

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЕЛИЧИН ДАВЛЕНИЙ ПАРОВ АЛКАНОВ АДДИТИВНЫМИ МЕТОДАМИ

Гарист Е.В.

Научные руководители– Гарист И.В., к.х.н., доцент,

Роганов Г.Н., д.х.н., профессор

Могилевский государственный университет продовольствия,

г. Могилев, Республика Беларусь

Разработана полуэмпирическая методика определения величин давлений паров органических соединений в широких интервалах температур, основанная на аддитивном определении численных значений коэффициентов аппроксимирующих уравнений, описывающих температурную зависимость давлений паров чистых жидкостей. В качестве аппроксимирующего уравнения выбрано уравнение Риделя, хорошо описывающее температурную зависимость давлений паров веществ в широких температурных интервалах и сопровождаемое системой взаимообусловленных выражений для определения целого ряда важнейших характеристик веществ (энтальпия испарения, нормальная точка кипения, критические температуры, давления и объемы, критический коэффициент Риделя, коэффициент сжимаемости и т.д.):

$$\ln P = A + \frac{B}{T} + C \cdot \ln T + D \cdot T^6,$$

где A , B , C , D – коэффициенты уравнения.

Для нахождения численных значений коэффициентов уравнения разработана модифицированная методика метода групповых вкладов с непосредственным полным учетом 1,4-внутримолекулярных взаимодействий, обладающая высокой эффективностью в аддитивных расчетах.

Численные значения параметров аддитивной методики найдены по совокупности экспериментальных величин давлений паров 27 алканов нормального и разветвленного строения в широких интервалах температур из базы данных NIST-TRC.

Отклонение величин давлений паров алканов, полученных расчетом по уравнению Риделя, коэффициенты которого определены аддитивным методом, от их экспериментальных определений составило в среднем 2,0-2,5% относительных [$(P_{\text{экс.}} - P_{\text{расч.}}) \cdot 100\% / P_{\text{экс.}}$], что находится на уровне экспериментальных погрешностей.