

УДК 531.19; 538.911

И. И. Наркевич, Е. В. Фарафонтова, А. А. Кулеш, А. А. Рогач
Белорусский государственный технологический университет

РЕШЕНИЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО ИНТЕГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛОВ СРЕДНИХ СИЛ И РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМАХ, СОДЕРЖАЩИХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ НАНОЧАСТИЦЫ

В работе используется ранее полученная замкнутая система статистических уравнений и формул, определяющая структурные и термодинамические характеристики неоднородных, в частности, гетерогенных молекулярных систем. Она получена в рамках двухуровневого статистического метода, который является симбиозом метода коррелятивных функций Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ), метода условных коррелятивных функций Ротта и метода термодинамических функционалов плотности.

В двухуровневом статистическом методе описание равновесных свойств осуществляется с помощью потенциалов средних сил, которые вследствие неоднородности молекулярных систем являются функционалами искомого поля плотности. Это поле задается полем чисел заполнения молекулами микроячеек, которые принадлежат координационным сферам ГЦК решетки, используемой при описании свойств простых молекулярных систем. При статистическом описании гетерогенных систем, содержащих наночастицы, центры координационных сфер совпадают с центром сферической кристаллической наночастицы, находящейся в термодинамическом равновесии с окружающей ее флюидной средой (жидкой либо газовой).

В данной работе с помощью ранее разработанной модернизированной компьютерной программы решена полная система преобразованных интегральных и алгебраических уравнений для гетерогенной системы, содержащей кристаллическую наночастицу внутри флюидной среды. По результатам расчетов построены изотермы свободной энергии однородной молекулярной системы в широкой области молекулярных объемов, включающей области существования кристаллического, жидкого и газообразного состояний вещества. С их помощью численно-геометрическим методом решена задача по определению термодинамических параметров фазовых переходов кристалл – газ, кристалл – жидкость и жидкость – газ при соответствующих температурах. Построенная фазовая диаграмма простых веществ позволит приступить к расчетам по определению полей плотности в межфазных областях гетерогенных систем и в задачах адсорбции на плоских и сферических поверхностях.

Ключевые слова: двухуровневый статистический метод, потенциал средних сил, гетерогенная система, наночастица, фазовый переход, фазовая диаграмма.

I. I. Narkevich, E. V. Farafontova, A. A. Kulesh, A. A. Rogach
Belarusian State Technological University

SOLUTION OF THE MODIFIED INTEGRAL EQUATION FOR POTENTIALS OF AVERAGE FORCES AND CALCULATION OF PHASE TRANSITION PARAMETERS IN HETEROGENEOUS SYSTEMS CONTAINING CRYSTALLINE NANOPARTICLES

The paper uses a closed system of statistical equations and formulas that determines the structural and thermodynamic characteristics of heterogeneous, in particular, heterogeneous molecular systems. It has been obtained using the two-level statistical method, which is a symbiosis of the Bogolyubov – Born – Green – Kirkwood – Ivon (BBGKI) method of correlation, the Rott conditional distribution method, and the density thermodynamic functionals method.

In the two-level statistical method, the description of equilibrium properties is carried out using potential of average forces, which, due to the heterogeneity of molecular systems, are functionals of the desired density field. This field is specified by the field of numbers of filling with molecules of microcells

that belong to the coordination spheres of the FCC lattice used to describe the properties of simple molecular systems. In the statistical description of heterogeneous systems containing nanoparticles, the centers of the coordination spheres coincide with the center of a spherical crystalline nanoparticle, which is in thermodynamic equilibrium with its surrounding fluid medium (liquid or gas).

In this work, we have solved the complete system of transformed integral and algebraic equations for a heterogeneous system containing a crystalline nanoparticle inside a fluid medium, using the previously developed modernized computer program. Based on the calculation results, free energy isotherms of a homogeneous molecular system are constructed in a wide range of molecular volumes, which contain regions of the existence of crystalline, liquid and gaseous states of matter. With their help, the problem of determining the thermodynamic parameters of the crystal – gas, crystal – liquid, and liquid – gas phase transitions at the corresponding temperatures has been solved. The constructed phase diagram of simple substances will allow us to start the calculations to determine the density fields in the interfacial regions of heterogeneous systems and in the problems of adsorption on flat and spherical surfaces.

Key words: two-level statistical method, potential of average forces, heterogeneous system, nanoparticle, phase transition, phase diagram.

Введение. Ранее в работах [1, 2] была опубликована статистическая теория и методика расчета структурных и термодинамических характеристик кристаллических наночастиц разных размеров с использованием двухуровневого статистического метода, подробно изложенного в монографии [3]. Он базируется на использовании метода коррелятивных функций Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ), метода условных распределений Ротта [4] и метода термодинамических потенциалов, которые в случае неоднородных систем являются функционалами поля плотности среды. Двухуровневый молекулярно-статистический подход реализует учет неоднородного распределения чисел заполнения n_i микроячеек 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 в случае флюидных (текучих) сред образуют гипотетическую кристаллическую решетку, а их форма и размеры в области кристалла претерпевают существенные изменения вблизи границ кристаллических наночастиц, т. е. наблюдается пространственная релаксация реальной кристаллической решетки. Для описания таких систем 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 объеме V , поэтому некоторые микроячейки с определенной вероятностью могут быть вакантными. В результате поле распределения чисел заполнения ячеек по объему наночастицы и окружающей среды отражает неоднородность распределения плотности в объеме гетерогенной системы.

В двухуровневом статистическом методе поле плотности в системе с наночастицами задается соответствующим полем чисел заполнения

ячеек, принадлежащих координационным сферам с номерами p ($p = 1, 2, \dots, P$), образующих сферическую кристаллическую наночастицу и окружающую ее флюидную, т. е. жидкую либо газовую, среду. Центр координационных сфер совпадает с центром сферической наночастицы.

Основная трудность практической реализации этого подхода связана с тем, что функционал свободной энергии неоднородной системы зависит от искомого профиля плотности через потенциалы средних сил ϕ_{ij} , которые можно рассчитать только численно в результате решения сложной системы интегральных уравнений. Усреднение парного межмолекулярного потенциала Леннард-Джонса $\Phi(r)$ в модифицированном интегральном уравнении проводится с помощью вспомогательной унарной функции распределения \hat{F}_{11}^* , которая имеет четко выраженную локализацию в окрестности узлов решетки в кристаллическом состоянии [5, 6]. В связи с этим макроструктура сферической кристаллической наночастицы с неоднородным радиальным профилем плотности описывается дискретными наборами чисел заполнения n_p и радиусов b_p сфер объемами v_i , внутри которых вспомогательные унарные функции \hat{F}_{11}^* распределения считаются постоянными. Аналогичный прием используется и при описании структуры флюидной среды. Поэтому искомые потенциалы средних сил ϕ_{ij} оказываются зависящими от значений чисел n_p и радиусов b_p сфер в ячейках, центры которых принадлежат соответствующим координационным сферам в объеме наночастицы и окружающей ее среды. В связи с этим все исходные статистические уравнения упрощаются, т. е. модифицируются так, чтобы появилась возможность осуществить их численное решение с использованием системы компьютерного проектирования Mathcad.

Основная часть. Для однокомпонентной системы с вакансиями исходное интегральное уравнение для потенциалов средних сил $\Phi_{ij}(\vec{q}_i, \{n_l\})$ имеет следующий вид [7, 8]:

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

Здесь $n_{ij}^{\mu\nu}$ – двухъячеечные числа заполнения всевозможных пар ячеек объемами ω_i и ω_j , которые определяют вероятность нахождения частицы сорта μ в ячейке ω_i и частицы сорта ν в ячейке ω_j ($\mu, \nu = a, v$; индекс a используется для реальных молекул или атомов, а индекс v – для вакантных ячеек, в которых находятся фиктивные частицы, которые не взаимодействуют между собой и с реальными молекулами). Функционал $f_{ij}(\vec{q}_i, \{n_l\}) = \exp\{-\beta\Phi_{ij}(\vec{q}_i, \{n_l\})\}$, а дополнительные функционалы $f_{ij}^{(a)}(\vec{q}_i, \{n_l\})$ и $f_{ij}^{av}(\{n_l\})$ находятся в результате усреднения, выполняемого с помощью вспомогательных нормированных на единицу унарных функций $\hat{F}_{11}^*(\vec{q}_j)$ и $\hat{F}_{11}^*(\vec{q}_i)$ соответственно ($\beta = 1/\theta$ – обратная безразмерная температура, $\theta = kT$):

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

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

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

где $\Phi(\vec{q}_i - \vec{q}_j)$ – парный межмолекулярный потенциал Леннарда-Джонса, описывающий взаимодействия двух реальных частиц (атомов либо молекул), находящихся в двух разных ячейках с номерами i и j (\vec{q}_i и \vec{q}_j – радиус-векторы этих частиц).

В интегральных уравнениях (1) числа заполнения всевозможных пар ячеек определяются следующими соотношениями [7]:

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

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

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

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

Из физических соображений ясно, и это подтверждается структурой уравнений (1), что в связи с короткодействующим межмолекулярным потенциалом $\Phi(\vec{q}_i - \vec{q}_j)$ 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 . В связи с этим достаточно учесть зависимость потенциалов $\Phi_{ij}(\vec{q}_i, \{n_l\})$ 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 вкладами от взаимодействия с ячейками, принадлежащими первым трем концентрическим координационным сферам ($l = 1, 2, 3$) с центрами в центре ячейки ω_i .

Учитывая вышесказанное, выпишем все соотношения и уравнения, образующие замкнутую систему модифицированных интегральных и алгебраических уравнений. 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.

Принимая во внимание вышеизложенное, модифицированное интегральное уравнение для потенциалов средних сил неоднородной однокомпонентной системы приобретает следующий вид [7]:

$$f_{ij}(\rho_i, b_j) = n_j g_{ij}(b_i, \rho_{ij}, b_j) f_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) + (1 - n_j g_{ij}(b_i, \rho_{ij}, b_j)) f_{ij}^{av}(b_i, \rho_{ij}, b_j). \quad (9)$$

Здесь $f_{ij}(\rho_i, b_j) = e^{-\beta\Phi_{ij}(\rho_i, b_j)}$, а $\Phi_{ij}(\rho_i, b_j)$ – потенциал средней силы, действующий на молекулу в ячейке ω_i со стороны молекулы, равномерно распределенной внутри сферы радиуса b_j объемом v_j внутри ячейки ω_j ; ρ_i – безразмерное расстояние от молекулы в объеме v_i до центра

объема v_j ; g_{ij} – аналог радиальной функции для гетерогенной системы, мысленно разделенной на микроячейки, образующие кристаллическую решетку (реальную в объеме наночастицы и гипотетическую в объеме окружающей ее флюидной среды):

$$g_{ij} = \frac{n_{ij}}{n_i n_j}, \quad n_{ij} = n_i - n_{ij}^{av}, \quad (10)$$

$$B_{ij} = (n_i - n_j) - \frac{1}{A_{ij}}, \quad A_{ij} = f_{ij}^{(a)}(b_i, \rho_{ij}, b_j) - 1, \quad (11)$$

$$n_{ij}^{av} = 0,5 B_{ij} + 0,5 \sqrt{B_{ij}^2 + 4n_i(1-n_j)A_{ij}^{-1}}, \quad (12)$$

где ρ_{ij} – безразмерное расстояние между центрами объемов v_i и v_j в ячейках ω_i и ω_j соответственно.

Функционалы $f_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j)$ и $f_{ij}^{(a)}(b_i, \rho_{ij}, b_j)$ определяются следующими выражениями:

$$f_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) = \frac{1}{v_j} \int_{v_j} e^{-\beta\Phi(|\bar{q}_i - \bar{q}_j|)} d\nu_j, \quad (13)$$

$$f_{ij}^{(a)}(b_i, \rho_{ij}, b_j) = \frac{1}{v_i} \int_{v_i} f_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) d\nu_i. \quad (14)$$

Функционалы энтропии S , внутренней энергии U и свободной энергии F сферической наночастицы и окружающей ее флюидной среды рассчитываются по следующим формулам:

$$S\{n_p\} = -\sum_{p=1}^P Z_p (n_p \ln n_p + (1-n_p) \ln(1-n_p) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq p}}^J n_p n_j g_{pj} \ln g_{pj}), \quad (15)$$

$$U\{n_p\} = \sum_{p=1}^P Z_p \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq p}}^J (n_p n_j g_{pj} \Psi(b_p, r_{pj}, b_j)), \quad (16)$$

$$F\{n_p\} = U\{n_p\} - \theta S\{n_p\}. \quad (17)$$

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 (15), (16);

$$\Psi(b_i, \rho_{ij}, b_j) = \frac{\int_{v_i} \Phi_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) \int_{v_j} e^{-\beta\Phi(|\bar{q}_i - \bar{q}_j|)} d\nu_j d\nu_i}{\int_{v_i, v_j} e^{-\beta\Phi(|\bar{q}_i - \bar{q}_j|)} d\nu_j d\nu_i}. \quad (18)$$

Здесь

$$\Phi_{ij}^{(a)}(\rho_i, b_j) = \frac{\int_{v_j} \Phi(\rho) e^{-\beta\Phi(|\bar{q}_i - \bar{q}_j|)} d\nu_j}{\int_{v_j} e^{-\beta\Phi(|\bar{q}_i - \bar{q}_j|)} d\nu_j}. \quad (19)$$

Для решения системы интегральных и алгебраических уравнений (9)–(19) для гетерогенной системы, состоящей из однородной кристаллической наночастицы и окружающей ее флюидной среды, проведена модернизация компьютерной программы, которая разработана с использованием системы компьютерного проектирования Mathcad.

В качестве первого шага выполнены расчеты по численному построению изотерм свободной энергии однородной молекулярной системы в широкой области молекулярных объемов, включающей области кристаллического, жидкого и газообразного состояний. С их помощью численно-геометрическим методом решена задача по определению термодинамических параметров фазовых переходов кристалл – газ, кристалл – жидкость и жидкость – газ при соответствующих температурах.

На рис. 1 изображены участки изотерм свободной энергии, соответствующие кристаллическому (рис. 1, а) и гетерогенному (рис. 1, б) состояниям системы в фазовых переходах кристалл – жидкость ($\theta = 1-2$) и кристалл – газ ($\theta = 0,6$). Гетерогенная область определена с помощью построения общих касательных к изотермам, определяющих точки a и b фазового перехода, для которых выполняются три условия равновесия сосуществующих фаз для температуры θ , давления p и химического потенциала μ ($\theta_a = \theta_b$, $p_a = p_b$, $\mu_a = \mu_b$).

Изображенная на рис. 2 изотерма свободной энергии при температуре $\theta = 0,6$ указывает на отсутствие фазового перехода кристалл – жидкость и наличие только фазового перехода кристалл – газ между точками a ($v_a \approx 0,84$) и d ($v_d \approx 1,35 \cdot 10^5$), что соответствует температуре, которая находится ниже тройной точки.

Участки изотерм свободной энергии, представленные на рис. 3–6, относятся к температурному интервалу между критической и тройной точками и определяют гетерогенные участки между точками c и d , соответствующие фазовому переходу жидкость – газ. Температура критической точки несколько выше значения, равного 3 (ориентировочно $\theta \approx 3,1$).

На рис. 7 изображена фазовая диаграмма $\theta - v$ в области фазового перехода жидкость – газ с соответствующими приближенными значениями параметров тройной и критической точек для простых веществ.

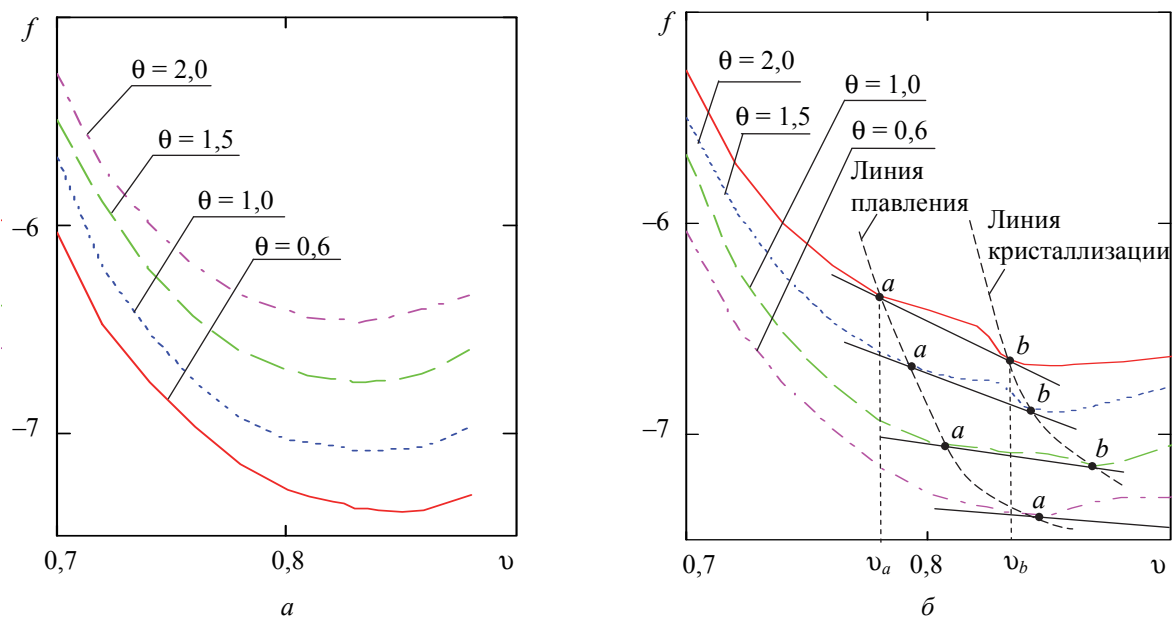


Рис. 1. Изотермы свободной энергии:
 а – область кристаллического состояния;
 б – область двухфазного равновесия

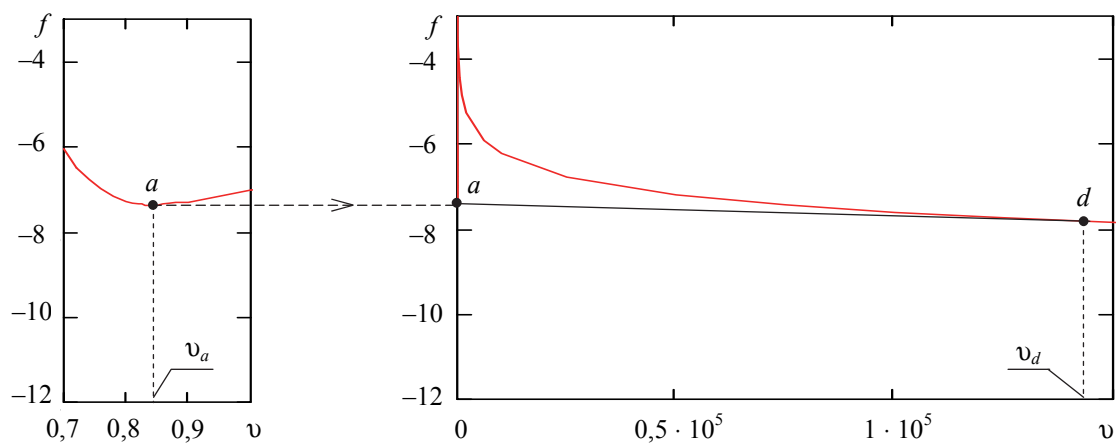


Рис. 2. Изотерма свободной энергии
 при температуре $\theta = 0,6$

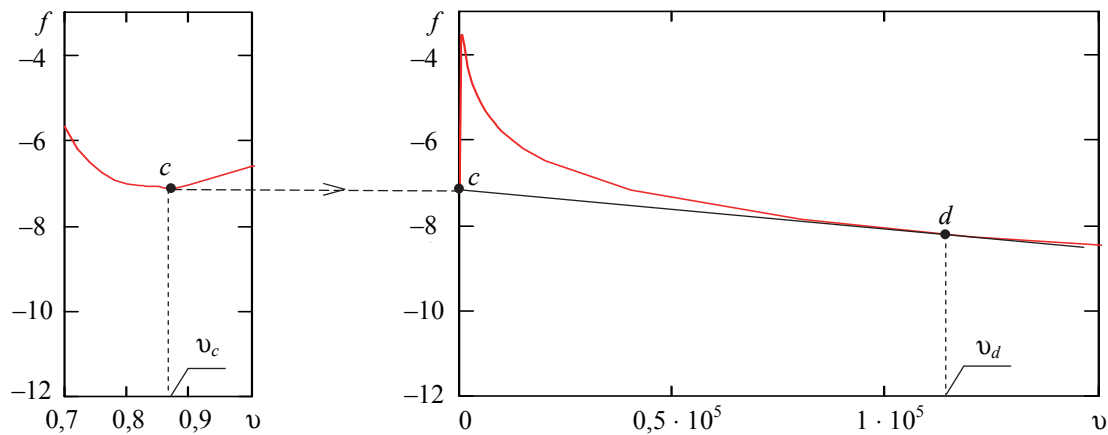


Рис. 3. Изотерма свободной энергии
 при температуре $\theta = 1,0$

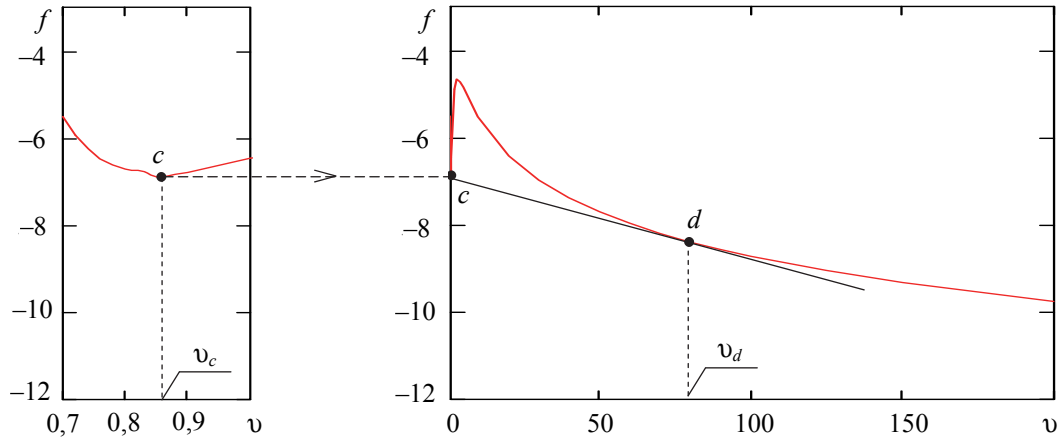


Рис. 4. Изотерма свободной энергии при температуре $\theta = 1,5$

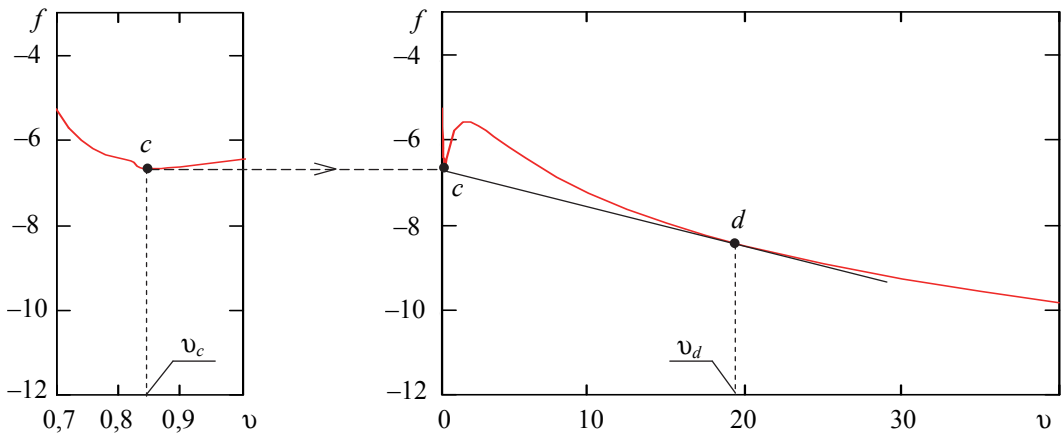


Рис. 5. Изотерма свободной энергии при температуре $\theta = 2,0$

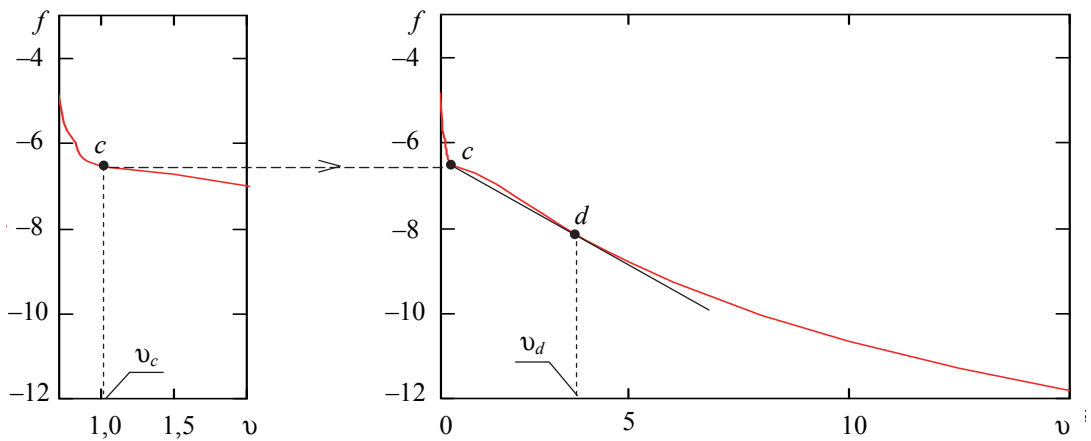


Рис. 6. Изотерма свободной энергии при температуре $\theta = 3,0$

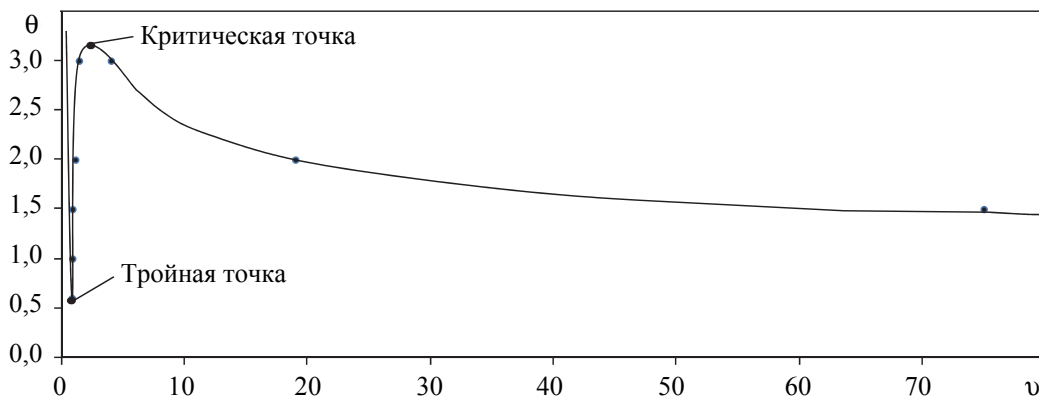


Рис. 7. Фазовая диаграмма для простых веществ

Заключение. С помощью разработанной модернизированной компьютерной программы решена замкнутая система модифицированных интегральных и алгебраических уравнений для гетерогенной системы, содержащей кристаллическую наночастицу внутри флюидной среды. По результатам расчетов построены изотермы свободной энергии однородной молекулярной системы в широкой области молекулярных объемов, включающей области существования кристаллического, жидкого и газообразного со-

стояний вещества. С их помощью численно-геометрическим методом решена задача по определению термодинамических параметров фазовых переходов кристалл – газ, кристалл – жидкость и жидкость – газ при соответствующих температурах. Построенная фазовая диаграмма простых веществ позволит приступить к расчетам по определению полей плотности в межфазных областях гетерогенных систем и в задачах адсорбции на плоских и сферических поверхностях.

Список литературы

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. Наркевич И. И. Двухуровневый статистический метод описания неоднородных систем. Ч. 1. Симбиоз методов коррелятивных функций и термодинамических функционалов плотности: монография. Нордерштедт: LAP LAMBERT Academic Publishing RU, 2019. 114 с.
4. Ротт Л. А. Статистическая теория молекулярных систем. М.: Наука, 1979. 280 с.
5. 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.
6. 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.
7. Наркевич И. И., Фарафонтова Е. В. Разработка компьютерной программы для расчета структурных и термодинамических характеристик кристаллических наночастиц разных размеров // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика. 2019. № 2. С. 34–39.
8. Narkevich I. I., Farafontova E. V. Two-level statistical description of structure of homogeneous macroscopic system and spherical crystalline nanoparticles // Nanoscience and Technology: An International Journal. 2019. № 10 (4). P. 365–376.

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. Narkevich I. I. *Dvukhurovnevyy statisticheskiy metod opisaniya neodnorodnykh sistem. Simbioz metodov korrelyativnykh funktsiy i termodinamicheskikh funktsionalov plotnosti* [Two-level statistical method for describing heterogeneous systems. Symbiosis of methods of correlative functions and thermodynamic functionals of density]. Norderstedt, LAP LAMBERT Academic Publishing RU, 2019. 114 p.

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

5. 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).

6. 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).

7. Narkevich I. I., Farafontova E. V. Development of a computer program for the calculating of the structural and thermodynamic characteristics of crystalline nanoparticles of different sizes. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2019, no. 2, pp. 34–39 (In Russian).

8. Narkevich I. I., Farafontova E. V. Two-level statistical description of structure of homogeneous macroscopic system and spherical crystalline nanoparticles. *Nanoscience and Technology: An International Journal*, 2019, no. 10 (4), pp. 365–376.

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

Кулеш Алексей Александрович – студент. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь).

Рогач Алеся Александровна – студентка. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь).

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

Kulesh Aleksey Aleksandrovich – student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus).

Rogach Alesya Aleksandrovna – student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus).

Поступила после доработки 15.05.2020