

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ПОДХОДЫ К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ СЖИМАЕМОСТИ И ФЛУКТУАЦИОННОГО ПАРАМЕТРА ЖИДКОСТЕЙ

Недялков Ю.В., Постников Е.Б.*

Курский гос. у-т, Курск, Россия

**ynedyalkov@gmail.com*

Тейтоподобное уравнение состояния, базирующееся на флуктуационной теории (FT-EoS) $\rho = \rho_0 + k^{-1} \log [k\rho_0\kappa_T^0(P - P_0) + 1]$, предложенное в работе [1], которое является средством для высокоточного предсказания плотности при высоких давлениях в различных жидких средах, от органических до ионных жидкостей [2], требует знания не только плотности ρ_0 при нормальном давлении или давлении на кривой равновесия P_0 , но также и изотермической сжимаемости и ее производной, входящей в параметр k при соответствующих условиях.

Мы рассматриваем практические программные реализации их расчета для электронных таблиц, основанную как на референтных экспериментальных данных, таких как плотность, изобарная теплоемкость, скорость звука, так и на чисто предсказательных методах, использующих данные о молекулярной структуре и параметрах и подход групповых вкладов. Последний набор методов позволяет также находить скорость звука с жидких углеводородах, основываясь на свойствах, представленных в справочных базах данных, таких как DIPPR 801 (AIChE) [3], что обсуждается в контексте молекулярной упаковки и флуктуаций плотности. В дополнение будет представлен общий алгоритм синтаксического разбора химического идентификатора SMILES с целью использования в различных методах группового вклада для расчета термодинамических величин, снабженный реализующим его набором программных процедур, не требующих от конечного пользователя программирования при их применении.

Работа поддержана грантом РФФИ No. 16-08-01203.

1. Postnikov E.B., Goncharov, A.L., Melent'ev, V.V. // Intern. J. Thermophys. 2014. V. 35. P. 2115.
2. Chorążewski M., Postnikov E.B., Jasiok B., Nedyalkov Yu.V., Jacquemin J. // Scientific Reports. 2017. V. 7: 5563.
3. Postnikov E., Nedyalkov Y, Polishuk, I. // Mendeley Data. 2018 <http://dx.doi.org/10.17632/zshnj5c7v7.1>.