

Из формул (2) и (3) следует выражение для эффективной массы:

$$m = eB/2\Delta\omega. \quad (4)$$

Выражение для $\Delta\omega$ можно получить из равенства,

$$\Delta P = P_{min}(\Delta\omega/\omega_0), \quad (5)$$

где P_{min} – значение мощности фотовозбуждения, соответствующее минимальному пропусканию, ω_0 – частота излучения зондирующего лазера. Выразив $\Delta\omega$ из (5) и учитывая, что $\omega_0 = 2\pi c/\lambda_0$ (c – скорость света в вакууме), получим

$$m = \frac{eB\lambda_0}{4\pi c(\Delta P/P_{min})}. \quad (6)$$

Расчет по формуле (6) дает значение эффективной массы для InSb $0,015m_0$, близкое к ее циклотронному значению ($0,013m_0$).

ЛИТЕРАТУРА

1. Palais O., Arcary A. Contactless measurement of surface recombination velocity in silicon wafers // J.Appl.Phys., 93, 4686 (2003).

2. Манухов В. В., Федорцов А. Б., Иванов А. С. Лазерно-интерференционный метод определения длины диффузии носителей заряда в полупроводниках // Физика и техника полупроводников. 2015. Т. 49, вып. 9. С. 1153–1158.

УДК 536.758

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

СТАТИСТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ АДСОРБЦИИ НА СФЕРИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦАХ

Для исследования адсорбции на кристаллических наночастиц сферической формы используется ранее полученная замкнутая система интегральных и алгебраических уравнений, описывающая структурные и термодинамические характеристики неоднородных (гетерогенных) молекулярных систем. Она получена в рамках двухуровневого статистического метода [1], который основывается на совместном использовании метода коррелятивных функций Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ), метода условных коррелятивных функций Ротта [2] и метода термодинамических функционалов плотности. Эти уравнения устанавливают связь между микроскопическими параметрами системы взаимодействующих частиц (атомов или мо-

лекул) и макроскопическими характеристиками кристаллических наночастиц, находящихся в равновесии с флюидной средой, в частности в этой работе с газообразной окружающей средой при температуре ниже температуры тройной точки $\theta_{тр}$.

В двухуровневом статистическом методе используются потенциалы φ_{ij} средних сил [3], которые являются функционалами от дискретных полей чисел заполнения n_p ячеек метода условных распределений. Центры ячеек принадлежат координационным сферам с номерами p ($p = 1, 2, \dots, P_{nano}$) относительно центра сферической наночастицы. Для сферической наночастицы поле плотности неоднородной системы зависит только от радиуса r_p координационной сферы. Поэтому радиальный профиль чисел заполнения $n(r_p)$ определяем с помощью аппроксимирующей трехпараметрической функции с гиперболическим тангенсом [3], т. е.

$$n(r_p) = a - (a - n_\infty) \text{th}(\kappa \Delta x_p). \quad (1)$$

Здесь a и κ – вариационные параметры теории; параметр n_∞ – определяет значения чисел заполнения для жидкой либо газовой среды, находящейся в равновесии с кристаллической наночастицей; $\Delta x_p = r_p - r_{nano}$; r_{nano} – радиус кристаллической наночастицы.

Значения вариационных параметров a и κ находятся при найденном минимуме большого термодинамического потенциала $\Omega\{n_p\} = F\{n_p\} - \mu \sum Z_p n_p$ наночастицы, который является функционалом от радиального профиля чисел заполнения n_p (Z_p – число узлов, принадлежащей координационной сфере с номером p).

Полная замкнутая система интегральных и алгебраических уравнений для неоднородной системы решалась численно методом итераций с помощью модернизированной компьютерной программы в пакете MathCad, разработанной ранее [3]. Вариационный расчет параметров a и κ для профиля плотности (1) в окрестности сферической кристаллической наночастицы, находящейся в равновесии с газообразной окружающей средой проводился при температуре $\theta = 0,6 < \theta_{тр}$.

Структура сферической кристаллической наночастицы с числами заполнения $n = 0,999$ и с неоднородным радиальным профилем плотности в переходном слое описывается дискретными наборами чисел заполнения n_p , среднеквадратичных отклонений σ_p молекул от центров ячеек и радиусов b_p сфер, которые определяют области локализации унарных функций распределения в ячейках с номерами P_{nano} .

Минимум функционала $\Omega\{n_p\}$ определялся численно для наночастиц разных радиусов при заданных наборах значений параметров a и κ . Для примера на рис. 1 приведены зависимости большого термо-

динамического потенциала Ω от вариационного параметра a в интервале от 0 до 0,15 при заданных значениях параметра κ для наночастицы, содержащей 15 координационных сфер $P_{nano} = 15$. Радиус наночастицы $r_{nano} = 4,38$ в единицах линейного параметра σ потенциала Леннарда–Джонса.

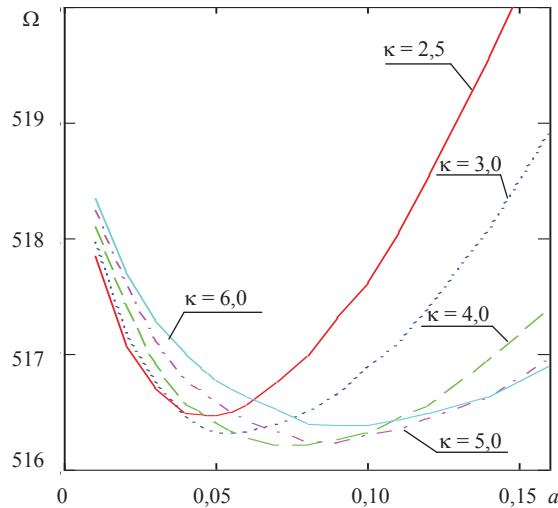


Рисунок 1 – Зависимости большого термодинамического потенциала Ω от вариационного параметра a при разных значениях параметра κ и $\theta = 0,6$ для наночастицы радиусом $r_{nano} = 4,38$

Из рис. 1 видно, что абсолютный минимум функционала $\Omega\{n_p\}$ реализуется при значениях $\kappa \approx 4,5$ и $a \approx 0,075$.

В случае кристаллической наночастицы с заданными числами заполнения ячеек $n \approx 0,999$ на ее границе образуется адсорбционный газообразный слой с повышенными значениями плотности. В объеме кристаллической наночастицы наблюдается постепенное увеличение среднеквадратичных отклонений σ_p от центра наночастицы к ее границе. Кроме этого происходит сдвиг узлов решетки в радиальном направлении, т. е. имеет место пространственная релаксация решетки.

В табл. 1 приведены значения вариационных параметров κ и a соответствующие минимуму большого термодинамического потенциала $\Omega\{n_p\}$ для наночастиц разных радиусов r_{nano} .

Таблица Значения вариационных параметров для наночастиц разных размеров

Радиус наночастицы r_{nano}	Число слоев наночастицы p_{nano}	Вариационный параметр κ	Вариационный параметр a	Число частиц в наночастице	Доля частиц в адсорбционном слое, %
2,45	5	5,5	0,100	79	2,5
3,47	10	5,3	0,085	201	1,5
4,38	15	4,5	0,075	381	1,3

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-