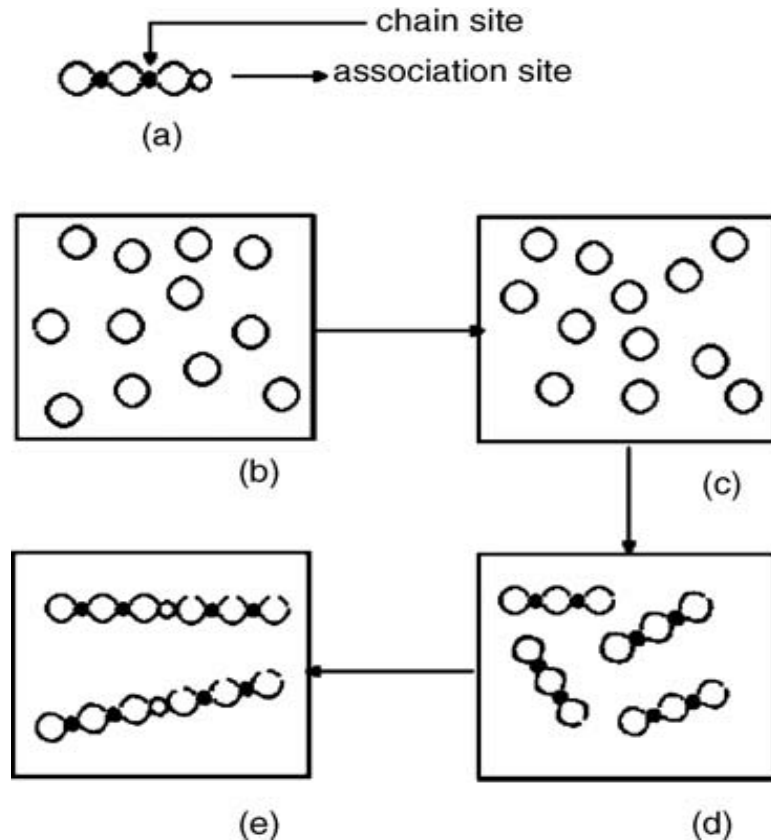


# *The Statistical Associating Fluid Theory (SAFT)*

Моисеев Александр

# Модель SAFT



Модель жидкости,  
состоящей из твёрдых  
шаров.

Потенциал взаимодействия:

$$V(r) = \begin{cases} \infty, & r < \sigma \\ 0, & r \geq \sigma \end{cases}$$

$$F^{res} = F^{seg} + F^{chain} + F^{assoc}$$

# Уравнения SAFT

$$\frac{F^{chain}}{RT} = \sum_i x_i (1 - m_i) \ln(g_{ii}(d_{ii})^{hs}),$$

где  $x_i$  – мольная доля компонента,  $g_{ii}$  – радиальная функция распределения,  $d_{ii}$  – диаметр

$$\frac{F^{assoc}}{RT} = \sum_i x_i \left[ \sum_{A_i} \left( \ln X^{A_i} - \frac{X^{A_i}}{2} \right) + \frac{1}{2} M_i \right],$$

где  $X^{A_i}$  – доля молекул, несвязанных с сайтом  $A$  молекулы  $i$ ,  $M_i$  – число сайтов ассоциации на молекуле  $i$

$$X^{A_i} = \left[ 1 + \sum_j \sum_{B_j} \rho_j X^{B_j} \Delta^{A_i B_j} \right]^{-1},$$

где  $\rho_j$  – молярная плотность молекул  $j$ ,  $\Delta^{A_i B_j}$  – сила ассоциации между двух сайтов  $A$  и  $B$  на молекулах  $i$  и  $j$

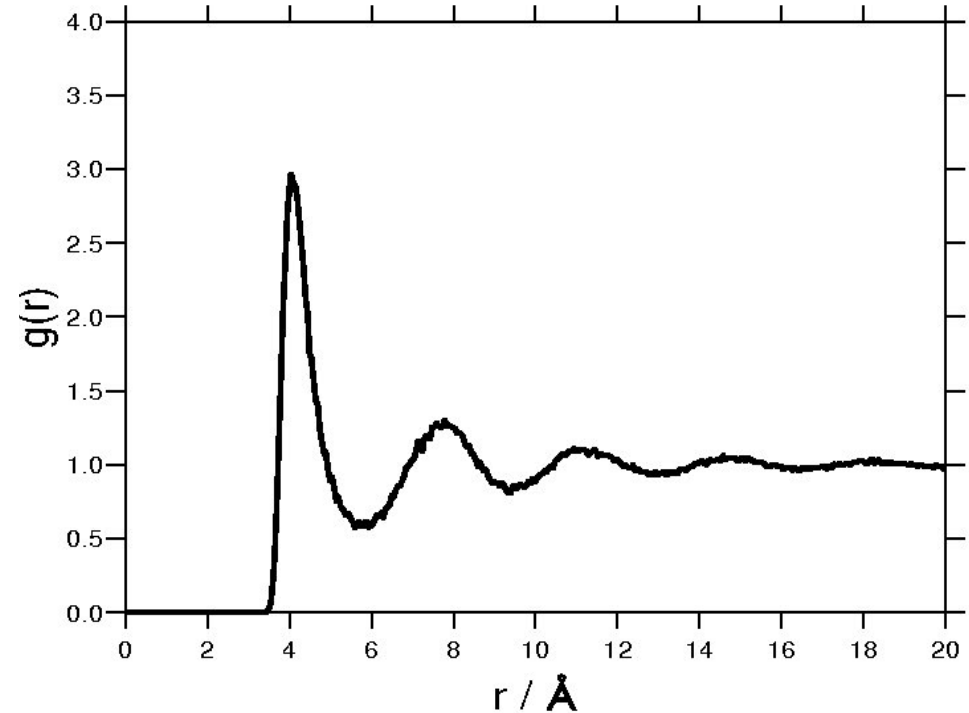
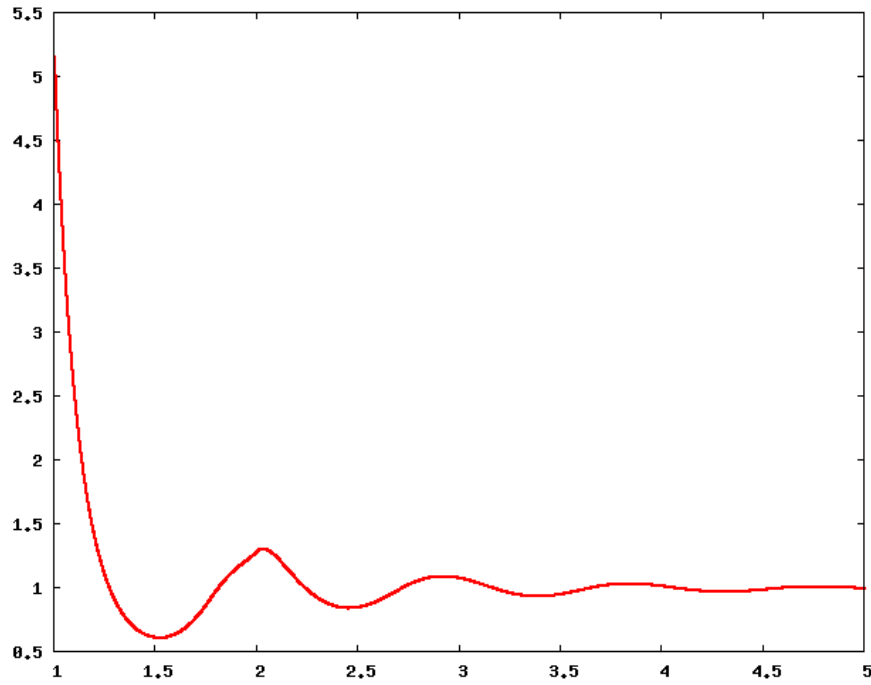
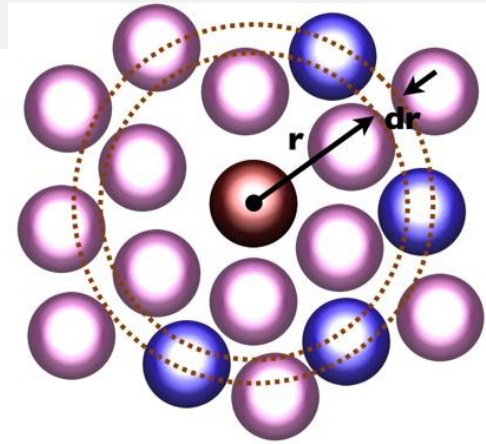
$$\Delta^{A_i B_j} = d_{ij}^3 g_{ij}(d_{ij})^{seg} \kappa^{A_i B_j} \left[ \exp(\varepsilon^{A_i B_j} / kT) - 1 \right],$$

где  $\kappa^{A_i B_j}$  – объём ассоциации,  $\varepsilon^{A_i B_j}$  – энергия ассоциации

# Радиальная функция распределения

$$g_{ij}(d_{ij}) = \frac{1}{1 - \zeta_3} + \left( \frac{d_i d_j}{d_i + d_j} \right) \frac{3\zeta_2}{(1 - \zeta_3)^2} + \left( \frac{d_i d_j}{d_i + d_j} \right)^2 \frac{2\zeta_2^2}{(1 - \zeta_3)^3}$$

$$\zeta_k = \frac{\pi N_{AV}}{6} \rho \sum_i X_i m_i d_{ii}^k$$



# Параметры модели SAFT

- количество сегментов в цепи  $m$
- диаметр сегмента  $d$
- энергия сегмента  $\varepsilon$
- объём ассоциации  $\kappa^{A_i B_j}$
- энергия ассоциации  $\varepsilon^{A_i B_j}$

Параметры модели оцениваются из экспериментальных данных о давлении пара чистого вещества и плотности.

# Смеси. Правила смешения

## Параметр взаимодействия $k_{ij}$

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j} (1 - k_{ij})$$

$$k_{ij} \propto \frac{\sqrt{I_i I_j}}{I_i + I_j},$$

где  $I$  – потенциал ионизации

## Правила смешения

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}$$

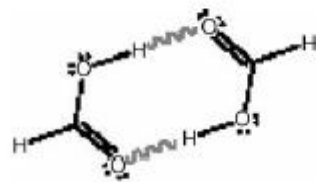
$$\varepsilon^{A_i B_j} = \frac{\varepsilon^{A_i B_i} + \varepsilon^{A_j B_j}}{2}$$

$$K^{A_i B_j} = \sqrt{K^{A_i B_i} K^{A_j B_j}}$$

# Схемы ассоциации



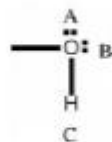
Acids



1A

1A, 2B

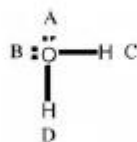
Alcohols



3B

2B/3B

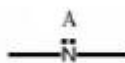
Water



4C

3B/4C

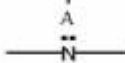
Tertiary



1A

Non-self-associating

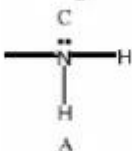
Secondary



2B

2B

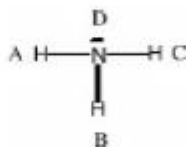
Primary



3B

3B

Ammonia



4B

3B



*Спасибо за внимание!*