

ISSN 1811-1807

# ҒЫЛЫМИ ЖУРНАЛ

Б. ТОРАЙҒЫРОВ АТЫНДАҒЫ ПАВЛОДАР МЕМЛЕКЕТЛІК УНИВЕРСИТЕТІ

1 '2007



ПМУ хабаршысы  
Вестник ПГУ

ФИЗИКА-МАТЕМАТИКАЛЫҚ СЕРИЯ

## НАҚТЫ ГАЗДАРДАҒЫ МОЛЕКУЛААРАЛЫҚ ӘСЕРЛЕСУДІ МОДЕЛЬДЕУ

**Н.Ж. Жуспекова, Ш.К. Биболов, А.Б. Альжанов  
С. Торайыров атындағы Павлодар мемлекеттік  
университеті**

*В статье освещаются вопросы задач межмолекулярного воздействия действительных газов.*

*Мақалда нақты газдардағы молекулааралық әсерлесудің түрлері есептерін қарастыруға болатынын ескертеді.*

*The given article dwells on inter-molecular influence of base gases.*

Нақты газдардың қасиеттерін сипаттауға жарамды теңдеуді іздеудің әдістерінің бірі, молекулалардың өлшемдерін және молекулааралық әсерлесу күшін ескеретін түзетулер енгізу болып табылады.

Нақты газ молекулаларының әсерлесуін ескеретін белгілі және қарапайым күй теңдеуі - Ван-дер-Ваальс теңдеуі.

$$\left[ p + \frac{a}{V_m^2} \right] (V_m - b) = RT$$

Ван-дер-Ваальс теңдеуі нақты газдардың қасиеттерін қысым мен температураының кең диапазонында әжептәуір дәлдікпен сипаттайды.

Нақты газдың қасиеттерінің ерекшеліктерін газда молекулаларды тұрақты топтамалары болуы арқылы түсіндіруге болады. Ол топтамаларды молекуланың ассоциациялары немесе кластерлер деп атайды. Ең қарапайым комплекс болып димер

табылады. Ол екі молекуланың бірігіп, байланысқан бір бүтін молекула, яғни массасы екі есе артық молекула ретінде қарастырылады. Төмен энергияда екі молекула массалар орталығы маңайында бір-бірін айналып, қозғалыста болады.

Кластерлі газда түрлі өлшемді кластерлер бір-бірімен және молекулалармен тепе-теңдікте болатын қоспаның жеке компоненттері ретінде қарастырылады. Соңғы кезде нақты газдардың қасиеттерін түсіндіру үшін кластерлер, ассоциациялар, молекулалық топтасу әдісі қолданылады.

Кластерлер концентрациясы арқылы сығылу факторы былай анықталады:

$$z = \frac{1}{1-b_c} \sum_{r=1}^{\infty} C_r,$$

мұндағы  $b_c$  – молекулалардың меншікті көлеміне енгізілген түзету,  $C_g$  –  $g$  молекулалардан құралған кластерлердің концентрациясы,  $r$  – қарауға енгізілетін ең үлкен кластердің өлшемі.

Бөлшектердің соқтығысуы кезінде бағытының әртүрлі болуымен байланысты, молекулаларды соқтығысуының эффективті диаметрі  $u$  шарлар ретінде қарастыруға болады. Бұл молекулалардың меншікті көлеміне енгізілген түзету үшін келесі формуланы береді:

$$b_c = \frac{2\psi}{3} n\pi\sigma^3,$$

мұндағы  $u$  – молекулалардың соқтығысуының эффективті диаметрі,  $\psi$  – кластерге енетін молекуланың орташа көлемінің өзгерісін ескеретін жиынның параметрі,  $n$  – бірлік көлемдегі молекулалар саны. Жоғары қысымда Ван-дер-Ваальс теңдеуі тәжірибеден және кластерлік модельден үлкен ауытқу береді. Ол кластерлердің үлкен концентрацияларында моль санының айнымалылығымен байланысты. Газдарда жоғары қысымда әртүрлі өлшемді кластерлер болады, және оларды есептеу тәжірибелік берілгендермен сығылу факторымен сәйкес келеді.

Идеал газдың 1 мольда  $NA$  молекулалар саны болады. Онда күй теңдеуі

$$PV = \nu RT,$$

осыдан:

$$V_M = \frac{\nu RT}{P}$$

Нақты газдың қасиеттерін суреттеу үшін  $Z$  – сығылу факторы кең қолданылады. Ол нақты газдың күйін сипаттауға ыңғайлы, бұл мәселе бойынша көптеген зерттеулер жүргізілді.

$$Z = \frac{PV_M}{RT}$$

мұндағы  $V_M$  – мольдік көлем;  $P$  – абсолют қысым;  $T$  – термодинамикалық температура;  $R$  – универсал газ тұрақтысы.

Белгілі күй теңдеулерін осы түрге келтіріп, сығылу факторы Ван-дер-Ваальс теңдеуі төменгі формуланы береді:

$$Z = \frac{1}{1 + \frac{a}{PV_M^2} - \frac{b}{V_M} - \frac{ab}{PV_M^3}},$$

мұндағы  $a$  және  $b$  – Ван-дер-Ваальс түзетулері.

Идеал газ үшін  $Z = 1$ . Нақты газдарда мольдік көлем  $V_M^*$ . На-

қты газбен идеал газдың мольдік көлемдерінің қатынасы  $\frac{V_M^*}{V_M} < 1$ ,

өйткені нақты газдардағы молекулалар саны идеал газдағы молекулалар санынан аз, яғни нақты газда топтамалар пайда болуынан.

$$1 = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 + \dots$$

мұндағы  $\alpha_2$  – димерлердің пайда болу үлесуі,  $\alpha_3$  – тримерлердің пайда болу үлесі және т.с.с.

Нақты газдардың мольдік саны идеал газдың мольдік санының кластерлер пайда болу үлестеріне көбейтіндісіне тең:

$$\nu = \left( \alpha_1 + \frac{\alpha_2}{2} + \frac{\alpha_3}{3} + \frac{\alpha_4}{4} + \frac{\alpha_5}{5} + \dots \right) \nu_0$$

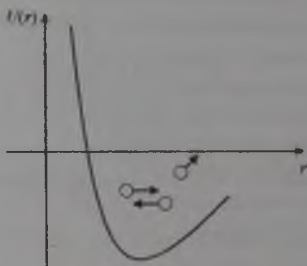
Бұл өрнектен көретініміз нақты газдың мольдік саны идеал газдың мольдік санынан бірнеше кем. Айталық мысалға, идеал

газдың  $V_m$  көлемінде он молекула болатын болса, нақты газда осы он молекуланың алтауы димерге айналуы мүмкін. Сонда нақты газдың  $V_m'$  көлемінде 7 топтама болады.

$$V_m' = 0,7V_m$$

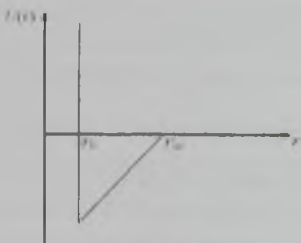
Нақты газдар үшін  $Z$  өте жоғары қысым және температура-лар ауданынан басқа аудандарда негізінде бірден кем.

Екі молекула бір-бірімен жақындай түскен кезде, үшінші бір молекула энергияның біраз бөлігін алып кеткенде, алдындағы екі молекула потенциалдық шұңқырдың ішінде бір-бірімен байланып қалады, яғни димер пайда болады (1-сурет).



1-ші сурет

Тікелей молекулалардың әсерлесуін экспериментте анықталмайды. Ал олардың әрекеттесу потенциалдары әртүрлі молекулалық құбылыстарды қарастыру үшін компьютерлік модельдеу қажет. Газ молекулаларының әсерлесуін модельдеуді үшбұрышты потенциал мысалында қарастырайық (2-ші сурет).



2-ші сурет

Есеп келесідей тұжырымдалады:  $N$  молекула қабырғалары  $l$  көлемде орналасқан. Үшбұрышты потенциал бойынша, егер молекулалар арасындағы қашықтық  $r > l$  болса, олардың арасында әсерлесу байқалмайды. Егер  $r = 0$  болса, молекулалар серпімді әсерлеседі.  $r_0 < r < l$  болғанда әсерлесу күші  $F'_0$  тұрақты болады.

Молекулалар әселесуін сипаттау үшін келесі алгоритм ұсынылады.

1. Молекулалар берілген көлемде кездейсоқ орналыстырылады (аралындағы қашықтық  $r > r_0$  болуы ескерілуі қажет).

2. Молекулалардың  $x, y$  жылдамдық проекциялары

$$0 + 2\sqrt{\frac{8RT}{\pi M}} \cos \frac{\pi}{4} \text{ аралығында кездейсоқ орнатылады.}$$

3. Цикл ішінде әрбір молекулаға басқа молекулалар жағынан әсер ететін нәтижелі күш анықталады.

$r^2 = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}$  формуласы бойынша екі молекула арасындағы қашықтық анықталады. Егер  $r < r_0$  болса, молекулалар арасында серпімді соқтығысу модельденеді.  $r > l$  болса, күш құраушылары  $f_x = 0, f_y = 0$  болады. Басқа жағдайларда екі молекула арасындағы күш құраушылары келесідей анықтала-

ды:  $f_x = F_0 \cos \alpha, f_y = F_0 \sin \alpha$ . б бұрышы  $\text{tg } \alpha = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}$  формуласы

бойынша анықталады.

Нәтижелі күш құраушылары:  $F_x = \sum_{i=1}^{N-1} f_{ix}$ ,  $F_y = \sum_{i=1}^{N-1} f_{iy}$ .

4. Нәтижелі күш арқылы Ньютонның 2-ші заңы бойынша

молекуланың үдеу құраушылары анықталады:  $a_x = \frac{F_x}{m_0}$ ,  $a_y = \frac{F_y}{m_0}$ ,

мұндағы  $m_0$  – молекуланың массасы.

5. Молекуланың жылдамдық құраушылары анықталады:

$$v_{x(t+dt)} = v_{x(t)} + a_x dt, \quad v_{y(t+dt)} = v_{y(t)} + a_y dt.$$

Келесі циклда молекулалардың жаңа координаталары анықталады:  $x_{t+dt} = x_{t-dt} + v_{x(t-dt)} dt$ ,  $y_{t+dt} = y_{t-dt} + v_{y(t-dt)} dt$ .

Ұсынылған алгоритмға негізделе отырып, нақты газдардағы молекулааралық әсерлесудің түрлі есептерін қарастыруға болады.