

- Уравнение Маргулеса

Выражение избыточной энергии Гиббса двухкомпонентных смесей:

$$\frac{G^{ex}}{RT} = x_1 x_2 (A_{21} x_1 + A_{12} x_2) \quad (1)$$

где A_{12} и A_{21} — параметры модели.

Выражения для коэффициентов активности:

$$\ln(\gamma_1) = (A_{12} + 2(A_{21} - A_{12})x_1)x_2^2 \quad (2)$$

$$\ln(\gamma_2) = (A_{21} + 2(A_{12} - A_{21})x_2)x_1^2 \quad (3)$$

- Уравнение Ван Лаара

Выражение избыточной энергии Гиббса двухкомпонентных смесей:

$$\frac{G^{ex}}{RT} = \frac{1}{\frac{1}{A_{12}x_1} + \frac{1}{A_{21}x_2}} \quad (4)$$

где A_{12} и A_{21} — параметры модели.

$$\ln(\gamma_1) = A_{12} \left(\frac{A_{21}x_2}{A_{12}x_1 + A_{21}x_2} \right)^2 \quad (5)$$

$$\ln(\gamma_2) = A_{21} \left(\frac{A_{12}x_1}{A_{12}x_1 + A_{21}x_2} \right)^2 \quad (6)$$

- Уравнение Вильсона

Выражение избыточной энергии Гиббса двухкомпонентных смесей:

$$\frac{G^{ex}}{RT} = -x_1 \ln(x_1 + A_{12}x_2) - x_2 \ln(A_{21}x_1 + x_2) \quad (7)$$

где $A_{12} = \frac{V_2^L}{V_1^L} \exp\left(-\frac{\lambda_{12} - \lambda_{11}}{RT}\right)$ и $A_{21} = \frac{V_1^L}{V_2^L} \exp\left(-\frac{\lambda_{21} - \lambda_{22}}{RT}\right)$, V_i^L — молярный объем чистого компонента i , λ_{ij} — параметр, характеризующий силу взаимодействия компонентов i и j , соответственно выполняется соотношение $\lambda_{ij} = \lambda_{ji}$. В данной работе можно использовать в качестве параметров модули A_{12} и A_{21} , в данном случае коэффициент активности будет зависеть только от состава жидкой фазы.

$$\ln(\gamma_1) = -\ln(x_1 + \Lambda_{12}x_2) + x_2 \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12}x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21}x_1 + x_2} \right) \quad (8)$$

$$\ln(\gamma_2) = -\ln(x_2 + \Lambda_{21}x_1) + x_1 \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12}x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21}x_1 + x_2} \right) \quad (9)$$

- Уравнение NRTL (Non-Random Two-Liquid)

Выражение избыточной энергии Гиббса двухкомпонентных смесей:

$$\frac{G^{ex}}{RT} = x_1x_2 \left(\frac{\tau_{21}G_{21}}{x_1 + G_{21}x_2} + \frac{\tau_{12}G_{12}}{G_{12}x_1 + x_2} \right) \quad (10)$$

где $G_{12} = \exp(-\alpha_{12}\tau_{12})$, $G_{21} = \exp(-\alpha_{21}\tau_{21})$, $\tau_{12} = \frac{g_{12} - g_{22}}{RT}$, $\tau_{21} = \frac{g_{21} - g_{11}}{RT}$, g — параметр взаимодействия между компонентами i и j ($g_{ij} = g_{ji}$), α_{ij} — параметр непропорциональности ($\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$). В данной работе в качестве параметров модели можно использовать τ_{12}, τ_{21} , α_{12} , в данном случае коэффициент активности будет зависеть только от состава жидкой фазы.

$$\ln(\gamma_1) = x_2^2 \left(\tau_{21} \left(\frac{G_{21}}{x_1 + x_2G_{21}} \right)^2 + \frac{\tau_{12}G_{12}}{(x_2 + x_1G_{12})^2} \right) \quad (11)$$

$$\ln(\gamma_2) = x_1^2 \left(\tau_{12} \left(\frac{G_{12}}{x_2 + x_1G_{12}} \right)^2 + \frac{\tau_{21}G_{21}}{(x_1 + x_2G_{21})^2} \right) \quad (12)$$

ЗАДАНИЕ Для системы из лабораторной работы №5 по экспериментальным данным определить параметры модели для описания коэффициентов активности. Подгонку параметров модели проводить по избыточной энергии Гиббса. Провести сравнение результатов с экспериментальными данными на p - x , y ; T - x , y и x - y диаграммах.

Варианты:

1. Уравнение Маргулеса
2. Уравнение Ван Лаара
3. Уравнение Вильсона
4. Уравнение NRTL

5. Уравнение Маргулеса
6. Уравнение Ван Лаара
7. Уравнение Вильсона
8. Уравнение NRTL
9. Уравнение Маргулеса
10. Уравнение Ван Лаара
11. Уравнение Вильсона
12. Уравнение NRTL
13. Уравнение Маргулеса
14. Уравнение Ван Лаара
15. Уравнение Вильсона
16. Уравнение NRTL
17. Уравнение Маргулеса
18. Уравнение Ван Лаара
19. Уравнение Вильсона
20. Уравнение NRTL
21. Уравнение Маргулеса
22. Уравнение Ван Лаара
23. Уравнение Вильсона
24. Уравнение NRTL
25. Уравнение Маргулеса
26. Уравнение Ван Лаара
27. Уравнение Вильсона
28. Уравнение NRTL