

МЕТОД ВОЗМУЩЕНИЙ В МОДЕЛИ ЖИДКОСТИ С ДВОЙНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ЮКАВЫ

И.К. Локтионов

Донецкий национальный технический университет, г. Донецк, ДНР

На основе свободной энергии Гельмгольца с применением теории возмущений выполнен расчёт некоторых термодинамических свойств модели простой жидкости с двойным потенциалом Юкавы. Продемонстрирована эффективность приближённых аналитических соотношений. Полученные результаты сопоставляются с данными экспериментов.

Ключевые слова: потенциал взаимодействия, критическая точка, термодинамические свойства.

Известно, что расчёт равновесных термодинамических свойств вещества в рамках статистического подхода может быть выполнен путём вычисления свободной энергии Гельмгольца для какой-либо конкретной модели вещества.

В настоящей работе объектом исследования служит однокомпонентная система N классических частиц, размещённых в объёме V при температуре T и взаимодействующих посредством парного центрального потенциала $v(|r|)$, который имеет фурье-образ $\tilde{v}(k)$. Основу для описания свойств указанной модельной системы составляет, полученное в квадратичном приближении метода перевала, выражение для свободной энергии [1,2]

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z = F_{id} + \frac{n^2 V}{2} \tilde{v}_0 + \frac{V}{2\beta} \int_{\Omega} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} [\ln(1 + n\beta\tilde{v}(k)) - n\beta\tilde{v}(k)], \quad (1)$$

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

В пионерской работе Д.Н. Зубарева [3] выражение для F указанных систем в несколько ином виде было получено методом коллективных переменных.

Для получения конкретных результатов с помощью (1) необходимо задать вид потенциальной функции, допускающей разложение Фурье. Основное приближение, которое можно использовать для жидкостей состоит в том, что многие её свойства связаны с отталкивательной ветвью потенциала взаимодействия. Одним из простейших потенциалов, описывающих отталкивание, является потенциал Юкавы. Однако весьма желательно, чтобы модельный потенциал отражал детали реальных взаимодействий, т.е. имел не

только отталкивание на малых расстояниях, но и притяжение на больших, что для непрерывных функций неизбежно приводит к появлению минимума - потенциальной ямы. В качестве притягивающего члена можно выбрать любую функцию, которая вместе с потенциалом Юкавы приводит к возникновению перечисленных свойств. Модель с притягивающей ветвью в виде экспоненциальной функции рассмотрена в [4].

Здесь парный потенциал представляется в виде линейной комбинации потенциалов Юкавы

$$v(r) = \frac{1}{4\pi r} (A \exp(-ar) - B \exp(-br)) \quad (2)$$

с положительными параметрами a, A, b, B и фурье-образом

$$\tilde{v}(k) = \frac{A}{k^2 + a^2} - \frac{B}{k^2 + b^2}. \quad (3)$$

Потенциал (2), часто называемый двойным потенциалом Юкавы, за последние два десятилетия в физике жидкого состояния получил весьма широкое распространение и успешно используется для описания свойств жидкости с привлечением методов компьютерного моделирования [5-8]. Возможность применения (2) в рамках приближения (1) обеспечивается выполнением неравенства $\tilde{v}(k) > 0$ [9], исключающим коллапс системы. Для потенциала (2) область устойчивости, связанная с этим неравенством, состоит из двух частей: сектора $G_1 = \{(\delta, \varepsilon) : 0 < \delta < 1, 0 < \varepsilon < \delta^2\}$ и полосы $G_2 = \{(\delta, \varepsilon) : \delta \geq 1, 0 \leq \varepsilon \leq 1\}$, представленных на рисунке 1, где $\delta = b/a$, $\varepsilon = B/A$. В секторе G_1 параметры $\delta = b/a$, $\varepsilon = B/A$ принимают такие значения, при которых конкуренция слагаемых в (2), приводит к образованию потенциальной ямы. В полосе G_2 при $\delta \geq 1$ при любых r в (2) доминирует первое слагаемое. Поэтому функция (2) преобразуется к отталкивательному потенциалу подобному потенциалу Юкавы, для которого исследование соответствующей модельной системы выполнено в [2]. Здесь

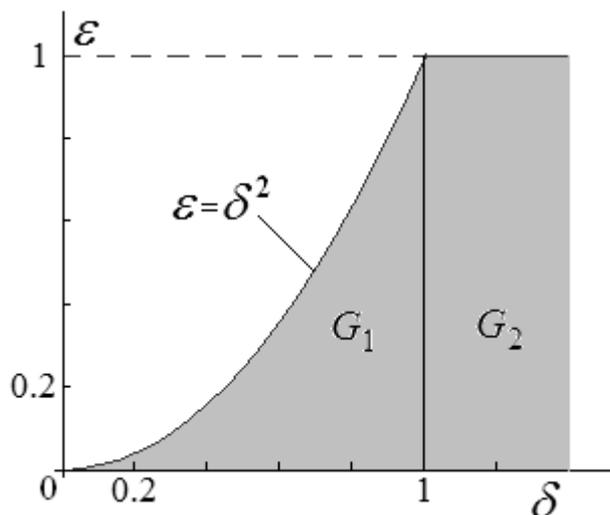


Рис.1. Область устойчивости потенциала (2).

рассмотрим случай, когда параметры δ и ε потенциала (2) принимают значения из области G_1 .

Программа исследования термодинамических свойств жидкости на основе интегрального представления свободной энергии F в сочетании с конкретным потенциалом взаимодействия состоит из двух этапов:

- вычисление интеграла в (1), связывающего термодинамические характеристики жидкости с параметрами потенциала $v(r)$;
- применение к полученному выражению для F математического аппарата термодинамики для расчёта свойств модельной системы и сравнение результатов расчётов с данными измерений.

Интегрирование по k в (1) с фурье-образом (3) осуществляется так же, как в работе [4] и приводит к следующему явному выражению для F

$$F = F_{id} + \frac{n^2 V}{2} \tilde{v}_0 + \frac{NAa}{8\pi} (1 - \varepsilon \delta) + \frac{Va^3}{12\pi\beta} \left[1 + \delta^3 - Q^3(x) + 3\delta q(x)Q(x) \right], \quad (4)$$

здесь введены обозначения: $x = n\beta w$, $w = A/a^2$, $q(x) = \sqrt{1 + xD}$,

$$D = 1 - \varepsilon/\delta^2, \quad d = 1 - \varepsilon, \quad \tilde{v}_0 = wD, \quad Q(x) = \sqrt{1 + \delta^2 + xd + 2\delta q(x)}.$$

Найдём уравнение состояния (УС)

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_v = \frac{n}{\beta} + \frac{n^2 w}{2} D - \frac{a^3}{12\pi\beta} J(x), \quad (5)$$

$$J(x) = 1 + \delta^3 - (Q^3 - 3\delta q Q) - 3x(\delta(qQ_1 + Qq_1) - Q^2 Q_1), \quad (6)$$

где $Q = Q(x)$, $q = q(x)$, $q_1 = D/2q(x)$, $Q_1 = (d + 2\delta q_1(x))/2Q(x)$.

Для удобства выполнения расчётов свойств термодинамические функции следует выразить в безразмерных координатах. С этой целью необходимо установить связь параметров потенциала с координатами критической точки (КТ), которая определяется решением системы уравнений

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial P}{\partial n} \right)_c = \frac{1}{\beta_c} \left(q^2(x_c) - \frac{a^3 x_c}{12\pi m_c} J'(x_c) \right) = 0, \\ \left(\frac{\partial^2 P}{\partial n^2} \right)_c = w \left(D - \frac{a^3 x_c}{12\pi m_c} J''(x_c) \right) = 0. \end{cases} \quad (7)$$

(индекс «с» относится к КТ, выражения для производных функции $J(x)$ по x имеют чрезвычайно громоздкий вид и поэтому не приводятся).

Система (7) сводится к нелинейному уравнению относительно безразмерной величины $x_c = x_c(\delta, \varepsilon) = n_c \beta_c w$

$$q^2(x_c) J''(x_c) - DJ'(x_c) = 0. \quad (8)$$

Это уравнение является сложным для анализа, хотя и допускает численное решение, и в некоторых частных случаях может быть решено точно [2,10]. Подставляя далее отношение

$$L = L(x_c) = \frac{a^3}{12\pi m_c} = \frac{q^2(x_c)}{x_c J'(x_c)}, \quad (9)$$

найденное из первого уравнения системы (7) в выражения для термодинамических функций, приходим к зависимостям изобарной

теплоёмкости $C_p(\tau)$, скорости звука $u_p(\tau)$ и коэффициента Джоуля-Томсона $\alpha_p(\tau)$ от безразмерных аргументов $\tau = T/T_c$, $\omega = 1/\varphi = n/n_c$ и параметров δ , ε . Приведём сводку формул, с помощью которых осуществляется расчёт теплофизических свойств модельной системы:

– уравнение состояния

$$\Pi(\omega, \tau) = \frac{1}{Z_c} \left[\tau\omega + \frac{x_c\omega^2}{2} D - L\tau J(\omega, \tau) \right], \quad (10)$$

где $Z_c = P_c V_c / RT_c = 1 + x_c D/2 - LJ(x_c)$ – критическая сжимаемость;

– изобарная молярная теплоёмкость

$$C_p(\tau) = C_v(\tau) - \tau Z_c R \frac{(\partial \Pi / \partial \tau)_\omega^2}{(\partial \Pi / \partial \varphi)_\tau}, \quad (11)$$

где $C_v(\tau) = -T^2 \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_V = R \left[\frac{3}{2} + \frac{x_c L}{\tau} J'(\omega, \tau) \right]$, $R = k_B N_A$;

$$\left(\frac{\partial \Pi}{\partial \varphi} \right)_\tau = -\frac{\omega^2 \tau}{Z_c} \left[q^2(x_c) - \frac{x_c L}{\tau} J'(\omega, \tau) \right],$$

$$\left(\frac{\partial \Pi}{\partial \tau} \right)_\omega = \frac{\omega}{Z_c} \left[1 - \frac{L}{\omega} \left(J(\omega, \tau) - \frac{x_c \omega}{\tau} J'(\omega, \tau) \right) \right];$$

– скорость звука

$$u_p(\tau) = \frac{1}{\omega} \sqrt{R \frac{Z_c T_c}{M} \left(R \frac{Z_c \tau}{C_v(\tau)} \left(\frac{\partial \Pi}{\partial \tau} \right)_\omega^2 - \left(\frac{\partial \Pi}{\partial \varphi} \right)_\tau \right)^{1/2}}; \quad (12)$$

– коэффициент Джоуля-Томсона

$$\alpha_p(\tau) = \frac{-N_A}{n_c \omega C_p(\tau)} \left(\omega \tau \frac{(\partial \Pi / \partial \tau)_\omega}{(\partial \Pi / \partial \varphi)_\tau} + 1 \right), \quad (13)$$

где M – молярная масса вещества, функции $J(\omega, \tau)$ и $J'(\omega, \tau)$ получены из $J(x)$ и $J'(x)$ с помощью замены $x = n\beta w = x_c \omega / \tau$.

– температура Бойля

$$T_B = \frac{3q^2(x_c)}{4J'(x_c)D} T_c \left[\frac{(1+\delta)(\delta+\varepsilon^2) - 4\varepsilon\delta}{\delta(1+\delta)} \right] \quad (14)$$

найдена из равенства нулю второго вириального коэффициента, получаемого путём разложения уравнения (5) по степеням плотности n с точностью до квадратных по n членов.

Применение численных методов для получения результатов высокой точности, делает весьма затруднительным обнаружение качественных зависимостей макроскопических свойств вещества от микроскопических характеристик составляющих его частиц. Поэтому представляют интерес приближённые аналитические методы, в частности, методы теории

возмущений, поскольку рассматриваемая задача содержит параметры δ и ε , которые учитывая геометрию сектора G_1 (рис.1), могут принимать близкие к нулю значения и можно подчинить какому-либо уравнению связи $\varepsilon = \varepsilon(\delta)$.

Задача состоит в построении приближённых выражений при малых значениях параметров δ и ε . Заметим, что в этом случае притяжение в потенциале (2) выступает в роли малой поправки. Для того чтобы свести к минимуму математические выкладки следует сделать правильный выбор связи $\varepsilon = K\delta^2$ ($K \in [0; 1)$) между параметрами δ и ε , и получить соответствующие разложения, на основе которых могут быть построены необходимые выражения для термодинамических функций. К примеру, связь в виде $\varepsilon = \delta^m$, $m > 2$ не позволяет выполнить корректный учёт слагаемых одинаковых степеней при разложении различных вспомогательных функций.

Ограничиваясь в разложении свободной энергии F линейными по ε членами, получим

$$F = F_{id} + \frac{n^2 V}{2} wD + \frac{Va^3}{8\pi\beta} x + \frac{Va^3}{12\pi\beta} \left[1 - q_0^3(x) + \frac{3x^2}{2q_0(x)} \varepsilon \right], \quad (15)$$

где $q_0(x) = \sqrt{1+x}$.

В этом случае УС и система уравнений, описывающих критическое состояние жидкости, имеют вид (5) и (7) однако функция $J(x)$, определяемая формулой (6) будет равна

$$J(x) = J_0(x) - \varepsilon J_2(x) = \left[1 - q_0(x) \left(1 - \frac{x}{2} \right) \right] - \varepsilon \left[\frac{3x^2 (q_0^2(x) + 1)}{4q_0^3(x)} \right], \quad (16)$$

а уравнение (8) преобразуется к уравнению

$$q^2(x_c) J_0''(x_c) - DJ_0'(x_c) = \varepsilon [q^2(x_c) J_2''(x_c) - DJ_2'(x_c)], \quad (17)$$

решение которого будем искать в виде ряда по степеням малого параметра ε

$$x_c = x_0 + \varepsilon x_1 + \dots, \quad (18)$$

где $x_0 = (1 + \sqrt{1+8D})/2D$ – решение невозмущенного уравнения $Dx_0^2 - x_0 - 2 = 0$, получаемого из (17) при $\varepsilon = 0$ ($\delta = 0$, $D = 1 - K$).

Подставляя x_0 в (16), найдём первую поправку

$$x_1 = \frac{q^2(x_0) J_2''(x_0) - DJ_2'(x_0)}{q^2(x_0) J_0'''(x_0)}, \quad (19)$$

Расчёт теплофизических свойств выполняется по формулам (10)-(14) с учётом функции (16) и решения (18). Выражение для температуры Бойля легко получить из (14), сохраняя в нём главные по δ и ε члены

$$T_B = \frac{3q^2(x_c)}{4J'(x_c)D} \left(1 - \frac{4\varepsilon}{1+\delta}\right) \cdot T_c. \quad (20)$$

Другой подход к выводу приближённых уравнений, не связанный с теорией возмущений, опирается на частные особенности конструкции выражения (4) для свободной энергии. А именно, при малых δ и ε можно воспользоваться приближённым равенством $d \approx D$. Тогда, полагая $q(x) \approx q_d(x) = \sqrt{1+xd}$ в функции $Q(x) = \sqrt{1+\delta^2+xd+2\delta q(x)}$, определяемой после формулы (4), получим $Q(x) \approx \delta + q_d(x)$ (расчёты показывают, что выбор $Q(x) \approx \delta + \sqrt{1+xD}$ оказывается физически мало обоснованным). В этом случае выражение (4) для свободной энергии принимает вид

$$F = F_{id} + \frac{n^2V}{2} wD + \frac{Va^3}{8\pi\beta} x(1-\varepsilon\delta) + \frac{Va^3}{12\pi\beta} [1 - q_d^3(x)], \quad (21)$$

где $q_d(x) = \sqrt{1+xd}$, а функция (6), входящая в УС (5) задаётся равенством

$$J(x) = 1 - q_d(x) \left(1 - \frac{xd}{2}\right). \quad (22)$$

Уравнение (8), в котором производные $J'(x) = 3xd^2/4q_d(x)$, $J''(x) = 3d^2(1+q_d^2)/8q_d^3(x)$, сводится к квадратному уравнению $Ddx_c^2 - dx_c - 2 = 0$ (здесь учёт $d \approx D$ приводит к независимости критической сжимаемости Z_c от параметров δ и ε , однако такая зависимость должна быть, поскольку каждой точке $(\delta; \varepsilon)$ отвечает некоторый потенциал, инициирующий определенный набор термодинамических свойств) с единственным положительным решением

$$x_c = \frac{1}{2Dd} \left(d + \sqrt{d^2 + 8Dd}\right). \quad (23)$$

Расчёт теплофизических свойств выполняется по формулам (10)-(14) с учётом функции (22) и решения (23).

Температуры Бойля определяется из равенства нулю второго вириального коэффициента, извлекаемого из разложения уравнения (5) с функцией (22) по степеням n с точностью до членов $\propto n^2$:

$$T_B = \frac{3d^2(1+x_cD)}{4J'(x_c)D} T_c. \quad (24)$$

В частном случае $\varepsilon = 0$ ($d = D = 1$) в потенциале (2) сохраняется первое слагаемое, и формулы (21)-(24) вместе с (10)-(13) будут описывать свойства модельной системы с потенциалом Юкавы. Соответствующие результаты расчётов показаны на всех представленных ниже рисунках.

Заметим, что перечисленные результаты можно получить и более коротким путём, сократив объём промежуточных выкладок, если в подынтегральном выражении в (1) заменить параметр D на d , что

существенно упрощает вычисление интеграла в (1) с фурье-образом (3). Издержки такой замены в виде потери точности при малых δ и ε , как показывают расчёты, представленные ниже, оказались незначительными. Этот путь может оказаться весьма эффективным при рассмотрении модели жидкости с потенциалом типа Морзе, когда аргументом логарифма под знаком интеграла в (1) является дробно-рациональная функция, образованная многочленами высоких степеней. Интегрирование с фурье-образом потенциала типа Морзе в общем случае приводит к таким громоздким вычислениям и необозримым конечным соотношениям, которые не могут вызвать одобрения даже у адептов аналитических методов.

Для иллюстрации предсказательных возможностей предлагаемых вычислительных схем расчёты выполнены по «точным» и приближённым формулам для точки $\delta_0 = 0.4$ $\varepsilon_0 = 0.0856$, в которой функция

$$\Phi(\delta, \varepsilon) = \sum_i \left[(X_i^{\text{exp}} - X_i^{\text{theor}}(\delta, \varepsilon)) / X_i^{\text{exp}} \right]^2, \quad (25)$$

представляющая сумму отклонений экспериментальных значений X_i^{exp} от соответствующих теоретических значений X_i^{theor} , определяемых по «точным» формулам (10)-(14), достигает минимума на прямой $\delta = 0.4$. Координаты $(\delta_0; \varepsilon_0)$ найдены с привлечением следующих экспериментальных данных для аргона: $Z_c = 0.292$, $u_c = 168.0$ м/с, $T_B/T_c = 2.740$ [11], $(\partial\Pi/\partial\tau)_c = 6.0$ [12], а также экстремальные значения теплоёмкости $C_p^{\text{max}} = 2513$ $\text{Äæ} / (\hat{e}\tilde{a} \cdot \hat{E})$, скорости звука $u_p^{\text{min}} = 259$ $\text{ì} / \tilde{n}$ [11] и коэффициента Джоуля-Томсона $\alpha_p^{\text{max}} = 4.26$ $\text{K} / \ddot{H}\grave{a}$ [13] в надкритической области при постоянном давлении $P = 10$ МПа. Значение коэффициента $K = 0.535$ в уравнении связи $\varepsilon = K\delta^2$, необходимое для расчёта свойств по УС (5) совместно с (16), найдено с учётом координат точки $(\delta_0; \varepsilon_0)$.

Результаты расчётов изобарной теплоёмкости аргона при $P = 10$ МПа, представленные на рис.2, показывают, что теоретическое значение C_p^{max} на кривых 1-3 приблизительно в 1.5 раза превышает соответствующую экспериментальную величину, а кривые 1-3, в отличие от экспериментальной кривой 4, имеют ярко выраженные минимумы при $T < T_{\text{max}}$. Такое поведение $C_p(T)$ связано с тем, что УС модельной системы содержат члены, пропорциональные $(\omega/\tau)^s$, вклад которых оказывается доминирующим при уменьшении температуры τ и увеличении плотности ω . Дифференцирование $\Pi(\omega, \tau)$ по τ с последующим возведением в квадрат увеличивает этот вклад в $C_p(T)$ даже при учёте производной $(\partial\Pi/\partial\varphi)_\tau$ в знаменателе формулы (11). Кроме того, заметим, что неверный ход изобарной теплоёмкости обусловлен не только с величиной показателя s , но и

возрастающими при понижении температуры отклонениями плотностей $\omega(\tau)$, определяемых из модельных УС, от соответствующих экспериментальных значений. Подобная картина поведения $C_p(T)$ при низких температурах наблюдается в ксеноне при $P \geq 10 \text{ МПа}$ [14].

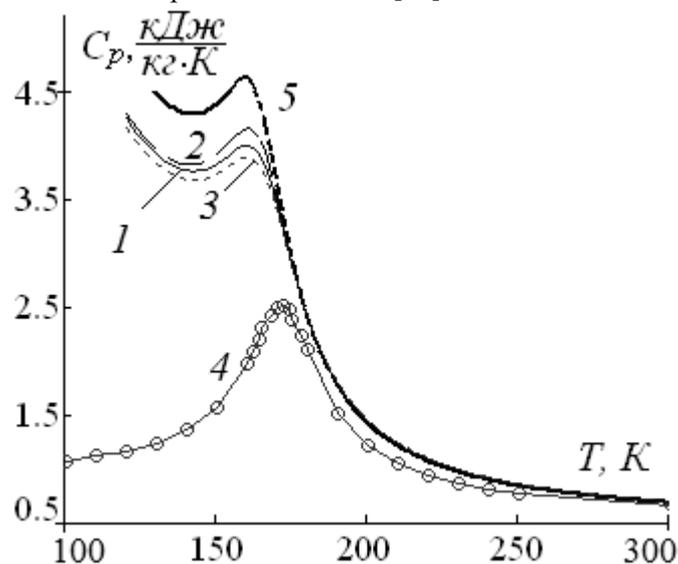


Рис.2. Зависимость изобарной теплоёмкости $C_p(T)$ при $P = 10 \text{ МПа}$:

1 – УС (5) с функцией (6) – «точный» расчёт; 2 – УС (5) с функцией (16) – теория возмущений; 3 – УС (5) с функцией (22); 4 – эксперимент [11]; 5 – расчёт с потенциалом Юкавы.

Из рис.3, на котором показаны данные измерений [11] и результаты расчётов скорости звука в аргоне при постоянном давлении $P = 10 \text{ МПа}$, следует, что отклонения теоретических кривых 1-3, от экспериментальной кривой 4, заметно возрастают при понижении температуры. При качественно верном воспроизведении зависимости $u_p(T)$ количественные расхождения можно объяснить конкуренцией сомножителей $C_v(T)$ и $(\partial\Pi/\partial\tau)_\rho^2$, которые содержат члены $(\omega/\tau)^S$ и наличием множителя $1/\omega(\tau)$ в формуле (12).

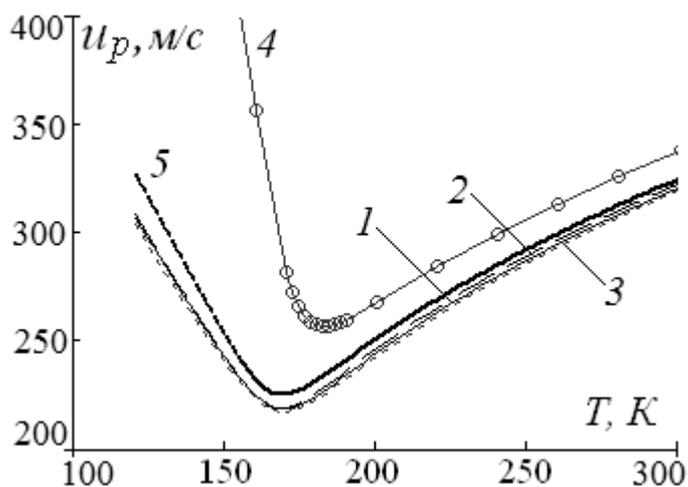


Рис.3. Зависимость скорости звука $u_p(T)$ в аргоне при $P = 10 \text{ МПа}$.

1 – УС (5) с функцией (6) – «точный» расчёт; 2 – УС (5) с функцией (16) – теория возмущений; 3 – УС (5) с функцией (22); 4 – эксперимент [11]; 5 – расчёт с потенциалом Юкавы.

Теоретические кривые 1-3, представленные на рис.4, качественно согласуются с данными эксперимента на линии 4 [13]. Заметим, что формула (12) при низких температурах хорошо описывает реальную зависимость коэффициента Джоуля-Томсона $\alpha_p(T)$. Это обусловлено тем, что члены вида $(\omega/\tau)^S$, отвечающие за аномальное поведение изобарной теплоёмкости при низких температурах, присутствуют в числителе и в знаменателе выражения (12), что приводит к компенсации их влияния.

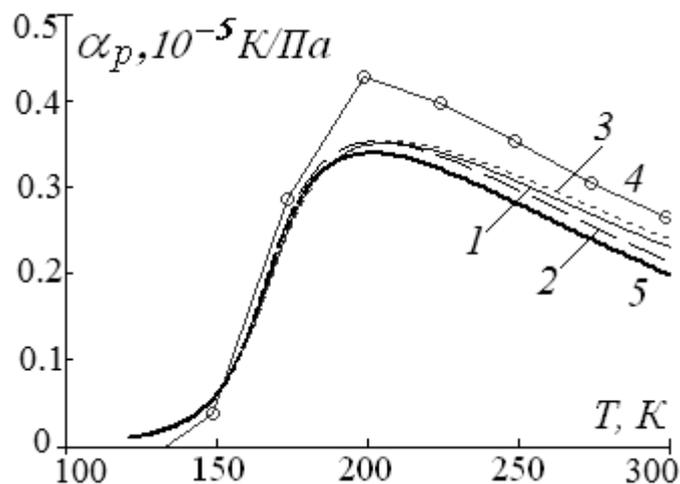


Рис.4. Температурная зависимость коэффициента Джоуля-Томсона $\alpha_p(T)$: 1 – УС (5) с функцией (6) – «точный» расчёт; 2 – УС (5) с функцией (16) – теория возмущений; 3 – УС (5) с функцией (22); 4 – эксперимент [13]; 5 – расчёт с потенциалом Юкавы.

Таблица

Сравнение значений некоторых термодинамических характеристик, подсчитанных приближёнными методами с «точными» значениями, найденными численными методами при $\delta_0 = 0.4$, $\varepsilon_0 = 0.0856$.

	решение $x_c = n_c \beta_c w$	Z_c	u_c , $\dot{\nu} / \dot{n}$	$\left(\frac{\partial \Pi}{\partial \tau}\right)_c$	T_B , K	α_P^{\max} , $K / \dot{\nu} \dot{a}$	u_P^{\min} , $\dot{\nu} / \dot{n}$
«точное» УС (5) с (6)	3.6284	0.2559	181.7	8.21	467.4	0.3503	218.6
УС (5) с (16)	3.6761	0.2686	183.3	7.91	460.3	0.3524	218.7
УС (5) с (22)	3.4960	0.2507	179.9	8.23	498.5	0.3521	217.3
Эксперимент	-	0.2919	168.0	6.0	412.7	0.426	257.0

Из таблицы видно, что результаты вычислений по приближённым формулам при $\delta_0 = 0.4$ хорошо согласуются с данными, полученными численными методами. Ясно, что при уменьшении δ и ε согласие будет улучшаться, и наоборот, при увеличении значений параметров на полученные выше соотношения полагаться нельзя, поскольку результаты расчётов становятся менее надёжными. В этом случае для сохранения точности расчёты должны проводиться с привлечением членов более высокого порядка теории возмущений.

Теория качественно неверно описывает экспериментальную зависимость $C_p(T)$ при низких температурах. Однако рассмотренные варианты описания термодинамики модели демонстрируют близкие по точности друг к другу и разумные при воспроизведении данных измерений скорости звука и коэффициента Джоуля-Томсона результаты.

Автор благодарит А.Ю. Захарова за полезные обсуждения, ценные замечания и советы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Захаров А.Ю., Локтионов И.К. Классическая статистика однокомпонентных систем с модельными потенциалами // ТМФ. 1999. Т. 119. №1. С. 167-176.
2. Локтионов И.К. Термодинамические свойства однокомпонентных систем с парными двухпараметрическими потенциалами взаимодействия // ТВТ. 2011. Т.49. № 4. С.529-536.
3. Зубарев Д.Н. Вычисление конфигурационных интегралов для системы частиц с кулоновским взаимодействием // ДАН СССР. 1954. Т.35. №4. С. 757-760.
4. Локтионов И.К. Расчет термодинамических свойств аргона в модели простой жидкости с трехпараметрическим потенциалом взаимодействия // Вестник Тверского ГУ. Серия: Химия, 2016, №4, С.156-167.
5. Y.-Z. Lin, Y.-G. Li, J.-F. Lu, W. Wu // Monte-Carlo simulation for the hard-core two-Yukawa fluids and test of the two-Yukawa equation of state // J. Chem. Phys. V.117, №22, 2002, PP.10165-10172.
6. M. Bahaa Khedr, S.M. Osman, M.S. Al Busaidi // New equation of state for double Yukawa potential with application to Lennard-Jones fluids // Physics and Chemistry of Liquids, V.47, №3, 2009, 237-249.

7. *J. Montes, M. Robles, M. Lopez de Haro* // Equation of state and critical point behavior of hard-core double-Yukawa fluids // *J. Chem. Phys.* 144, 084503 (2016)
8. *Herve Guerin* // Analytical equation of state for double Yukawa and hard core double Yukawa fluids: application to simple and colloidal fluids // *Physica A* 304 (2002) 327-339.
9. *Рюэль Д.* Статистическая механика. Строгие результаты / Под ред. Минлоса Р.А. Пер. с англ. Новикова И.Д., Герцика В.М. М.: Мир, 1971. С. 367.
10. *Локтионов И.К.* Применение двухпараметрических осциллирующих потенциалов взаимодействия для описания теплофизических свойств простых жидкостей // *ТВТ.* 2012. Т.50. № 6 . С.760-768.
11. *Stewart R.B., Jacobsen R.T.* Thermodynamical Properties of Argon from the Triple Point to 1200 K with Pressures to 1000 MPa // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 1989. V.18. №2. P. 639.
12. *Каганер М.Г.* Максимумы термодинамических свойств и переход газа к жидкости в надкритической области // *ЖФХ.* 1958. Т. XXX11. №2. С.332.
13. *Landolt-Bornstein.* Zahlenwerte und Funktionen aus Physik, Chemie, Astronomie, Geophysik und Technik, Aufl. 6, Bd.2, Teil 4. Springer-Verlag Berlin, Hedelberg GmbH 2013. P.757.
14. *Sifner O., Klomfar J.* // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 1994. V.23. №1. P. 63.

THE PERTURBATION METHOD IN THE MODEL LIQUID WITH DOUBLE YUKAWA POTENTIAL

I. K. Loktionov

*Donetsk national technical University, Donetsk
likk@telenet.dn.ua, lok_ig@mail.ru*

Calculation of some thermodynamic properties of a simple fluid model with double Yukawa potential is performed on the basis of Helmholtz free energy using perturbation theory. The efficiency of approximate analytical relations is demonstrated. The obtained results are compared with experimental data.

Key words: *interaction potential, critical point, thermodynamic properties.*

Об авторе:

ЛОКТИОНОВ ИГОРЬ КОНСТАНТИНОВИЧ, кафедра высшей математики Донецкого национального технического университета.
e-mail: likk@telenet.dn.ua, lok_ig@mail.ru

Поступила в редакцию 30 мая 2018 года