

Уравнения состояния NH_3 и CO_2 в рамках феноменологической теории критической точки

Рыков С.В.¹, Кудрявцева И.В.² и Рыков В.А.^{2,®}

¹ Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна, Большая Морская 18, Санкт-Петербург, 191186, Россия

² Университет ИТМО, Кронвергский 49, Санкт-Петербург, 197101, Россия

® rykov-vladimir@rambler.ru

Для NH_3 и CO_2 разработаны фундаментальные уравнения состояния (ФУС) в форме свободной энергии Гельмгольца. Рабочие диапазоны уравнений состояния (УС): для NH_3 от тройной точки до 1000 К и 110 МПа; для CO_2 – до 1000 К и 800 МПа. В основу подхода положена феноменологическая теория (ФТ) критической точки (КТ) [1], связывающая энтропию с коэффициентом изотермической сжимаемости, изохорной и изобарной теплоемкостью. В рамках ФТ [1] и разработано используемое в данной работе выражение для свободной энергии Гельмгольца, которое удовлетворяет в окрестности КТ масштабной теории, а в регулярной области переходит в УС вириального вида. В структуру ФУС входит сингулярная составляющая, которая обеспечивает выполнение в асимптотической окрестности КТ степенных законов масштабной теории и для расчета параметров которой не нужно привлекать опытные данные о свойствах исследуемого вещества, кроме ацентрического фактора и критического фактора сжимаемости [2,3]. Проведено сравнение предложенного ФУС: для NH_3 , с ФУС Gao и др. (2023), УС Sengers и Edison (1999), таблицами ГСССД Голубева (1978), Клецкого (1978), Рыкова и др. (2009); для CO_2 с ФУС Span и Wagner (1996), УС Безверхого и др. (2020), УС Kiselev и Ely (2007).

[1] Kudryavtseva I V and Rykov S V 2024 *Russ. J. Phys. Chem. A* **98** 2461–2474

[2] Rykov S V and Kudryavtseva I V 2025 *Russ. J. Phys. Chem. A* **99** 659–668

[3] Лысенков В Ф и Рыков В А 1991 *ТВТ* **29** 1236–1238