

ВЕРСИИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ И ВЫБОР ОПТИМАЛЬНОЙ ИЗ НИХ ДЛЯ РАСЧЕТОВ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ*

Ю. А. Богданова¹, И. В. Маклашова², Т. Д. Третьякова³

Аннотация: Рассмотрены основные положения теории возмущений для расчета термодинамических свойств однокомпонентных систем. Исследованы версии различных авторов для выбора наиболее точной. Верификация проведена путем сравнения результатов расчетов термодинамических параметров модельной однокомпонентной системы с потенциалом взаимодействия Exp-6, изотермического сжатия гелия с потенциалом Леннарда-Джонса и параметров состояния жидкого алюминия с потенциалом Морзе с данными моделирования Монте Карло (МК) и экспериментальными данными.

Ключевые слова: теория возмущений; межмолекулярный потенциал взаимодействия; уравнение состояния; флюиды; изотермическое сжатие

DOI: 10.30826/CE19120117

Литература

1. *Henderson D., Barker J. A.* Perturbation theory and equation of state for fluids. II. A successful theory of liquids // *J. Chem. Phys.*, 1967. Vol. 47. No. 11. P. 4714–4721. doi: 10.1063/1.1701689.
2. *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. P. 5237–5247. doi: 10.1063/1.1674820.
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. doi: 10.1063/1.448762.
4. *Carnahan N. F., Starling K. E.* Equation of state for nonattracting rigid spheres // *J. Chem. Phys.*, 1969. Vol. 51. P. 635–636. doi: 10.1063/1.1672048.
5. *Leonard P. J., Henderson D., Barker J. A.* Perturbation theory and liquid mixtures // *T. Faraday Soc.*, 1970. Vol. 66. P. 2439–2452. doi: 10.1039/TF9706602439.
6. *Rogers B. L., Prausnitz J. M.* Calculation of high-pressure vapour–liquid equilibria with a perturbed hard-sphere equation of state // *T. Faraday Soc.*, 1971. Vol. 67. P. 3474–3483. doi: 10.1039/TF9716703474.
7. *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. doi: 10.1103/PhysRevA.4.1597.
8. *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. doi: 10.1063/1.1675700.
9. *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. Met. Phys.*, 1983. Vol. 13. P. 2517–2542. doi: 10.1103/PhysRevB.96.024203.
10. *Kahl G., Hafner J.* A blip-function calculation of the structure of liquid binary alloys // *J. Phys. F*, 1985. Vol. 15. No. 8. P. 1627–1638. doi: 10.1088/0305-4608/15/8/003.
11. *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. P. 663–669. doi: 10.1524/zpch.1988.156.Part_2.663.
12. *Дубинин Н. Э., Юрьев А. А., Ватолин Н. А.* Применение метода WCA для расчета термодинамических свойств двухкомпонентных металлических расплавов // *Докл. Акад. наук*, 1993. Т. 332. № 3. С. 325–327.
13. *Dubin N. E., Yuryev A. A., Vatolin N. A.* Straightforward calculation of the WCA entropy and internal energy for liquid metals // *Thermochim. Acta*, 2011. Vol. 518. Iss. 1–2. P. 9–12. doi: 10.1016/j.tca.2011.01.041.
14. *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.
15. *Варгафтик Н. Б.* Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. — М.: Наука, 1972. 720 с.
16. *Циклус Д. С.* Плотные газы. — М.: Химия, 1977. 168 с.
17. *Fried L. E., Howard W. M.* An accurate equation of state for the exponential-6 fluid applied to dense supercriti-

*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», ivmaklashova@mephi.ru

³Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», tutimaggie1@gmail.com

- cal nitrogen // *J. Chem. Phys.*, 1998. Vol. 109. No. 17. P. 7338–7348. doi: 10.1063/1.476520.
18. *Selezenev A. A., Aleynikov A. Yu., Gantchuk N. S., et al.* SageMD: Molecular-dynamic software package to study properties of materials with different models for interatomic interactions // *Comp. Mater. Sci.*, 2003. Vol. 28. P. 107–124. doi: 10.1016/S0927-0256(03)00101-0.
19. *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. № 5. С. 297–301.
20. *Murnagan F. D.* The compressibility of media under extreme pressures // *P. Natl. Acad. Sci. USA*, 1944. Vol. 30. No. 9. P. 244–248. doi: 10.1073/pnas.30.9.244.
21. *Vaboya S. N., Kennedy G. C.* Compressibility of 18 metals to 45 kbar // *J. Phys. Chem. Solids*, 1970. Vol. 31. No. 10. P. 2329–2345. doi: 10.1016/0022-3697(70)90247-7.
22. *Syassen K., Holzappel W. B.* Isothermal compression of Al and Ag to 120 kbar // *J. Appl. Phys.*, 1978. Vol. 49. P. 4427–4430. doi: 10.1063/1.325497.
23. *Litygina L. M., Malyushskaya Z. V., Pashkina T. A., Kambalkina S. S.* Isothermal compression of Al to 10 GPa at 673 K // *Phys. Status Solidi A*, 1982. Vol. 69. No. 2. P. K147–K150. doi: 10.1002/pssa.2210690247.
24. *Dewaele A., Loubeyre P., Mezouar M.* Equations of state of six metals above 94 GPa // *Phys. Rev. B*, 2004. Vol. 70. P. 094112-1–094112-8. doi: 10.1103/PhysRevB.70.094112.

Поступила в редакцию 25.12.18