

**СОВРЕМЕННЫЕ ТЕНДЕНЦИИ В ПОСТРОЕНИИ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ:
ОБЗОР, КЛАССИФИКАЦИЯ И АНАЛИЗ**

Старовойтова Н.В.

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

В настоящее время в теории жидкого состояния не существует достаточно обоснованного и пригодного для точных расчетов термодинамических свойств уравнения состояния. Несмотря на впечатляющее развитие молекулярной теории, инженеру часто нужно знать физико-химические свойства, которые еще не были измерены и не могут быть рассчитаны существующими теоретическими методами. Скорость накопления новых данных снижается, в то время как возрастает потребность в точных данных для проектирования. Данных по смесям вообще мало. Проектировщикам часто приходится создавать предприятия для производства новых веществ, а, поскольку вещества новые, то мало что известно об их свойствах. Поэтому создание обоснованного уравнения состояния для описания тех или иных свойств в широком интервале температур и давлений является актуальной проблемой в наши дни. Потребность в точных предсказаниях термодинамических свойств многих жидкостей и смесей привела к развитию большого разнообразия уравнений состояния с отличающейся степенью эмпиризма, прогнозирующей способностью и математической формой. Методика построения таких уравнений предполагает наличие достаточного количества высокоточных опытных данных, что не всегда имеет место. Подавляющее большинство эмпирических уравнений имеет плохие экстраполяционные, а часто и интерполяционные возможности в области параметров, для которых при построении уравнения состояния опытные данные не использовались. Как правило, такие уравнения хорошо описывают термические свойства, но дают большие погрешности при расчете калорических и акустических свойств. В связи с этим при построении уравнения состояния часто используется схема совместной обработки термических, калорических и акустических данных, хотя такие схемы в математическом отношении весьма сложны и пока мало изучены. При составлении таблиц всегда ставится задача достичь точности расчета термодинамических свойств, отвечающей точности современного эксперимента. К сожалению, малый объем имеющейся в литературе информации о термических свойствах алканов не позволяет пока разработать достаточно надежное уравнение состояния.

Многие из уравнений состояния, широко использовавшихся в прошлом для описания термодинамических свойств важных веществ (например, уравнения Мартина-Хау, Битти-Бриджмена, Казавчинского и т.д.), не применяются в настоящее время в связи с ограничениями по описываемому ими диапазону параметров состояния. Напротив, по-прежнему используются вириальное уравнение состояния Майера-Боголюбова, некоторые из модификаций уравнения состояния Бенедикта-Вэбба-Рубина, а также взаимосогласованные уравнения состояния.

В последние годы для ряда веществ были разработаны калорические уравнения состояния в форме зависимости свободной энергии от температуры и плотности. При этом свободная энергия складывалась из свободной энергии вещества в состоянии идеального газа и избыточной свободной энергии. Наличие простого соотношения между свободной энергией и давлением позволяет, при желании, пересчитать калорическое уравнение в обычное термическое. Хотя глубоких принципиальных различий между этими уравнениями нет, необходимо отметить, что в отличие от модификаций уравнения Бенедикта-Вэбба-Рубина, в которых используются слагаемые с целочисленными степенями температуры, многие новые калорические уравнения включают члены с дробными и весьма высокими значениями показателей степеней. Выполнен обзор, классификация и анализ большей части известных эмпирических и полуэмпирических уравнений состояния для жидкостей. Показано, что к числу наиболее сложных, но одновременно и наиболее точных калорических уравнений состояния относится уравнение, предложенное Леммоном для описания свойств *n*-алканов и их смесей.