

## СТАТИСТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ И АМПЛИТУДНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЭНЕРГИИ ОБРАЗОВАНИЯ ФЛУКТУАЦИЙ В НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМАХ

Разработанный ранее двухуровневый статистический метод описания свойств молекулярных систем в данной работе применяется для исследования энергии образования элементарных флуктуаций поля плотности в системе с межмолекулярным взаимодействием Леннарда-Джонса. Существуют несколько методов изучения флуктуаций плотности в состоянии термодинамического равновесия.

Один из них – это хорошо известная феноменологическая флуктуационная теория фазовых переходов [1], основанная на использовании эффективного гамильтониана Ландау – Лифшица для большого термодинамического потенциала  $\Omega = F - \mu N$  [2]. Эта теория развита в двух направлениях, первое из которых связано с разложением гамильтониана по степеням параметра порядка в градиентном приближении, а второе – с разложением в ряд Фурье по пространственным гармоникам с различными волновыми числами и амплитудами.

Другим альтернативным направлением в теоретическом изучении флуктуаций плотности является предложенный ранее статистический подход на основе статистического выражения для потенциала  $\Omega$ , полученного в рамках двухуровневого метода.

В результате сформулирована и опубликована [3] идея о принципиальной возможности сокращенного статистического описании термодинамических флуктуаций с последующим введением цепочки коррелятивных функций  $W$  для ансамбля взаимодействующих элементарных флуктуаций плотности (ЭФП), которые возникают случайным образом на фоне однородной макроскопической системы с заданными термодинамическими параметрами. Для этого введены эффективные потенциалы взаимодействия одиночных ЭФП со средой ( $\Psi(x_i)$ ) и друг с другом (для двух флуктуаций –  $\Psi(x_i, x_j)$ , трех и так далее).

Следовательно потенциал  $\Omega$  ансамбля ЭФП представляется в виде разложения по неприводимым эффективным потенциалам  $\Psi$ :

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

где  $\Psi_1(x_i) = \tilde{\Omega}(x_i)$ .

$$\begin{aligned}\Psi_2(x_i, x_j) &= \tilde{\Omega}(x_i, x_j) - \tilde{\Omega}(x_i) - \tilde{\Omega}(x_j), \\ \Psi_3(x_i, x_j, x_k) &= \tilde{\Omega}(x_i, x_j, x_k) - \tilde{\Omega}(x_i, x_j) - \tilde{\Omega}(x_j, x_k) - \tilde{\Omega}(x_i, x_k).\end{aligned}\quad (2)$$

Два первые дифференциальные уравнения для коррелятивных функций  $W_1(x_i)$  и  $W_2(x_i, x_j)$  имеют следующий вид:

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

Для практической реализации идеи о сокращенном описании поля флуктуаций в среде со средней плотностью  $n_c$  используются ЭФП в виде сферических волн с различными амплитудами  $x$  и волновыми числами  $k$  [4]:

$$n_s(x, k, r) = n_c + x \frac{\sin(k \cdot r)}{k \cdot r}.\quad (4)$$

Соответственно на рис. 1 и 2 представлены амплитудные и спектральные характеристики энергии образования ЭФП, полученные с помощью компьютерной программы в системе MathCad.

Из рис. 1 видно, что по мере увеличения волнового числа  $k$  минимумы амплитудных зависимостей с отрицательными значениями энергии ЭФП смещаются вначале в сторону больших значений амплитуд  $x_p$ , а затем начинают смещаться в обратном направлении.

Кривые на рис. 2 указывают на существование таких волн флуктуации плотности, которые соответствуют локальным минимумам энергии  $\Omega$ , возникающим при выполнении условий, напоминающих

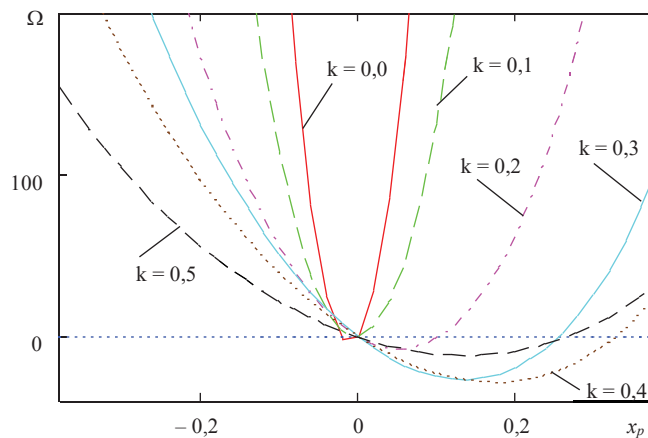
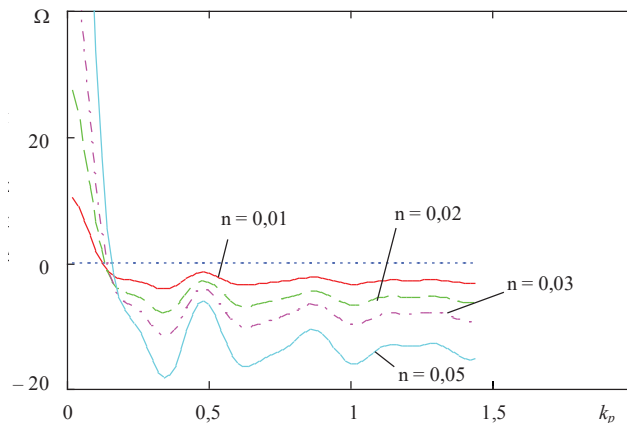


Рисунок 1 – Амплитудные зависимости энергии  $\Omega$  для ЭФП при разных значениях волновых чисел  $k$



**Рисунок 2 – Спектральные зависимости энергии  $\Omega$  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  $\lambda$  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. Фарафонтова // 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. Фарафонтова  
(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-