

УДК 536.7

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ АРГОНА В МОДЕЛИ ПРОСТОЙ ЖИДКОСТИ С ТРЕХПАРАМЕТРИЧЕСКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

И.К. Локтионов

Донецкий национальный технический университет, г. Донецк

Равновесные термодинамические свойства системы частиц, моделирующей простую жидкость, исследованы на основе статистического подхода. Задача нахождения трёх параметров потенциала взаимодействия сводится к поиску одного безразмерного параметра, оптимальное значение которого найдено с учетом координат критической точки и использовано для расчета свойств в надкритической области и на линии насыщения. Полученные результаты сопоставляются с экспериментальными данными.

Ключевые слова: потенциал взаимодействия, критическая точка, уравнение состояния, теплоемкость, скорость звука.

Исследование равновесных теплофизических свойств вещества может быть выполнено в рамках термодинамического или статистического подходов. Статистический подход составляет группа методов, для применения которых необходимо задание потенциала $v(r)$ межчастичного взаимодействия:

- методы молекулярной динамики и Монте-Карло, позволяющие производить расчеты свойств систем с ограниченным числом частиц и представлять результаты в виде таблиц или графиков [1];
- метод интегральных уравнений, который сводится к поиску радиальной функции распределения, используемой, в частности, для построения уравнения состояния [2–4];
- метод Гиббса, связанный с вычислением или оценкой конфигурационного интеграла [5;6].

Привлекательность двух последних методов объясняется возможностью получения удобных для анализа аналитических зависимостей свойств модельной системы, как от параметров состояния, так и от микроскопических характеристик, составляющих её частиц.

В настоящей работе реализуется сценарий расчета равновесных термодинамических свойств простой жидкости, основанный на методе Гиббса. Роль модели простой жидкости выполняет система N одинаковых частиц, размещенных в объеме V и взаимодействующих

посредством парного центрального потенциала $v(|\vec{r}|)$, который может быть представлен интегралом Фурье

$$v(|\vec{r}|) = \int_{\Omega} \tilde{v}(k) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) d^3\vec{k}, \quad (1)$$

где $\tilde{v}(k)$ —фурье-образ потенциала, Ω — область определения $\tilde{v}(k)$.

Конфигурационный интеграл для указанной системы в [6] приведен к интегралу типа Лапласа и вычислен в квадратичном приближении метода перевала, в результате получено следующее выражение для свободной энергии Гельмгольца:

$$F = F_{id} + \frac{n^2 V}{2} \tilde{v}(0) + \frac{V}{2\beta} \int_{\Omega} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} [\ln(1 + n\beta\tilde{v}(k)) - n\beta\tilde{v}(k)], \quad (2)$$

где обозначено $\beta = 1/k_B T$ – обратная температура, k_B – постоянная Больцмана, $n = N/V$ – плотность числа частиц, $\tilde{v}_0 = \tilde{v}(0)$ – значение фурье-образа при $k = 0$, $F_{id} = Nk_B T \ln(n \cdot \lambda^3)$, $\lambda = h/\sqrt{2\pi m_0 k_B T}$ – тепловая длина волны де Бройля, h – постоянная Планка.

Интеграл в правой части (2) зависит не только от n и β , но и от параметров потенциала взаимодействия.

Одним из потенциалов, которые могут быть использованы в рамках приближения (2), является трехпараметрический потенциал

$$v(r) = \frac{\exp(-ar)}{4\pi} \left(\frac{A}{r} - \frac{B}{2a} \right) \quad (3)$$

с фурье-образом

$$\tilde{v}(k) = \frac{A}{k^2 + a^2} - \frac{B}{(k^2 + a^2)^2}. \quad (4)$$

Если потенциал $v(r)$ обеспечивает устойчивость системы (т.е. не приводит к её коллапсу), то его фурье-образ удовлетворяет неравенству $\tilde{v}(k) > 0$ [7; 8]. Для потенциала (3) последнее неравенство эквивалентно условию

$$0 \leq \varepsilon < 1, \quad (5)$$

где $\varepsilon = B/Aa^2$ — безразмерная величина ($A > 0, B \geq 0, a > 0$).

Заметим, что при выполнении условия (5) потенциал (3) сохраняет основные черты «реалистичных» потенциалов, а именно,

- отталкивание на малых расстояниях;
- притяжение на больших;
- существование минимума на промежуточных расстояниях.

Задача состоит в том, чтобы описать некоторую совокупность измеряемых свойств с наименьшими погрешностями в рамках приближения (2) в сочетании с потенциалом (3).

Расчет равновесных свойств модельной системы выполняется стандартными методами термодинамики из свободной энергии (2), выражение для которой после интегрирования с фурье-образом (4) имеет вид

$$F = F_{id} + \frac{n^2V}{2} wd + \frac{nV}{8\pi} Aa \left(1 + \frac{\varepsilon}{2}\right) + \frac{Va^3}{12\pi\beta} \left[2 - (Q^3 - 3qQ)\right], \quad (6)$$

где $Q = Q(x) = \sqrt{2 + x + 2q(x)}$, $q = q(x) = \sqrt{1 + xd}$, $x = n\beta w$, $w = A/a^2$, $d = 1 - \varepsilon$.

Из выражения (6) следует, что все определяемые с его помощью термодинамические функции оказываются зависящими от параметров потенциала. Поэтому с целью нахождения оптимальных значений a, A, B результаты расчетов свойств модельной системы нужно сравнивать с соответствующими данными измерений и выбрать такую совокупность параметров, при которой наблюдается наименьшее отклонение теоретических значений от экспериментальных. Практическая реализация этой программы действий в общем случае связана с решением системы нелинейных уравнений, получаемых на основе соотношений между измеряемыми свойствами и искомыми величинами. Заметим, что таких систем может быть несколько (в зависимости от набора используемых свойств). Но для каждой из них возникает вопрос о совместности и вопрос о начальных приближениях a, A, B , необходимых для применения одного из численных методов. Ответы на эти вопросы пока не найдены.

Покажем, что в случае модельного потенциала (3) задача нахождения трёх параметров a, A, B сводится к поиску только одного безразмерного параметра $\varepsilon = B/Aa^2$. Для этого найдем уравнение состояния (УС).

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \frac{n}{\beta} + \frac{n^2w}{2}d - \frac{a^3}{12\pi\beta}J(x), \quad (7)$$

здесь $J(x) = 2 - (Q^3 - 3qQ) - 3x(qQ_1 + Qq_1 - Q^2Q_1)$, функции $q_1 = q_1(x) = d/2q$, $Q_1 = Q_1(x) = (1 + 2q_1)/2Q$ связаны с производными $q(x), Q(x)$ по n .

Обычная процедура определения параметров критической точки (КТ) состоит в решении системы уравнений

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial P}{\partial n}\right)_c = \frac{1}{\beta_c} \left(q^2(x_c) + \frac{a^3 x_c^2}{12\pi n_c} J_1(x_c) \right) = 0, \\ \left(\frac{\partial^2 P}{\partial n^2}\right)_c = w \left(d + \frac{a^3 x_c}{12\pi n_c} J_1(x_c) + \frac{a^3 x_c^2}{12\pi n_c} J_2(x_c) \right) = 0, \end{cases} \quad (8)$$

где $J_1(x) = 3(qQ_2 + 2q_1Q_1 + Qq_2 - (2QQ_1^2 + Q^2Q_2))$,

$J_2(x) = 3(qQ_3 + 3q_1Q_2 + 3q_2Q_1 + Qq_3 - (2Q_1^3 + 6QQ_1Q_2 + Q^2Q_3))$,

функции $q_2 = q_2(x) = -\frac{d^2}{4q^3}$, $Q_2 = Q_2(x) = \frac{q_2 - Q_1^2}{Q}$, $q_3 = q_3(x) = \frac{3d^3}{8q^5}$,

$Q_3 = Q_3(x) = \frac{q_3 - 3Q_1Q_2}{Q}$ связаны со второй и третьей производными от

$q(x)$, $Q(x)$ по n . Здесь и всюду ниже индекс «с» относится к КТ.

Выразим из первого уравнения системы (8)

$$a^3 = -\frac{12\pi n_c q_c^2}{x_c^2 J_1(x_c)}. \quad (9)$$

Подставляя (9) во второе уравнение (8), получим нелинейное уравнение

$$J_1(x_c, \varepsilon) + x_c q^2(x_c, \varepsilon) J_2(x_c, \varepsilon) = 0, \quad (10)$$

относительно безразмерной величины $x_c = x_c(\varepsilon) = n_c \beta_c w$.

Анализ результатов численного решения уравнения (10) при $\varepsilon \rightarrow 0+0$ и при $\varepsilon \rightarrow 1-0$ показывает, что для стыковки решений $x_c(\varepsilon)$ не исключено построение аппроксимант различной точности. Например, точность выражения $x_c = (2\varepsilon^4 + 3\varepsilon^3 - 10)/5(\varepsilon - 1)$ при $\varepsilon \in [0; 1)$ — не более 1.8% относительно численных результатов.

Величины x_c и a^3 используем для представления УС (7) в приведенных координатах $\Pi = P/P_c$, $\tau = T/T_c$, $\omega = n/n_c$:

$$\Pi(\omega, \tau) = \frac{1}{Z_c} \left[\omega\tau + \frac{x_c d \omega^2}{2} + \tau \frac{q_c^2}{x_c^2 J_1(x_c)} J(\omega, \tau) \right], \quad (11)$$

где $J(\omega, \tau) = 2 - (Q^3 - 3qQ) - 3f(\omega, \tau)(qQ_1 + Qq_1 - Q^2Q_1)$,

$Q(\omega, \tau) = \sqrt{2 + f(\omega, \tau) + 2q}$, $f(\omega, \tau) = x_c \omega / \tau$, $q(\omega, \tau) = \sqrt{1 + f(\omega, \tau)d}$,

$q_1(\omega, \tau) = \frac{d}{2q}$, $Q_1(\omega, \tau) = \frac{1 + 2q_1}{2Q}$, $Z_c = \frac{P_c V_c}{RT_c} = 1 + \frac{x_c d^2}{2} + \left(\frac{q_c}{x_c}\right)^2 \frac{J(x_c)}{J_1(x_c)}$.

Вспомогательные функции $q(\omega, \tau)$, $q_1(\omega, \tau)$, $Q(\omega, \tau)$, $Q_1(\omega, \tau)$ получены из соответствующих функций, введенных после формул (7) и (8) с помощью замены $x = x_c \omega / \tau$.

Из (11) следует, что в УС зависимость от параметров потенциала сохраняется только в виде зависимости от одного варьируемого безразмерного параметра $\varepsilon = B/Aa^2$. Таким образом, задача

нахождения трех оптимальных значений a, A, B сводится к поиску одного значения ε .

Приведём выражения для термодинамических функций, вытекающие из УС (11) и используемые далее для построения температурных зависимостей в надкритической области ($P > P_c$) и на линии равновесия фаз:

— молярная изобарная теплоемкость

$$C_p(\tau, \omega) = C_v(\tau, \omega) + Z_c R \frac{\tau}{\omega^2} \frac{(\partial \Pi / \partial \tau)_\omega^2}{(\partial \Pi / \partial \omega)_\tau}, \quad (12)$$

где $C_v(\tau, \omega) = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_v = R \left[\frac{3}{2} + \frac{q_c^2 \cdot \omega}{J_1(x_c) \tau^2} J_1(\omega, \tau) \right]$,

$$\left(\frac{\partial \Pi}{\partial \omega} \right)_\tau = \frac{1}{Z_c} \left(q^2(\omega, \tau) + \frac{q_c^2 \cdot \omega}{J_1(x_c) \tau^2} J_1(\omega, \tau) \right), \quad J_1(\omega, \tau) = J_1(x), \quad x = x_c \omega / \tau,$$

$$\left(\frac{\partial \Pi}{\partial \tau} \right)_\omega = \frac{\omega}{Z_c} \left(1 + \frac{q_c^2}{x_c^2 J_1(x_c) \cdot \omega} \left[J(\omega, \tau) + \left(\frac{x_c \omega}{\tau} \right)^2 J_1(\omega, \tau) \right] \right);$$

— скорость звука

$$u(\tau, \omega) = \frac{Z_c R}{\omega} \left(\frac{T_c}{M} \right)^{1/2} \left(\frac{\tau}{C_v(\tau, \omega)} \left(\frac{\partial \Pi}{\partial \tau} \right)_\omega^2 + \frac{\omega^2}{Z_c R} \left(\frac{\partial \Pi}{\partial \omega} \right)_T \right)^{1/2}, \quad (13)$$

где $R = k_B N_A$ — универсальная газовая постоянная;

— коэффициент Джоуля–Томсона

$$\alpha(\tau, \omega) = \frac{N_A}{C_p(\tau, \omega) n_c \omega} \left[\frac{\tau}{\omega} \frac{(\partial \Pi / \partial \tau)_\omega}{(\partial \Pi / \partial \omega)_\tau} - 1 \right]. \quad (14)$$

Задачу расчета перечисленных выше свойств можно считать исчерпанной, если

- 1) при $P > P_c$ найдены плотности модельной системы ω , которые являются решениями уравнения

$$\Pi(\tau, \omega) - P/P_c = 0, \quad (15)$$

- 2) на линии насыщения найдены плотности сосуществующих фаз ω_1 и ω_2 — решения системы уравнений, определяющих равновесие фаз

$$\begin{cases} \Pi(\omega_1, \tau) = \Pi(\omega_2, \tau), \\ \mu(\omega_1, \tau) = \mu(\omega_2, \tau), \end{cases} \quad (16)$$

$$\mu(\omega, \tau) = T_c \tau \left[\ln(\omega n_c \lambda^3) + \frac{x_c \omega d}{\tau} - \frac{3q_c^2}{2\tau x_c J_1(x_c)} \left(1 + \frac{\varepsilon}{2} + 2(qQ_1 + q_1Q - Q^2Q_1) \right) \right]$$

— химический потенциал, $\mu = (\partial F / \partial N)_{T, V}$,

3) определено оптимальное значение подгоночного параметра ε .

Заметим, что уравнение (15) и система (16) не содержат явно ни критических параметров, ни параметров потенциала взаимодействия, поэтому решение ω уравнения (15) зависит от ε , τ и $\Pi = P/P_c$, а решение системы (16) — только от ε и τ . Уравнение (15) и система (16) решены численно. Поиск оптимального значения ε_0 сводится к установлению минимума функции

$$\Phi(\varepsilon) = \sum_i \left(\frac{1}{X_i^{\text{exp}}} (X_i^{\text{exp}} - X_i^{\text{theor}}(\varepsilon)) \right)^2, \quad (17)$$

здесь X_i — величина i -го экспериментального или расчетного свойства системы. Конкуренция слагаемых, входящих в (17) может приводить к существованию минимума функции $\Phi(\varepsilon)$.

Если для расчета ε_0 по формуле (17) использовать экспериментальные значения для аргона в КТ $Z_c = 0.292$, $(\partial \Pi / \partial \tau)_c = 6.0$ [9], а так же $T_B = 412.8 \text{ K}$ [10] и экстремальные значения теплоемкости $C_p^{\text{max}} = 2513 \text{ \AA} \hat{a} / \hat{e} \hat{a} \cdot \hat{E}$, скорости звука $u_p^{\text{min}} = 259 \text{ \AA} / \hat{n}$ [10] и коэффициента Джоуля-Томсона $\alpha_p^{\text{max}} = 4.26 \cdot 10^{-6} \hat{E} / \hat{I} \hat{a}$ [11] при $P = 10 \text{ МПа}$, то функция $\Phi(\varepsilon)$ достигает минимума в точке $\varepsilon_0 = 0.656$.

В рассматриваемой модели температура Бойля определяется из равенства нулю второго вириального коэффициента

$$B_2(T) = \frac{N_A \tilde{V}_0}{2k_b T} \left(1 - \frac{T_B}{T} \right), \quad (18)$$

полученного из разложения уравнения (7) по степеням n с точностью до членов n^2 :

$$T_B = - \frac{3q_c^2 T_c}{32x_c J_1(x_c)} \frac{[(\varepsilon - 2)^2 + 4]}{1 - \varepsilon}, \quad J_1(x_c) < 0. \quad (19)$$

В таблице приводятся относительные погрешности некоторых величин, рассчитанных по различным УС в КТ и надкритической области. В последних трёх столбцах содержатся погрешности экстремальных значений теплоемкости, скорости звука и коэффициента

Джоуля–Томсона, температурные зависимости, которых при $P = 10 \text{ МПа}$ показаны на рис. 1–3.

Относительные погрешности некоторых величин $\delta X_i^{theor} (\%)$

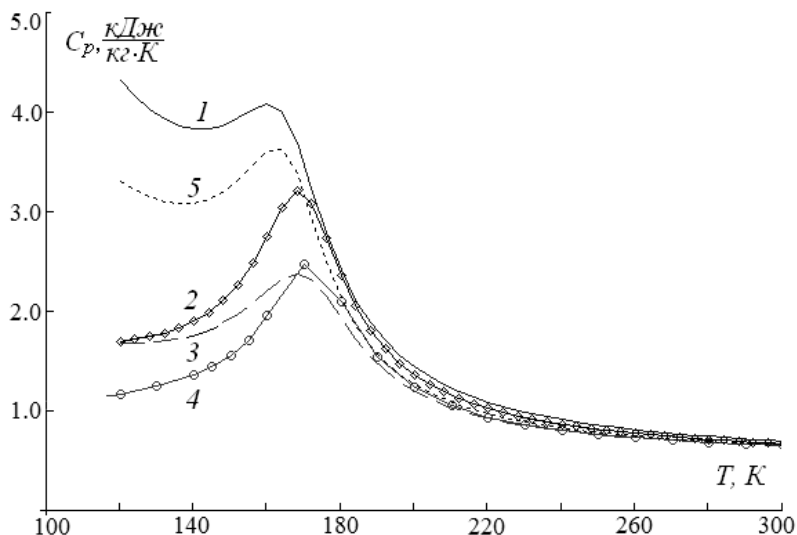
Уравнение состояния	δZ_c	δu_c	$\delta(\partial\Pi/\partial\tau)_c$	δT_B	δC_p^{\max}	δu_p^{\min}	$\delta \alpha_p^{\max}$
(11) $\varepsilon = 0.656$	11.3	8.9	36.7	9.0	62.4	14.6	18.2
осциллирующий потенциал [12]	1.3	3.3	8.9	18.7	29.96	20.2	11.4
Редлиха-Квонга [13]	14.1	27.9	18.4	5.8	5.4	1.8	6.8

Отметим, что изменение набора свойств в формуле (17) приводит к корректировке значения $\varepsilon_0 = 0.656$ и изменению величин погрешностей, представленных в таблице.

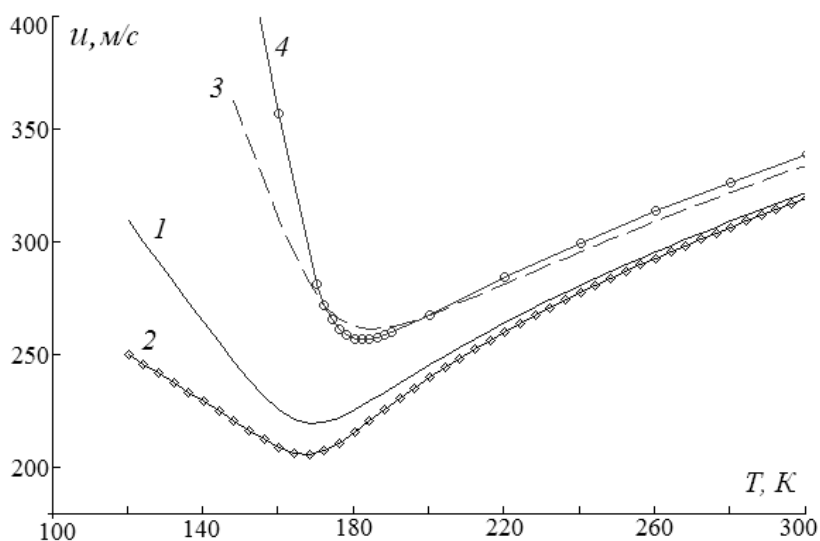
На рис. 1 зависимость $C_p(T)$, построенная по формуле (12) при $P = 10 \text{ МПа}$, сопоставляется с аналогичными зависимостями, полученными для других модельных систем и данными измерений для аргона [10]. При низких температурах для кривых 1 и 5 наблюдается отклонение от экспериментального поведения изобарной теплоемкости.

В уравнениях состояния (11) и Бергло [13] можно выделить слагаемые $\sim 1/T^2$, влияние которых после дифференцирования давления по T при определении $C_p(T)$ заметно усиливается с понижением температуры. Это обстоятельство объясняет качественно неверное описание эксперимента с помощью упомянутых уравнений при низких температурах.

На рис. 2 изображены результаты теоретических расчётов и данные измерений [10] скорости звука в аргоне при постоянном давлении. Кривая 3, построенная по уравнению Редлиха–Квонга в окрестности экспериментального минимума $u_p^{\min} = 259 \text{ м/с}$ и при $T > 180 \text{ К}$, хорошо описывает реальную ситуацию. На кривой 1, полученной в модели с потенциалом (3), минимум $u \approx 220 \text{ м/с}$ достигается при $T = 168 \text{ К}$. Погрешность уменьшается с увеличением температуры до 5%.



Р и с . 1. Температурная зависимость C_p для аргона при $P = 10 \text{ МПа}$.
 Теоретические кривые: 1 – уравнение (11) при $\varepsilon_0 = 0.656$, 2 – модель с осциллирующим потенциалом [12], 3 – уравнение Редлиха-Квонга [13], 4 – эксперимент [10], 5 – уравнение Бергло [13]



Р и с . 2. Температурная зависимость u_p для аргона при $P = 10 \text{ МПа}$.
 Теоретические кривые: 1 – уравнение (11) при $\varepsilon_0 = 0.656$, 2 – модель с осциллирующим потенциалом [12], 3 – уравнение Редлиха-Квонга [13]; 4 – эксперимент [10]

Все представленные на рис. 3 зависимости коэффициента Джоуля–Томсона $\alpha(T)$ при постоянном давлении $P = 10 \text{ МПа}$ качественно верно воспроизводят эксперимент. Видно, что кривая 1, построенная по результатам расчетов $\alpha(T)$, выполненных по формуле (14) в модели с потенциалом (3), в окрестности максимума имеет наибольшие отклонения (18%) от экспериментальной кривой 4. Погрешность при температурах около 300 К не превышает 16%.

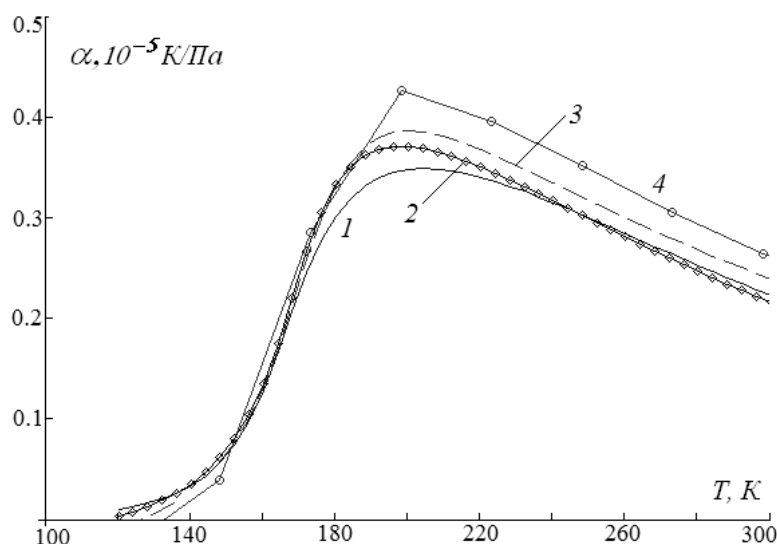
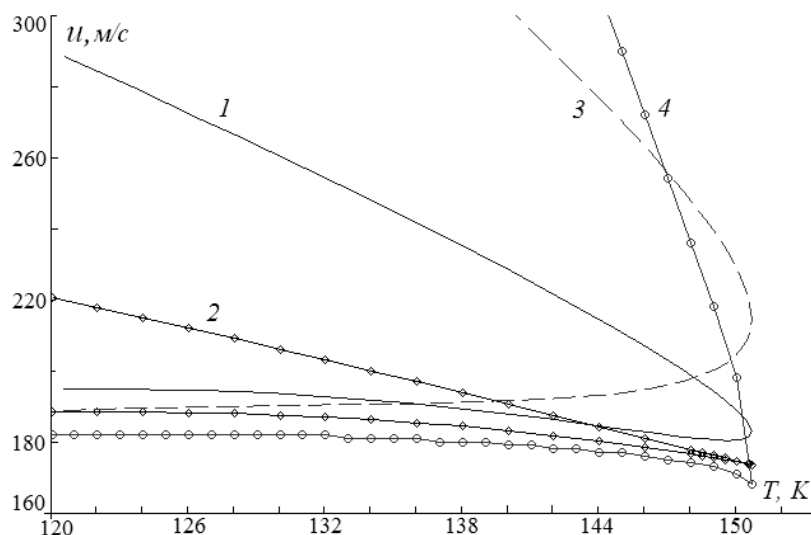


Рис. 3. Температурная зависимость коэффициента Джоуля–Томсона α_p для аргона при $P = 10 \text{ МПа}$. Теоретические кривые: 1 – уравнение (11) при $\varepsilon_0 = 0.656$, 2 – модель с осциллирующим потенциалом [12], 3 – уравнение Редлиха–Квонга [13], 4 – эксперимент по данным [11]

Расчет скорости звука в аргоне на линии равновесия фаз, показанный на рис. 4, выполнен по формуле (13) с учетом решений системы (16).

Погрешность для газовой ветви в рассматриваемой модели (нижняя часть кривой 1) не превышает 9%, а в модели с ОСЦ-потенциалом – не более 5%.



Р и с . 4. Зависимость скорости звука от температуры на линии сосуществующих фаз. Теоретические кривые: 1 – уравнение (11) при $\varepsilon_0 = 0.656$, 2 – модель с осциллирующим потенциалом [12], 3 – уравнение Редлиха-Квонга [13]; 4 – эксперимент [10]

На рис. 4 кривая 1, представляющая результаты расчета $u(T)$ на линии насыщения в модели простой жидкости с потенциалом (3), находится в лучшем согласии с данными измерений, чем кривая 2, полученная в приближении (2) с осциллирующим потенциалом [12], и кривая 3, построенная по уравнению Редлиха–Квонга [13].

Зависимости $C_p(T)$ и энтропии, полученные на линии насыщения представляются качественно вполне удовлетворительными. Расчет $C_p(T)$ и энтропии на линии насыщения в окрестности КТ показывают качественно правильную картину поведения.

Представленные здесь теоретические результаты далеки от точности, достижимой на эксперименте. Однако если иметь в виду, что основной задачей статистической теории жидкости является предсказание поведения термодинамических свойств в зависимости от характеристик межчастичного взаимодействия и параметров состояния, то полученные результаты свидетельствуют о пригодности теоретических построений для качественного воспроизведения экспериментальной картины. Среди рассмотренных свойств исключение составляет зависимость $C_p(T)$, которая неверно описывает эксперимент в надкритической области при низких температурах. Причины несоответствия результатов расчетов заключаются в приближенном характере выражения для свободной энергии и

недостаточно реалистичном потенциале взаимодействия, что привело к появлению в УС членов, пропорциональных обратным степеням температуры, а также к существенным отклонениям плотности ω от экспериментальных значений в надкритической области при относительно низких температурах.

Автор выражает благодарность А.Ю. Захарову за полезные обсуждения и ценные замечания, учет которых позволил улучшить предыдущий вариант статьи.

Список литературы

1. Alder B.J., Wainwright T.E. // Proceedings of the International Symposium on Transport. Processes in Statistical Mechanics. Brussels, August 27-31, 1956 (1958). Interscience Publ. / Ed. I. Prigogine. P. 97.– N.-Y.: 1958.
2. Боголюбов Н.Н.. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.-Л., Гостехиздат. 1946. 120 с.
3. Kirkwood J.G., Boggs E. // J. Chem. Phys. 1942. V. 10. P. 394.
4. Born M., Green H.S.. A General Kinetik Theory of Liquids. Cambridge, Cambridge Univ. Press., 1949. 102 p.
5. Зубарев Д.Н. // ДАН СССР. 1954. Т. 35. №4. С. 757.
6. Захаров А.Ю., Локтионов И.К. // ТМФ. 1999. Т. 119. №1. С. 167.
7. Baus M., Tejero C.F. Equilibrium Statistical Physics: Phases of Matter and Phase Transitions. Springer, 2008. 374 p.
8. Рюэль Д. Статистическая механика. Строгие результаты / Под ред. Р.А. Минлоса. Пер. с англ. И.Д. Новикова и В.М. Герцика, М.: Мир, 1971. 367 с.
9. Каганер М.Г. // ЖФХ. 1958. Т. 32. №2. С. 332.
10. Stewart R.B., Jacobsen R.T. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1989. V.18. №2. P. 639.
11. Таблицы физических величин: справочник / под ред. И.К. Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1008 с.
12. Локтионов И.К. // Теплофизика высоких температур. 2014. Т. 52. № 3 . С. 402–414.
13. Шпильрайн Э.Э., Кессельман П.М. Основы теории теплофизических свойств веществ. М.: «Энергия», 1977. 248 с.

CALCULATION OF THERMODYNAMICS PROPERTIES OF ARGON IN MODEL OF SIMPLE LIQUID WITH THREE-PARAMETER INTERACTION POTENTIAL

I.K. Loktionov

Donetsk National Technical University, Donetsk

Equilibrium thermodynamics properties of the system of particles, designing a simple liquid, are investigational on the basis of statistical approach. The task of being of three parameters of interaction potential is taken to the search of one dimensionless parameter the optimal value of that is found with bringing in of coordinates of critical point and used for the calculation of properties in the supercritical region and on the phase equilibrium line. The obtained results are compared with the experimental data.

Keywords: interaction potential, critical point, equation of state, heat capacity, speed of sound.

Об авторе:

ЛОКТИОНОВ Игорь Константинович – старший преподаватель кафедры высшей математики Донецкого национального технического университета, e-mail: likk@telenet.dn.ua