**ВОДНО-ЭТАНОЛЬНЫЕ РАСТВОРЫ: ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ В ПРОТОЧНОМ РЕЖИМЕ**

**Федосеев Т.1,2, Богдан Т.В.1,3, Богородский С.Э.1, Богдан В.И.1,3**

*Студент, 4 курс бакалавриата*

*1Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*

*2НИЯУ «МИФИ», институт ЛаПлаз, Москва, Россия*

*3 Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail:* [*vfkbuyec@gmail.com*](mailto:vfkbuyec@gmail.com),[*vibogdan@gmail.com*](mailto:vibogdan@gmail.com)

Использование сверхкритических флюидов в промышленности в качестве растворителей или экстрагентов позволяет использовать преимущества состояния вещества в сверхкритическом состоянии, сочетающем в себе преимущества газовой и жидкой фаз: отсутствие диффузионных ограничений при смешивании реагентов, неограниченная растворимость компонентов [1].  Таким образом, для практических использований водно-этанольных смесей необходимо определить параметры их перехода в сверхкритическую область.

В настоящей работе рассчитывали и экспериментально определяли область перехода в сверхкритическое состояние водно-этанольной смеси 0.55 м.д. этанола.

Критические параметры для воды и этилового спирта известны (Tкр воды = 647 К, pкр = 22 МПа; Tкр этанола = 516 К, pкр = 6.3 МПа [2], однако для водно-спиртовых смесей область перехода в сверхкритическое состояние не определена. Для водно-этанольных растворов (0.55 м.д. этанола), рассчитанные по правилу аддитивности, критические параметры составляют Tкр = 575 К, pкр = 13.4 МПа. Расчеты по уравнению Пенга-Робинсона [3] дают близкие результаты.  Для расчета плотности смеси использовали программный пакет COCO -simulator [4].

Экспериментальная методика определения критических параметров основана на резком изменении плотности водно-этанольного раствора при переходе в сверхкритические условия. В термодинамически равновесных условиях (проточный режим) экспериментальная изобара (12 МПа) изменения температуры во времени носит плавный монотонный характер, что свидетельствует о фазовом переходе второго рода. Переход в сверхкритическую область для водно-этанольной смеси (0.55 м.д. этанола) при давлении 12 МПа наблюдается при температурах выше 570К. В динамическом термодинамически неравновесном «форсуночном» режиме фиксировались показания температуры в центре реактора. Подача водно-этанольной смеси из тонкого капилляра в основной реактор осуществлялась при температурах на 100-150 К относительно температуры основного реактора (заведомо СКФ условия). Установлены множественные сильные амплитудные колебания ∆ = 50-80 К вблизи критической температуры. По-видимому, что в таком эксперименте имеет место снарядный режим течения с множественным образованием кавитационных “пузырьков” газа в жидкости, которые при расширении и схлопывании генерируют очаговый критический переход (в силу резкого возрастания до критических значений давления при схлопывании пузырька). В пользу этого предположения говорит анализ чисел Рейнольдса при разных температурах.

**Литература**



*1. Е.С. Алексеев, А.Ю. Алентьев, И.А. Бажанов, А.С. Белова, и др.. Сверхкритические флюиды в химии // Успехи химии. 2020. Т. 89. С. 1337-1427.*

*2. CRC Handbook of Chemistry and Physics. 102nd Ed. / ed. Rumble J.R. Boca Raton, FL: CRC Press, 2021.*

*3. D.Y. Peng, D. B. Robinson. A New Two-Constant Equation of State // Industrial and Engineering Chemistry: Fundamentals. 1976. Vol. 15. P. 59-64.*

*4.COCO (CAPE-OPEN to CAPE-OPEN) simulation environment.* [*https://www.cocosimulator.org/index.html.*](https://www.cocosimulator.org/index.html.)