

Примечание: Публикация является дополненным вариантом статьи, опубликованной в книге "Материалы X Российской конференции по теплофизическим свойствам веществ". Казань: *Бутлеровские сообщения*. 2002. С.13-26. УДК 541.12.011. Поступила в редакцию 10 ноября 2002 г.

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ НА ОСНОВЕ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ЧАСТИЧНЫХ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

© Дьяконов Сергей Германович

Казанский государственный технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань 420015. Россия. E-mail: alklin@kstu.ru

Ключевые слова: теплофизические свойства, метод расчета, интегральные уравнения, частичные функции распределения

Резюме

Для проектирования и оптимизации любого процесса химической технологии необходима информация о различных физико-химических свойствах веществ, участвующих в нём. Спектр таких свойств весьма широк. Они представляют собой две большие группы, объединяющие равновесные и неравновесные характеристики. Так как возможности эмпирических и полумпирических методов имеют известные ограничения, одним из способов решения задачи может быть использование подходов молекулярно-статистической теории, в рамках которой любые термодинамические свойства можно определить на основе информации о взаимодействии между атомами и молекулами вещества.