

**РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТРОЙНОЙ ЖИДКОЙ СМЕСИ
Н-ОКТАН + Н-ДОДЕКАН + Н-ГЕКСАДЕКАН С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
АКУСТИЧЕСКИХ ДАННЫХ И ПРИНЦИПА КОНГРУЭНТНОСТИ В РАМКАХ
“ОДНОЖИДКОСТНОГО” ПРИБЛИЖЕНИЯ**

Голубева Н.В.

Научный руководитель – Хасаншин Т.С., д.т.н., профессор
Могилевский государственный университет продовольствия
г. Могилев, Республика Беларусь

Представлены результаты расчетного исследования термодинамических свойств тройной жидкой смеси н-октан + н-додекан + н-гексадекан ($C_8+C_{12}+C_{16}$) двух составов в интервале температур 298-433 К и давлений 0.1-100 МПа. Анализ литературных источников показал, что сведения о свойствах данной смеси в литературе отсутствуют. Поэтому для оценки термодинамических свойств было предложено использовать принцип конгруэнтности (совпадения) Бренстеда и Кефеда [1]. Принцип конгруэнтности указывает на то, что любые смеси, составленные из представителей ряда н-алканов, являются конгруэнтными чистому гомологу со средним углеродным числом N в смеси, определенным как:

$$N = \sum x_i N_i, \quad (1)$$

где x_i и N_i – молярная концентрация и число атомов углерода в молекуле i -компонента соответственно.

Подобные смеси принято называть н-псевдоалканами, т.е. в рамках использования понятия “одно жидкостного” приближения рассматривать их как чистые вещества. В соответствии с принципом конгруэнтности такие смеси и соответствующие им чистые н-алканы при одинаковом значении N , должны обладать одинаковыми свойствами при заданных температурах и давлениях, несмотря на то, что состав смеси может быть различным. Несложно определить, что смеси $0.25C_8+0.5C_{12}+0.25C_{16}$, $0.688C_8+0.124C_{12}+0.188C_{16}$ конгруэнтны чистым н-алканам додекану C_{12} и декану C_{10} .

Для вычисления свойств тройной смеси необходимо иметь данные о скорости звука в зависимости от температуры и давления, а также температурные зависимости плотности и изобарной теплоемкости при атмосферном давлении. Необходимые сведения об этих свойствах были получены с использованием корреляционных уравнений, отражающих зависимости скорости звука, молярного объема и молярной изобарной теплоемкости смесей от числа N и параметров состояния, и, построенных с привлечением собственных и литературных данных о свойствах чистых гомологов и их бинарных смесей. Предложен и реализован алгоритм, и программа вычислений термодинамических свойств жидкой тройной смеси.

Получена таблица, содержащая значения скорости звука, плотности, изобарной и изохорной теплоемкости, изотермической сжимаемости в указанном интервале параметров. Проведенное сравнение результатов расчета с данными прямых измерений для чистых н-алканов C_{10} и C_{12} показало удовлетворительное согласие.

[1] – Brønsted, J.N. The thermodynamic properties of paraffin mixtures. I. / J.N. Brønsted, J. Koefoed // Det. Kgl. Dansk. Videnskab. Selskab. Mat.-Fys. Medd. – 1946. – Vol. 22, №7. – P. 1–32.