A multi-scale simulation of vinyl acetate systems applied in the industrial gas separation column

Minhua Zhang[1, 2], Lihang Chen[1, 2], Jing Ma[1, 2, *]

[1]Key Laboratory for Green Chemical Technology of Ministry of Education, R&D Center for Petrochemical Technology, Tianjin University, Tianjin 300072, China

[2]Collaborative Innovation Center of Chemical Science and Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China

*Corresponding author email: majing0027@tju.edu.cn

Table S1 Vapor-liquid equilibrium data for the C_2H_2-VAc binary mixture at 101.325 kPa

T/K	x_{C2H2}	y_{C2H2}
188.30	1	1
208.15	0.426(0.004)	0.999(0.021)
218.15	0.315(0.006)	0.999(0.020)
223.15	0.256(0.003)	0.998(0.023)
243.15	0.175(0.005)	0.994(0.019)
263.15	0.087(0.007)	0.984(0.011)
273.15	0.061(0.007)	0.964(0.012)
283.15	0.054(0.002)	0.943(0.024)
293.15	0.042(0.006)	0.928(0.013)
303.15	0.033(0.006)	0.912(0.043)
345.85	0	0

Table S2 Vapor-liquid equilibrium data for the CO_2-VAc binary mixture at 101.325 kPa

T(K)	x_{CO2}	y_{CO2}
216.65	1	1
223.15	0.342（0.008）	0.994（0.033）
233.15	0.185（0.006）	0.990（0.061）
243.15	0.075（0.006）	0.985（0.053）
263.15	0.053（0.004）	0.980（0.056）
278.15	0.047（0.006）	0.967（0.071）
293.15	0.041（0.003）	0.905（0.023）
345.85	0	0

Table S3 Vapor-liquid equilibrium data for the CH_3CHO-VAc mixture at 101.325 kPa

T/K	x_{CH3CHO}	y_{CH3CHO}
293.00	1	1
295.00	0.950（0.004）	0.992（0.023）
300.00	0.775（0.002）	0.959（0.019）
305.00	0.625（0.003）	0.918（0.037）
310.00	0.475（0.004）	0.854（0.025）
315.00	0.375（0.004）	0.788（0.038）
320.00	0.300（0.003）	0.720（0.015）
325.00	0.225（0.005）	0.625（0.045）
330.00	0.150（0.006）	0.490（0.042）
335.00	0.102（0.003）	0.368（0.035）
340.00	0.050（0.001）	0.209（0.026）
345.85	0	0

Table S4 Binary interaction parameters of the UNIQUAC-RK model for the light components

Component i Component j	C_2H_2 CO_2	CO_2 CH_3CHO	C_2H_2 CH_3CHO
b_{ij}	-58.95	78.54	230.49
b_{ji}	36.58	49.96	-108.32

Note: b_{ij}, b_{ji} are the binary interaction parameters of the UNIQUAC-RK model.

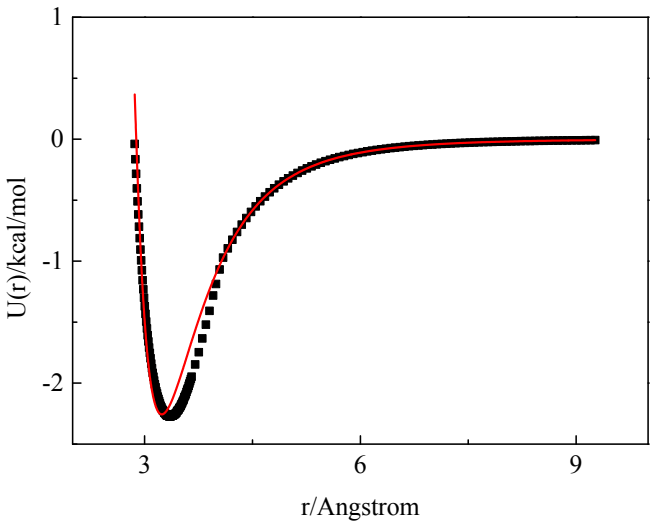

Fig. S1 L-J 12-6 potential energy fitting curve of the interaction energy between C_2H_2 and Ne^{20} (black points: quantum chemistry calculation results, red line: fitting curve).