

Определение давления насыщенных паров ароматических соединений на основе экспериментальных данных по их растворимости в сверхкритическом диоксиде углерода

© **Билалов*⁺ Тимур Ренатович и Гумеров Фарид Мухамедович**

Кафедра теоретических основ теплотехники. Казанский национальный исследовательский технологический университет. ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.

E-mail: t.bilalov@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: сверхкритический диоксид углерода, растворимость, описание, уравнение Пенга-Робинсона, давление насыщенных паров.

Аннотация

В работе представлен метод описания растворимости различных веществ в сверхкритическом диоксиде углерода, основанный на уравнении состояния реальных газов Пенга-Робинсона, а также однопараметрического закона смешивания Мухопадхьяи и Рао. Алгоритм расчета включает в себя неизвестный коэффициент бинарного взаимодействия, определяемый методом перебора и минимизации среднеквадратичного отклонения расчетных значений растворимости от экспериментальных на описываемой изотерме, а также давление насыщенных паров растворяемого вещества при температуре процесса. При наличии экспериментальных данных давления насыщенных паров, на точность описания влияет в первую очередь корректность методики проведения эксперимента и его точность. В случае отсутствия надежных экспериментальных данных это значение определяется различными расчетными методами. Большинство расчетных методов основаны на уравнении Клаузиуса-Клапейрона, и используют в качестве исходных данных критические параметры исследуемого вещества, а также как правило, нормальную температуру кипения. Различными авторами были предложены уникальные расчетные методы определения давления насыщенных паров, результаты расчетов по которым отличаются порой на несколько порядков. В работе представлены результаты исследования влияния метода определения давления насыщенных паров вещества, растворяемого в сверхкритическом диоксиде углерода, на точность описания растворимости. Перечень расчетных методов установления величины давления насыщенных паров включает методы: Клайперона, Ли-Кеслера, Риделя, Фроста-Колкуорфа-Годоса и Риделя-Планка-Миллера. Показано, что в большинстве случаев эти методы не позволяют описывать экспериментальные данные по растворимости вещества в СК-СО₂ с приемлемой (до 10-12%) точностью. В работе также предложено использование давления насыщенных паров в качестве второго подгоночного параметра при описании растворимости в дополнение к традиционно принятому коэффициенту бинарного взаимодействия. Это позволило значительно увеличивает точность описания растворимости веществ в сверхкритическом диоксиде углерода. Показана существенно большая сходимость значений давления насыщенных паров, установленных подобным образом, со значениями, полученными в рамках использования экспериментальных методов.