

МНОГОКОМПОНЕНТНАЯ ВЕРСИЯ ЗАМЫКАНИЯ HMSA ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ УДАРНЫХ АДИАБАТ CO₂, N₂ и O₂

А. А. Анিকেев¹, Ю. А. Богданова², С. А. Губин³

Аннотация: Как отталкивающие, так и притягивающие молекулярные взаимодействия влияют на ударно-волновое сжатие смесей C_xN_yO_z. Вследствие этого требуется точное уравнение состояния с широким диапазоном применимости для моделирования ударных адиабат таких систем. Эта задача может быть решена с помощью самосогласованного приложения Орнштейна–Цернике на основе теории интегральных уравнений для функции распределения (ИУр). Как известно, замыкающее уравнение HMSA (hypernetted chain-softcore mean spherical approximation) для ИУр на основе гибридного гиперсетевого цепного мягкоядерного среднесферического приближения обеспечивает точные результаты для жидкостей и газов при высоких давлениях. К сожалению, это замыкание было разработано для одного компонента. Для моделирования смесей диссоциировавших продуктов ударной волны с помощью ИУр обычно используется эффективная однокомпонентная модель Ван-дер-Ваальса. Эта модель не способна воспроизвести ударную адиабату CO₂ при давлениях выше 50 ГПа. В данной работе предложено новое многокомпонентное замыкание на основе HMSA и виральной теоремы в парциальной формулировке. Оно верифицировано при помощи молекулярного Монте-Карло моделирования вплоть до давления в 160 ГПа с точностью порядка 1%–2%.

Ключевые слова: HMSA; ИУр; СКФ; уравнение состояния; диоксид углерода; азот; кислород; ударная волна; ударная адиабата; Монте-Карло

Литература

1. Анিকেев А. А., Богданова Ю. А., Викторов С. Б., Губин С. А. Расчет ударных адиабат N₂ и CO₂ с использованием многокомпонентных уравнений состояния // Горение и взрыв, 2014. Вып. 7. С. 170–174.
2. Богданова Ю. А., Губин С. А., Викторов С. Б., Анিকেев А. А. Область применимости модели эффективного однокомпонентного флюида в сравнении с точной моделью уравнения состояния двухкомпонентных систем // Горение и взрыв, 2014. Вып. 7. С. 175–180.
3. Kang H. S., Ree F. H. Thermodynamic and structural properties of strongly coupled plasma mixtures from the perturbative HNC-equation // Strongly Coupled Coulomb Systems Conference, 1997. Chestnut Hill, MA. Available at: www.osti.gov/scitech/biblio/303926 (accessed November 10, 2014).

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», anikeev_aa@mail.ru

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», bogdanova.youlia@bk.ru

³Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», gubin_sa@mail.ru

4. Zerah G., Hansen J.-P. Self-consistent integral equations for fluid pair distribution function: Another attempt // J. Chem. Phys., 1985. Vol. 84. No. 4. P. 2336–2343. doi: 10.1063/1.450397.
5. Аникеев А. А., Викторов С. Б., Губин С. А. Уравнение состояния сверхкритического флюида на основе уравнения Орнштейна–Цернике // Хим. физика, 2014. Т. 33. № 1. С. 20. doi: 10.7868/S0207401X14010038.
6. Victorov S. B., El-Rabii H., Gubin S. A., Maklashova I. V., Bogdanova Yu. A. An accurate equation-of-state model for thermodynamic calculations of chemically reactive carbon-containing systems // J. Energ. Mater., 2010. Vol. 28. No. 1. P. 35–49. doi: 10.1080/07370652.2010.491496.
7. JANAF Thermochemical Tables. Available at: www.kinetics.nist.gov/janaf.
8. Introduction to MCCCSTowhee. Available at: www.towhee.sourceforge.net.
9. Nellis W. J., Mitchel A. C., Ree F. H., Ross M., Holmes N. C., Trainor R. J., Erskine D. J. Equation of state of shock-compressed liquids: Carbon dioxide and air // J. Chem. Phys., 1991. Vol. 95. No. 3. P. 5268–5272. doi: 10.1063/1.461665.
10. Nellis W. J., Mitchel A. C. Shock compression of liquid argon, nitrogen, and oxygen to 90 GPa (900 kbar) // J. Chem. Phys., 1980. Vol. 73. No. 12. P. 6137–6145. doi: 10.1063/1.440105.
11. Nellis W. J., Radousky H. B., Hamilton D. C., Mitchell A. C., Holmes N. C., Christianson K. B., van Thiel M. Equation-of-state, shock-temperature, and electrical-conductivity data of dense fluid nitrogen in the region of dissociative phase transition // J. Chem. Phys., 1991. Vol. 94. No. 3. P. 2244–2257. doi: 10.1063/1.459895.
12. Fried L. E., Howard W. M. An accurate equation of state for the exponential-6 fluid applied to dense supercritical nitrogen // J. Chem. Phys., 1998. Vol. 109. No. 17. P. 7338–7348. doi: 10.1063/1.476520.

Поступила в редакцию 01.11.14