

Федеральное агентство по образованию
Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Казанский государственный технологический университет»

А.В. Клинов, Г.С. Дьяконов

**МЕТОД ЧАСТИЧНЫХ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ
ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
ГАЗОВ И ЖИДКОСТЕЙ**

Казань
КГТУ
2008

УДК 536.75

Клинов А.В.

Метод частичных функций распределения для расчета термодинамических свойств газов и жидкостей: монография / А.В. Клинов, Г.С. Дьяконов. – Казань: Изд-во Казан.гос.технол.ун-та, 2008.- 152 с.

ISBN 978-5-7882-0691-2

В монографии представлен один из перспективных современных методов молекулярно-статистической теории – метод частичных функций распределения. Рассмотрены основы этого метода и его современное состояние. Приводятся эффективные алгоритмы решения интегральных уравнений для расчета частичных функций распределения и определения на их основе различных термодинамических свойств газов и жидкостей, как в однофазном состоянии, так и в условиях фазовых равновесий различных типов.

Печатается по решению редакционно-издательского совета Казанского государственного технологического университета

Рецензенты: д.т.н., проф. Р.Г. Тхавутдинов
д.т.н., проф. Ю.В. Ваньков

ISBN 978-5-7882-0691-2

© Клинов А.В., Дьяконов Г.С., 2008

© Казанский государственный
технологический университет, 2008.

ОГЛАВЛЕНИЕ.

Введение	4
Глава 1. Молекулярно-статистическое описание макросвойств газов и жидкостей	8
1.1 Методы численного эксперимента	9
1.2 Метод частичных функций распределения	20
1.3 Межмолекулярные взаимодействия и модели межмолекулярных потенциалов	32
Глава 2. Системы с центральными межмолекулярными взаимодействиями	44
2.1 Интегральное уравнения ОЦ для расчета двухчастичных функций распределения и способы его замыкания	44
2.2 Численные методы решения уравнения ОЦ	45
2.3 Термодинамические свойства в однофазном состоянии	51
2.4 Полярные системы	59
2.5 Фазовые равновесия	62
2.5.1 Равновесие пар-жидкость	65
2.5.2 Равновесие газ-жидкость. Суб- и сверхкритическая растворимость	78
2.5.3 Равновесие жидкость-жидкость	89
2.5.4 Равновесие жидкость-твердое тело	92
Глава 3. Системы с нецентральными потенциалами межмолекулярного взаимодействия	94
3.1 Теория RISM и интегральные уравнения SSOZ.	94
3.2 Метод расчета межмолекулярной функции распределения	107
3.3 Описание термодинамических свойств молекулярных флюидов на основе многочастичных потенциалов взаимодействия	126
Заключение	140
Список литературы	141