

# ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

Игнатенко В.М.

Необходимость проведения расчетов термодинамических свойств многокомпонентных газовых смесей определяется потребностью промышленности в технике (в частности, в компрессорах) и технологии для разнообразных производственных процессов.

Расчет термодинамических свойств веществ на основе закона соответственных состояний во многих случаях не обеспечивает достаточной точности. Использование уравнений состояния Битти-Бриджмена, Богомолова-Майера, Загорученко, Редлиха-Квонга и др. [1] возможно, если известны значения индивидуальных коэффициентов компонентов газовой смеси и коэффициентов, учитывающих взаимодействие компонентов. Однако значения этих коэффициентов известны для ограниченного количества веществ.

Метод Ли-Кеслера, основанный на использовании модифицированного уравнения Бенедикта-Вебба-Рубина (БВР), для практического применения требует значительно меньшего объема информации о рассматриваемых веществах. Согласно данному методу термодинамические параметры определяются по формуле

$$A = A^{\circ} + \frac{\omega}{\omega^{\circ}} \cdot (A^{\circ} - A^{\circ}), \quad (1)$$

где  $A$  - рассматриваемый параметр,  $\omega$  - коэффициент ацентричности.

Индексом  $^{\circ}$  обозначаются величины для "основного" вещества, для которого  $\omega = 0$ , а индексом  $^{\circ}$  - для "эталонного" вещества, в качестве которого выбран н-октан,  $\omega^{\circ} = 0,3978$ . По формуле (1) определяются термодинамические параметры, такие, как коэффициент сжимаемости  $Z$ , изотермические поправки к удельной энтальпии  $\Delta i = i^{uo} - i$ , удельной энтропии

$\Delta s = s^{ud} - s$ , изобарной теплоемкости  $\Delta c_p = c_p^{ud} - c_p$  и др.

Модифицированное уравнение БВР имеет вид

$$\frac{p_r}{T_r \cdot \rho_r} = 1 + B \cdot \rho_r + C \cdot \rho_r^2 + D \cdot \rho_r^5 + \frac{c_4}{T_r^3} \cdot \rho_r^2 \cdot (\beta + \gamma \cdot \rho_r^2) \cdot e^{-\gamma \cdot \rho_r^2}, \quad (2)$$

где индекс  $r$  относится к приведенным параметрам состояния рассматриваемого вещества.

$$p_r = \frac{p}{p_{кр}}, T_r = \frac{T}{T_{кр}}, \text{ где } p_{кр} \text{ и } T_{кр} - \text{ критические давление и}$$

температура вещества или псевдокритические параметры газовой смеси. Значения критических параметров более, чем для 400 веществ приведены в [1].

Коэффициенты уравнения (2) определяются по формулам

$$B = b_1 - \frac{b_2}{T_r} - \frac{b_3}{T_r^2} - \frac{b_4}{T_r^3}, C = c_1 - \frac{c_2}{T_r} - \frac{c_3}{T_r^3}, D = d_1 + \frac{d_2}{T_r}. \quad (3)$$

Принимая, что  $\rho_r = \frac{p_r}{Z \cdot T_r}$ , уравнение (2) можно записать в

форме, удобной для вычисления  $Z$  методом последовательных приближений:

$$Z = 1 + B \cdot \frac{p_r}{T_r \cdot Z} + C \cdot \left(\frac{p_r}{T_r}\right)^2 \cdot \frac{1}{Z^2} + D \cdot \left(\frac{p_r}{T_r}\right)^5 \cdot \frac{1}{Z^5} + \frac{c_4}{T_r^3} \cdot \left(\frac{p_r}{T_r}\right)^2 \cdot \frac{1}{Z^2} \cdot \left[ \beta + \gamma \cdot \left(\frac{p_r}{T_r}\right)^2 \cdot \frac{1}{Z^2} \right] \cdot e^{-\gamma \cdot \left(\frac{p_r}{T_r}\right)^2 \cdot \frac{1}{Z^2}} \quad (4)$$

По формуле (4) определяется  $Z^0$  для "основного" вещества, затем  $Z^1$  для "эталонного" вещества и по формуле (1) определяется  $Z$  для рассматриваемого вещества.

Для газовой смеси из  $k$  компонентов с мольной концентрацией  $j$ -го компонента  $r_j$  коэффициент ацентричности

$$\omega = \sum_{j=1}^k r_j \cdot \omega_j, \quad (5)$$

где  $\omega_j$  - коэффициент ацентричности  $j$ -го компонента.

Псевдокритические параметры газовой смеси определяются по формулам:

$$\text{плотность } \rho_{кр} = 8 / \left\{ \sum_i^k \sum_j^k r_i \cdot r_j \cdot (\rho_{кри}^{-1/3} + \rho_{крj}^{-1/3})^3 \right\}; \quad (6)$$

температура

$$T_{кр} = \frac{\rho_{кр}}{8} \cdot \sum_i^k \sum_j^k r_i \cdot r_j \cdot (\rho_{кри}^{-1/3} + \rho_{крj}^{-1/3}) \cdot (T_{кри} \cdot T_{крj})^{1/2}; \quad (7)$$

$$\text{давление } P_{кр} = (0,2905 - 0,085 \cdot \omega) \cdot \rho_{кр} \cdot R \cdot T_{кр}. \quad (8)$$

В уравнениях (6),(7) и (8) критическая плотность  $j$ -го компонента

$$\rho_{крj} = P_{крj} / [(0,2905 - 0,085 \cdot \omega_j) \cdot R_j \cdot T_{крj}]. \quad (9)$$

Для выполнения расчетов разработана программа на языке программирования Object Pascal в среде разработки Delphi, в которой реализован представленный выше метод расчета. База данных включает сведения более, чем для 400 веществ [1].

Литература:

1. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Л.:Химия, 1982.-582с.

## МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ДЕФЕКТОУТВОРЕННЯ У МОНОКРИСТАЛАХ ТЕЛУРИДУ КАДМІЮ ЛЕГОВАНОГО ХЛОРОМ

Косяк В.В., Опанасюк А.С., Тиркусова Н.В.

Одним із перспективних матеріалів для виготовлення високочутливих неохолоджувальних детекторів іонізуючого випромінювання є телурид кадмію легований хлором. Використання хлору як легуючого елемента дозволяє отримувати низьку провідність монокристалів  $CdTe$ , завдяки ефекту самокомпенсації заряджених атомних дефектів, що забезпечує високу ефективність детектування рентгенівського та гама випромінювання.

За допомогою метода квазіхімічних реакцій проведено моделювання процесів дефектоутворення у монокристалах  $CdTe:Cl$  в залежності від тиску пари кадмію та концентрації домішкових атомів. При цьому основним механізмом