

Рисунок 2 – Спектральные зависимости энергии Ω для ЭФП при разных значениях амплитуд x , соответствующих минимумам амплитудных зависимостей, изображенных на рисунке 1

условия возникновения минимумов интенсивности при интерференции, а именно, если длины волн λ связаны с радиусом R наноразмерной системы сферической формы следующими соотношениями:

$$R = 3\lambda_1/2; \quad R = 6\lambda_2/2; \quad R = 9\lambda_3/2. \quad (5)$$

В выполненных расчетах безразмерный радиус $R = 31,4$, что соответствует порядка 15 нм. Тогда $\lambda_1/2=10,5$; $\lambda_2/2=5,25$; $\lambda_3/2=3,5$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Паташинский А. З., Покровский В. Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. –М.: Наука. 1982. –382 с.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. Б. Статистическая физика: в 2 ч. – М.: Наука. 1987. – Ч. 1. – 586 с.
3. Narkevich I. I. *Physica*. 112A. – 1982. – P. 167-192.
4. Наркевич И. И. Е. В. Фарафонтowa // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика. – 2022. – № 2 (260). – С. 49-54.

УДК 536.758

Проф. И.И. Наркевич; доц. Е.В. Фарафонтowa
(БГТУ, г. Минск)

СТАТИСТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ АДСОРБЦИИ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ НА СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦАХ

Для изучения влияния температуры на адсорбцию из газовой фазы на поверхности кристаллических наночастиц используется ранее полученная замкнутая система интегральных и алгебраических урав-

нений, 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 молекул) 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 $\theta_{тр}$.

Потенциалы φ_{ij} средних сил [3], используемые в двухуровневом статистическом методе, являются функционалами от дискретных полей чисел заполнения n_p ячеек метода условных распределений. В случае сферической наночастицы поле плотности зависит только от радиусов r_p координационных сфер с номерами p относительно центра наночастицы ($p = 1, 2, \dots, P$). Радиальный профиль чисел заполнения $n(r_p)$ для газообразной молекулярной системы определяем с помощью аппроксимирующей трехпараметрической функции с гиперболическим тангенсом [3], т. е.

$$n(r_p) = n_x - (n_x - n_\infty) \text{th} \{ \kappa (r - r_{nano}) \}, \quad p > p_{nano}.$$

Здесь n_x и κ – вариационные параметры теории; третий параметр n_∞ определяет значения чисел заполнения для однородной жидкой либо газовой среды, находящейся в равновесии с исследуемой кристаллической наночастицей; r_{nano} – радиус наночастицы, соответствующий номеру p_{nano} кристаллической наночастицы.

В случае сферической поверхности раздела фаз значения вариационных параметров n_x и κ находятся при решении вариационной задачи по отысканию минимума большого термодинамического потенциала $\Omega\{n_p\} = F\{n_p\} - \mu \sum n_p$ наночастицы, который является функционалом от радиального профиля чисел заполнения n_p .

Полная замкнутая система интегральных и алгебраических уравнений для неоднородной системы решалась численно методом итераций с помощью преобразованной компьютерной программы в пакете MathCad. Минимум потенциала $\Omega\{n_p\}$ определялся численно для разных заданных значений параметра κ при изменении параметра n_x от 0,03 до 0,1. Расчеты проведены для наночастицы с диаметром $d = 2,36$ нм, что соответствует наночастице, состоящей из $p_{nano} = 20$ коор-

динационных сфер.

Структура сферической кристаллической наночастицы с неоднородным радиальным профилем плотности описывается дискретными наборами чисел заполнения n_p , среднеквадратичных отклонений σ_p молекул от центров ячеек и радиусов b_p сфер, внутри которых унарные функции распределения считаются постоянными.

Для примера на рис. 1 приведены равновесные радиальные профили плотности n_p и среднеквадратичных отклонений σ_p молекул от узлов ГЦК решетки при температуре $\theta = 0,5$ в единицах параметра ε потенциала Леннард-Джонса (абсолютный минимум функционала $\Omega\{n_p\}$ при данной температуре реализуется при значениях $\kappa \approx 4,5$ и $n_x \approx 0,064$).

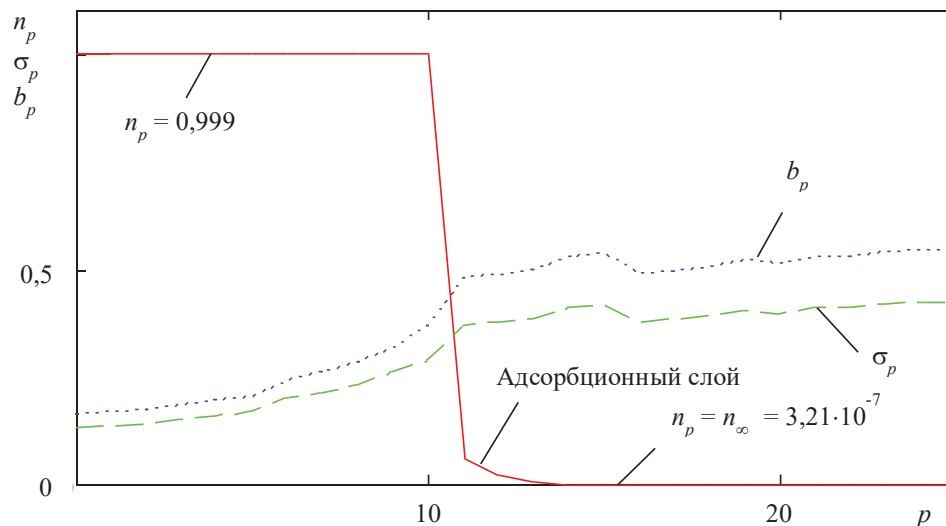


Рисунок 1 – Зависимости плотности n_p , среднеквадратичных отклонений σ_p и радиусов b_p сфер от номеров p координационных сфер гетерогенной системы

Для случая кристаллической наночастицы с числами заполнения ячеек $n \approx 0,999$ на ее границе образуется адсорбционный газообразный слой с повышенными значениями плотности. В объеме кристаллической наночастицы наблюдается увеличение среднеквадратичных отклонений σ_p от центра наночастицы к ее границе, что свидетельствует о пространственной релаксации ГЦК решетки.

На рис. 2 приведены результаты расчетов адсорбции из газовой фазы на поверхности кристаллических наночастиц при температурах $\theta = 0,4; 0,5; 0,6$.

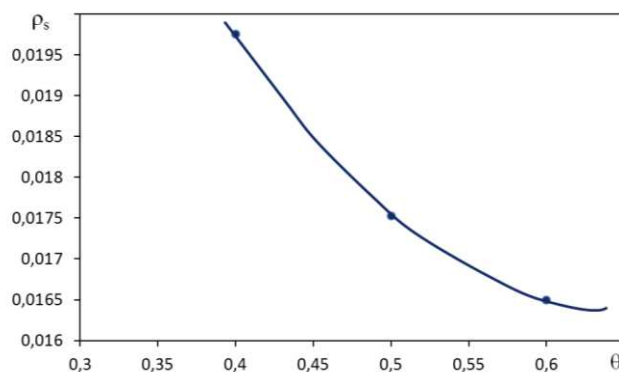


Рисунок 2 – Зависимость поверхностной плотности ρ_s адсорбированных молекул от температуры θ

Из рис. 2 видно, что с увеличением температуры θ число адсорбированных молекул на поверхности наночастицы 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. Фарафонтова Е. В., Наркевич И. И. Статистическое описание адсорбции из газовой фазы на сферических наночастицах с учетом пространственной релаксации кристаллической решетки // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. – 2022. – № 2 (260). – С. 55-59.

УДК 536.24

Доц. Т.Б. Карлович¹; студ. А.О. Карлович²
(¹БГТУ, г. Минск; ²БГУ, г. Минск)

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ ПОДОГРЕВАЕМЫХ СНИЗУ КОНВЕКТИВНЫХ ПОТОКОВ ВОЗДУХА В ВЫТЯЖНОЙ ШАХТЕ

Математическое моделирование процессов конвективной неустойчивости получило широкое распространение с совершенствованием компьютерной техники и на сегодняшний день является неотъемлемой частью исследований наряду с аналитическими методами решения нелинейных уравнений движения жидкости, учитывающих