

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ФЛЮИДА, ПОСТРОЕННОЕ С ПОМОЩЬЮ ФУНКЦИИ $h(r_{12})$ ОРНШТЕЙНА–ЦЕРНИКЕ

Мартынов Г.А.¹, Рыков В.А.², Устюжанин Е.Е.^{3*}, Реутов Б.Ф.³

¹ИФХ РАН, Москва, ²ГАХПТ, Москва, ³МЭИ, Москва

*ustmei@itf.mpei.ac.ru

Для разработки уравнения состояния флюида (УСФ) авторы привлекли локальную статистику, которая анализирует состояние вещества внутри микроскопически малой корреляционной сферы. Была разработана методика, которая оперирует общей корреляционной функцией $h(r_{12})$ в форме уравнения Орнштейна–Цернике (ОЦ), потенциалом парного взаимодействия частиц $\Phi(r)$, термическим потенциалом $\omega(r)$ и двухчастичной функцией распределения $G(r)$. Методика описала переход $h(r_{12}) \Rightarrow h(r)$, то есть был найден явный вид корреляционной функции $h(r)$, при этом были подобраны аналитические выражения для функций $\Phi(r)$, $\omega(r)$ и $G(r)$. В этом переходе не было использовано сторонней информации в форме гипотез или аналогий, то есть модель флюида строилась из первых принципов.

Граничный вариант $h(r)_{AS}$ был получен для заданной $(\Delta\rho = \rho/\rho_c - 1 \leq \Delta\rho_{AS}, \Delta\theta = (\theta - \theta_c)/\theta_c > 0)$ окрестности критической точки. Были разработаны методика перехода от $h(r)_{AS}$ к термодинамическим свойствам и аналитические выражения для изотермической сжимаемости, давления P и других свойств. Давление получило вид суперпозиции регулярной и сингулярной частей

$$P(\rho, \theta) = P^{(rg)}(\rho, \theta) + \pi_0 \Delta\rho^\delta + k_0 \Delta\rho \Delta\theta^\gamma, \quad (1)$$

где δ и γ — критические показатели, π_0 и k_0 — амплитуды.

Оценка аппроксимационных возможностей УСФ была осуществлена (Матизен Э.В., 2002) на массиве опытных (P, ρ, T) данных гелия-4. УСФ (1) отражает сингулярность избыточного давления на изохоре и изотерме (δ и γ не являются целочисленными). Расчетные значения давления (1) удовлетворительно (в пределах 0.1–0.2%) согласуются с исходными опытными данными. Анализ показал, что уравнение (1) оказывается работоспособным в области давлений $P = 0.228$ –4.0 МПа и в интервале температур $T = 5.5$ –20 К.

Осуществлено методическое сопоставление сингулярной части УСФ (1) и давления, заданного в виде $P^{cr} = f(\Delta\rho, (\Delta\rho/\Delta\theta)^\eta)$ и описанного в [1].

Работа выполнена при поддержке РФФИ.

1. Рыков В.А., Реутов Б.Ф., Устюжанин Е.Е. // Proc. of 5th World Conference on Experimental Heat Transfer and Thermodynamics. Thessalonoci, Greece, 24–28 September, 2001. V.2. P.1279–1285.