

## Использование программного пакета PhD для расчета фазовых диаграмм

<http://td.chem.msu.ru/develop/phdi/>

### Задача 1.

Варьируя вид выражения избыточной энергии Гиббса, получите различные типы фазовых диаграмм бинарной системы А – В из диаграммы с простой «сигарой» (все растворы в системе – идеальные). Примите, что газовая фаза идеальна, энергия Гиббса ее относительно жидкости может быть записана в виде:

$$G_v - G_L = (1 - x)(2000 - 3 \cdot T) + x(600 - 2 \cdot T)$$

### Задача 2.

В табл. 1 приведены температуры замерзания смесей воды и глицерина. Энтальпии плавления компонентов равны 6008 и 18497 Дж·моль<sup>-1</sup>, соответственно. Используя координаты эвтектической точки, оцените значение параметра взаимодействия субрегулярного раствора. Сравните экспериментальные данные с результатами расчета диаграммы плавкости в предположении образования (а) идеального, (б) субрегулярного раствора.

Таблица 1. Кривая кристаллизации водно-глицеринового раствора

x	T, K	x	T, K
0	273,15	0,2269	239,6
0,0213	271,6	0,2800 (эвт)	228,7
0,0466	268,4	0,3134	235,4
0,0774	263,7	0,4390	254,0
0,1154	257,7	0,6378	271,6
0,1646	251,2	1	291,2

### Задача 3.

По результатам изотермических исследований давления пара над растворами системы метанол – вода были определены параметры модели Маргулеса при 322.91 К:  $A_{12} = 0.4502$ ,  $A_{21} = 0.5957$  [Bredig G., Bayer R. // Z.Phys.Chem. 1927, 130, 1]. Рассчитайте и сравните с экспериментом  $p$ - $x$ - $y$ -диаграммы системы при 312.91 и 322.91 К. Рассчитайте диаграмму кипения при стандартном давлении, сравните результаты расчета с экспериментальными данными (табл. 2 и 3). Определите температуру кипения раствора с мольной долей спирта 0.8 и состав пара при давлении 0.1, 0.5 и 1 бар. Давления паров индивидуальных компонентов возьмите из базы <http://webbook.nist.gov/>

Таблица 2. Давления пара над растворами системы CH<sub>3</sub>OH – H<sub>2</sub>O

<i>p</i> , бар	<i>x</i>	<i>y</i>
322.91 K		
0.15724	0.9514	0.7259
0.20658	0.8782	0.5259
0.22329	0.8522	0.4780
0.25789	0.7869	0.3706
0.28645	0.7307	0.2894
0.31132	0.6748	0.2420
312.91 K		
0.1282	0.8665	0.3786
0.13605	0.8477	0.3836
0.15579	0.7968	0.3266
0.16105	0.7772	0.3046
0.22026	0.5638	0.1762
0.23079	0.4968	0.1543

Таблица 3. Температура кипения водных растворов метанола при 1 бар

<i>x</i>	<i>y</i>	<i>T</i> , K
0.4063	0.1817	344.45
0.7681	0.3515	353.35
0.8743	0.5169	359.75
0.9469	0.7166	366.05