

УДК 531.19; 539.682 Е.В.Фарафонтова, ассист., канд. физ.-мат. наук;  
И.И. Наркевич, проф., д-р физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЕДИНОЙ МОЛЕКУЛЯРНО-  
СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ РАСЧЕТА СВОБОДНОЙ  
ЭНЕРГИИ, ЭНТРОПИИ, ТЕПЛОЕМКОСТИ КРИСТАЛЛА  
С ВАКАНСИЯМИ И ЖИДКОСТИ С УЧЕТОМ  
ИСКЛЮЧЕННОГО ОБЪЕМА**

Ранее разработанная в рамках двухуровневого молекулярно-статистического подхода единая статистическая модель кристалла, жидкости и газа используется для описания структуры и термодинамических характеристик макроскопической системы [1].

Полученное с помощью этой модели статистическое выражение для свободной энергии  $F = U - TS$  позволяет рассчитать энтропию, внутреннюю энергию и теплоемкость системы:

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_V, \quad U = F + TS,$$

$$C_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = -T \left( \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_V = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V. \quad (1)$$

Молекулярные энтропия  $s = S/N$  и теплоемкость  $c_v = C_V/N$  рассчитывались путем дифференцирования свободной энергии, приходящейся на одну молекулу ( $f = F/N$ ):

$$s = - \left( \frac{\partial f}{\partial \theta} \right)_v, \quad c_v = \theta \left( \frac{\partial s}{\partial \theta} \right)_v = -\theta \frac{\partial^2 f(\theta, v)}{\partial \theta^2}, \quad \theta = kT. \quad (2)$$

В численных расчетах энтропия и теплоемкость рассчитывались с помощью первых разностных производных от свободной энергии  $f$  и энтропии  $s$  соответственно:

$$s \approx - \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta \theta}, \quad c_v \approx \theta \frac{s_{i+1} - s_i}{\Delta \theta} = \frac{\theta}{(\Delta \theta)^2} (2f_i - f_{i-1} - f_{i+1}). \quad (3)$$

Среднее значение теплоемкости  $c_v$  при  $v = 0,9$  в интервале температур от  $\theta_1 = 0,8$  до  $\theta_2 = 1,3$  равно приблизительно 2,9, где все величины с помощью параметров потенциала Леннард-Джонса представлены в безразмерной форме.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Наркевич И.И., Фарафонтова Е.В., Козич Е.Ю. Итерационная процедура решения системы двух интегральных уравнений для малой подсистемы молекул в поле остальных молекул среды с учетом неоднородностей в их распределении по объемам микрочаек / Труды БГТУ. 2015. № 6: Физ.-мат. науки и информатика – С. 73–77.