



**İSTANBUL ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**İZOBARİK ŞARTLARDA ÇEŞİTLİ İKİLİ VE ÜÇLÜ  
KARIŞIMLARA AİT SIVI-BUHAR DENGE VERİLERİNİN  
BULUNMASI VE KORELASYONU**

**Neslihan SİPAHİ**

**Kimya Mühendisliği Anabilim Dalı  
Temel İşlemler ve Termodinamik Programı**

**Danışman**

**Yrd. Doç. Dr. Metin HASDEMİR**

**Temmuz, 2005**

**İSTANBUL**

## ÖNSÖZ

Yüksek lisans tez çalışmalarım sırasında tüm bilgi ve birikimlerini paylaşan; bana yol gösteren ve benden hiçbir yardımı esirgemeyen değerli danışman hocam Sayın Yrd. Doç. Dr. Metin Hasdemir'e, analiz çalışmalarımında yardımlarını esirgemeyen değerli hocalarım Yrd. Doç. Dr. Mehmet Bilgin ve Yrd. Doç. Dr. Süheyla Çehreli'ye, ders aşamasından tez aşamasına kadar olan süreçte her konuda desteklerini aldığım, Temel İşlemler ve Termodinamik Anabilim Dalı Başkanı Sayın Prof. Dr. Umur Dramur'a, İstanbul Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Dekan Yardımcısı Sayın Prof. Dr. Ahmet Aydın'a, Sayın Prof. Dr. Beşir Tatlı'ya, en içten teşekkürlerimi ve saygılarımı sunarım.

Yüksek lisans tezimin hazırlanışı ve çalışmalarımın her aşamasında her konuda yardımcı olan Temel İşlemler ve Termodinamik Anabilim Dalı'nın değerli akademisyenlerine teşekkürü ayrıca borç bilirim.

Ayrıca tez çalışmalarım sırasında bana her konuda yardımcı olan ve deneyimlerini aktaran değerli arkadaşım Çiğdem Arısoy'a ve tüm eğitim hayatım boyunca desteğini benden esirgemeyen, her koşulda yanımda olan aileme de teşekkür ederim. Çalışmalarımın bundan sonra yapılacak olan çalışmalara yol gösterici ve faydalı olmasını dilerim.

**Temmuz, 2005**

**Neslihan SİPAHİ**

# İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ .....	i
İÇİNDEKİLER .....	ii
ŞEKİL LİSTESİ .....	v
TABLO LİSTESİ .....	vii
SEMBOL LİSTESİ .....	viii
ÖZET .....	x
SUMMARY .....	xi
1. GİRİŞ .....	1
2. GENEL KISIMLAR .....	3
2.1.TERMODİNAMİK, FAZ DENGELERİ TERMODİNAMİĞİ .....	3
2.2.TERMODİNAMİK SİSTEMLER.....	3
2.3. TERMODİNAMİĞİN BİRİNCİ YASASI VE İÇ ENERJİ.....	3
2.3.1. Entalpi.....	4
2.4. TERMODİNAMİĞİN İKİNCİ KANUNU VE ENTROPİ.....	5
2.5. TEMEL TERMODİNAMİK BAĞINTILAR.....	5
2.5.1. Kimyasal Potansiyel (Molar Serbest Entalpi).....	6
2.6. FAZLAR KURALI.....	7
2.7. İDEAL SİSTEMLER.....	9
2.7.1. İdeal Gaz Karışımları.....	9
2.7.2. İdeal Çözeltiler.....	10
Henry Yasası.....	10
Raoult Kanunu.....	11
2.8. İDEAL OLMAYAN SİSTEMLER.....	11
2.8.1. İdeal Olmayan Gaz Karışımları.....	11
2.8.2. İdeal Olmayan Sıvı Karışımları.....	13
2.9. SIVI – BUHAR DENGESİ.....	14

2.9.1. Sıvı – Buhar Denge Diyagramları.....	15
<b>3. MALZEME VE YÖNTEM .....</b>	<b>17</b>
<b>3.1. MODEL DENKLEMLER.....</b>	<b>17</b>
3.1.1. Wilson Modeli.....	18
3.1.2. NRTL Modeli.....	19
3.1.3. UNIQUAC Modeli.....	20
3.1.4. UNIFAC Modeli.....	21
<b>3.2. DENEYSEL YÖNTEM .....</b>	<b>25</b>
3.2.1. Denemelerin Yapılışı.....	25
3.2.2. Gaz Kromatografisinde Analiz Şartları.....	27
3.2.3. Kullanılan Kimyasalların Özellikleri.....	28
<b>4. BULGULAR .....</b>	<b>30</b>
<b>4.1. DENEMELERDEN ELDE EDİLEN VERİLER .....</b>	<b>30</b>
4.1.1. Toluen (1)-asetik asit (2) Sistemi.....	30
4.1.2. Metil etil keton (1)-toluen (2) Sistemi.....	33
4.1.3. 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) Sistemi.....	36
4.1.4. 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) Sistemi.....	38
<b>4.2. MODELLERDEN ELDE EDİLEN VERİLER.....</b>	<b>41</b>
4.2.1. Metil etil keton (1)-toluen (2) Sistemi İçin NRTL Modeli Verileri.....	41
4.2.2. Metil etil keton (1)-toluen (2) Sistemi için Wilson Modeli Verileri.....	42
4.2.3. Metil etil keton (1)-toluen (2) Sistemi için UNIFAC Modeli Verileri.....	43
4.2.4. Metil etil keton (1)-toluen (2) Sistemi için UNIQUAC Modeli Verileri.....	44
4.2.5. 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) Sistemi için Wilson Modeli Verileri.....	46
4.2.6. 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) Sistemi için NRTL Modeli Verileri.....	47
4.2.7. 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) Sistemi için UNIFAC Modeli Verileri.....	48
4.2.8. 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) Sistemi için UNIQUAC Modeli	49

Verileri.....	
4.2.9. Toluen (1)-asetik asit (2) Sistemi için NRTL Modeli Verileri.....	51
4.2.10. Toluen (1)-asetik asit (2) Sistemi için Wilson Modeli Verileri.....	52
4.2.11. Toluen (1)-asetik asit (2) Sistemi için UNIFAC Modeli Verileri.....	53
4.2.12. Toluen (1)-asetik asit (2) Sistemi için UNIQUAC Modeli Verileri.....	54
4.2.13. 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) Sistemi için NRTL Modeli Verileri.....	56
4.2.14. 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) Sistemi için Wilson Modeli Verileri.....	57
4.2.15. 1,2-Diklor etan(1)-asetik asit(2) Sistemi için UNIFAC Modeli Verileri.....	58
4.2.16. 1,2-Diklor etan(1)-asetik asit(2) Sistemi için UNIQUAC Modeli Verileri.....	59
4.3. ÜÇLÜ SİSTEME AİT DENEYSEL VERİLER.....	62
4.3.1. Toluen (1)- 1,2-diklor etan (2)-asetik asit (3) Üçlü Sistemi.....	62
5. TARTIŞMA VE SONUÇ .....	64
6. KAYNAKLAR .....	66
7. EKLER.....	68
EK A.....	68
EK B.....	69
8. ÖZGEÇMİŞ .....	70

## ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 1.1	: Gerçek davranış gösteren maddelerin faz denge verilerinin veriminde ve ekonomisinde önem taşıdığı başlıca alanlar.....	2
Şekil 2.1	:İdeal davranan ikili karışımların T-x, P-x, ve x-y faz diyagramları.....	16
Şekil 2.2	:Minimum azeotrop oluşturan karışımların T-x, P-x, ve x-y faz diyagramları.....	16
Şekil 2.3	:Maksimum azeotrop oluşturan karışımların T-x, P-x, ve x-y faz diyagramları.....	16
Şekil 3.1	: Fishcher – Labodest sıvı – buhar denge cihazı.....	25
Şekil 4.1	: Toluen (1)-asetik asit (2) sistemine ait sıvı-buhar denge eğrisi .....	31
Şekil 4.2	:Toluen (1)-asetik asit (2) sisteminde kaynama noktalarının kompozisyonla değişimi.....	31
Şekil 4.3	:Toluen (1)-asetik asit (2) sisteminde aktivite katsayılarının kompozisyonla değişimi.....	32
Şekil 4.4	: Toluen (1)-asetik asit (2) sistemine ait geçerlilik.....	32
Şekil 4.5	: Metil etil keton (1)-toluen (2) sıvı-buhar denge eğrisi.....	34
Şekil 4.6	:Metil etil keton (1)-toluen (2) sisteminde kaynama noktalarının kompozisyonla değişimi.....	34
Şekil 4.7	:Metil etil keton (1)-toluen (2) sisteminde aktivite katsayılarının kompozisyonla değişimi .....	35
Şekil 4.8	: 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) sıvı-buhar denge eğrisi.....	36
Şekil 4.9	:1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) sisteminde kaynama noktalarının kompozisyonla değişimi.....	37
Şekil 4.10	:1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) sisteminde aktivite katsayılarının kompozisyonla değişimi.....	37
Şekil 4.11	:1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) sistemine ait sıvı-buhar denge eğrisi.....	39
Şekil 4.12	: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) sisteminde sıcaklığın kompozisyonla değişimi.....	39
Şekil 4.13	: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) sisteminde aktivite katsayılarının kompozisyonla değişimi.....	40
Şekil 4.14	: Metil etil keton (1)-toluen (2) sistemi deneysel verilerinin NRTL, Wilson model verileriyle karşılaştırılması.....	45
Şekil 4.15	: Metil etil keton (1)-toluen (2) sistemi deneysel verilerinin UNIQUAC,UNIFAC model verileriyle karşılaştırılması.....	45
Şekil 4.16	: 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) sistemi deneysel verilerinin NRTL, Wilson model verileriyle karşılaştırılması.....	50
Şekil 4.17	: 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) sistemi deneysel verilerinin UNIFAC, UNIQUAC model verileriyle karşılaştırılması.....	50
Şekil 4.18	: Toluen (1)-asetik asit (2) sisteminde deneysel verilerin NRTL, Wilson model verileriyle karşılaştırılması.....	55
Şekil 4.19	: Toluen (1)-asetik asit (2) sisteminde deneysel verilerin UNIFAC, UNIQUAC model verileriyle karşılaştırılması.....	55
Şekil 4.20	: 1,2-Diklor etan(1)-asetik asit(2) sisteminde deneysel verilerin NRTL, Wilson, model verileriyle karşılaştırılması.....	60

<b>Şekil 4.21</b>	: 1,2-Diklor etan(1)-asetik asit(2) sisteminde deneysel verilerin UNIQUAC, UNIFAC model verileriyle karşılaştırılması.....	60
<b>Şekil 4.22</b>	: Toluen (1)- 1, 2-diklor etan (2)-asetik asit (3) üçlü sistemine ait sıvı – buhar denge diyagramı.....	63

## TABLO LİSTESİ

<b>Tablo 3.1</b>	: NRTL, Wilson, Unifac ve Uniquac Metodlarının Karşılaştırılması.....	24
<b>Tablo 3.2</b>	: Metil etil ketona ait fiziksel özellikler.....	28
<b>Tablo 3.3</b>	: Asetik asite ait fiziksel özellikler.....	28
<b>Tablo 3.4</b>	: Toluene ait fiziksel özellikler .....	29
<b>Tablo 3.5</b>	: 1, 2-Diklor etana ait fiziksel özellikler.....	29
<b>Tablo 4.1</b>	: Toluene-asetik asit ikili sistemine ait sıvı- buhar denge verileri (760 mm Hg).....	30
<b>Tablo 4.2</b>	: Metil etil keton (1)-toluene (2) ikili sistemine ait sıvı- buhar denge verileri (760 mm Hg).....	33
<b>Tablo 4.3</b>	: Diklor etan (1)-toluene (2) ikili sistemine ait sıvı- buhar denge verileri (760 mm Hg).....	36
<b>Tablo 4.4</b>	: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) ikili sistemine ait sıvı- buhar denge verileri (760 mm Hg).....	38
<b>Tablo 4.5</b>	: Metil etil keton (1)-toluene (2) sistemi NRTL modeli verileri.....	41
<b>Tablo 4.6</b>	: Metil etil keton (1)-toluene (2) sistemi Wilson modeli verileri.....	42
<b>Tablo 4.7</b>	: Metil etil keton (1)-toluene (2) sistemi Unifac modeli verileri.....	43
<b>Tablo 4.8</b>	: Metil etil keton (1)-toluene (2) sistemi Uniquac modeli verileri.....	44
<b>Tablo 4.9</b>	: 1,2-Diklor etan (1)-toluene (2) Sistemi Wilson modeli verileri.....	46
<b>Tablo 4.10</b>	: 1,2-Diklor etan (1)-toluene (2) Sistemi NRTL modeli verileri.....	47
<b>Tablo 4.11</b>	: 1,2-Diklor etan (1)-toluene (2) sistemi Unifac modeli verileri.....	48
<b>Tablo 4.12</b>	: 1,2-Diklor etan (1)-toluene (2) sistemi Uniquac modeli verileri.....	49
<b>Tablo 4.13</b>	: Toluene (1)-asetik asit (2) sistemi NRTL modeli verileri.....	51
<b>Tablo 4.14</b>	: Toluene (1)-asetik asit (2) sistemi Wilson modeli verileri.....	52
<b>Tablo 4.15</b>	: Toluene (1)-asetik asit (2) sistemi Unifac modeli verileri.....	53
<b>Tablo 4.16</b>	: Toluene (1)-asetik asit (2) sistemi Uniquac modeli verileri.....	54
<b>Tablo 4.17</b>	: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) sistemi NRTL modeli verileri.....	56
<b>Tablo 4.18</b>	: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) sistemi Wilson modeli verileri.....	57
<b>Tablo 4.19</b>	: 1,2-Diklor etan(1)-asetik asit(2) sistemi Unifac modeli verileri.....	58
<b>Tablo 4.20</b>	: 1,2-Dikloreten(1)-Asetik Asit(2) sistemi Uniquac modeli verileri.....	59
<b>Tablo 4.21</b>	: Metil etil keton (1)-toluene (2) sistemi etkileşim parametreleri.....	61
<b>Tablo 4.22</b>	: 1,2-Diklor etan (1)-toluene (2) sistemi etkileşim parametreleri.....	61
<b>Tablo 4.23</b>	: Toluene (1)-asetik asit (2) sistemi etkileşim parametreleri.....	61
<b>Tablo 4.24</b>	: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) sistemi etkileşim parametreleri.....	61
<b>Tablo 4.25</b>	: Toluene (1)- 1, 2-diklor etan (2)-asetik asit (3) üçlü sistemine ait sıvı – buhar denge verileri.....	62



## SEMBOL LİSTESİ

<b>A</b>	: Helmholtz serbest enerjisi
<b>A, B, C</b>	: Antoine sabitleri
<b>a<sub>i</sub></b>	: aktiflik
<b>b</b>	: serbestlik derecesi
<b>C</b>	: dengede bulunan komponent sayısı
<b>DKE</b>	: Diklor etan
<b>E</b>	: enerji
<b>f</b>	: Fugasite
<b>G</b>	: Gibbs serbest enerjisi
<b>G<sup>E</sup></b>	: Gibbs enerjisi fark fonksiyonu
<b>g</b>	: n mol maddenin serbest entalpisi
<b>H</b>	: entalpi
<b>KE</b>	: kinetik enerji
<b>MEK</b>	: Metil etil keton
<b>n</b>	: mol sayısı
<b>P</b>	: basınç
<b>P<sup>o</sup></b>	: standart basınç ( 1 atm)
<b>P<sub>i</sub></b>	: i komponentinin kısmi basıncı
<b>P<sub>i</sub><sup>o</sup></b>	: i komponentinin saf haldeki buhar basıncı
<b>PE</b>	: potansiyel enerji
<b>p</b>	: denge faktörü sayısı
<b>Q</b>	: ısı
<b>Q<sub>r</sub></b>	: reversible proses için ısı
<b>R</b>	: gaz sabiti
<b>r</b>	: moleküler Van Der Waals hacmi
<b>S</b>	: entropi
<b>S<sub>t</sub></b>	: toplam entropi
<b>T</b>	: sıcaklık
<b>U</b>	: iç enerji
<b>U<sub>ij</sub> - U<sub>ij</sub></b>	: Uniquac etkileşim parametreleri
<b>V</b>	: hacim
<b>v<sub>i</sub></b>	: kısmi hacim
<b>V<sub>i</sub></b>	: saf molar hacim
<b>W</b>	: iş
<b>x<sub>i</sub></b>	: i komponentinin sıvı fazdaki mol fraksiyonu
<b>y<sub>i</sub></b>	: i komponentinin buhar fazdaki mol fraksiyonu
<b>Z</b>	: bastırılabilme faktörü
<b>z</b>	: koordinasyon sayısı
<b>Δ</b>	: değişim
<b>μ<sub>i</sub></b>	: i komponentinin kimyasal potansiyeli
<b>μ<sub>ig</sub></b>	: i komponentinin P <sub>i</sub> basıncına bağlı kimyasal potansiyeli
<b>μ<sub>is</sub>*</b>	: sıvı fazdaki x <sub>i</sub> mol kesrine bağlı olan kimyasal potansiyeli
<b>μ<sub>i</sub>*</b>	: aktifliği 1 olan komponentin standart kimyasal potansiyeli
<b>φ</b>	: fugasite katsayısı
<b>φ'</b>	: doymuş fugasite katsayısı

$\phi^{\circ}$	: i komponentinin doymuş fūgasite katsayısı
$\gamma_i$	: aktivite katsayısı
$\gamma_i^C$	: Unifac modelinde i komponentine ait combinatorial aktivite katsayısı
$\gamma_i^R$	: Unifac modelinde i komponentine ait residual aktivite katsayısı
$\phi$	: dengedeki faz sayısı
$a_{ij}, \lambda_{ij}$	: Wilson etkileşim parametreleri
$b_{ij}, \alpha$	: NRTL etkileşim parametreleri

## ÖZET

### İZOBARİK ŞARTLARDA ÇEŞİTLİ İKİLİ VE ÜÇLÜ KARIŞIMLARIN SIVI-BUHAR DENGE VERİLERİNİN BULUNMASI VE KORELASYONU

Sıvı-Buhar denge verileri, kimyasal madde veya karışımlarının belirli koşullardaki davranışları ile ilgili çalışmalarda önemli bir yol gösterici rolünü üstlenmekte olup; destilasyon, adsorpsiyon, absorpsiyon gibi ayırma işlemlerinde kullanılan cihazların dizaynı, etkin olarak işletilmesi ve enerjinin verimli olarak kullanılması açısından önem taşımaktadır.

Deneysel veriler ve modelden elde edilen veriler arasında karşılaştırma yapılarak çeşitli test yöntemleriyle metodun çalışmakta olan kombinasyona uygunluğu belirlenmekte ve söz konusu metodun kullanılabilirliği ile ilgili bir görüşe varılabilmektedir.

Bu çalışmada; çeşitli ikili ve üçlü karışımlara ait sıvı-buhar denge verileri izobarik koşullarda deneysel olarak bulunmuştur. Denemeler Fischer Labodest sıvı-buhar denge cihazında gerçekleştirilmiş, cihazdan alınan sıvı ve buhar faza ait numuneler HP-6890 tipi gaz kromatografi cihazında analize tabi tutulmuş, asit analizleri volumetrik titrasyon metoduyla gerçekleştirilmiştir. Bu aşamada ulaştığımız deneysel veriler, ikili ve üçlü karışımlara ait sıvı faz kompozisyonları, buhar faz kompozisyonları olup; buradan fğasitelerin eşitliği prensibinden yola çıkılarak oluşturulmuş bir Q-Basic yazılımı yardımıyla deneysel aktivite katsayılarına ulaşılmıştır.

Söz konusu karışımlara uygunluğunu test etmiş olduğumuz aktivite katsayısı modelleri; NRTL, UNIQUAC, UNIFAC, WILSON modelleri olup; Chem CAD 5.2 Professional programı yardımıyla bu model denklemlerden elde edilen veriler ile deneysel veriler karşılaştırılmıştır. Çalışmalardaki tüm veri ve sonuçlar uygun tablo ve grafiklerle sunulmuştur.

## SUMMARY

### **DETERMINING LIQUID - VAPOUR EQUILIBRIUM DATA OF DIFFERENT BINARY AND TERNARY MIXTURES AND CORRELATION AT IZOBARIC CONDITIONS**

Liquid-vapour equilibrium data is in great importance in the case of the behaviour of chemical substances and mixtures at different conditions and also it is important at separation operations as distillation, adsorption, absorption; operating them actively, using the energy efficiently.

Comparing between the experimental data and data obtained from the model; the suitability of method to the combination with different test methods is determined and we can have an opinion about the uses of the method.

In this work, liquid-vapour equilibrium data belongs to different binary and ternary mixtures is reached at izobaric conditions experimentally. Experiments are treated by Fischer Labo Dest liquid-vapour equilibrium equipment; samples belong to liquid-vapour phase is analysed by HP-6890 gas chromatographic equipment and acid analyses are determined by the volumetric titration method. Experimental data that is reached in that way is liquid and vapour phase compositions belong to binary and ternary systems; experimental activity coefficients are determined by a Q-Basic computer programme based on the equation of fugacity principle.

Activity coefficient models that we tested the suitability to the mixtures are the models as NRTL, UNIQUAC, UNIFAC, Wilson; the data, obtained from model equation in Chem CAD 5.2 Professional, is compared with the experimental data. All of the data and conclusions are presented by the tables and graphs.

## 1. GİRİŞ

Sıvı-buhar denge verileri, kimyasal madde veya karışımlarının belirli koşullardaki davranışları ile ilgili çalışmalarda önemli bir yol gösterici rolünü üstlenmekte olup; destilasyon, adsorpsiyon, absorpsiyon gibi ayırma işlemlerinde kullanılan cihazların dizaynı, etkin olarak işletilmesi ve enerjinin verimli olarak kullanılması açısından önem taşımaktadır.

Kimya endüstrisinde üretim öncesi saflaştırma amaçlı olarak kullanılan destilasyon, ekstraksiyon, kristalizasyon, absorpsiyon ve adsorpsiyon gibi diğer saflaştırma metodları başta çözücülerin geri kazanılması ve petrol rafinasyonu olmak üzere hemen hemen tüm kimyasal üretim yapılan işletmelerde başvurulmakta olan bir işlemlerdir.

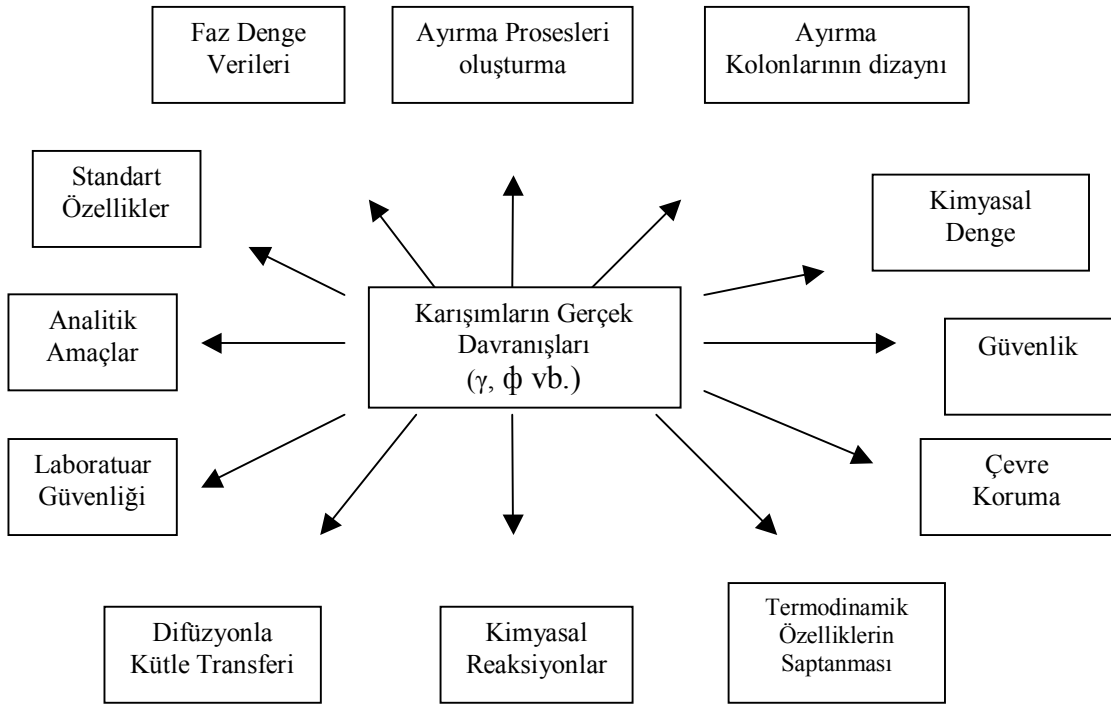
Özellikle gerçek davranış gösteren maddelerden oluşan petrol karışımının ayrılmasında sıvı-buhar denge verilerinin büyük önem taşıdığı görülmektedir. Doğru sıvı-buhar denge verileri ve proses tasarım ve optimizasyon bilgilerinin kombinasyonu ile kimyasal üretimin her alanında önemli değerde ekonomik tasarruf olacağı açıktır.

İzobarik ve izotermal şartlarda farklı maddeler için sıvı-buhar denge verilerine deneysel olarak ulaşmak çoğunlukla zor ve zaman alıcı olduğundan, bazı hesaplama metodlarına ihtiyaç duyulmuştur. Bu gereksinimden yola çıkılarak araştırmacılar Aktivite Katsayısı Modelleri adı altında toplanan çeşitli hesaplama modelleriyle ilgili çalışmalar ileri sürmüşlerdir [1,2,3,4,5,6]. Bu modellerin yardımıyla özellikle sıvı – buhar olmak üzere sıvı – sıvı faz dengelerine ait verilere güvenilir olarak ulaşmak mümkündür. Denge verilerinin bulunmasına ilişkin modeller ilk olarak 1900'lü yılların başında Margules ve Van Laar tarafından geliştirilmiştir [7]. Bu modeller aktivite katsayılarının hesaplanmasında yaygın olarak kullanılan en basit modellerdir. 1975, 1977 yıllarında Fredenslund (UNIFAC); 1969 yılında Derr ve Deal [8]; 1979 yılında Kojima ve Tochigi (ASOG) bu konuda başarıyla uygulanabilen modeller geliştirmişlerdir [9]. Bu modeller diğer gelişmiş aktivite katsayısı modelleri için birer başlangıç noktası olmuşlardır.

Deneysel veriler ve modelden elde edilen veriler arasında karşılaştırma yapılarak çeşitli test yöntemleriyle metodun çalışmakta olan kombinasyona uygunluğu belirlenmekte ve söz konusu metodun kullanılabilirliği ile ilgili bir görüşe varılabilmektedir.

Faz dengesini içeren ayırma proseslerinin çoğu kimya endüstrisinde izotermalden çok izobarik verilere ihtiyaç duymaktadır [10].

Karışımların gerçek davranışlarıyla ilgili verilere ulaşmak yalnızca ayırma proseslerinde değil Şekil 1.1'de gösterildiği gibi bir çok alanda işlemlerin verimli ve ekonomik şekilde yürütülmesine yardımcı olur. Karışımların gerçek davranışları aktivite, fugasite vb. etkileşim parametreleriyle ifade edilmektedir.



Şekil 1.1 : Gerçek davranış gösteren maddelerin faz denge verilerinin veriminde ve ekonomisinde önem taşıdığı başlıca alanlar

## 2. GENEL KISIMLAR

### 2.1. TERMODİNAMİK, FAZ DENGELERİ TERMODİNAMİĞİ

Termodinamik enerjinin bir şekilden başka bir şekle dönüşümünü inceleyen bir bilim dalıdır. Kinetik, potansiyel, iş, ısı enerji türleri olup birbirlerine dönüşüm halinde bulunmaktadır. Fazlar arasındaki kütle aktarımında ve kimyasal tepkimelerdeki denge koşullarını incelemek, bunlardan yola çıkarak kimya sektöründe uygulanan temel işlemlerin verimli olarak gerçekleştirilmesi için somut verilere ulaşmak termodinamiğin temel işlevleri arasında yer almaktadır.

Faz dengeleri termodinamiği; iki veya daha fazla faz denge durumuna ulaştığı andaki termodinamik özellikler, sıcaklık, basınç ve bileşim gibi, arasındaki bağıntıları elde etmek için uğraşır [11].

### 2.2. TERMODİNAMİK SİSTEMLER

Termodinamik bir sistem, en basit şekliyle kimyasal bir tepkimeden veya dış güçlerden etkilenmeyen kütlesi sabit bir akışkan olarak tanımlanır. Böyle bir sistem basınç (P), hacim (V) ve sıcaklık (T) koordinatlarıyla tanımlanır ( P – V – T sistemi). Denge durumunda bu üç koordinatın birbirleriyle olan bağıntısı eğer sistem ideal bir gazdan oluşuyorsa;

$$PV = RT \quad (2.1)$$

olarak verilmektedir. Eğer gaz ideal değilse denklem üzerinde gerçek hal davranışını tanımlayan bazı düzeltmeler yapılmaktadır.

### 2.3. TERMODİNAMİĞİN BİRİNCİ YASASI VE İÇ ENERJİ

Kapalı bir sistem için termodinamiğin birinci yasası matematiksel olarak;

$$\Delta E = Q - W \quad (2.2)$$

şeklinde ifade edilir.  $\Delta E$  sistemin toplam enerji değişimini,  $Q$  sisteme verilen ısıyı,  $W$  ise sistemin yaptığı işi simgelemektedir. Toplam enerji değişimi aşağıdaki şekilde de ifade edilebilir.

$$\Delta E = \Delta(\text{KE}) + \Delta(\text{PE}) + \Delta U \quad (2.3)$$

$\Delta(\text{KE})$  kinetik enerji değişimini,  $\Delta(\text{PE})$  potansiyel enerji değişimini,  $\Delta U$  ise iç enerji değişimini ifade etmektedir. İç enerji, bir cismin sıcaklık, basınç ve bileşimiyle belirlenen içsel haline dayanır ve mikroskopik anlamda moleküllerin ve atomların kinetik ve potansiyel enerjilerinden oluşur. Mutlak değeri hesaplanamadığından değişimi şeklinde termodinamikte yer alır. (2.2) ve (2.3) denklemleriyle;

$$\Delta(\text{KE}) + \Delta(\text{PE}) + \Delta U = Q - W \quad (2.4)$$

denkleminde ulaşılır. Kapalı sistemlerde kinetik ve potansiyel enerji değişimleri ihmal edilebileceğinden sadece iç enerji değişiminin alınan ısı ve yapılan iş arasındaki mutlak farka eşit olduğu sonucu ortaya konulmaktadır.

$$\Delta U = Q - W \quad (2.5)$$

$n$  mol madde ve sonsuz küçük bir değişim için;

$$d(nU) = \delta Q - \delta W \quad (2.6)$$

### 2.3.1. Entalpi

En basit termodinamik fonksiyon olan entalpi matematiksel olarak ;

$$H = U + PV \quad (2.7)$$

olarak ifade edilir. Sabit basınçta reversible bir proses için kapalı bir P-V-T sisteminde

$$dH = dU + PdV \quad (2.8)$$

geçerlidir.

$$\Delta W = PdV \quad (2.9)$$

$$dU = \delta Q - \delta W \quad (2.10)$$



(2.8), (2.9) ve (2.10)'dan yola çıkılarak

$$\Delta H = Q \quad (2.11)$$

eşitliğine ulaşılır. Sabit basınçta sistemin aldığı yada verdiği ısı miktarı entalpi değişimine eşit olur.

#### 2.4. TERMODİNAMİĞİN İKİNCİ KANUNU VE ENTROPİ

Bir sistemin sıcaklığı sabit iken ısı verildiğinde oluşan değişiklikler entropi olarak ifade edilir. Reversible bir proses için;

$$dS = \delta Q_r / T \quad (2.12)$$

olup Bir sistem ile çevresinin entropilerindeki değişimlerin toplamı pozitifdir ve reversible duruma yaklaştıkça sıfıra yaklaşır. Bu, termodinamiğin ikinci kanunu olarak adlandırılır.

$$\Delta S_t \geq 0 \quad (2.13)$$

#### 2.5. TEMEL TERMODİNAMİK BAĞINTILAR

Termodinamiğin birinci ve ikinci yasalarının birleştirilmesiyle yeni termodinamik bağıntılar türetilmiştir. Serbest iç enerji (Helmholtz, A) ve serbest entalpi (Gibbs, G) olarak tanımlanan bu temel bağıntılar ile olayların kendiliğinden gerçekleşme eğilimi için gerekli bilgilere daha basit şekilde ulaşılabilmektedir. Serbest iç enerji fonksiyonu; iç enerji ve entropiye, serbest entalpi fonksiyonu ise entalpi ve entropiye bağlıdır. Serbest iç enerji fonksiyonu sabit hacim ve sabit sıcaklıkta yürüyen olaylar, serbest entalpi fonksiyonu ise sabit basınç ve sabit sıcaklıkta yürüyen olaylar için tanımlanmıştır. Gibbs serbest enerjisi,

$$nG = nH - T(nS) \quad (2.14)$$

Helmholtz serbest enerjisi ise,

$$nA = nU - T(nS) \quad (2.15)$$

şeklinde tanımlanır.

Sonsuz küçük değişimler ve 1 mol madde için aşağıdaki ifadeler elde edilir.

$$dH = dU + PdV + VdP \quad (2.16)$$

$$dG = dH - TdS - SdT \quad (2.17)$$

$$dA = dU - TdS - SdT \quad (2.18)$$

Kapalı bir sistemin temel denklemini olan;

$$dU = TdS - PdV \quad (2.19)$$

ile (2.16), (2.17), (2.18) denklemlerinin ayrı ayrı birleştirilmesinden;

$$dH = TdS + VdP \quad (2.20)$$

$$dG = VdP - SdT \quad (2.21)$$

$$dA = -PdV - SdT \quad (2.22)$$

denklemleri elde edilir.

Bütün bu temel bağıntılar kapalı sistemler için geçerli olup, bu termodinamik özelliklerden, özellikle Gibbs enerjisine ait denklemlerden yola çıkılarak, ideal olmayan sistemlere ait düzeltme katsayılarına ulaşılabilmektedir.

### 2.5.1. Kimyasal Potansiyel (Molar Serbest Entalpi)

Molar serbest entalpi fonksiyonuna kimyasal potansiyel adı verilir. Saf bir maddenin n molünün serbest entalpisi g, bir molünün serbest entalpisi G,  $\mu$  ise kimyasal potansiyel olmak üzere;

$$\mu = G = g/n \quad (2.23)$$

$$\mu = G = f(T,P), \quad d\mu = (\delta\mu/\delta T)_P dT + (\delta\mu/\delta P)_T dP = - SdT + VdP \quad (2.24)$$

şeklinde yazılabilir. Sabit sıcaklıkta  $dT = 0$  olacağından saf haldeki ideal bir gaz için;

$$d\mu = VdP = (RT/P)dP \quad (2.25)$$

eşitliği yazılabilir. Basınç, standart değeri olan  $P^\circ = 1 \text{ atm}$ 'den bir  $P$  değerine değişirken kimyasal potansiyelin de  $\mu^\circ$  'dan herhangi bir  $\mu$  değerine geçeceği düşünülerek integral alındığında,

$$\mu - \mu^\circ = RT \ln(P/P^\circ) \quad (2.26)$$

eşitliği bulunur.

Bir ideal gaz karışımında bulunan herhangi bir  $i$  bileşeni için kimyasal potansiyel son bağıntıdaki  $P$  basıncı yerine  $P_i = P^\circ y_i$  şeklinde tanımlanan kısmi basınç alınarak,

$$\mu_i = \mu^\circ + RT \ln(P_i/P^\circ) \quad (2.27)$$

$$\mu_i = \mu^\circ + RT \ln(P^\circ y_i/P^\circ) = \mu^\circ + RT \ln y_i \quad (2.28)$$

eşitlikleri yazılabilir. (2.24), (2.26) ve (2.28) bağıntılarından yola çıkılarak, kimyasal potansiyelin sıcaklık yükselirken düştüğü, basınç ve bileşim yükselirken yükseldiği sonucuna varılmaktadır.

Kimyasal potansiyel sonuç olarak madde akımının yürütücü bir kuvveti olarak ortaya çıkmaktadır. Kendiliğinden akış, kimyasal potansiyelin düşük olduğu yerden yüksek olduğu yere doğru olacaktır. Gazların basınçlarının yada bir karışımındaki konsantrasyonlarının büyük olduğu yerden küçük olduğu yere kendiliğinden olan akışı sırasında kimyasal potansiyel değişimi eksi işaretli, evrendeki entropi değişimi ise artı işaretli olmaktadır [12].

## 2.6. FAZLAR KURALI

Denge halinde bulunan bir sistemin, denge halini koruyabilmesi için önceden saptanması gereken denge faktör sayısını bildiren fazlar kuralı J. Williard Gibbs tarafından, 1876'da ortaya atılmıştır. Bu kural aşağıdaki denklemle ifade edilir.

$$b = C + p - \phi \quad (2.29)$$

Bu bağıntı,  $\phi$  faza ayrılmış  $C$  komponentli dengedeki bir sistemin halinin belli olabilmesi için gereken faktör sayısını, yani varyansı veren fazlar kuralının bağıntısıdır.

Burada  $b$ , sistemi matematiksel anlamda doğru ifade edebilmek için tanımlanması gereken değişken sayısını yani serbestlik derecesini;  $C$ , dengede bulunan komponent sayısını;  $\phi$ , denge durumundaki faz sayısını;  $p$  ise denge faktörü sayısını (sıcaklık, basınç vb.) ifade eder.

Kendi içerisinde uniform nitelik taşıyan, heterojen bir sistemin öteki kısımlarından kesin sınır yüzeyi ile ayrılmış bulunan kısma faz adı verilir. Komponent, dengedeki sistemi oluşturmak için birarada bulundurulması gereken minimum bileşen sayısına denir.

Denge faktörlerinin temperatör ve basınç olduğu hallerde  $p = 2$ 'dir.

$$b = C + 2 - \phi \quad (2.30)$$

Varyanssız sistemlerde ( $b = 0$ );

$$0 = C + 2 - \phi \quad (2.31)$$

$$\phi = C + 2 \quad (2.32)$$

Sistemdeki faz sayısı komponent sayısının iki fazlasına eşitse sistem varyanssızdır, sistemin hali tamamiyle bellidir. Sistemin sıcaklık ve basıncının sabit değerleri vardır.

Bir varyanslı sistemlerde ( $b = 1$ );

$$1 = C + 2 - \phi \quad (2.33)$$

$$\phi = C + 1 \quad (2.34)$$

Sistemdeki faz sayısı komponent sayısından bir fazla ise sistemin denge halinin belli olabilmesi için önceden tek bir denge faktörünün bilinmesi gereklidir.

İki varyanslı sistemlerde ( $b = 2$ );

$$2 = C + 2 - \phi \quad (2.35)$$

$$\phi = C \quad (2.36)$$

Faz sayısı komponent sayısına eşitse, sistemin denge halinin belli olması için 2 faktörün bilinmesi gereklidir.

Homojen fazlarda, miktara bağlı olmayan sıcaklık, basınç, yoğunluk ve bileşimler her tarafta aynıdır. Denge, iki veya daha fazla sayıdaki fazın birbirlerini etkilemediği durum olarak tanımlanır. Herhangi iki fazın denge verilerinden yararlanılarak diğer özelliklerinin saptanması mümkündür.

## 2.7. İDEAL SİSTEMLER

İdeal sistem kavramı bir varsayımdır. Molekülleri arasında hiçbir etkileşim olmayan sistemler gerçekte var olmamakla birlikte, basınçları çok düşürülerek sıfıra yaklaştırılan gaz karışımları ideal sistem varsayımına uygun bir örnek olarak kabul edilir. Basınç düşerken moleküller arasındaki etkileşimler azalarak ortadan kalktığı ve çok artan gaz hacimleri yanında moleküllerin öz hacimleri ihmal edilebilecek boyutta kaldığı için gazlar ideale yaklaşmaktadır. İdeal sistem bir kabul olup, gerçek sistemlere ait termodinamik özelliklere geçişte bir araç olarak kullanılmaktadır [12].

### 2.7.1. İdeal Gaz Karışımları

İdeal gaz karışımları saf ideal gazlar gibi davranırlar. Toplam basıncı  $P$ , toplam hacmi  $V$  ve sıcaklığı  $T$  olan bir karışım ve karışımdaki her bileşen için ideal gaz denklemi;

$$PV = nRT \quad (2.37)$$

$$P_i V = n_i RT \quad (2.38)$$

$$P v_i = n_i RT \quad (2.39)$$

Karışımla aynı sıcaklıkta olmak üzere; yalnızca bir  $i$  bileşeninin  $n_i$  molü konularak hazırlanan bir sistemin hacmi karışımın hacmine eşitlendiğinde gözlenen  $P_i$  basıncına kısmi basınç, aynı sistem üzerine karışımın toplam basıncı uygulandığında gözlenen  $v_i$  hacmine kısmi hacim adı verilir. (2.37), (2.38), (2.39) denklemlerinin taraf tarafa oranlanmasıyla  $y_i$  ile simgelenen gaz fazındaki mol kesri için;

$$y_i = \frac{n_i}{n} = \frac{v_i}{V} = \frac{P_i}{P} \quad (2.40)$$

$$P_i = P y_i \quad (2.41)$$

$$\sum P_i = \sum P y_i = P \sum y_i = P \quad (2.42)$$

(2.42) ifadesi Dalton'un Kısmi Basınçlar Kanunu'nun matematiksel bir ifadesidir. Bir gaz karışımının toplam basıncı, karışımı oluşturan gazların kısmi basınçlarının toplamına eşittir.

### 2.7.2. İdeal Çözeltiler

Aynı moleküller ile farklı moleküller arasındaki etkileşmelerin hemen hemen aynı olduğu homojen sistemlere ideal çözeltiler adı verilir. Çözücü yanında çözünenin çok az alınmasıyla hazırlanan seyreltik çözeltiler ideal karışım gibi davranırlar. Bir ideal sıvı karışımındaki  $i$  bileşeni için kimyasal potansiyel;

$$\mu_i = \mu^{\circ} + RT \ln x_i \quad (2.43)$$

şeklinde tanımlanabilir. Sıcaklık ve basınç standart değerlerinde iken  $\mu^{\circ}$  niceliğine saf  $i$  bileşeni için standart kimyasal potansiyel olarak adlandırılır.

Aynı ve farklı moleküller arasında çekme yada itme gibi etkileşimler aynı olduğundan ideal karışımların hazırlanması sırasında hacim değişimi ve ısı alışverişi gözlenmez. Hacim, entalpi ve iç enerji değişimleri sıfır olduğu halde; iş alışverişi, serbest entalpi, serbest iç enerji ve entropi değişimleri sıfırdan farklıdır. Sabit basınç ve sıcaklıkta kendiliğinden olan homojen bir karışma sırasında karışımın serbest entalpi değişimi eksi işaret; entropi değişimi ise artan düzensizlik nedeniyle artı işaretli olacaktır. Karışımın bileşenlerine ayrılması sırasında entropi değişimi eksi işaretli olurken, serbest iç enerji, serbest entalpi ve iş alışverişinin işareti artı olur.

#### *Henry Yasası*

Sabit sıcaklık ve basınçtaki bir gaz karışımı yada kendi buharı ile dengede olan bir sıvı fazda;  $i$  bileşeninin  $P_i$  basıncına bağlı olan kimyasal potansiyeli  $\mu_{ig}$ , sıvı fazdaki  $x_i$  mol kesrine bağlı olan kimyasal potansiyeli de  $\mu_{is}$  olmak üzere;

$$\mu_{ig} = \mu_{is} \quad (2.44)$$

$$\mu_{ig}^{\circ} + RT \ln(P_i/P^{\circ}) = \mu_{is}^{\circ} + RT \ln x_i \quad (2.45)$$

$$\ln(P_i/P^{\circ}x_i) = (\mu_{is}^{\circ} - \mu_{ig}^{\circ})/RT = -\Delta G_i/RT \text{ (sabit)} \quad (2.46)$$

$$P_i/P^{\circ}x_i = K_i \quad (2.47)$$

Sonucuna varılır. Buna göre; sıcaklık sabit kalmak koşulu ile bir bileşenin sıvı fazdaki  $x_i$  mol kesri gaz yada buhar fazındaki kısmi basıncı ile doğru orantılıdır.

### *Raoult Kanunu*

Buharı ile dengede olan saf bir madde için  $x_i = 1$  ve  $P_i$  kısmi basıncı da  $P_i^{\circ}$  olacağından,

$$\ln(P_i^{\circ}/P^{\circ}) = (\mu_{is}^{\circ} - \mu_{ib}^{\circ})/RT \quad (2.48)$$

$$\ln(P_i/P^{\circ}x_i) = \ln(P_i^{\circ}/P^{\circ}) \quad (2.49)$$

$$P_i = P_i^{\circ}x_i \quad (2.50)$$

eşitliğine ulaşılabilir. Sıvı ve buhar fazları ideal olan bir karışımda sıcaklık sabit kalmak koşulu ile bir  $i$  bileşenin buhar fazındaki  $P_i$  kısmi basıncı sıvı fazdaki  $x_i$  mol kesri ile doğru orantılıdır.

## **2.8. İDEAL OLMAYAN SİSTEMLER**

İdeal olmayan (gerçek) sistemlerde moleküller arasında gerçekte bulunan etkileşim kuvvetleri ihmal edilmemektedir. Aynı tanecikler arasındaki etkileşimler ile ayrı tanecikler arasındaki etkileşimlerin farklı olmasından dolayı karışımlarda ideal durumdan sapmalar söz konusu olmaktadır. Bu sapmaların bir ölçüsü ve gerçek davranışın birer ifadesi olarak fügenite ve aktivite tanımlarına gereksinim duyulmuştur.

### **2.8.1. İdeal Olmayan Gaz Karışımları**

Basınçları düşük ve sıcaklıkları yüksek olan gaz karışımlarına ideal gaz yasaları büyük bir doğrulukla uygulanmaktadır. Yükselen basınç ve düşük sıcaklıkla birlikte

moleküller arasındaki etkileşmeler artmakta ve gaz karışımları ideallikten uzaklaşmaktadırlar.

İdeal gazlar için türetilen termodinamik bağıntıların gerçek gazlar için de geçerli olması için basınç yerine alınması gereken yeni hal değişkenine füğasite adı verilir. Basınç yerine füğasite alınarak gerçek gazlara uyarlanan bağıntılar;

$$dG = VdP = RT \ln f \quad (2.51)$$

$$\Delta G = w = RT \ln(f_2/f_1) \quad (2.52)$$

şeklinde yazılabilir.

Saf bir gazın kimyasal potansiyelinin basınca bağıllığı için;  $P^\circ$  değeri 1 atm olan standart basınç,  $\mu^\circ$  ise bu basınçtaki standart kimyasal potansiyel olmak üzere;

$$\mu = \mu^\circ + RT \ln (P/P^\circ) \quad (2.53)$$

denklemini yazılmaktadır.

(2.53) denkleminde yola çıkılarak hesaplanan P basıncına termodinamik basınç; gerçek gazların termodinamik basıncına füğasite adı verilir.

Bu tanıma göre gerçek gazların kimyasal potansiyeli için;

$$\mu = \mu^\circ + RT \ln (f/P^\circ) \quad (2.54)$$

Füğasite ile basınç arasındaki ilişki;

$$\phi = f/P \quad (2.55)$$

şeklinde yazılabilir. Burada  $\phi$  füğasite katsayısı olup, moleküller arasındaki etkileşim şekli ve ideallikten sapma durumunu ifade eder.  $\phi < 1$  ise moleküller arası çekim kuvvetleri,  $\phi > 1$  ise moleküller arası itme kuvvetleri etkindir.  $\phi = 1$  olduğunda gaz idealdir.



İdeal gaz varsayımından sapmanın bir başka ölçüsü de bastırılabilirlik faktörü gerçek gazlar için PV çarpımının ideal gazların aynı sıcaklıktaki (PV)<sub>i</sub> çarpımına oranı olarak tanımlanır.

$$Z = \frac{PV}{(PV)_i} = \frac{PV}{nRT} \quad (2.56)$$

Basınç sıfıra giderken bu oran bütün gazlarda bire yaklaşır. Düşük basınçlarda genellikle  $Z < 1$  olması çekme kuvvetlerinin etkinliğinden, yüksek basınçlarda ise genellikle  $Z > 1$  olması itme kuvvetlerinin etkinliğinden kaynaklanmaktadır.

### 2.8.2. İdeal Olmayan Sıvı Karışımları

Aynı tanecikler arasındaki etkileşimler ile ayrı tanecikler arasındaki etkileşimlerin farklı olmasından dolayı ideal karışımdan beklenen özellikleri göstermeyen karışımlara gerçek karışımlar adı verilir.

İdeal sıvı karışımlarda türetilen termodinamik bağıntıların gerçek karışımlar için de geçerli olabilmesi için konsantrasyon yerine alınması gereken yeni bir hal değişkenine ihtiyaç vardır. (2.43) denkleminde yola çıkılarak elde edilen;

$$x_i = \exp[(\mu_i - \mu_i^*)/RT] \quad (2.57)$$

denkleminde hesaplanan  $x_i$  termodinamik derişimdir. Gerçek karışımlarda kütleli ölçümlerden bulunan derişimden farklı olan  $\exp[(\mu_i - \mu_i^*)/RT]$  termodinamik derişimi aktiflik olarak tanımlanır ve  $a_i$  şeklinde simgelenir. Gerçek gaz karışımları için (2.57) denkleminde  $x_i$  yerine  $a_i$  yazıldığında ;

$$a_i = \exp[(\mu_i - \mu_i^*)/RT] \quad (2.58)$$

Burada  $\mu_i^*$  terimi karışımdaki aktifliği 1 olan bir bileşenin belli sıcaklık ve basınçtaki standart kimyasal potansiyelini göstermektedir.

Gerçek karışımlardaki bir bileşen için, termodinamik ölçümlerden hesaplanan  $a_i$  aktifliğinin kütleli ölçümlerden hesaplanan  $x_i$  mol kesrine oranı;

$$\gamma_i = a_i/x_i \quad (2.59)$$

şeklinde simgelenir ve aktivite katsayısı olarak adlandırılır. İdeal karışımlarda aktivite katsayısı 1 olur. Bileşenlerinin aktiflik katsayısı 1'e yaklaşan karışımlar ideale yaklaşmış olur.

Aktivite katsayısı idealden sapmanın bir ölçüsüdür. Raoult Kanununda da gerçek karışımlar için gereken düzeltmeler yapıldığında;

$$P_i = \gamma_i \cdot x_i \cdot P_i^\circ \quad (2.60)$$

denklemini elde edilmektedir.

## 2.9. SIVI – BUHAR DENGESİ

Faz dengeleri hesaplamaları için başlangıç noktası bir sistemde her bileşenin fūgasitesinin dengedeki her evre için aynı olması gerektiğidir. Bir i bileşeni için;

$$f_{i(v)}' = f_{i(L)}' \quad (2.61)$$

denkliği yazılabilir. Buradan;

$$f_{i(v)}' = y_i \cdot \phi' \cdot P \quad (2.62)$$

$$f_{i(L)}' = x_i \cdot \gamma_i \cdot P_i^\circ \cdot \phi^\circ \quad (2.63)$$

$$y_i \cdot \phi' \cdot P = x_i \cdot \gamma_i \cdot P_i^\circ \cdot \phi^\circ \quad (2.64)$$

denklemine ulaşılabilir.

$y_i$  : i bileşeninin buhar fazındaki mol kesri

$\phi'$  : Fūgasite katsayısı

$P$  : Karışımın toplam basıncı

$x_i$  : i bileşeninin sıvı fazdaki mol kesri

$P_i^\circ$  : i bileşeninin saf haldeki doymuş buhar basıncı

$\phi^\circ$  : i bileşeninin fūgasite katsayısı

$\gamma_i$  : Aktivite katsayısı

(2.64) denklemi sıvı – buhar faz dengesi hesaplamalarında temel teşkil eder. Verilen bir T sıcaklığında bir i bileşenin saf haldeki buhar basıncı Antoine denklemi yardımıyla hesaplanmaktadır.

$$\text{Log } P = A - B/(C+T) \quad (2.65)$$

Burada A, B, C sabit sayılar olup bileşenlere ve sıcaklık aralıklarına göre ayrı ayrı tayin edilirler. P, atmosfer cinsinden basınç ; T ise Kelvin yada °C cinsinden sıcaklıktır.

$x_i$  ,  $y_i$  deneysel metodlarla tayin edilmekte; fūgasite katsayıları için ise buhar fazını tanımlayan çeşitli hal denklemlerinin elde olduğu kabul edilmektedir. Buradan yola çıkılarak sıvı – buhar denge verilerine ulaşılabilir.

### 2.9.1. Sıvı – Buhar Denge Diyagramları

Denge halinde bulunan sıvı ve buhar fazları ifade eden sıvı – buhar denge diyagramları, 2 bileşenli sistemlerde 3 bağımsız değişkenden (basınç, kompozisyon, sıcaklık) birinin sabit tutulmasıyla çizilir.

Denge diyagramları, denge verilerinin elde edildiği deneysel şartlara göre sabit basınçta ve sabit sıcaklıkta olmak üzere iki şekilde ifade edilebilir. Grafikler sabit sıcaklıkta kompozisyon ile basınç, sabit basınçta da kompozisyon ile sıcaklık arasında çizilir.

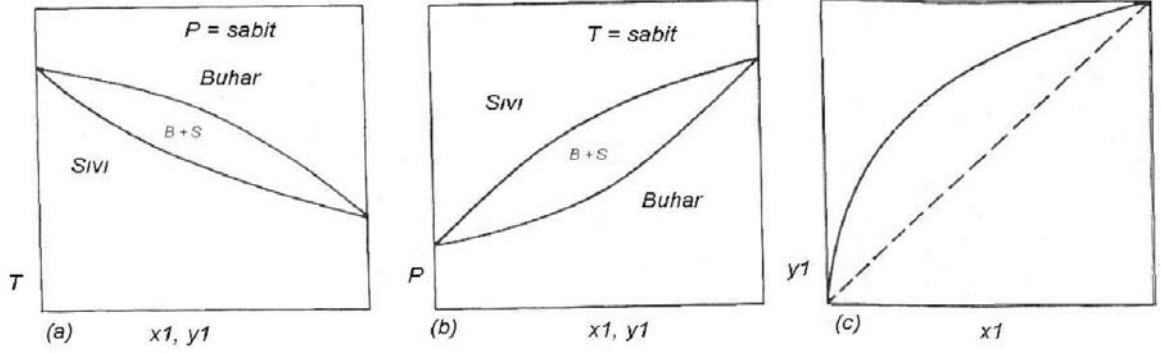
Sabit basınçta sıcaklık ile kompozisyon arasında çizilen grafiklere "kaynama noktası diyagramları" denir. Ayrıca her iki durumda da ikili sistemlere ait sıvı faz ile buhar faz kompozisyonları arasında bir grafik çizilir ve bu grafiğe "sıvı – buhar denge eğrisi" adı verilir.

Destilasyon işlemlerinde gerekli temel bilgi, destilasyon işlemi uygulanacak karışıma ait buhar ve sıvı faz arasındaki denge eğrilerinden elde edilmektedir.

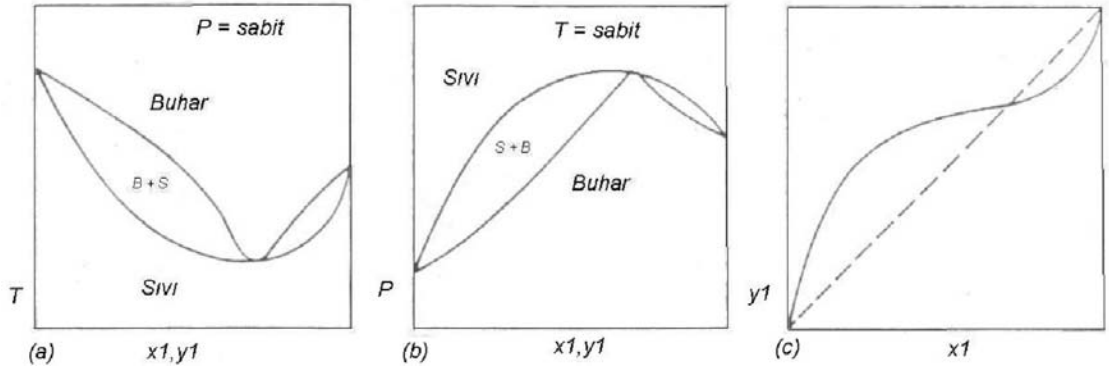
İkili karışımların Raoult kanunundan pozitif veya negatif sapmasına ve Raoult kanununa uyması durumunda 3 değişik durum ortaya çıkar.

Raoult kanununa uyan durum ideal durum olarak nitelendirilir. Karışım şekil 2.1-a, b, c de olduğu gibi diyagramlar verir. Diğer hallerde ise denge eğrisi üzerinde belli

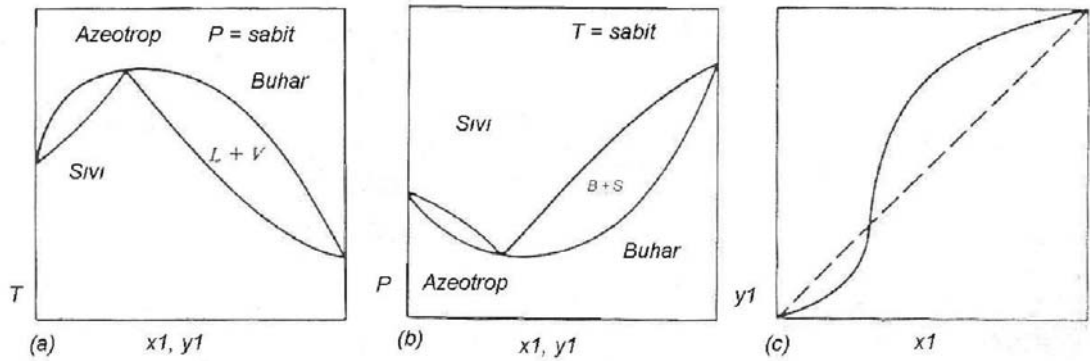
sıcaklıklarda buhar ve sıvı faz kompozisyonlarının birbirine eşit olduğu görülmektedir. Böyle karışımlar "azeotropik karışımlar" adını alıp; Raoult kanunundan sapmalarına göre minimum yada maksimum azeotrop teşkil ederler. Şekil 2.2-a, b, c ve şekil 2.3-a, b,c'de bu durumdaki karışımlara ait grafikler gösterilmektedir [13].



Şekil 2.1 : İdeal davranan ikili karışımların T-x, P-x, ve x-y faz diyagramları



Şekil 2.2 : Minimum azeotrop oluşturan karışımların T-x, P-x, ve x-y faz diyagramları



Şekil 2.3 : Maksimum azeotrop oluşturan karışımların T-x, P-x, ve x-y faz diyagramları

### 3. MALZEME VE YÖNTEM

#### 3.1. MODEL DENKLEMLER

İdeal sistemlerde sıvı-buhar denge verileri, sistemin toplam basıncı ve bileşenlerin doygunluk basınçları üzerinden hesaplanabilir. Ancak sistem gerçek davranış sergilediğinde verilere ulaşmak için aktivite katsayısının hesaplanması gereklidir. Sıvı-buhar dengesinde aktivite katsayılarının hesaplanması için gerçek davranışı ifade eden amprik bağıntılar oluşturulmuştur. Bu denklemler model denklemler adını alır.

Sıvı-buhar denge verilerinin bulunmasına ilişkin literatürde çeşitli modeller ileri sürülmüştür [14,15,16,17]. Bunlardan hangileri gerçek davranışı daha iyi ifade ediyorsa o modelin kullanılması tercih edilir. Bu modeller sıvı fazdaki Gibbs enerjisi fark fonksiyonundan türetilen farklı yapıdaki matematiksel fonksiyonlardır. Denklemlerdeki katsayılar amprik olarak belirlenir. Kullanılan terim sayısı karışımın molekül karmaşıklığına ve eldeki verilerin nitelik ve niceliğine bağlıdır.

Denge verilerinin bulunmasına ilişkin modeller 1900'lü yılların başında Margules ve Van Laar tarafından geliştirilmiştir [7]. Bu modeller aktivite katsayılarının hesaplanmasında yaygın olarak kullanılan en basit modeller olup; basit bir sıvı karışımı için molekülleri aynı boyut, şekil ve kimyasal özellikteki karışımlar için kullanılır.

Daha sonraki yıllarda sıvıların moleküler termodinamiği alanındaki birçok modern teorik gelişme moleküllerin büyüklük ve biçimleriyle birlikte moleküller aralarındaki etkileşimleri esasına dayalı olarak gerçekleşmiştir. 1964 yılında G.M Wilson tarafından önerilen modelin (Wilson) sıvı-buhar denge verilerine ulaşmadaki başarısı, alternatif modellerin de gelişmesine katkıda bulunmuştur. 1968 yılında Renon ve Prausnitz [1], NRTL (Non Random Two Liquid) modelini; 1975 yılında Abrams ve Prausnitz [2], UNIQUAC (UNİversal QUAsi Chemical) modelini ileri sürmüşlerdir. Aynı yıl Fredenslund, Jones ve Prausnitz [3] tarafından UNIQUAC modeli esas alınarak UNIFAC (UNİquac Functional group Activity Coefficients) modeli geliştirilmiştir. Günümüze yaklaşıldıkça bu modellerden bir kısmı bazı özel durumlar için modifiye edilerek kullanılmışlardır [18, 19, 20, 21].

### 3.1.1. Wilson Modeli

Çok bileşenli bir sistem için Wilson, Gibbs enerjisi fark fonksiyonu için şu ifadeyi vermiştir.

$$\frac{G^E}{RT} = - \sum_{i=1}^m x_i \ln \left( \sum_{j=1}^m \Lambda_{ij} x_j \right) \quad (3.1)$$

$\Lambda_{ij}$  parametresi;

$$\Lambda_{ij} = \frac{V_j}{V_i} \exp \left( - \frac{(\lambda_{ij} - \lambda_{ii})}{RT} \right) \quad (3.2)$$

$V_i$ ,  $i$  bileşeninin saf molar hacmini,  $\lambda_{ij}$  ve  $\lambda_{ii}$  ise alt simgelerle belirlenen moleküller arasındaki etkileşme enerjilerini göstermektedir.

$$\ln \gamma_i = 1 - \ln \left( \sum_{j=1}^m \Lambda_{ij} x_j \right) - \sum_{k=1}^m \left( \frac{\Lambda_{ki} x_i}{\sum_{j=1}^m \Lambda_{ij} x_j} \right) \quad (3.3)$$

İki bileşenli bir sistemde her bileşen için (3.3) denklemi aşağıdaki şekilde yazılabilir.

$$\ln \gamma_1 = - \ln(x_1 + \Lambda_{12} x_2) + x_2 \left( \frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12} x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{x_2 + \Lambda_{21} x_1} \right) \quad (3.4)$$

$$\ln \gamma_2 = -\ln(x_2 + \Lambda_{21} x_1) + x_2 \left( \frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12} x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{x_2 + \Lambda_{21} x_1} \right) \quad (3.5)$$

Wilson modeli sıcaklık aralığı çok büyük olmamak üzere, sıcaklıktan bağımsız olarak düşünülebilir. Başka bir deyişle bir sıcaklıkta elde edilen parametreler başka sıcaklık için de kullanışlı olabilmektedir.

Başka bir avantaj olarak da çok bileşenli sistemlerde de iki bileşenli sistemlerin parametrelerinin kullanılabilir olmasıdır.

Modelin dezavantajı olarak kısmi olarak karışan sıvılar için denklemin uygun olmamasını ve aktivite katsayılarının maksimum veya minimum değer aldığı durumlarda Wilson parametrelerinin hesaplanamamasını alabiliriz.

### 3.1.2. NRTL Modeli

Wilson denkleminin dezavantajları, Renon ve Prausnitz'i daha kullanışlı ve her sisteme uyum sağlayabilecek yeni bir model geliştirmeye yöneltmiştir. Wilson, Van Laar ve Heil modellerinin kombinasyonuyla NRTL adı verilen yeni bir denklem oluşturulmuştur.

$$\frac{G^E}{RT} = x_1 x_2 \left( \frac{\tau_{21} G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} + \frac{\tau_{12} G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right) \quad (3.6)$$

$$\tau_{12} = \Delta g_{12} / RT \quad (3.7)$$

$$\tau_{21} = \Delta g_{21} / RT \quad (3.8)$$

$$\ln g_{12} = -\alpha_{12} \tau_{12} \quad (3.9)$$

$$\ln g_{21} = -\alpha_{12} \tau_{21} \quad (3.10)$$

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 \left( \tau_{21} \left( \frac{G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} \right)^2 + \frac{\tau_{12} G_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right) \quad (3.11)$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 \left( \tau_{12} \left( \frac{G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right)^2 + \frac{\tau_{21} G_{21}}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} \right) \quad (3.12)$$

Burada,

$$\Delta g_{12} = g_{12} - g_{22}$$

$$\Delta g_{21} = g_{21} - g_{11}$$

olup, tayin edilmesi gereken parametreler;  $\Delta g_{12}$ ,  $\Delta g_{21}$ ,  $\alpha_{12}$  'dir. Üç parametrelili bir model denklem olduğundan sistemlere daha iyi uyum sağlamak ve çok bileşenli sistemlerde iyi sonuçlar vermektedir.

### 3.1.3. UNIQUAC Modeli

UNIQUAC modeli aktivite katsayısını iki kısımda ifade eder. Birinci kısım ( $\gamma_i^C$ ) moleküllerin büyüklükleri ve biçimleri arasındaki farklılaşmayı ifade eder. İkinci kısım ise ( $\gamma_i^R$ ) enerji etkileşmelerini ifade eder.

UNIQUAC modeli daha sonraları su ve alkolleri de kapsayacak şekilde modifiye edilmiştir. Bu düzeltme sonucunda yüzey etkileşim parametresi de modele alınmıştır [5].

Çok bileşenli bir sistemde herhangi bir  $i$  bileşenin aktivite katsayısı UNIQUAC denklemiyle aşağıdaki şekillerde yazılır.

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R \quad (3.13)$$

$$\ln \gamma_i^C = \ln (\phi_i/x_i) + (z/2)q_i \ln (\theta_i/\phi_i) + l_i - (\phi_i/x_i) \left( \sum_{j=1}^m x_j l_j \right) \quad (3.14)$$



$$\ln \gamma_i^R = -q'_i \ln \left( \sum_{j=1}^m \theta'_j \tau_{ij} \right) + q'_i - q'_i \sum_{j=1}^m \frac{\theta'_j - \tau_{ij}}{\left( \sum_{k=1}^m \theta'_k \tau_{kj} \right)} \quad (3.15)$$

Burada kullanılan parametreler;

$$\theta_i = q_i x_i / \sum_{j=1}^m q_j x_j \quad (3.16)$$

$$\phi_i = r_i x_i / \sum_{j=1}^m r_j x_j \quad (3.17)$$

$$\theta'_i = q'_i x_i / \sum_{j=1}^m q'_j x_j \quad (3.18)$$

$$l_i = (z/2) (r_i - q_i) - (r_i - 1) \quad (3.19)$$

$$\tau_{ij} = \exp \left( - \frac{U_{ij} - U_{jj}}{RT} \right) = \exp (- a_{ij}/T) \quad (3.20)$$

şeklinde yazılabilir.

$r$  moleküler Van Der Waals hacmini,  $z$  koordinasyon sayısını ve  $U_{ij} - U_{jj}$  ise karakteristik enerji farkını göstermektedir. UNIQUAC modelinin polimer molekülleri içeren çözeltilere de uygulanabiliyor olması avantaj oluşturur.

#### 3.1.4. UNIFAC Modeli

Bu model temel olarak UNIQUAC modelini esas almaktadır. Sıvı karışımlar kendisini oluşturan bileşenlerin dışında, kimyasal gruplardan oluşmuş bir çözelti olarak ele alınır. Kimyasal gruplar molekülleri oluşturur ve alt gruplar olarak tanımlanır. Birbirine benzeyen her bir alt grup bir ana grubun üyesidir ve alt gruplara ait enerji parametreleri deneysel olarak literatürde tespit edilmiştir. Bu verilerden yola çıkılarak bu alt grupları içeren farklı bileşenlerden oluşan karışımların faz denge verileri hesaplanabilmektedir. UNIFAC modelinin ilk avantajı da budur. Başka bir deyişle az sayıdaki alt grupların bir

araya gelmesiyle geniş kombinasyonda ve çok sayıda moleküle ait faz dengesi verilerine ulaşılabilmektedir. Günümüzde hemen hemen bütün bileşenleri oluşturan alt gruplara ait enerji parametreleri literatürde mevcuttur.

UNIFAC modelinde UNIQUAC modelinde olduğu gibi moleküler aktivite katsayısı iki kısımdan oluşur.  $\gamma_i^C$  hesaplaması UNIQUAC modelindeki yöntemle aynı olup,  $\gamma_i^R$  aşağıdaki şekilde hesaplanmaktadır. Bu farklılık kimyasal gruplardan oluşmuş bir karışım kavramından ileri gelmektedir. Modele ait denklemler [22];

$$\ln \gamma_i^C = 1 - J_i + \ln J_i - 5 \cdot q_i \left( 1 - \frac{J_i}{L_i} - \ln \frac{J_i}{L_i} \right) \quad (3.21)$$

$$\ln \gamma_i^R = q_i (1 - \ln L_i) - \sum_k \left( \theta_k \frac{s_{ki}}{\eta_k} - G_{ki} \ln \frac{s_{ki}}{\eta_k} \right) \quad (3.22)$$

$$J_i = r_i / \sum_{j=1}^m r_j x_j \quad (3.23)$$

$$L_i = q_i / \sum_{j=1}^m q_j x_j \quad (3.24)$$

$$r_i = \sum_k V_k^{(i)} R_k \quad (3.25)$$

$$q_i = \sum_k V_k^{(i)} Q_k \quad (3.26)$$

$$G_{ki} = v_k^i \cdot Q_k \quad (3.27)$$

$$\theta_k = \sum_i G_{ki} x_i \quad (3.28)$$

$$s_{ki} = \sum_k G_{mi} \tau_{mk} \quad (3.29)$$

$$\eta_k = \sum_k s_{ki} x_i \quad (3.30)$$

$$\tau_{mk} = \exp(-a_{mk} / T) \quad (3.31)$$

Her bir alt grup,  $k$  ile gösterilen bir numara ile tanımlanmıştır. Relatif hacim  $R_k$ , relatif yüzey  $Q_k$  ile gösterilmiştir. UNIFAC grubuna ait etkileşim parametreleri  $a_{mk}$  ile gösterilir.  $i$  indisi maddeleri,  $k$  indisi alt grupları temsil eder.  $j$  ise bütün maddeleri kapsayan yalancı indistir.  $v_k^i$  niceliği,  $k$  tipi alt grupların  $i$  maddesinin bir molekülünde içerisindeki sayısıdır.  $R_k$  ve  $Q_k$  alt grup parametreleri ile  $a_{mk}$  grup etkileşim parametreleri ise literatürden bulunur.

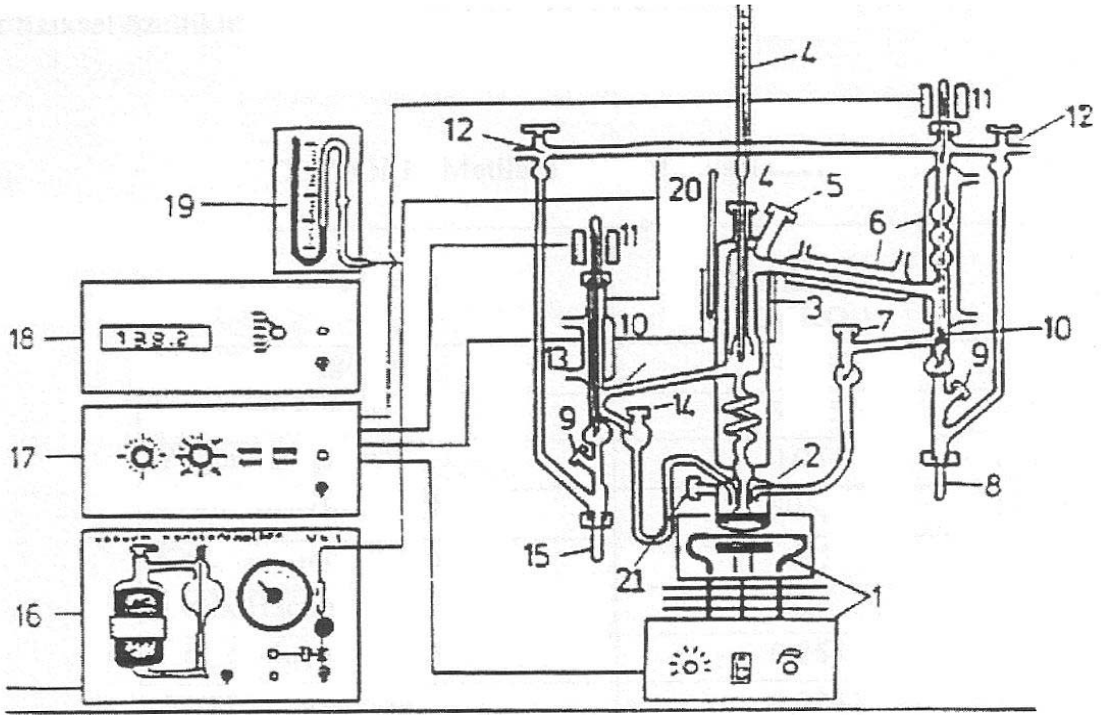
Tablo 3.1 : NRTL, Wilson, UNIFAC ve UNIQUAC Metodlarının Karşılaştırılması

	<b>Avantaj</b>	<b>Dezavantaj</b>
<b>Wilson</b>	Parametrelerinin sıcaklıktan bağımsız olması ve çok bileşenli sistemler için kullanılabilir olması	Kısmi karışan sıvılar için uygun olmaması ve aktivite katsayılarının min. veya max. değerini aldığı anda parametrelerinin hesaplanamaması
<b>NRTL</b>	Üç parametrelili bir model olduğundan sistemlere daha iyi uyum sağlaması ve sıvı-sıvı faz dengelerinde de kullanılabilir olması	Büyük molekül içeren polimer karışımlara uygulanamaması
<b>UNIQUAC</b>	Polimer molekülleri içeren karışımlara da uygulanabilmesi ve sıvı-sıvı faz dengelerinde de kullanılabilir olması	Kompleks bir matematiksel formülü olması, asit, alkol ve su karışımlarının assosiye davranışlarını simgelemekte yetersiz kalması [18]
<b>UNIFAC</b>	Çok sayıda ve çeşitlilikte moleküle ait faz denge verilerine ulaşılabilir olması, literatürde çok sayıda grubun UNIFAC etkileşim parametreleri bulunduğu için deneye başvurulmadan denge verilerine ulaşılabilmesi, sıvı-sıvı faz dengelerinde de kullanılabilir olması	Kompleks bir matematiksel formülü olması, asit, alkol ve su karışımlarının assosiye davranışlarını simgelemekte yetersiz kalması [18]

## 3.2. DENEYSEL YÖNTEM

### 3.2.1. Denemelerin Yapılışı

Sıvı-buhar denge verilerinin elde edilmesi amacıyla deneysel çalışmalarda “Fischer” firmasının geliştirmiş olduğu “Fischer Labodest Sıvı-Buhar Denge Cihazı” kullanılmıştır. Deneysel çalışmaların yapıldığı cihaz, Şekil 3.1’de şematik olarak gösterilmiştir.



- |  |  |
|--|--|
| 1. Isıtıcı                                   | 12. Üç yönlü havalandırma vanaları       |
| 2. Kaynama Haznesi                           | 13. Soğutucu                             |
| 3. Isıtıcı Manto                             | 14. Contalı vidalı kapak                 |
| 4. Denge sıcaklığının ölçüldüğü termometre   | 15. Sıvı faz örnek alma tüpü             |
| 5. Contalı vidalı kapak                      | 16. Vakum kontrol edicisi                |
| 6. Soğutucular                               | 17. Isıtıcı manto kontrolörü             |
| 7. Contalı vidalı kapak                      | 18. Dijital termometre                   |
| 8. Buhar faz örnek alma tüpü                 | 19. Vakummetre                           |
| 9. Numune yolunu açma/kapama muslukları      | 20. Isıtıcı manto kontrol termometresi   |
| 10. Manyetik olarak açılıp kapanan ventiller | 21. Sıvı faz sıcaklığının okunduğu kısım |
| 11. Manyetik alan oluşturan bobinler         |  |

Şekil 3.1 : Fishcher – Labodest sıvı – buhar denge cihazı

Denemelerde;

Metil etil keton (1)-toluen (2)

1, 2-Dikloretan (1)-toluen (2)

Toluen (1)-asetik asit (2)

1, 2-Dikloretan (1)-asetik asit (2)

Toluen (1)- 1, 2-dikloretan (2)-asetik asit (3)

İkili ve üçlü karışımlarının 760 mm Hg basıncında ve denge sıcaklıklarında sıvı-buhar denge verileri bulunmuştur.

Denemelerin yapılışı sırasında izlenen genel yöntem şu şekildedir: Metil etil keton (1) – tolue (2) ikili sistemi için; cihazın kaynama haznesine yaklaşık 60 ml metil etil keton konuldu. Isıtıcı ve ısıtıcı manto çalıştırıldıktan sonra kaynama noktası, dolayısıyla denge sıcaklığı tespit edilmiştir. Daha sonra contalı vidalı kapak yardımıyla üzerine yaklaşık 3 ml tolue ilave edilmiştir. Bundan sonra sistemin tekrar denge haline ulaşması için (sıcaklık sabit kalana dek) yaklaşık 50 dakika beklendikten sonra sıvı ve buhar faz örnek alma tüpleri yardımıyla aynı anda yaklaşık 2'şer ml numune alınmış ve gaz kromatografisinde analiz edilmiştir. Böylece sabit basınçta, denge sıcaklığı bilinen ikili bir karışıma ait denge bileşimleri ( $x_1$ ,  $x_2$ ,  $y_1$ ,  $y_2$ ) deneysel olarak tayin edilmiştir. Sistem tolue bakımından zengin hale gelinceye dek 3 'er ml tolue ilave edilmiş, aynı işlemler tekrarlanarak bulunan kompozisyondaki denge sıcaklığı tespit edilmiştir.

Tolue (1)- 1, 2-diklor etan (2)-asetik asit (3) üçlü sistemi için; kaynama haznesine 30 ml asetik asit ve 30 ml tolue karışımı konulmuş, ısıtıcı ve ısıtıcı manto çalıştırılarak sistemin denge sıcaklığına gelmesi beklenmiş, bu aşamada 2 ml 1, 2-diklor etan ilave edilerek denge sıcaklığındaki sıvı faz ve buhar faz bileşimleri analiz edilmiştir. Daha sonra sisteme 2 ml daha 1, 2-diklor etan ilave edilerek aynı işlemler tekrar edilmiştir.

Metil etil keton (1)-tolue (2), 1, 2-diklor etan (1)-tolue (2), 1, 2-diklor etan (1)-tolue (2) – asetik asit (3) sistemlerine ait sıvı faz ve buhar faz denge bileşimleri, HP-6890 tipi gaz kromatografi cihazında yapılmış olup integratör olarak HP Chem-Station software kullanılmıştır. Numunelerin analizleri FID dedektörle yapılmıştır.

Toluen (1)-asetik asit (2), 1, 2-diklor etan (1)-asetik asit (2) sistemlerine ait analizler volumetrik analiz yöntemiyle yapılmıştır. Bu yöntemde 0,1 N ayarlı NaOH çözeltisi ile fenolftalein indikatörlüğünde, buhar ve sıvı fazlara ait numuneler titre edilmiştir.

$$T = N.f.S.e / 1000 \quad (3.32)$$

T = Asetik asit miktarı (g),

N = NaOH çözeltisinin normalitesi,

f = Ayar faktörü,

e = etkime değeri,

S = NaOH sarfiyatı (ml)

### 3.2.2. Gaz Kromatografisinde Analiz Şartları

Metil etil keton (1) – Toluen (2), 1, 2-Diklor etan (1) – Toluen (2), 1, 2-Diklor etan (1) – Toluen (2) – Asetik asit (3) sistemlerine ait sıvı ve buhar fazdan alınan numuneler FID dedektörle yapılmıştır ve iç standart olarak n – propanol olarak kullanılmıştır.

Cihaz : Hewlett Packard 6890 GC

Kolon : HP 19091 N – 213 HP-Innowax (polietilen glikol) kapiler kolon

Kolon Uzunluğu : 30 m

Kolon İç Çapı : 320 µm

Film Kalınlığı : 0,5 µm

Taşıyıcı Gaz N<sub>2</sub> Akış Hızı : 0,8 ml/dak

Kolon Giriş sıcaklığı : 200°C

Split Oranı : 100/1

Dedektör : FID

Dedektör Sıcaklığı : 250°C

H<sub>2</sub> Akış Hızı : 33 ml/dak

Hava Akış Hızı : 400 ml/dak

### 3.2.3. Kullanılan Kimyasalların Özellikleri

Aşağıdaki tablolarda kullanılan kimyasalların fiziksel özellikleri verilmektedir.

Tablo 3.2: Metil etil ketona ait fiziksel özellikler

<b>FİZİKSEL ÖZELLİKLER</b>	<b>METİL ETİL KETON C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O</b>
Mol Tartısı (g/mol)	72,107
Kaynama Noktası (°C)	79,6
Yoğunluk (g/cm <sup>3</sup> )	0,805
Kritik Sıcaklık, T <sub>C</sub> (K)	535,6
Kritik Basınç, P <sub>C</sub> (atm)	41
Kritik Hacim, V <sub>C</sub> (cm <sup>3</sup> /mol)	267
Kritik Sıkıştırma Faktörü, Z <sub>C</sub>	0,249
Asentrik Faktör, ω	0,329
Antoine Sabiti, ANTA	16,5986
Antoine Sabiti, ANTB	3150,42
Antoine Sabiti, ANTC	-36,65

Tablo 3.3:Asetik asite ait fiziksel özellikler

<b>FİZİKSEL ÖZELLİKLER</b>	<b>ASETİK ASİT C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub></b>
Mol Tartısı (g/mol)	60,052
Kaynama Noktası (°C)	118
Yoğunluk (g/cm <sup>3</sup> )	1,049
Kritik Sıcaklık, T <sub>C</sub> (K)	594,4
Kritik Basınç, P <sub>C</sub> (atm)	57,1
Kritik Hacim, V <sub>C</sub> (cm <sup>3</sup> /mol)	171
Kritik Sıkıştırma Faktörü, Z <sub>C</sub>	0,200
Asentrik Faktör, ω	0,454
Antoine Sabiti, ANTA	16,8080
Antoine Sabiti, ANTB	3405,57
Antoine Sabiti, ANTC	-56,34



Tablo 3.4: Toluene ait fiziksel özellikler

<b>FİZİKSEL ÖZELLİKLER</b>	<b>TOLUEN C<sub>7</sub>H<sub>8</sub></b>
Mol Tartısı (g/mol)	92,14
Kaynama Noktası (°C)	110,6
Yoğunluk (g/cm <sup>3</sup> )	0,867
Kritik Sıcaklık, T <sub>C</sub> (K)	591,7
Kritik Basınç, P <sub>C</sub> (atm)	40,6
Kritik Hacim, V <sub>C</sub> (cm <sup>3</sup> /mol)	316
Kritik Sıkıştırma Faktörü, Z <sub>C</sub>	0,264
Asentrik Faktör, ω	0,257
Antoine Sabiti, ANTA	16,0137
Antoine Sabiti, ANTB	3096,52
Antoine Sabiti, ANTC	-53,67

Tablo 3.5: 1, 2-Diklor etana ait fiziksel özellikler

<b>FİZİKSEL ÖZELLİKLER</b>	<b>1,2-DİKLOR ETAN C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub></b>
Mol Tartısı (g/mol)	98,96
Kaynama Noktası (°C)	84
Yoğunluk (g/cm <sup>3</sup> )	1,250
Kritik Sıcaklık, T <sub>C</sub> (K)	561
Kritik Basınç, P <sub>C</sub> (atm)	53
Kritik Hacim, V <sub>C</sub> (cm <sup>3</sup> /mol)	220
Kritik Sıkıştırma Faktörü, Z <sub>C</sub>	0,25
Asentrik Faktör, ω	0,286
Antoine Sabiti, ANTA	16,0842
Antoine Sabiti, ANTB	2697,29
Antoine Sabiti, ANTC	-45,03

## 4. BULGULAR

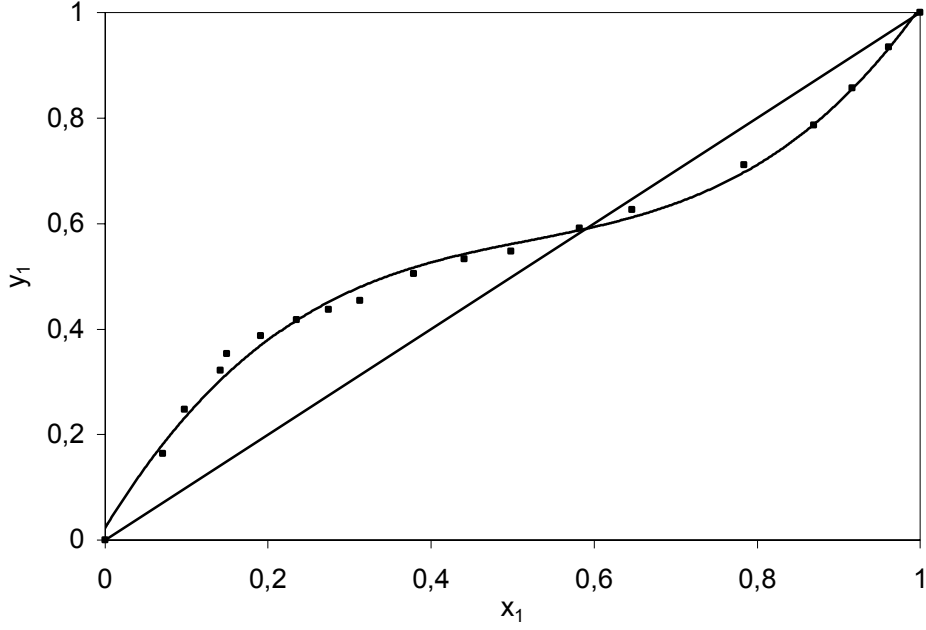
### 4.1. DENEMELERDEN ELDE EDİLEN VERİLER

Deneysel aktivite katsayıları bir Q-Basic yazılımı yardımıyla hesaplanmıştır. Bu programa ait sonuç çıktılarından bir örnek Ek A'da sunulmuştur.

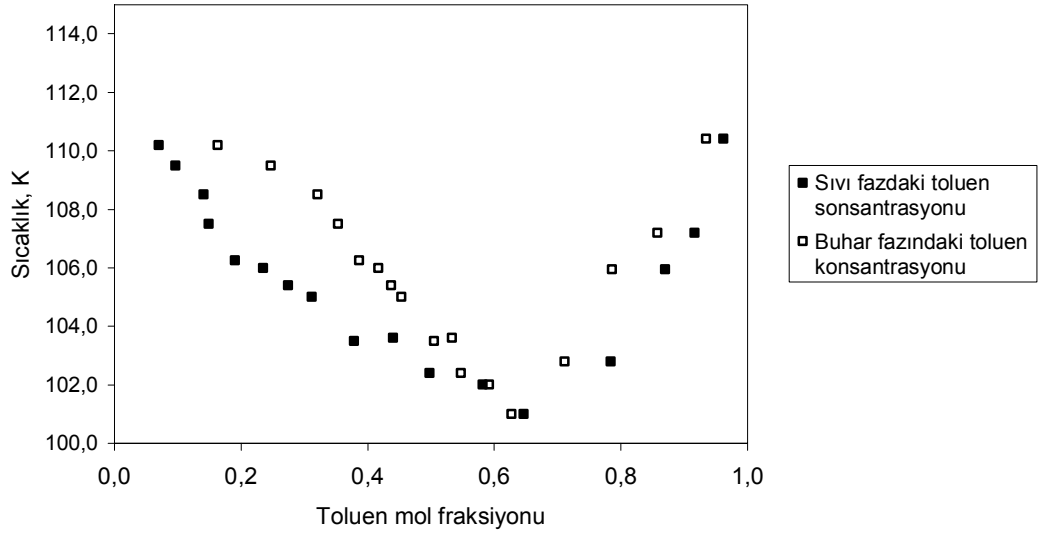
#### 4.1.1. Toluen (1) – asetik asit (2) Sistemi

Tablo 4.1: Toluen-Asetik asit ikili sistemine ait sıvı-buhar denge verileri (760 mm Hg)

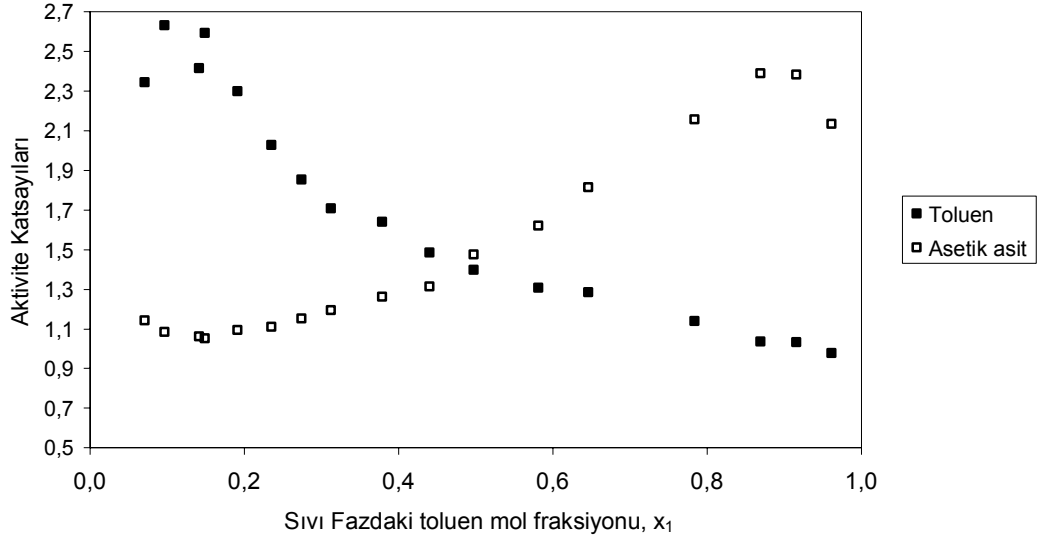
Deney No	$x_1$	$x_2$	$y_1$	$y_2$	T (K)	$\gamma_1$	$\gamma_2$
1	0,9614	0,0387	0,9347	0,0654	110,40	0,9785	2,1349
2	0,9164	0,0837	0,8576	0,1425	107,20	1,0326	2,3830
3	0,8697	0,1304	0,7863	0,2137	105,95	1,0346	2,3895
4	0,7838	0,2162	0,7117	0,2883	102,80	1,1403	2,1565
5	0,6466	0,3534	0,6271	0,3729	101,00	1,2855	1,8126
6	0,5817	0,4183	0,5917	0,4083	102,00	1,3083	1,6213
7	0,4979	0,5021	0,5478	0,4522	102,40	1,3983	1,4761
8	0,4404	0,5596	0,5331	0,4669	103,60	1,4844	1,3139
9	0,3788	0,6212	0,5046	0,4954	103,50	1,6384	1,2600
10	0,3125	0,6875	0,4536	0,5464	105,00	1,7079	1,1950
11	0,2744	0,7256	0,4375	0,5625	105,40	1,8541	1,1504
12	0,2351	0,7649	0,4173	0,5827	106,00	2,0281	1,1085
13	0,1912	0,8088	0,3872	0,6128	106,25	2,2971	1,0935
14	0,1493	0,8507	0,3538	0,6462	107,50	2,5921	1,0527
15	0,1416	0,8584	0,3216	0,6784	108,50	2,4136	1,0604
16	0,0972	0,9028	0,2477	0,7523	109,50	2,6315	1,0828
17	0,0708	0,9292	0,1639	0,8361	110,20	2,3432	1,1434



Şekil 4.1: Toluen (1)-asetik asit (2) sistemine ait sıvı-buhar denge eğrisi

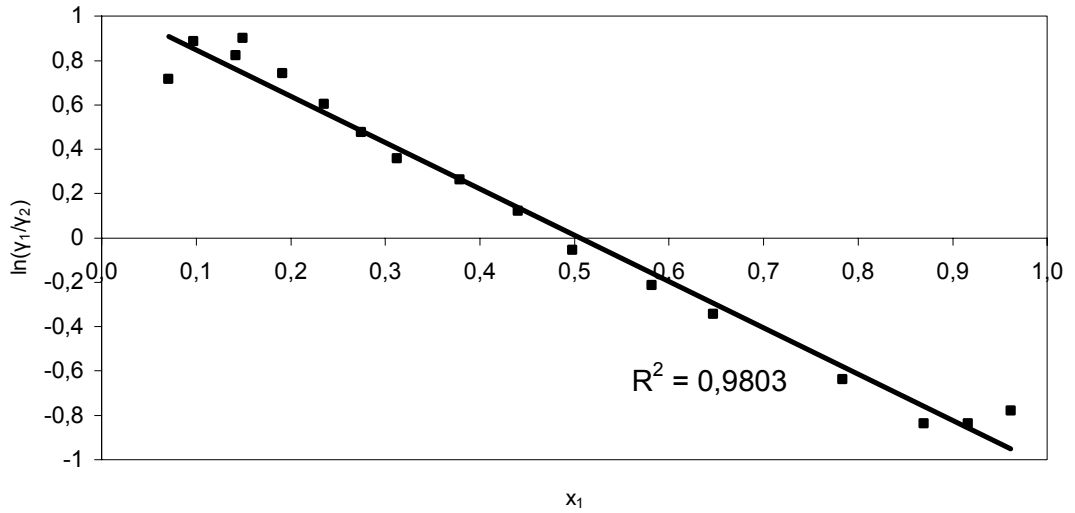


Şekil 4.2: Toluen (1)-asetik asit (2) sisteminde kaynama noktalarının kompozisyonla değişimi



Şekil 4.3: Toluen (1)-asetik asit (2) sisteminde aktivite katsayılarının kompozisyonla değişimi

Not : Toluen (1)-asetik asit (2) sistemine ait deneysel verilerin doğruluğu Redlich-Kister testi ile sınanmış ve şekil 4.4'te gösterildiği gibi  $R^2$  değerinin 0,9803 olduğu tespit edilmiştir.

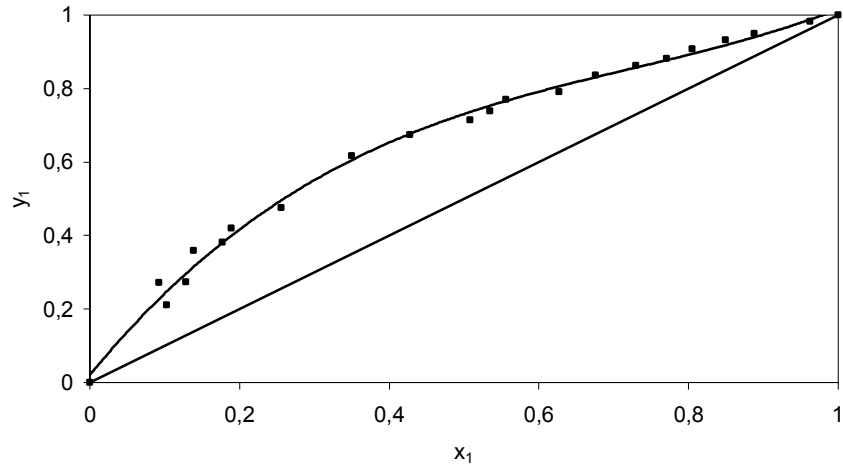


Şekil 4.4: Toluen (1)-asetik asit (2) sistemine ait geçerlilik

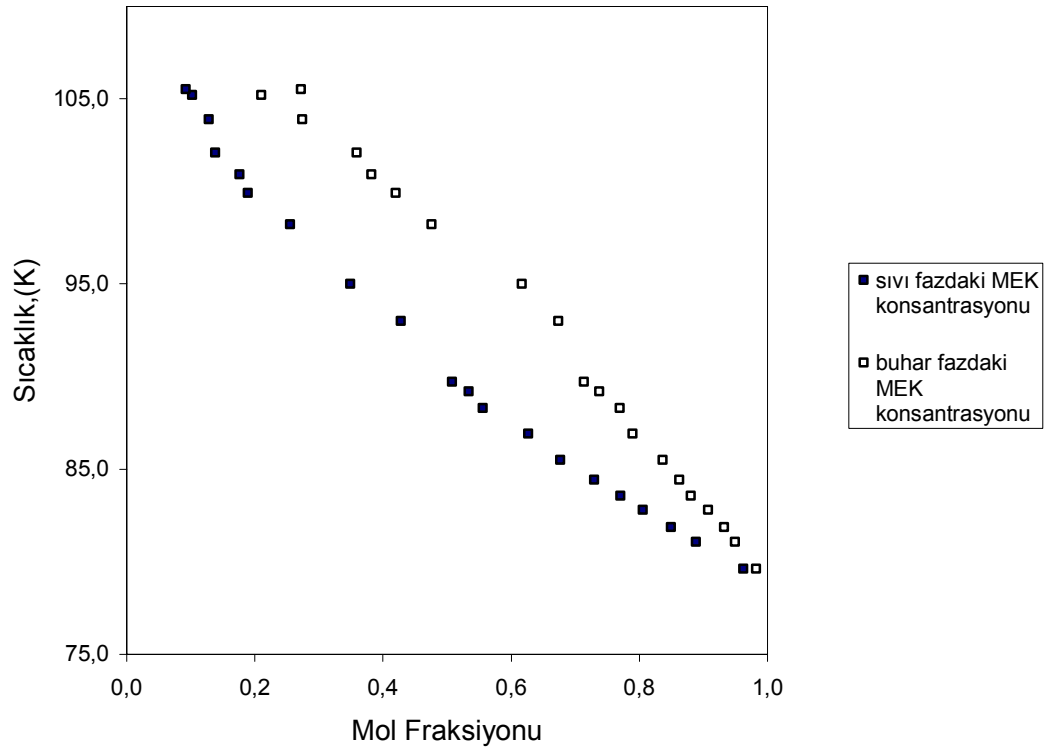
#### 4.1.2. Metil etil keton (1)-Toluen (2) Sistemi

Tablo 4.2: Metil etil keton (1)-toluen (2) ikili sistemine ait sıvı- buhar denge verileri (760 mm Hg)

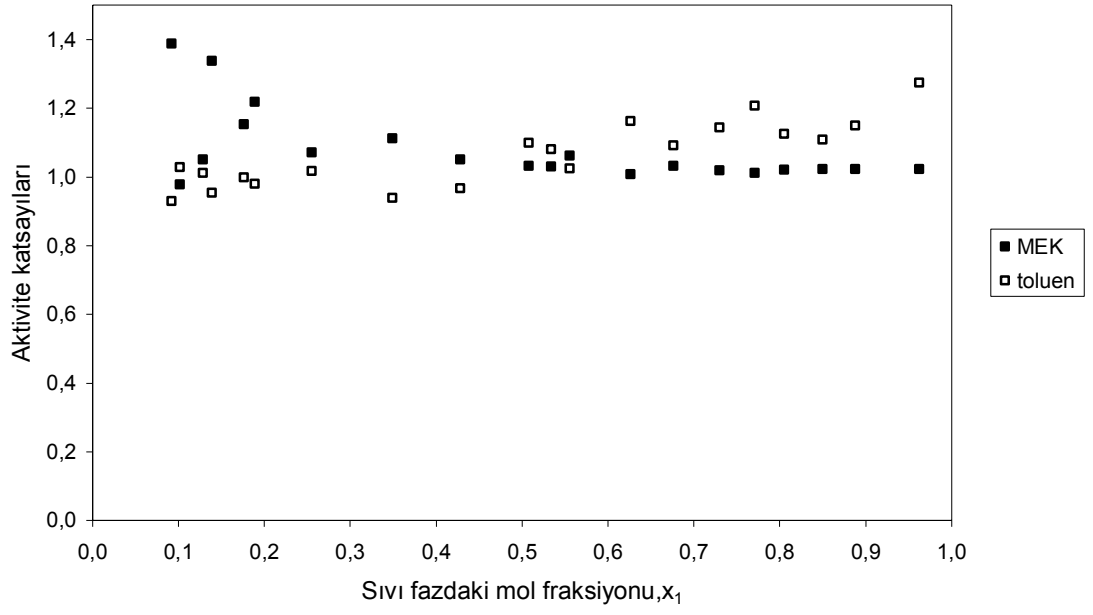
Deney No	$x_1$	$x_2$	$y_1$	$y_2$	T (K)	$\gamma_1$	$\gamma_2$
1	0,9623	0,0377	0,9818	0,0182	79,6	1,0216	1,2747
2	0,8883	0,1117	0,9491	0,0510	81,05	1,0221	1,1486
3	0,8499	0,1501	0,9321	0,0679	81,85	1,0234	1,1074
4	0,8051	0,1949	0,9075	0,0925	82,80	1,0213	1,1254
5	0,7709	0,2291	0,8805	0,1195	83,55	1,0112	1,2062
6	0,7301	0,2699	0,8626	0,1374	84,40	1,0191	1,1438
7	0,6763	0,3237	0,8368	0,1632	85,50	1,0321	1,0920
8	0,6267	0,3733	0,7900	0,2100	86,90	1,0080	1,1629
9	0,5558	0,4442	0,7695	0,2305	88,30	1,0614	1,0248
10	0,5084	0,4916	0,7135	0,2865	89,70	1,0321	1,0996
11	0,5344	0,4656	0,7376	0,2624	89,20	1,0302	1,0806
12	0,4280	0,5720	0,6741	0,3259	93,00	1,0513	0,9673
13	0,3496	0,6504	0,6167	0,3833	95,00	1,1117	0,9393
14	0,2556	0,7444	0,4756	0,5244	98,20	1,0707	1,0168
15	0,1892	0,8108	0,4199	0,5801	99,90	1,2180	0,9804
16	0,1767	0,8233	0,3820	0,6180	100,90	1,1538	0,9980
17	0,1388	0,8612	0,3593	0,6407	102,10	1,3366	0,9540
18	0,1284	0,8716	0,2743	0,7257	103,90	1,0499	1,0120
19	0,1022	0,8978	0,2105	0,7896	105,20	0,9772	1,0287
20	0,0925	0,9075	0,2727	0,7273	105,50	1,3875	0,9292



Şekil 4.5: Metil etil keton (1)-toluen (2) sıvı-buhar denge eğrisi



Şekil 4.6: Metil etil keton (1)-toluen (2) sisteminde kaynama noktalarının kompozisyonla değişimi

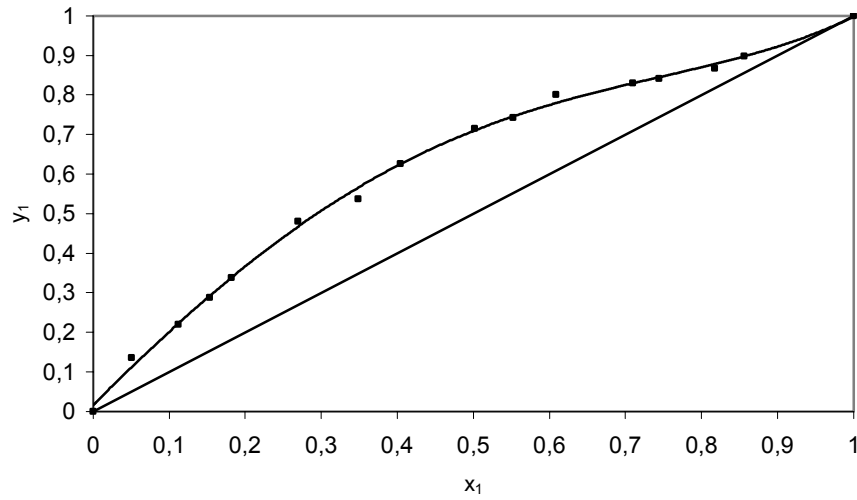


Şekil 4.7: Metil etil keton (1)-toluen (2) sisteminde aktivite katsayılarının kompozisyonla değişimi

#### 4.1.2. 1,2-Diklor etan (1)-Toluen (2) Sistemi

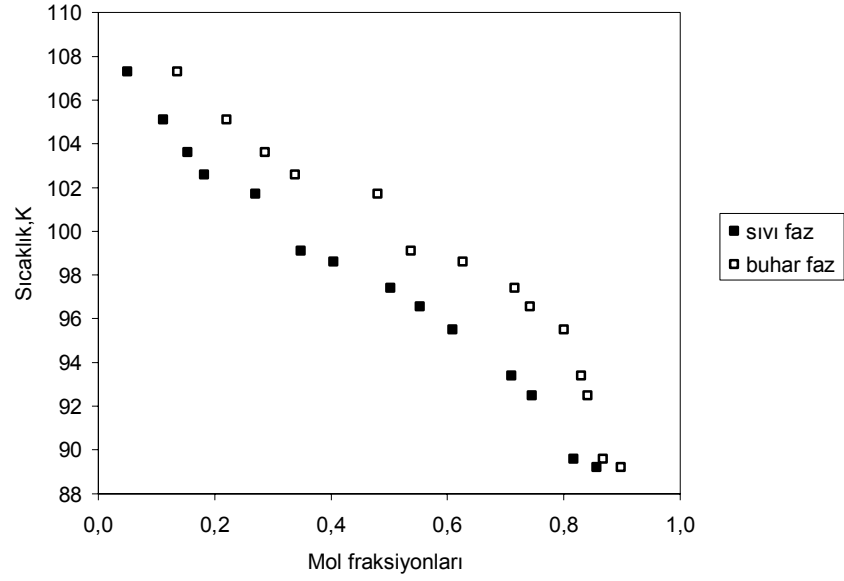
Tablo 4.3: Diklor etan (1)-toluen (2) ikili sistemine ait sıvı- buhar denge verileri (760 mm Hg)

Deney No	$x_1$	$x_2$	$y_1$	$y_2$	T (K)	$\gamma_1$	$\gamma_2$
1	0,0504	0,9496	0,1357	0,8643	107,30	0,6578	1,0014
2	0,1122	0,8878	0,2204	0,7796	105,10	0,5061	1,0302
3	0,1532	0,8468	0,2869	0,7131	103,60	0,5004	1,0327
4	0,1818	0,8182	0,3379	0,6621	102,60	0,5090	1,0223
5	0,2699	0,7301	0,4801	0,5199	101,70	0,4981	0,9242
6	0,3485	0,6515	0,5376	0,4624	99,10	0,4610	0,9965
7	0,4040	0,596	0,6261	0,3739	98,60	0,4690	0,8944
8	0,5017	0,4983	0,7152	0,2848	97,40	0,4448	0,8454
9	0,5524	0,4476	0,7419	0,2581	96,55	0,4282	0,8757
10	0,6088	0,3912	0,7999	0,2001	95,50	0,4304	0,8026
11	0,7097	0,2903	0,8303	0,1697	93,40	0,4046	0,9798
12	0,7447	0,2553	0,8403	0,1597	92,50	0,3996	1,0788
13	0,8172	0,1828	0,8677	0,1323	89,60	0,4060	1,3700
14	0,8559	0,1441	0,8984	0,1016	89,20	0,4057	1,3521

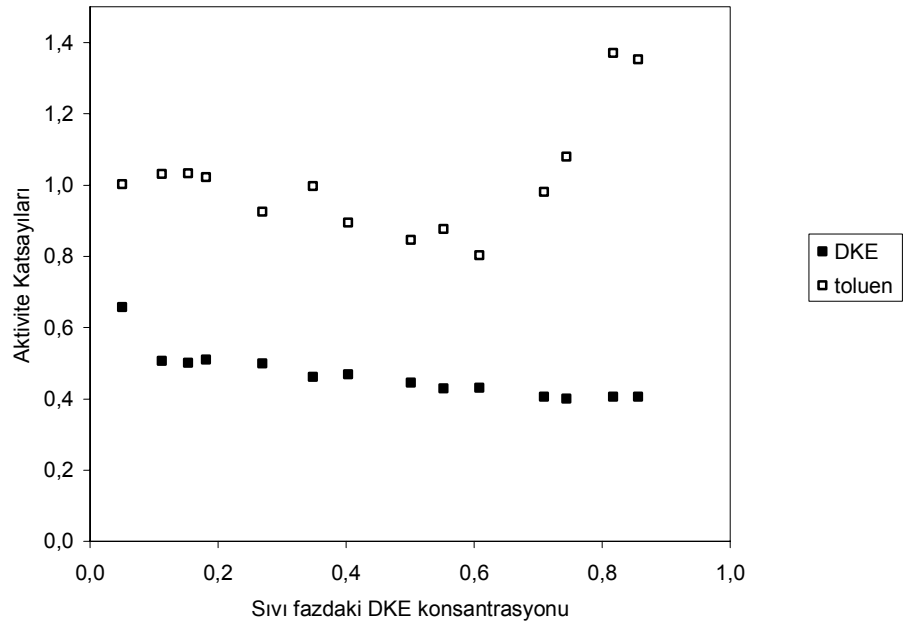


Şekil 4.8: 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) sıvı-buhar denge eğrisi





Şekil 4.9: 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) sisteminde kaynama noktalarının kompozisyonla değişimi

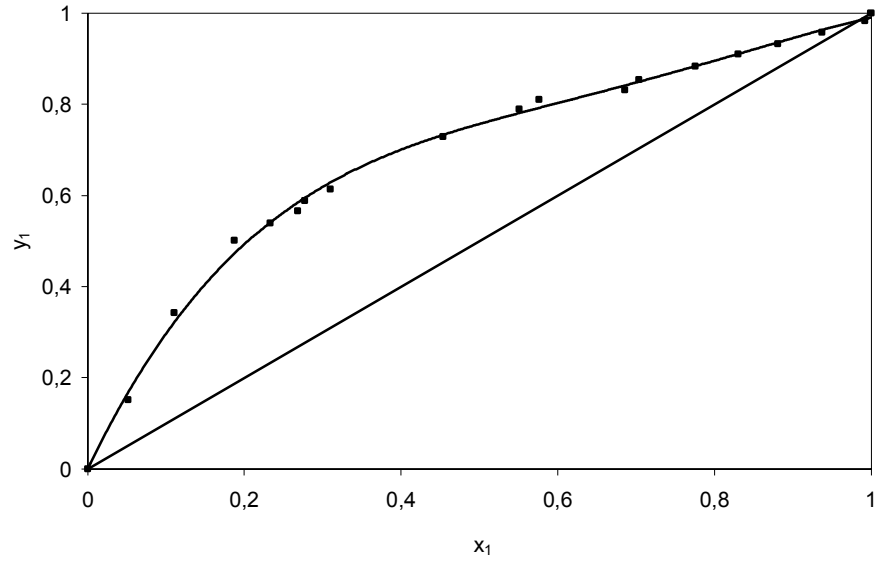


Şekil 4.10: 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) sisteminde aktivite katsayılarının kompozisyonla değişimi

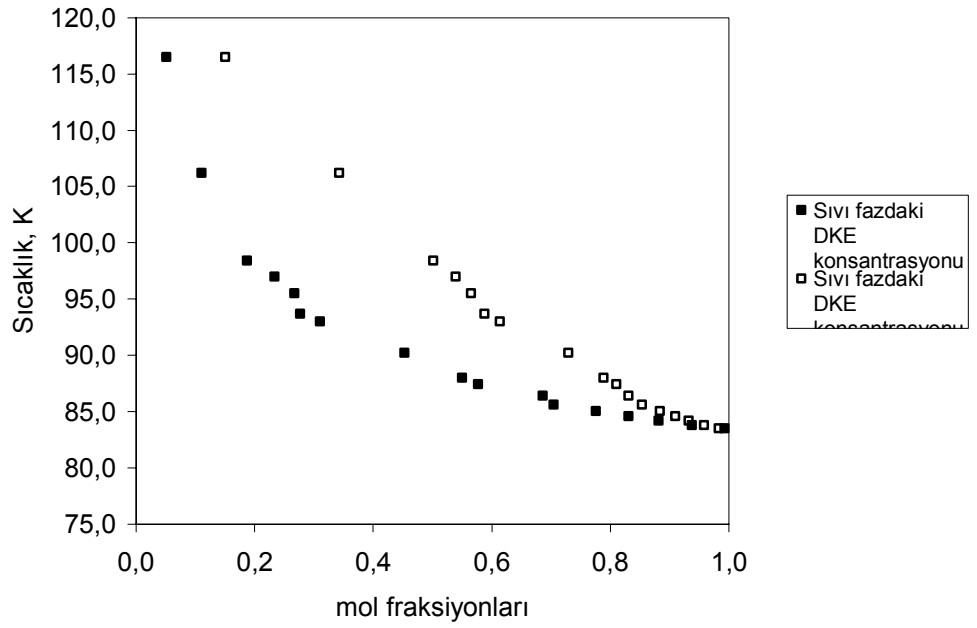
#### 4.1.4. 1,2-Diklor etan (1)-Asetik asit (2) Sistemi

Tablo 4.4: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) ikili sistemine ait sıvı- buhar denge verileri (760 mm Hg)

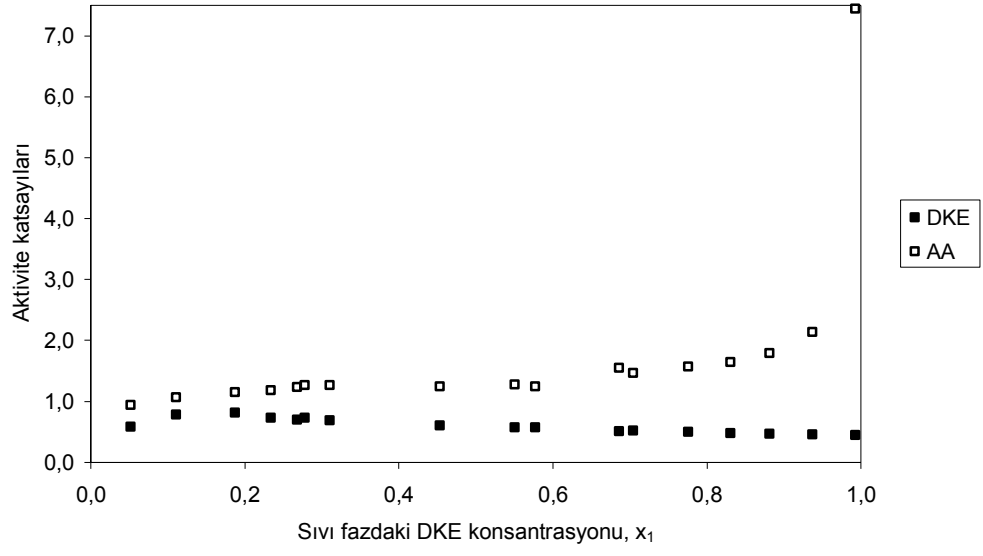
Deney No	$x_1$	$x_2$	$y_1$	$y_2$	T (K)	$\gamma_1$	$\gamma_2$
1	0,9925	0,0075	0,9826	0,0174	83,50	0,4470	7,4415
2	0,9373	0,0627	0,9577	0,0423	83,80	0,4575	2,1396
3	0,8812	0,1188	0,9318	0,0682	84,20	0,4683	1,7934
4	0,8304	0,1696	0,9094	0,0906	84,60	0,4796	1,6440
5	0,7755	0,2245	0,8835	0,1165	85,00	0,4935	1,5733
6	0,7043	0,2957	0,8535	0,1465	85,60	0,5163	1,4688
7	0,6862	0,3138	0,8308	0,1692	86,40	0,5047	1,5517
8	0,5767	0,4233	0,8104	0,1896	87,40	0,5701	1,2423
9	0,5507	0,4493	0,7883	0,2117	88,00	0,5714	1,2783
10	0,4535	0,5465	0,7289	0,2711	90,20	0,6048	1,2423
11	0,3103	0,6897	0,6136	0,3864	93,00	0,6911	1,2692
12	0,2775	0,7225	0,5876	0,4124	93,70	0,7267	1,2614
13	0,2679	0,7321	0,5657	0,4343	95,50	0,6916	1,2307
14	0,2335	0,7665	0,5392	0,4608	97,00	0,7278	1,1839
15	0,1876	0,8124	0,5011	0,4989	98,40	0,8125	1,1524
16	0,1108	0,8892	0,3426	0,6574	106,20	0,7756	1,0688
17	0,0518	0,9482	0,1513	0,8487	116,50	0,5757	0,9342



Şekil 4.11: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) sistemine ait sıvı-buhar denge eğrisi



Şekil 4.12: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) sisteminde sıcaklığın kompozisyonla değişimi



Şekil 4.13: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) sisteminde aktivite katsayılarının kompozisyonla değişimi

## 4.2. MODELLERDEN ELDE EDİLEN VERİLER

Chem CAD 5.2 Professional bilgisayar programındaki Wilson, NRTL, UNIQUAC ve UNIFAC modelleri kullanılarak elde edilen veriler her bir sistem için aşağıdaki tablolarda verilmiştir. Modellerin kullandığı etkileşim parametreleri de tablo 21, 22, 23 ve 24'te görülmektedir. Ek B'de programa ait sonuç çıktılarından bir örnek sunulmuştur.

### 4.2.1. Metil etil keton (1)-Toluen (2) Sistemi için NRTL Modeli Verileri

Tablo 4.5: Metil etil keton (1)-toluen (2) sistemi NRTL modeli verileri

$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,00000	0,00000	1,104	1,000
0,05000	0,12589	1,099	1,000
0,10000	0,23348	1,094	1,000
0,15000	0,32625	1,089	1,001
0,20000	0,40687	1,084	1,002
0,25000	0,47744	1,078	1,003
0,30000	0,53962	1,073	1,005
0,35000	0,59477	1,066	1,008
0,40000	0,64398	1,060	1,011
0,45000	0,68814	1,054	1,016
0,50000	0,72802	1,047	1,021
0,55000	0,76426	1,041	1,028
0,60000	0,79740	1,034	1,037
0,65000	0,82793	1,028	1,047
0,70000	0,85626	1,022	1,060
0,75000	0,88278	1,016	1,076
0,80000	0,90783	1,011	1,094
0,85000	0,93176	1,007	1,117
0,90000	0,95487	1,003	1,144
0,95000	0,97751	1,001	1,176
1,00000	1,00000	1,000	1,215

#### 4.2.2. Metil etil keton (1)-Toluen (2) Sistemi için Wilson Modeli Verileri

Tablo 4.6: Metil etil keton (1)-toluen (2) sistemi Wilson modeli verileri

$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,00000	0,00000	1,367	1,000
0,05000	0,14931	1,337	1,001
0,10000	0,26732	1,308	1,003
0,15000	0,36277	1,280	1,006
0,20000	0,44157	1,253	1,011
0,25000	0,50778	1,227	1,017
0,30000	0,56432	1,202	1,026
0,35000	0,61333	1,177	1,036
0,40000	0,65641	1,154	1,049
0,45000	0,69479	1,133	1,065
0,50000	0,72944	1,112	1,083
0,55000	0,76114	1,093	1,104
0,60000	0,79052	1,075	1,130
0,65000	0,81813	1,059	1,159
0,70000	0,84446	1,045	1,194
0,75000	0,86994	1,032	1,234
0,80000	0,89499	1,021	1,281
0,85000	0,92004	1,012	1,335
0,90000	0,94554	1,006	1,400
0,95000	0,97199	1,001	1,475
1,00000	1,00000	1,000	1,565

#### 4.2.3. Metil etil keton (1)-Toluen (2) Sistemi için UNIFAC Modeli Verileri

Tablo 4.7: Metil etil keton (1)-toluen (2) sistemi UNIFAC modeli verileri

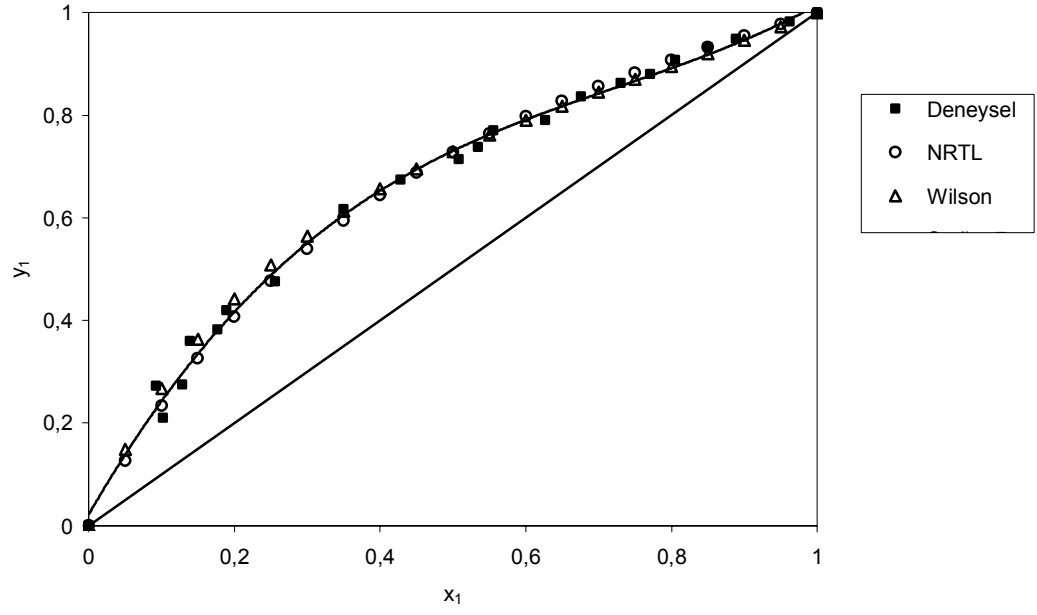
$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,00000	0,00000	1,181	1,000
0,05000	0,13243	1,165	1,000
0,10000	0,24231	1,149	1,002
0,15000	0,33490	1,134	1,004
0,20000	0,41402	1,120	1,006
0,25000	0,48247	1,106	1,010
0,30000	0,54238	1,093	1,015
0,35000	0,59536	1,081	1,020
0,40000	0,64268	1,070	1,027
0,45000	0,68534	1,059	1,035
0,50000	0,72413	1,049	1,044
0,55000	0,75970	1,040	1,054
0,60000	0,79258	1,032	1,066
0,65000	0,82321	1,025	1,079
0,70000	0,85196	1,018	1,094
0,75000	0,87915	1,013	1,110
0,80000	0,90505	1,008	1,128
0,85000	0,92989	1,005	1,148
0,90000	0,95388	1,002	1,169
0,95000	0,97719	1,001	1,193
1,00000	1,00000	1,000	1,219

#### 4.2.4. Metil etil keton (1)-Toluen (2) Sistemi için UNIQUAC Modeli Verileri

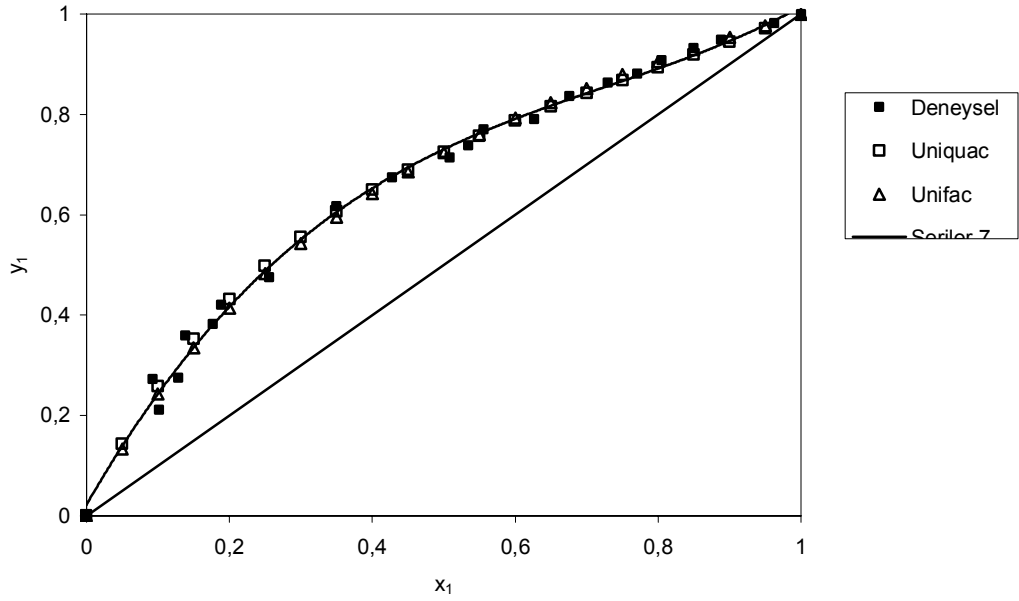
Tablo 4.8: Metil etil keton (1)-toluen (2) sistemi UNIQUAC modeli verileri

$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,00000	0,00000	1,130	1,000
0,05000	0,12335	1,118	1,000
0,10000	0,22848	1,107	1,001
0,15000	0,31907	1,096	1,002
0,20000	0,39788	1,086	1,004
0,25000	0,46708	1,076	1,007
0,30000	0,52835	1,067	1,010
0,35000	0,58305	1,058	1,014
0,40000	0,63223	1,050	1,019
0,45000	0,67677	1,043	1,025
0,50000	0,71737	1,036	1,031
0,55000	0,75463	1,029	1,038
0,60000	0,78903	1,023	1,046
0,65000	0,82098	1,018	1,055
0,70000	0,85084	1,013	1,065
0,75000	0,87889	1,009	1,076
0,80000	0,90539	1,006	1,089
0,85000	0,93057	1,004	1,102
0,90000	0,95462	1,002	1,117
0,95000	0,97771	1,000	1,133
1,00000	1,00000	1,000	1,151





Şekil 4.14: Metil etil keton (1)-toluen (2) sistemi deneysel verilerinin NRTL, Wilson model verileriyle karşılaştırılması



Şekil 4.15: Metil etil keton (1)-toluen (2) sistemi deneysel verilerinin UNIQUAC, UNIFAC model verileriyle karşılaştırılması

#### 4.2.5. 1,2-Diklor etan (1)-Toluen (2) Sistemi için Wilson Modeli Verileri

Tablo 4.9: 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) Sistemi Wilson modeli verileri

$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,0000	0,0000	1,7630	1,0000
0,0500	0,1342	1,3600	1,0060
0,1000	0,2194	1,1760	1,0170
0,1500	0,2894	1,0810	1,0290
0,2000	0,3531	1,0290	1,0390
0,2500	0,4133	1,0000	1,0460
0,3000	0,4709	0,9850	1,0510
0,3500	0,5261	0,9770	1,0540
0,4000	0,5789	0,9750	1,0540
0,4500	0,6290	0,9750	1,0530
0,5000	0,6764	0,9770	1,0490
0,5500	0,7209	0,9800	1,0430
0,6000	0,7626	0,9830	1,0370
0,6500	0,8014	0,9870	1,0280
0,7000	0,8373	0,9900	1,0190
0,7500	0,8705	0,9930	1,0090
0,8000	0,9011	0,9960	0,9980
0,8500	0,9291	0,9970	0,9870
0,9000	0,9549	0,9990	0,9750
0,9500	0,9785	1,0000	0,9630
1,0000	1,0000	1,0000	0,9500

#### 4.2.6. 1,2-Diklor etan (1)-Toluen (2) Sistemi için NRTL Modeli Verileri

Tablo 4.10: 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) Sistemi NRTL modeli verileri

$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,0000	0,0000	3,6260	1,0000
0,0500	0,1240	1,2550	1,0160
0,1000	0,2081	1,1090	1,0250
0,1500	0,2865	1,0670	1,0300
0,2000	0,3587	1,0490	1,0340
0,2500	0,4251	1,0390	1,0360
0,3000	0,4860	1,0320	1,0390
0,3500	0,5419	1,0270	1,0410
0,4000	0,5935	1,0220	1,0430
0,4500	0,6411	1,0190	1,0460
0,5000	0,6853	1,0150	1,0490
0,5500	0,7263	1,0130	1,0520
0,6000	0,7646	1,0100	1,0550
0,6500	0,8004	1,0080	1,0590
0,7000	0,8339	1,0060	1,0630
0,7500	0,8655	1,0040	1,0680
0,8000	0,8953	1,0030	1,0730
0,8500	0,9234	1,0010	1,0780
0,9000	0,9502	1,0010	1,0840
0,9500	0,9757	1,0000	1,0910
1,0000	1,0000	1,0000	1,0980

#### 4.2.7. 1,2-Diklor etan (1)-Toluen (2) Sistemi için UNIFAC Modeli Verileri

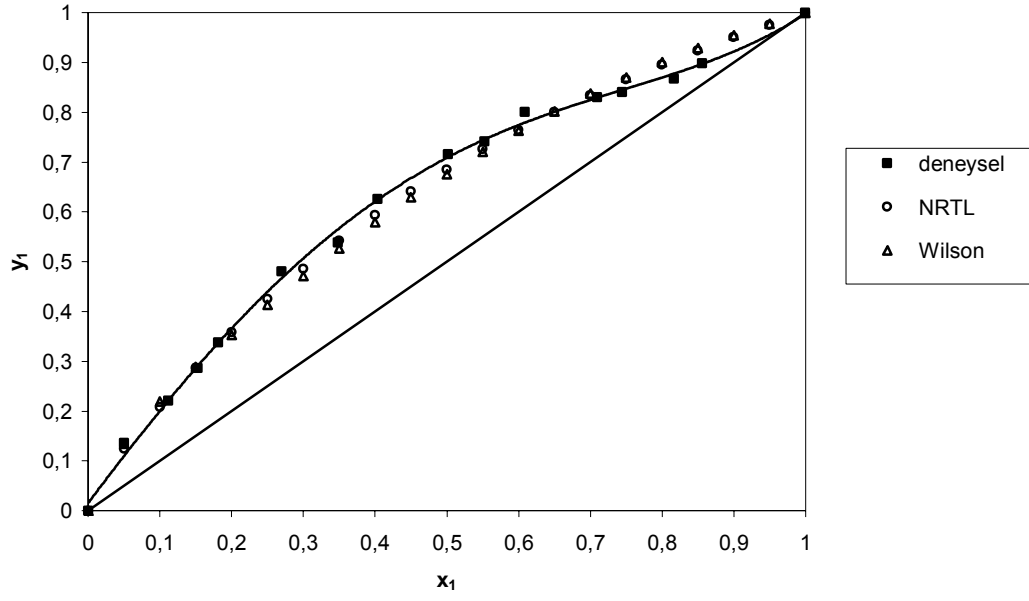
Tablo 4.11: 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) sistemi UNIFAC modeli verileri

$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,0000	0,0000	1,0010	1,0000
0,0500	0,1026	1,0010	1,0000
0,1000	0,1951	1,0010	1,0000
0,1500	0,2787	1,0010	1,0000
0,2000	0,3547	1,0010	1,0000
0,2500	0,4239	1,0010	1,0000
0,3000	0,4870	1,0000	1,0000
0,3500	0,5448	1,0000	1,0000
0,4000	0,5980	1,0000	1,0000
0,4500	0,6468	1,0000	1,0000
0,5000	0,6919	1,0000	1,0000
0,5500	0,7336	1,0000	0,9990
0,6000	0,7722	1,0000	0,9990
0,6500	0,8081	1,0000	0,9990
0,7000	0,8414	1,0000	0,9990
0,7500	0,8725	1,0000	0,9990
0,8000	0,9014	1,0000	0,9990
0,8500	0,9285	1,0000	0,9990
0,9000	0,9539	1,0000	0,9990
0,9500	0,9777	1,0000	0,9990
1,0000	1,0000	1,0000	0,9990

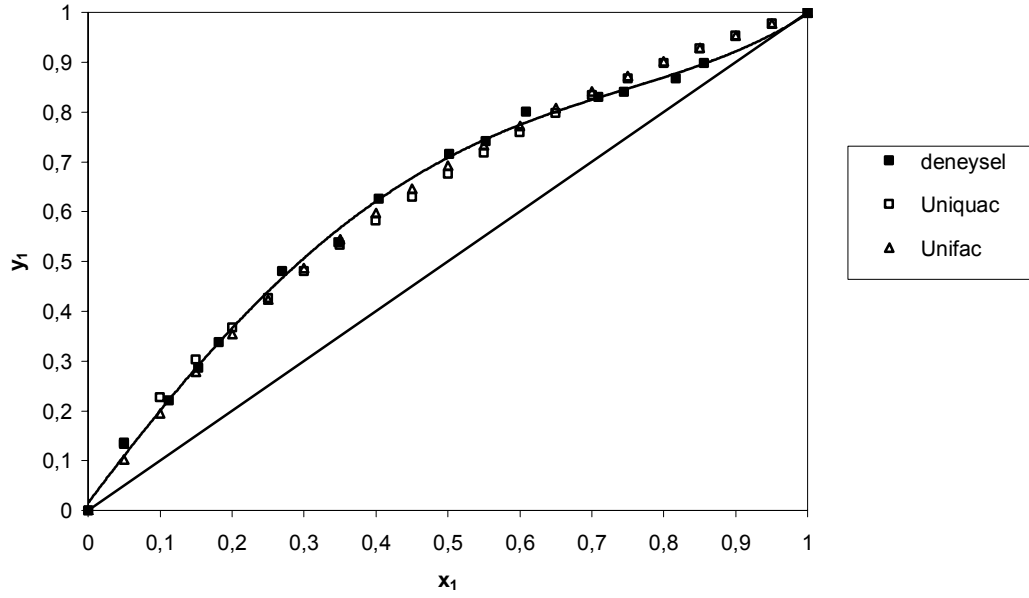
#### 4.2.8. 1,2-Diklor etan (1)-Toluen (2) Sistemi için UNIQUAC Modeli Verileri

Tablo 4.12: 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) sistemi UNIQUAC modeli verileri

$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,0000	0,0000	1,5350	1,0000
0,0500	0,1333	1,3470	1,0030
0,1000	0,2274	1,2230	1,0100
0,1500	0,3024	1,1400	1,0200
0,2000	0,3672	1,0840	1,0300
0,2500	0,4260	1,0460	1,0400
0,3000	0,4809	1,0210	1,0480
0,3500	0,5329	1,0040	1,0550
0,4000	0,5825	0,9940	1,0600
0,4500	0,6300	0,9880	1,0630
0,5000	0,6753	0,9850	1,0640
0,5500	0,7185	0,9850	1,0620
0,6000	0,7594	0,9860	1,0590
0,6500	0,7979	0,9880	1,0530
0,7000	0,8340	0,9900	1,0450
0,7500	0,8676	0,9930	1,0350
0,8000	0,8987	0,9950	1,0240
0,8500	0,9275	0,9970	1,0120
0,9000	0,9539	0,9990	0,9980
0,9500	0,9780	1,0000	0,9840
1,0000	1,0000	1,0000	0,9690



Şekil 4.16: 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) sistemi deneysel verilerinin NRTL, Wilson model verileriyle karşılaştırılması



Şekil 4.17: 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) sistemi deneysel verilerinin UNIFAC, UNIQUAC model verileriyle karşılaştırılması

#### 4.2.9. Toluen (1)-Asetik asit (2) Sistemi için NRTL Modeli Verileri

Tablo 4.13: Toluen (1)-asetik asit (2) sistemi NRTL modeli verileri

$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,0000	0,0000	7,5950	1,0000
0,0500	0,2514	5,1120	1,0100
0,1000	0,3401	3,7690	1,0360
0,1500	0,3876	2,9950	1,0710
0,2000	0,4212	2,5130	1,1110
0,2500	0,4491	2,1920	1,1560
0,3000	0,4747	1,9650	1,2050
0,3500	0,4992	1,7970	1,2580
0,4000	0,5231	1,6680	1,3150
0,4500	0,5466	1,5640	1,3790
0,5000	0,5698	1,4790	1,4520
0,5500	0,5925	1,4050	1,5360
0,6000	0,6149	1,3400	1,6380
0,6500	0,6367	1,2810	1,7660
0,7000	0,6580	1,2260	1,9340
0,7500	0,6791	1,1750	2,1650
0,8000	0,7005	1,1270	2,5020
0,8500	0,7243	1,0820	3,0270
0,9000	0,7558	1,0430	3,9230
0,9500	0,8144	1,0130	5,6390
1,0000	1,0000	1,0000	9,3700

#### 4.2.10. Toluen (1)-Asetik asit (2) Sistemi için Wilson Modeli Verileri

Tablo 4.14: Toluen (1)-asetik asit (2) sistemi Wilson modeli verileri

$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,0000	0,0000	5,6430	1,0000
0,0500	0,2329	4,6150	1,0060
0,1000	0,3479	3,8480	1,0210
0,1500	0,4149	3,2700	1,0460
0,2000	0,4583	2,8270	1,0790
0,2500	0,4888	2,4810	1,1220
0,3000	0,5115	2,2050	1,1730
0,3500	0,5294	1,9830	1,2350
0,4000	0,5443	1,8000	1,3090
0,4500	0,5574	1,6490	1,3980
0,5000	0,5694	1,5220	1,5030
0,5500	0,5812	1,4160	1,6280
0,6000	0,5933	1,3260	1,7800
0,6500	0,6065	1,2490	1,9650
0,7000	0,6218	1,1850	2,1940
0,7500	0,6405	1,1300	2,4810
0,8000	0,6649	1,0860	2,8480
0,8500	0,6988	1,0500	3,3280
0,9000	0,7498	1,0230	3,9690
0,9500	0,8348	1,0060	4,8410
1,0000	1,0000	1,0000	6,0190



#### 4.2.11. Toluen (1)-Asetik asit (2) Sistemi için UNIFAC Modeli Verileri

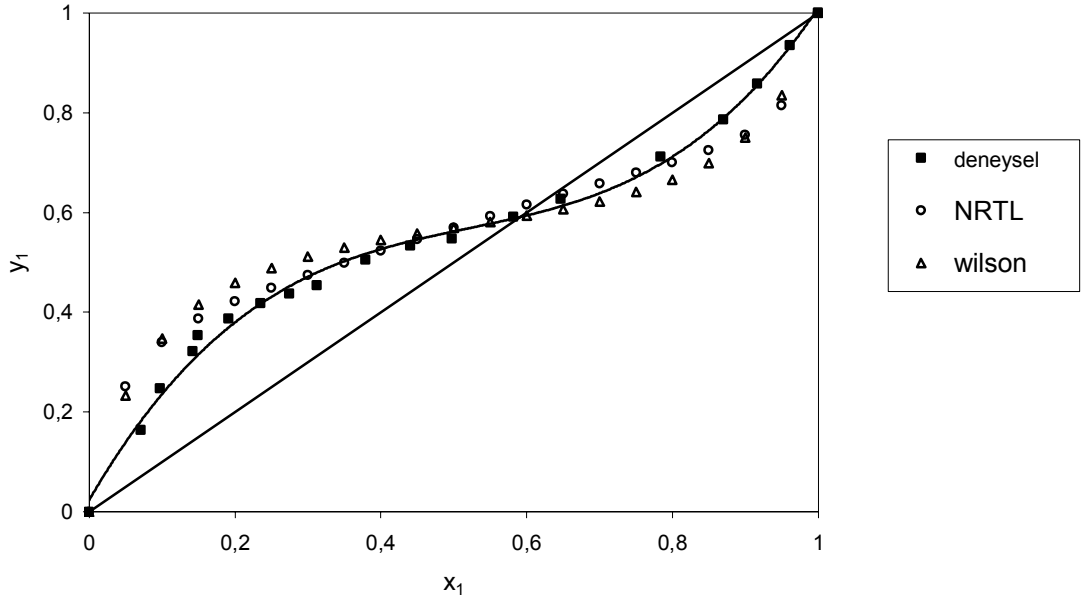
Tablo 4.15: Toluen (1)-asetik asit (2) sistemi UNIFAC modeli verileri

$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,0000	0,0000	3,2900	1,0000
0,0500	0,1637	2,9970	1,0030
0,1000	0,2741	2,7300	1,0110
0,1500	0,3523	2,4910	1,0240
0,2000	0,4101	2,2780	1,0450
0,2500	0,4542	2,0890	1,0720
0,3000	0,4890	1,9230	1,1060
0,3500	0,5172	1,7760	1,1500
0,4000	0,5408	1,6480	1,2030
0,4500	0,5613	1,5350	1,2680
0,5000	0,5797	1,4370	1,3470
0,5500	0,5969	1,3510	1,4420
0,6000	0,6139	1,2760	1,5580
0,6500	0,6316	1,2120	1,6990
0,7000	0,6510	1,1570	1,8710
0,7500	0,6737	1,1100	2,0850
0,8000	0,7017	1,0720	2,3520
0,8500	0,7385	1,0410	2,6890
0,9000	0,7902	1,0190	3,1210
0,9500	0,8687	1,0050	3,6760
1,0000	1,0000	1,0000	4,3850

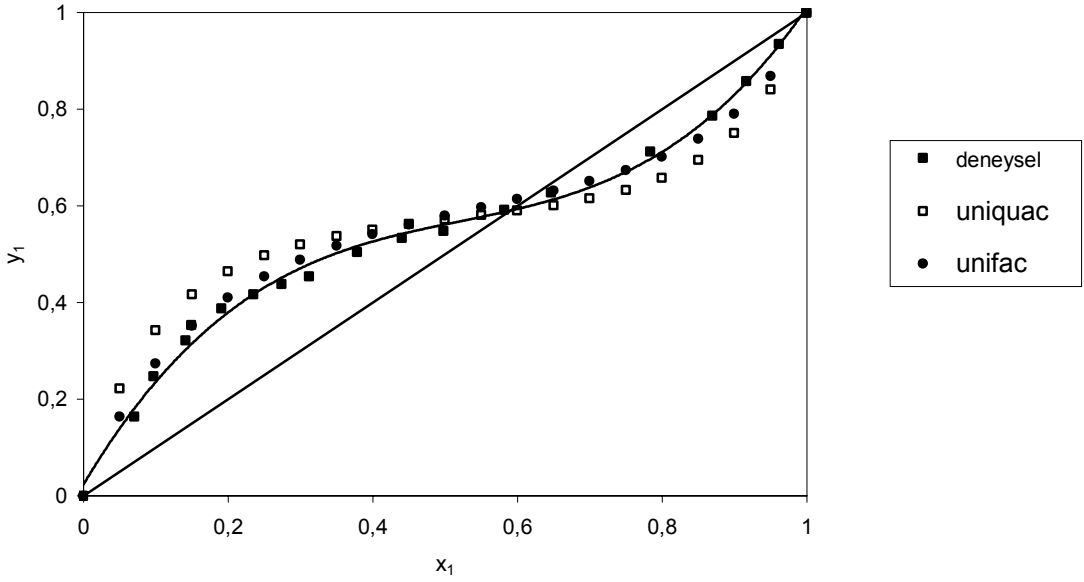
#### 4.2.12. Toluen (1)-Asetik asit (2) Sistemi için UNIQUAC Modeli Verileri

Tablo 4.16: Toluen (1)-asetik asit (2) sistemi UNIQUAC modeli verileri

$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,0000	0,0000	5,0640	1,0000
0,0500	0,2225	4,3510	1,0040
0,1000	0,3432	3,7580	1,0170
0,1500	0,4165	3,2690	1,0380
0,2000	0,4643	2,8650	1,0680
0,2500	0,4970	2,5320	1,1080
0,3000	0,5204	2,2550	1,1580
0,3500	0,5377	2,0240	1,2210
0,4000	0,5511	1,8310	1,2970
0,4500	0,5620	1,6690	1,3890
0,5000	0,5715	1,5330	1,5000
0,5500	0,5806	1,4180	1,6350
0,6000	0,5901	1,3220	1,7980
0,6500	0,6012	1,2410	1,9970
0,7000	0,6150	1,1750	2,2390
0,7500	0,6332	1,1200	2,5370
0,8000	0,6585	1,0760	2,9060
0,8500	0,6951	1,0430	3,3630
0,9000	0,7506	1,0190	3,9330
0,9500	0,8403	1,0050	4,6380
1,0000	1,0000	1,0000	5,4880



Şekil 4.18: Toluen (1)-asetik asit (2) sisteminde deneysel verilerin NRTL, Wilson model verileriyle karşılaştırılması



Şekil 4.19: Toluen (1)-asetik asit (2) sisteminde deneysel verilerin UNIFAC, UNIQUAC model verileriyle karşılaştırılması

#### 4.2.13. 1,2-Diklor etan (1)-Asetik asit (2) Sistemi için NRTL Modeli Verileri

Tablo 4.17: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) Sistemi NRTL modeli verileri

$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,0000	0,0000	7,5950	1,0000
0,0500	0,2514	5,1120	1,0100
0,1000	0,3401	3,7690	1,0360
0,1500	0,3876	2,9950	1,0710
0,2000	0,4212	2,5130	1,1110
0,2500	0,4491	2,1920	1,1560
0,3000	0,4747	1,9650	1,2050
0,3500	0,4992	1,7970	1,2580
0,4000	0,5231	1,6680	1,3150
0,4500	0,5466	1,5640	1,3790
0,5000	0,5698	1,4790	1,4520
0,5500	0,5925	1,4050	1,5360
0,6000	0,6149	1,3400	1,6380
0,6500	0,6367	1,2810	1,7660
0,7000	0,6580	1,2260	1,9340
0,7500	0,6791	1,1750	2,1650
0,8000	0,7005	1,1270	2,5020
0,8500	0,7243	1,0820	3,0270
0,9000	0,7558	1,0430	3,9230
0,9500	0,8144	1,0130	5,6390
1,0000	1,0000	1,0000	9,3700

#### 4.2.14. 1,2-Diklor etan (1)-Asetik asit (2) Sistemi için Wilson Modeli Verileri

Tablo 4.18: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) Sistemi Wilson modeli verileri

$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,0000	0,0000	2,7050	1,0000
0,0500	0,2655	2,5180	1,0020
0,1000	0,4225	2,3460	1,0080
0,1500	0,5242	2,1890	1,0190
0,2000	0,5947	2,0450	1,0340
0,2500	0,6460	1,9150	1,0550
0,3000	0,6851	1,7970	1,0820
0,3500	0,7158	1,6890	1,1150
0,4000	0,7408	1,5910	1,1570
0,4500	0,7616	1,5020	1,2080
0,5000	0,7794	1,4220	1,2700
0,5500	0,7951	1,3490	1,3470
0,6000	0,8095	1,2830	1,4430
0,6500	0,8230	1,2240	1,5620
0,7000	0,8365	1,1710	1,7130
0,7500	0,8504	1,1250	1,9080
0,8000	0,8659	1,0840	2,1650
0,8500	0,8843	1,0510	2,5150
0,9000	0,9083	1,0240	3,0080
0,9500	0,9430	1,0070	3,7380
1,0000	1,0000	1,0000	4,8880

#### 4.2.15. 1,2-Diklor etan (1)-Asetik asit (2) Sistemi için UNIFAC Modeli Verileri

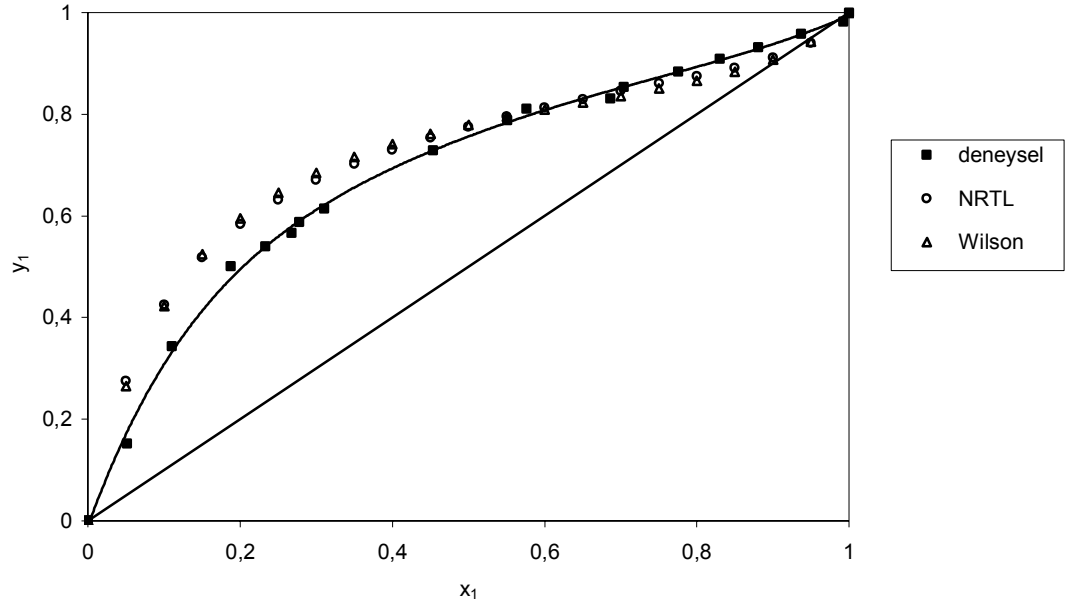
Tablo 4.19: 1,2-Diklor etan(1)-asetik asit(2) Sistemi UNIFAC modeli verileri

$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,0000	0,0000	2,3770	1,0000
0,0500	0,2426	2,2430	1,0020
0,1000	0,3954	2,1130	1,0080
0,1500	0,4982	1,9890	1,0170
0,2000	0,5711	1,8720	1,0320
0,2500	0,6252	1,7630	1,0510
0,3000	0,6668	1,6630	1,0760
0,3500	0,7000	1,5710	1,1080
0,4000	0,7271	1,4870	1,1460
0,4500	0,7501	1,4100	1,1940
0,5000	0,7701	1,3410	1,2510
0,5500	0,7880	1,2780	1,3200
0,6000	0,8048	1,2230	1,4040
0,6500	0,8209	1,1730	1,5060
0,7000	0,8371	1,1300	1,6310
0,7500	0,8542	1,0920	1,7850
0,8000	0,8729	1,0610	1,9770
0,8500	0,8945	1,0350	2,2190
0,9000	0,9208	1,0160	2,5300
0,9500	0,9544	1,0040	2,9350
1,0000	1,0000	1,0000	3,4740

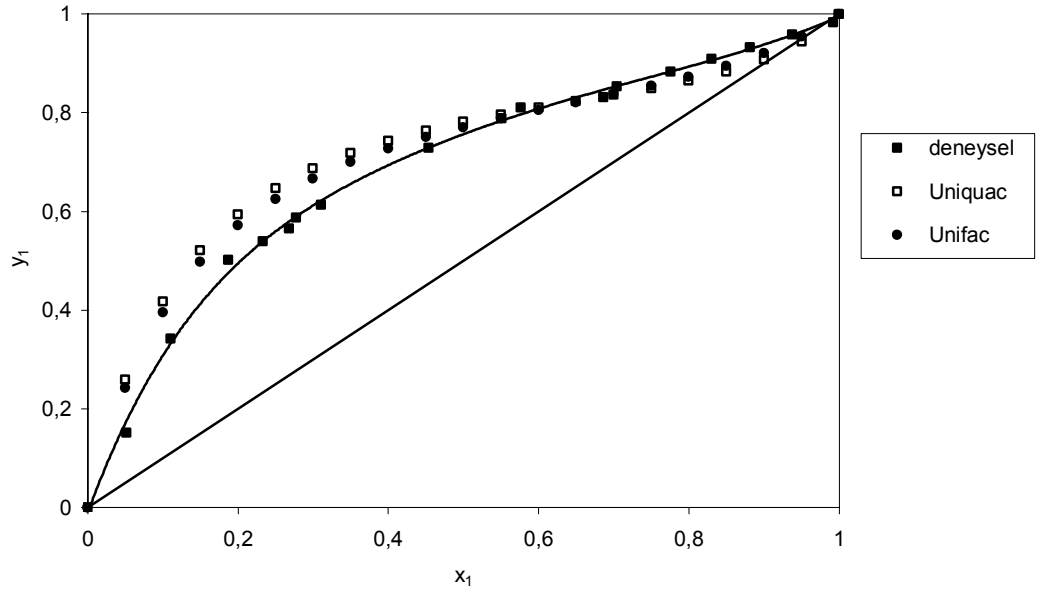
#### 4.2.16. 1,2-Diklor etan (1)-Asetik asit (2) Sistemi için UNIQUAC Modeli Verileri

Tablo 4.20: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) Sistemi UNIQUAC modeli verileri

$x_1$	$y_2$	$\gamma_1$	$\gamma_2$
0,0000	0,0000	2,5900	1,0000
0,0500	0,2592	2,4400	1,0020
0,1000	0,4172	2,2960	1,0070
0,1500	0,5212	2,1610	1,0160
0,2000	0,5938	2,0330	1,0300
0,2500	0,6468	1,9130	1,0490
0,3000	0,6870	1,8010	1,0750
0,3500	0,7183	1,6960	1,1070
0,4000	0,7434	1,6000	1,1470
0,4500	0,7641	1,5100	1,1980
0,5000	0,7815	1,4280	1,2610
0,5500	0,7966	1,3530	1,3400
0,6000	0,8102	1,2850	1,4380
0,6500	0,8230	1,2230	1,5620
0,7000	0,8358	1,1690	1,7180
0,7500	0,8492	1,1210	1,9190
0,8000	0,8645	1,0800	2,1820
0,8500	0,8833	1,0470	2,5300
0,9000	0,9082	1,0220	3,0040
0,9500	0,9440	1,0060	3,6630
1,0000	1,0000	1,0000	4,6080



Şekil 4.20: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) sisteminde deneysel verilerin NRTL, Wilson, model verileriyle karşılaştırılması



Şekil 4.21: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) sisteminde deneysel verilerin UNIQUAC, UNIFAC model verileriyle karşılaştırılması



Tablo 4.21: Metil etil keton (1)-toluen sistemi (2) sistemi etkileşim parametreleri

	$U_{12} - U_{22}$	$U_{21} - U_{11}$	$a_{12}$	$a_{21}$	$b_{12}$	$b_{21}$	$\alpha$
<b>Wilson</b>	-	-	49,813	265,770	-	-	-
<b>NRTL</b>	-	-	-	-	463,33	-329,95	0,191
<b>UNIQUAC</b>	366,37	-250,28	-	-	-	-	-

Tablo 4.22: 1,2-Diklor etan (1)-toluen (2) sistemi etkileşim parametreleri

	$U_{12} - U_{22}$	$U_{21} - U_{11}$	$a_{12}$	$a_{21}$	$b_{12}$	$b_{21}$	$\alpha$
<b>Wilson</b>	-	-	1654,670	-857,049	-	-	-
<b>NRTL</b>	-	-	-	-	21,04	476,35	2,733
<b>UNIQUAC</b>	-532,08	879,08	-	-	-	-	-

Tablo 4.23: Toluen (1)-asetik asit (2) sistemi etkileşim parametreleri

	$U_{12} - U_{22}$	$U_{21} - U_{11}$	$a_{12}$	$a_{21}$	$b_{12}$	$b_{21}$	$\alpha$
<b>Wilson</b>	-	-	340,536	1343,090	-	-	-
<b>NRTL</b>	-	-	-	-	666,30	600,01	0,727
<b>UNIQUAC</b>	664,23	-67,76	-	-	-	-	-

Tablo 4.24: 1,2-Diklor etan (1)-asetik asit (2) sistemi etkileşim parametreleri

	$U_{12} - U_{22}$	$U_{21} - U_{11}$	$a_{12}$	$a_{21}$	$b_{12}$	$b_{21}$	$\alpha$
<b>Wilson</b>	-	-	-31,663	1183,610	-	-	-
<b>NRTL</b>	-	-	-	-	505,26	263,99	0,883
<b>UNIQUAC</b>	730,13	-182,10	-	-	-	-	-

Not 1: Wilson modelindeki notasyon ile  $a_{12} = \lambda_{12} - \lambda_{11}$ ,  $a_{21} = \lambda_{21} - \lambda_{22}$  olarak açıklanmaktadır, Chem CAD 5.2 Professional bu değerleri cal/mol cinsinden vermiştir.

Not 2: Chem CAD 5.2 Professional  $U_{12} - U_{22}$  değerini cal/mol cinsinden vermiştir.

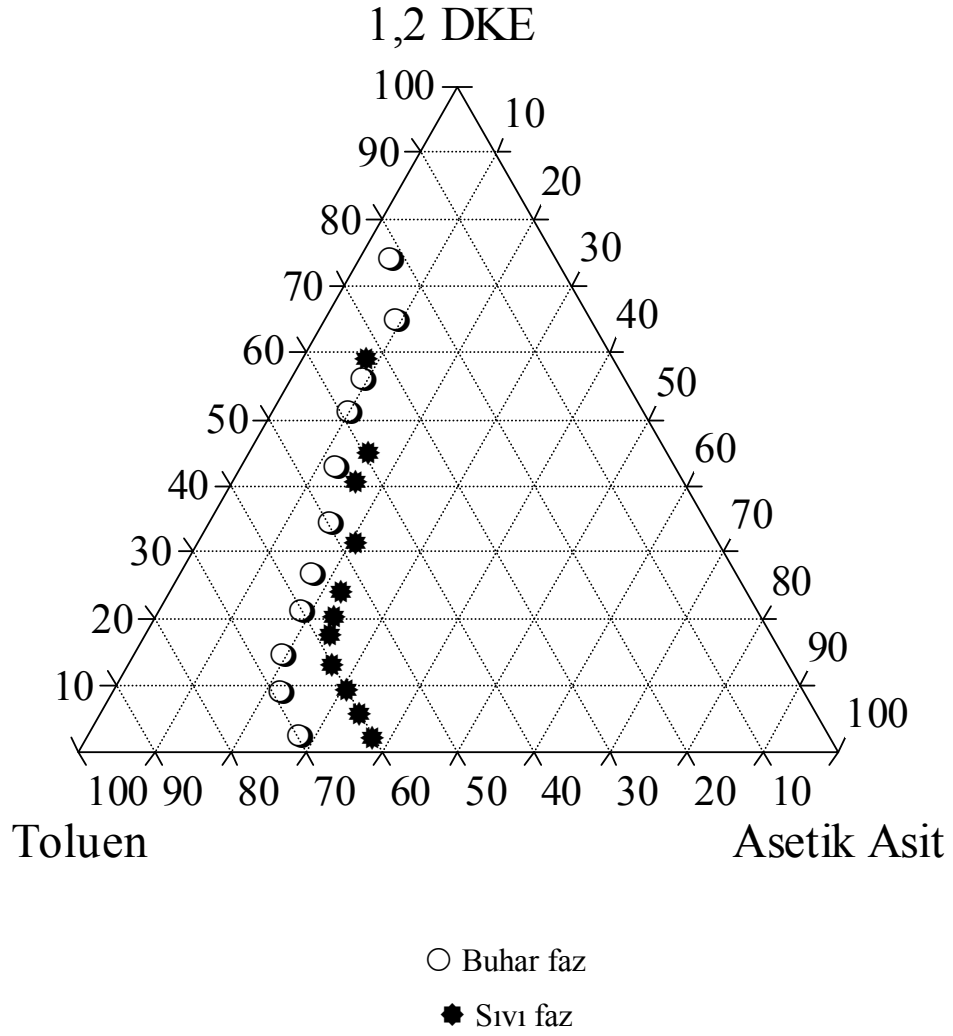
Not 3: NRTL modelindeki notasyon ile  $b_{12} = g_{12} - g_{11}$ ,  $b_{21} = g_{21} - g_{22}$  olarak açıklanmaktadır, Chem CAD 5.2 Professional bu değerleri Kelvin cinsinden vermiştir.

### 4.3. ÜÇLÜ SİSTEME AİT DENEYSEL VERİLER

#### 4.3.1. Toluen (1) - 1,2-Diklor etan (2)-Asetik asit (3) Üçlü Sistemi

Tablo 4.25 : Toluen (1) - 1, 2-diklor etan (2)-Asetik asit (3) üçlü sistemine ait sıvı-buhar denge verileri

Deney No	$x_1$	$x_2$	$y_1$	$y_2$	T (K)	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$\gamma_2$
1	0,6028	0,0181	0,6973	0,0232	102,50	1,4657	0,3522	1,2819
2	0,5658	0,0598	0,6896	0,0867	101,85	1,5748	0,4045	1,3418
3	0,6007	0,1303	0,6607	0,1414	100,80	1,4667	0,3108	1,5698
4	0,6018	0,0895	0,6021	0,2109	99,90	1,3710	0,6903	2,2256
5	0,5813	0,1711	0,5606	0,2628	98,30	1,3876	0,4683	2,2418
6	0,5617	0,2014	0,4976	0,3409	96,70	1,3392	0,5376	2,6230
7	0,5360	0,2352	0,4492	0,4235	95,60	1,3108	0,5882	2,8807
8	0,4801	0,3106	0,3928	0,5059	94,10	1,3412	0,5532	2,9207
9	0,4352	0,4024	0,3460	0,5572	92,80	1,3579	0,4865	2,8573
10	0,3945	0,4458	0,2205	0,7368	91,30	1,0017	0,6040	3,4716
11	0,3260	0,5884	0,2594	0,6470	90,20	1,4772	0,4137	2,7526



Şekil 4.22 : Toluen (1)-1, 2-diklor etan (2)- asetik asit (3) üçlü sistemine ait sıvı – buhar denge diyagramı

## 5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Metil etil keton-toluen, 1,2 diklor etan-toluen, toluen-asetik asit ve 1,2 diklor etan-asetik asit ikili karışımlarının 760 mmHg basıncında elde edilen deneysel verileri bir Q-Basic programı yardımıyla hesaplanarak, tablolarda verilmiş ve bu verilerden yola çıkılarak; sıvı-buhar denge eğrileri, kaynama noktalarının konsantrasyonla değişimini veren grafikler ve aktivite katsayılarının konsantrasyonla değişimini veren grafikler çizilmiştir. Daha sonra deneysel veriler ile Chem CAD 5.2 Professional programında NRTL, Wilson, UNIQUAC, UNIFAC modelleriyle aynı şartlarda hesaplanan veriler karşılaştırılarak sonuçlar tartışılmıştır.

Metil etil keton-toluen sistemine ait veriler ile söz konusu modellerdeki verilerin uyumluluk göstermiş olduğu görülmüştür.

1,2 Diklor etan-toluen sistemine ait veriler ile modellerden elde edilen verilerin genel olarak uyum gösterdiği ancak tam olarak örtüşmediği görülmüştür. 1,2 Diklor etan konsantrasyonunun düşük olduğu noktalarda değerler daha iyi uyum sağlamakta ancak konsantrasyon yükseldikçe büyük çapta olmayan sapmalar gözlenmiştir.

Toluen-asetik asit sistemine ait veriler ile modellerden elde edilen veriler arasında grafik eğilimi olarak genel bir uyum görülmüş ancak değerler tam çakışmamıştır. Özellikle toluenin düşük ve yüksek konsantrasyon değerinde olduğu noktalarda UNIQUAC, Wilson ve NRTL modellerinden sapmalar gözlenmiştir. UNIFAC modeliyle tam bir örtüşme gözlenmemişse diğer modellere göre veriler arasındaki uyumun daha fazla olduğu görülmüştür.

1,2 Diklor etan-asetik asit sistemine ait veriler ile modellerden elde edilen veriler arasında grafiksel olarak genel bir uyum görülmüş ancak değerlerin tam olarak örtüşmediği görülmüştür. Deneysel verilerin UNIFAC modelinden elde edilen verilere daha yakın seyrettiği tespit edilmiştir.

Toluen -1, 2-diklor etan-asetik asit üçlü sistemine ait denemelerden elde edilen veriler tablo 4.25'te verilmiş ve bu veriler ışığında şekil 4.22'de görüldüğü gibi üçlü karışım sıvı – buhar diyagramı çizilmiştir.

Bu çalışmanın devamı niteliğindeki araştırmalarda, ikili karışım sıvı – buhar denge verilerinden yola çıkılarak, üçlü sistem verilerine ulaşılması ve bunun için bir yöntem oluşturulması hedeflenmiştir.

## 6. KAYNAKLAR

1. RENON, H., PRAUSNITZ, J.M., 1968, Local Compositions in Thermodynamic Excess Functions for Liquid Mixtures, *AIChE Journal*, Vol. 14, No.1, 135-144
2. ABRAMS, D. S., PRAUSNITZ, J.M., 1975, Statistical Thermodynamics of Liquid Mixtures: A New Expression for the Excess Gibbs Enerjy of Partly or Completely Miscible Systems, *AIChE Journal*, Vol. 21, No. 1, 116-128
3. FREDENSLUND, a., JONES, R. L., PRAUSNITZ, J.M., 1975, *AIChE Journal*, Vol. 21, No.6, 1086-1099
4. SKJOLD-JORGENSEN, S., KOLBE, B., GHEMLING, J., RASMUSSEN, P., 1979, Vapour-Liquid Equilibria by UNIFAC Group Contribution. Revision end Extensiyon, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, Vol. 18, No.4, 714-722
5. ANDERSON, T.F., PRAUSNITZ, J.M., 1978, Application of the UNIQUAC Equation to Calculation of Multicomponent Phase Equilibria. 1. Vapor-Liquid Equilibria, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, Vol. 17, No.4, 552-560
6. TAMIR, A., WISNIAK, J., 1975, Vapour-Liquid Equilibria in Associating Solutions, *Chemical Engineering Science*, Vol. 30, 335-342
7. KYLE, B. G., 1992, *Chemical and Process Thermodynamics*, Second Edition, Prentice Hall Inc., USA.
8. DERR, E.L., DEAL, C. H., 1969, Distillation 1969, *Int. Conf. on Distillation*, 1969, London, 3, 32-40
9. GMEHLING, J., LI, J., SCHILLER, M., 1993, A Modified Model. 2. Present Parameter Matrix and Results for Different Thermodynamic Properties, *Ind. Eng. Chem.Res.*, Vol. 32, No. 1, 178-193
10. LEE, L., CHEN, W., HUANG, J., 1996, Experiments and Correlations of Phase Equilibria of Ethanol-ethyl Acetate-Water Ternary Mixture, *Chem. Eng. of Japan*, Vol. 29, No. 3, 427-438
11. DİNÇER, S., 1984, *Kimya Mühendisliğinde Denge Süreçlerinin Temodinamiği*, 1. Baskı, Boğaziçi Üniversitesi Yayınları, No. 319, İstanbul
12. SARIKAYA, Y., 1997, *Fizikokimya*, Gazi Yayınları, 2. Baskı, Ankara
13. WALAS, S., 1985, *Phase Equilibria in Chemical Engineering*, Butterworth Publishers, 260-261

14. GHEMLING, J., RASMUSSEN, P., FREDENSLIUND, A., 1982, Vapour-Liquid Equilibria by UNIFAC Group Contribution. Revision and Extension 2., *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, Vol. 21, No.1, 118-127
15. THOMAS, E. R., ECKERT, C. A., 1984, Prediction of Limiting Activity Coefficients by a Modified Separation Cohesive Energy Density Model and UNIFAC, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, Vol. 23, No.2, 194-209
16. SPALA, E. E., RICKER, N. L., 1982, Thermodynamic Model for Solvating Solutions with Physical Interactions, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, Vol. 21, No.3, 409-415
17. CHEN S. A., BAGLEY, E.B., 1978, *Chem. Eng. Sci.*, 33,161
18. FU, Y., SANDLER, S. I., ORBEY, H., 1995, A Modified UNIQUAC Model That Includes Hydrogen Bonding, *Ind. Eng. Chem. Res.* Vol. 34, No. 12, 4351-4363
19. KOCHIGI, K., TIEGS, D., GHEMLING, J., KOJIMA, K., 1990, Determination of New ASOG Parameters, *J. Chem. Eng. Jpn.*, Vol. 23, 453-463
20. WEIDLICH, U., GMEHLING, J., 1987, A Modified UNIFAC Model, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 26, 1372-1381
21. LARSEN, B. L., RASMUSSEN, P., FREDENSLUND, A., 1987 A Modified UNIFAC Group-Contribution Model for the Prediction of Phase Equilibria and Heats of Mixing, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 26, 2274-2286
22. SMITH, J. M., VEN NESS, H. C., 1998, *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*, Fourth Edition, McGraw-Hill Book Company, Singapore

## 7. EKLER

### EK A

Model verileri hesaplayan Chem CAD 5.2 Professional programının toluen-asetik asit sistemine ait Wilson modeli verileri sonuç sayfası

aatotwilso - Microsoft Word

Dosya Düzen Görünüm Ekle Biçim Araçlar Tablo Pencere Yardım

Normal Courier New 10

CHEMCAD 5, 2, 0 Page 1

Job Name: neslihan Date: 04/07/2005 Time: 16:50:50

XY data for Toluene / Acetic Acid

Wilson parameters: 340,536 1343,090

Mole Fractions									
T	Beg K	P	Da	X1	Y1	Gamma1	Gamma2	Phi1	Phi2
391,159	101325,391	0,00000	0,00000	0,00000	5,643	1,000	1,000	1,000	1,000
384,158	101325,391	0,05000	0,23290	4,615	1,006	1,000	1,000	1,000	1,000
380,330	101325,391	0,10000	0,34793	3,848	1,021	1,000	1,000	1,000	1,000
378,049	101325,391	0,15000	0,41490	3,270	1,046	1,000	1,000	1,000	1,000
376,609	101325,391	0,20000	0,45833	2,827	1,079	1,000	1,000	1,000	1,000
375,663	101325,391	0,25000	0,48877	2,481	1,122	1,000	1,000	1,000	1,000
375,023	101325,391	0,30000	0,51149	2,205	1,173	1,000	1,000	1,000	1,000
374,583	101325,391	0,35000	0,52942	1,983	1,235	1,000	1,000	1,000	1,000
374,277	101325,391	0,40000	0,54432	1,800	1,309	1,000	1,000	1,000	1,000
374,067	101325,391	0,45000	0,55736	1,649	1,398	1,000	1,000	1,000	1,000
373,929	101325,391	0,50000	0,56940	1,522	1,503	1,000	1,000	1,000	1,000
373,852	101325,391	0,55000	0,58115	1,416	1,628	1,000	1,000	1,000	1,000
373,833	101325,391	0,60000	0,59327	1,326	1,780	1,000	1,000	1,000	1,000
373,878	101325,391	0,65000	0,60650	1,249	1,965	1,000	1,000	1,000	1,000
374,008	101325,391	0,70000	0,62180	1,185	2,194	1,000	1,000	1,000	1,000
374,258	101325,391	0,75000	0,64054	1,130	2,481	1,000	1,000	1,000	1,000
374,697	101325,391	0,80000	0,66491	1,086	2,848	1,000	1,000	1,000	1,000
375,448	101325,391	0,85000	0,69878	1,050	3,328	1,000	1,000	1,000	1,000
376,757	101325,391	0,90000	0,74975	1,023	3,969	1,000	1,000	1,000	1,000
379,141	101325,391	0,95000	0,83484	1,006	4,841	1,000	1,000	1,000	1,000
383,830	101325,391	1,00000	1,00000	1,000	6,019	1,000	1,000	1,000	1,000

Sayfa 1 Böl 1 1/1 Bgl 6,1 cm Sat 10 Süt 46 KAY DİM SEÇ ÜYÜZ Türkçe

Başlat TEZ ÇALIŞMASI 3½ Disket (A:) W 2 Microsoft Yazım ve Dilişisi Durumu NESİL - Not D... TR 00:45



**EK B**

Deneysel aktivite katsayılarını hesaplayan Q-Basic programının toluen-1,2-diklor etan-asetik asit sistemine ait sonuç sayfası

NESİL - Not Defteri

Dosya Düzen Biçim Görünüm Yardım

D. NO	X1	X2	Y1	Y2	T	DENEYSEL	VLE	DEĞERLERİ"	Gama1	Gama2	Gama3
1	0.60276	0.01805	0.69725	0.02316	102.50	1.465742	0.352234	1.281917			
2	0.56576	0.05981	0.68961	0.08671	101.85	1.574836	0.404471	1.341809			
3	0.60070	0.13030	0.66070	0.14140	100.80	1.466660	0.310776	1.569770			
4	0.60177	0.08949	0.60210	0.21090	99.90	1.371047	0.690261	2.225602			
5	0.58130	0.17110	0.56058	0.26276	98.30	1.387555	0.468296	2.241806			
6	0.56170	0.20140	0.49763	0.34089	96.70	1.339158	0.537591	2.622984			
7	0.53601	0.23522	0.44918	0.42346	95.60	1.310763	0.588160	2.880717			
8	0.48008	0.31059	0.39275	0.50592	94.10	1.341202	0.553218	2.920662			
9	0.43524	0.40244	0.34599	0.55724	92.80	1.357947	0.486478	2.857279			
10	0.39447	0.44582	0.22050	0.73680	91.30	1.001678	0.604024	3.471598			
11	0.32603	0.58842	0.25940	0.64697	90.20	1.477170	0.413743	2.752631			

Başlat

TEZ ÇALIŞMASI 3½ Disket (A:) 2 Microsoft ... Microsoft Exc... NESİL - Not D... TR 00:48

## 8. ÖZGEÇMİŞ

26 Haziran 1979 İstanbul doğumludur. 1997 yılında Pertevniyal Anadolu Lisesi'ni bitirmiş, 1998 yılında İstanbul Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Kimya Mühendisliği Bölümüne girmiştir. 2001 yılında Yunisan Tekstil A.Ş. de 1.5 ay İşletme ve Laboratuvar stajı yapmıştır. Prof. Dr. Umut Dramur danışmanlığında “Yüksek Safılıkta Sızma Zeytinyağı Üretimi” konulu bitirme tezini vererek 2002 yılında lisans eğitimini tamamlayıp, İstanbul Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Mühendisliği Anabilim dalında yüksek lisans eğitimine başlamıştır. Ağustos 2003'te, yapı ve endüstriyel grubu yüzey örtü malzemeleri üreten bir firmada kalite güvence mühendisi olarak başladığı görevine halen devam etmektedir.