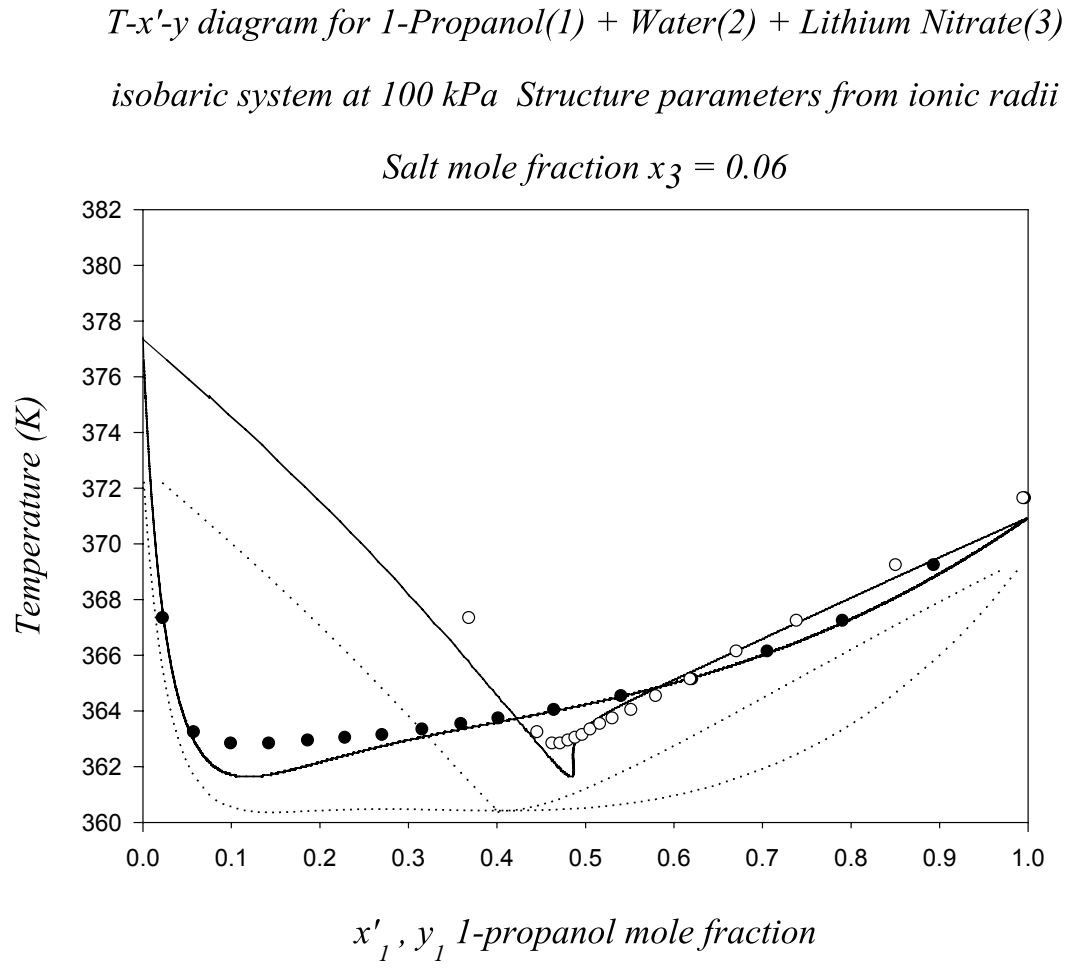
ภาพที่ 3-84 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.04 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



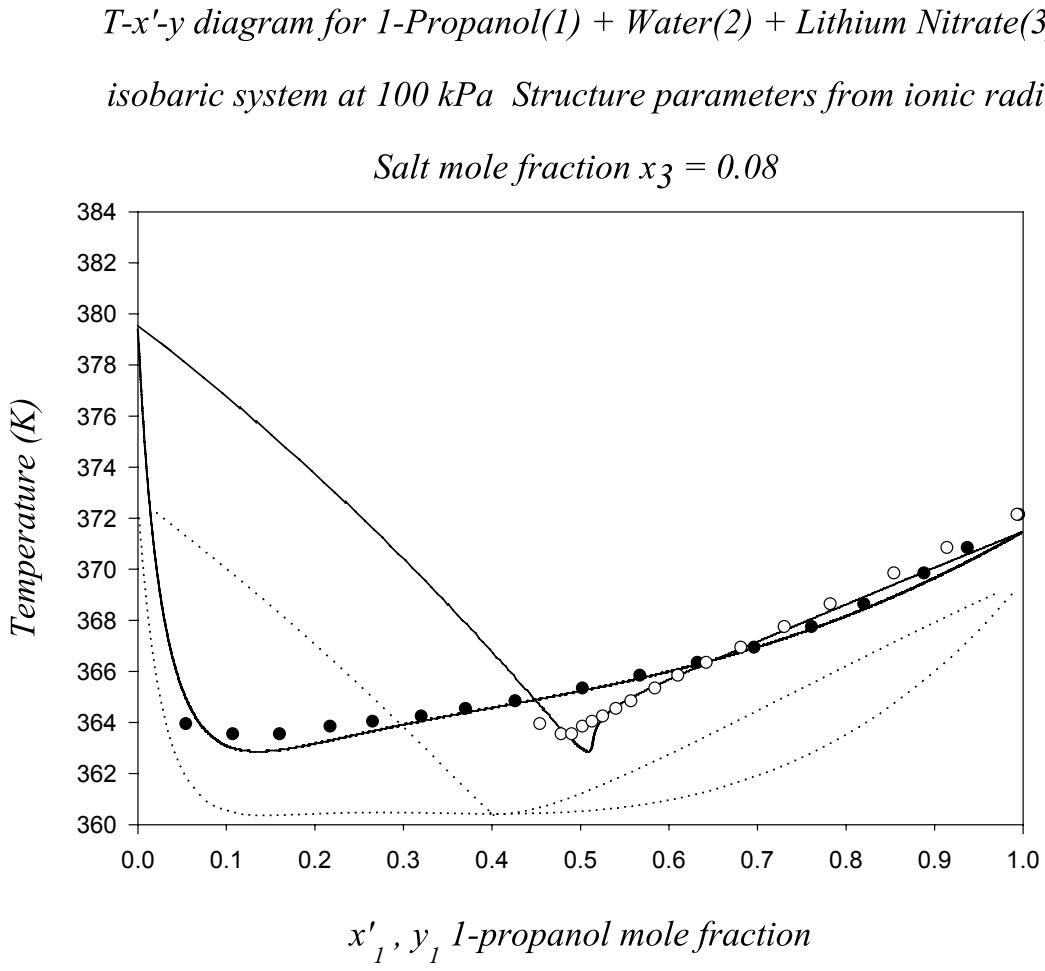
ภาพที่ 3-85 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.06 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



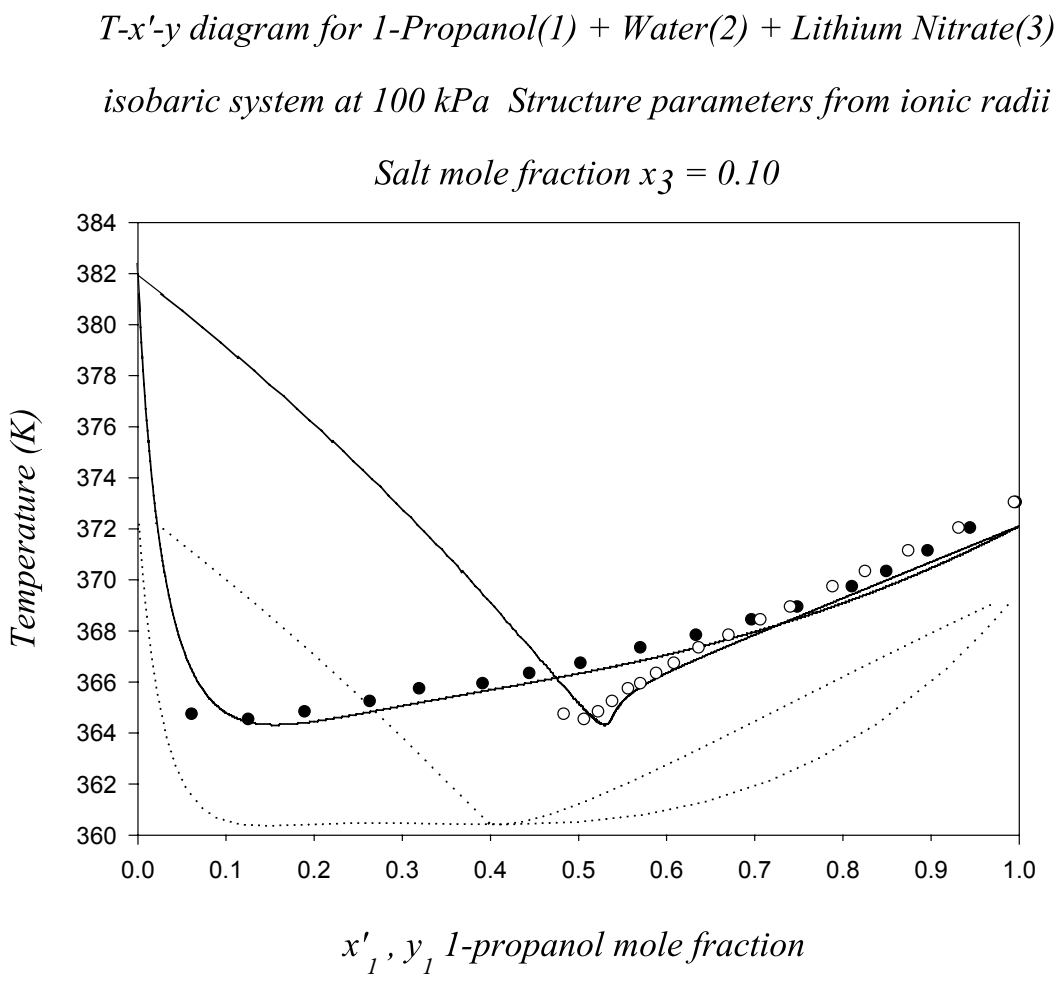
ภาพที่ 3-86 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.08 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



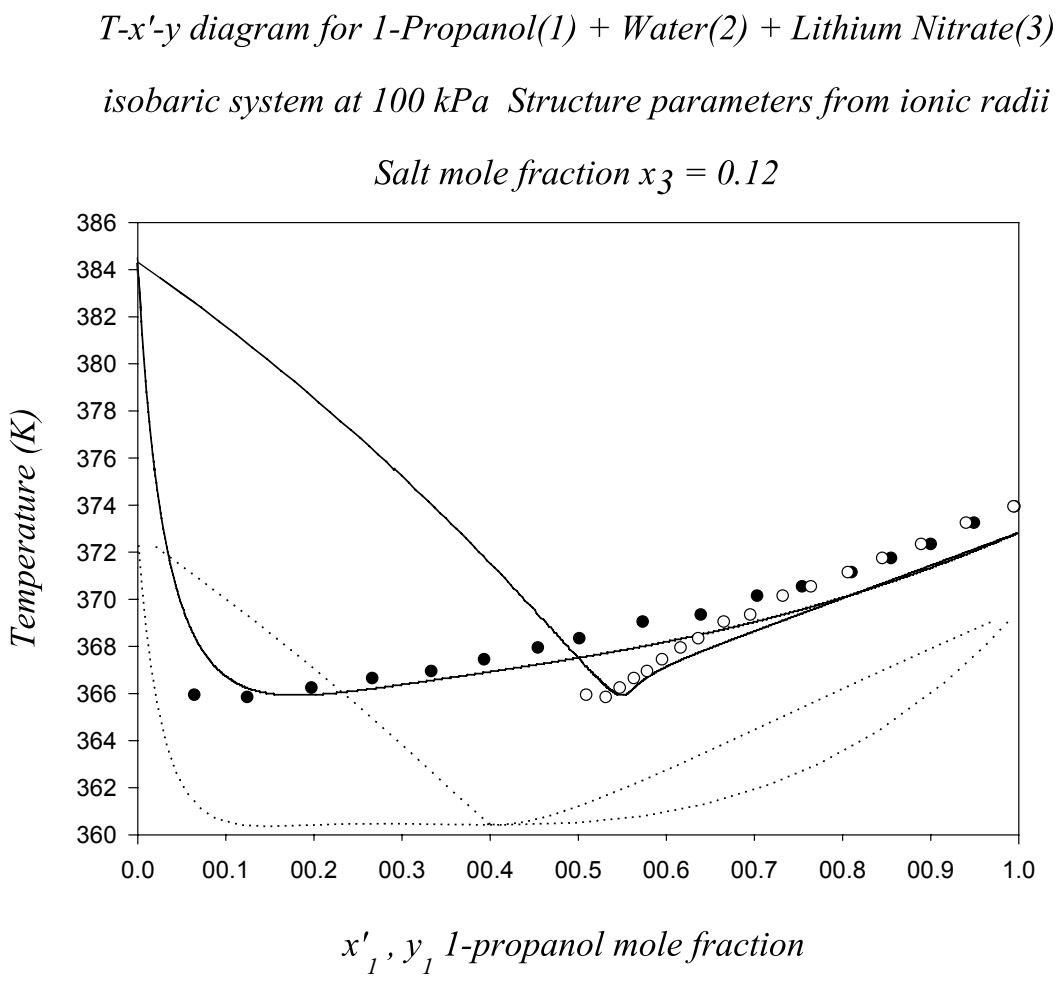
ภาพที่ 3-87 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.10 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ



ภาพที่ 3-88 สมดุลระหว่างวัฏภาคระหว่างไอ (y_1) และวัฏภาคของเหลว (x_1') และอุณหภูมิของระบบที่ประกอบด้วย 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) ที่ความดัน 100 kPa และความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.12 โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

เมื่อ ● คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว ข้อมูลจากการทดลอง

○ คือ ค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ ข้อมูลจากการทดลอง

—— คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC

..... คือ ข้อมูลจากการคำนวณด้วยแบบจำลอง UNIQUAC ของระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) ที่ปราศจากเกลือ

<u>วิจารณ์ผลศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์กำหนดจากรัศมีไอออน</u>

จากการศึกษาสมดุลระหว่างวัฏภาคไอและวัฏภาคของเหลวของระบบอิเล็กโทรไลต์และความดันของระบบมีค่าคงที่ โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างขององค์ประกอบที่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์กำหนดจากรัศมีไอออน พบว่า เมื่อกำหนดให้องค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายที่ไม่เป็นสารอิเล็กโทรไลต์ ได้แก่ เอทานอล 1-โพรพานอล และน้ำ ใช้พารามิเตอร์โครงสร้างที่ได้จากปริมาตรและพื้นที่ของแวนเดอร์วาลส์ที่มีความสัมพันธ์กับส่วนมาตรฐาน และสำหรับองค์ประกอบที่เป็นตัวถูกละลายสารอิเล็กโทรไลต์ ได้แก่ โพแทสเซียมไอออน สตรอนเทียมไอออน โซเดียมไอออน แคลเซียมไอออน ลิเทียมไอออน และ ไนเตรทไอออน ใช้พารามิเตอร์โครงสร้างที่ได้จากการกำหนดโดยรัศมีไอออน ในการทำการถดถอยไม่เชิงเส้นเพื่อหาค่าพารามิเตอร์สำหรับแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC สามารถหาค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองได้ และสามารถนำไปคำนวณค่าสัมประสิทธิ์แอคติวิตีของตัวทำละลายและคำนวณสมดุลระหว่างวัฏภาคและอุณหภูมิของระบบที่ความดันคงที่ได้

ตำแหน่งอะซีโอโทรปที่เกิดขึ้นกับองค์ประกอบที่เป็นตัวทำละลายในระบบสารอิเล็กโทรไลต์ พิจารณาตำแหน่งอะซีโอโทรปของตัวทำละลาย i และ j เมื่อค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคของเหลว (x_i, x_j) มีค่าเท่ากับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ (y_i, y_j) ในระบบ เอทานอล(1) + น้ำ(2) ที่ความดันของระบบคงที่ 100 kPa เมื่อมีเกลือในระบบที่ความเข้มข้นของเกลือมีค่าเศษส่วนโมลเท่ากับ 0.01 ก็สามารถกำจัดอะซีโอโทรปของเอทานอล(1) ได้ สำหรับระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) พบว่าตำแหน่งอะซีโอโทรปที่เกิดขึ้นไม่ต่างจากการคำนวณด้วยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างเดิม ผลการคำนวณแสดงตำแหน่งอะซีโอโทรปของ 1-โพรพานอล(1) แสดงในตาราง 3-81

ตาราง 3-81 ตำแหน่งของค่าเศษส่วนโมล ($x'_{1,cal}, y_{1,cal}$) และอุณหภูมิ (K) ที่ทำให้เกิดอะซีโอโทรปของ 1-โพรพานอล(1) จากผลการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

ค่าเศษส่วนโมลของเกลือ	ระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + แคลเซียมไนเตรท(3) 100 kPa	ระบบ 1-โพรพานอล(1) + น้ำ(2) + ลิเทียมไนเตรท(3) 100 kPa
0.02	0.51 (362.55 K)	0.45 (362.25 K)
0.04	0.61 (364.20 K)	0.51 (363.40 K)
0.06	0.71 (366.05 K)	0.58 (364.85 K)
0.08	0.80 (367.80 K)	0.65 (366.50 K)
0.10	-	0.73 (368.30 K)
0.12	-	0.82 (370.35 K)

ค่าเฉลี่ย ค่าความแปรปรวน และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของแอลกอฮอล์(1) และของน้ำ(2) แสดงในตาราง 3-82 และ 3-83 ตามลำดับ

ตาราง 3-82 ค่าเฉลี่ย ค่าความแปรปรวน และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของแอลกอฮอล์(1) ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

	10	11	12	13	14
Mean	-0.545	-1.084	-1.246	0.048	-0.387
Variance	0.654	5.700	4.017	1.994	5.289
Std-Dev	0.809	2.388	2.004	1.412	2.300

ตาราง 3-83 ค่าเฉลี่ย ค่าความแปรปรวน และค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ของเปอร์เซ็นต์ความผิดพลาดของค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอของ น้ำ(2) ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง Electrolyte UNIQUAC โดยค่าพารามิเตอร์โครงสร้างของสารอิเล็กโทรไลต์ได้จากการกำหนดด้วยรัศมีไอออน

	10	11	12	13	14
Mean	0.573	1.084	1.419	-0.686	-0.190
Variance	0.591	1.887	2.899	40.216	8.261
Std-Dev	0.769	1.374	1.703	6.342	2.874

กำหนดให้ 10 คือ ระบบเอทานอล + น้ำ + โพแทสเซียมไนเตรท ที่ความดัน 100 kPa
11 คือ ระบบเอทานอล + น้ำ + สตรอนเทียมไนเตรท ที่ความดัน 100 kPa
12 คือ ระบบเอทานอล + น้ำ + โซเดียมไนเตรท ที่ความดัน 100 kPa
13 คือ ระบบ 1-โพรพานอล + น้ำ + แคลเซียมไนเตรท ที่ความดัน 100 kPa
14 คือ ระบบ 1-โพรพานอล + น้ำ + ลิเทียมไนเตรท ที่ความดัน 100 kPa