Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 10

ТВЕРЬ 2018

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

www.physchemaspects.ru

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2018. – Вып. 10. – 708 с.

ISBN 978-5-7609-1395-1

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-1395-1

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2018

© Тверской государственной
университет, 2018

УДК 536.712; 536.752

К РАСЧЕТУ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КСЕНОНА

Р.А. Магомедов¹, Э.Н. Ахмедов¹, Р.Р. Мейланов¹, В.Д. Бейбалаев^{1,2}, А.А. Аливердиев^{1,2}

¹ФГБУН «Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра
Российской академии наук»

367030, Махачкала, пр-т Шамиля, 39-а

²ФГБОУ ВО «Дагестанский государственный университет»

367000, Махачкала, ул. Гаджиева, 43-а

ramazan_magomedov@rambler.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.446

Аннотация: На основе обобщения термодинамики в производных дробного порядка и полученных аналитических выражений с учетом второго вириального коэффициента B проведен расчет теплофизических характеристик инертного газа ксенона Xe : энтропии S и изохорной теплоемкости C_V . В статье приведен расчет теплофизических параметров ксенона при температурах 500, 1000, 1400, 2000 К и интервале давлений от 0,1 до 90 МПа.

Ключевые слова: производная дробного порядка, фрактальное уравнение состояния, энтропия, изохорная теплоемкость.

1. Введение

В основе математического аппарата традиционной термодинамики и статистической физики лежит гипотеза молекулярного хаоса. При этом постулируется близкое действие молекул и отсутствие «памяти» в актах столкновений частиц [1], что далеко не всегда оправдано. Необходимость учета эффектов нелокальности в описании неравновесных процессов привела к развитию принципиально новых методов анализа, в частности, основанных на применении математического аппарата дифференцирования дробного порядка – дробного исчисления [2-4]. Действительно, переход от обычных производных к производным дробного порядка представляет собой один из естественных способов учета принципа локального неравновесия. В этом случае обобщение преобразования Лежандра для пары термодинамических переменных, например, для температуры и энтропии:

$$d(TS) = TdS + SdT \quad (1)$$

и может быть обобщено в форме

$$d^\alpha(TS) = \frac{S^{1-\alpha} \cdot T}{\Gamma(2-\alpha)} dS^\alpha + \frac{T^{1-\alpha} \cdot S}{\Gamma(2-\alpha)} dT^\alpha, \quad (2)$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция (интеграл Эйлера второго рода), $dx^\alpha = (dx)^\alpha / \Gamma(1+\alpha)$ – «обобщенное» бесконечно малое приращение независимой переменной, производные дробного порядка произвольной функции от двух переменных определены как

$$\frac{\partial^\alpha L(x, y)}{\partial x^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\partial}{\partial x} \int_0^x \frac{L(\xi, y)}{(x-\xi)^\alpha} d\xi, \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad [2], \quad \text{а полный дифференциала}$$

$$\text{задается выражением } d^\alpha L(x, y) = \frac{\partial^\alpha L(x, y)}{\partial x^\alpha} dx^\alpha + \frac{\partial^\alpha L(x, y)}{\partial y^\alpha} dy^\alpha.$$

Показатель дробного порядка по термодинамическому параметру α в выражении (2) может принимать значения от нуля до единицы, и при $\alpha=1$ выражения (1) и (2) становятся тождественными. Таким образом, переход к классической термодинамике Карно, Клаузиуса и Гельмгольца является частным случаем «фрактальной» термодинамики, при равенстве показателя производной единице.

2. Результаты и обсуждение

В наших недавних работах [5-8] продемонстрировано, что исходя из выражения для статистической суммы можно вывести однопараметрическое уравнение состояния и получить аналитические выражения для термодинамических характеристик. Таким образом, на основе экспериментально измеренных значений P, V, T и полученного однопараметрического «фрактального» уравнения состояния можно определить значение показателя производной дробного порядка, и далее рассчитать термодинамические характеристики. Это позволяет учесть нелокальные эффекты в термодинамических процессах. Более того, переход к производным дробного порядка не является формальным математическим переходом, а связан с фундаментальными аспектами физики систем с выраженными эффектами памяти и пространственных корреляций. Однопараметрическое фрактальное уравнение состояния может позволить рассчитать (предсказать) теплофизические параметры в образующихся нанокластерах ксенона в рабочей зоне реактора и их влияние на реактивность, которое обусловлено поглощением тепловых нейтронов в данных областях. В реальном эксперименте невозможно измерить теплофизические параметры ксенона при таких высоких температурах и давлениях в связи с влиянием радиоактивности на измерительную аппаратуру (оборудование) и экспериментатора.

В настоящей работе на основе обобщенной термодинамики в дробном исчислении проведен расчет энтропии и теплоемкости для ксенона, используя параметр α (показатель дробного порядка по термодинамическому параметру), вычисленный из фрактального уравнения состояния.

Как было нами показано в [5], фрактальное уравнение состояния с учетом второго вириального коэффициента имеет вид:

$$P = \rho R_{\Gamma} T \left\{ 1 + \rho B + (1 - \alpha) \cdot \left[\ln \left(\frac{eM}{\rho N_A} \left[\frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right]^{3/2} \right) + \psi(1) - \psi(2 - \alpha) - \rho B \right] \right\}, \quad (3)$$

где P – давление, ρ – плотность, $R_{\Gamma} = R/M$ – удельная газовая постоянная, рассчитываемая для каждого вещества из универсальной газовой постоянной R и молярной массы M , m – масса атома, e – экспонента, N_A – постоянная Авогадро, k – постоянная Больцмана, $\hbar$ – постоянная Планка, $\psi(x)$ – пси-функция Эйлера: $\psi(x) = \frac{d}{dx} \ln \Gamma(x) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)}$.

При этом аналитические выражения для энтропии S и изохорной теплоемкости C_V имеют вид:

$$S = R_{\Gamma} \left\{ \ln \left[\frac{eM}{\rho N_A} \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right] + \frac{3}{2} \left[\frac{1}{2 - \alpha} \right] + \psi(2) - \psi(2 - \alpha) \right\} - \quad (4)$$

$$- R_{\Gamma} \frac{\rho}{M} \left\{ b - (1 - \alpha) \frac{5 - 2\alpha}{(2 - \alpha)(3 - \alpha)} \frac{a}{N_A kT} \right\},$$

$$C_V = \frac{3}{2} \frac{R_{\Gamma}}{\Gamma(2 - \alpha)} \left[1 - \frac{18P_c b^2}{N_A kT} \right] + \quad (5)$$

$$+ \frac{3}{2} \frac{R_{\Gamma}(1 - \alpha)}{\Gamma(2 - \alpha)} \left[\ln \left(\left(\frac{eM}{\rho N_A} \right)^{2/3} \frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right) - 1 - \rho b \left(\frac{2}{3} - \frac{18P_c b^2}{N_A kT} \right) \right],$$

где $B(T) = b - \frac{a}{kT}$ – второй вириальный коэффициент, a и b – постоянные Ван-дер-Ваальса, P_c – критическое давление.

Расчетные значения теплофизических параметров инертного газа – ксенона Xe : энтропии и изохорной теплоемкости соответственно с формулами (4) и (5) с использованием коэффициента дифференцирования дробного порядка, полученного по табличным данным из выражения (3) (обратная задача решалась с привлечение программной среды MathCAD), представлены в Таблице.

3. Заключение

Анализ представленных в таблице результатов показывает, что расчетные значения теплофизических характеристик ксенона достаточно хорошо согласуются с табличными (справочными) данными [9], отклонение для значений энтропии $\sim 0,02\%$, для теплоемкости – $\sim 3,5\%$, что позволяет надеяться на перспективность предлагаемого метода для расчета термодинамических характеристик веществ при высоких температурах и давлениях, близких к экстремальным.

**Физико-химические аспекты изучения кластеров,
наноструктур и наноматериалов**

Таблица. Теплофизические параметры ксенона Xe

P , МПа	ρ , кг/м ³	α	$S \times 10^3$, Дж/(кг·К) [9]	$S \times 10^3$, Дж/(кг·К)	$C_V \times 10^3$, Дж/(кг·К) [9]	$C_V \times 10^3$, Дж/(кг·К)
$T = 500 \text{ K}, B = -3,034 \cdot 10^{-4} \text{ м}^3/\text{кг}$ [10]						
0,1	3,16	0,99998	1,374	1,37402	0,095	0,09501
1,0	31,87	0,99996	1,227	1,22699	0,096	0,09503
2,0	64,31	0,99990	1,181	1,18101	0,096	0,09509
3,0	97,33	0,99982	1,154	1,15402	0,097	0,09517
4,0	130,94	0,99972	1,134	1,13403	0,098	0,09527
5,0	165,13	0,99961	1,118	1,11807	0,099	0,09537
6,0	199,91	0,99947	1,104	1,10413	0,099	0,09550
8,0	271,23	0,99913	1,082	1,08229	0,101	0,09581
10,0	344,82	0,99868	1,064	1,06456	0,102	0,09621
$T = 1000 \text{ K}, B = 1,165 \cdot 10^{-4} \text{ м}^3/\text{кг}$ [10]						
0,1	1,58	0,99999	1,484	1,48399	0,095	0,09487
1,0	15,77	0,99999	1,338	1,33799	0,095	0,09487
5,0	78,27	0,99999	1,235	1,23501	0,095	0,09487
10,0	155,03	0,99997	1,189	1,18902	0,096	0,09502
20,0	303,43	0,99967	1,142	1,14204	0,097	0,09532
30,0	444,30	0,99910	1,114	1,11415	0,098	0,09587
40,0	577,16	0,99830	1,093	1,09338	0,098	0,09662
$T = 1400 \text{ K}, B = 2,173 \cdot 10^{-4} \text{ м}^3/\text{кг}$ [10]						
0,1	1,13	0,99999	1,537	1,53698	0,095	0,09499
1,0	11,25	0,99999	1,391	1,39100	0,095	0,09499
5,0	55,76	0,99999	1,289	1,28745	0,095	0,09499
10,0	110,25	0,99999	1,244	1,24157	0,096	0,09499
20,0	215,39	0,99997	1,199	1,19900	0,096	0,09502
30,0	315,49	0,99976	1,172	1,17199	0,096	0,09524
40,0	410,70	0,99944	1,152	1,15195	0,097	0,09556
50,0	501,21	0,99901	1,137	1,13699	0,097	0,09598
60,0	587,26	0,99848	1,124	1,12399	0,098	0,09649
$T = 2000 \text{ K}, B = 2,832 \cdot 10^{-4} \text{ м}^3/\text{кг}$ [10]						
0,1	0,79	0,99999	1,594	1,59398	0,095	0,09499
1,0	7,88	0,99999	1,448	1,44799	0,095	0,09499
5,0	39,07	0,99999	1,346	1,34599	0,095	0,09499
10,0	77,35	0,99999	1,301	1,30098	0,095	0,09499
20,0	151,57	0,99999	1,257	1,25698	0,096	0,09499
30,0	222,81	0,99999	1,231	1,23098	0,096	0,09499
40,0	291,21	0,99988	1,212	1,21199	0,096	0,09512
50,0	356,93	0,99971	1,197	1,19699	0,096	0,09529
70,0	480,87	0,99923	1,175	1,17500	0,097	0,09579
90,0	595,73	0,99867	1,158	1,15801	0,097	0,09645

Полученная погрешность зависит от точности физических констант, входящих в аналитические выражения и возможных допущений при их выводе. Необходимость в таких данных возникает в связи со сложностью

проведения эксперимента при таких высоких температурах и давлениях, и необходимостью знания соответствия значений P, ρ, T – (или P, V, T –) данных, их диаграмм и свойств для применения в теплотехнике и ядерной энергетике.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 16-08-00067-а).

Библиографический список:

1. **Боголюбов, Н.Н.** Избранные труды по статистической физике / Н.Н. Боголюбов. – М.: Изд-во МГУ, 1979. – 34 с.
2. **Нахушев, А.М.** Дробное исчисление и его применение / А.М. Нахушев. – М. Физматлит, 2003. – 272 с.
3. **Uchaikin, V.V.** Fractional derivatives for physicists and engineers/ V.V. Uchaikin. – Beijing - Berlin - Heidelberg: Higher Education Press, Springer-Verlag, 2013. – 385 p.
4. **Herrmann, R.** Fractional calculus: an introduction for physicists / R. Herrmann. – 2nd ed. New Jersey - London - Singapore - Beijing - Shanghai - Hong Kong - Taipei - Chennai: World Scientific Publishing Company, 2014. – 500 p.
5. **Мейланов, Р.П.** Термодинамика в дробном исчислении / Р.П. Мейланов, Р.А. Магомедов // Инженерно-физический журнал. – 2014. – Т. 87. – № 6. – С. 1455-1465.
6. **Magomedov, R.A.** Calculation of multicomponent compound properties using generalization of thermodynamics in derivatives of fractional order / R.A. Magomedov, R.P. Meilanov, E.N. Akhmedov, A.A. Aliverdiev // Journal of Physics: Conference Series. – 2016. – V. 774. – № 1. – P. 012025-1-0120245-6.
7. **Magomedov, R.A.** To the fractal equation of state / R.A. Magomedov, R.R. Meilanov, R.P. Meilanov, et al. // Journal of Physics: Conference Series. – 2017. – V. 891. – I. 1. – P. 012331-1-012331-6.
8. **Magomedov, R.A.** Generalization of thermodynamics in fractional order derivatives and calculation of heat-transfer properties of noble gases / R.A. Magomedov, R.R. Meilanov, R.P. Meilanov, et al. // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. – 2018. – V. 133 – I. 2. – P. 1189-1194
9. Теплофизические свойства технически важных газов при высоких температурах и давлениях: Справочник // В.Н. Зубарев, А.Д. Козлов, В.М. Кузнецов и др. – М.: Энергоатомиздат, 1989. – 232 с.
10. Физические величины. Справочник / под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 316 с.

References:

1. **Bogolyubov, N.N.** Izbrannyye trudy po statisticheskoy fizike / N.N. Bogolyubov. – М.: Izd-vo MGU, 1979. – 34 p.
2. **Nakhushev, A.M.** Drobnoye ischislenie i ego primeneniye / A.M. Nakhushev. – М. Fizmatlit, 2003. – 272 p.
3. **Uchaikin, V.V.** Fractional derivatives for physicists and engineers/ V.V. Uchaikin. – Beijing - Berlin - Heidelberg: Higher Education Press, Springer-Verlag, 2013. – 385 p.

4. **Herrmann, R.** Fractional calculus: an introduction for physicists / R. Herrmann. – 2nd ed. New Jersey - London - Singapore - Beijing - Shanghai - Hong Kong - Taipei - Chennai: World Scientific Publishing Company, 2014. – 500 p.
5. **Meilanov, R.P.** Termodinamika v drobnom ischislenii / R.P. Meilanov, R.A. Magomedov // Inzhenerno-fizicheskij zhurnal. – 2014. – V. 87. – no. 6. – P. 1455-1465.
6. **Magomedov, R.A.** Calculation of multicomponent compound properties using generalization of thermodynamics in derivatives of fractional order / R.A. Magomedov, R.P. Meilanov, E.N. Akhmedov, A.A. Aliverdiev // Journal of Physics: Conference Series. – 2016. – V. 774. – № 1. – P. 012025-1-0120245-6.
7. **Magomedov, R.A.** To the fractal equation of state / R.A. Magomedov, R.R. Meilanov, R.P. Meilanov, et al. // Journal of Physics: Conference Series. – 2017. – V. 891. – I. 1. – P. 012331-1-012331-6.
8. **Magomedov, R.A.** Generalization of thermodynamics in fractional order derivatives and calculation of heat-transfer properties of noble gases / R.A. Magomedov, R.R. Meilanov, R.P. Meilanov, et al. // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. – 2018. – V. 133 – I. 2. – P. 1189-1194
9. Teplofizicheskie svoystva tekhnicheskii vazhnykh gazov pri vysokikh temperaturah i davleniyah: Spravochnik // V.N. Zubarev, A.D. Kozlov, V.M. Kuznecov i dr. – M.: Energoatomizdat, 1989. – 232 p.
10. Fizicheskie velichiny. Spravochnik / pod red. I.S. Grigor'eva, E.Z. Mejliхова. – M.: Energoatomizdat, 1991. – 316 p.

CALCULATIONS OF THERMOPHYSICAL CHARACTERISTICS OF XENON

R.A. Magomedov¹, E.N. Akhmedov¹, R.R. Meilanov¹, V.D. Beybalaev^{1,2}, A.A. Aliverdiev^{1,2}

¹*Institute for Geothermal Research of the Dagestan Scientific Center of RAS*

²*Dagestan State University*

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.446

Abstract: On the basis of a generalization of thermodynamics in fractional derivatives and some analytical expressions obtained, taking into account the second virial coefficient B , we calculated thermophysical characteristics of a noble gas xenon Xe : entropy S and isochoric heat capacity C_V . The calculated thermophysical parameters of exemplifying on xenon at temperatures 500, 1000, 1400, 2000 K in the pressure range from 0,1 to 90 MPa are given.

Keywords: *thermodynamics, fractional derivative, fractal equation of state, entropy, isochoric heat capacity.*

Магомедов Рамазан Абдуллаевич – старший научный сотрудник, ФГБУН «Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра Российской академии наук»

Ахмедов Энвер Нариманович – младший научный сотрудник, ФГБУН «Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра Российской академии наук»

Мейланов Рашид Русланович – младший научный сотрудник, ФГБУН «Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра Российской академии наук»

Бейбалаев Ветлузин Джабраилович – к.ф.-м.н., старший научный сотрудник, ФГБУН «Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра Российской академии наук», доцент кафедры прикладной математики ФГБОУ ВО «Дагестанский государственный университет»

Аливердиев Абутраб Александрович – д.ф.-м.н., главный научный сотрудник, ФГБУН «Институт проблем геотермии Дагестанского научного центра Российской академии наук», профессор кафедры прикладной математики ФГБОУ ВО «Дагестанский государственный университет»

Ramazan A. Magomedov – Senior Researcher, Institute for Geothermal Research of the Dagestan Scientific Center of RAS

Enver N. Akhmedov – Junior Researcher, Institute for Geothermal Research of the Dagestan Scientific Center of RAS

Rashid R. Meilanov – Junior Researcher, Institute for Geothermal Research of the Dagestan Scientific Center of RAS

Velugin D. Beybalaev – Ph. D., Senior Researcher, Institute for Geothermal Research of the Dagestan Scientific Center of RAS, Docent of the Department of Applied Mathematics, Dagestan State University

Abutrab A. Aliverdiev – Dr. Sc., Chief Researcher, Institute for Geothermal Research of the Dagestan Scientific Center of RAS, Professor of the Department of Applied Mathematics, Dagestan State University