

МОДЕЛЬ ЭФФЕКТИВНОГО ДВУХКОМПОНЕНТНОГО ФЛЮИДА ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ СМЕСЕЙ*

Ю. А. Богданова¹, С. А. Губин², А. А. Аникеев³

Abstract: Представлена новая модель эффективного двухкомпонентного флюида, основанная на разработанном уравнении состояния (УрС) двухкомпонентных смесей. В этой модели предполагается разделение всех компонентов смеси на две группы с близкими по значению энергетическими потенциальными параметрами. Таким образом, многокомпонентная смесь представляется в виде эффективного двухкомпонентного флюида. Эта методика позволяет избежать ошибку, вносимую в расчет термодинамических параметров многокомпонентной смеси со значительно отличающимися энергетическими потенциальными параметрами компонентов моделью эффективного однокомпонентного флюида. Проведены расчеты трехкомпонентных смесей $\text{NH}_3\text{--H}_2\text{--N}_2$ различного состава. Показано, что результаты расчетов по предложенной методике лучше согласуются с экспериментальными данными, чем аналогичные расчеты, основанные на использовании модели эффективного однокомпонентного флюида vdWf.

Ключевые слова: теория возмущений; модель эффективного однокомпонентного флюида; межмолекулярный потенциал взаимодействия Exp-6; термодинамические параметры состояния

Литература

1. Kang H. S., Lee C. S., Ree T., Ree F. H. A perturbation theory of classical equilibrium fluids // J. Chem. Phys., 1985. Vol. 82. No. 1. P. 414–423. doi: 10.1063/1.448762.
2. Byers-Brown W., Horton T. V. Hard-sphere perturbation theory for classical fluids to high densities // Mol. Phys., 1988. Vol. 63. No. 1. P. 125–138. doi: 10.1080/00268978800100101.
3. Ross M. A high-density fluid-perturbation theory based on an inverse 12th-power hard-sphere reference system // J. Chem. Phys., 1979. Vol. 71. No. 4. P. 1567–1571. doi: 10.1063/1.438501.
4. Ree F. H. Simple mixing rule for mixtures with Exp-6 interactions // J. Chem. Phys., 1983. Vol. 78. No. 1. P. 409–415. doi: 10.1063/1.444517.
5. Богданова Ю. А., Аникеев А. А., Губин С. А., Викторов С. Б. Границы применимости модели эффективного однокомпонентного флюида // Ж. физ. химии, 2015. Т. 89. № 5 С. 196–201.

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 16-19-00188).

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», bogdanova.youlia@bk.ru

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», sagubin@mephi.ru

³Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», anikeev_aa@mail.ru

6. Богданова Ю. А., Губин С. А., Викторов С. Б., Губина Т. В. Теоретическая модель уравнения состояния двухкомпонентного флюида с потенциалом $\epsilon_{\text{XP-6}}$ на основе теории возмущений // Теплофизика высоких температур, 2015. Т. 53. № 4. С. 1–11.
7. Ree F. H. Postdetonation behavior of condensed high explosives by modern methods of statistical mechanics // 7th Symposium (International) on Detonation. — Annapolis, MD, USA, 1981. P. 646–661.
8. Ree F. H. Molecular interaction of dense water at high temperature // J. Chem. Phys., 1982. Vol. 76. No. 12. P. 6287–6302. doi: 10.1063/1.443032.
9. Богданова Ю. А., Аникеев А. А., Губин С. А., Викторов С. Б., Маклашова И. В. Применение теоретической модели уравнений состояния для расчета термодинамических параметров двухкомпонентной смеси $\text{NH}_3\text{--H}_2$ с использованием модифицированной формы потенциала взаимодействия XP-6 // Хим. физика, 2015. Т. 34. № 5. С. 1–8.
10. Victorov S. B., Gubin S. A. A new accurate equation of state for fluid detonation products based on an improved version of the KLRR perturbation theory // 13th Detonation Symposium (International) Proceedings. — Norfolk, VA, USA: Los Alamos National Laboratory, 2006. P. 13.1118–13.1127.
11. Reed T. M., Gubbins K. E. Applied statistical mechanics. — New York, NY, USA: McGraw-Hill, 1973. 132 p.
12. Bogdanova Yu. A., Gubin S. A., Anikeev A. A., Victorov S. B. Dissociation of shock-compressed liquid hydrogen and deuterium // Physics Procedia, 2015. Vol. 72. P. 329–332.
13. Казарновский Я. С., Симонов Г. В., Аристов Г. Е. Сжимаемость смесей азот–водород–аммиак при высоких давлениях и температурах // Ж. физ. химии, 1940. Т. 14. № 5-6. С. 774.

Поступила в редакцию 18.12.15