

Міністерство освіти і науки України
Національний університет
«Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»

Тези

**77-ї наукової конференції професорів,
викладачів, наукових працівників,
аспірантів та студентів університету**

ТОМ 2

16 травня – 22 травня 2025 р.

*А.Т. Лобурець, к.ф.-м.н., доцент,
В.В. Мисак, М. І. Подовжній, студенти гр. 101 НГ,
Національний університет
“Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка”,
С.О. Заїка, аспірантка Інституту фізики НАН України*

ДИФУЗИЯ І ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ “ТВЕРДА ФАЗА – РІДИНА” ТА “РІДИНА – ГАЗ” У НЕПЕРЕРВНОМУ СЕРЕДОВИЩІ ТА В УМОВАХ КОНФАЙМЕНТУ

Термін “конфаймент” у нашому випадку означає просторове обмеження дифузії. Це можуть бути дуже різноманітні системи, наприклад, дифузія та адсорбція молекул рідини у капілярах або ж *поровому просторі нафтового пласта*, процеси легування металів, формування відповідних електронних переходів у напівпровідниках, гетерогенному каталізі тощо.

Метою роботи є вивчення на атомарному рівні процесів міграції речовини у поровому просторі за результатами математичного моделювання з урахуванням потенціалів латеральної взаємодії частинок з використанням динаміки Ланжевена. Така взаємодія у випадку відштовхування між частинками може проявлятися на віддальх в десятки ангстрем, що сильно урізноманітнює характер фазових переходів і ускладнює використання рівнянь стану речовини. Особливо це відчутно у випадку багатокомпонентних сумішей, якими є вуглеводні. Важливою особливістю молекул вуглеводнів є їхня геометрична будова. Це кількість атомів карбону у молекулі (довжина аліфатичного ланцюжка у нормальних алканах та наявність розгалужень у молекулах ізомерів). У випадку газової фази результат взаємодії при зіткненні двох молекул залежатиме ще й від їхньої взаємної орієнтації на момент зіткнення.

Вивчення фазових переходів у двовимірних системах пов'язане з серйозними труднощами. Тому доводиться використовувати взаємодоповнюючі методи. Приклад виконаних нами таких розрахунків представлено на Рис. 1. На графіку критичну ізотерму помічено чорним диском. На двох нижніх ізотермах пунктирами зображено лінії Максвелла, що відсікають рівні площі вгорі і внизу кожної ізотерми (петлі Маєра - Вуда) [1]. Як відомо, в однокомпонентній системі на фазовій діаграмі, побудованій в координатах температура – тиск лінії кипіння та конденсації, збігаються. У випадку двокомпонентної суміші ці лінії розщеплюються, утворюючи петлю. У таких системах (дво- і багатокомпонентних) спостерігаються ретроградні процеси (зворотна конденсація). Відмітимо, що експериментально петлі Маєра - Вуда на залежностях тиск – температура не спостерігаються. Це є особливістю кубічної залежності тиску від об'єму (густини), що впливає з рівняння

Ван дер Ваальса, яке цілком незадовільно відображає залежність рідкої фази від температури. У нафтогазовій справі рівняння Ван дер Ваальса не використовуються через його погану відповідність реальним системам. Досить вдалим для практичного застосування виявилися кубічні відносно об'єму рівняння, запропоновані Редліхом – Квонгом, Пенгом – Робінсоном та Саове – Редліхом – Квонгом. Існує досить велика кількість модифікацій названих вище рівнянь, виконаних іншими авторами, наприклад [2-5]. Недоліком модифікацій є те, що вони не є універсальними і їх потрібно адаптувати під кожну конкретну задачу. Один із прикладів порівняння результатів, одержаних за допомогою класичних рівнянь та однієї з таких модифікацій для багатокомпонентної системи, запозичений нами з роботи [2], наводимо на Рис. 2.

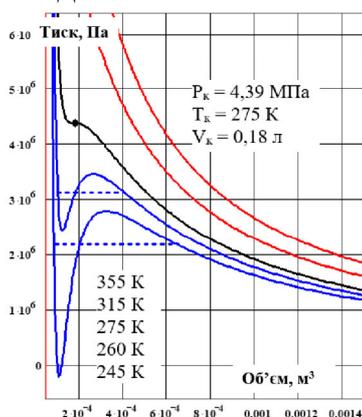


Рис. 1

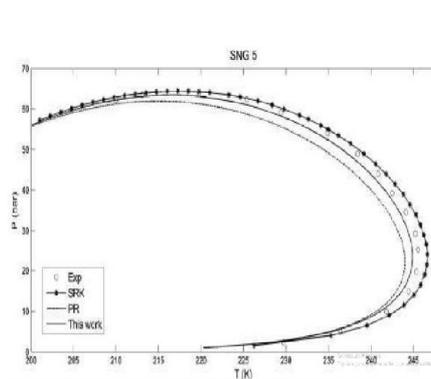


Рис. 2

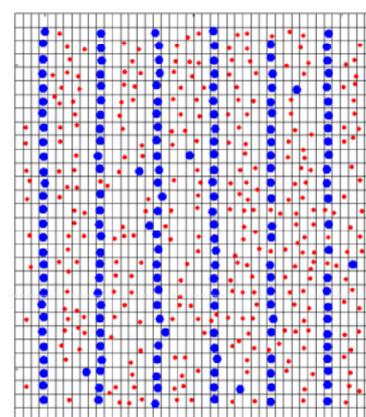


Рис. 3

Ми створили математичну модель дифузії частинок у порах, обійшовши перелічені вище труднощі, відмовившись від використання рівнянь стану. Приклад результатів, одержаних завдяки її використанню, показано на Рис.3. Великими дисками означено стінки пор. Видно отвори, які сполучають пори. Матриця даних, використаних при візуалізації результатів комп'ютерного експерименту, несе повну інформацію про фазовий стан речовини та її термодинамічні і кінетичні характеристики.

Література:

1. Лобурець А.Т., Заїка С.О. *Навчальний посібник із дисципліни «Хімічна термодинаміка»*. – Полтава: ПолтНТУ, 2019.
2. Haghtalab A. et al. *A modified Peng–Robinson equation of state for phase equilibrium calculation of liquefied, synthetic natural gas, and gas condensate mixtures // The Canadian Journal of Chemical Engineering*. – 2011. – Vol. 9999. – P. 12.
3. Zhao W. et al. *Modified Alpha Function for Peng-Robinson Cubic Equation of State // Chemical Engineering Transactions*. – 2020. – Vol. 81. – P. 547–552. – DOI: 10.3303/CET2081092.
4. McNeill J.H. et al. *Modifying the Redlich-Kwong-Soave Equation of State // Proceedings of the Oklahoma Academy of Science*. – 2018. – Vol. 98. – P. 127–138.
5. Vorobiova H. et al. *Effect detection of using a modified Redlich-Kwong-Aungier equation of state on the calculation of carbon dioxide flow in a centrifugal compressor // Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. – 2024. – Vol. 2, No. 8 (128). – P. 54–65. – DOI: <https://doi.org/10.15587/1729-4061.2024.302837>.