



دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه، گروه مهندسی شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد (M.Sc.)

مهندسی شیمی

گرایش : بیوتکنولوژی

عنوان

مدل سازی ترمودینامیکی استخراج زیست مولکول ها با سامانه های دو فازي آبی حاوی مایع یونی با استفاده از معادلات UNIQUAC-NRF , UNIQUAC

استاد راهنما

دکتر عبدالرضا مقدسی

استاد مشاور

دکتر صاحبعلی منافی

نگارش

فاطمه عاشوری

بهار ۱۳۹۴

فهرست مطالب

۱- مقدمه

۲- پیشینه تحقیق (مروری بر کارهای گذشته)

۳- توصیف فرایند

۳- معادلات ترمودینامیگی ارائه شده

۴- الگوریتم محاسبات

۵- بحث و بررسی نتایج

۶- نتیجه گیری و پیشنهادات

۷- منابع و مراجع

اهمیت استخراج مایع - مایع با تولید سیستم های آبی دو فاز (ATPS) برای تفکیک و خالص سازی درشت مولکول هایی مانند پروتئین ها یا آنتی بیوتیک ها افزایش یافته است. هزینه ی این فرآیند در مقایسه با هزینه ی روش های معمول تفکیک زیست مولکول ها به دلیل استفاده از استخراج کننده ها و محدودیت تعداد مراحل کمتر است. همچنین فعالیت اغلب زیست مولکول ها نیز حفظ می شود. ATPS یک فن مطمئن جداسازی و تصفیه را برای زیست مولکول ها فراهم می کند که از عهده نیازهایی که در بالا ذکر شده است برمی آید.

۱-۱ مزایا و ویژگی های مایعات یونی

الف) داشتن فشار بخار ناچیز

ب) رسانا بودن

ج) تشکیل یک سیستم دوفازی مناسب برای جداسازی (Separation Techniques).

د) قابلیت طراحی برای هر واکنش

ه) پایداری گرمایی زیادی و قابلیت بازیافت آنها

۲- مروری بر کارهای گذشته

نتیجه	سیستم دو فازی	محقق
<p>بهترین سیستم برای پیش بینی تقسیم پروتئین PEG/tartrate انتخاب شد و با مدل پیتزر مدل سازی انجام دادند که چارچوب ترمودینامیکی مناسبی برای تشریح و پیش بینی تعادل این سیستم ها فراهم کرد. ضرایب تقسیم محاسباتی و آزمایشگاهی با یکدیگر همخوانی داشتند</p>	<p>تعادل فازی و تقسیم پروتئین های پپسین و لیزوزیم و بتا-لاکتوگلوبولین، کاتالاز و آلفا-آمیلاز را در سیستم دو فازی آبی PEG و نمک های مختلف بررسی و شبیه سازی نمودند.</p>	<p>Brenda Perez و همکاران در سال ۲۰۱۳</p>
<p>تاثیرات دما، وزن مولکولی پلیمر، غلظت پلیمر و غلظت نمک بر ضریب توزیع را مورد مطالعه قرار دادند الگوی Chen-NRTL می تواند به درستی و با دقت ضریب توزیع را در سیستم های دوفازی مایع بهم مرتبط سازد</p>	<p>توزیع آنتی بیوتیک Cephalexin در سیستم های دو فازی آبی PEG و K_2HPO_4 یا $Na_3Citrate$ و مدل سازی سیستم</p>	<p>پازوکی و همکاران در سال ۲۰۰۹ [1]</p>
<p>اثرات pH و تجمع نمک را مورد مطالعه قرار دادند و مدل vers برای توضیح معادله فازی به کار گرفته شد و به خوبی قادر به پیش بینی سیستم است.</p>	<p>توزیع برخی زیست مولکول ها مانند آنزیم lysozyme، bovine serum albumin و α-amylase را در سیستم های دو فازی آبی PEG و K_2HPO_4 و Na_2SO_4 و مدل سازی سیستم</p>	<p>حق طلب و همکاران در سال ۲۰۰۱ [2]</p>
<p>ضریب توزیع پذیری آمینواسید ها طراحی شد و برای مطالعه رفتار تعادلی سیستم از معادله حالت SAFT استفاده شده است که این مدل توانسته به خوبی رفتار سیستم را پیش بینی کند.</p>	<p>مطالعه آزمایشگاهی سیستم های دو فازی آبی حاوی مایع یونی برای جداسازی آمینواسید ها</p>	<p>همکاران [3]</p>

۳- توصیف فرایند

در این بررسی به مدل سازی سیستم های دوفازی آبی حاوی مایع یونی با استفاده از نرم افزار MATLAB پرداخته می شود. به این منظور از داده های آزمایشگاهی محققان [۳] در این زمینه استفاده شده است که جداسازی آمینواسید های گلوتامیک اسید، فنیل آلانین و تریپتوفان را در دو فاز آبی و مایع یونی در دمای 298/15 کلوین و فشار اتمسفریک بررسی کرده اند. برای این کار از مایع یونی آب گریز ۱- بوتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم بیس تری فلورومتیل سولفونیل ایمید $[C_6mim][Tf_2N]$ استفاده شده است. برای مطالعه رفتار تعادلی سیستم از معادلات UNIQUAC و UNIQUAC-NRF استفاده می شود و پارامترهای برهم کنش دوتایی اجزاء با استفاده از داده های تعادلی بهینه شده است.

$$\frac{g^E(\text{ترکیبی})}{RT} = \sum_i x_i \ln \frac{\varphi_i}{x_i} + \sum_i \frac{z}{2} q_i x_i \ln \frac{\theta_i}{\varphi_i}$$

$$\frac{g^E(\text{باقیمانده})}{RT} = - \sum_i q_i x_i \ln \sum_i \theta_i \tau_{ji}$$

$$\tau_{ji} \equiv \exp\left(-\left[\frac{u_{ji} - u_{ii}}{RT}\right]\right)$$

$$\ln \gamma_i = \ln \frac{\varphi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\varphi_i} + I_j - \frac{\varphi_i}{x_i} \sum_j x_j I_j - q_i \ln \left(\sum_j \theta_j \tau_{ji} \right) + q_i - q_i \sum_j \frac{\theta_j \tau_{ij}}{\sum_k \theta_k \tau_{kj}}$$

$$I_j = \left(\frac{z}{2}\right) (\tau_j - q_j) - (r_j - 1)$$

$$\theta_i \equiv \frac{q_i x_i}{\sum_j q_j x_j}$$

$$\varphi_i \equiv \frac{r_j x_j}{\sum_j r_j x_j}$$

$$\ln \gamma_i^C = \ln \frac{\Phi_i}{x_i} + \frac{Z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} + l_i - \frac{\Phi_i}{x_i} \sum_{j=1}^N x_j l_j$$

$$\ln \gamma_i^R = q_i \left[1 + \ln \Gamma_{ii} - \sum_{j=1}^N \theta_j \Gamma_{ij} \right.$$

$$\left. + (1 - \theta_i) \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \theta_j \ln \left(\frac{\Gamma_{ij} \Gamma_{ji}}{\Gamma_{ii} \Gamma_{jj}} \right) - \frac{1}{2} \sum_{\substack{K=1 \\ K \neq I}}^N \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq K, i}}^N \theta_K \theta_l \ln \left(\frac{\Gamma_{kl} \Gamma_{lk}}{\Gamma_{kk} \Gamma_{ll}} \right) \right]$$

$$\Phi_i = \frac{r_i x_i}{\sum_{j=1}^m r_j x_j}$$

$$\Gamma_{ij} = \frac{\tau_{ij}}{\sum \tau_{ij} \theta_k}$$

$$\theta_i = \frac{q_i x_i}{\sum_{j=1}^m q_j x_j}$$

$$\tau_{ij} = \exp \left(\frac{-a_{ij}}{T} \right)$$

$$\tau_{ii} = \tau_{jj} = 1.0$$

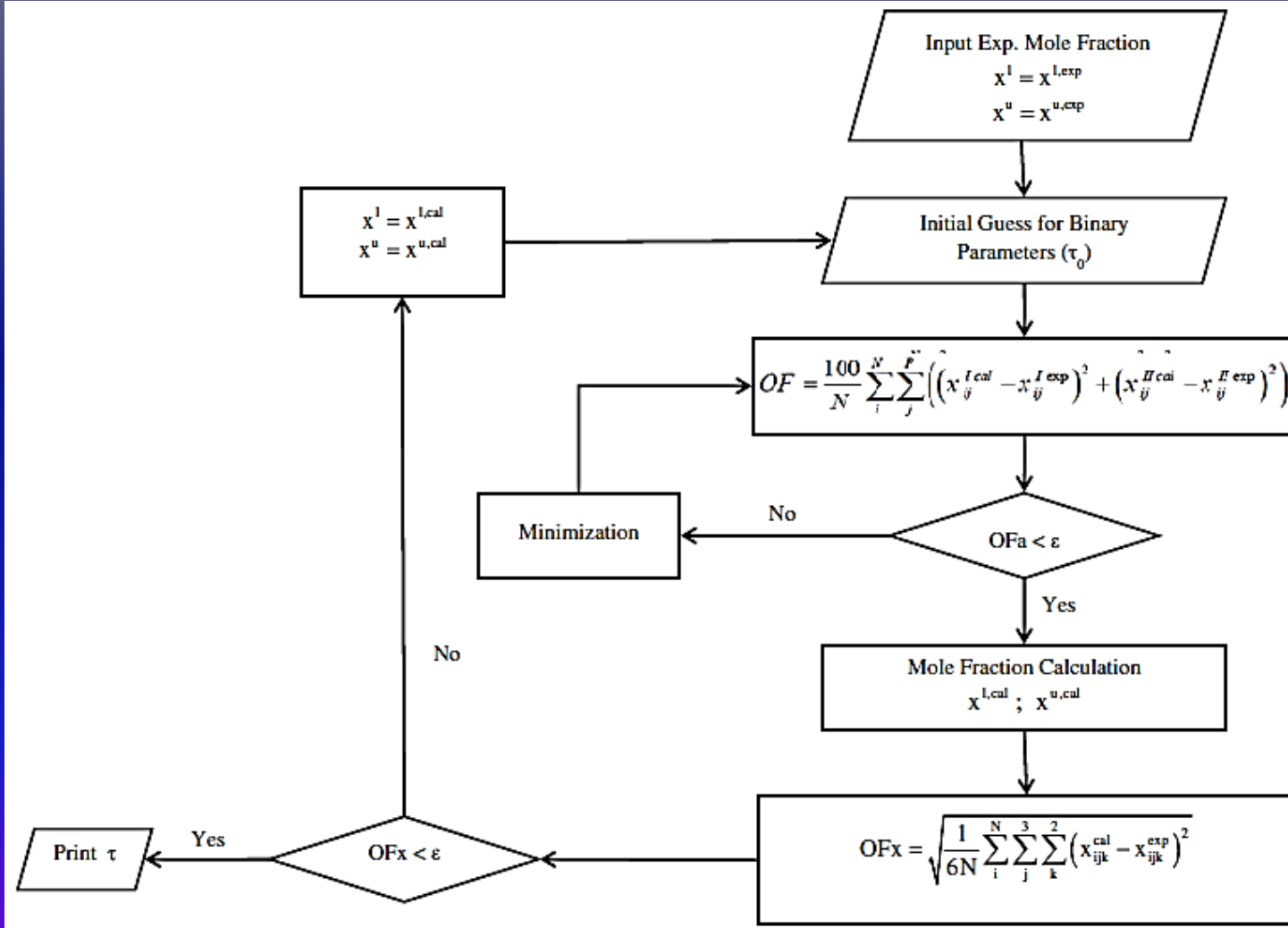
$$l_j = \frac{Z}{2} (r_j - q_j) - (r_j - 1)$$

$$a_{ij} = \alpha_{ij} + \beta_{ij} T + \delta_{ij} T^2$$

$$Z = 5 - 10$$

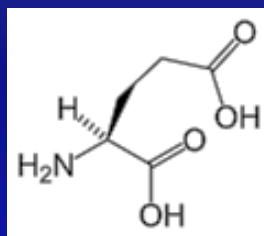
$$a_{ij} = (u_{ij} - u_{jj}) / R$$

الگوریتم محاسبات

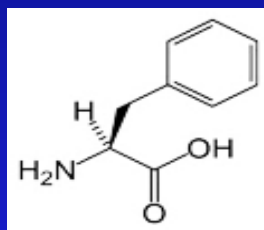


اصلی ترین ساختار پروتئین ها و آنزیم ها را اسیدهای آمینه تشکیل می دهند که تفاوت اصلی آن ها با کربو هیدرات و چربی در وجود نیتروژن در ساختار سلولی آمینو اسید ها علاوه بر کربن ، هیدروژن و اکسیژن است. هر اسید آمینه، از یک کربن نامتقارن به نام کربن α تشکیل یافته است که با چهار گروه مختلف کربوکسیل (COOH) اتم هیدروژن، گروه آمینه بازی و یک زنجیره غیر جانبی (R-) پیوند برقرار می کند

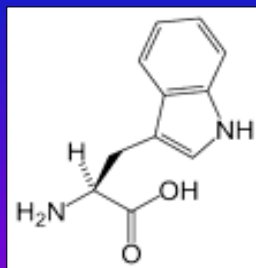
معرفی آمینواسید های مورد مطالعه



الف) گلو تامیک اسید



ب) فنیل آلانین



ج) تریپتوفان

بحث و بررسی نتایج

جدول (۱) پارامترهای r , q

اجزا	r	q	منابع
آب	0.92	1.42	[۴]
مایع یونی	11.2	7.29	[۴]
گلوتامیک اسید	2.9281	2.3424	-
تریپتوفان	4.4627	3.5701	-
فنیل آلانین	4.0261	3.2208	-

پارامترهای r , q برای آمینو اسیدهای مورد مطالعه در دسترس نبود در نتیجه از روابط موجود محاسبه گردید. [۵]

$$r_i = 0.029281v_m$$

$$q_i = \frac{(z-2)r_i}{z} + \frac{2(1-l_i)}{z}$$

$$Z=10$$

کسر وزنی های مدل سازی در فاز مایع یونی با معادله UNIQUAC

۰/۰۰۰۱۳۹	۰/۰۰۰۱
۰/۰۰۰۱۷۷	۰/۰۰۰۱
۰/۰۰۰۱۹۲	۰/۰۰۰۲
۰/۰۰۰۲۰۷	۰/۰۰۰۲
۰/۰۰۰۳۱	۰/۰۰۰۴
۰/۰۰۰۳۴۴	۰/۰۰۰۴

(ب)

کسر وزنی های مدل سازی در فاز آبی با معادله UNIQUAC

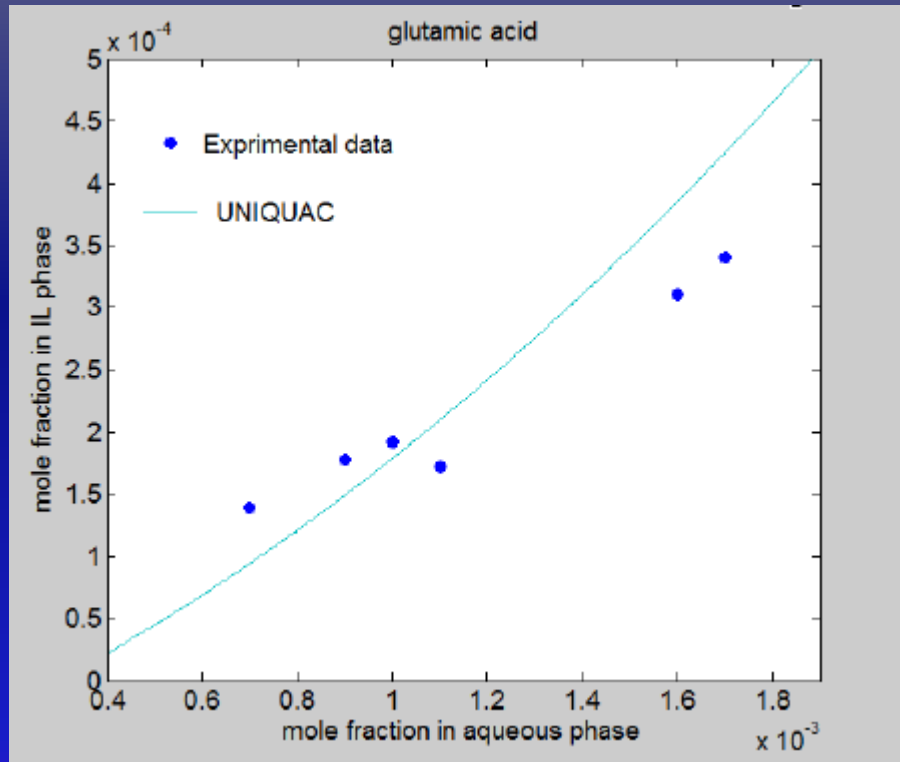
۰/۰۰۰۳۹	۰/۰۰۰۷
۰/۰۰۰۵۸	۰/۰۰۰۹
۰/۰۰۰۶۷	۰/۰۰۱۰
۰/۰۰۰۹۲	۰/۰۰۱۱
۰/۰۰۱۴۸	۰/۰۰۱۶
۰/۰۰۱۷۶	۰/۰۰۱۷

(الف)

i	j	a_{ij}	τ_{ij}
مایع یونی	گلوتامیک اسید	-۸۶.۵۲۴۲	۱.۳۳۶۷
مایع یونی	آب	-۲۵۳.۴۴۷۰	۲.۳۳۹۸
گلوتامیک اسید	مایع یونی	۶۵.۳۳۵۲	-۱.۲۴۵۰
گلوتامیک اسید	آب	۲۳۸.۸۷۱۱	۰.۴۴۸۸
آب	مایع یونی	۲۴۳.۵۵۸۱	۰.۴۴۱۸
آب	گلوتامیک اسید	-۷۹.۴۸۲۶	۱.۳۰۵۵

(ج)

جدول (۲) داده های حاصل از نتایج آزمایشگاهی و مدلسازی شده برای گلوتامیک اسید (الف) در فاز آبی (ب) در فاز مایع یونی (ج) پارامترهای برهم کنش دوتایی



شکل (۱) کسر وزنی به دست آمده توسط معادله UNIQUAC برای گلوتامیک اسید و مقایسه آن با مقادیر تجربی

کسر وزنی های آزمایشگاهی در فاز مایع یونی	کسر وزنی های مدل سازی در فاز مایع یونی با معادله UNIQUAC
./۰۰۱۸۰۳	./۰۰۲۳
./۰۰۲۴۰۷	./۰۰۲۷
./۰۰۳۷۷۸	./۰۰۳۳
./۰۰۴۲۷۵	./۰۰۴۳
./۰۰۵۱۴۵	./۰۰۵۱
./۰۰۶۵۳۸	./۰۰۷۷

(ب)

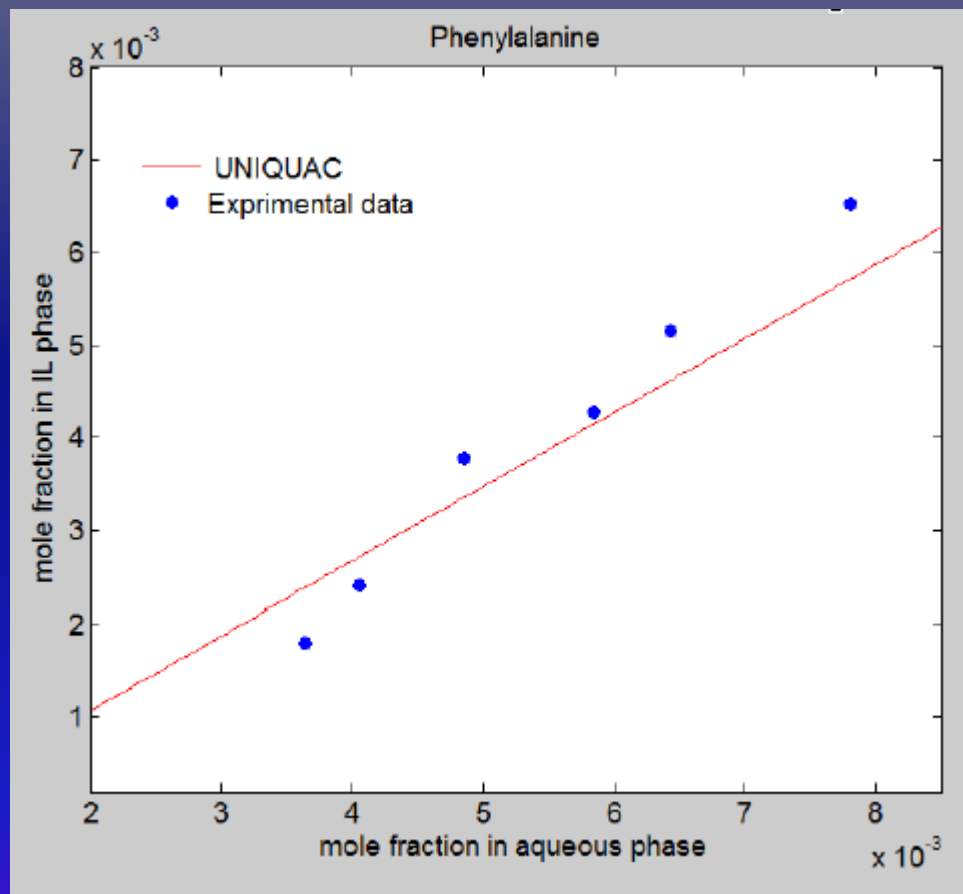
کسر وزنی های آزمایشگاهی در فاز آبی	کسر وزنی های مدل سازی در فاز آبی با معادله UNIQUAC
./۰۰۳۶۴۳	./۰۰۳۰
./۰۰۴۰۵۹	./۰۰۳۹
./۰۰۴۸۵۱	./۰۰۵۸
./۰۰۵۸۵۲	./۰۰۶۲
./۰۰۶۴۳۵	./۰۰۸۳
./۰۰۷۸۱	./۰۰۸۵

(الف)

i	j	a_{ij}	τ_{ij}
مایع یونی	فنیل آلانین	۲۷۸/۷۶۸۶	۳/۹۲۴
مایع یونی	آب	۳۸/۲۹۸۶	۸/۷۹۴
فنیل آلانین	مایع یونی	۴۲/۴۸۴۱	۰/۸۶۷۱۸
فنیل آلانین	آب	-۱۷۷/۶۱۰۱	۱/۸۱۴۹
آب	مایع یونی	-۳۹/۲۲۱۲	۱/۱۴۰۷
آب	فنیل آلانین	۱۲۵/۸۰۶۹	۰/۶۵۵۶

(ج)

جدول (۳) داده های حاصل از نتایج آزمایشگاهی و مدل سازی شده برای فنیل آلانین الف) در فاز آبی ب) در فاز مایع یونی ج) پارامتر های برهم کنش دوتایی



شکل (۲) کسر وزنی بدست آمده توسط معادله UNIQUAC برای فنیل آلانین و مقایسه آن با مقادیر تجربی

(الف)

کسر وزنی های مدل سازی در فاز آبی با معادله UNIQUAC	کسر وزنی های آزمایشگاهی در فاز آبی
۰/۰۰۰۳	۰/۰۰۰۳۸۵
۰/۰۰۰۴	۰/۰۰۰۳۸۷
۰/۰۰۰۴	۰/۰۰۰۳۸۹
۰/۰۰۰۳	۰/۰۰۰۳۹۶
۰/۰۰۰۲	۰/۰۰۰۴۰۶
۰/۰۰۰۲	۰/۰۰۰۴۰۹
۰/۰۰۰۲	۰/۰۰۰۴۱۶
۰/۰۰۰۱	۰/۰۰۰۴۲۸
۰/۰۰۰۱	۰/۰۰۰۴۴۰
۰/۰۰۰۱	۰/۰۰۰۴۴۴
۰	۰/۰۰۰۴۵۰
۰	۰/۰۰۰۴۶۵

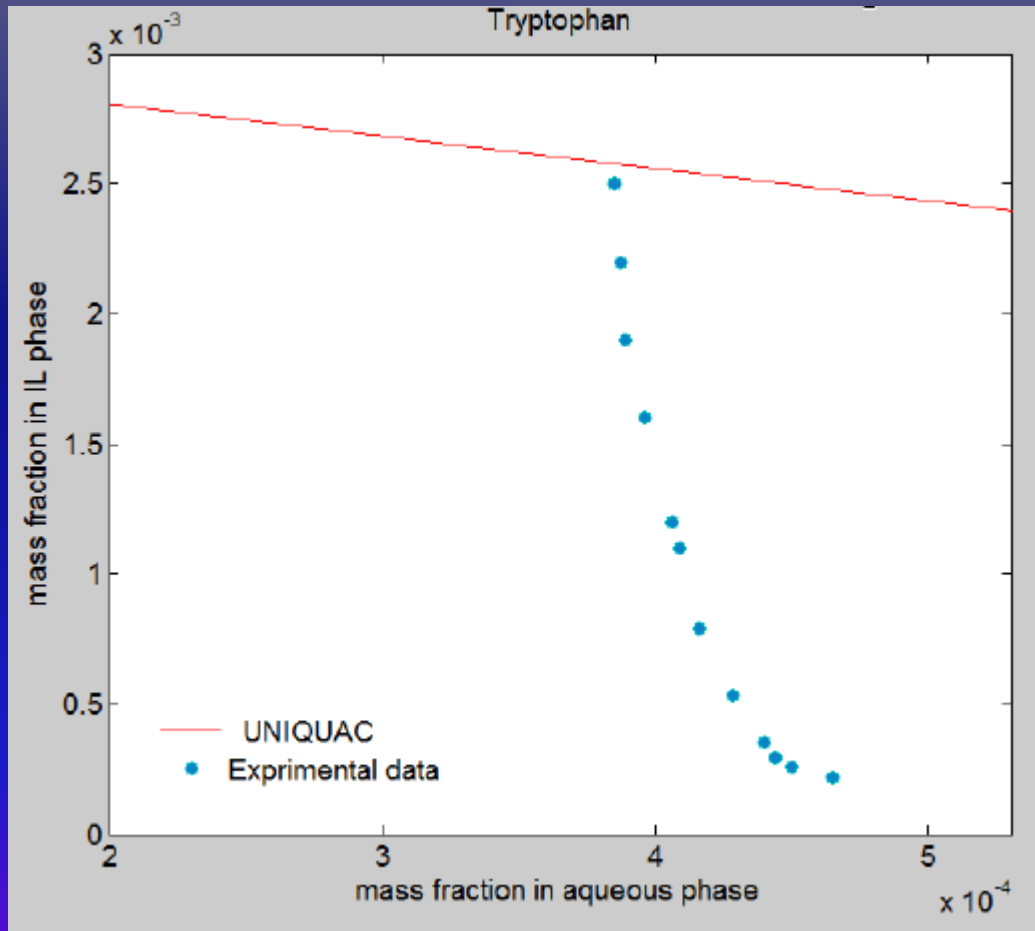
(ب)

کسر وزنی های مدل سازی ها در فاز مایع یونی با معادله UNIQUAC	کسر وزنی های آزمایشگاهی در فاز مایع یونی
۰/۰۰۲۵	۰/۰۰۲۵۱
۰/۰۰۲۶	۰/۰۰۲۱۶
۰/۰۰۲۶	۰/۰۰۱۹۳
۰/۰۰۲۶	۰/۰۰۱۵۹
۰/۰۰۲۷	۰/۰۰۱۲۴
۰/۰۰۲۷	۰/۰۰۱۰۷
۰/۰۰۲۸	۰/۰۰۰۷۸
۰/۰۰۲۸	۰/۰۰۰۵۳
۰/۰۰۲۹	۰/۰۰۰۳۵
۰/۰۰۳۰	۰/۰۰۰۲۹
۰/۰۰۳۰	۰/۰۰۰۲۵
۰/۰۰۳۱	۰/۰۰۰۲۱

(ج)

i	j	a_{ij}	τ_{ij}
مایع یونی	تریپتوفان	۳۰۰/۲۴۷۸	۰/۳۶۵۳
مایع یونی	آب	-۱۵۸/۴۳۴۷	۱/۷۰۱۳
تریپتوفان	مایع یونی	-۱۹۷/۰۷۲	۱/۹۳۶۷
تریپتوفان	آب	۱۲۴/۶۰۹۵	۰/۶۵۸۴
آب	مایع یونی	۲۰/۰۰۵۱	-۱/۰۶۹۴
آب	تریپتوفان	-۴۷۴/۸۸۱۲	۴/۹۱۷۳

جدول (۴) داده های حاصل از نتایج آزمایشگاهی و مدل سازی شده برای تریپتوفان (الف) در فاز آبی (ب) در فاز مایع یونی (ج) پارامتر های برهم کنش دوتایی



شکل (۳) کسر وزنی بدست آمده توسط معادله UNIQUAC برای تریپتوفان و مقایسه آن با مقادیر تجربی

(الف)

کسر وزنی های مدل سازی در فاز آبی با معادله UNIQUAC-NRF	کسر وزنی های آزمایشگاهی در فاز آبی
./...۰۵	./...۳۹
./...۶۹	./...۵۸
./...۷۲	./...۶۷
./...۰۸	./...۰۹۲
./...۱۹	./...۱۴۶
./...۱۳	./...۱۷۶

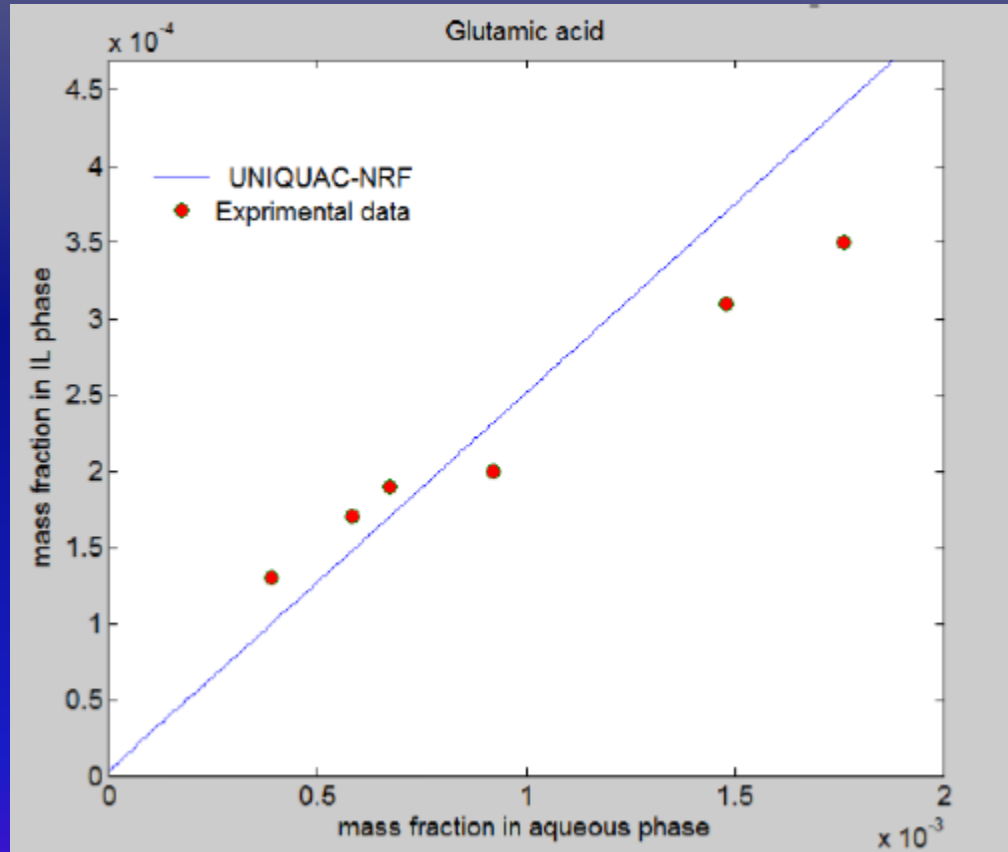
(ب)

کسر وزنی های مدل سازی در فاز مایع یونی با معادله UNIQUAC-NRF	کسر وزنی های آزمایشگاهی در فاز مایع یونی
./...۰۱	./...۱۳۹
./...۰۱	./...۱۷۷
./...۰۲	./...۱۹۲
./...۰۲	./...۲۰۷
./...۰۴	./...۰۳۱
./...۰۵	./...۰۳۴۴

i	j	α_{ij}	β_{ij}	δ_{ij}	a_{ij}	τ_{ij}
مایع یونی	گلوتامیک اسید	۱۷۵/۲۳۳۲	./۴۷۷۶	--./...۰۷۴	-۳۳۵/۷۴۱۱	۳/۰۸۳۵
مایع یونی	آب	-۳۰۹/۴۱۳۹	./...۰۹۷۴	./...۰۰۲	-۲۶۵/۰۰۸۲	./۵۲۳۴
گلوتامیک اسید	مایع یونی	-۱۴۰/۸۷۹۳	۱/۷۷۸۷	./...۰۲۲	۱۹۳/۰۵۲۵	۲/۴۳۳۳
گلوتامیک اسید	آب	۲۴۰/۶۵۷۳	./...۰۸۳۹۳	--./...۰۲۴	۲۷۶/۶۹۴۵	۱/۳۵۸۹
آب	مایع یونی	۶۷/۳۹۸۴	--./...۰۹۶۶۵	./...۰۱۵	-۹۱/۴۴۲۲	./...۳۹۵۳
آب	گلوتامیک اسید	۵۲/۷۹۲۷	--./...۰۸۴۱۱	.	-۱۹۷/۴۰۴۴	۱/۹۳۸۹

(ج)

جدول (۵) داده های حاصل از نتایج آزمایشگاهی و مدل سازی شده برای گلوتامیک اسید (الف) در فاز آبی (ب) در فاز مایع یونی (ج) پارامتر های برهم کنش دوتایی برای معادله UNIQUAC-NRF



شکل (۴) کسر وزنی بدست آمده توسط معادله UNIQUAC-NRF برای گلوتامیک اسید و مقایسه آن با مقادیر تجربی

(الف)

کسر وزنی های مدل سازی در فاز آبی با معادله	کسر وزنی های آزمایشگاهی در فاز آبی
UNUQUAC-NRF	UNUQUAC-NRF
0.0030	0.003643
0.0038	0.004059
0.0055	0.004851
0.0053	0.005852
0.0069	0.006435
0.0064	0.00781

(ب)

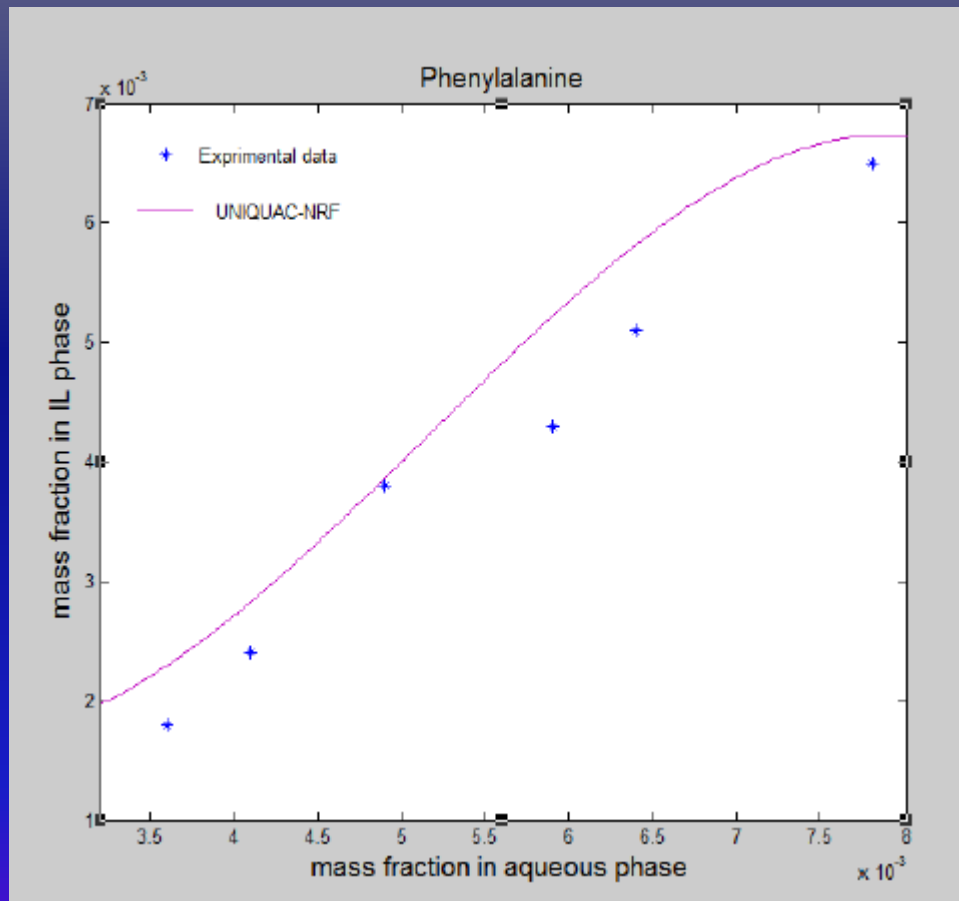
کسر وزنی های مدل سازی در فاز مایع یونی با معادله	کسر وزنی های آزمایشگاهی در فاز مایع یونی
UNUQUAC-NRF	UNUQUAC-NRF
0.0022	0.001803
0.0026	0.002407
0.0033	0.003778
0.0044	0.004275
0.0052	0.005145
0.0080	0.00653

i	j	α_{ij}	β_{ij}	δ_{ij}	a_{ij}	τ_{ij}
مایع یونی	فتیل آلانین	-23/2902	-/7572	.../...4	163/0635	-/5787
مایع یونی	آب	-75/4028	-/2144	.../...9	-65/7746	3/4887
فتیل آلانین	مایع یونی	-92/3014	.../8305	.../...24	-2725432	1/2468
فتیل آلانین	آب	-222/2164	.../8305	0.0002	-449/9699	-/9260
آب	مایع یونی	-46/8948	-/2059	0.0001	22/9302	4/5231
آب	فتیل آلانین	-107/4945	-/4536	0.0016	168/2543	-/5687

(ج)

جدول (۶) داده های حاصل از نتایج آزمایشگاهی و مدل سازی شده برای فتیل آلانین (الف) در فاز آبی (ب) در فاز مایع یونی (ج) پارامترهای برهم کنش دوتایی برای معادله

UNUQUAC-NRF



شکل (۵) کسر وزنی بدست آمده توسط معادله UNIQUAC-NRF برای فنیل آلانین و مقایسه آن با مقادیر تجربی

(الف)

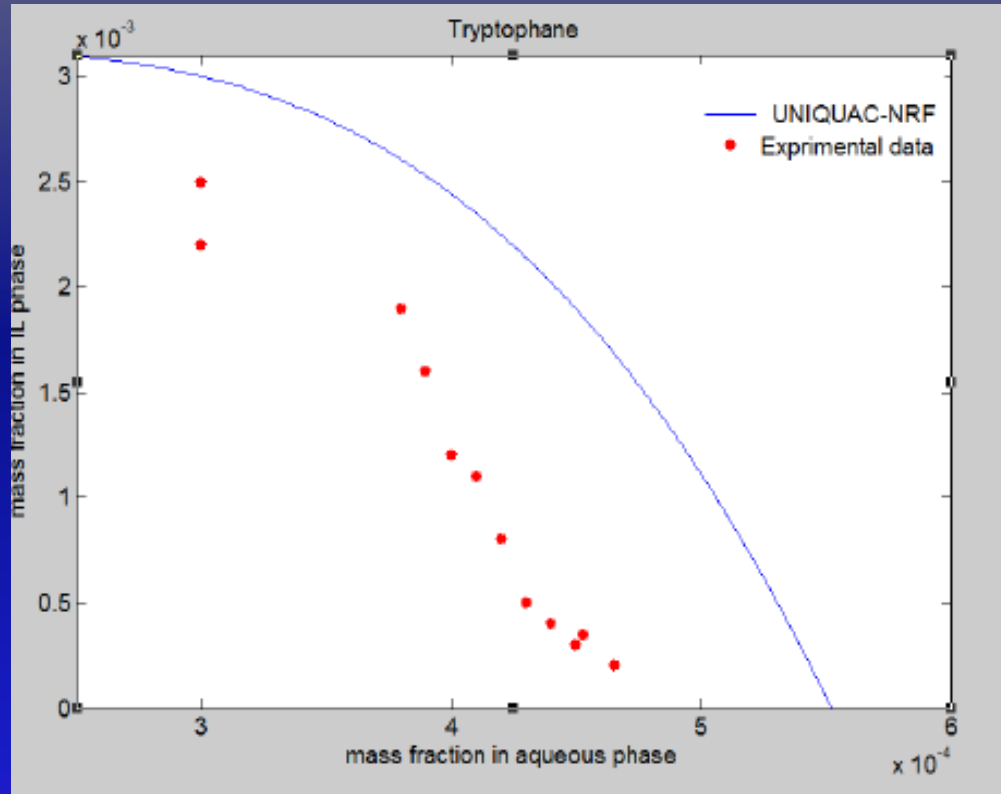
(ب)

کسر وزنی های مدل سازی در فاز مایع یونی با معادله UNIQUAC-NRF		کسر وزنی های آزمایشگاهی در فاز آبی	
۰/۰۰۲۵۱	۰/۰۰۲۸	۰/۰۰۳۸۵	۰/۰۰۰۳
۰/۰۰۲۱۶	۰/۰۰۲۹	۰/۰۰۳۸۷	۰/۰۰۰۳
۰/۰۰۱۹۳	۰/۰۰۲۹	۰/۰۰۳۸۹	۰/۰۰۰۳
۰/۰۰۱۵۹	۰/۰۰۲۹	۰/۰۰۳۹۶	۰/۰۰۰۲
۰/۰۰۱۲۴	۰/۰۰۳۰	۰/۰۰۴۰۶	۰/۰۰۰۲
۰/۰۰۱۰۷	۰/۰۰۳۰	۰/۰۰۴۰۹	۰/۰۰۰۱
۰/۰۰۰۷۸	۰/۰۰۳۱	۰/۰۰۴۱۶	۰/۰۰۰۱
۰/۰۰۰۵۳	۰/۰۰۳۲	۰/۰۰۴۲۸	۰/۰۰۰۱
۰/۰۰۰۳۵	۰/۰۰۳۳	۰/۰۰۴۴۰	.
۰/۰۰۰۲۹	۰/۰۰۳۳	۰/۰۰۴۴۴	.
۰/۰۰۰۲۵	۰/۰۰۳۳	۰/۰۰۴۵۰	.
۰/۰۰۰۲۱	۰/۰۰۳۵	۰/۰۰۴۶۵	.

i	j	α_{ij}	β_{ij}	δ_{ij}	a_{ij}	τ_{ij}
مایع یونی	تریئوفان	-۴۴/۳۱۰۶	-/۴۸۳۰	--/۵۳۹۴	-۵۱/۷۵۹۴	-/۸۴۰۶
مایع یونی	آب	۵۵۵۲/-۵۳	-/۱۷۳۰	--/۷۴۴۱	-۶۸/۱۱۱۸	-/۹۴۶۹
تریئوفان	مایع یونی	۹۳۲۷/-۴۷	-/۳۴۵۱	--/۴۳۵۴	۱۶/۲۶۵۷	۱/۲۵۶۶
تریئوفان	آب	-۳۶/۰۰۴۱	-/۵۱۱۳	--/۴۸۷۷	۷۳/۰۸۴۱	-/۹۳۸۶
آب	مایع یونی	-۵۴/۵۶۳۴	-/۴۳۷۶	--/۶۴۱۴	۱۸/۸۸۰۰	-/۷۸۲۶
آب	تریئوفان	-۳۶/۰۰۷۵	-/۳۴۸۶	--/۴۶۰۱	۲۷/۰۲۰۴	-/۹۱۳۴

(ج)

جدول (۷) داده های حاصل از نتایج آزمایشگاهی و مدل سازی شده برای تریئوفان (الف) در فاز آبی (ب) در فاز مایع یونی (ج) پارامترهای برهم کنش دوتایی برای معادله UNIQUAC-NRF



شکل (٦) کسر وزنی بدست آمده توسط معادله UNIQUAC-NRF برای تریپتوفان و مقایسه آن با مقادیر تجربی

(ب)

$P_{IL/W}$ (Exprimental)	$P_{IL/W}$ (UNIQUEAC)	$P_{IL/W}$ (UNIQUEAC- NRF)
-/۳۴۷	-/۱۴	-/۲
-/۳۰۴	-/۱۱	-/۱۴
-/۲۸۵	-/۲۰	-/۲۷
-/۲۲۵	-/۱۸	-/۲۵
-/۲۰۸	-/۲۵	-/۲۱
-/۱۹۶	-/۲۳	-/۳۸

(الف)

$P_{IL/W}$ (Exprimental)	$P_{IL/W}$ (UNIQUEAC)	$P_{IL/W}$ (UNIQUEAC- NRF)
-/۴۹۵	-/۷۶	-/۷۳
-/۵۹۳	-/۶۹	-/۶۸
-/۷۷۸	-/۵۶	-/۶۰
-/۷۳۰	-/۶۹	-/۸۳
-/۷۹۹	-/۶۱	-/۷۵
-/۸۳۷	-/۹۰	۱/۲۵

(ج)

$P_{IL/W}$ (Exprimental)	$P_{IL/W}$ (UNIQUEAC)	$P_{IL/W}$ (UNIQUEAC- NRF)
۶/۴۹	۸/۳۳	۹/۳
۵/۵۹	۶/۵	۹/۶
۴/۹۷	۶/۵	۹/۶
۴/۰۲	۸/۶	۱۴
۳/۰۴	۱۳/۵	۱۵
۲/۶۲	۱۳/۵	۳۰
۱/۸۹	۱۴	۳۱
۱/۲۴	۲۸	۳۲
-/۸-۷	۲۹	∞
-/۶۵۷	۳۰	∞
-/۵۷۲	∞	∞
-/۴۶۵	∞	∞

جدول (۸) ضریب توزیع پذیری (الف) فنیل آلانین (ب) گلوتامیک اسید (ج) تریپتوفان و مقایسه با دو معادله

نتیجه گیری

در این بررسی به مدلسازی استخراج آمینواسید های گلوتامیک اسید، فنیل آلانین و تریپتوفان را در دو فاز آبی و مایع یونی آب گریز ۱- بوتیل ۳- متیل ایمیدازولیوم بیس تری فلورومتیل سولفونیل ایمید در دمای 298/15 کلوین و فشار اتمسفریک پرداخته شد .

برای مطالعه رفتار تعادلی سیستم از معادلات UNIQUAC و UNIQUAC-NRF استفاده شده و پارامترهای برهم کنش دوتایی اجزاء با استفاده از داده های تعادلی بهینه شده است.

نتایج نشان می دهد که معادلات UNIQUAC و UNIQUAC-NRF به خوبی قادر است رفتار تعادلی مایع - مایع سیستم های آب ، گلوتامیک اسید و مایع یونی و آب، فنیل آلانین و مایع یونی را پیش بینی کند اما برای سیستم حاوی تریپتوفان داده های آزمایشگاهی با نتایج مدل سازی UNIQUAC و UNIQUAC-NRF همخوانی خوبی ندارند که این روند گاهی صعودی و گاهی نزولی می باشد . این احتمال وجود دارد که در صورت تنظیم پارامترهای معادلات با دقت بیشتر می توان نتایج دقیق تری برای آمینو اسید تریپتوفان پیش بینی کرد.

پیشنهادات

استفاده از مدل های ترمودینامیکی دیگر در مدل سازی آمینو اسیدها با درصد خطای کمتر

حدس های اولیه مناسب جهت مدل سازی با معادلات ترمودینامیکی

استفاده از داده های آزمایشگاهی معتبر و دقیق

استفاده از نرم افزار های مناسب جهت رسیدن به نتایج مدل سازی مناسب

References

1. G.Pazuki et al, Measurement and Modeling Process Partitioning of Cephalexin Antibiotic in Aqueous Two-Phase Systems Containing Poly(ethylene glycol) 4000, 10000 and K₂HPO₄, Na₃Citrate , J. Chem. Eng. Data (2009), 54, 2239–2244.
2. A. Haghtalab et al, Experimental Results and Thermodynamic Modeling of the Partitioning of Lysozyme, Bovine Serum Albumin, and α -Amylase in Aqueous Two-Phase Systems of PEG and (K₂HPO₄ or Na₂SO₄), J. Chem. Eng. Data (2003), 48, 1170-1177
3. H.Nazem et al, Experimental Studying and Thermodynamic Modeling of separation of amino acids by ionic liquids, Third Technical Conference of Thermodynamics
4. D. Simoni, Predictive Modeling Of Fluid Phase Equilibria For Systems Containing Ionic Liquids, Submitted to the Graduate School of the University of Notre Dame in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Doctor of Philosophy, 2009.
5. A. Haghtalab, A. Paraj, Computation of liquid–liquid equilibrium of organic-ionic liquid systems using NRTL, UNIQUAC and NRTL-NRF models, Journal of Molecular Liquids 171 (2012) 43–49



با توجه از تشکر شما