

УДК 531.19; 538.911

И. И. Наркевич, Е. В. Фарафонтова

Белорусский государственный технологический университет

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

В работе используются статистические уравнения и формулы для неоднородных многокомпонентных молекулярных систем, полученные в рамках двухуровневого статистического метода, который является симбиозом метода коррелятивных функций Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ), метода условных распределений Ротта и метода термодинамических функционалов плотности. На основе общих статистических уравнений и соотношений составлена замкнутая система уравнений, описывающих микро- и макроструктуру, а также термодинамические характеристики кристаллических неоднородных систем, решение которой определяет одночастичные потенциалы средних сил. Эти потенциалы, к которым относятся одиночные наночастицы, либо системы из наночастиц разных размеров являются функционалами искомого поля унарной плотности.

В данной работе на основе ранее разработанной методики усреднения потенциала Леннарда-Джонса составлена полная система интегральных и алгебраических уравнений, позволяющая статистически рассчитать энтропию, внутреннюю энергию и свободную энергию сферических наночастиц, которые являются функционалами искомого радиального профиля унарной плотности. На ее основе разработана компьютерная программа расчета структурных и термодинамических характеристик кристаллических сферических наночастиц с заданным неоднородным радиальным профилем плотности и проведены расчеты их параметров при заданной температуре.

Ключевые слова: двухуровневый молекулярно-статистический подход, потенциал средних сил, неоднородная система, наночастица.

I. I. Narkevich, E. V. Farafontova

Belarusian State Technological University

DEVELOPMENT OF A COMPUTER PROGRAM FOR THE CALCULATION OF THE STRUCTURAL AND THERMODYNAMIC CHARACTERISTICS OF CRYSTALLINE NANOPARTICLES OF DIFFERENT SIZES

The paper uses statistical equations and formulas for heterogeneous multicomponent molecular systems obtained in the framework of the two-level statistical method. This method is based on the Bogolyubov – Born – Green – Kirkwood – Ivon (BBGKI) method of correlation, the Rott conditional distributions method, and the density thermodynamic functionals method. Based on general statistical equations and ratios, a closed system of equations is compiled that describes the micro-, macrostructure, and thermodynamic characteristics of crystalline heterogeneous systems. Its solution determines the single-particle potentials of average forces. The potentials in the case of inhomogeneous systems, such as nanoparticles or systems of nanoparticles, are functionals of the desired unary density field.

On the basis of the developed method of averaging the Lennard-Jones potential, a complete system of integral and algebraic equations has been compiled, whose solution allows calculating the entropy functionals, the internal and free energies of spherical nanoparticles. A computer program has been developed for calculating the structural and thermodynamic characteristics of a crystalline spherical nanoparticle with the desired inhomogeneous radial density profile, and its parameters are calculated at a given temperature.

Key words: two-level molecular-statistical approach, mean force potential, inhomogeneous system, nanoparticle.

Введение. Двухуровневый статистический метод [1, 2], который ранее применялся для описания равновесных свойств однородных макроскопических систем, в данной работе используется для разработки компьютерной программы расчета структурных и термодинамических параметров неоднородных систем, в частности сферических наночастиц. Он базируется на совместном использовании метода кор-

релятивных функций Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ), метода условных распределений Ротта [3] и метода термодинамических потенциалов, которые в случае неоднородных систем являются функционалами поля плотности среды. Двухуровневый молекулярно-статистический подход позволяет реализовать учет неоднородного распределения чисел заполнения n_i микрочаек

объемами ω_i ($i = 1, 2, \dots, M$), на которые в соответствии с основной идеей метода условных распределений Л. А. Ротта мысленно разделен весь объем V системы. Эти ячейки образуют гипотетическую кристаллическую решетку, причем их форма и размеры претерпевают существенные изменения вблизи границ наночастиц. При этом используется F_{11} -приближение, учитывающее множество наиболее вероятных состояний конденсированной системы из N молекул в объеме V , где в каждой микроячейке может содержаться не более одной частицы. Количество микроячеек M превышает число N частиц в наночастице так, что некоторые микроячейки с определенной вероятностью могут быть вакантными. В результате средние числа заполнения ячеек меньше единицы, а поле их распределения по объему отражает неоднородность распределения плотности наночастицы.

В процессе последовательной реализации двухуровневого статистического подхода ранее получена замкнутая система интегральных уравнений, решение которой определяет одночастичные потенциалы средних сил Φ_{ij} , которые описывают взаимодействие выделенной молекулы конденсированной среды в ячейке ω_i с другими молекулами, статистически распределенными в ячейках ω_j . Центры этих ячеек образуют соответствующую гипотетическую кристаллическую решетку – регулярную для однородных и нерегулярную для неоднородных макроскопических систем или систем из малого числа атомов или молекул (кластеров), представителями которых и являются наночастицы. В случае неоднородных систем одночастичные потенциалы Φ_{ij} являются функциями радиус-векторов \vec{q}_i и одновременно функционалами по отношению к унарному полю чисел заполнения n_k , т. е. $\Phi_{ij} = \Phi_{ij}(\vec{q}_i, \{n_k\})$ ($i, j, k = 1, 2, \dots, M$).

Основная часть. В работах [4, 5] изложены результаты, которые получены в предположении, что заполнение ячеек ω_i и ω_j молекулами или коллоидными частицами системы происходит независимо друг от друга, т. е. двухъячеечные числа заполнения $n_{ij} \approx n_i n_j$. В данной работе и последующих расчетах будем учитывать корреляцию при заполнении всевозможных пар ячеек в объеме сферических наночастиц. Потенциалы средних сил таких наночастиц являются функционалами от искомого радиального поля унарной плотности, т. е. чисел заполнения n_l (l – номер координационной сферы относительно центра наночастицы, $l = 1, 2, \dots, L$).

Для наночастицы, являющейся однокомпонентной системой с вакансиями, интегральное уравнение для потенциалов средних сил запишем в следующем виде:

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

Здесь $f_{ij}(\vec{q}_i, \{n_l\}) = \exp\{-\beta\Phi_{ij}(\vec{q}_i, \{n_l\})\}$, $\beta = 1/\theta$, $\theta = kT$, n_{ij}^{uv} – двухъячеечные числа заполнения пар ячеек с номерами i и j , которые определяют вероятность того, что частица сорта μ гипотетической двухкомпонентной системы, состоящей из реальных молекул и вакансий, находится в ячейке с номером i , а другая частица сорта ν находится в ячейке с номером j ($i, j = 1, 2, \dots, M$), $\mu, \nu = a, v$ (a – для реальных молекул, v – для вакантных ячеек, в которых находятся квазичастицы, не взаимодействующие между собой и с реальными молекулами сорта a).

Вспомогательные функционалы $f_{ij}^{(a)}(\vec{q}_i, \{n_l\})$ и $f_{ij} \{n_l\}$ из выражения (1) рассчитываются в результате усреднения, выполняемого с помощью вспомогательных унарных функций $\hat{F}_{11}^*(\vec{q}_j)$ и $\hat{F}_{11}^*(\vec{q}_i)$ соответственно:

$$f_{ij}^{(a)}(\vec{q}_i, \{n_l\}) = \int_{\omega_j} \exp\{-\beta\Phi(\|\vec{q}_i - \vec{q}_j\|)\} \hat{F}_{11}^*(\vec{q}_j) d\vec{q}_j, \quad (2)$$

$$f_{ij} \{n_l\} = \int_{\omega_i} \exp\{-\beta\Phi_{ij}(\vec{q}_i, \{n_l\})\} \hat{F}_{11}^*(\vec{q}_i) d\vec{q}_i, \quad (3)$$

где $\Phi(\|\vec{q}_i - \vec{q}_j\|)$ – парный потенциал взаимодействия двух частиц, находящихся в двух разных ячейках с номерами i и j (\vec{q}_i и \vec{q}_j – радиус-векторы частиц). Вспомогательная нормированная на единицу унарная функция $\hat{F}_{11}^*(\vec{q}_i)$ распределения молекулы в ячейке ω_i выражается через искомые одночастичные потенциалы средних сил Φ_{ik} и определяется следующим выражением:

$$\hat{F}_{11}^*(\vec{q}_i) = \frac{\exp\left\{-\beta \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{ik}(\vec{q}_i, \{n_l\})\right\} d\vec{q}_i}{\int_{\omega_i} \exp\left\{-\beta \sum_{k \neq i, j}^M \Phi_{ik}(\vec{q}_i, \{n_l\})\right\} d\vec{q}_i}. \quad (4)$$

Функция $\hat{F}_{11}^*(\vec{q}_j)$ рассчитывается аналогично. Двухъячеечные числа заполнения всевозможных пар ячеек определяются следующими соотношениями [2]:

$$n_{ij}^{aa} \{n_l\} = n_i - n_{ij}^{av} \{n_l\}, \quad (5)$$

$$n_{ij}^{av} \{n_l\} = \frac{1}{2A_{ij}} \left\{ \left[(n_i - n_j) A_{ij} - 1 \right] + \sqrt{\left[(n_i - n_j) A_{ij} - 1 \right]^2 + 4n_i(1 - n_j) A_{ij}} \right\}, \quad (6)$$

$$A_{ij} = f_{ij}^{(a)} \{n_l\} - 1, \quad (7)$$

$$f_{ij}^{(a)} \{n_l\} = \int_{\omega} f_{ij}^{(a)}(\bar{q}_i, \{n_l\}) \hat{F}_{11}^*(\bar{q}_i) d\bar{q}_i. \quad (8)$$

Из физических соображений ясно, и это подтверждается структурой уравнений (1), что в связи с короткодействующим межмолекулярным потенциалом $\Phi(\bar{q}_i - \bar{q}_j)$ все потенциалы средних сил ϕ_{ij} в неоднородной среде должны наиболее сильно зависеть от плотности в ближайших ячейках, окружающих выделенную пару ячеек ω_i и ω_j . Вследствие этого достаточно учесть зависимость потенциалов $\phi_{ij}(\bar{q}_i, \{n_l\})$ только от чисел заполнения в ячейках ω_i, ω_j , а в численных расчетах при выполнении суммирования по $k \neq i, j$ в формуле (4) можно ограничиться вкладом от взаимодействия с ячейками, принадлежащими первым трем концентрическим координационным сферам ($l = 1, 2, 3$) с центрами в центре ячейки ω_i .

Преобразование системы интегральных уравнений для последующего численного решения. На основе общих статистических уравнений и соотношений (1)–(8), полученных в рамках двухуровневого статистического метода описания свойств неоднородных систем, составим замкнутую систему уравнений, описывающих микро-, макроструктуру и термодинамические характеристики кристаллической наночастицы с искомым неоднородным радиальным профилем плотности. Поле плотности в используемом методе задается соответствующим полем чисел заполнения ячеек, принадлежащих координационным сферам с центрами, совпадающими с центром сферической наночастицы. Основная трудность практической реализации этого подхода связана с тем обстоятельством, что функционал свободной энергии неоднородной системы зависит от искомого профиля плотности, т. е. набора чисел заполнения n_l неявно, через посредство потенциалов средних сил ϕ_{ij} , которые можно рассчитать только численно, в процессе решения достаточно сложной системы интегральных уравнений (1)–(8). Поэтому далее воспользуемся предложенной ранее методикой усреднения парного межмолекулярного потенциала Леннарда-Джонса (уравнение (2)) и других потенциалов (выражения (3), (8)) для системы в кристаллическом состоянии [4], для которого вспомогательные унарные функции распределения \hat{F}_{11}^* имеют четко выраженную локализацию в окрестности узлов кристаллической решетки. Суть этой методики состоит в том, чтобы усреднение соответствующих функций проводить по областям локализации функций распределения в виде шаров с радиусами b_l , внутри которых аппроксимированные унарные функции \hat{F}_{11}^* считаются постоянными. Эти ра-

диусы связаны со среднеквадратичными отклонениями σ_p молекул от узлов, принадлежащих координационным сферам с номерами p относительно центра наночастицы ($p = 1, 2, \dots, P$). В результате макроструктура сферической наночастицы с неоднородным радиальным профилем плотности описывается дискретными наборами чисел заполнения n_p и радиусов b_p сфер. Поэтому искомые потенциалы средних сил ϕ_{ij} окажутся зависящими от значений чисел n_p и радиусов b_p сфер в ячейках, центры которых принадлежат соответствующим координационным сферам. Учитывая вышесказанное, выпишем все соотношения и уравнения, образующие замкнутую систему интегральных и алгебраических уравнений, для решения которой разработана компьютерная программа с привлечением пакета Mathcad.

Все формулы и уравнения далее записаны в безразмерном виде, когда геометрические размеры определены в единицах линейного параметра σ потенциала Леннарда-Джонса, а все величины, имеющие размерность энергии, найдены в единицах энергетического параметра ϵ этого же потенциала:

$$\Phi(\rho) = 4\epsilon \left(\frac{\sigma^{12}}{\rho^{12}} - \frac{\sigma^6}{\rho^6} \right). \quad (9)$$

В безразмерной форме выражение (9) примет следующий вид:

$$U(r) = \frac{\Phi(\rho)}{\epsilon} = 4 \left(\frac{1}{r^{12}} - \frac{1}{r^6} \right), \quad r = \frac{\rho}{\sigma}. \quad (10)$$

Учитывая вышеизложенное, запишем аппроксимированные формулы для унарной F_{11} и бинарной $F_{11}^{(1)}$ функций, описывающих равномерное распределение молекул внутри всех сфер с радиусами b_i , центры которых совпадают с узлами кристаллической решетки наночастицы ($v_i = 4\pi b_i^3 / 3$, $v_j = 4\pi b_j^3 / 3$, $n_{ij} \equiv n_{ij}^{aa}$):

$$F_{11} = n_i \hat{F}_{11}^* \approx \frac{n_i}{v_i}, \quad F_{11}^{(1)} \approx \frac{n_{ij}}{Q_{ij}} \exp\{-\beta U(r)\}. \quad (11)$$

Здесь Q_{ij} – нормирующий множитель бинарной функции $F_{11}^{(1)}$, которая нормирована так, чтобы интеграл от $F_{11}^{(1)}$ по объемам сфер радиусов b_i и b_j был равен n_{ij} , т. е.

$$Q_{ij} = \int_{v_i} dv_i \int_{v_j} dv_j e^{-\beta U(r)} = \int_{v_i} I_{ij}(\rho_i, b_j) dv_i. \quad (12)$$

Здесь и далее ρ_i – безразмерное расстояние от молекулы в объеме v_i до центра объема v_j , а интеграл

$$I_{ij}(\rho_i, b_j) = \int_{v_j} e^{-\beta U(r)} dv_j. \quad (13)$$

С помощью бинарных функций распределения двух молекул в объемах v_i и v_j рассчитаем среднее значение их энергии взаимодействия внутри этих объемов:

$$\begin{aligned} \langle U_{ij} \rangle &= \int \int_{v_i v_j} U(r) F_{11}^{(1)}(r) dv_i dv_j = \\ &= \frac{n_{ij}}{Q_{ij}} \int_{v_i} dv_i \int_{v_j} U(r) e^{-\beta U(r)} dv_j = \\ &= n_{ij} \frac{\int_{v_i} \varphi_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) I_{ij}(\rho_i, b_j) dv_i}{\int_{v_i} I_{ij}(\rho_i, b_j) dv_i}. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \varphi_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) &= \frac{\int_{v_j} U(r) e^{-\beta U(r)} dv_j}{\int_{v_j} e^{-\beta U(r)} dv_j} = \\ &= \frac{\int_{v_j} U(r) e^{-\beta U(r)} dv_j}{I_{ij}(\rho_i, b_j)}. \end{aligned} \quad (15)$$

В результате получим, что

$$\langle U_{ij} \rangle = n_{ij} \langle \varphi^{(a)}(\rho_i, b_j) \rangle_i = n_{ij} \psi(b_i, \rho_{ij}, b_j), \quad (16)$$

где ρ_{ij} – безразмерное расстояние между центрами объемов v_i и v_j , а среднее значение для функции $\varphi_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j)$ получается в результате ее усреднения, выполненного с помощью $I_{ij}(\rho_i, b_j)$:

$$\psi(b_i, \rho_{ij}, b_j) = \frac{\int_{v_i} \varphi_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) I_{ij}(\rho_i, b_j) dv_i}{\int_{v_i} I_{ij}(\rho_i, b_j) dv_i}. \quad (17)$$

Переходя к расчету потенциалов средних сил φ_{ij} , запишем выражения для функционалов (2), (3), которые входят в правую часть интегрального уравнения (1) и рассчитываются с учетом аппроксимированных функций \hat{F}_{11}^* (формулы (11)):

$$\begin{aligned} f_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) &= \frac{I_{ij}(\rho_i, b_j)}{v_j}, \\ f_{ij}^{(a)}(b_i, \rho_{ij}, b_j) &= \frac{1}{v_i v_j} \int_{v_i v_j} f_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) dv_i. \end{aligned} \quad (18)$$

Далее учтем, что средние значения функций $f_{ij}(\bar{q}_i, \{n_i\})$ и $f_{ij}^{(a)}(\bar{q}_i, \{n_i\})$ равны [2]:

$$\langle f_{ij}(\rho_i, b_j) \rangle = \langle f_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) \rangle = f_{ij}^{(a)}(b_i, \rho_{ij}, b_j). \quad (19)$$

Здесь $f_{ij}(\rho_i, b_j) = e^{-\beta \varphi_{ij}(\rho_i, b_j)}$, а $\varphi_{ij}(\rho_i, b_j)$ – потенциал средней силы, действующий на молекулу в ячейке ω_i со стороны молекулы, равномерно распределенной внутри сферы радиуса b_j в ячейке ω_j , а g_{ij} – аналог радиальной функции для кристаллической наночастицы, которая усреднена по объемам v_i и v_j :

$$g_{ij} = \frac{n_{ij}}{n_i n_j}, \quad n_{ij} = n_i - n_{ij}^{av}, \quad (20)$$

$$B_{ij} = (n_i - n_j) - \frac{1}{A_{ij}}, \quad A_{ij} = f_{ij}^{(a)}(b_i, \rho_{ij}, b_j) - 1, \quad (21)$$

$$n_{ij}^{av} = 0,5 B_{ij} + 0,5 \sqrt{B_{ij}^2 + 4 n_i (1 - n_j) A_{ij}^{-1}}. \quad (22)$$

С учетом соотношений (19)–(22) интегральное уравнение (1) перепишем в следующем виде:

$$\begin{aligned} f_{ij}(\rho_i, b_j) &= n_j g_{ij}(b_i, \rho_{ij}, b_j) f_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) + \\ &+ (1 - n_j g_{ij}(b_i, \rho_{ij}, b_j)) f_{ij}^{(a)}(b_i, \rho_{ij}, b_j). \end{aligned} \quad (23)$$

Решение системы уравнений (23) относительно набора радиусов b_p сферической наночастицы при заданном наборе чисел заполнения n_p для ячеек, принадлежащих координационным сферам с номерами p ($p = 1, 2, \dots, P$), находится методом итераций. Для этого по заданному набору пробных значений b_p в правой части (23) рассчитываются значения функции $f_{ij}(\rho_i, b_j)$. С их помощью находятся нормированные на единицу унарные функции \hat{F}_{11} распределения молекул в ячейках, принадлежащих координационным сферам с номерами p , а затем рассчитываются радиальные смещения Δr_p узлов и среднеквадратичные отклонения σ_p молекул от смещенных узлов, принадлежащих сферам с номерами p :

$$\Delta r_p = \sqrt{\Delta X_p^2 + \Delta Y_p^2 + \Delta Z_p^2}, \quad (24)$$

где

$$\Delta X_p = \int_{v_i} (x - X_p) \hat{F}_{11}(x, y, z) dv_i, \quad (25)$$

$$\Delta Y_p = \int_{v_i} (y - Y_p) \hat{F}_{11}(x, y, z) dv_i, \quad (26)$$

$$\Delta Z_p = \int_{v_i} (z - Z_p) \hat{F}_{11}(x, y, z) dv_i, \quad (27)$$

$$\sigma_p = \left(\int_{\omega_p} r^2 \hat{F}_{11}(x, y, z) d\omega_p \right)^{1/2} = \sqrt{\frac{3}{5}} b_p. \quad (28)$$

Здесь унарная функция распределения частиц в ячейке ω_p определяется выражением

$$\hat{F}_{11}(x, y, z) = \frac{\exp\left\{-\beta \sum_{j \neq p}^M \varphi_{pj}(\rho_p, b_j)\right\}}{\int_{v_p} \exp\left\{-\beta \sum_{j \neq p}^M \varphi_{pj}(\rho_p, b_j)\right\} dv_p}. \quad (29)$$

По полученным значениям среднеквадратичных отклонений σ_p с помощью формулы (28) находятся новые значения радиусов b_p^H ($b_p^H = \sqrt{5/3} \sigma_p$). Итерации продолжаются до тех пор, пока новые значения не совпадут с заданной относительной погрешностью с предыдущими значениями.

Функционалы энтропии S , внутренней энергии U и свободной энергии F сферической наночастицы определяются по следующим формулам:

$$S\{n_p\} = -\sum_{p=1}^P Z_p (n_p \ln n_p + (1-n_p) \ln(1-n_p) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq p}}^J n_p n_j g_{pj} \ln g_{pj}), \quad (30)$$

$$U\{n_p\} = \sum_{p=1}^P Z_p \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq p}}^J (n_p n_j g_{pj} \psi(b_p, r_{pj}, b_j)), \quad (31)$$

$$F\{n_p\} = U\{n_p\} - \theta S\{n_p\}. \quad (32)$$

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 ω_p , по узлам которых выполняется суммирование в уравнениях (30), (31).

В табл. 1 приведены полученные после выполнения итераций с относительной погрешностью $\varepsilon = 10^{-3}$ результаты расчетов параметров сферической наночастицы, состоящей из 201 узла, принадлежащего десяти координационным сферам ($P = 10$), при температуре $\theta = 0,6$. Значения функционалов энтропии s , внутренней u и свободной f энергий, приходящиеся на одну молекулу, представлены в табл. 2.

Литература

1. Наркевич И. И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: дис. ... д-ра физ.-мат. наук. СПб., 1993. 223 с.
2. Наркевич И. И. Интегральное уравнение для потенциалов средних сил и свободная энергия однокомпонентной неоднородной системы в рамках двухуровневого молекулярно-статистического метода // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика. 2017. № 1. С. 32–38.
3. Ротт Л. А. Статистическая теория молекулярных систем. М.: Наука, 1979. 280 с.
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. 2016. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 61–65.

Таблица 1

Среднеквадратичные отклонения σ_p и радиальные смещения Δr_p для разных координационных сфер с номерами p для наночастицы при температуре $\theta = 0,6$

Номер координационной сферы p	n_p	σ_p	σ_p^H	Δr_p	Δr_p^H
0	0,99	0,103	0,106	0	0
1	0,99	0,105	0,106	0,086	0,008
2	0,95	0,109	0,110	0,117	0,129
3	0,85	0,106	0,106	0,136	0,140
4	0,80	0,106	0,108	0,165	0,160
5	0,70	0,113	0,110	0,198	0,178
6	0,50	0,123	0,119	0,181	0,176
7	0,30	0,115	0,114	0,190	0,186
8	0,20	0,130	0,132	0,209	0,223
9	0,15	0,125	0,151	0,214	0,252
10	0,10	0,138	0,138	0,220	0,251

Таблица 2

Значения функционалов энтропии s , внутренней u и свободной f энергий наночастицы при температуре $\theta = 0,6$

s	u	f	F	N
0,432	-4,228	-3,969	-368,164	93

Заключение. С помощью двухуровневого статистического метода составлена полная система интегральных и алгебраических уравнений, решение которой позволяет рассчитывать структурные характеристики, функционалы энтропии, внутренней и свободной энергий сферических кристаллических наночастиц с заданным радиальным профилем плотности. На основе разработанной методики итерационного решения системы интегральных уравнений для потенциалов средних сил написана компьютерная программа расчета структурных и термодинамических характеристик кристаллической сферической наночастицы с искомым неоднородным радиальным профилем плотности. Проведен расчет параметров наночастицы при температуре $\theta = 0,6$.

5. Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В., Зубрицкий Д. Е. Численно-аналитический расчет микроскопического распределения центров коллоидных частиц в макроскопически однородном водном растворе // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика. 2018. № 2. С. 47–51.

References

1. Narkevich I. I. *Molekulyarno-statisticheskaya teoriya neodnorodnykh kondensirovannykh sred. Dis. dokt. fiz.-mat. nauk* [Molecular-statistical theory of the non-homogeneous condensed matter. Doct. Diss.]. St. Petersburg, 1993. 223 p.

2. Narkevich I. I. Integral equation for potentials forces and free energy inhomogeneous one-component system within two-level molecular-statistical methods. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2017, no. 1, pp. 32–38 (In Russian).

3. Rott L. A. *Statisticheskaya teoriya molekulyarnykh system* [Statistical theory of molecular systems]. Moscow, Nauka Publ., 1979. 280 p.

4. Narkevich I. I., Kvasov N. T., Kozich E. Yu. Two-level molecular-statistical description of the structure and thermodynamic characteristics of homogeneous macroscopic systems and spherical nanoparticles. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], 2016, no. 6: Physics and Mathematics. Informatics, pp. 61–65 (In Russian).

5. Narkevich I. I., Farafontova E. V., Zubrytski D. E. Numerical-analytical calculation of microscopic distribution of colloid particle centers in a macroscopically homogeneous aqueous solution. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2018, no. 2, pp. 47–51 (In Russian).

Информация об авторах

Наркевич Иван Иванович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: Narkevich@belstu.by

Фарафонтова Елена Валерьевна – кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: farafontova@belstu.by

Information about the authors

Narkevich Ivan Ivanovich – DSc (Physics and Mathematics), Professor, Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: Narkevich@belstu.by

Farafontova Elena Valer'yevna – PhD (Physics and Mathematics), Senior Lecturer, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: farafontova @belstu.by

Поступила 15.05.2019