

УДК 536.9+536.77

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

**ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ РАЗМЕРА СФЕРИЧЕСКИХ
КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ
НА ИХ СТРУКТУРУ И ТЕМПЕРАТУРУ ПЛАВЛЕНИЯ
В РАМКАХ ДВУХУРОВНЕВОГО МОЛЕКУЛЯРНО-
СТАТИСТИЧЕСКОГО ПОДХОДА**

Для статистического исследования структуры сферических наночастиц в данной работе используется ранее полученная система уравнений, позволяющая рассчитывать среднеквадратичные отклонения σ молекул из узлов деформированной кристаллической решетки наночастицы, узлы которой являются центрами одночастичной плотности вероятности распределения молекул в микроячейках объемами ω_i ($i = 1, 2, \dots, M$) метода условных распределений. Эта система имеет следующий вид:

$$\sigma_i^2 = \int_{\omega_i} n_i r_i^2 \hat{F}_{11}(\vec{r}_i, \{b_j\}, \{n_j\}) d\omega_i, \hat{F}_{11} = A_i \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \sum_{j \neq i}^M \varphi(\rho_{ij}, \{\sigma_j\}, \{n_j\}) \right\}. \quad (1)$$

Здесь M – число узлов в решетке наночастицы; n_i – числа заполнения ячеек ω_i ; φ_{ij} – средний потенциал взаимодействия молекулы в ячейке ω_i с молекулой, распределенной равновероятно внутри сферы радиуса b_i ($b_i = \sqrt{5/3} \sigma_i$), \hat{F}_{11} – одночастичная функция условных распределений, которая согласно (1) является функцией координат в ячейке ω_i и функционалом от дискретных полей σ_j и n_j ($j = 1, 2, \dots, M$).

Среднеквадратичные отклонения σ_l в каждой ячейке ω_i , принадлежащей координационной сфере с номером l относительно центра наночастицы, одинаковы. Поэтому при вычислении суммы в выражении для \hat{F}_{11} проводим суммирование по j для заданного номера l , а затем суммируем по l . В таблице приведены значения температуры плавления $\theta_{пл}$ наночастицы, среднеквадратичные отклонения σ_l радиальные смещения узлов решетки r_l , отражающие релаксацию решетки при $n_i < 1$, т. к. в кристаллическом состоянии

$$n_i < 1 \quad (1 - n_i < 10^{-3}).$$

Таблица

l	M	R_l	$\theta_{пл}$	σ_0	σ_1	r_1	σ_2	r_2	σ_3	r_3
1	12	1,15	0,30	0,070	0,146	0,038	-	-	-	-
2	18	1,62	0,37	0,081	0,159	0,050	0,314	0,146	-	-
3	42	1,99	0,50	0,108	0,197	0,064	0,296	0,167	0,420	0,176