симметризация бинодалей и определение критических точек некоторых материалов на основе низкотемпературных измерений

E.M. Aпфельбаум, В.С. Воробьев

Объединенный Институт Высоких Температур РАН, г. Москва, Россия, apfel\_e@mail.ru

Предлагается метод симметризации кривой сосуществования жидкость-пар. Он основан на введении «решеткообразной» плотности в виде *x*= *ρ*1/(*ρ*1 + *ρ*2), где *ρ*1, и *ρ*2 — плотности вдоль бинодали жидкость-газ. Симметричная фазовая диаграмма строится на основе экспериментальных данных и данных численного моделирования для реальных веществ и моделей (благородные газы, многоатомные молекулы, органические вещества, металлы и модели Ван-дер-Ваальса и Леннарда-Джонса). Показано. что после симетризации давление и температура удовлетворяют некоторым новым соотношениям подобия [1].

Излагается метод нахождения критических точек и построения бинодалей жидкость-газ для металлических элементов [2]. Учитывается неаналитическое поведение в окрестности критической точки и асимптотика Клапейрона — Клаузиуса при низких температурах. Данный подход обеспечивает хорошее согласие с экспериментальными данными для широкого набора неметаллических веществ, ртути и щелочных металлов, для которых бинодали и критические параметры измерены. Были рассчитаны бинодали и критические точки для ряда металлов (Al, Cu, Fe и Zr), для которых измерялись только низкотемпературные участки бинодалей. Показано, что метод дает приемлемую точность для измеренных жидкой, и особенно, для газовой ветви бинодали, вдоль которой плотность меняется на несколько порядков величины. Эти данные сопоставлялись с ранее известными оценками критических параметров. Представляется, что полученные значения критических параметров являются наиболее надежными из всех ранее представленных значений. Предлагаемый метод нахождения критических параметров достаточно прост и может быть использован и для других металлических элементов, у которых имеется экспериментальная информация о низкотемпературных частях бинодалей.

Литература

1. E.M. Apfelbaum, V.S. Vorob’ev, J. Phys. Chem. B 2015, *119* (26), 8419–8424
2. E.M. Apfelbaum, V.S. Vorob’ev, J.Phys. Chem. B 2015, 119, 11825−11832