

Прохоров Е. С.

О РАСЧЕТЕ ВНУТРЕННЕЙ ЭНЕРГИИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

Адрес статьи: www.gramota.net/materials/1/2008/1/69.html

Статья опубликована в авторской редакции и отражает точку зрения автора(ов) по рассматриваемому вопросу.

Источник

Альманах современной науки и образования

Тамбов: Грамота, 2008. № 1 (8). С. 170-171. ISSN 1993-5552.

Адрес журнала: www.gramota.net/editions/1.html

Содержание данного номера журнала: www.gramota.net/materials/1/2008/1/

© Издательство "Грамота"

Информация о возможности публикации статей в журнале размещена на Интернет сайте издательства: www.gramota.net

Вопросы, связанные с публикациями научных материалов, редакция просит направлять на адрес: almanac@gramota.net

В модели идеального газа полагают, что силы взаимодействия между частицами (молекулами) пренебрежимо малы. Поэтому по своим свойствам к идеальному газу близки разреженные реальные газы при температурах далеких от температуры конденсации. В курсах "Молекулярной физики и термодинамики" для описания идеального газа используют два уравнения состояния: термическое (уравнение Клайперона -

Менделеева) - $p/\rho = RT/\mu$ и калорическое (уравнение внутренней энергии) - $U = 1/(\gamma - 1) \cdot p/\rho$. Здесь использованы следующие обозначения: P - давление, ρ - плотность, T - термодинамическая температура, R - газовая постоянная; μ - молярная масса; γ - эффективный показатель адиабаты; U - удельная (на единицу массы) внутренняя энергия газа. Отметим, что U обычно определяется с точностью до аддитивной постоянной, зависящей от начала отсчета энергии.

Если предположить, что эффективный показатель адиабаты γ не зависит от других термодинамических параметров

$$\gamma = const, \quad (1)$$

то идеальный газ называют совершенным [Румер, Рывкин 1977].

Условие (1) верно для одноатомного газа, а для многоатомного газа и смесей различных газов это условие справедливо лишь в узком температурном интервале. В большинстве случаев, при выполнении термического уравнения состояния, имеем $\gamma \neq c_p/c_v \neq (\partial \ln p / \partial \ln \rho)_S \neq const$ (c_p и c_v - теплоемкости при постоянном давлении и объеме, S - энтропия). Это означает, что применимость модели идеального газа шире, чем модели совершенного газа. Поэтому с методической и практической точек зрения целесообразно использовать иное калорическое уравнение для идеальных газов, пригодное для достаточно широкого спектра газов (газовых смесей) и широкого диапазона температур.

В настоящем сообщении на основе общих физических положений предложен вывод уравнения для расчета внутренней энергии смеси идеальных газов, компоненты которых состоят не более чем из двухатомных молекул.

Пусть молярная масса газовой смеси равна μ , а мольные доли одно- и двухатомных молекул равны $v_n = \sum_i v_{n,i}$, где суммирование проводится по совокупности различных n - атомных молекул ($n = 1, 2$). Очевидно, что

$$v_1 + v_2 = 1, \quad v_1 + 2v_2 = \mu / \mu^a, \quad (2)$$

где μ^a - молярная масса газовой смеси при разложении всех молекул на атомы. Подчеркнем, что μ^a является константой даже при наличии химических реакций в замкнутом объеме (без массообмена с окружающей средой). Отношение μ / μ^a определяет среднее число атомов в молекуле.

Из закона равнораспределения энергии по степеням свободы молекулы вытекает, что средняя удельная энергия молекул для любого i - го компонента смеси определяется формулой

$$U_i = j_i RT / (2\mu_i), \quad (3)$$

где $j_i = (J^n + J^b + 2J^k)_i$ - сумма числа поступательных ($J^n = 3$), числа вращательных (J^b) и удвоенного числа колебательных (J^k) степеней свободы молекулы. Одноатомные газы обладают только поступательными степенями свободы ($J^b = J^k = 0$). В двухатомных газах, даже при достаточно низких ($T = 100 \div 300$ К) температурах, число J^b уже равно своему классическому предельному значению - 2. При более высоких температурах изменение числа J_i происходит только за счет возбуждения колебаний атомов в молекуле.

Число J^k для двухатомных молекул будем описывать функцией [Ландау, Лифшиц 1976]

$$j_i^k = F(\Theta_i/T) = (\Theta_i/T) / [\exp(\Theta_i/T) - 1], \quad (4)$$

где Θ_i - "характеристическая температура" возбуждения колебательных степеней свободы. Отметим, что $F(1) = 0,582$. Используя соотношения (2)-(4) для аппроксимации термодинамических данных [Глушко 1978], [Варгафтик 1972] в диапазоне $T = 300 \div 5000$ К, можно оценить значение Θ_i . Например: $\Theta_{H_2} \approx 3500$ К, $\Theta_{O_2} \approx 1500$ К, $\Theta_{OH} \approx 3500$ К, $\Theta_{N_2} \approx 3000$ К, $\Theta_{CO} \approx 3000$ К (индекс обозначает химический символ вещества). Такой подход в дальнейшем позволяет для любого i - го компонента смеси с точностью $\sim 5\%$ рассчитывать не только U_i , но и его теплоемкости $c_{v,i} = dU_i/dT$ и $c_{p,i} = c_{v,i} + R/\mu_i$. Из расчетов следует, что при $\Theta_i/T = 1$

величина мольной теплоемкости $\mu_i c_{p,i}$ для двухатомного компонента отличается от своего классического значения - $9/2 R$ менее чем на 2 %.

Если ввести эффективное (одно для всех молекул) значение характеристической температуры $\Theta = \sum_i \nu_{2,i} \Theta_i / \nu_2$, тогда с учетом (3) и (4) удельная внутренняя энергия U газовой смеси определяется выражением

$$U = \left\{ 3\nu_1 + \left[5 + 2 \frac{\Theta/T}{\exp(\Theta/T) - 1} \right] \nu_2 \right\} \frac{RT}{2\mu} \quad (5)$$

С учетом (2) преобразуем (5):

$$U = \left[\frac{\mu}{\mu^a} + \frac{1}{2} + \left(\frac{\mu}{\mu^a} - 1 \right) \frac{\Theta/T}{\exp(\Theta/T) - 1} \right] \frac{RT}{\mu} \quad (6)$$

Если в газовой смеси химических превращений - нет, тогда $U = U(T)$. В противном случае, внутренняя энергия является уже функцией двух переменных: $U = U(T, \mu)$. Заметим, что при наличии химических реакций уравнение (6) описывает только термодинамическую часть U_{th} полной внутренней энергии $U_{\Sigma} = U_{th} + U_{ch}$, которая включает в себя и химическую составляющую $U_{ch} \neq const$.

Для демонстрации точности (6) проведены расчеты для воздуха при $T = 300 \div 2000$ К, когда процессами диссоциации молекул можно пренебречь. Полагали, что воздух имеет следующий состав: $0,78 N_2 + 0,21 O_2 + 0,01 Ar$ (тогда $\mu / \mu^a = 1,99$ и $\Theta = 2660$ К). Оказалось, что значение U , полученное с помощью (6), практически совпадают (отличие ~ 1 %) с расчетами с использованием табличных термодинамических данных [Варгафтик 1972]. Также для сравнения были выполнены расчеты U по модели совершенного газа при значении $\gamma = 1,4$ (как для воздуха при нормальных условиях). В этом случае погрешность расчетов внутренней энергии для заданного температурного диапазона с ростом T монотонно возрастает (начиная от 1 %) и может достигать 20 % и выше, особенно в области высоких температур.

Таким образом, получено калорическое уравнение состояния (6), которое позволяет с высокой точностью и в широком диапазоне температур рассчитывать внутреннюю энергию смеси идеальных газов, состоящих из одно- и двухатомных молекул.

Список использованной литературы

1. Варгафтик Н. Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. - М.: Наука, 1972. - 720 с.
2. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: справочное издание в 4-х томах / Под ред. В. П. Глушко. - М.: Наука, 1978.
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. - М.: Наука, 1976. - 584 с.
4. Румер Ю. Б., Рывкин М. Ш. Термодинамика, статистическая физика и кинетика. - М.: Наука, 1977. - 552 с.

ИНТЕГРАЦИЯ ДАННЫХ И ПРИЛОЖЕНИЙ УНАСЛЕДОВАННЫХ ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ В СИСТЕМУ АВТОМАТИЗАЦИИ БИЗНЕС-ПРОЦЕССОВ ПРЕДПРИЯТИЯ НА ПРИМЕРЕ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ КОМПАНИИ ОАО «ФАРМАЦИЯ»

Прохоров Н. М., Хмелевской Б. Г., Шибанов С. В.
Пензенский государственный университет

Информационные системы (ИС), предназначенные для сбора и обработки информации, усовершенствования процессов управления и принятия решений, предоставления широкого спектра услуг, как специалистам, так и простым гражданам присутствуют во многих сферах человеческой деятельности. В областях своего внедрения ИС позволяют достичь повышения эффективности функционирования объекта, оперативности информационного обеспечения. Фактически, ИС являются составной частью жизни нашего общества, а их корректное и эффективное функционирование - жизненно необходимой составляющей для многих финансовых, социальных, государственных и бизнес областей деятельности.

Постоянное развитие приложений, наращивание мощностей, обновление, информационных систем предприятия, использование решений от различных поставщиков, реализованных на разных платформах и с разной архитектурой - все это приводит к разнородности данных, используемых внутри компании. Большое количество различных информационных систем, применяемых в разных подразделениях, приводит к неэффективному использованию одних и тех же данных. В результате информация, предоставляемая для работы компании, зачастую проходит многократное дублирование и искажается, что в свою очередь приводит к принятию не оптимальных и не оперативных решений и, как следствие, ухудшению бизнеса. Подобные проблемы достаточно давно привели компании к необходимости автоматизации бизнес-процессов и интеграции различных приложений.