3. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. – М.: Наука, 1979.

4. Наркевич И.И. Метод множителей Лагранжа в проблеме нормировки коррелятивных функций многокомпонентного кристалла с дефектами // Высокочистые вещества. 1990. № 1. – С. 67-75.

5. Наркевич И.И. Статистическое изучение релаксации кристаллической решетки в окрестности дефектов различной природы // Весці АН БССР. Сер. фіз.-мат. навук. – Минск, 1988. № 5. – С. 86-92.

6. Narkevich I.I. A statistical study of the defect crystal lattice relaxation // Physica A. 1988. № 150. – P. 659-671.

7. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Молекулярно-статистическое описание неоднородно деформированных образцов. 1. Постановка задачи и метод ее решения // Инженерно-физический журнал. 2000. Т. 73. № 6. – С. 1313-1319.

8. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. – М.: Наука, 1971.

УДК 539.311

И.И. Наркевич, профессор; А.В. Жаркевич, ассистент

РАСЧЕТ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ И СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ОДНОМЕРНОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ОДНООСНОГО РАСТЯЖЕНИЯ - СЖАТИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО КРИСТАЛЛА

The expression for a free energy of the deformed linear of knot chain of the one-dimension crystal was obtained in this article. The calculation and analysis of dependence of a free energy and distribution functions of particles near the microcell knot from relative deformation at difference temperatures and concentrations was made.

Воспользуемся общим функциональным статистическим выражением [1,2] для свободной энергии неоднородной многокомпонентной системы молекул сортов μ. Применим его к разрабатываемой статистической модели одноосного растяжения-сжатия [3]. Для этого рассмотрим линейную цепочку из M узлов, по которым равномерно распределены N молекул. Поэтому узлы цепочки с вероятностью $n_a = N/M$ заняты молекулами (частицами сорта $\mu = a$). Вакантные узлы рассматриваются как узлы, занятые с вероятностью $n_в = 1 - n_a$ фиктивными частицами сорта $\mu = в$. Поскольку при однородной деформации цепочки поле относительной деформации $\lambda_l = \lambda = const$ ($l = 1,2,..M$), то функционал свободной энергии превращается в функцию двух внутренних параметров (концентрации $n \equiv n_a$ и деформации λ), подлежащих определению путем варьирования свободной энергии при фиксированных значениях общего числа частиц N. Воспользовавшись результатами работы [4] (см. предыдущую статью этого сборника) и вычислив соответствующие интегралы в квадратичном приближении по отклонению x молекул от узлов (центров микроячеек метода условных распределений проф. Ротта Л.А. [5]), получим выражение для свободной энергии деформированной цепочки:

$$F \cong \Theta M\left[n\ln n + (1-n)\ln(1-n) + n^2(1-n)^2 z^2\right] +$$
$$+\,\Theta M\left[\frac{n}{2}\left(\ln\left(\frac{\beta_1}{2\pi}\right) - \frac{\alpha_1^2}{\beta_1}\right) + \frac{n^2}{2}\left(1 + (1-n)^2 z\right)\left(\ln 2 + 2\varphi_1 + \frac{\alpha_1^2}{2\beta_1}\right)\right], \qquad (1)$$

где $\Theta = kT$ – приведенная температура, k – постоянная Больцмана.

Присутствующие здесь величины φ_1, α_1 и β_1 являются коэффициентами разложения потенциала средних сил $\varphi_1(x)$, для которых в [4] получена система трансцендентных уравнений (см. формулы (22) в [4]). Эта система трех уравнений устанавливает связь между шестью коэффициентами разложения пробного потенциала $\varphi_0(x')$ и потенциала $\varphi_1(x)$, который находится при решении нелинейного интегрального уравнения методом итераций.

Коэффициент φ_0 определяется из условия нормировки вспомогательной функции F_{11}^* и в окончательные уравнения не входит, потому система содержит пять неизвестных коэффициентов. Таким образом следует установить еще два уравнения связи для коэффициентов разложения. Воспользуемся имеющейся возможностью относительной свободы в выборе пробной функции $\varphi_0(x)$ при организации итерационной процедуры. Учтем, что итерационная процедура на ЭВМ заканчивается, если найденная функция φ_1 с достаточной точностью совпадает с предыдущей функцией φ_0, используемой в правой части решаемого интегрального уравнения. Поэтому заманчивым представлялось уже на первой итерации решения интегрального уравнения в приближении Гаусса положить $\varphi_1(x) = \varphi_0(x)$ и, следовательно, приравнять попарно коэффициенты α и β, т. е. положить $\alpha_1 = \alpha_0$, $\beta_1 = \beta_0$. Проведенный анализ такой возможности показал, что система уравнений (22) в [4] в этом случае не имеет решения для коэффициентов β. Это означает, что в данном приближении $\beta_1 \neq \beta$, и недостающие уравнения связи было решено устанавливать с помощью вариационного метода, основанного на экстремальных свойствах термодинамических потенциалов равновесных систем, например, свободной энергии.

Из выражения (1) видно, что оно содержит во вторых квадратных скобках линейный по концентрации n член, который в строгом выражении для свободной энергии должен отсутствовать, так как вклад от парных взаимодействий в пределе при n, стремящемся к нулю, когда можно пренебречь корреляцией в заполнении пар ячеек, должен быть квадратичным по n. Поэтому, приравнивая к нулю коэффициент при $n/2$ (в круглых скобках), получаем дополнительное уравнение связи между коэффициентами α_1 и β_1:

$$\ln\left(\frac{\beta_1}{2\pi}\right) - \frac{\alpha_1^2}{\beta_1} = 0. \tag{2}$$

Учитывая вышеизложенное о потенциалах $\varphi_0(x')$ и $\varphi_1(x)$, положим $\alpha_1 = \alpha_0$ ($\beta_1 \neq \beta_0$), тогда формулы (22) из [4] упрощаются ($\alpha_1 = a$):

$$\varphi_1 = \Phi_0 + \frac{\alpha_0^2}{4\beta_0} - \ln\left(\frac{n_{aa}}{n_l}\sqrt{\frac{\beta_0}{(в + \beta_0)}}\right), \tag{3}$$

$$\beta_1 = в - в^2/(в + \beta_0), \tag{4}$$

где

$$n_{aa} \approx n^2\left[1+(1-n)^2 z\right], \quad z=\sqrt{\frac{1}{2}}\exp\left(-\left\{\varphi_1+\frac{\alpha_1^2}{4\beta_1^2}\right\}\right)-1,$$

и совместно с уравнением (2) образуют полную систему трех уравнений для коэффициентов φ_1, β_1 и β_0. Величины Φ_0, а и в, входящие в уравнения (3,4), являются коэффициентами разложения потенциала Леннард-Джонса по смещениям молекул из узлов деформированной решетки с параметром R (R_0 - аналогичный параметр, т. е. расстояние между соседними узлами недеформированной решетки). Поэтому они являются известными функциями деформации λ (см. формулы (20) из [4]), которые после перехода с помощью параметров потенциала Леннард- Джонса (σ, ε) к безразмерным величинам графически представлены на рис. 1.

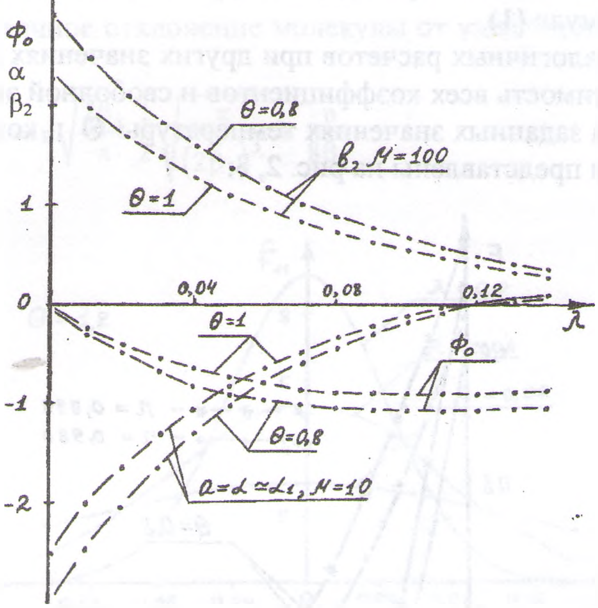

Рис. 1. Зависимость коэффициентов Φ_0, а и в от деформации λ (при R_0=1)

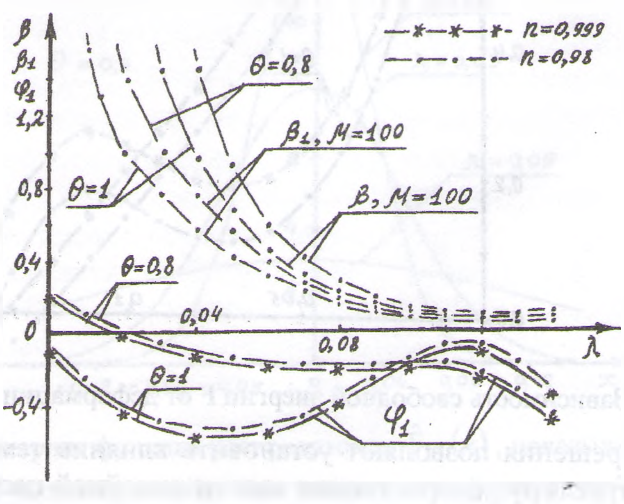

Рис. 2. Зависимость коэффициентов β, β_1 и φ_1 от деформации λ (при R_0=1)

Для решения системы нелинейных уравнений разработана блок-схема и составлена программа для ЭВМ с использованием пакета программ «Математика 3.0». Численное решение системы (2-4) выполнялось в следующей последовательности:

1. Задавались значения приведенной температуры Θ (в единицах параметра ε), концентрации n и деформации λ (при $R_0 = 1$ в единицах параметра σ).
2. По формулам (20) из [4] рассчитывались коэффициенты Φ_0, а и в.
3. В приближении $\alpha_1 \cong a$ с помощью пакета «Математика 3.0» решалось трансцендентное уравнение (2) относительно коэффициента β_1, а затем находили коэффициент β_0 из уравнения (4).
4. Нелинейное трансцендентное относительно коэффициента φ_1 уравнение (3) решалось также с использованием пакета «Математика 3.0».
5. Найденные значения всех коэффициентов использовались для расчета свободной энергии по формуле (1).

Результаты аналогичных расчетов при других значениях деформации λ позволили установить зависимость всех коэффициентов и свободной энергии от относительной деформации λ (при заданных значениях температуры Θ и концентрации n). Эти зависимости графически представлены на рис. 2, 3.

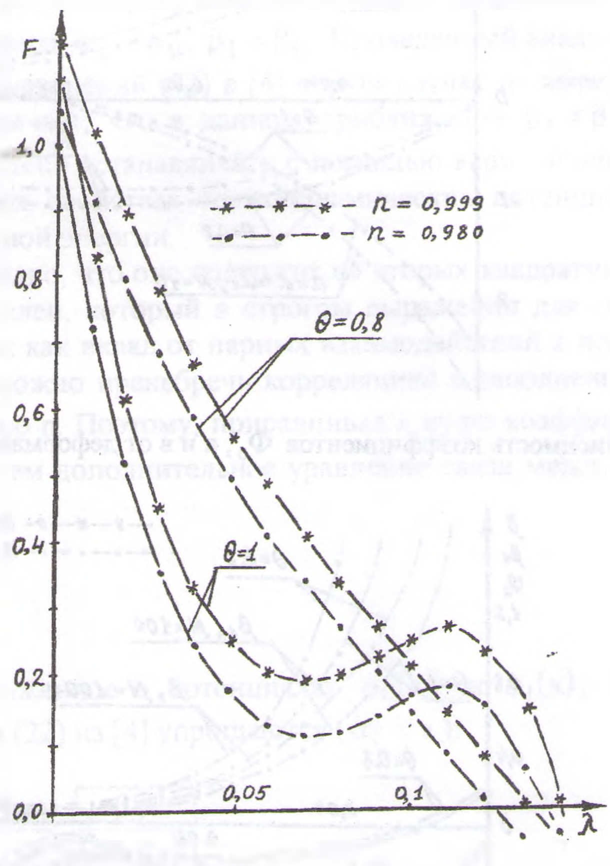

Рис. 3. Зависимость свободной энергии F от деформации λ (приR_0=1)

Полученные решения позволяют установить влияние температуры и концентрации вакансий на структуру распределения частиц линейной цепочки, которая описывается с помощью нормированных унарной функции распределения $\hat{F}_{11}(x)$ и вспомогательной функции распределения $\hat{F}^*_{11}(x)$, входящей в нелинейное интегральное уравнение для потенциалов средних сил. В квадратичном приближении по смещениям (приближение Гаусса) для линейной цепочки эти функции имеют следующий вид (см. формулы (23) из [4]):

$$\hat{F}_{11}(x) = n\sqrt{\frac{2\beta_1}{\pi}}e^{-2\beta_1 x^2}, \tag{5}$$

$$\hat{F}^*_{11}(x) = \sqrt{\frac{\beta_1}{\pi}}e^{-\left(\alpha_1^2/4\beta_1\right)}e^{-\left(\alpha_1 x+\beta_1 x^2\right)}. \tag{6}$$

Полученное аналитическое выражение для функций (5) с учетом зависимости коэффициента β_1 от деформации λ (рис. 2) показывает, что с увеличением деформации при растяжении линейной цепочки функция распределения $\hat{F}_{11}(x)$ «размывается» (рис. 4), а среднеквадратичное отклонение молекулы от узлов при этом увеличивается, поскольку

$$\left\langle x^2\right\rangle = \int x^2 \hat{F}_{11}(x)dx = n\sqrt{\frac{2\beta_1}{\pi}}\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\left(2\beta_1\right)^3}} = \frac{n}{8\beta_1}. \tag{7}$$

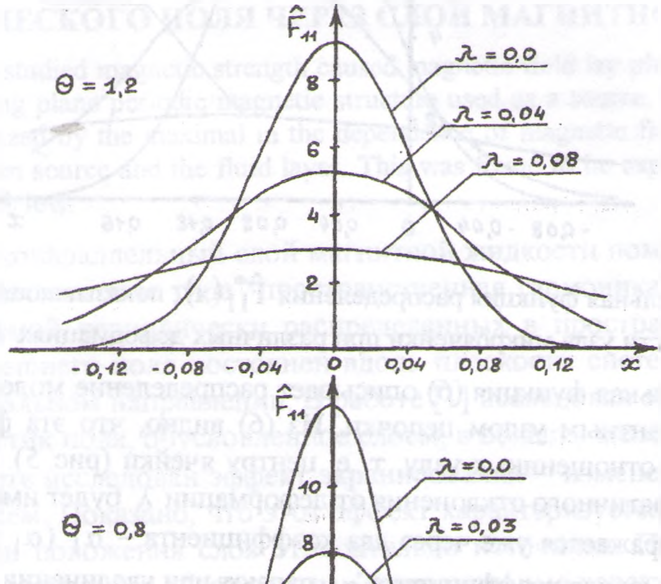

Рис. 4. Нормированная унарная функция распределения $\hat{F}_{11}(x)$, показывающая распределение частицы в окрестности узла микроячейки при различных деформациях λ и температуре Θ

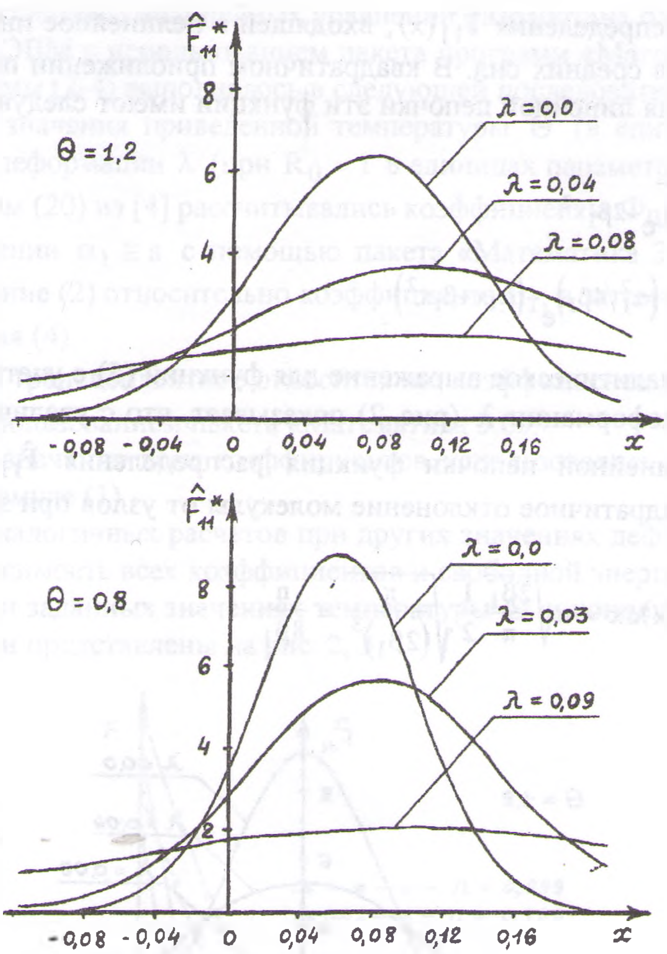

Рис. 5. Вспомогательная функция распределения $\hat{F}^*_{11}(x)$, показывающая распределение частицы в окрестности узла микроячейки при различных деформациях λ и температуре Θ

Вспомогательная функция (6) описывает распределение молекулы в ячейке, которая соседствует с вакантным узлом цепочки. Из (6) видно, что эта функция распределения асимметрична по отношению к узлу, т. е. центру ячейки (рис. 5). В этом случае зависимость среднеквадратичного отклонения от деформации λ будет иметь более сложный вид, поскольку оно выражается уже через два коэффициента – α_1 $(\alpha_1 \cong a)$ и β_1: значения коэффициента β_1 и модуля коэффициента α_1 падают при увеличении λ (рис. 1, 2).

Приведенные расчеты показывают, что предложенная одномерная статистическая модель одноосного растяжения – сжатия позволяет в явном виде учесть влияние структуры и взаимодействия на свободную энергию. Это означает, что созданы условия для построения основ статистической теории упругости, которая будет свободна от модельного феноменологического представления о сплошности материала (на микроуровне среда обладает дискретностью структуры) и способна описывать нелинейные участки диаграммы растяжения – сжатия, которые, как известно, отвечают за нелинейную упругость, пластичность и текучесть материала.

ЛИТЕРАТУРА

1. Наркевич И.И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред. Дисс. докт. физ.-мат. наук. – СПб.: СПГУ, 1993. – 242 с.
2. Наркевич И.И. Построение нелокальной статистической теории деформированных кристаллов с дефектами, проблемы и перспективы решения. // Труды БГТУ. Сер. физ. - мат. наук и информатики. Вып. VIII. – Минск, 2000. – С. 93-97.
3. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Молекулярно-статистическое описание неоднородно деформированных образцов. 1. Постановка задачи и метод ее решения. // Инженерно-физический журнал. Минск, 2000. Том 73. № 6. – С. 1313-1319.
4. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Исследование структуры одномерной статистической модели одноосного деформирования молекулярного кристалла // Труды БГТУ. Сер. физ. - мат. наук и информатики. Вып. IX. – Минск, 2001.
5. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. – М.: Наука, 1979.

УДК 537.84

А.Н. Вислович, доцент; А.Б. Сухоцкий, ассистент; А.А. Алексеев, студент

ПРОХОЖДЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГАРМОНИКИ МАГНИТОСТАТИЧЕСКОГО ПОЛЯ ЧЕРЕЗ СЛОЙ МАГНИТНОЙ ЖИДКОСТИ

Change was studied magnetic strength caused magnetic field lay placed in parallel behind flat screening plane periodic magnetic structure used as a source. The effect observed is characterized by the maximal in the dependence of magnetic field strength on the distance between source and the fluid layer. This was found to be explained by nonlinearly on magnetic low.

Введение. Плоскопараллельный слой магнитной жидкости помещается в неоднородное магнитостатическое поле типа “пространственная гармоника”, которое формируется плоской системой периодически распределенных в пространстве постоянных магнитов. Модуль внешнего поля постоянен вдоль плоскости системы и экспоненциально убывает в нормальном направлении. В работе [1] исследован эффект отражения - изменение характеристик поля, обусловленное слоем, в области между системой и слоем. В настоящей работе исследован эффект экранирования – изменение характеристик поля в области за слоем. Показано, что этот эффект характеризуется условным максимумом при изменении положения слоя относительно источника. При некоторой толщине слоя максимум становится абсолютным. Экстремальные характеристики эффекта обусловлены нелинейностью закона намагничивания жидкости. Дано приближенное описание регистрируемых эффектов путем обобщения представлений линейной теории на случай нелинейно намагничивающейся среды.

Описание экспериментальной установки. На рис. 1 изображена схема экспериментальной установки. В качестве источника магнитного поля использована плоская периодическая магнитная система 1, подробно представленная в работе [1].
На источник поля может быть установлена кювета 2, заполненная магнитной жидкостью. В экспериментах используются кюветы различной высоты с двумя ограничивающими горизонтальными пластинами 3 и 4, сделанными из органического стекла. Геометрические параметры кювет: длина (вдоль оси x) 60 мм, ширина (вдоль оси y) 50 мм, высоты 3,3 мм, 8,3 мм, 13 мм, 16,7 мм, 19,7 мм, толщина ограничивающих гори-