

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ АРГОНА В ОБЛАСТИ КРИТИЧЕСКИХ СОСТОЯНИЙ

Нурышева М., Гордеева Э. А.
Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург

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

При моделировании равновесных свойств индивидуальных веществ обычно используют широкодиапазонные уравнения состояния, которые и качественно и количественно верно передают регулярную часть термодинамической поверхности. В частности, с высокой точностью передают термические и калорические свойства жидкости в области высоких давлений (вплоть до границы жидкость - твердое тело) и газ в его разряженном состоянии.

Однако в широкой окрестности критической точки эти уравнения даже качественно не описывают поведение термодинамических свойств реальной жидкости. Поэтому в последнее время предпринят ряд попыток [1-5] построить уравнение состояния в переменных плотность – температура, которое, во-первых, воспроизводит на характерных линиях термодинамической поверхности: кривой сосуществования, критической изотерме и критической изобаре, степенные законы в соответствии с требованиями масштабной теории критической точки. Во-вторых, удовлетворяет гипотезе об одинаковом характере поведения в асимптотической окрестности критической точки коэффициента изотермической сжимаемости $K_T \sim |\tau|^{-\gamma}$, изохорной теплоемкости $C_V \sim |\tau|^{-\alpha}$ и изобарной теплоемкости $C_P \sim |\tau|^{-\gamma}$ на критической и некритических изохорах. Здесь γ – критический индекс K_T , α – критический индекс C_V , $\tau = T/T_c - 1$, T_c – критическая температура.

В данной работе проведен численный анализ уравнений, предложенных в работах [1-6], на примере описания равновесных свойств аргона в области сильно развитых флуктуаций плотности. Показано, что масштабное уравнение, рассмотренное в работе [1], не удовлетворяет гипотезе об одинаковом характере поведения термодинамических функций, имеющих особенность в критической точке, на критической и некритических изохорах. Это существенно ограничивает рабочую область данного масштабного уравнения при описании области метастабильных состояний. Во-вторых, показано, что масштабная функция химического потенциала $h(x)$, используемая в работе [1], является частным случаем масштабной функции $h(x)$, которая предложена в работе [4] и подобно исследована в работе [2]. При этом на критические индексы накладывается дополнительное условие: $\gamma - 2\beta = 0$, где β – критический индекс линии насыщения. Нами показано, что в этом случае из равенств Гриффитса следует, что $\delta = 3$, где δ – критический индекс критической изотермы. Моделирование термической поверхности аргона проводилось на основе программы, разработанной на Фортране, с последующим анализом полученных результатов в пакете MathCad.

Полученные результаты позволили сделать ряд выводов. Во-первых, сконструированная и используемая в работе [1] функция $h(x)$ может быть физически обоснована только при целочисленных значениях критического индекса δ . При этом на основе уравнения состояния, предложенного в работе [1], не удастся даже качественно верно описать поведение термической поверхности в окрестности критической изотермы $\tau = 0$. Во-вторых, масштабное уравнение состояния аргона, разработанное на основе феноменологической теории А.А. Мигдала и метода псевдокритических точек [2, 4], по своим расчетным характеристикам не уступает линейной модели Скофилда, но в отличие от последней качественно верно описывает область метастабильных состояний. В-третьих, метод псевдокритических точек, использованный в данной работе, может быть рекомендован для построения фундаментальных уравне-

ний состояния индивидуальных веществ, удовлетворяющих масштабной гипотезе критической точки [6].

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

Литература

1. Безверхий П.П., Мартынец В.Г., Матизен Э.В. Непараметрическое масштабное уравнение состояния для флюидов с учетом асимметрии // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2009. Т. 136. № 2. С. 311-317.
2. Rykov S. V., Kudryavtseva I. V., Rykov V. A., Ustyuzhanin E. E. Scaling Migdal model and a nonparametric equation of state for argon // Journal of Physics: Conference Series. 2019 J. Phys.: Conf. Ser. V.1147 012018
3. Рыков С.В., Рыков В.А. Обобщенная модель масштабного уравнения, основанная на феноменологической теории критических явлений // Фундаментальные исследования. 2014. № 11-9. С. 1916-1920.
4. 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.
5. Рыков С.В. Фундаментальное уравнение состояния, учитывающее асимметрию жидкости // Научно-технический вестник Поволжья. 2014. № 1. С. 33–36.
6. Rykov V. A., Rykov S. V., Kudryavtseva I. V., Sverdlov A. V. Method of constructing a fundamental equation of state based on a scaling hypothesis // Journal of Physics: Conf. Series. 2017. V 891. 012334.