

находим величины $\min_{\{n_j, n_j, n_k\}} K(n_j, n_j, n_k)$ и $\max_{\{n_j, n_j, n_k\}} K(n_j, n_j, n_k)$, для определения которых используем процедуры Minimize и Maximize.

Расчеты, выполненные в соответствии с изложенным алгоритмом, показывают, что максимальная погрешность в оценке статистической суммы по сравнению с точным результатом [3] не превышает 5%.

ЛИТЕРАТУРА

1 Бокун, Г. С. Прямая оценка точности расчета статистической суммы решеточной системы с помощью потенциалов средних сил / Г. С. Бокун, В. С. Вихренко, Д.В. Гапанюк // Труды. БГТУ – 2012. – С. 45-47.

2 Вихренко, В. С. Равновесные и диффузионные характеристики интеркаляционных систем на основе решеточных моделей: монография / В. С. Вихренко, Я. Г. Грода, Г.С. Бокун. – Минск: БГТУ, 2008. – 326 с.

3 Ландау, Л. Д. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 1976. – 583 с.

УДК 536.758+539.311

И. И. Наркевич, проф., д-р физ.-мат. наук;

Е. В. Фарафонтова, мл. науч. сотр. (БГТУ, г. Минск);

А. К. Щекин, проф. д-р физ.-мат. наук (СПбГУ, г. Санкт-Петербург);

ЗАМКНУТАЯ СИСТЕМА ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛОВ СРЕДНИХ СИЛ МАЛОЙ ПОДСИСТЕМЫ МОЛЕКУЛ СРЕДЫ, НАХОДЯЩЕЙСЯ В СРЕДНЕМ ПОЛЕ ОСТАЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ ОДНОРОДНОЙ МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

Ранее в рамках двухуровневого молекулярно-статистического подхода [1] была разработана единая модель [2] конденсированной молекулярной среды, которая позволила получить всефазное уравнение состояния, обобщающее известное уравнение состояния М. Планка для разреженного газа [3]. В процессе обобщения был статистически введен энергоэнтропийный параметр всефазного уравнения состояния вместо энергетического параметра в уравнениях М. Планка и Ван-дер-Ваальса. Энергоэнтропийный параметр выражается через потенциалы средних сил модифицированного метода условных коррелятивных функций [1]. Эти потенциалы должны быть определены в результате решения системы интегральных уравнений для первых, вторых и т. д. координационных сфер гранецентрированной кубической

решетки, узлы которой образованы центрами совокупности микроячеек объемом ω , на которые в соответствии с методом условных распределений мысленно разделен весь объем изучаемой однородной либо неоднородной молекулярной системы. Построение статистической теории неоднородных систем необходимо, в частности, при определении профилей плотности и характеристик поверхностных слоев с плоской и сферической поверхностями раздела фаз [4].

По мере увеличения номера координационной сферы потенциалы средних сил за счет усреднения сглаживаются, глубина потенциальной ямы уменьшается, а абсолютные значения потенциалов средних сил стремятся к нулю. Поэтому будет логичным, если при расчете энергии выделенной молекулы в среде будет последовательно учтено взаимодействие с ближайшим окружением (первая и вторая координационные сферы) с помощью потенциалов средних сил, а вклад остальных молекул системы будет определен в приближении среднего поля. Для реализации этой идеи построим внутри среды сферическую полость радиуса b с центром в микроячейке ω , в которой находится выделенная молекула среды. Радиус b подберем так, чтобы внутри сферической полости оказались центры микроячеек, относящиеся к первой и второй координационным сферам. При этом потребуем, чтобы объем полости был равен суммарному объему микроячеек, центры которых принадлежат упомянутым координационным сферам. Тогда $4/3\pi b^3 = 19\omega$, а радиус $b = \sqrt[3]{57\omega/4\pi}$.

После применения принципа суперпозиции и выполнения усреднения потенциала Леннард-Джонса по равновероятным положениям второй молекулы в сплошной однородной среде за пределами сферической полости радиуса b было получено аналитическое выражение для потенциала $\varphi(x)$ молекулярного поля внутри полости [5].

$$\varphi(x) = \varphi^*(x) - \varphi^{**}(x), \quad (1)$$

где

$$\varphi^*(x) = \frac{4}{v} (\varphi_{12}^*(x) - \varphi_6^*(x)), \quad \varphi^{**}(x) = \frac{4}{v} (\varphi_{12}^{**}(x) - \varphi_6^{**}(x)), \quad (2)$$

$$\varphi_6^*(x) = \pi b \left(\frac{1}{(b-x)^2(b+x)^2} + \frac{b^2+3x^2}{3(b+x)^3(b-x)^3} \right),$$

$$\varphi_{12}^*(x) = \frac{\pi}{5} \left(\frac{2b(b^2+x^2)(b^4+6b^2x^2+x^4)}{(b-x)^8(b+x)^8} + \frac{(b-x)^9+(b+x)^9}{9(b-x)^9(b+x)^9} \right),$$

$$\Phi_6^{**}(x) = 2\pi \left[\frac{1}{3} \left(1 - \frac{1}{(b-x)^3} \right) - \frac{1}{4x} \left(1 - \frac{1}{(b-x)^2} \right) - \frac{1}{8} \left(1 - \frac{1}{(b-x)^4} \right) \right] \left(x - \frac{b^2}{x} \right)$$

$$\Phi_{12}^{**}(x) = 2\pi \left[\frac{1}{9} \left(1 - \frac{1}{(b-x)^9} \right) - \frac{1}{16x} \left(1 - \frac{1}{(b-x)^8} \right) - \frac{1}{20} \left(1 - \frac{1}{(b-x)^{10}} \right) \right] \left(x - \frac{b^2}{x} \right)$$

Потенциал $\Phi^*(x)$ описывает молекулярное поле внутри полости, которое создается внешней однородной сплошной средой. Потенциал $\Phi^{**}(x)$ учитывает корреляцию между положениями молекул внутри полости и за ее пределами [5]. В качестве примера на рисунке 1 приведены зависимости потенциалов $\Phi^*(x)$, $\Phi^{**}(x)$ и $\Phi(x)$, которые рассчитаны по формулам (1), (2).

Наличие выражения для потенциала $\Phi(x)$ позволяет решать задачу по определению функции распределения одиночной частицы среды в микроячейке ω_i и пар частиц, находящихся в микроячейках ω_i и ω_j ($i, j = 1, 2, \dots, M$):

$$\hat{F}_{11}(\bar{q}_i^\mu) = \frac{n_i^\mu}{Q_i^\mu} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \Phi_i(\bar{q}_i^\mu) \right\} \quad (3)$$

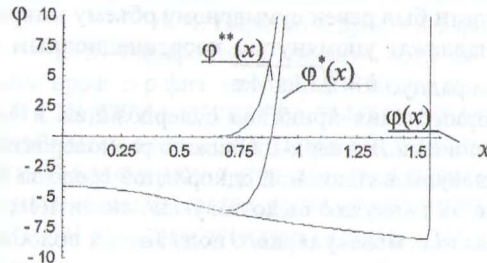


Рисунок 1 – Зависимость потенциалов $\Phi^*(x)$, $\Phi^{**}(x)$ и $\Phi(x)$ от координаты x при $b = 1,6$

$$\hat{F}_{11}^{(1)}(\bar{q}_i^\mu, \bar{q}_j^\nu) = \frac{n_{ij}^{\mu\nu}}{Q_{ij}^{\mu\nu}} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[\Phi_{\mu\nu}(r_{ij}) + \Phi_{ij}(\bar{q}_i^\mu) + \Phi_{ji}(\bar{q}_j^\nu) \right] \right\}, \quad (4)$$

где

$$\Phi_i(\bar{q}_i^\mu) = \sum_{k \neq i}^L \Phi_{ik}(\bar{q}_i^\mu) + \Phi(x_i) \quad (5)$$

$$\Phi_{ij}(\bar{q}_i^\mu) = \sum_{k \neq i, j}^L \Phi_{ik}(\bar{q}_i^\mu) + \Phi(x_i) \quad \Phi_{ji}(\bar{q}_j^\nu) = \sum_{k \neq j, i}^L \Phi_{jk}(\bar{q}_j^\nu) + \Phi(x_j) \quad (6)$$

Здесь индексы μ, ν определяют сорт частиц двухкомпонентной системы ($\mu, \nu = a$ для молекул среды, $\mu, \nu = e$ для квазичастиц, которые находясь в микроячейках, не взаимодействуют между собой и с реальными частицами, т. е. молекулами изучаемой однокомпонентной системы). Величины n_i^{μ} и $n_{ij}^{\mu\nu}$ являются одноячеечными и двухъячеечными числами заполнения одиночных микроячеек ω_i и пар микроячеек ω_i и ω_j соответственно. Потенциалы Φ_{ik} (или Φ_{jk}) являются потенциалами средних сил взаимодействия выделенной частицы в микроячейке ω_i (или ω_j) с частицами распределенных в микроячейке ω_k , центр которой принадлежит первой или второй координационным сферам. Индекс L определяет число микроячеек, центры которых находятся внутри сферической полости радиуса b , $\Phi_{aa}(r_{ij})$ – потенциал Леннарда-Джонса для двух молекул, наводящихся на расстоянии r_{ij} , причем одна молекула находится в микроячейке ω_i , а другая – в микроячейке ω_j (потенциалы с участием квазичастиц равны нулю по определению, т. е. $\Phi_{ee} = 0$, $\Phi_{ae} = 0$ и $\Phi_{ea} = 0$).

Общую систему замкнутых интегральных уравнений (см. формулу (30) в [2]), которая получена с учетом бинарных корреляций, будем использовать для расчета двух потенциалов средних сил взаимодействия выделенной молекулы в микроячейке ω_i с молекулами, распределенными в микроячейках ω_j , центры которых принадлежат первой и второй координационным сферам гранецентрированной кубической решетки [5]. При этом интегрировании (усреднение) по объему ω_j микроячейки в виде додекаэдра заменим (как и ранее) на интегрирование по равновеликой сфере радиуса R_0 , ($\omega = 4/3\pi R_0^3$). В результате можно предположить, что потенциалы средних сил $\Phi_{ij}(\bar{q}^i)$ зависят только от расстояния ρ_i^j между молекулой в микроячейке ω_i и центром микроячейки ω_j , по которой проведено усреднение с помощью вспомогательной функции $F_{11}^*(\bar{q}_j)$ и слабо зависит от угловых переменных сферической системы координат. Введем потенциалы $\Phi_1(\rho_i^j)$ и $\Phi_2(\rho_i^j)$, которые определяют взаимодействие молекулы в микроячейке ω_i с молекулами, распределенными в микроячейках ω_j первой ($m = 1$) и второй ($m = 2$) координационных сфер соответственно. Индексом k будем нумеровать микроячейки первой ($k = 1, 2, \dots, 12$) и второй ($k = 1, 2, \dots, 6$) координационных сфер. Двухъячеечные числа за-

полнения $n_{ij}^{\mu\nu}$ для пары микроячеек, которые являются ближайшими, т. е. первыми соседями, обозначим через $n_1^{\mu\nu}$, а для вторых — $n_2^{\mu\nu}$.

Учитывая введенные обозначения, запишем систему двух интегральных уравнений для потенциалов $\Phi_1(\rho_i')$ и $\Phi_2(\rho_i')$. Если микроячейки i и j являются первыми соседями, то

$$\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_1(\rho_i')\right\} = \frac{n_1^{aa}}{n} \left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi(r_{ij})\right\} \right\rangle_j^* + \frac{n_1^{ab}}{n} \left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_1(\rho_i')\right\} \right\rangle_i^*. \quad (7)$$

Если микроячейки i и j являются вторыми соседями, то

$$\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_2(\rho_i')\right\} = \frac{n_2^{aa}}{n} \left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi(r_{ij})\right\} \right\rangle_j^* + \frac{n_2^{ab}}{n} \left\langle \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_2(\rho_i')\right\} \right\rangle_i^*. \quad (8)$$

Здесь обозначения $\langle \dots \rangle_j^*$ и $\langle \dots \rangle_i^*$ означает усреднение по положениям молекул в микроячейках ω_j и ω_i соответственно. Оно выполняется с помощью вспомогательных функций $\hat{F}_{11}^*(\bar{q}_j)$ и $\hat{F}_{11}^*(\bar{q}_i)$, записанных с учетом взаимного расположения центров микроячеек ω_j и ω_i , которые являются первыми либо вторыми соседями.

Если микроячейки i и j являются ближайшими, т. е. первыми соседями, то

$$\hat{F}_{11}^*(\bar{q}_j) = \frac{\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\left[\sum_{k \neq i}^{12} \Phi_1(\rho_j^k) + \sum_{k=1}^6 \Phi_2(\rho_j^k) + \varphi(x_j)\right]\right\}}{\int_{\omega_j} \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\left[\sum_{k \neq i}^{12} \Phi_1(\rho_j^k) + \sum_{k=1}^6 \Phi_2(\rho_j^k) + \varphi(x_j)\right]\right\} d\bar{q}_j}, \quad (9)$$

$$\hat{F}_{11}^*(\bar{q}_i) = \frac{\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\left[\sum_{k \neq j}^{12} \Phi_1(\rho_i^k) + \sum_{k=1}^6 \Phi_2(\rho_i^k) + \varphi(x_i)\right]\right\}}{\int_{\omega_i} \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\left[\sum_{k \neq j}^{12} \Phi_1(\rho_i^k) + \sum_{k=1}^6 \Phi_2(\rho_i^k) + \varphi(x_i)\right]\right\} d\bar{q}_i}. \quad (10)$$

Если микроячейки i и j являются вторыми соседями, то

$$\hat{F}_{11}^{*2}(\bar{q}_j) = \frac{\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\left[\sum_{k=1}^{12} \Phi_1(\rho_j^k) + \sum_{k \neq i}^6 \Phi_2(\rho_j^k) + \varphi(x_j)\right]\right\}}{\int_{\omega_j} \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\left[\sum_{k=1}^{12} \Phi_1(\rho_j^k) + \sum_{k \neq i}^6 \Phi_2(\rho_j^k) + \varphi(x_j)\right]\right\} d\bar{q}_j}, \quad (11)$$

$$\hat{F}_{11}^{*2}(\bar{q}_i) = \frac{\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\left[\sum_{k=1}^{12}\varphi_1(\rho_i^k) + \sum_{k \neq j}^6\varphi_2(\rho_i^k) + \varphi(x_i)\right]\right\}}{\int_{\omega_i} \exp\left\{-\frac{1}{\theta}\left[\sum_{k=1}^{12}\varphi_1(\rho_i^k) + \sum_{k \neq j}^6\varphi_2(\rho_i^k) + \varphi(x_i)\right]\right\} d\bar{q}_i}. \quad (12)$$

Формулы для двухъячеечных чисел заполнения n_m^{as} и n_m^{aa} однородной системы (при $m = 1, 2$) запишем, используя общие выражения, полученные в [1] для неоднородной системы:

$$n_m^{as} = \frac{1}{2z_m} \left(-1 + \sqrt{1 + 4n(1-n)z_m}\right), \quad m = 1, 2, \quad (13)$$

$$n_m^{aa} = n - n_m^{as}, \quad z_m = \exp\left\{-\frac{\varphi_m(\theta, \nu)}{\theta}\right\} - 1. \quad (14)$$

Здесь величина $\varphi_m(\theta, \nu)$ является средним значением потенциала средних сил $\varphi_m(\rho_i^j)$, которое находится в результате усреднения

$\exp\left\{-\frac{\varphi_m(\rho_i^j)}{\theta}\right\}$ по положениям молекулы в микроячейке ω_i :

$$\exp\left\{-\frac{\varphi_m(\theta, \nu)}{\theta}\right\} = \left\langle \exp\left\{-\frac{\varphi_m(\rho_i^j)}{\theta}\right\} \right\rangle_i = \int_{\omega_i} \exp\left\{-\frac{\varphi_m(\rho_i^j)}{\theta}\right\} \hat{F}_{11}^{*m}(\bar{q}_i) d\bar{q}_i. \quad (15)$$

Полученная система уравнений для потенциалов средних сил $\varphi_1(\rho_i^j)$, $\varphi_2(\rho_i^j)$ и двухъячеечных чисел заполнения позволяет использовать итерационный метод ее решения [2] в кристаллическом, жидком и газообразном состояниях вещества.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Наркевич, И. И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: дис. ... д-ра физ.-мат. наук / И. И. Наркевич. – СПб., 1993. – 223 л.
- 2 Наркевич, И. И. Единая статистическая модель кристаллического, жидкого и газообразного состояний вещества / И. И. Наркевич, Е. В. Фарафонтон // Весці НАН Беларусі. Сер. физ.-мат. наук. – 2011. – № 3. – С. 71–79.
- 3 Planck, M. Concerning the canonic equation of state for monoatomic gas / M. Planck // Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. – 1908. – № 32. – P. 633–647.
- 4 Быков, Т. В. Термодинамические характеристики малой капли в рамках метода функционала плотности / Т. В. Быков, А. К. Щекин // Коллоидный журнал. – 1999. – Т. 61, № 2. – С. 164–171.

5 Динамика спектроскопических переходов, перенос заряда и установление дальнего порядка в низкоразмерных квантовых системах. Разработка статистико-механических моделей молекулярных и ионных систем для исследования равновесных свойств, фазовых переходов и ионно-электронного переноса в конденсированных средах: отчет о НИР (промежуточный) / Бел. гос. технол. ун-т (БГТУ); рук. темы И.И. Наркевич. – Мн., 2011. – 44 с. – № ГР 20114311.

УДК 537.6

В. Г. Шепелевич, проф., д-р физ.-мат. наук (БГУ, г. Минск);
А.К. Сойка, проф., д-р физ.-мат. наук;
П.А. Сивцова, ассист., канд. физ.-мат. наук; И.О. Сологуб, ассист.
(БГТУ, г. Минск)

МАГНИТОПЛАСТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В СИЛЬНОМ ИМПУЛЬСНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

К магнитоэластическим эффектам (МЭЭ) относят большую группу эффектов, заключающихся в изменении механических характеристик твёрдых тел при воздействии на них магнитного поля. В настоящее время обнаружено влияние магнитного поля на подвижность дислокаций, предел текучести, микротвёрдость и другие характеристики широкого спектра материалов. МЭЭ могут обнаруживаться либо в присутствии магнитного поля, либо быть долговременными или необратимыми [1, 2].

Теории МЭЭ пока не существует, так как неясны элементарные физические процессы, лежащие в его основе. В связи с этим представляется актуальным экспериментальное исследование МЭЭ в различных материалах с использованием сильных импульсных магнитных полей (СИМП). В данной работе приведены результаты исследования влияния СИМП с индукцией до 40 Тл на микротвёрдость фольг из Al и Al-Zn.

Исследуемые образцы представляли собой полоски фольги из Al и Al - 6 ат.%Zn толщиной ~ 200 мкм с размерами 5x15 мм². Полоски закреплялись на стеклянных пластинках и размещались в катушке так, что силовые линии магнитного поля были параллельны их поверхности (чем сводились к минимуму пондеромоторное и тепловое воздействия СИМП на фольгу вследствие возникновения в ней вихревых токов). Образцы подвергались однократному воздействию импульса магнитного поля, амплитуда индукции которого изменялась от 5 до 40 Тл.

СИМП создавалось разрядом конденсаторной батареи ёмкостью ≈ 3500 мкФ с напряжением до 5 кВ на спиральный соленоид из бериллиевой бронзы индуктивностью ~ 10⁻⁷ Гн. С целью получения