

Студ. Е.Ю. Козич

Науч. рук.: проф. И.И. Наркевич; ассист. Е.В. Фарафонтова
(кафедра физики, БГТУ)

**РАСЧЕТ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МОЛЕКУЛ
В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦАХ С ПОМОЩЬЮ
АППРОКСИМАЦИОННЫХ ВЫРАЖЕНИЙ
ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛОВ СРЕДНИХ СИЛ**

Введение. При статистическом изучении равновесных свойств вещества в кристаллическом состоянии необходимо учитывать специфическое строение кристаллов и характер распределения молекул в объемах примитивных ячеек соответствующих кристаллических решеток. Молекулы в кристаллах совершают колебания вблизи узлов решетки, это означает, что одночастичная функция распределения молекул сильно локализована непосредственно около этих узлов, причем амплитуда колебаний составляет порядка 10 % от параметра d решетки. Отсутствие аналитических выражений для потенциалов средних сил и функций распределения в первом F_{11} -приближении статистического метода условных распределений [1] создает значительные трудности при нахождении усредненных, т. е. интегральных характеристик отдельных молекул, групп молекул и вещества как макроскопической молекулярной системы, а также при расчете характеристик внутреннего молекулярного поля в объеме вещества, создаваемого всеми N молекулами термодинамической системы в кристаллическом состоянии. Фактически приходится проводить расчеты потенциалов средних сил численными методами с большими затратами компьютерного времени.

В данной работе для потенциалов средних сил используются ранее полученные аналитические выражения для средних потенциалов взаимодействия в кристаллическом состоянии. При их получении учитывалось, что одночастичные функции распределения \hat{F}_1 молекул вблизи узлов кристаллической решетки имеют сильно выраженные максимумы, что позволило аналитически выполнить усреднение по положениям молекулы в окрестности узлов решетки. Для этого нормированные на единицу одночастичные функции \hat{F}_1 заменяли на вспомогательные функции \hat{F}_1^* с равномерным распределением молекул внутри сфер с радиусами b_i , центры которых совпадают с узлами решетки ($i=1, 2, \dots, M$). В результате усреднения в сферической системе координат потенциала Леннард–Джонса с помощью функции \hat{F}_1^* получена формула для среднего одночастичного потенциала взаимо-

действия выделенной молекулы среды с молекулой, равномерно распределенной в некоторой ячейке решетки [2] (ρ – расстояние от молекулы до центра сферы радиуса b):

$$\Phi_{\text{ср}} = \Phi_{12} - \Phi_6 = \frac{4/3b^6 + 12b^4\rho^2 + 16,8b^2\rho^4 + 4\rho^6}{(\rho^2 - b^2)^9} - \frac{4}{(\rho^2 - b^2)^3}, \quad (1)$$

Использование средних потенциалов в качестве аппроксимационных выражений для потенциалов средних сил. В качестве примера рассмотрим расчет одночастичных функций распределения молекул в наночастицы из 43 молекул с гранецентрированной кубической решеткой (рис. 1).

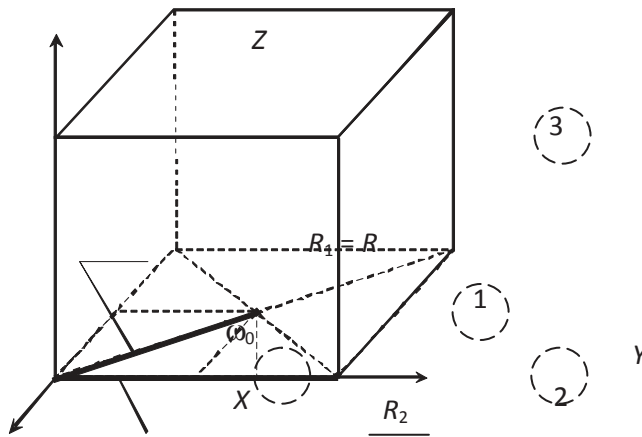


Рисунок 1 - Элементарная ячейка гранецентрированной кубической решетки (R – параметр решетки)

При изучении распределения молекул вблизи узлов решетки рассчитываем среднеквадратичные отклонения σ_i для молекул в центральной ячейке ω_0 и в ячейках ω_i , принадлежащих трем первым координационным сферам с радиусами R_i ($i = 1, 2, 3$). Для этого параметры b_i модели подбираем так, чтобы среднеквадратичные отклонения σ_i молекул от узлов были равными для функций $\mathcal{K}_1(\vec{q}_i)$ и \mathcal{K}_1^* :

$$\int_{\omega_1} r^2 \mathcal{K}_1 d\omega_i = \sqrt{\frac{3}{5}} b_i, \quad \mathcal{K}_1(\vec{q}_i) = A_i \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \sum_{j \neq i}^{42} \Phi_{ij}(\vec{\rho}_i)\right\} \Rightarrow b_i = \sqrt{5/3} \sigma_i. \quad (2)$$

Здесь $\theta = kT$ - приведенная температура, A_i - нормировка функции $\mathcal{K}_1(\vec{q}_i)$, \vec{q}_i – радиус-вектор молекулы относительно узла ячейки ω_i .

На рисунке 2 изображены профили функций $\mathcal{K}_1(\vec{q}_i)$ для наночастицы из 43 молекул с ГЦК решеткой, которые определяют распределение молекулы вблизи центрального узла наночастицы (рис. 2 а), а также молекул в ячейках первой (рис. 2 б), второй (рис. 2 в) и третьей (рис. 2 г) координационных сфер ($N = R/h$, h – шаг по x, y, z).

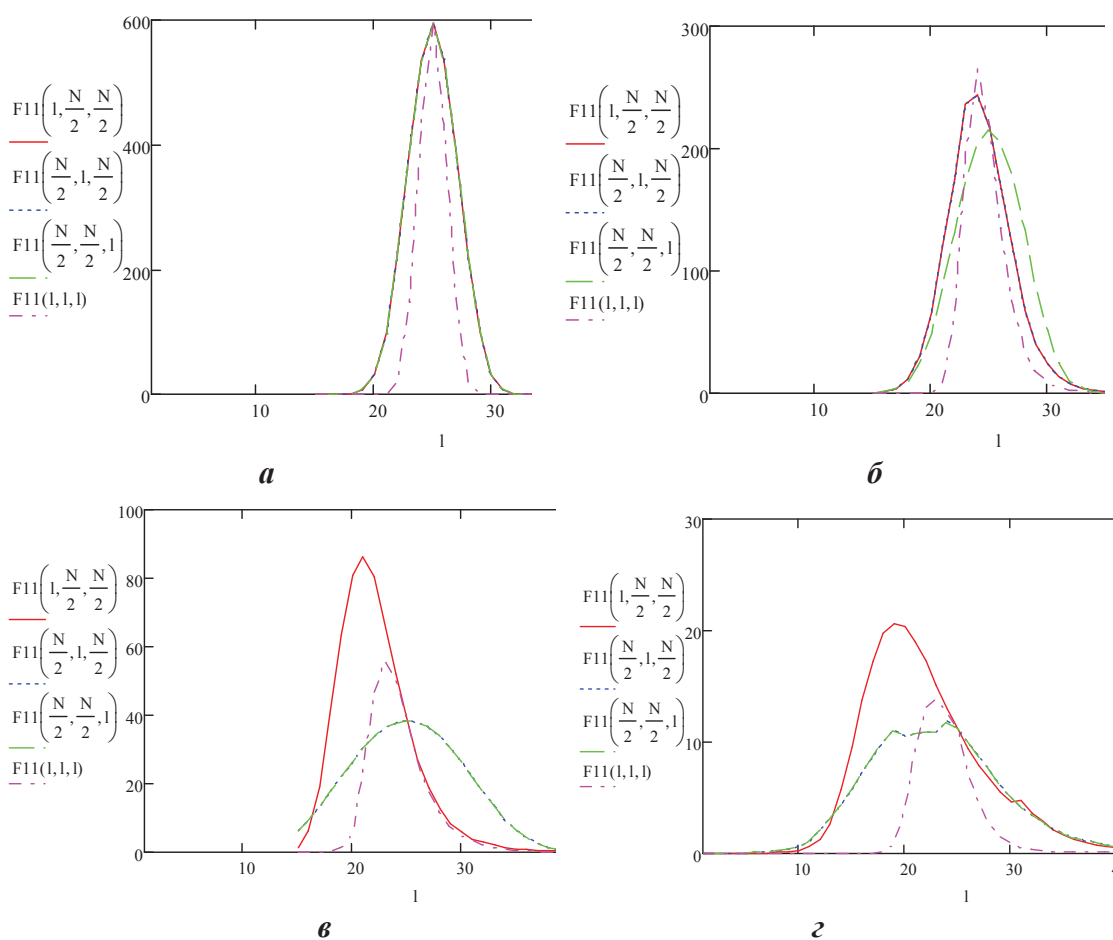


Рисунок 2 - Профили сечений функции распределения \hat{F}_1 для молекулы в центральной ячейке (а) и для молекул в ячейках первой (б), второй (в) и третьей (г) координационных сфер

Из рисунков видно, что профили функций в плоскостях, параллельных координатным плоскостям и проходящих через центры ячеек, имеют центр симметрии в узле центральной ячейки при $l = 25$ (рис. 2 а), а в остальных ячейках профили функций указывают на анизотропию в распределении молекул в окрестности узлов решетки.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ротт Л. А. Статистическая теория молекулярных систем. – М.: Наука, 1979. – 280 с.
2. Козич Е. Ю. Численно-аналитический расчёт средней энергии наночастицы в форме икосаэдра / В. Б. Клышко // 66-я НТК студентов и магистрантов: сб. науч. работ: в 4-х ч. – Минск: БГТУ, 2015. – Ч. 4. С. 75–78.