**ТЕРМОДИНАМИКА ПАРОЖИДКОСТНОГО РАВНОВЕСИЯ В СМЕСЯХ УГЛЕВОДОРОДОВ НА ОСНОВЕ ОДНОФЛЮИДНОЙ МОДЕЛИ**

Казанцев С.А., Клинов А.В., Дьяконов С.Г., Дьяконов Г.С., Динмухаметова Р.А.

*ФГБОУ ВПО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Россия, 420015, Казань, ул. К.Маркса, 68. rezdin29@gmail.com*

Рассматривается методика расчета параметров парожидкостного равновесия в смесях на основе так называемой однофлюидной модели Ван-дер-Ваальса. В качестве стандартного флюида для получения уравнения состояния используется система частиц с потенциалом взаимодействия Леннард-Джонса, параметры которого рассчитываются по критической точке конкретного вещества. Для расчета равновесия используются точные термодинамические соотношения: равенство химических потенциалов и давлений в двух фазах. Даются результаты расчетов для бинарных смесей: метан-этан, метан-пропан, этан-пропан и их сравнение с экспериментальными данными. При этом в однофлюидной модели смеси используется представление об инвариантности зависимости функционалов отталкивания и притяжения от числовой плотности и температуры, полученных ранее для чистого вещества.

Работа выполнена при поддержке РФФИ № 12-08-00465-а.