

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФУЛЛЕРИТА C<sub>60</sub>

Рехвиашвили С.Ш.

Институт прикладной математики и автоматизации, Нальчик, Россия

E-mail: rsergo@mail.ru

В работе в рамках квантово-статистического метода выведены новое выражение для изохорной теплоемкости и уравнение состояния фуллерита с учетом колебательно-вращательного и внутримолекулярного вкладов [1,2].

Полученные формулы содержат интегралы типа интеграла Дебая, которые необходимо вычислять с помощью численных методов.

Изохорная теплоемкость:

$$C_V = C_{V1} + C_{V2}, \quad (1)$$

$$C_{V1} = 9R \left( \frac{\theta_1}{T} \right)^2 \int_0^1 \frac{[\exp(-2x\theta_1/T) + 6 \exp(-x\theta_1/T) + 1] \exp(-x\theta_1/T) x^4 dx}{[1 - \exp(-x\theta_1/T)]^2 [1 + \exp(-x\theta_1/T)]^2},$$

$$C_{V2} = 540R \left( \frac{\theta_2}{T} \right)^2 \int_0^1 \frac{\exp(-x\theta_2/T) x^4 dx}{[1 - \exp(-x\theta_2/T)]^2}.$$

Уравнение состояния:

$$p = \frac{B}{2} \left[ \left( \frac{V_0}{V} \right)^5 - \left( \frac{V_0}{V} \right)^3 \right] + \frac{\gamma_1 E_1 + \gamma_2 E_2}{V}, \quad (2)$$

$$E_1 = 9R\theta_1 \left[ \frac{3}{8} - \int_0^1 \frac{\exp\left(-\frac{\theta_1}{T}x\right) \left( 3 \exp\left(-\frac{\theta_1}{T}x\right) + 1 \right) x^3 dx}{\exp\left(-\frac{2\theta_1}{T}x\right) - 1} \right],$$

$$E_2 = 540R\theta_2 \left( \frac{1}{8} - \int_0^1 \frac{\exp\left(-\frac{\theta_2}{T}x\right) x^3 dx}{\exp\left(-\frac{\theta_2}{T}x\right) - 1} \right), \quad \gamma_i = -\frac{\partial \ln \theta_i}{\partial \ln V}, \quad \theta_i = \theta_{0i} \left( \frac{V_0}{V} \right)^{\gamma_i} \quad (i=1,2).$$

В приведенных формулах используются следующие обозначения:  $R$  – газовая постоянная,  $\gamma_i > 0$  – аналоги параметра Грюнайзена, отвечающие за колебательно-вращательный ( $i=1$ ) и внутримолекулярный вклады ( $i=2$ ),  $V_0 = 4.4 \cdot 10^{-4}$  м<sup>3</sup>/моль – равновесный объем,  $\theta_{01} = 47$  К и  $\theta_{02} = 1630$  К – характеристические температуры при  $V = V_0$ .

С помощью формул (1) и (2) проведены численные расчеты, которые хорошо согласуются с известными экспериментальными данными.

## Список использованных источников

1. Рехвиашвили С.Ш. // Физика твердого тела. 2013. Т.55. №7. С.1422-1424.
2. Рехвиашвили С.Ш. // Физика твердого тела. 2017. Т.49. №4 (в печати).