

АПРИОРНЫЕ РАСЧЕТЫ АДсорбЦИОННЫХ РАВНОВЕСИЙ В ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМАХ

Н.Г. Крюченкова, Д.А.Фирсов, А.М. Толмачев

*МГУ им. М.В.Ломоносова,
E-mail: amtolmach@yandex.ru*

В докладе описана процедура априорного расчета равновесных характеристик адсорбции трехкомпонентных растворов по экспериментальным данным для соответствующих двухкомпонентных растворов. Расчет основан на разработанном авторами ранее методе, позволяющем с хорошей точностью находить зависимости равновесных активностей компонентов в трехкомпонентном растворе от задаваемого состава адсорбционного раствора. Для представления результатов расчета в компьютерном банке данных по адсорбции (<http://www.adsorption.ru>, [http:// www.chem.msu.ru /~Adsorption](http://www.chem.msu.ru/~Adsorption)) с целью пополнения весьма ограниченного числа экспериментальных данных, имеющихся в литературе, необходимо перейти от активностей к мольным концентрациям компонентов в растворе. Для решения этой задачи была разработана компьютерная программа, позволяющая по известным зависимостям коэффициентов активности компонентов трехкомпонентного раствора от состава и двум значениям их активности, находимым в результате априорного расчета, определять соответствующие мольные доли компонентов раствора.

На основании проведенных расчетов для включения в банк данных по адсорбции подготовлены данные по адсорбции на активном угле трехкомпонентных растворов: бензол-четырёххлористый углерод-изооктан и бензол-этанол-изооктан при 303 и 338К.