

УДК 536.758+539.311 И. И. Наркевич, проф., д-р физ.-мат. наук;  
Г. С. Бокун, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ  
НАНОЧАСТИЦ С ПОМОЩЬЮ КОРРЕЛЯТИВНЫХ  
ФУНКЦИЙ УСЛОВНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ.  
ДВУХУРОВНЕВЫЙ МОЛЕКУЛЯРНО-СТАТИСТИЧЕСКИЙ  
ПОДХОД ДЛЯ РАСЧЕТА ФЛУКТУАЦИЙ**

Для исследования структуры и термодинамических характеристик наночастиц будем использовать общие статистические формулы, полученные в рамках двухуровневого молекулярно-статистического подхода [1], который является модификацией метода условных распределений [2] и используется при описании свойств неоднородных молекулярных систем с помощью потенциалов средних сил. Одночастичные потенциалы, являющиеся функционалами от искомым полей плотности, определяют вид младших условных функций распределения. Они удовлетворяют достаточно сложной системе интегральных уравнений, решение которой требует выполнения большого объема численных расчетов.

Для реализации последних сначала была построена алмазная решетка. С помощью представлений физики твердого тела об элементарной, примитивной и молекулярной ячейках выделена структура наночастицы как ограниченный фрагмент алмазной структуры с центрально симметричным распределением узлов. Свойства образованной структуры характеризуются зависимостью ее характеристик от расстояния до центра частицы. В нашей теории применяются три параметра – это средняя заселенность узлов решетки; параметр, характеризующий степень ее локальной деформации; амплитуда колебаний атомов относительно своих узлов. В данной работе рассмотрено, как изменяется величина локализации колебаний частиц вокруг своих узлов по мере удаления от центра наночастицы. Исследовано явление спонтанной деслокализации, возникающей на поверхности наночастицы и диффундирующей внутрь ее объема с увеличением температуры и уменьшением давления.

**ЛИТЕРАТУРА**

1. Наркевич, И.И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: дис. ... д-ра физ.-мат. наук / И.И. Наркевич. – СПб., 1993. – 223 л.
2. Ротт, Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. Метод коррелятивных функций условных распределений / Л. А. Ротт. – М., 1979. – 280 с.