

УДК 536.7.541.1

**В.И. Недоступ\*, О.В. Недоступ**Физико-химический институт им. А.В. Богатского Национальной академии наук Украины,  
Люстдорфская дорога, 86, г. Одесса, 65080, Украина;

\* e-mail: physchem@paco.net

**КАНОНИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ТЕХНИЧЕСКИХ ГАЗОВ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ОПТИМИЗАЦИОННЫХ ПРОГРАММАХ**

На основании анализа термодинамической поверхности состояния реального газа показано, что она образована движением прямолинейного в координатах  $T, \rho$  и  $\Delta F, \rho$  ( $T$  — температура,  $\rho$  — плотность,  $\Delta F$  — конфигурационная часть свободной энергии Гельмгольца) луча вокруг точки с координатами  $T=0$  и  $\rho=\rho_0$ . В интервале плотностей  $\rho=1,5 \rho_{cr}$  ( $\rho_{cr}$  — критическая плотность) линейчатая поверхность совпадает с поверхностью состояния. Это позволило с привлечением вириального уравнения предложить уравнение состояния для газов в интервале плотностей  $0-1,5 \rho_{cr}$  в канонической форме — свободная энергия Гельмгольца в зависимости от температуры и плотности. Уравнение имеет вид  $\Delta F / \rho = RT_0 B$ , где  $T_0$  — параметрическая температура, равная  $T_0 = T / (1 - \rho \cdot \rho_0^{-1})$ ,  $\rho_0$  — плотность узловой точки с координатами  $T = 0$  и  $\rho = \rho_0$ ,  $B$  — второй вириальный коэффициент, отнесенный к параметрической температуре  $T_0$ . Показано, что это уравнение состояния может быть приведено к форме уравнения Ван-дер-Ваальса  $\Delta F = RT(b - a/RT_0)b\rho(1 - b\rho)^{-1}$ . Отличие от классического уравнения состояния Ван-дер-Ваальса состоит в том, что значение  $\rho_0 = 1/b$  для  $\Delta F$  вдвое больше, чем для коэффициента сжимаемости  $Z = PV/RT$ . Отсюда предложен метод составления уравнения состояния в канонической форме: на основании  $P, v, T$ -данных определяются  $B(T_0)$  и  $\rho_0$ , а затем  $\rho_0$  удваивается. Приведены результаты сравнения «экспериментальных» и расчетных значений  $\Delta F$  и  $Z$  для модельной системы Леннарда-Джонса (12–6). Показано, что уравнение состояния воспроизводит «экспериментальные» данные с погрешностью эксперимента.

**Ключевые слова:** уравнение состояния, термодинамическая поверхность, термодинамические свойства.

V. I. Nedostup, O. V. Nedostup

**THE CANONICAL EQUATION OF STATE OF TECHNICAL GASES FOR THE OPTIMIZING PROGRAMS**

On the base of the analysis of the real gas surface of state it has been shown that thermodynamic surface can be formed through the movement of rectilinear in coordinates  $T, \rho$  and  $\Delta F, \rho$  ( $T$  — temperature,  $\rho$  — density,  $\Delta F$  — configuration part of the Helmgolts free energy) beam around the point with coordinates  $T=0$  and  $\rho = \rho_0$ . The linear surface coincides with the surface of state within the interval of densities up to  $\rho=1,5 \rho_{cr}$  ( $\rho_{cr}$  — critical density). The following equation of state gases for the interval of densities  $0-1,5 \rho_{cr}$  in canonical form — Helmgolts free energy depending on the temperature and density is proposed with the use of the virial equation. Equation can be presented in the form:  $\Delta F / \rho = RT_0 B$ , where  $T_0$  — parametric temperature equals  $T_0 = T / (1 - \rho \cdot \rho_0^{-1})$ ,  $\rho_0$  — density of point with coordinates  $T = 0$  and  $\rho=\rho_0$ ,  $B$  — second virial coefficient related to parametric temperature  $T_0$ . It has been shown that equation of state can be represented as Van der Waals equation  $\Delta F = RT(b - a/RT_0)b\rho(1 - b\rho)^{-1}$ . As compared to the classical equation of state of the Van der Waals the value  $\rho_0 = 1/b$  for  $\Delta F$  is twice as much than for the compressibility coefficient  $Z = PV/RT$ . Hence method for obtaining of equation of state in canonical form: on the base of  $P, v, T$ -data are determined  $B(T_0)$  and  $\rho_0$ , and then  $\rho_0$  redoubles. Results of comparison, of experimental and calculated values  $\Delta F$  and  $Z$  for model system Lennard-Jones (12–6) have been reported. It has been shown that equation of state describes «experimental» data with the experiment error.

**Key words:** equation of state; thermodynamics surface; thermodynamic properties.