

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Бадалян Анна Юріївна



УДК 538.91; 537.9

**ФОРМУВАННЯ ТА РЕЖИМИ РУХУ АНСАМБЛІВ  
НАНОЧАСТИНОК В РАМКАХ СТАТИСТИЧНОЇ ТЕОРІЇ**

Спеціальність 01.04.07 – фізика твердого тіла

**АВТОРЕФЕРАТ**

дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Суми – 2018

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Сумському державному університеті Міністерства освіти і науки України.

Науковий керівник –

кандидат фізико-математичних наук, доцент  
**Ющенко Ольга Володимирівна**,  
доцент кафедри наноелектроніки  
Сумського державного університету.

Офіційні опоненти:

доктор фізико-математичних наук, професор  
**Прилуцький Юрій Іванович**,  
професор кафедри біофізики і медичної  
інформатики Київського національного  
університету імені Тараса Шевченка;

кандидат фізико-математичних наук, професор  
**Лобода Валерій Борисович**, професор  
кафедри енергетики Сумського національного  
аграрного університету.

Захист відбудеться 28 вересня 2018 року о 12-00 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 55.051.02 у Сумському державному університеті за адресою: 40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2, корпус ЕТ, ауд. 236.  
E-mail:d55.051.02@sumdu.edu.ua

Із дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Сумського державного університету за адресою: 40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2, а також на сайті інституційного репозитарію СумДУ. Режим доступу :  
<http://essuir.sumdu.edu.ua/handle/123456789/68171>

Автореферат розісланий 23 серпня 2018 року

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради

Чешко І. В.

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Наноструктуровані матеріали є об'єктом підвищеного інтересу для фундаментальної та прикладної науки, оскільки зі зменшенням характерних розмірів їх структурних одиниць до нанорівня вони часто набувають нових властивостей, зумовлених квантово-розмірними ефектами і зростаючою роллю поверхневих взаємодій. Сучасний інтерес до цієї області фізики твердого тіла пов'язаний як із принципово новими фундаментальними науковими проблемами і фізичними явищами, так і з перспективами створення на основі вже відкритих явищ абсолютно нових квантових пристроїв і систем із широкими функціональними можливостями для опто- та наноелектроніки, вимірювальної техніки, інформаційних технологій нового покоління, засобів зв'язку, тощо.

Більшість наноструктурованих матеріалів утворені так званими нанокластерами (або наночастинками). Серед досліджуваних наночастинок особливе місце займають металеві наночастинки, а також їх ансамблі, наприклад, острівкові металеві плівки, розміщені на діелектричних підкладках. Як відомо, більшість ефектів у поведінці наночастинок пов'язана з межею поділу фаз, зокрема, термодинамічними умовами фазових переходів, неадитивними властивостями термодинамічних функцій. Також особливу роль необхідно відвести колективним ефектам, що відбуваються при формуванні нанокластерів. Одним із способів їх одержання є самоорганізація ансамблю наночастинок. Значний інтерес викликають також фазові структурні перетворення в наносистемах. Згідно розглянутих досліджень нанометрові розміри приводять до стабілізації багатьох нерівноважних структур. Деформоване тверде тіло є системою, в процесі еволюції якої відбувається самоорганізація дисипативних структур, їх перебудова. Ці перебудови можна розглядати як послідовність переходів, за яких випадковість, нерівноважність і незворотність приводять до порядку в системі.

Із вищезазначеного особливої актуальності набувають теоретичні методи аналізу поведінки наночастинок, що дозволяють прогнозувати еволюцію їх властивостей, колективні процеси самоорганізації наночастинок у нанокластери та наноструктури, режими їх руху.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами і темами.** Дисертаційна робота виконана на кафедрах наноелектроніки і прикладної математики та моделювання складних систем Сумського державного університету в рамках держбюджетної теми «Дослідження процесів формування багатошарових анізотропних нано-розмірних структур адсорбату при конденсації та епітаксiальному рості» № 0117U003927 (2017–2020 рр.). Дисертант брав участь у виконанні зазначеної НДР як виконавець наукових досліджень та підготовці проміжного звіту.

**Мета роботи і завдання дослідження** полягали у розробленні оптимальних теоретичних моделей, що дозволяють описати властивості та поведінку наночастинок, їх індивідуальну динаміку та колективні ефекти в ансамблях наночастинок в залежності від впливу зовнішніх параметрів.

Відповідно до поставленої мети необхідно було вирішити такі наукові задачі:

- побудувати теоретичні моделі, що дають можливість самоузгодженим чином описати процеси самоорганізації при формуванні ансамблів та русі наночастинок;
- розглянути кінетику активного броунівського руху наночастинок на основі фазових портретів системи при різних значеннях зовнішніх параметрів;
- у рамках польової теорії проаналізувати основні параметри, що описують стан ансамблю наночастинок з урахуванням властивості неадитивності термодинамічних потенціалів;
- дослідити умови самоподібності системи, що визначають зв'язок параметра неадитивності  $q$  та параметра деформації фазового простору  $\lambda$ ;
- створити теоретичні моделі опису магнітних переходів першого роду в ансамблях наночастинок;
- у рамках теорії середнього поля на основі моделі Ізінга дослідити перехід між різними магнітними станами ансамблю наночастинок.

**Об'єкт дослідження** – явище самоорганізації в процесі формування та руху ансамблю наночастинок.

**Предмет дослідження** – переходи між різними режимами поведінки ансамблю наночастинок як неадитивних складних систем у процесі самоорганізації.

**Методи дослідження:** метод розв'язання системи нелінійних рівнянь в рамках адіабатичного наближення; числовий метод дослідження динаміки процесу на основі фазових портретів; аналітичне дослідження динаміки самоорганізації методом показників Ляпунова; метод Мартіна–Сіггіа–Роуза для побудови польової теорії неадитивних систем; підходи теорії середнього поля під час аналізу мікроскопічної моделі опису процесів самоорганізації.

**Наукова новизна.** Дослідження формування та режимів руху ансамблів наночастинок у рамках статистичної теорії дозволило одержати такі наукові результати, що виносяться на захист:

1. Вперше з урахуванням зміни внутрішньої енергії металевих та колоїдних наночастинок на основі канонічної системи рівнянь руху встановлені різні режими формування та руху ансамблів наночастинок: поступальний, обертальний та переривчастий. У рамках цього підходу показано, що параметри середовища з рідким тертям або характер перерозподілу внутрішньої енергії впливають на активний броунівський рух частинок.
2. Удосконалена статистична модель дозволила дослідити поведінку ансамблю наночастинок на основі рівнянь для термодинамічних потенціалів, що не мають властивості адитивності. Вперше встановлена залежність ймовірності реалізації різних станів ансамблю наночастинок від параметра неадитивності.
3. На основі деформованого гамільтоніана Ізінга з урахуванням неадитивних властивостей системи вперше одержана модель, яка в рамках теорії середнього поля описує перехід першого роду між різними магнітними станами ансамблю наночастинок.

**Практичне значення одержаних результатів.** Результати дисертаційної роботи дозволи розширити уявлення про властивості, типи руху та режими формування ансамблів наночастинок. Запропоновані в роботі моделі дозволяють спрогнозувати значення зовнішніх параметрів (наприклад, температуру розчину, в якому розміщені зважені наночастинок), за яких можливе утворення нанокластерів у процесі

самоорганізації ансамблю наночастинок. Це прогнозування викликає особливий інтерес для прикладних досліджень і розробок технічних підходів для осадження впорядкованих структур, побудованих із наночастинок, що можуть слугувати функціональними елементами мініатюрних електронних пристроїв.

**Особистий внесок** полягає у самостійному пошуку та аналізі літературних джерел, проведенні наукових досліджень. Разом із науковим керівником кандидатом фізико-математичних наук О. В. Ющенко були визначені цілі, завдання, обговорювали та аналізували одержані результати дослідження. Автор особисто брав участь на всіх етапах досліджень і інтерпретації одержаних результатів, та підготував тексти усіх опублікованих наукових праць [1–26].

У праці [1] дисертант брав участь в аналізі літературних джерел щодо режимів руху наночастинок.

У праці [2] завдання здобувача полягало в аналітичному та числовому розв'язуванні рівнянь, а також в обговоренні одержаних результатів.

Дисертант у праці [3] провів аналітичний аналіз рівнянь та побудовав діаграму типів стійкості особових точок.

У праці [4] здобувач чисельно розв'язав початкову систему диференціальних рівнянь, на її основі побудовав фазові портрети.

У праці [5] здобувач проаналізував вплив параметра на стаціонарне значення параметра порядку, що характеризує магнітний стан ансамблю наночастинок.

У працях [6–9] дисертант провів числовий аналіз системи диференціальних рівнянь.

Основні наукові результати доповідалися на наукових конференціях [10–26] і повністю підготовлені дисертантом.

**Апробація результатів дисертації.** Основні наукові та практичні результати роботи оприлюднені та обговорені на таких конференціях: 36th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Львів, 2011 р.); Міжнародних конференціях «Nanomaterials. Application and Properties» (Алушта, 2012, 2013 рр.; Львів, 2014 р.; Затока, 2017 р.); Міжнародних конференціях «СВЧ-техніка та телекомунікаційні технології» (Севастополь, 2011, 2012, 2013 рр.); III Young Scientists Conference «Modern Problems of Theoretical Physics» (Київ, 2011 р.); «Фізика, електроніка, електротехніка» (Суми, 2012, 2013, 2014 рр.); Міжнародній конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики «ЄВРИКА» (Львів, 2012 р.); 4th Conference «Statistical Physics: Modern Trends and Applications» (Львів, 2012 р.); International Conference of young scientists and post-graduates IEP (Ужгород, 2013 р.).

**Публікації.** Основні матеріали дисертаційної роботи опубліковані у 26 працях, з яких 3 статті у фахових виданнях України, 2 статті в зарубіжних наукових журналах (4 статті індексуються наукометричною базою даних Scopus), 9 статей в матеріалах конференцій та 12 тез доповідей на міжнародних наукових конференціях.

**Структура та обсяг роботи.** Дисертаційна робота складається із вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних джерел із 178 найменувань на 14 сторінках. Обсяг дисертації становить 155 сторінок, з яких 117 сторінок основний

текст; робота містить 23 рисунки і 1 таблицю, зокрема 2 рисунки на окремих сторінках.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** наведена загальна характеристика роботи, обґрунтована актуальність теми дисертації, визначені мета та завдання роботи, предмет, об'єкт і методи досліджень, сформульовані наукова новизна і практична цінність одержаних результатів, визначений особистий внесок здобувача, наведена інформація про апробацію результатів роботи і публікації за темою дисертації.

У **першому розділі** «Організація, взаємодія та властивості наносистем» проведений літературний огляд наукових праць, спрямованих на вивчення структурно-фазового стану та поведінки руху наночастинок.

*Перший підрозділ* містить узагальнені дані про нанокластерні системи, їх синтез та класифікацію. Розглянуті властивості ізольованих наночастинок, які залежать від розмірів нанокластуру, зміни теплоємності.

У *другому підрозділі* розглядалися методи формування ансамблів наночастинок та їх рух. У той самий час розглянуті теоретичні моделі поведінки наносистем недостатньо повно описують рух наночастинок та їх самоорганізацію у наноструктури.

У *третьому підрозділі* розглянуті магнітні властивості наночастинок. Установлено, що магнітні фазові переходи у нанокластерних системах, які відбуваються за механізмом першого роду, недостатньо досліджені теоретично, а модель такого переходу з урахуванням властивості неадитивності взагалі відсутня у теперішній час.

На підставі проведеного літературного огляду були визначені мета й завдання дисертаційної роботи, обґрунтована актуальність дослідження поведінки та властивостей ансамблю наночастинок.

У **другому розділі** «Моделі формування ансамблів та руху наночастинок» на основі канонічної системи досліджена поведінка активних броунівських частинок. На основі фазових портретів вивчена кінетика системи для гармонічного і ангармонічного осциляторів за різних умов перетворення внутрішньої енергії частинок в механічну або кінетичну енергію руху. На основі синергетичної системи рівнянь Лоренца побудована модель переходів між прямим та зворотними режимами руху наночастинок.

*Перший підрозділ* присвячений аналізу типів руху наночастинок. Останнім часом актуальним є дослідження металевих наночастинок, що під час нагрівання лазером виконують активний броунівський рух, тобто можуть здійснювати не лише випадкові блукання, а й перетворювати внутрішню енергію в енергію руху.

У *другому підрозділі* розглянута аналітична модель формування ансамблів наночастинок. Згідно із загальною теорією канонічних дисипативних систем, де враховується взаємозв'язок внутрішньої енергії системи з кінетичною і повною механічною енергіями, розглянули рух колоїдних наночастинок у середовищі з рідким тертям із коефіцієнтом рідинного тертя  $\gamma$ . У результаті на основі канонічної системи рівнянь Гамільтона для координати та імпульсу частинки з урахуванням

внутрішньої енергії для опису різних динамічних режимів утворення ансамблів наночастинок одержали:

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad (1)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} - \gamma \frac{\partial H}{\partial p} + \beta \varepsilon \cdot f_1(H), \quad (2)$$

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\varepsilon_e - \varepsilon}{\tau} - 2\mu\varepsilon \cdot f_2(H), \quad (3)$$

де  $q$  – координата;  $p$  – імпульс;  $H$  – гамільтоніан. У рівнянні (3) швидкість зміни внутрішньої енергії частинки задається двома складовими: релаксаційною складовою, що описує зменшення внутрішньої енергії в автономному режимі до значення  $\varepsilon_e$ , яке визначається зовнішніми умовами ( $\tau$  – відповідний час релаксації); дисипативною складовою, яка описує зменшення внутрішньої енергії після її перетворення у кінетичну або повну механічну енергію. У той самий час відповідне перетворення енергій приносить позитивний внесок до рівняння (2). Функції  $f_1$  та  $f_2$  визначають перетворення до конкретного виду енергії, коефіцієнти  $\beta$  та  $2\mu$  є позитивними константами зв'язку. Внаслідок розв'язання системи (1)–(3) для різних початкових умов (різних станів для складових ансамблю наночастинок) дає можливість прогнозувати координати та можливі умови утворення ансамблю наночастинок.

Спочатку розглянемо випадок, коли внутрішня енергія перетворюється лише у кінетичну. У разі гармонічного руху частинки (обираємо стандартний гамільтоніан) система (1)–(3) набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{p}{m}, \\ \dot{p} &= -m\omega^2 q - \gamma \frac{p}{m} + \beta \varepsilon \frac{p}{m}, \\ \dot{\varepsilon} &= \frac{\varepsilon_e - \varepsilon}{\tau} - \mu \varepsilon \frac{p^2}{m}, \end{aligned} \quad (4)$$

де  $m$  – маса частинки;  $\omega$  – власна частота.

Для аналізу даної системи зручно позбутися великої кількості констант, вводячи безрозмірні змінні для часу, координати, імпульсу та внутрішньої енергії, а також безрозмірні константи  $\chi \equiv t_s^2 \omega^2$ ,  $\delta \equiv \tau/t_s$ , де  $t_s$  – масштаб часу.

У рамках адіабатичного наближення  $\tau \ll t_s$  ( $\delta \ll 1$ ), якщо час релаксації внутрішньої енергії набагато менший, ніж шкала часу, одержуємо систему двох диференціальних рівнянь:

$$\begin{aligned} \dot{q} &= p, \\ \dot{p} &= -\chi q - p + \frac{\varepsilon_e p}{1 + p^2}, \end{aligned} \quad (5)$$

аналіз яких у рамках методу фазової площини дозволяє описати кінетику досліджуваного процесу. Для рівняння (5) існує лише одна особлива точка  $O$ , що характеризується показниками Ляпунова:

$$\lambda_{1,2} = \frac{\varepsilon_e - 1}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_e - 1}{2}\right)^2 - \chi}. \quad (6)$$

Умови утворення ансамблю наночастинок у цій точці: при  $\varepsilon_e < 1$  вона є стійкою (і ансамбль наночастинок може утворюватися), при  $\varepsilon_e > 1$  – нестійкою, загасаючий коливальний режим, якщо точка  $O$  відповідає фокусу, реалізується за  $\varepsilon_e \in (1 - 2\sqrt{\chi}; 1 + 2\sqrt{\chi})$ . Для ангармонічного руху, коли гамільтоніан:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} + \alpha_1 q^3 + \beta_1 q^4, \quad (7)$$

де  $\alpha_1$  та  $\beta_1$  є коефіцієнтами поправки третьої та четвертої ступені до гамільтоніана.

Аналогічно, використовуючи додаткові безрозмірні параметри  $\kappa \equiv (3\alpha_1 / \gamma)t_s q_s$ ,  $\eta \equiv (4\beta_1 / \gamma)t_s q_s^2$  та зазначене наближення, одержуємо систему рівнянь:

$$\begin{aligned} \dot{q} &= p, \\ \dot{p} &= -\chi q - \kappa q^2 - \eta q^3 - p + \frac{\varepsilon_e p}{1 + p^2}, \end{aligned} \quad (8)$$

що, крім точки  $O(0,0)$ , має дві додаткові особливі точки  $A, B$  із координатами  $q_{A,B} = -\kappa / 2\eta \mp \sqrt{(\kappa / 2\eta)^2 - \chi / \eta}$ ,  $p_{A,B} = 0$ . Тип стійкості точок  $A$  та  $B$  легше аналізувати на прикладі фазових портретів, показаних на рисунку 1. Як видно з фазових портретів, точка  $B$  є сідлом і рух у безпосередній близькості від сідла нестійкий.

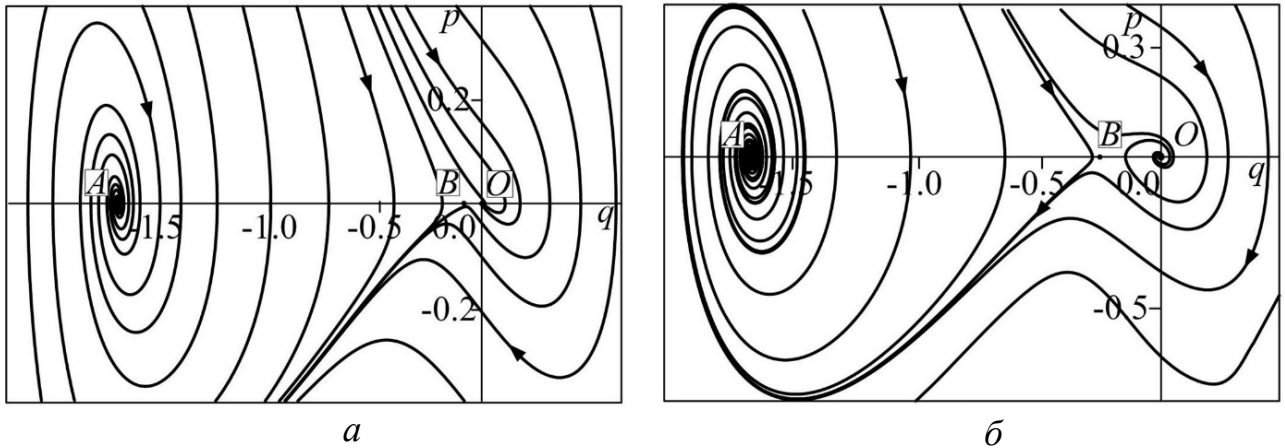


Рисунок 1 – Фазові портрети системи рівнянь (5) при: а)  $\varepsilon_e = 0.1$ ,  $\chi = 0.1$ ,  $\kappa = 4$ ,  $\eta = 3$ ; б)  $\varepsilon_e = 0.5$ ,  $\chi = 1$ ,  $\kappa = 3$ ,  $\eta = 1$

При цьому з рисунка 1 а, б випливає, що можливе утворення одразу двох ансамблів наночастинок із координатами, що задаються абсцисами особливих точок  $O$  та  $A$ .

Розглянемо випадок, коли внутрішня енергія перетворюється не лише на кінетичну, а й на повну механічну енергію.



Тоді замість системи (1)–(3) маємо:

$$\begin{aligned}\dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p}, \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} - \gamma \frac{\partial H}{\partial p} + \beta \varepsilon \frac{\partial H}{\partial p} + \alpha \varepsilon \frac{\partial H}{\partial q}, \\ \dot{\varepsilon} &= \frac{\varepsilon_e - \varepsilon}{\tau} - 2\mu\varepsilon K(p) - 2\sigma\varepsilon P(q),\end{aligned}\quad (9)$$

де  $\alpha$  та  $\sigma$  – відповідні позитивні константи зв'язку, що задаються компонентами потенціальної енергії системи. Крім того, введемо позначення для співвідношення коефіцієнтів зв'язку сил, що діють на систему, і констант зв'язку внутрішньої енергії з кінетичною/потенціальною енергіями  $\varphi \equiv \alpha\gamma/\beta$ ,  $\psi \equiv \sigma/\mu$ . Тоді в рамках описаного раніше методу для гармонічного руху одержуємо три особливі точки:  $O(0; 0)$ ,  $C(-\sqrt{(\varepsilon_e\varphi - 1)/(\psi\chi)}; 0)$ ,  $D(\sqrt{(\varepsilon_e\varphi - 1)/(\psi\chi)}; 0)$ . Відповідні фазові портрети зображені на рисунку 2. У разі ангармонічного руху маємо 7 особливих точок. Приклад зазначеного стану системи ілюструється фазовим портретом на рисунку 3.

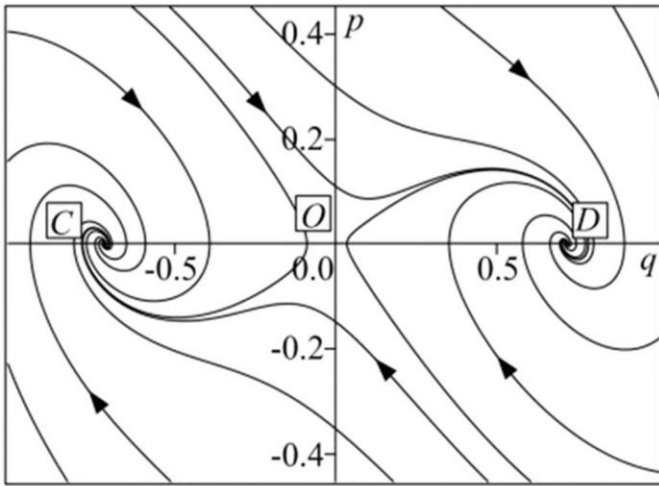


Рисунок 2 – Фазовий портрет системи (9) при  $\varepsilon_e = 0.5$ ,  $\varphi = 3$

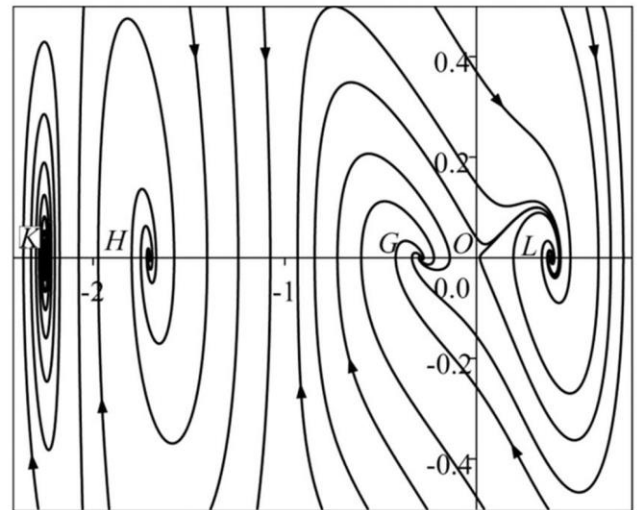


Рисунок 3 – Фазовий портрет у випадку ангармонічного руху при  $\varepsilon_e = 0.5$ ,  $\varphi = 1$ ,  $\chi = 1$ ,  $\kappa = 3$ ,  $\eta = 1$

Звичайно цей розгляд враховує лише пасивні (теплові) коливання колоїдних частинок. Але, навіть унаслідок такого підходу можна зробити висновок про вплив параметрів середовища або характер перерозподілу внутрішньої енергії на динамічні режими утворення ансамблю наночастинок.

У *третьому підрозділі* розглянута синергетична модель переходу між режимами руху наночастинок. Для опису режимів руху ансамблю наночастинок можна використати іншу систему трьох диференціальних рівнянь на основі системи Лоренца. При цьому параметр порядку зводиться до середньої швидкості  $v$  руху системи, сполучене поле являє собою далекодійчу силу, а керуючий параметр характеризує внутрішній стан, що визначає реакцію частинок на цю силу. Використовуючи стандартний підхід Лоренца, ми одержали загальну картину самоорганізації, що характеризує поведінку групи частинок у цілому. Проведене

дослідження показало, що введення стохастичних джерел до стандартної системи Лоренца дозволяють представити основні особливості переходу до переривчастого руху групи активних частинок, що частіше за все спостерігається в експерименті.

У третьому розділі «Статистична теорія поля неадитивної системи» на основі польових методів розвинена статистична теорія складних систем, термодинамічні потенціали яких не мають властивості адитивності.

У першому та другому підрозділах розглянуті неадитивні системи та наведені основні співвідношення польової схеми. Представимо поведінку стохастичної системи (ансамблю наночастинок) просторово-часовою залежністю  $x(\mathbf{r}, t)$  амплітуди гідродинамічної моди, середнє значення якої зводиться до параметра порядку, що характеризує стан системи (наприклад, концентрацію наночастинок). Для опису цієї залежності будемо виходити з рівняння Ланжевена:

$$\dot{x}(\mathbf{r}, t) - D\nabla^2 x = -\gamma \frac{\partial F}{\partial x} + \zeta(\mathbf{r}, t). \quad (10)$$

Тут  $\nabla \equiv \partial/\partial \mathbf{r}$ ;  $D$  – параметр неоднорідності;  $\gamma$  – кінетичний коефіцієнт;  $F(x)$  – вільна енергія;  $\zeta(\mathbf{r}, t)$  – стохастичний доданок, визначений умовами білого шуму.

Третій підрозділ присвячений статистичній теорії поля. Ця теорія ґрунтується на методі генеруючого функціонала:

$$Z\{u(\mathbf{r}, t)\} = \int Z\{x\} \exp\left(\int u x d\mathbf{r} dt\right) \{\delta x\}, \quad \{\delta x\} \equiv \prod_{\mathbf{r}, t} \delta x(\mathbf{r}, t), \quad (11)$$

що являє собою функціональне перетворення Лапласа узагальненої статистичної суми. Варіювання генеруючого функціонала (11) за пробним полем  $u(\mathbf{r}, t)$  дозволяє знайти корелятори спостережуваної величини  $x(\mathbf{r}, t)$ :

$$\langle x(\mathbf{r}_1, t_1), \dots, x(\mathbf{r}_n, t_n) \rangle = \frac{1}{Z\{u=0\}} \left[ \mathcal{D}_{u(\mathbf{r}_1, t_1)}, \dots, \mathcal{D}_{u(\mathbf{r}_n, t_n)} \right] Z\{u(\mathbf{r}, t)\} \Big|_{u(\mathbf{r}, t)=0}, \quad (12)$$

та простежити еволюцію найбільш імовірних значень стохастичної змінної  $x$  та її дисперсії. Використовуючи рівняння Ейлера з дисипативною функцією  $\mathcal{R} = \dot{x}^2/2$ , одержуємо рівняння для найбільш імовірних значень концентрації наночастинок та її флуктуацій:

$$\dot{x} - \nabla^2 x = f + p, \quad (13)$$

$$\dot{p} + \dot{x} + \nabla^2 p = -f p. \quad (14)$$

Для неадитивних систем замість (11) маємо функціонал:

$$Z_q\{x(\mathbf{r}, t)\} = \frac{2\pi}{2-q} \int \exp\left[-S_q\{x(\mathbf{r}, t), p(\mathbf{r}, t)\}\right] \{\delta p\}, \quad (15)$$

що відрізняється від стандартного подання несуттєвим множником і заміною звичайної експоненти на деформовану експоненту Цалліса ( $q$  – параметр деформації або параметр неадитивності). У результаті деформація статистичної системи не впливає на форму лагранжіана, що приводить до тих самих рівнянь еволюції (13), (14). Таким чином, деформація фазового простору не змінює форму траєкторій, за якими проходить еволюція неадитивної системи. Визначимо густину вільної енергії Ландау з безрозмірною температурою  $\varepsilon$ ; крім того, градієнтні доданки  $\nabla^2 x$  та  $\nabla^2 p$

апроксимуємо лінійними функціями  $x/\xi^2$  і  $p/\lambda^2$  із масштабами  $\xi$  та  $\lambda$ . Тоді система (13)–(14) набуває вигляду:

$$\dot{x} = -\left[(\varepsilon - \xi^{-2}) + x\right]x + p, \quad (16)$$

$$\dot{p} + \dot{x} = \left[(\varepsilon - \lambda^2) + 3x^2\right]p. \quad (17)$$

Відповідні фазові портрети (рис. 4) мають центральносиметричну форму.

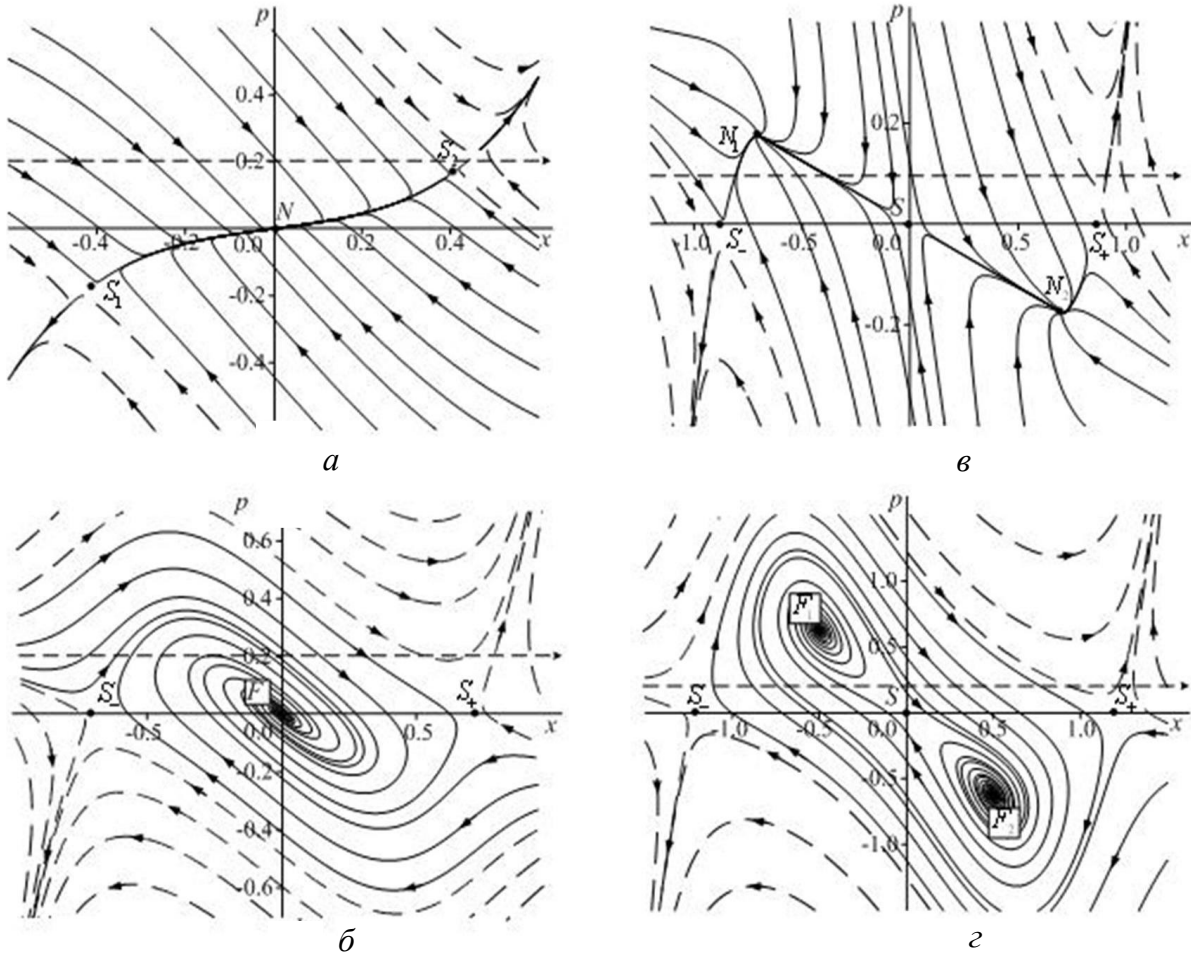


Рисунок 4 – Фазові портрети системи рівнянь (16)–(17): зліва – вище від точки переходу ( $\varepsilon = 0.5$ ) при  $\xi = 2$  та  $\lambda = 1$  (а),  $\xi = 1$  та  $\lambda = 2$  (б); справа – нижче від точки переходу ( $\varepsilon = -0.5$ ) при  $\xi = 2$  та  $\lambda = 1$  (в),  $\xi = 1$  та  $\lambda = 2$  (г)

Із рисунка 4 а видно, що за сильної неоднорідності флуктуацій вище від точки переходу, якщо виконуються умови  $0 < \varepsilon < \lambda^{-2}$ , реалізується стійкий вузол  $O$ , розташований на початку координат  $x_0 = 0$ ,  $p_0 = 0$ , та пара центральносиметричних сідел  $S_{1,2}$ . Очевидно, така картина відповідає однорідному невпорядкованому стану ансамблю наночастинок. Із ослабленням неоднорідності в розподілі флуктуацій до такої міри, що порушується нерівність  $\varepsilon < \lambda^{-2}$ , і з посиленням неоднорідності розподілу концентрації наночастинок, що забезпечує умову  $\varepsilon < \xi^{-2}$  (рис. 4 б), сідла  $S_{\pm}$  симетрично зміщуються на вісь абсцис, а вузол  $O$  трансформується у фокус. Доречно припустити, що така ситуація становить еволюцію невпорядкованої системи через стадію гетерофазних флуктуацій. І нарешті, з розмиванням

просторових розподілів амплітуди флуктуацій і параметра порядку, якщо одночасно виконуються нерівності  $\varepsilon < \lambda^{-2}$ ,  $\varepsilon < \xi^{-2}$ , відбувається зворотна біфуркація пари сідел  $S_{\pm}$  та вузла  $O$  в сідло  $S$ , розташоване на початку координат. Перехід у впорядковану фазу  $\varepsilon < 0$  (рис. 4 в, г) забезпечує виконання умов  $\varepsilon < \lambda^{-2}, \xi^{-2}$ , за яких можливі конфігурації фазових портретів визначаються наявністю п'яти особливих точок – сідла  $S$ , розташованого на початку координат, центральносиметричних стійких вузлів / фокусів  $N_{1,2} / F_{1,2}$  та пари сідел  $S_{\pm}$ , симетрично розташованих на осі абсцис. Проведений розгляд показує, що деформація статистичного розподілу, який приводить до неадитивності термодинамічних потенціалів, не вимагає принципових змін при використанні польових методів для опису складних систем. Зокрема виявляється, що еволюція найбільш імовірних значень концентрації наночастинок і амплітуди її флуктуацій взагалі не відчуває змін, тоді як імовірності реалізації різних фазових траєкторій залежать від параметра неадитивності  $q$ . При цьому польовий формалізм модифікується так само, як і статистика Цалліса.

У четвертому підрозділі наведені основні залежності від параметра неадитивності. Термодинамічні властивості неадитивності систем, що складаються з  $N$  частинок, визначаються  $q$ -деформованою вільною енергією  $F_{qN} := -T \ln_q(Z_{qN})$ . Оскільки  $q$ -логарифм статистичної суми зберігає свою адитивність, визначений таким чином термодинамічний потенціал може бути поданий у стандартній формі  $F_{qN} = Nf_q$ , де питома вільна енергія  $f_q := -T \ln_q(Z_q)$  задається статистичною сумою  $Z_q$ , що припадає на одну частинку. При  $q \neq 1$  величина  $Z_q$  залежить від кількості частинок  $N$ , завдяки чому порушується умова адитивності  $F_{qN} \propto N$  повної вільної енергії.

Розглянемо поведінку моментів спостережуваних величин залежно від параметра неадитивності. Оскільки для вільного поля моменти непарних порядків дорівнюють нулю, то на рис. 5 наведені дані для великих значень параметрів ангармонізму. Привертає увагу той факт, що за фіксованого порядку  $m$  момент  $\langle x^m \rangle_q$  масштабується кількістю частинок  $N^m$ , взятих так само. Крім того, виявляється, що моменти  $\langle x^{2n-1} \rangle_q$  непарного порядку набувають негативних значень, а  $\langle x^{2n} \rangle_q$  – позитивних.

Із порівняння кривих, які відповідають різним ступеням ангармонізму, на рис. 6 видно, що його зростання приводить до збільшення абсолютних значень моментів непарного порядку.

При інтерпретації знайдених залежностей статистичної суми і моментів спостережуваних величин від параметра неадитивності необхідно мати на увазі, що в самоподібних системах його значення  $q$  не є вільними. Це пов'язано з тим, що при деформації фазового простору, що розтягує одну з осей  $x, p$  в  $\lambda$  разів і знижує іншу так само (внаслідок цього фазовий об'єм не змінюється), повинна виконуватися умова самоподібності розподілу станів  $x, p$ . Це виявляється у тому, що фізичні

значення величин задаються не вихідною ймовірністю  $p(x)$ , а ескортною, яка є степеневою функцією.

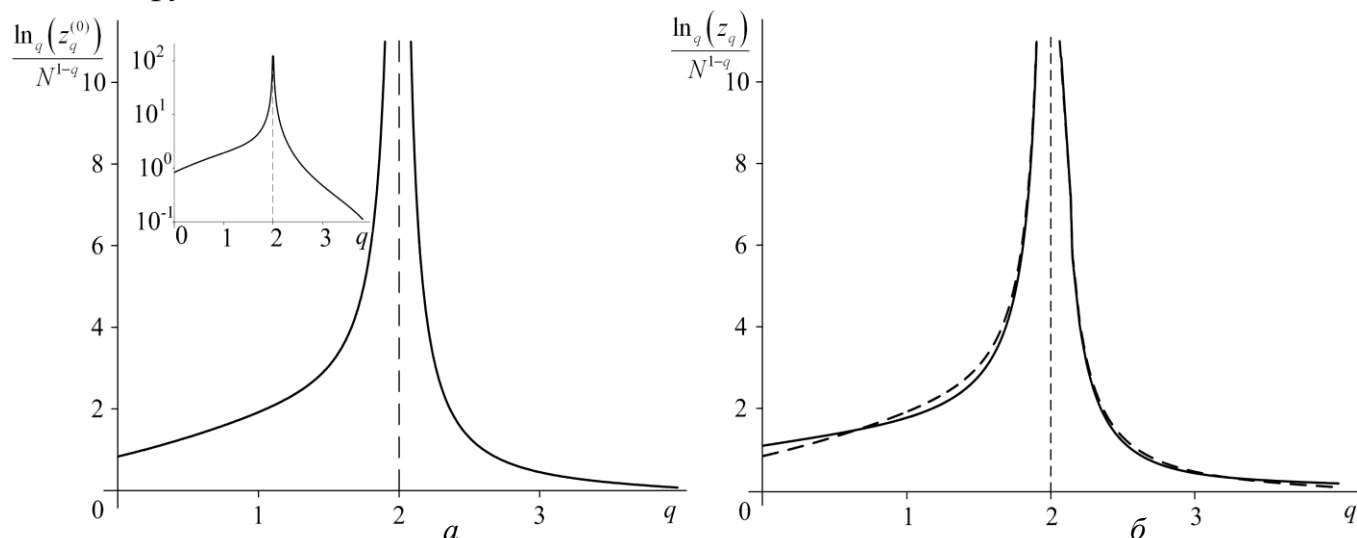


Рисунок 5 – Залежність  $q$ -логарифма: а) для одночастинкової статистичної суми  $z_q$  від параметра неадитивності (на вставці використані напівлогарифмічні координати); б) для статистичної суми вільного поля (штрихова лінія) і з урахуванням ангармонізму при  $\lambda = \mu = 12$  (суцільна)

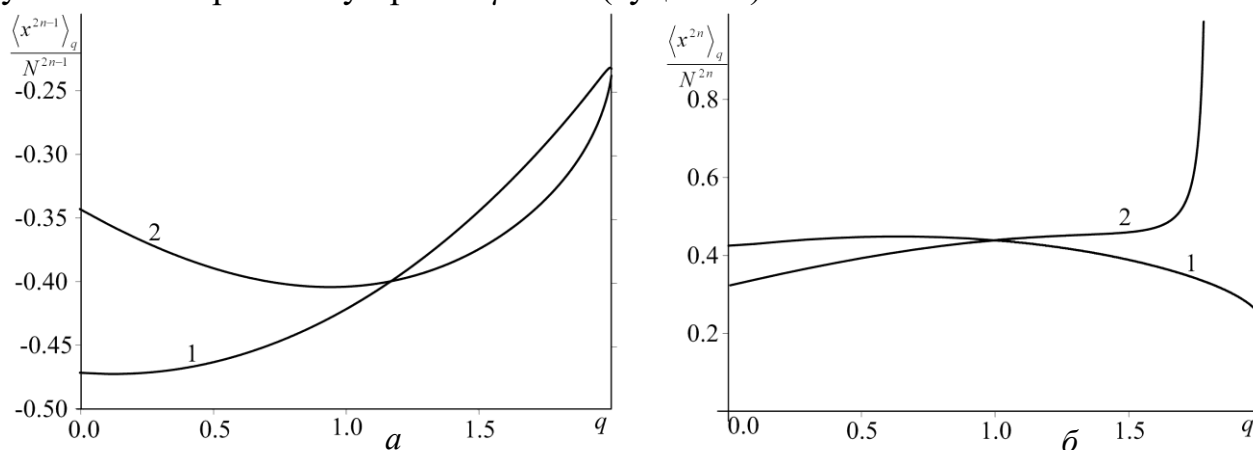


Рисунок 6 – Залежності моментів  $\langle x^{2n-1} \rangle_q$  (а) та  $\langle x^{2n} \rangle_q$  (б) від параметра неадитивності при  $\lambda = \mu = 12$  (криві 1, 2 відповідають  $n = 1, 2$ )

У четвертому розділі «Магнітні фазові переходи в нанокластерних системах» у рамках теорії середнього поля досліджений фазовий перехід парамагнетик – феромагнетик для деформованої статсуми.

У першому підрозділі розглянутий мікроскопічний підхід у рамках моделі Ізінга. Деформований гамільтоніан Ізінга був побудований за рахунок заміни спіну  $i$ -го вузла  $s_i$  на деформований варіант:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} s_i^q s_j^q - h \sum_i s_i^q. \quad (18)$$

Тут сума береться за всіма вузлами  $N$  решітки з індексами  $i \neq j$ ;  $J_{ij}$  – потенціал ефективної взаємодії;  $h$  – зовнішнє поле;  $s_i = \pm 1$  – значення спіну в кожному вузлі;  $q$  – параметр неадитивності (деформації). Для подальшого розгляду необхідно

визначити середнє  $\langle s^q \rangle$  з дробовим показником  $q$ . Відомо, що якщо існує початковий розподіл для стохастичної змінної  $x = s^q$ , то можна використати співвідношення  $s^q P(s) ds = x P_q(x) dx$ . При цьому така задача має сенс лише у випадку самоподібних систем, де функція розподілу має степеневий вигляд, тобто  $P(s) = N_p^{-1} s^{-\mu}$ , де  $\mu$  – показник степеня;  $N_p = a^{\mu-1} / (1-\mu)$  ( $a \rightarrow 0$ ) – константа нормування. Унаслідок цього дробове середнє можна представити у вигляді:

$$\langle s^q \rangle = \beta^{-1} (N_p (2-\mu))^{\beta-1} \langle s \rangle^\beta, \quad (19)$$

де введено позначення  $\beta \equiv (q+1-\mu) / (2-\mu)$ .

Параметр порядку, що відрізняє невпорядкований стан (парамагнітний) від впорядкованого (феромагнітний), являє собою середній спін  $\langle s_i \rangle = \langle s \rangle = \eta$ . Одержимо одержимо ефективний гамільтоніан неадитивної системи у вигляді:

$$H_{ef} = -\sum_i (h + CT_c \eta^\beta) s_i, \quad (20)$$

де параметр  $C \equiv \beta^{-1} (N_p (2-\mu))^{\beta-1}$ .

Обчисливши статистичну суму за всіма наборами можливих орієнтацій спінів для всіх вузлів та скориставшись її зв'язком з вільною енергією, одержимо остаточний вираз для вільної енергії неадитивної системи:

$$F = \frac{N}{2} T_c \eta^2 - TN \ln 2 - TN \ln \text{ch} \left( \frac{h}{T} + C \frac{T_c}{T} \eta^\beta \right). \quad (21)$$

Перший доданок відповідає енергії самодії, другий – визначає зменшення енергії за рахунок зростання хаосу. Основну роль у рівнянні (21) відіграє останній доданок, який не зводиться до стандартної форми Ландау. Для одержання феноменологічної теорії у виразі (21) був проведений розклад гіперболічного косинуса та логарифма. Унаслідок цього для вільної енергії, що припадає на один вузол  $f = F/N$ , одержана формула в наближенні  $h = 0$ :

$$f = \frac{T_c}{2} \eta^2 - \frac{C^2 T_c^2}{2T} \eta^{2\beta} + \frac{C^4 T_c^4}{12T^3} \eta^{4\beta}. \quad (22)$$

Стаціонарне значення середнього спіну обчислимо з умови рівноваги  $\partial f / \partial \eta = 0$ . Очевидно, що перше стаціонарне рішення  $\eta_0 = 0$  відповідає невпорядкованому стану. Вираз для стаціонарного значення, що відповідає впорядкованому стану, одержимо завдяки наближенню  $|T - T_c| \ll T_c$  та введенню безрозмірної температури

$$\theta = \frac{T}{T_c}. \quad (23)$$

Отже, можна одержати (див. рис. 7) залежність  $\theta \eta_0$ :

$$\theta = \beta C^2 \eta_0^{2(\beta-1)} \left( 1 - \frac{C^2}{3} \eta_0^{2\beta} \right). \quad (24)$$

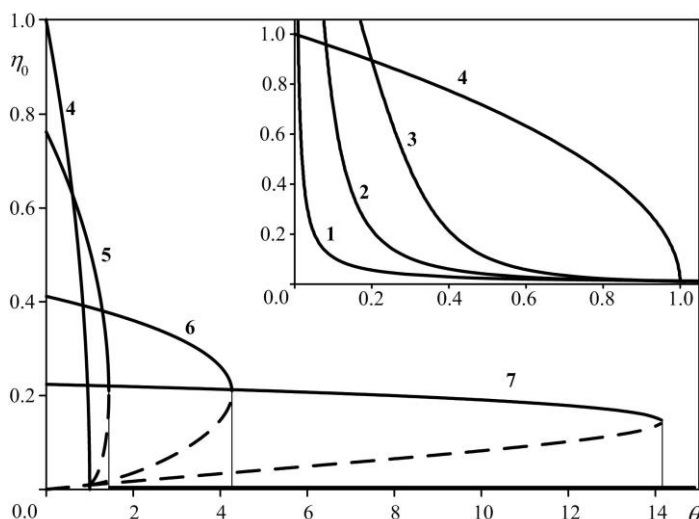


Рисунок 7 – Залежність рівноважного значення параметра порядку  $\eta_0$  від безрозмірної температури  $\theta$  для  $a = 0.001$ ,  $\mu = 0.5$ . Крива 1 відповідає  $q = 1/5$ ,  $2 \rightarrow q = 3/5$ ,  $3 \rightarrow q = 7/9$ ,  $4 \rightarrow q = 1$ ,  $5 \rightarrow q = 21/19$ ,  $6 \rightarrow q = 7/5$ ,  $7 \rightarrow q = 9/5$

На рисунку 7 відображена температурна залежність рівноважного значення параметра порядку для різних значень параметра  $q$ . При цьому для  $q < 1$  змінюється характер залежності (порівнюючи криві 1–3 з кривою 4 на рис. 7). Також необхідно зазначити, що для кривих 2, 3 максимально можливе значення параметра порядку реалізується за температури порядку  $(0,1 - 0,2)T_c$ . Цей результат пояснюється тим, що залежність (24) одержали за умови наближення  $|T - T_c| \ll T_c$ . Аналізуючи криві 5–7 на рис. 7, можна зробити висновок, що рівноважне значення параметра порядку відчуває стрибок, тобто фазовий перехід для неадитивних систем може реалізовуватися за механізмом фазового переходу першого роду (останнє може бути перевірено лише експериментально), або значення параметра  $q > 1$  для такого випадку не реалізується.

У другому підрозділі розглянутий термодинамічний підхід у рамках наближення Ландау. На рисунку 8 показано, що характер фазового переходу визначається параметром  $\delta$ , що задається коефіцієнтом стискання нанокластерної системи, що теоретично підтверджує експериментальні результати.

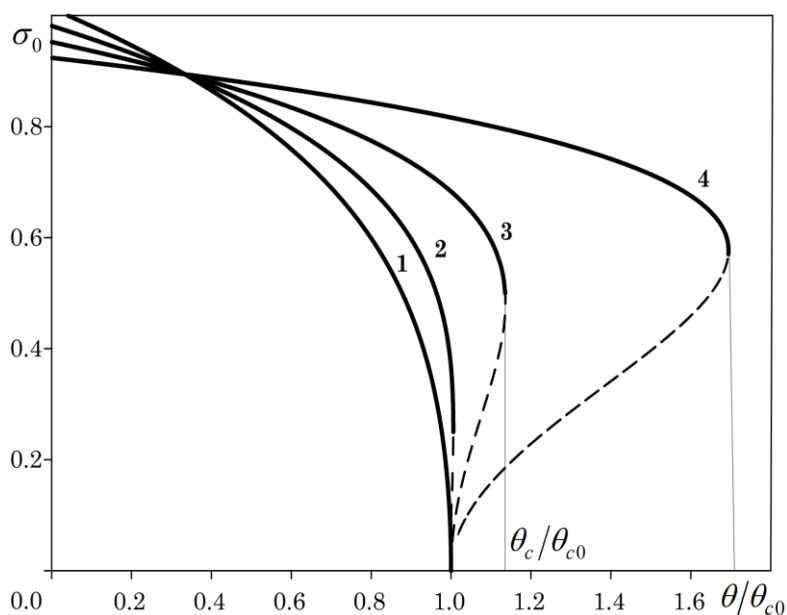


Рисунок 8 – Температурна залежність стаціонарного значення відносної намагніченості для різних значень коефіцієнта стискання  $\delta$ ,  $1 \rightarrow \delta = 0.5$ ,  $2 \rightarrow \delta = 1$ ,  $3 \rightarrow \delta = 2$ ,  $4 \rightarrow \delta = 5$

Також було проаналізовано феноменологічну модель переходу між парамагнітним та магнітовпорядкованим станами нанокластерної системи за механізмом фазового переходу першого роду з урахуванням міжкластерної взаємодії та дії зовнішнього тиску. Обчислені температурна залежність

стаціонарного значення відносної намагніченості та критичне значення тиску, за якого можливий перехід.

## ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі проведені дослідження формування та режимів руху ансамблів наночастинок в рамках статистичної теорії, що дозволяє сформулювати такі висновки:

1. На основі канонічної системи, доповненої рівнянням швидкості зміни внутрішньої енергії, була побудована теоретична модель, що дозволяє описати різні режими формування ансамблів наночастинок. Розглянута кінетика руху наночастинок на основі фазових портретів системи за різних значень зовнішніх параметрів, що дозволяють установити умови формування ансамблю наночастинок. Досліджені різні випадки перетворення внутрішньої енергії частинок до кінетичної та повної механічної енергії для гармонічного та ангармонічного типів руху.

2. На основі синергетичної системи рівнянь побудована модель переходів між направленим, обертальним та переривчастим режимами руху наночастинок. Показано, що за умови врахування флуктуацій внутрішньої енергії можна описати перехід до переривчастого режиму руху. Побудовані діаграми можливих режимів поведінки ансамблю наночастинок за різних значень параметра внутрішнього стану.

3. Розвинена статистична модель, що описує поведінку ансамблю наночастинок на основі рівнянь для термодинамічних потенціалів, які не мають властивості адитивності. Одержано ефективний лагранжіан системи, виходячи з якого, визначені рівняння еволюції найбільш імовірних значень параметра порядку, що характеризує стан ансамблю наночастинок. Вперше у ході аналізу польової схеми для опису неадитивної системи наночастинок показано, що деформація статистичного розподілу не змінює рівняння еволюції найбільш імовірних значень концентрації наночастинок та амплітуди її флуктуацій, тоді як ймовірність реалізації різних фазових траєкторій істотно залежить від параметра неадитивності.

4. Розвинута теорія збурень, використання якої дозволяє знайти поправки довільного порядку до зазначених величин. Одержані рівняння генеруючого функціонала для систем, що мають внутрішню симетрію та зв'язки. Вперше під час дослідження умови самоподібності системи, що визначає зв'язок параметра неадитивності  $q$  та параметра деформації фазового простору  $\lambda$ , знайдено, що зі зміною параметра деформації від 0 до  $\infty$  параметр  $q$  зменшується від 2 до 1.5.

5. У рамках теорії середнього поля на основі деформованого гамільтоніана Ізінга досліджений перехід між різними магнітними станами ансамблю наночастинок. Показано, що врахування властивостей неадитивності дозволяє описати перехід між парамагнітним та феромагнітним станами нанокластерних систем за режимом фазового переходу першого роду, який на відміну від масивних зразків спостерігається у багатьох експериментах з ансамблями наночастинок.

6. Досліджена феноменологічна модель переходу між парамагнітним та магнітовпорядкованим станами нанокластерної системи з урахуванням міжкластерної взаємодії та дії зовнішнього тиску. Обчислені температурна



залежність стаціонарного значення відносної намагніченості та критичне значення тиску, за якого можливий перехід.

## СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ РОБІТ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

### 1. Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати

1. Исследование режимов движения наночастиц в рамках стохастической системы / О. В. Ющенко, **А. Ю. Бадалян** // *Журнал нано- та електронної фізики*. – 2012. – Т. 4, № 3. – С. 03009(1–6).
2. Statistical field theory of a non-additive system motion / A. I. Olemskoi, O. V. Yushchenko, **A. Yu. Badalyan** // *Theoretical and Mathematical Physics*. – 2013. – V. 174, No. 3. – P. 386–405.
3. Мікроскопічний опис неекстенсивних систем у рамках моделі Ізінга / О. В. Ющенко, **А. Ю. Бадалян** // *Український фізичний журнал*. – 2013. – Т. 58, № 5. – С. 497–504.
4. Canonical representation of the active nanoparticles kinetics / O. V. Yushchenko, **A. Yu. Badalyan** // *Universal Journal of Materials Science*. – 2014. – V. 2, No. 2. – P. 42–48.
5. Магнітні фазові переходи першого роду в нанокластерних системах в рамках наближення Ландау / О. В. Ющенко, **А. Ю. Бадалян** // *Журнал нано- та електронної фізики*. – 2017. – Т. 9, № 4. – С. 04022(5сс).

### 2. Наукові праці апробаційного характеру

6. The investigation of the external influence on the motion regimes of nanoparticles / O. V. Yushchenko, **A. Yu. Badalyan** // Proceedings of the International Conference «Nanomaterials: Applications And Properties» (Alushta, Crimea, 17–22 September 2012). – Sumy, 2012. – V. 1, № 2. – 02NNBM19 (3pp).
7. Transformation of the Internal Energy of the Active Nanoparticles under Canonical Representation / O. V. Yushchenko, **A. Yu. Badalyan** // Proceedings of the International Conference «Nanomaterials: Applications And Properties» (Alushta, Crimea, 16–21 September 2013). – Sumy, 2013. – V. 2, № 2. – 04NABM29 (4pp).
8. Kinetics of the Active Nanoparticles / O. V. Yushchenko, **A. Yu. Badalyan** // Proceedings of the International Conference «Nanomaterials: Applications And Properties» (Alushta, Crimea, 21–27 September 2014). – Sumy, 2014. – V. 3, № 2. – 02NNPT04(3pp).
9. Magnetic Transitions in Nanocluster Systems Taking into Account the External Field / O. V. Yushchenko, **A. Yu. Badalyan** // Proceedings of the International Conference «Nanomaterials: Applications And Properties» (Zatoka, 10–15 September 2017). – Sumy, 2017. – V. 3, №3 - 03NNSA1629(5pp).
10. Исследование коллективного поведения наночастиц с учетом флуктуаций управляющего параметра / О. В. Ющенко, **А. Ю. Бадалян** // Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии» (Севастополь, 12–16 сентября 2011 г.). – Севастополь, 2011. – С. 771–772.
11. Теория поля неаддитивных систем / О. В. Ющенко, **А. Ю. Бадалян** //

Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии» (Севастополь, 11–15 сентября 2012 г.). – Севастополь, 2012. – С. 735–736.

12. The description of the active nanoparticles kinetics within the bounds of canonical representation / O. V. Yushchenko, **A. Yu. Badalyan** // 23-ая Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии» (Севастополь, 8–14 сентября 2013 г.). – Севастополь, 2013. – С. 883-884.

13. Kinematics of nonextensive statistical systems / A. I. Olemskoi, O. V. Yushchenko, **A. Yu. Badalyan** // Науково-технічна конференція «Фізика, електроніка, електротехніка – 2011» (Суми, 18-22 квітня 2011 р.). – Суми, 2011. – С. 63.

14. Statistical field theory of nonextensive systems / A. I. Olemskoi, O. V. Yushchenko, **A. Yu. Badalyan** // 36-th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Lviv, 5–7 april 2011 y.). – Lviv, 2011. – P. 131.

15. Theoretical description of collective motion of active nanoparticles / O. V. Yushchenko, **A. Yu. Badalyan** // III Young Scientists Conference «Modern Problems of Theoretical Physics» (Kiev, 21–23 december 2011 y.). – Kiev, 2011. – P. 62.

16. Исследование стохастической динамики движения наночастиц / О. В. Ющенко, **А. Ю. Бадалян** // Науково-технічна конференція «Фізика, електроніка, електротехніка – 2012» (Суми, 16–21 квітня 2012 р.). – Суми, 2012. – С. 79.

17. Статистичний опис колективного руху наночастинок / О. В. Ющенко, **А. Ю. Бадалян** // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЄВРИКА-2012 (Львів, 19–22 квітня 2012 р.). – Львів, 2012. – С. A28.

18. Microscopic representation of non-extensive systems within the Ising model / O. V. Yushchenko, **A. Yu. Badalyan** // 4th Conference «Statistical Physics: Modern Trends and Applications» (Lviv, 3–6 july 2012 y.). – Lviv, 2012. – P. 139.

19. Аналіз кінетики руху наночастинок / О. В. Ющенко, **А. Ю. Бадалян** // Науково-технічна конференція «Фізика, електроніка, електротехніка – 2013» (Суми, 22–27 квітня 2013 р.). – Суми, 2013. – С. 64.

20. Active Brownian motion of Self-propelled Particles / O. V. Yushchenko, **A. Yu. Badalyan** // International Conference of young scientists and post-graduates IEP–2013 (Uzhhorod, 20–23 may 2013 y.). – Uzhhorod, 2013. – P. 165-166.

21. A self-assembly of nanoparticles / O. V. Ющенко, **А. Ю. Бадалян** // Науково-технічна конференція «Фізика, електроніка, електротехніка – 2014» (Суми, 21–26 квітня 2014 р.). – Суми, 2014. – С. 90.

### **3. Праці, які додатково відображають наукові результати**

22. Statistical description of the collective motion of nanoparticles / O. V. Yushchenko, **A. Yu. Badalyan** // *Physical Review E*. – 2012. V. 85. – P. 051127 (6).

23. Кинетика движения активных броуновских наночастиц / О. В. Ющенко, **А. Ю. Бадалян** // II Всероссийская научно-техническая конференция молодых ученых, аспирантов и студентов с международным участием «Высокие технологии в современной науке и технике» (Томск, 27–29 март 2013 г.). – Томск, 2013. – С. 106–108.

24. Влияние стохастического источника на режимы движения наночастиц / О. В. Ющенко, **А. Ю. Бадалян** // III Всероссийская молодежная конференция с элементами научной школы «Функциональные наноматериалы и высокочистые вещества» (Москва, 29 мая–1 июня 2012 г.). – Москва, 2012. – С. 653-654.
25. Микроскопическая теория неэкстенсивных систем в рамках модели Изинга / О. В. Ющенко, **А. Ю. Бадалян** // Международная научная школа «Теоретическая физика», Воронеж: ИПЦ «Научная книга» (Воронеж, 26–27 июня 2012 г.). – Воронеж, 2012. – С. 64-65.
26. Кинетическое описание движения наночастиц / О. В. Ющенко, **А. Ю. Бадалян** // Всероссийская молодежная научная школа «Химия и технология полимерных и композиционных материалов» (Москва, 26–28 ноябрь 2012 г.). – Москва, 2012. – С.335.

## АННОТАЦІЯ

**Бадалян А. Ю. Формування та режими руху ансамблів наночастинок в рамках статистичної теорії. – Рукопис.**

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла. – Сумський державний університет, Суми, 2018.

Дисертаційна робота присвячена розробленню оптимальних теоретичних моделей, що дозволяють описувати поведінку наночастинок на мікроскопічному рівні з урахуванням неадитивності властивостей та колективну поведінку ансамблів наночастинок у процесі самоорганізації. Оскільки концепція самоорганізації є узагальненням фізичного поняття фазового переходу, то викладений в роботі феноменологічний підхід необхідно вважати розвитком схем термодинамічних перетворень на відкриті складні системи. Для підтвердження спільності синергетичної теорії досліджується декілька підходів при описі поведінки ансамблів наночастинок.

У літературному огляді були визначені цілі та завдання дисертаційної роботи, обґрунтована актуальність дослідження. Для кожного з досліджених процесів самоорганізації був визначений мінімальний набір ступенів свободи. Подані кілька систем диференціальних рівнянь, що дозволяють самостійно описувати процес самоорганізації ансамблів наночастинок. Обчислені стаціонарні значення основних параметрів, що визначаються розв'язками систем диференціальних рівнянь.

Також досліджена динаміка процесу самоорганізації наночастинок; вивчена стохастична картина самоорганізації за допомогою флуктуацій основних параметрів системи; побудована статистична картина переходу між різними режимами руху наночастинок; у рамках мікроскопічного підходу досліджені властивості основних параметрів наносистем; проаналізована феноменологічна модель переходу між парамагнітним та магнітовпорядкованим станами нанокластерної системи за механізмом фазового переходу першого роду з урахуванням міжкластерної взаємодії та дії зовнішнього тиску; обчислені температурна залежність стаціонарного значення відносної намагніченості та критичне значення тиску, за якого можливий перехід.

**Ключові слова:** наночастинки, самоорганізація, параметр порядку, флуктуації, неадитивність.

## АННОТАЦИЯ

**Бадалян А. Ю. Формирование и режимы движения ансамблей наночастиц в рамках статистической теории. – Рукопись.**

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика твердого тела. – Сумский государственный университет, Сумы, 2018.

Диссертационная работа посвящена разработке оптимальных теоретических моделей, позволяющих описывать поведение наночастиц на микроскопическом уровне с учетом свойств неадитивности и коллективное поведение ансамблей наночастиц в процессе самоорганизации. Так как концепция самоорганизации является обобщением физического понятия фазового перехода, то изложенный в работе феноменологический подход следует считать развитием схемы термодинамических преобразований на открытые сложные системы. Для подтверждения общности синергетической теории исследуется несколько подходов при описании поведения ансамблей наночастиц.

В литературном обзоре были обозначены цели и задачи диссертационной работы, обоснована актуальность исследования. Для каждого из исследованных процессов самоорганизации был определен минимальный набор степеней свободы. Представлены несколько систем дифференциальных уравнений, позволяющих самостоятельно описывать процесс самоорганизации ансамблей наночастиц. Найденные стационарные значения основных параметров, определяемые решениями систем дифференциальных уравнений.

Также исследована динамика процесса самоорганизации наночастиц; изучена стохастическая картина самоорганизации с помощью флуктуаций основных параметров системы; построена статистическая картина перехода между различными режимами движения наночастиц; в рамках микроскопического подхода исследованы свойства основных параметров наносистем; проанализирована феноменологическая модель перехода между парамагнитным и магнитоупорядоченным состояниями нанокластерной системы по механизму фазового перехода первого рода с учетом межкластерного взаимодействия и действия внешнего давления; найдена температурная зависимость стационарного значения относительной намагниченности и критическое значение давления, при котором возможен переход.

**Ключевые слова:** наночастицы, самоорганизация, параметр порядка, флуктуации, неадитивность.

## ABSTRACT

**Badalyan A. Yu. The formation and regimes of nanoparticle within the statistical theory. – Manuscript.**

Thesis for a candidate of physics and mathematics sciences degree, by specialty 01.04.07 – solid state physics. – Sumy State University, Sumy, 2018.

The thesis is devoted to the development of optimal theoretical models that allow describing the behavior of nanoparticles at a microscopic level, taking into account the properties of nonadditivity and the collective behavior of ensembles of nanoparticles in the process of self-organization. Since the concept of self-organization is a generalization of the physical concept of a phase transition, the phenomenological approach presented in this paper should be considered as an evolution of the scheme of thermodynamic transformations to open complex systems. To confirm the generality of the synergetic theory, several approaches are considered in describing the behavior of ensembles of nanoparticles.

In the literary review, the goals and objectives of the dissertation work were identified, the relevance of the study was substantiated. For each of the self-organization processes studied, a minimum set of degrees of freedom was defined. Several systems of differential equations are presented that allow one to describe independently the process of self-organization of ensembles of nanoparticles. The stationary values of the basic parameters, determined by solutions of systems of differential equations, are found.

The dynamics of the self-organization of nanoparticles was also studied; the stochastic picture of self-organization by means of fluctuations of the basic parameters of the system is studied; a statistical picture of the transition between different regimes of motion of nanoparticles is constructed; in the framework of a microscopic approach, the properties of the main parameters of nanosystems were investigated; the phenomenological model of the transition between the paramagnetic and magnetically ordered states of a nanocluster system is analyzed by the mechanism of the first-order phase transition, taking into account the intercluster interaction and the action of external pressure; the temperature dependence of the stationary value of the relative magnetization and the critical value of the pressure at which the transition is possible are found.

**Key words:** nanoparticles, self-organization, order parameter, fluctuations, nonadaptivity.

Підписано до друку 17.08.2018.  
Формат 60×90/16. Ум. друк. арк. 0,9. Обл.-вид. арк. 1,1.  
Тираж 100 пр. Зам. № 841

Видавець і виготовлювач  
Сумський державний університет,  
вул. Римського-Корсакова, 2, м. Суми, 40007  
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3062 від 17.12.2007.