

ภาคผนวก ค

การคำนวณความหนาแน่นและค่าการละลาย
ของสีย้อมในการ์บอนไดออกไซด์

การคำนวณค่าแฟกเตอร์สภาพกีดกัน (Compressibility Factor, z) ของคาร์บอนไดออกไซด์ เหนือวิกฤต

1. ค่าแฟกเตอร์สภาพกีดกัน (Compressibility Factor, z) สามารถหาได้จากสมการต่อไปนี้

$$z = z^0 + \omega z^1 \quad (\text{ค.1})$$

z คือ ค่าแฟกเตอร์สภาพกีดกัน

z^0 และ z^1 คือ correlation factor

ω คือ อะเซนตริกแฟกเตอร์

เปิดตารางหาค่าอุณหภูมิวิกฤต (T_c) ความดันวิกฤต (P_c) และ ω ของคาร์บอนไดออกไซด์

$$T_c = 304 \text{ เคลวิน}$$

$$P_c = 7.4 \text{ เมกะพาสกาล}$$

$$\omega = 0.224$$

นำค่าอุณหภูมิวิกฤต (T_c) และ ความดันวิกฤต (P_c) มาคำนวณหา อุณหภูมิลดรูป (T_r) และ ความดันลดรูป (P_r) ดังสมการต่อไปนี้

$$T_r = \frac{T}{T_c} \quad \text{และ} \quad P_r = \frac{P}{P_c}$$

T และ P คือ อุณหภูมิ (เคลวิน) และความดัน (เมกะพาสกาล) ในการทดลอง

เมื่ออุณหภูมิที่ใช้ในการทดลองเท่ากับ 50 องศาเซลเซียส (323 เคลวิน) ดังนั้นอุณหภูมิลดรูป (T_r) มีค่าเท่ากับ

$$T_r = \frac{323}{304} = 1.0625$$

เพื่อให้ง่ายต่อการประมาณค่า จึงให้ T_r มีค่าเท่ากับ 1.05 ส่วนอุณหภูมิลดรูป (T_r) ที่ใช้ในการทดลองอื่นๆ สามารถคำนวณได้ในทำนองเดียวกัน ซึ่งค่าอุณหภูมิลดรูปที่คำนวณได้ แสดงในตารางที่ ค.1

ตารางที่ ค.1 อุณหภูมิลดรูป (T_r) ที่อุณหภูมิที่ใช้ในการทดลองต่างๆ

อุณหภูมิที่ใช้ในการทดลอง (องศาเซลเซียส)	อุณหภูมิลดรูป (T_r)
50	1.0625
60	1.1
70	1.15

เมื่อความดันที่ใช้ในการทดลองเท่ากับ 15 เมกะพาสคาล ดังนั้นความดันลดรูป (P_r) มีค่าเท่ากับ

$$P_r = \frac{15}{7.4} = 2.03$$

ส่วนความดันลดรูป (P_r) ที่ความดันที่ใช้ในการทดลองอื่นๆ สามารถคำนวณได้ในทำนองเดียวกัน ซึ่งค่าความดันลดรูป ที่คำนวณได้ แสดงในตารางที่ ค.2

ตารางที่ ค.2 ความดันลดรูป (P_r) ที่ความดันที่ใช้ในการทดลองต่างๆ

ความดันที่ใช้ในการทดลอง (เมกะพาสคาล)	ความดันลดรูป (P_r)
10.0	1.35
12.0	1.62
15.0	2.03
20.0	2.7

ค่า z^0 และ z^1 สามารถหาได้จากการประมาณค่าในตาราง Lee/Kesler Generalized-correlation [1] ซึ่งค่า z^0 และ z^1 ที่ได้จากการประมาณค่ามีค่าดังแสดงในตาราง ค.4

ตารางที่ ค.3 ค่า z^0 และ z^1 จากตาราง Lee/Kesler Generalized-correlation ในช่วงอุณหภูมิวิกฤต
คงที่เท่ากับ 1.05 และ ความดันวิกฤตต่างๆ

อุณหภูมิวิกฤต (T_r)	ความดันวิกฤต (P_r)	z^0	z^1
1.05	1.2000	0.4437	0.1059
	1.5000	0.3131	0.0451
	2.0000	0.3452	-0.0432
	3.0000	0.4604	-0.0838

จากตาราง ค.3 เนื่องจากค่าความดันวิกฤต ที่ใช้ในการทดลองไม่มีบันทึกในตาราง ดังนั้นจึง
ต้องทำการประมาณค่าในช่วงของตารางเพื่อหาค่า z^0 และ z^1 ที่อยู่ในช่วง P_r เท่ากับ 1.35 -2.7 ซึ่งค่า
 z^0 และ z^1 ที่ประมาณได้ แสดงในตาราง ค.4

ตารางที่ ค.4 ค่า z^0 และ z^1 จากตาราง Lee/Kesler Generalized-correlation ในช่วงอุณหภูมิวิกฤต
คงที่เท่ากับ 1.05 และ ความดันวิกฤตที่ใช้ในการทดลอง

อุณหภูมิวิกฤต (T_r)	ความดันวิกฤต (P_r)	z^0	z^1
1.05	1.35	0.3784	0.0755
	1.62	0.3208	0.0239
	2.03	0.3487	-0.0444
	2.7	0.4258	-0.0716

ส่วนค่า z^0 และ z^1 ที่อุณหภูมิวิกฤตอื่นๆก็สามารถประมาณค่าได้ในทำนองเดียวกัน ซึ่งแสดง
ในตารางที่ ค.5

ตารางที่ ค. 5 ค่า z^0 และ z^1 จากตาราง Lee/Kesler Generalized-correlation ในช่วงอุณหภูมิวิกฤต
 คงที่เท่ากับ 1.1 กับ 1.15 และความดันวิกฤตที่ใช้ในการทดลอง

อุณหภูมิวิกฤต (T_r)	ความดันวิกฤต (P_r)	z^0	z^1
1.1	1.35	0.5282	0.1264
	1.62	0.4430	0.1406
	2.03	0.3978	0.0666
	2.7	0.4525	0.0694
1.15	1.35	0.6301	0.1246
	1.62	0.5545	0.1577
	2.03	0.4768	0.1627
	2.7	0.4960	0.0733

จากนั้นนำค่า z^0 และ z^1 ที่ประมาณค่าได้มาหาค่าแฟกเตอร์สภาพกดอัด (Compressibility Factor, z) จากสมการต่อไปนี้

$$z = z^0 + \omega z^1 \quad (\text{ค.1})$$

ซึ่งค่าแฟกเตอร์สภาพกดอัด (z) ที่คำนวณได้ แสดงในตาราง ค.6

ตาราง ค. 6 แสดงค่าแฟกเตอร์สภาพกดอัด (z) ที่ได้จากคำนวณ

อุณหภูมิวิกฤต (T_r)	ความดันวิกฤต (P_r)	z
1.05	1.35	0.3953
	1.62	0.3262
	2.03	0.3388
	2.7	0.4098
1.1	1.35	0.4999
	1.62	0.4115
	2.03	0.3829
	2.7	0.4370

ตาราง ค. 6 (ต่อ)

อุณหภูมิวิกฤต (T_c)	ความดันวิกฤต (P_c)	z
1.15	1.35	0.6022
	1.62	0.5192
	2.03	0.4404
	2.7	0.4800

การคำนวณความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต

นำค่าแฟกเตอร์สภาพกคอัด (z) ของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต มาทำการคำนวณเพื่อหาปริมาตรจำเพาะของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต (v) ได้ด้วยสมการต่อไปนี้ [1]

$$z = \frac{Pv}{RT} \quad (\text{ค.2})$$

P คือ ความดันในการทดลอง (บรรยากาศ)

v คือ ปริมาตรจำเพาะของคาร์บอนไดออกไซด์ (ลูกบาศก์เซนติเมตรต่อโมล)

R คือ ค่าคงที่ของก๊าซอุดมคติ (0.08206 ลูกบาศก์เดซิเมตร บรรยากาศ ต่อโมล เคลวิน)

T คือ อุณหภูมิในการทดลอง (เคลวิน)

ตัวอย่างการคำนวณหาปริมาตรจำเพาะของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต (v) กรณี อุณหภูมิ และ ความดันที่ใช้ในการทดลองเท่ากับ 50 องศาเซลเซียส (323 เคลวิน) และ 15 เมกะพาสกาล ตามลำดับ ค่า z มีค่าเท่ากับ 0.3388

$$v = \frac{zRT}{P} = \frac{0.3388 \times 0.08206 \frac{\text{dm}^3 \times \text{atm}}{\text{mol} \times \text{K}}}{15 \text{MPa}} \times 323 \text{K} \times \frac{1000 \text{cm}^3}{\text{dm}^3} \times \frac{0.101325 \text{MPa}}{\text{atm}} = 60.66 \frac{\text{cm}^3}{\text{mol}}$$

ค่าปริมาตรจำเพาะของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต (v) ที่อุณหภูมิ และ ความดันที่ใช้ในการทดลองอื่นๆก็คำนวณได้ในทำนองเดียวกัน ซึ่งแสดงค่าในตาราง ค.7

ตาราง ค.7 ค่าปริมาตรจำเพาะของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต (v)

อุณหภูมิในการทดลอง (องศาเซลเซียส)	ความดันในการทดลอง (เมกะพาสกาล)	ปริมาตรจำเพาะของคาร์บอนไดออกไซด์ เหนือวิกฤต $\left(\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}}\right)$
50	10.0	106.16
	12.0	73.01
	15.0	60.66
	20.0	55.03
60	10.0	138.41
	12.0	94.95
	15.0	70.68
	20.0	60.50
70	10.0	171.74
	12.0	123.39
	15.0	83.73
	20.0	68.45

จากนั้นนำค่าปริมาตรจำเพาะของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตที่หาได้ มาทำการคำนวณหาความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต จากความสัมพันธ์ต่อไปนี้

$$\rho = \frac{m}{v} \quad (\text{ค.3})$$

ρ คือ ความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์ (กรัมต่อลูกบาศก์เซนติเมตร)

m คือ น้ำหนักโมเลกุลของคาร์บอนไดออกไซด์ มีค่าเท่ากับ 44 กรัมต่อโมล

ค่าความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต ที่คำนวณได้แสดงในตาราง ค.8

ตาราง ค. 8 ความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต ที่อุณหภูมิและความดันต่างๆ

อุณหภูมิในการทดลอง (องศาเซลเซียส)	ความดันในการทดลอง (เมกะพาสกาล)	ความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต $\left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right)$
50	10.0	414.67
	12.0	602.66
	15.0	725.35
	20.0	799.56
60	10.0	317.90
	12.0	463.40
	15.0	622.52
	20.0	727.27
70	10.0	256.20
	12.0	356.59
	15.0	525.50
	20.0	642.80

การคำนวณค่าการละลายของสีย้อมในคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต

นำค่าความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตที่ได้ มาคำนวณหาค่าการละลายของสีย้อมในคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤตได้จากสมการเอมพิริคัลของ Sung และ Shim [3]

$$\ln y = \alpha + \frac{\beta}{T} + \left(\delta + \frac{\gamma}{T} \right) \ln p \quad (\text{ค.4})$$

y คือ ค่าการละลายของสีย้อมในคาร์บอนไดออกไซด์ (g_{Dye}/g_{CO_2})

α , β , δ และ γ คือ ค่าคงที่ที่ได้จากการทดลอง

p คือ ความหนาแน่นของคาร์บอนไดออกไซด์ (kg/m^3)

ค่าคงที่ α , β , δ และ γ สามารถหาได้จากผลการทดลอง ซึ่งค่าเหล่านี้แสดงในตารางที่ 2.5

ตารางที่ ค.9 ค่าคงที่ α , β , δ และ γ [3]

ระบบ	ค่าคงที่สำหรับสมการ (2.1)				AAD%
	α	β (เคลวิน)	δ	γ (เคลวิน)	
CO ₂ +C.I.Disperse Red 1	21.650	-26262	-1.2076	2633.7	11.7

AAD% = Absolute Arithmetic mean Deviation

ค่าการละลายของสีย้อมในคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต ที่คำนวณได้จากสมการ (ค.4) แสดงในตาราง ค.10

ตาราง ค. 10 ค่าการละลายของสีย้อมในคาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต (y) ที่อุณหภูมิและความดันต่างๆ ที่ใช้ในการทดลอง

อุณหภูมิในการทดลอง (องศาเซลเซียส)	ความดันในการทดลอง (เมกะพาสกาล)	ค่าการละลายของสีย้อมใน คาร์บอนไดออกไซด์เหนือวิกฤต ($\times 10^{-7}$)
50	10.0	0.18
	12.0	2.53
	15.0	9.15
	20.0	18.00
60	10.0	0.08
	12.0	1.04
	15.0	7.53
	20.0	21.34
70	10.0	0.05
	12.0	0.46
	15.0	5.69
	20.0	20.94