**Лекция 6. Учет ионизации в термодинамическом расчете**

[ Учет ионизации в термодинамическом расчете 2](#_Toc427315790)

#  Учет ионизации в термодинамическом расчете

**ИОНИЗАЦИЯ** - превращение электрически нейтральных атомных частиц (атомов, молекул) в результате превращения под влиянием разнообразных внешних агентов (рентгеновские лучи, электрический разряд, пламя и т. д.) из них одного или нескольких электронов в положительные ионы и свободные электроны.

Газовые среды в основном состоят из нейтральных молекул. В определенных условиях часть молекул и/ или атомов может ионизироваться. Есть два основных способа ионизации в газах:

* Термическая ионизация — ионизация, при которой необходимую энергию для отрыва электрона от атома дают столкновения между атомами вследствие сильного повышения температуры;
* Ионизация электрическим полем — ионизация, возникающая при превышении значения напряжения внутреннего электрического поля предельного значения, которое ведет к отрыву электронов от атомов газа.

При расчете параметров физико-химического процесса при экстремально высоких температурах выше 5000 К необходимо учитывать возможность ионизации газовой среды. При моделировании детонации, взрыва или горения в определенных условиях надо учитывать ионизацию газа, т.к. продукты могут быть слабоионизированной плазмой.

Ионизационное равновесие идеальных газов в термодинамических равновесных системах определено термодинамическими параметрами газа (*Т, Р, V*) и рассчитывается методам статистической физики. В системах, находящихся в равновесии, средние концентрации газовых частиц с течением времени не изменяются. Это значит, что скорости прямых и обратных химических реакций равны и выполняется закон действующих масс[[1]](#footnote-1). Рассматривая равновесную термическую ионизацию идеальных газов как баланс различных реакций ионизации и рекомбинации, Саха[[2]](#footnote-2) получил выражение для константы ионизационного равновесия в разреженном газе.

*Предположения:*

Количество ионов мало, т.е. нет кулоновского взаимодействия между ионами.

Не учитывается радиационная ионизация.

Не учитывается ионизация электрическим полем.

Рассмотрим сложную закрытую химическую систему.

Введем в систему уравнений для описания количества химических элементов новый элемент *EL*  – электронный.

Теперь в системе элементов: *NEL*+1. (К химическим элементам мы добавили электронный).

Добавим в систему уравнений для расчета равновесного состава, основанную на экстремизации характеристических функций термодинамики, еще одно уравнение.

*Уравнение сохранения электрического заряда:*

 , *i*=1,..., *NEL* ,

где

 – избыток или недостаток число кг атомов «химического» элемента *EL* в 1 кг исходной смеси.

 – избыток или недостаток число кг атомов «химического» элемента *EL* в 1 кмоле *j*-го газообразного вещества.

 – избыток или недостаток число кг атомов «химического» элемента *EL* в 1 кмоле *j*-го конденсированного вещества.

При недостатке электронов в ионе по сравнению с электронейтральной молекулой .

При избытке электронов в ионе по сравнению с электронейтральной молекулой .

Например, для Ar+++  значение =-3, а для О2- значение =+1.

Обычно =0, =0. Тогда =0.

Таким образом общая система уравнений для решения заданной термодинамической задачи с учетом ионизации будет иметь вид:

 или , или , или 

 или .

 *j*=1,...,*NG* , *j*=1,..., *NC* , *i*=1,..., *NEL*+1,

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. [↑](#footnote-ref-1)
2. Saha M.N. Ionisation in the solar chramosphorell Philosophycal Magazin. 1920. V.40. P.472-488. [↑](#footnote-ref-2)