

## МЕТОДИКА РАСЧЕТА И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БИНАРНОЙ ЖИДКОЙ СМЕСИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕОРИИ ПРИГОЖИНА-ФЛОРИ- ПАТТЕРСОНА

Левков Р.В., Клименко Д.В.

Научные руководители – Щемелев А.П., к.т.н., доцент,

Голубева Н.В., ст. преподаватель

Могилевский государственный университет продовольствия

г. Могилев, Республика Беларусь

Для исследуемых бинарных смесей разработана методика расчета и прогнозирования термодинамических свойств на основе теории Пригожина-Флори-Паттерсона. Данная методика основана на строгих соотношениях термодинамики и уравнениях, полученных на основе теории Пригожина-Флори-Паттерсона, для избыточного объема и избыточной изобарной теплоемкости. На основе теории Пригожина-Флори-Паттерсона впервые были получены уравнения для определения производных молярного объема и приведенного объема по температуре и давлению для области высоких давлений.

Термодинамические свойства были получены путем дифференцирования и интегрирования уравнения для избыточного объема:

$$V^E = (x_1V_1^* + x_2V_2^*) \left[ \tilde{T} \left( \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{T}} \right)_P \Psi_1 \theta_2 \frac{X_{12}}{P_1^*} - \frac{1}{2} \left( \frac{\tilde{v}_1 - \tilde{v}_2}{\left( \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{T}} \right)_P} \right)^2 \left( \frac{\partial^2 \tilde{v}}{\partial \tilde{T}^2} \right)_P \frac{(P_1^{*2} \Psi_2 + P_2^{*2} \Psi_1)}{(P_1^* \Psi_2 + P_2^* \Psi_1)^2} \Psi_1 \Psi_2 + \right. \\ \left. + \frac{(\tilde{v}_1 - \tilde{v}_2)(P_1^* - P_2^*)}{(P_1^* \Psi_2 + P_2^* \Psi_1)} \Psi_1 \Psi_2 \right], \quad (1)$$

с привлечением других соотношений термодинамики на основе данных по плотности и скорости звука для смеси циклогексан + пропилбензол.

Новая методика позволяет на основе предложенных уравнений с использованием строгих соотношений термодинамики в широком диапазоне параметров состояния выполнить расчет комплекса термодинамических свойств чистых компонентов и их бинарных смесей.

Выполненная проверка разработанной методики расчета показала возможность расчета свойств бинарной смеси на основе теории Пригожина-Флори-Паттерсона с точностью на уровне точности экспериментального определения этих свойств в широком диапазоне температур и давлений.

Полученная система уравнений пригодна также для прогнозирования термодинамических свойств, ранее неисследованных смесей при использовании параметра энергетического взаимодействия компонентов смеси вычисленного из соотношения, предложенного Паттерсоном при помощи приближения Абе и Флори.