

Нестехиометрические модели взаимосвязи изотерм избыточных мольных свойств тернарных смесей с изотермами бинарных смесей

© Сатгараев Аделъ Наилевич,¹⁺ Искоркин Андрей Дмитриевич,¹
Султанова Расима Бакиевна¹ и Николаев Вячеслав Федорович^{2*}

¹ Кафедра технологии основного органического и нефтехимического синтеза. Казанский государственный технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-41-11. E-mail: satgaraev_adel@mail.ru

² Лаборатория оптической спектроскопии. Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН. Ул. Ак. Арбузова, 8. г. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 273-18-92. E-mail: nikolaev@iopc.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: тернарная смесь, бинарная смесь, избыточная термодинамическая функция, избыточный мольный объем, энтальпия смешения, нестехиометрическая модель, модель Редлиха-Кистера, симметричная модель, асимметричная модель.

Аннотация

Проведен анализ известных асимметричных и симметричных моделей взаимосвязи изотерм свойств бинарных и тернарных смесей. В качестве объектов использованы экспериментальные данные по мольным объемам (293.15 К) бинарных систем вода (1) + этанол (2), вода (1) + 1-пропанол (3) и этанол (2) + 1-пропанол (3) и тернарной смеси вода (1) + этанол (2) + 1-пропанол (3), а также литературные данные по энтальпиям смешения (298.15 К) бинарных систем вода (1) + этанол (2), вода (1) + 1,4-диоксан (3) и этанол (2) + 1,4-диоксан (3) и тернарной смеси вода (1) + этанол (2) + 1,4-диоксан (3). Избыточные мольные объемы (V^E) и энтальпии смешения (H^E) бинарных систем описаны с помощью уравнения Редлиха-Кистера и нестехиометрических моделей. Эффективность симметричных и асимметричных моделей для тройных систем оценена по минимуму среднеквадратичных отклонений расчета от эксперимента. Применение поправки Цибульки показано на примере уточнения модели Радойковича. При описании физико-химических свойств тернарных смесей с использованием асимметричных моделей использован алгоритм выбора асимметричной вершины, основанный на сопоставлении критериев полярности (структурированности) индивидуальных компонентов смесей.