

УДК 538.911

И. И. Наркевич, проф., д-р физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

**СТАТИСТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ УНАРНЫХ  
ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ АТОМОВ ИЛИ МОЛЕКУЛ  
В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЕ С ЗАДАННЫМ  
РАДИАЛЬНЫМ ПРОФИЛЕМ СРЕДНЕЙ ПЛОТНОСТИ**

В рамках двухуровневого молекулярно-статистического подхода [1], в котором одновременно используется метод ББГКИ, метод условных распределений Л.А. Ротта [2] и метод термодинамических функционалов плотности [3], проведены расчеты микроструктуры сферических кристаллических наночастиц, имеющих 6 координационных сфер, которым принадлежат 84 узла ГЦК решетки, так что при числе заполнения  $n = 1$ , наночастицы могут иметь 85 молекул, одна из которых находится в центральной ячейке, т. е. в центре наночастицы.

В результате решения ранее полученной системы интегральных уравнений [4] рассчитано поле радиального смещения узлов, вызванное деформацией исходной ГЦК решетки в сферической наночастице с заданным радиальным профилем чисел заполнения микроячеек этой решетки. Одновременно рассчитаны среднеквадратичные отклонения атомов или молекул простых веществ от новых (смещенных) узлов решетки. Получен соответствующий радиальный профиль среднеквадратичных отклонений, характеризующий форму унарных функций распределения всех частиц в окрестности смещенных узлов, которые указывают на пространственную релаксацию решетки в малых системах (наночастицах), имеющих общую границу с окружающей средой.

**ЛИТЕРАТУРА**

1. Наркевич, И. И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.14. СПб., 1993. 242 л.
2. Ротт, Л. А. Статистическая теория молекулярных систем. М.: Наука, 1979. 280 с.
3. Evans R. The nature of the liquid-vapour interface and other topics in the statistical mechanics of nonuniform, classical fluids // *Advances in Physics*. 1979. Vol. 28, no. 2. P. 143–200.
4. 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.