

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛОВ*

Ю. А. Богданова¹, С. А. Губин², И. В. Маклашова³, А. В. Кудинов⁴, И. Н. Мельников⁵

Аннотация: Продемонстрировано применение уравнения состояния (УрС), основанного на теории возмущений, для расчета свойств конденсированных алюминия и меди при изотермическом сжатии. Для описания межмолекулярного взаимодействия в металлах использовался парный потенциал Морзе. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными и расчетами на основе описанных в литературе эмпирического и аналитического уравнений состояния. Таким образом, разработанное на основе теории возмущений уравнение состояния с использованием соответствующего потенциала межмолекулярного взаимодействия является надежным универсальным инструментом для расчета термодинамических свойств как газообразных (флюидных) систем, так и конденсированных сред и позволяет анализировать изменения атомной структуры вещества.

Ключевые слова: теория возмущений; межмолекулярный потенциал взаимодействия Морзе; термодинамические параметры состояния; радиальная функция распределения; изотермическое сжатие

Литература

1. Губин С. А., Маклашова И. В., Селезнев А. А. и др. Молекулярно-динамическое моделирование и визуализация плавления кристалла алюминия в ударной волне // Научная визуализация, 2014. Т. 6. № 5. С. 14–23.
2. Gubin S. A., Maklashova I. V., Seleznev A. A., Kozlova S. A. Molecular-dynamics study melting aluminum at high pressures // Physics Procedia, 2015. Vol. 72. P. 338–341.
3. 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.
4. 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.
5. 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.
6. Викторов С. Б., Губин С. А. Термодинамическое моделирование сложных химических систем при высоких давлениях и температурах. — М.: НИЯУ МИФИ, 2016. 128 с.
7. Weeks J. D., Chandler D., Andersen H. C. Role of repulsive forces in determining the equilibrium structure of simple liquids // J. Chem. Phys., 1971. Vol. 54. No. 12. P. 5237–5247.
8. Weeks J. D., Chandler D., Andersen H. C. Relationship between the hard-sphere fluid and fluids with realistic repulsive forces // Phys. Rev. A, 1971. Vol. 4. No. 4. P. 1597–1607.
9. Weeks J. D., Chandler D., Andersen H. C. Perturbation theory of the thermodynamic properties of simple liquids // J. Chem. Phys., 1971. Vol. 55. No. 11. P. 5422–5423.
10. Bratkovsky A. M., Vaks V. G., Trefilov A. V. On the accuracy of the liquid theory approximate methods for the description of liquid metal thermodynamics // J. Phys. F Metal Phys., 1983. Vol. 13. No. 12. P. 2517–2542.
11. Kahl G., Hafner J. A blip-function calculation of the structure of liquid binary alloys // J. Phys. F Metal Phys., 1985. Vol. 15. No. 8. P. 1627–1638.
12. Ng D. A., Silbert M. WCA studies of the partial structure factors of liquid binary alloys: Application to Al–Mg // J. Phys. Chem., 1988. Vol. 156. No. 2. P. 663–669.
13. Дубинин Н. Э., Юрьев А. А., Ватолин Н. А. Применение метода WCA для расчета термодинамических свойств двухкомпонентных металлических расплавов // Докл. РАН, 1993. Т. 332. № 3. С. 325–327.
14. Dubinin N. E., Yuryev A. A., Vatin N. A. Straightforward calculation of the WCA entropy and internal energy for liquid metals // Thermochimica Acta, 2011. Vol. 518. No. 1-2. P. 9–12.
15. Victorov S. B., El-Rabii H., Gubin S. A., Maklashova I. V., Bogdanova Yu. A. An accurate equation-of-state model for thermodynamic calculations of chemically reactive carbon-containing systems // J. Energ. Mater., 2010. Vol. 28. Suppl. P. 35–49.
16. Богданова Ю. А., Викторов С. Б., Губин С. А., Любимов А. В., Шаргатов В. А. Применение теории возмущения для смеси атомов и молекул водорода с потенциалом межмолекулярного взаимодействия Морзе // Известия вузов. Физика, 2010. Т. 53. № 3. С. 30–42.

* 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», gubin_sa@mail.ru

³Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», ivmaklashova@mephi.ru

⁴Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», swen379@gmail.com

⁵Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», l2ewt@mail.ru

17. Богданова Ю. А., Губин С. А., Викторов С. Б., Анисеев А. А. Применение теоретической модели уравнения состояния для расчета ударных адиабат N_2, O_2, CO_2 // Известия вузов. Физика, 2016. Т. 59. № 2. С. 30–35.
18. Selezenev A. A., Aleynikov A. Yu., Gantchuk N. S., et al. Sage MD: Molecular-dynamic software package to study properties of materials with different models for interatomic interactions // Comput. Mater. Sci., 2003. Vol. 28. No. 2. P. 107–124.
19. Throop G. J., Bearman R. J. Radial distribution functions for mixtures of hard spheres // J. Chem. Phys., 1965. Vol. 42. P. 2838–2843.
20. Leonard P. J., Henderson D., Barker J. A. Calculation of the radial distribution function of hard-sphere mixtures in the Percus–Yevick approximation // Molec. Phys., 1971. Vol. 21. No. 1. P. 107–111.
21. Lebowitz J. L. Exact solution of generalized Percus–Yevick equation for a mixture of hard sphere // Phys. Rev., 1964. Vol. 133. P. A895.
22. Богданова Ю. А., Викторов С. Б., Губин С. А., Любимов А. В., Шаргатов В. А. Расчет функций распределения молекул двухкомпонентного твердосферного флюида // Известия вузов. Физика, 2010. Т. 53. № 2. С. 10–17.
23. Smith W. R., Henderson D. Analytical representation of the Percus–Yevick hard-sphere radial distribution function // Molec. Phys., 1970. Vol. 19. No. 3. P. 411–415.
24. Waseda Y., Suzuki K. Characteristics of soft core in pair potential and static structure in liquid metals // Science Reports of the Research Institutes, Tohoku University. Ser. A, Physics, chemistry and metallurgy, 1972. Vol. 24. P. 139–184.
25. Waseda Y., Tamaki S. The structures of 3d-transition metals in the liquid state // Philosophical Magazine, 1975. Vol. 32. No. 2. P. 273–281.
26. Богданова Ю. А., Губин С. А., Викторов С. Б., Губина Т. В. Теоретическая модель уравнения состояния двухкомпонентного флюида с потенциалом ехр-6 на основе теории возмущений // Теплофизика высоких температур, 2015. Т. 53. № 4. С. 1–11.
27. Губин С. А., Маклашова И. В., Мельникова К. С. Теплофизические и механические свойства композита из алюминия и оксида алюминия на основе модели аддитивного смешения // Горение и взрыв, 2012. Т. 5. С. 297–301.
28. Murnagan F. D. The compressibility of media under extreme pressures // Proc. Natl. Acad. Sci., 1944. Vol. 30. No. 9. P. 244–248.
29. Vaboya S. N., Kennedy G. C. Compressibility of 18 metals to 45 kbar // J. Physics Chemistry Solids, 1970. Vol. 31. No. 10. P. 2329–2345.
30. Mao H. K., Bell P. M. Specific volume measurement of Cu, Mo, Pd and Ag and calibration of the ruby R1 fluorescence pressure gauge from 0.06 to 1 Mbar // J. Appl. Phys., 1978. Vol. 49. No. 6. P. 3276–3283.
31. Syassen K., Holzappel W. B. Isothermal compression of Al and Ag to 120 kbar // J. Appl. Phys., 1978. Vol. 49. P. 4427–4430.

Поступила в редакцию 29.12.16