

Е.В. Фарафонтова, доц.; И.И. Наркевич, проф. (БГТУ, г. Минск);
Г.Э. Наркевич, студ. (МФТИ, г. Москва)

СТАТИСТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ ПОЛЯ ПЛОТНОСТИ В СФЕРИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ НАНОЧАСТИЦАХ

Ранее предприняты первые шаги для практической реализации идеи о принципиальной возможности сокращенного описания флуктуаций поля плотности с помощью введенной цепочки коррелятивных функций для ансамбля взаимодействующих *элементарных флуктуаций плотности* (ЭФП) [1].

Они с определенной вероятностью возникают и исчезают случайным образом на фоне однородной макроскопической системы с заданными термодинамическими параметрами, и поэтому их можно рассматривать в качестве квазичастиц. Их коррелятивные функции введены аналогично тому, как это сделано для системы реальных частиц (атомов либо молекул) в известном методе Боголюбова – Борна – Грина – Кирквуда – Ивона (ББГКИ). В качестве потенциалов взаимодействия ЭФП с однородной средой (без учета флуктуаций) и между собой в этой работе используются энергии образования одиночных $\tilde{\Omega}(x_i)$ и бинарных $\tilde{\Omega}(x_i, x_j)$ ЭФП, расчет которых возможен в рамках двухуровневого статистического метода [2] описания свойств неоднородных систем, одним из примеров которых как раз и являются системы с флуктуирующим полем плотности.

Конкретные численные расчеты выполнены для простой молекулярной системы с межчастичным взаимодействием Леннард-Джонса, которая представляет собой сферическую наночастицу, находящуюся в термостате с заданными термодинамическими параметрами (температура и химический потенциал).

В связи с этим для статистического описания такой системы используется большой термодинамический потенциал $\Omega\{\rho_l\}$, который является функционалом поля плотности ρ_l , сформированным с помощью соответствующего ансамбля ЭФП.

В данной работе для практической реализации идеи о сокращенном описании поля флуктуаций в молекулярной среде со средней плотностью n_c используются ЭФП в виде сферических волн с различными значениями амплитуд x и волновых чисел k [3]:

$$\Delta n(x, k, r) = n\{\rho_l\} - n_c = x \frac{\sin(kr)}{kr}. \quad (1)$$

Потенциалы $\tilde{\Omega}(x_1, k_1, x_2, k_2, r)$ для бинарных ЭФП с двумя центрами на фиксированном расстоянии r друг от друга позволяют выполнить численное усреднение произведения флуктуаций плотности в двух точках системы. Это позволит рассчитать бинарную корреляционную функцию $G(\vec{r})$ наноразмерной либо макроскопической системы с учетом флуктуаций поля плотности по следующей формуле:

$$G(\vec{r}) = \frac{\sum_{x_1} \sum_{x_2} \sum_{k_1} \sum_{k_2} (\Delta n_1 \Delta n_2) e^{\frac{\tilde{\Omega}(x_1, k_1, x_2, k_2, r)}{\theta}}}{\sum_{x_1} \sum_{x_2} \sum_{k_1} \sum_{k_2} e^{\frac{\tilde{\Omega}(x_1, k_1, x_2, k_2, r)}{\theta}}}, \quad (2)$$

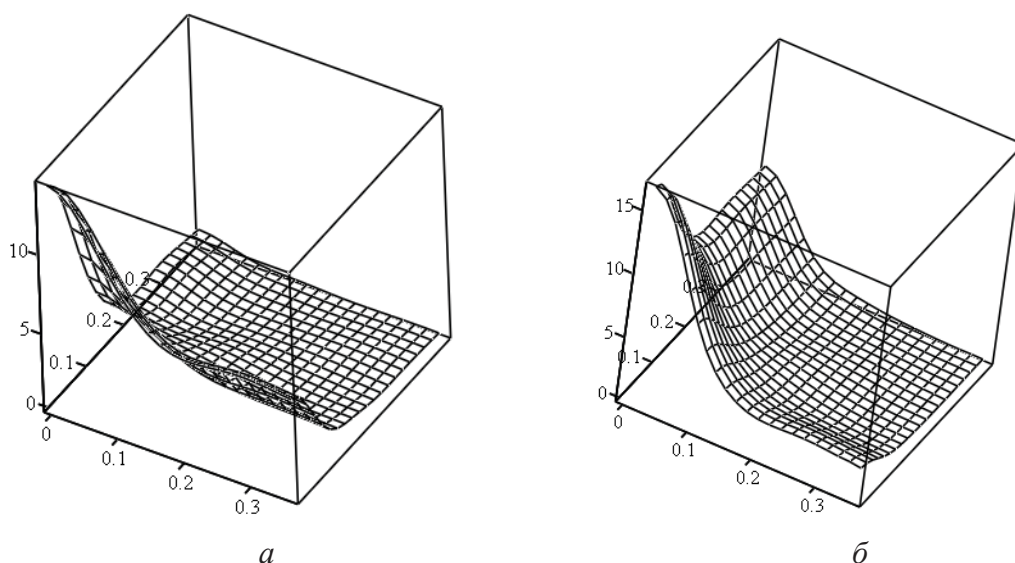
где $\Delta n_1 = \Delta n(x_1, k_1, 0)$, $\Delta n_2 = \Delta n(x_2, k_2, r)$.

Отметим, что для наночастицы радиусом R , имеющей собственную сферическую границу, функция $G(\vec{r})$ зависит от положения центров бинарных ЭФП и их ориентации внутри сферы, т. е. она анизотропна, тогда как аналогичная функция однородной макроскопической системы изотропна, т. к. зависит только от r .

Численные расчеты потенциалов $\tilde{\Omega}(x_1, k_1, x_2, k_2, r)$ выполнены с помощью специальных компьютерных программ (разработанных с использованием системы Mathcad) для наночастицы как молекулярной термодинамической системы, находящейся в равновесии с термостатом в окрестности критической точки жидкость – газ.

При этом все величины обезразмерены с помощью линейного и энергетического параметров потенциала Леннард-Джонса. Конкретные расчеты выполнены для сферической наночастицы радиусом $R = 31,4$, что примерно соответствует 15 нанометрам. Она находится в термостате при температуре $\theta = 3,5$ и плотности $\rho = 1 / v = n_c / \omega$, здесь $n_c = 0,505$ – средние числа заполнения элементарных ячеек кубической решетки в статистическом методе условных распределений, ω – объем ячеек, для которых расстояния между ближайшими узлами $d = 1,096$. Для этих термодинамических параметров химический потенциал системы $\mu = -3,0523$ при учете взаимодействия каждой молекулы с тремя ближайшими соседями в решетке.

В качестве примера на рис. 1 приведены графики энергий образования бинарных ЭФП для разных наборов значений амплитуд x_1, x_2 и расстояния $r = 2$.



**Рисунок 1 – Спектральные зависимости энергии образования двух бинарной ЭФП с заданными разными значениями амплитуд одинаковых знаков:
 $a - x_1 = 0,02$ и $x_2 = 0,04$; $b - x_1 = -0,04$ и $x_2 = -0,02$**

Выполненные в работе численные расчеты энергии образования бинарных флуктуаций показали, что сформулированная ранее идея о принципиальной возможности сокращенного статистического описания флуктуаций поля плотности может быть практически реализована при исследовании вкладов тепловых флуктуаций в термодинамические характеристики наноразмерных систем, что в принципе невозможно сделать известными из литературы методами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Наркевич И.И., Фарафонтова Е.В. Статистическое исследование флуктуации поля плотности в сферических молекулярных наночастицах // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2024. № 2 (284). С. 25–29.
2. 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.
3. Наркевич И.И., Фарафонтова Е.В., Волосевич З.Г. Статистическое исследование амплитудных и спектральных характеристик энергии образования флуктуаций поля плотности в наноразмерных системах // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2023. № 2 (272). С. 40–46.