

Из таблицы видно, что с увеличением радиуса наночастицы минимум функционала $\Omega\{n_p\}$ определяется при меньших значениях вариационных параметров k и a , а отношение числа частиц в адсорбционном слое к числу частиц в наночастице уменьшается.

ЛИТЕРАТУРА

1. 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.

2. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. М.: Наука. 1979. 280 с.

3. Комплексный статистико-вариационный расчет термодинамических и структурных характеристик гетерогенной системы «кристаллическая наночастица – однородная газовая среда» / И. И. Наркевич [и др.] // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика. 2021. № 2 (248). С. 33–40.

УДК 536.758

И.И. Наркевич, проф., д-р физ.-мат. наук;
Е.В. Фарафонтова, доц., канд. физ.-мат. наук
(БГТУ, г. Минск)

ПРИМЕНЕНИЕ ИДЕИ О СОКРАЩЕННОМ ОПИСАНИИ ФЛУКТУАЦИЙ ПОЛЯ ПЛОТНОСТЕЙ В РАМКАХ ДВУХУРОВНЕВОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО МЕТОДА

С помощью двухуровневого статистического метода ранее было проведено исследование структуры и термодинамических характеристик сферических кристаллических наночастиц, находящихся в равновесии с газообразной окружающей средой. Полученные результаты указывают на возможность описания флуктуаций поля плотности с помощью двухуровневого метода.

В настоящее время существует несколько научных направлений в изучении флуктуаций плотности. Один из них – это феноменологическая теория Ландау, которая использует эффективный гамильтониана системы [1] используя следующие разложения:

а) разложение параметра порядка по степеням с учетом градиентного слагаемого;

б) разложение поля плотности в ряд Фурье по пространственным гармоникам (с разными волновыми числами).

Именно это разложение использовал Бразовский С.А. для пред-

сказания принципиальной возможности перехода однородной фазы в неоднородное (слоистое) состояние [2]. Этот фазовый переход обнаружен в коллоидных системах и статистически обоснован при использовании потенциала SALR (притяжение на малых расстояниях и отталкивание на больших расстояниях) между коллоидными частицами [3]:

$$U(r) = 4(r^{-12} - r^{-6}) + Ar^{-1}e^{-\alpha r}. \quad (1)$$

Другим подходом к изучению флуктуаций плотности является статистический метод на основе выражения для термодинамического потенциала Ω , полученного в рамках двухуровневого статистического метода [3].

Ранее была сформулирована и опубликована [4] идея о сокращенном описании флуктуаций с последующим введением коррелятивных функций для элементарных флуктуаций плотности (ЭФП):

а) введены потенциалы взаимодействия ЭФП со средой ($\Psi(x_i)$) и между собой ($\Psi(x_i, x_j)$) и т. д.

б) потенциал Ω , как функционал поля плотности разложен по одночастичным $\Psi(x_i)$, двухчастичным $\Psi(x_i, x_j)$ и т. д. потенциалам взаимодействия:

$$\Omega\{\rho_l\} = \Omega\{\rho_{\text{нб}}\} + \sum_{i=1}^M \Psi_1(x_i) + \sum_{i<j}^M \Psi_2(x_i, x_j) + \sum_k^M \Psi_3(x_i, x_j, x_k); \quad (2)$$

в) потенциалы ЭФП выражены через соответствующие потенциалы $\tilde{\Omega}$:

$\Psi_1(x_i) = \tilde{\Omega}(x_i) -$ флуктуационная часть потенциала системы с одной ЭФП,

$$\Psi_2(x_i, x_j) = \tilde{\Omega}(x_i, x_j) - \tilde{\Omega}(x_i) - \tilde{\Omega}(x_j);$$

$$\Psi_3(x_i, x_j, x_k) = \tilde{\Omega}(x_i, x_j, x_k) - \tilde{\Omega}(x_i, x_j) - \tilde{\Omega}(x_j, x_k) - \tilde{\Omega}(x_i, x_k);$$

г) введены коррелятивные функции для одной $W_1(x_i)$, двух $W_2(x_i, x_j)$ и т. д. ЭФП, для которых получена цепочка дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial W_1}{\partial x_i} + \frac{1}{\theta} \frac{\partial \Psi_1}{\partial x_i} + \frac{1}{\theta} \sum \frac{\partial \Psi_2}{\partial x_i} W_2(x_i, x_j) dx_j &= 0; \\ \frac{\partial W_2}{\partial x_j} + \frac{1}{\theta} \frac{\partial \Psi_2}{\partial x_j} + \frac{1}{\theta} \sum \frac{\partial \Psi_3}{\partial x_j} W_3(x_i, x_j, x_k) dx_k &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Для практической реализации идеи о сокращенном описании поля флуктуаций составлена компьютерная программа в системе MathCad, которая позволяет рассчитывать потенциалы $\Psi(x_i)$ и $\Psi(x_i, x_j)$ с последующим решением системы (2) после обрыва на втором уравнении.

На рис. 1 изображены профили плотности для двух элементарных флуктуаций с противоположными знаками и их общий профиль, полученный по принципу суперпозиции.

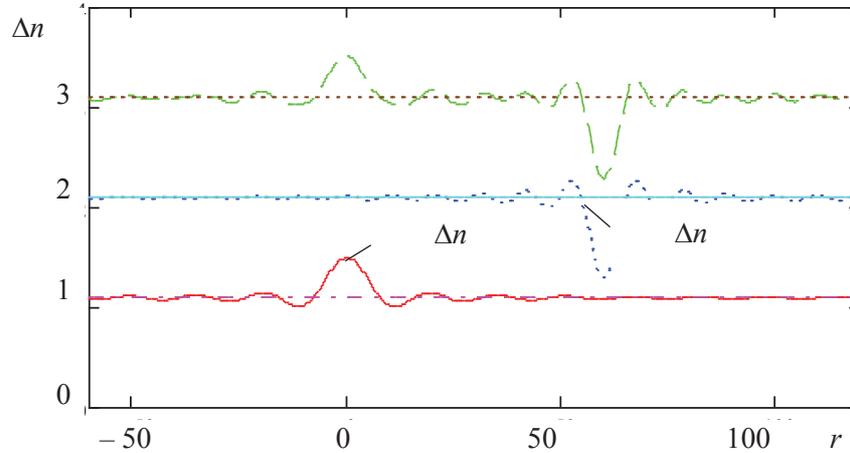


Рисунок 1 – Профили плотности для двух разноименных элементарных флуктуаций и их общий профиль

На рис. 2 представлен график зависимости потенциала $\Psi(x_i)$ от величины флуктуации плотности в элементарном объеме и одночастичная функция $W(x_i)$, построенная без учета взаимодействия с другими флуктуациями.

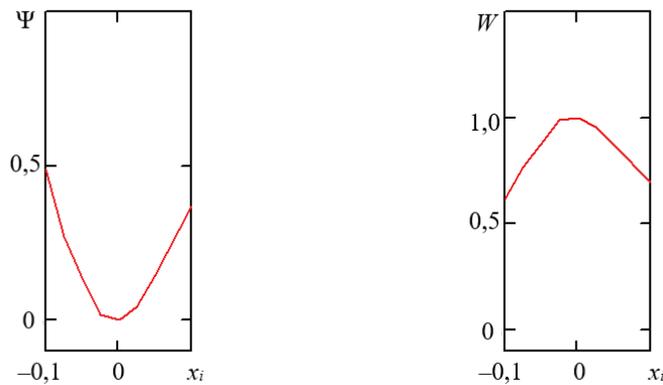


Рисунок 2 – Потенциал взаимодействия $\Psi(x_i)$ и функция распределения $W(x_i)$ элементарной флуктуации в газе с радиальным профилем плотности $n_s(r)$ с волновым числом $k = 3$ при температуре $\theta = 1,1$ и плотности газа $n_c = 0,1$

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Учеб. Пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. 5. Статистическая физика. Ч. 1. 5-е изд, стереот. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. 616 с.
2. Brazovskii S.A. Sov. Phys. JETP. 1975. Vol.41, no 1. P. 85.
3. Наркевич И.И. Статическое обоснование предсказанного Бразовским перехода термодинамической системы из однородного состо-

яния в неоднородное // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика. 2019. № 2 (224). С. 28–33.

4. Narkevich I.I. Statistical theory of nonuniform systems and reduced description in the density fluctuation theory // *Physica A*. 1982 Vol. 112 A. P. 167–192.

УДК 539.1.06:539.23.234

В.В. Тульев, доц., канд. физ.-мат. наук
(БГТУ, г. Минск)

СОСТАВ ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ СТРУКТУР Ti/Si И Co/Si, ПОЛУЧЕННЫХ ИОННО-АССИСТИРУЕМЫМ ОСАЖДЕНИЕМ В ВАКУУМЕ

На образцы из кремния наносились покрытия на основе Ti и Co методом ионно-ассистируемого осаждения в вакууме. В часть кремниевых образцов был имплантирован ксеноновый маркер для установления границы раздела покрытие/подложка [1]. Осаждение покрытий осуществлялось при ускоряющих напряжениях 7 кВ и плотности ионного тока $\sim(4-5)$ мкА/см², время осаждения покрытий составляло 2 часа, средняя скорость нанесения покрытия находилась в пределах 0,2–0,5 нм/мин. Отношение плотности потока J_i ассистирующих ионов к плотности потока J_a нейтральных атомов составляло $J_i/J_a = 0,1-0,4$, что соответствует условию роста покрытия на подложке. В рабочей камере в процессе осаждения покрытий поддерживался вакуум при давлении $\sim 10^{-2}$ Па.

Послойный элементный анализ проводился методом резерфордовского обратного рассеяния (РОР) ионов гелия в сочетании с компьютерным моделированием RUMP. Определения содержания водорода в полученных Me/Si-структурах было проведено с помощью метода ядерных реакций (ЯР). Для этого использовалась резонансная ядерная реакция при взаимодействии ионов азота с водородом ${}^1\text{H}({}^{15}\text{N}, \alpha\gamma){}^{12}\text{C}$. Распределение водорода по глубине было определено при сканировании поверхности образцов пучком ионов N^+ с энергией, изменяющейся в интервале 6380–7000 МэВ через 10 кэВ в зависимости от толщины анализируемого слоя.

На рис. 1 представлен спектр РОР ионов гелия от образца из кремния с ксеноновым маркером до и после осаждения покрытия на основе Ti при одновременном облучении ионами Ti^+ . Вид спектра РОР от структуры Ti/(Si+Xe) позволяет сделать вывод о том, что в покрытии кроме атомов осаждаемого металла титана содержатся