

Семёнов Иван Александрович,

к.т.н., доцент, Ангарский государственный технический университет,

e-mail: semenovia.chem@yandex.ru

Шишкин Марк Дмитриевич,

магистрант каф. ХТТ, Ангарский государственный технический университет,

e-mail: mark.shishkin.00@mail.ru

РАСЧЁТ ПАРОЖИДКОСТНОГО РАВНОВЕСИЯ НА ОСНОВЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ КОЭФФИЦИЕНТОВ АКТИВНОСТИ

Semenov I.A., Shishkin M.D.

CALCULATION OF VAPOR-LIQUID EQUILIBRIUM BASED ON THERMODYNAMIC MODELS OF ACTIVITY COEFFICIENTS

Аннотация. Рассмотрены основные термодинамические модели для расчета коэффициентов активности компонентов неидеальных растворов. Показана необходимость точной оценки парожидкостного равновесия при моделировании массообменных процессов.

Ключевые слова: коэффициенты активности, растворы, NRTL, UNIQUAC, UNIFAC.

Abstract. The main thermodynamic models for calculating the activity coefficients of components of non-ideal solutions are considered. The need for an accurate assessment of vapor-liquid equilibrium when modeling mass transfer processes is shown.

Keywords: activity coefficients, solutions, NRTL, UNIQUAC, UNIFAC.

Равновесие пар–жидкость имеет огромное значение при выполнении технологических расчетов в области химической технологии. В частности, точная оценка концентраций равновесных фаз необходима для проектирования, оптимизации и моделирования процессов ректификации.

При описании парожидкостного равновесия важным аспектом является степень идеальности жидкого раствора. Идеальные и неидеальные растворы представляют собой две фундаментальные концепции в изучении смесей. Понимание их различий имеет решающее значение для прогнозирования поведения смесей в различных процессах.

Идеальный раствор – это теоретическая концепция, предполагающая идеальное смешивание и неспецифическое взаимодействие компонентов друг с другом. В идеальном растворе свойства, такие как объем, энтальпия и энтропия, подчиняются правилу аддитивности свойств отдельных компонентов.

Однако реальные смеси в большинстве случаев относятся к неидеальным растворам. Такое отклонение от идеальности вызвано специфическим взаимодействием между отдельными компонентами. Эти взаимодействия могут проявляться в нелинейных связях между свойствами и концентрациями, а также в образовании межмолекулярных сил, таких как водородные связи или силы Ван-дер-Ваальса.

Термодинамическое описание неидеальности смесей сводится к оценке коэффициентов активности каждого компонента раствора. Расчёт коэффициен-

тов активности в зависимости от концентраций веществ выполняют на основе термодинамических моделей.

Существует несколько моделей коэффициентов активности, каждая из которых имеет свой собственный набор допущений и математических выражений. Некоторые распространенные модели включают уравнение Маргулеса, уравнение Вильсона, модель NRTL (NonRandomTwoLiquid) и модель UNIQUAC (UniversalQuasiChemical). Эти модели включают различные параметры и условия взаимодействия и позволяют математически описать сложность фазового равновесия в различных системах [1].

Одной из известных моделей коэффициентов активности, широко используемых в расчетах парожидкостного равновесия, является модель UNIFAC. Модель UNIFAC выходит за рамки многих других моделей, поскольку включает подробную информацию о молекулярной структуре и взаимодействиях веществ друг с другом, что делает ее особенно подходящей для сложных смесей, встречающихся в различных отраслях промышленности.

UNIFAC действует по принципу группового вклада, при котором молекулы делятся на функциональные группы, каждая из которых характеризуется своими параметрами взаимодействия. Эти параметры описывают энергетический вклад различных групп в общее поведение раствора. Суммируя вклады отдельных групп, UNIFAC дает всестороннее описание неидеального поведения в многокомпонентных смесях.

Одним из ключевых преимуществ модели UNIFAC является ее универсальность и применимость к широкому кругу систем, включая полярные и неполярные вещества. Она может точно предсказывать равновесие пар–жидкость, равновесие жидкость–жидкость и другие термодинамические свойства в системах, содержащих различные органические соединения, электролиты и смеси растворителей.

Применение моделей коэффициентов активности для моделирования массообменных процессов широко распространено в таких отраслях, как нефтехимия, нефтепереработка, органический синтез. Однако важно отметить, что модели коэффициентов активности имеют свои специфические ограничения и допущения. Они часто полагаются на эмпирические корреляции и требуют экспериментальных данных для оценки своих параметров. Кроме того, эти модели могут неточно отражать поведение сильно неидеальных систем и систем со сложными молекулярными взаимодействиями. Поэтому важно тщательно выбирать подходящую модель активности под конкретную систему веществ и проверять результаты ее расчета на экспериментальных данных.

ЛИТЕРАТУРА

1. Уэйлес, С. Фазовые равновесия в химической технологии: В 2-х ч., Ч. 2. Пер. с англ / С. Уэйлес – М.: Мир, 1989. – 360 с.