

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ ХЛАДОНА R218

Барафанова Е. Ю., Нурышева М.  
Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург

научный руководитель Рыков В.А.  
Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург

При моделировании равновесных свойств индивидуальных веществ в области критических состояний, широкое распространение получили масштабные уравнения состояния, как в параметрической форме, так и в переменных плотность-температура [1, 2]. Однако рабочая область этих уравнений ограничена широкой окрестностью критической точки. Рабочая область кроссоверных уравнений состояния [3] более широкая, но и она ограничена следующими параметрами состояния: по плотности  $\rho/\rho_c \leq 2$  и по температуре  $T/T_c \leq 2$ . На основе метода псевдокритических точек в [4] предложено единое неаналитическое уравнение состояния, рабочая область которого при описании регулярной части термодинамической поверхности не уступает фундаментальным уравнениям вириального вида. При этом при расчете равновесных свойств жидкости в критической области это уравнение не уступает масштабным уравнениям состояния.

Однако в рамках подхода [4] остается еще ряд задач, которые требуют своего решения. Одна из них – это задача выбора кроссоверной функции, связывающей нерегулярную и регулярную составляющие единого неаналитического уравнений состояния. В данной работе рассмотрены различные варианты кроссоверных функций, которые апробированы на примере моделирования термической поверхности перфторпропана.

При выборе кроссоверной функции  $f(\rho, T)$  на ее структуру накладывается ряд ограничений. Первое ограничение – функция должна в области малых плотностей и давлений удовлетворять предельному переходу  $f(\rho \rightarrow 0, T) \sim \rho^3$ . Показано, что в случае выполнения данного предельного перехода можно не только обеспечить в области разряженного газа переход в уравнению идеального газа, но и количественно и качественно верно описать поведение младших вириальных коэффициентов. Второе ограничение – в окрестности критической точки должен выполняться предельный переход  $f(\rho \rightarrow \rho_c, T \rightarrow T_c) = 1$ . Тогда в околоскритической области можно обеспечить переход к масштабному уравнению состояния, например, уравнению Вайдома. Рассматривались кроссоверные функции двух классов: экспоненциального вида и в виде полиномов. В каждом случае на одном и том же массиве экспериментальной информации о равновесных свойствах перфторпропана определялись коэффициенты и параметры единого неаналитического уравнений состояния и анализировались отклонения расчетных значений плотности, давления и температуры от их экспериментальных значений.

По результатам работы сделан ряд выводов. Во-первых, наиболее обоснованной в термодинамическом отношении является кроссоверная функция  $f(\rho)$ , зависящая только от плотности. Обусловлено это тем, что при таком выборе кроссоверной функции структура единого неаналитического уравнения состояния может быть строго рассчитана на основе нового представления масштабной гипотезы [5, 6]. Использовать с этой целью феноменологическую теорию критической точки Мигдала оказалось невозможным, так как в этом случае кроссоверная функция будет зависеть только от температуры [2]. Поэтому в этом случае ни одно из выше упомянутых ограничений на функцию  $f(\rho, T)$  выполнить нельзя. Во-вторых, из рассмотренных функций  $f(\rho)$  наиболее предпочтительными оказались функции экспоненциального вида, так как они позволяют качественно верно воспроизводить не только младшие, но и старшие вириальные коэффициенты. При этом точность описания критиче-

ской области соответствует возможностям масштабным параметрическим и непараметрическим уравнениям состояния.

Работа выполнена в рамках темы НИР-ФУНД № 617028 «Ресурсосберегающие и экологически безопасные технологии углеводородной энергетики и низкотемпературных систем».

#### Литература

1. Schofield P, Litster I.D., Ho I.T. Correlation between critical coefficients and critical exponents // *Phys. Rev. Lett.* – 1969. V. 23, № 19. P. 1098–1102.
2. Kudryavtseva I.V., Rykov S.V. A Nonparametric Scaling Equation of State, Developed on the Basis of the Migdal's Phenomenological Theory and Benedek's Hypothesis // *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2016, Vol. 90, No. 7, pp. 1493–1495.
3. Rizi A., Abbaci A. A thermodynamic equation of state for the critical region of argon // *Journal of Molecular Liquids* V. 171. 2012. P. 64–70.
4. Рыков С.В., Кудрявцева И.В., Рыков В.А. Физическое обоснование метода псевдокритических точек // *Научно-технический вестник Поволжья*. 2014. № 2. С. 44–47.
5. Рыков С.В., Рыков В.А. Обобщенная модель масштабного уравнения, основанная на феноменологической теории критических явлений // *Фундаментальные исследования*. 2014. № 11-9. С. 1916-1920.
6. Kudryavtseva I.V., Rykov V.A., Rykov S.V., Ustyuzhanin E.E. A new variant of a scaling hypothesis and a fundamental equation of state based on it // *Journal of Physics: Conf. Series*. 2018. V 946. 012118.