

УДК 537.7, 541.1

В.И. Недоступ

Физико-химический институт имени А.В. Богатского НАН Украины, Люстдорфская дорога, 86,
г. Одесса, Украина, 65080
e-mail: physchem@paco.net

МЕТОДИКА РАСЧЁТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

Предложена удобная для практических расчётов теоретическая модель газовой смеси, реализующая концепцию термодинамического подобия для трёхпараметрического потенциала ($n-6$). Обоснована форма уравнения состояния смеси, методика определения параметра крутизны отталкивания n и других величин, необходимых для расчёта, а также метод определения энергии взаимодействия разнородных молекул по данным о взаимодействии чистых компонентов. Приведены потенциальные параметры и другие величины для большого числа технически важных газов, необходимые для расчёта термодинамических свойств смесей произвольного состава.

Ключевые слова: Газовые смеси. Термодинамические свойства. Уравнение состояния. Межмолекулярные взаимодействия.

V.I. Nedostup**CALCULATION METHOD OF THERMODYNAMIC PROPERTIES GASEOUS MIXTURES**

Theoretical model of gaseous mixture useful for practical calculations that realizes conception of thermodynamic similarity for three-parameter potential ($n-6$) is proposed. The form of mixture state equation, method of parameter determination of n repulsion's steepness and other parameters needed for calculate, as well as a method for determining the energy of interaction of heterogeneous molecular data on the interaction of the pure components are explained. The potential parameters and other values are given for a large number of technically important gases required for the calculation of thermodynamic properties of mixtures of arbitrary composition.

Keywords: Gaseous mixtures. Thermodynamic properties. Equation of state. Intermolecular interactions.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

B — второй вириальный коэффициент;
 f, q — корректирующие множители;
 ΔF — конфигурационная часть свободной энергии Гельмгольца;
 k — постоянная Больцмана;
 N — число Авогадро;
 n — показатель крутизны отталкивания потенциала;
 T — абсолютная температура;
 r — межчастичное расстояние;
 $U(r)$ — энергия межмолекулярного взаимодействия;
 V — удельный объём;

x_i, x_j — доли компонентов i и j в смеси;
 ε и σ — силовые параметры потенциала;
 ρ — плотность;
 τ — приведённая температура;
 ω — приведённая плотность.

ИНДЕКСЫ

o — параметр опорной точки подобия;
 $кр$ — параметр критической точки;
 B — температура Бойля;
 $см$ — смеси;
 $*$ — приведённый параметр.

1. ВВЕДЕНИЕ

Современные методы расчёта термодинамических свойств смесей основаны на уравнениях состояния, коэффициенты которых комбинируются с учётом уравне-

ний состояния компонентов по предложенным авторами правилам. Эти правила зачастую лишены основательной физической доказательности и нуждаются в корректировке для решения конкретных задач [1].

В настоящей работе делается попытка привлечь