

УДК 536.9+539.77

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**

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 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.

С помощью представлений физики твердого тела об элементарной, примитивной и молекулярной ячейках рассмотрена структура наночастицы как фрагмент алмазной структуры с центрально симметричным распределением узлов, содержащий ограниченное число координационных сфер. Для выполнения исследований составлена программа расчета координат узлов в наночастице, принадлежащих координационным сферам разных радиусов. Свойства выделенной структуры характеризуются зависимостью ее характеристик от расстояния до центра наночастицы. В развиваемой теории для описания структуры применяются три параметра: средняя заселенность узлов решетки, смещение узлов в связи с ее деформацией и среднеквадратичное отклонение молекул относительно узлов. В данной работе рассмотрено изменение величины среднеквадратичного отклонения молекул по мере удаления от центра наночастицы. Исследовано явление делокализации функции распределения, возникающей на поверхности наночастицы, которое приводит к ее плавлению при соответствующей температуре.

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.