

КОМПЬЮТЕРНОЕ ПОСТРОЕНИЕ АЛМАЗНОЙ РЕШЕТКИ И ЕЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДЛЯ РАСЧЕТА УНАРНЫХ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ АТОМОВ УГЛЕРОДА В НАНОЧАСТИЦЕ

Ранее выполненная алгоритмизация [1] двухуровневого молекулярно-статистического подхода [2] использована для разработки компьютерной программы по расчету унарных функций распределения молекул в наночастицах с гранецентрированной решеткой [3] и атомов углерода в алмазоподобных сферических наночастицах. С помощью этих функций рассчитаны среднеквадратичные отклонения σ_l атомов углерода от узлов алмазной решетки (табл.) и обнаружена ее пространственная релаксация вблизи границы сферической наночастицы.

Таблица – Зависимость радиусов $b_l = \sqrt{5/3}\sigma_l$ температуры $\theta = kT/\varepsilon$ и номеров l координационных сфер для наночастицы при общем числе сфер $L = 15$ (ε – энергетический параметр потенциала Леннард – Джонса)

θ	l							
	0	2	4	6	8	10	12	ε
0,05	0,041	0,041	0,041	0,076	0,126	0,221	0,789	$1,377 \cdot 10^{-4}$
0,06	0,046	0,046	0,046	0,047	0,192	0,225	0,835	$1,319 \cdot 10^{-4}$
0,08	0,663	0,667	0,669	0,676	0,687	0,695	0,706	$4,697 \cdot 10^{-4}$

Одновременно при релаксации решетки наблюдается делокализация приповерхностных атомов, которая приводит к плавлению наночастиц разных размеров при различных температурах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бокун Г. С. Алгоритмизация двухуровневого молекулярно-статистического подхода для расчета параметров кристаллических наночастиц со структурой алмазной решетки // Труды БГТУ: №6(188). 2016. С. 71-75.
2. Наркевич И. И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.14. СПб. 1993. 242 л.
3. Наркевич И. И., Квасов Н. Т., Козич Е. Ю. Двухуровневое молекулярно-статистическое изучение структуры и термодинамических характеристик однородных макроскопических систем и сферических наночастиц // Труды БГТУ: №6(188). 2016. С. 61-65.