

Расчет давления насыщенных паров алюминия и железа от тройной до критической точки

В.С. Воробьев

Объединенный институт высоких температур РАН

Предложен новый метод расчета давления насыщенных паров вдоль линии равновесия жидкость-пар. Он основан на глобальном изоморфизме между термодинамикой решеточных модельных систем (модель Изинга) и термодинамикой реальных веществ [1, 2]. Для решеточных моделей (РМ) симметричный вид кривой фазового равновесия является отражением факта равноправия пары частица-дырка (спин-антиспин). Задавая определенный вид кривой фазового равновесия решеточной модели с двумя произвольными параметрами, с помощью специального преобразования термодинамических переменных (плотности и температуры) [1, 2], можно построить бинодали и факторы сжимаемости реальных веществ. При этом критическая точка (КТ) и линия для единичного фактора сжимаемости (ЕФС) РМ переходят в соответствующую точку и линию реальной системы. Характер преобразования зависит от значения термодинамических величин в КТ и параметров, определяющих положение линии ЕФС. В отличие от ранее известных методов построения давления насыщения на основе законов подобия данный метод обеспечивает экспоненциальное убывание давления пара с уменьшением температуры, что позволяет охватить широкий температурный диапазон (от критической до тройной точки). Метод был сопоставлен с численными результатами для модельных систем, описываемых потенциалом Леннард-Джонса и потенциалом прямоугольной ямы, и с экспериментальными данными для аргона, ртути и цезия. Во всех этих случаях модуль среднего отклонения расчетных данных и результатов численного или натурального эксперимента не превосходил 3.4%. Затем метод был применен для металлов алюминия и железа, для которых измерено давление насыщенных паров лишь при низких температурах, а параметры критической точки носят предсказательный характер. Построены зависимости давления насыщения от температуры для критических значений, предлагаемых различными авторами, и найдено среднее отклонение от экспериментальных данных на низкотемпературном участке бинодали, что позволяет сделать определенные выводы о корректности того или иного выбора параметров критической точки.

1. Kulinskii, V. L. J. Phys. Chem. B. 2010, 114, 2852.
2. Apfelbaum E. M., Vorob'ev V. S. J. Phys. Chem. B 2010, 114, 9820–9826