

И.И. Наркевич, проф., д-р физ.-мат. наук  
 Е.В. Фарафонтובה, ст. преп., канд. физ.-мат. наук  
 (БГТУ, г. Минск)

## РАЗРАБОТКА КОМПЬЮТЕРНОЙ ПРОГРАММЫ ДЛЯ РАСЧЕТА СТРУКТУРНЫХ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ РАЗНЫХ РАЗМЕРОВ

Ранее [1] были изложены результаты расчетов микроструктуры и термодинамических характеристик сферических кристаллических наночастиц полученные в предположении, что заполнение ячеек  $\omega_i$  и  $\omega_j$  метода условных распределений молекулами системы происходит независимо друг от друга, т. е. двухъячеечные числа заполнения  $n_{ij} \approx n_i n_j$ . В дальнейших расчетах учитывается корреляция при заполнении всевозможных пар ячеек в объеме наночастицы. В двухуровневом молекулярно-статистическом подходе используются потенциалы  $\varphi$  средних сил, которые в силу неоднородности системы являются функционалами от искомым полей плотности. В случае однокомпонентной системы интегральное уравнение для потенциалов средних сил имеет следующий вид:

$$f_{ij}(\vec{q}_i, \{n_l\}) = \frac{n_{ij}^{aa}}{n_i} f_{ij}^{(a)}(\vec{q}_i, \{n_l\}) + \frac{n_{ij}^{av}}{n_i} f_{ij} \{n_l\}. \quad (1)$$

Здесь

$$f_{ij}^{(a)}(\vec{q}_i, \{n_l\}) = \frac{\int_{\omega_j} \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \Phi(|\vec{q}_i - \vec{q}_j|)\right\} \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i, j}^M \varphi_{jk}(\vec{q}_j, \{n_l\})\right\} d\vec{q}_j}{\int_{\omega_j} \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i, j}^M \varphi_{jk}(\vec{q}_j, \{n_l\})\right\} d\vec{q}_j}, \quad (2)$$

$$f_{ij} \{n_l\} = \frac{\int_{\omega_i} \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \varphi_{ij}(\vec{q}_i, \{n_l\})\right\} \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i, j}^M \varphi_{ik}(\vec{q}_i, \{n_l\})\right\} d\vec{q}_i}{\int_{\omega_i} \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i, j}^M \varphi_{ik}(\vec{q}_i, \{n_l\})\right\} d\vec{q}_i}, \quad \theta = kT, \quad (3)$$

$$n_{ij}^{aa} \{n_l\} = n_i - n_{ij}^{av} \{n_l\}, \quad (4)$$

$$n_{ij}^{av} \{n_l\} = \frac{1}{2A_{ij}} \left\{ \left[ (n_i - n_j) A_{ij} - 1 \right] + \sqrt{\left[ (n_i - n_j) A_{ij} - 1 \right]^2 + 4n_i(1 - n_j) A_{ij}} \right\}, \quad (5)$$

$$A_{ij} = f_{ij}^{(a)}\{n_l\} - 1, \quad (6)$$

$$f_{ij}^{(a)}\{n_l\} = \frac{\int_{\omega_i} f_{ij}^{(a)}(\vec{q}_i, \{n_l\}) \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{ik}(\vec{q}_i, \{n_l\})\right\} d\vec{q}_i}{\int_{\omega_i} \exp\left\{-\frac{1}{\theta} \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{ik}(\vec{q}_i, \{n_l\})\right\} d\vec{q}_i}. \quad (7)$$

Из физических соображений ясно, что в связи с короткодействующим межмолекулярным потенциалом  $\Phi(|\vec{q}_i - \vec{q}_j|)$  потенциалы в неоднородной среде должны наиболее сильно зависеть от плотности в ближайших ячейках, окружающих выделенную пару ячеек  $\omega_i$  и  $\omega_j$ . В связи с этим, в численных расчетах достаточно учесть зависимость потенциалов  $\Phi_{ij}(\vec{q}_i, \{n_l\})$  только от чисел заполнения в ячейках  $\omega_i, \omega_j$ , принадлежащих первым трем координационным сферам и воспользоваться методикой усреднения потенциала Леннард–Джонса, которая была разработана ранее. Функционалы энтропии  $S$ , внутренней энергии  $U$  и свободной энергии  $F$  сферической наночастицы определяются по следующим формулам:

$$S\{n_p\} = -\sum_{p=1}^P Z_p \left( n_p \ln n_p + (1 - n_p) \ln(1 - n_p) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq p}}^J n_{pj} \ln G_{pj} \right), \quad (8)$$

$$U\{n_p\} = \sum_{p=1}^P Z_p \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq p}}^J (n_p n_j G_{pj} \Phi(b_p, r_{pj}, b_j)), \quad F\{n_p\} = U\{n_p\} - \theta S\{n_p\}. \quad (9)$$

Здесь  $Z_p$  – число узлов, принадлежащих координационной сфере с номером  $p$ ;  $J = 42$  – число узлов, принадлежащих трем координационным сферам с центрами, совпадающими с центром ячейки  $\omega_p$ , по узлам которых выполняется суммирование в уравнениях (8) и (9).

Учитывая вышесказанное, для решения замкнутой системы интегральных и алгебраических уравнений (1)–(9) разработана компьютерная программа с привлечением пакета Mathcad и проведены контрольные расчеты.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Наркевич, И. И. Численно-аналитический расчет равновесных характеристик наночастиц в рамках двухуровневого молекулярно-статистического метода / И. И. Наркевич, Е. В. Фарафонтон, Н. А. Липай // Наноструктуры в конденсированных средах. Сборник научных статей. 2018. Минск – С. 124–130.