

ОБЗОР И АНАЛИЗ МЕТОДОВ ОЦЕНКИ ИЗБЫТОЧНЫХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

Уланович А.А.

**Научный руководитель – Самуйлов В.С., к.т.н., доцент
Могилевский государственный университет продовольствия
г. Могилев, Республика Беларусь**

При исследовании смесей на практике зачастую исследуется не само свойство реальной смеси, а его отклонение от свойства идеальной смеси при одинаковых температуре, давлении и составе, называемое избыточной термодинамической функцией (свойством). Интерес к исследованию избыточных функций объясняется практической значимостью данных по этим свойствам, которые применяются для проектирования и создания новейшего оборудования, аппаратов и т.п. Для практики является существенно важным представление имеющихся данных по избыточным свойствам в виде уравнений, при помощи которых можно определить величину избыточного свойства, а, следовательно, и свойства реальной смеси любого состава.

Данная работа посвящена обзору существующих методов оценки избыточных свойств. В настоящее время накоплено достаточное количество уравнений применяемых для оценки избыточных термодинамических функций. Эти уравнения можно разделить на две группы. К первой группе относятся теоретические уравнения, полученные на основе небольшого массива экспериментальных данных и предназначенные для прогнозирования избыточных свойств мало или вовсе неизученных смесей. Ко второй группе можно отнести полуэмпирические (полутеоретические) и эмпирические уравнения, при помощи которых описывают поведение избыточных функций для строго определенной смеси или гомологического ряда. Одними из первых теоретических уравнений являлись уравнения Скотчарда-Гильдебрандта и Гугенхайма. Данные уравнения не получили широкого распространения из-за ряда ограничений. Однако на их базе были предложены такие уравнения как Вильсона, NRTL (non-random two liquids) и UNIQUAC (universal quasi chemical). Данные уравнения используются в настоящий момент и способны давать хорошие результаты для сильно неидеальных смесей.

Одно из первых эмпирических уравнений было предложено Бренстедом и Кефедом. Опираясь на уравнение Бренстеда-Кефеда, были получены уравнения МакГлашана и Хиджманса-Холлемана. Преимущество данных уравнений состоит в том, что они способны предсказывать избыточные свойства большого набора смесей состоящих из представителей одного гомологического ряда. Также хорошими предсказательными способностями обладает уравнение Джейна, которое связывает избыточные свойства с топологическими характеристиками веществ. Среди эмпирических уравнений также следует выделить уравнение Воля, Хванга и Редлиха-Кистера.

Теоретические уравнения выводились, опираясь на некоторую физическую модель, что является несомненным их плюсом. Однако данные уравнения являются более сложными, чем эмпирические уравнения. Наиболее предпочтительными для использования являются эмпирические уравнения, обладающие прогнозирующими способностями, т.к. они способны предсказывать избыточные свойства вообще неисследованных смесей по ограниченному количеству исходных данных.