

дем, что модуль изгибной упругости $k \approx Kh = (10^{-19} - 10^{-20})$ Дж. Эта оценка отвечает экспериментальным данным [5,6].

ЛИТЕРАТУРА

1. Веденов А.А. Физика растворов.- М.: Наука, 1984.
2. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. Статистическая физика макро-молекул. - М.: Наука, 1989.
3. Petrov A.G., Seleznev S.A., Derzhanski A. Principles and methods of liquid crystal physics applied to the structure and functions of biological membranes // Acta Physica Polonica. - 1979. - V. A55. - P. 385-405.
4. Немцов В.Б. Неравновесная статистическая механика систем с ориентационным порядком,- Мн.: Тэхналогія, 1997.
5. Ивенс И., Скейлок Р. Механика и термодинамика биологических мембран.- М.: Мир, 1982.
6. Helfrich W. Elastic properties of lipid bilayers: Theory and possible experiments// Z. Naturforsch. - 1973. - V. 28C. - P. 693-703.
7. Helfrich W. Lipid bilayer spheres: deformation and birefringence in magnetic fields// Phys. Lett. - 1973. - V. 43A. - P. 409-410.
8. Canham P.B.. The minimum energy of bending as a possible explanation of biconcave shape of the human red blood cells// J. Theoret. Biol. - 1970. - V. 26. - P. 61-81.
9. Ивков В.Г., Берестовский Г.Н. Динамическая структура липидного бислоя. - М.: Наука, 1981.
10. Marcelja. Chain ordering in liquid crystals. II Structure of bilayers membranes// BBA. - 1974. - V. 367. - P. 165-176.
11. Lee Davison. Linear theory of heat conduction and dissipation in liquid crystals of nematic type// Phys. Rev. - 1969. - V. 180. - P. 232-237.

УДК 536.758+539.311

И.И.Наркевич, профессор;

А.В.Жаркевич, аспирант

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ДЕФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК

The statistical method of the description of deformation fields of crystal lattice in the vicinity of defects is proposed in the article. The closed integral equation for potentials of average forces determining the interaction in the deformed lattice is used. These potentials is decomposed in the row at deformation tensor components. The system of linear integral equations is obtained for decomposition coefficients.

В последнее время весьма актуальной стала задача описания деформации кристаллических решеток в окрестности дефектов, особенно в той

области, где в принципе не могут быть применены традиционные методы теории упругости.

Ранее разработанное двухуровневое описание молекулярных систем [1], которое базируется на одновременном использовании метода коррелятивных функций условных распределений [2] и метода термодинамических функционалов [3] сделало возможным статистическое описание полей деформации кристаллических решеток в окрестности дефектов. В рамках этого подхода появилась возможность теоретического исследования пространственно-неоднородных систем [4]. При этом весь объем пространственно-неоднородной (деформированной) системы V , состоящей из N частиц, мысленно делится на микроячейки. Объем ω каждой микроячейки должен быть таким, чтобы в ней могло находиться не более одной частицы. Отсутствие частицы в микрообъеме соответствует вакансии. Причиной деформации или неоднородности могут быть внешние поля либо, в случае фазовых переходов, неоднородность плотности возникает в межфазной области. В частности, на границе раздела с кристаллической фазой имеет место неоднородное распределение различного рода дефектов и связанная с ними релаксация кристаллической решетки, т.е. возникает поле неоднородной деформации вблизи ядра дефектов. При описании неоднородностей в таких системах используются коррелятивные функции условных распределений [5], описывающие неоднородное распределение частиц на микро- и макроуровнях. Эти функции являются функциями координат частиц системы, распределенных в микроячейках, и функционалами от сглаженных полей плотности и компонент тензора деформации кристаллической решетки, образованной этими микроячейками.

При статистическом учете наличия тепловых вакансий в кристаллах число микроячеек M оказывается больше числа частиц N , так что средний объем ω микроячеек ($\omega = V / M$) будет меньше молекулярного объема $v = V / N$ и подлежит определению. Сглаженные (усредненные по объемам микроячеек ω_k ($k = 1, 2, \dots, M$) поля плотности и деформации описываются набором n_k^μ чисел заполнения для частиц (сорт $\mu = a$) и вакансий (сорт $\mu = b$), а также набором $\lambda_k^{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = 1, 2, 3$) компонент микроскопического тензора деформации, который определяет материальный градиент [6] вектора перемещения $\vec{U}_I$ центров ячеек, отвечающих в статистическом подходе наиболее вероятным положениям частиц системы (узлы решетки):

$$\lambda^{\alpha\beta} = \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta}, \quad \vec{u} = \vec{r} - \vec{r}^*, \quad \vec{r}^* = \{x, y, z\}. \quad (1)$$

Здесь $\vec{r}^*$ - радиус-вектор точки пространства в регулярной базисной решетке из пустых и заполненных одной частицей ячеек, а $\vec{r}$ - радиус-вектор соответствующей точки в кристалле с деформированной решеткой. На рис. 1 схематично изображены все вектора, определяющие положение некоторой точки среды (точка A) в системе деформированных ячеек ω_l ($l = 1, 2, \dots$) и в системе с регулярным расположением одинаковых по величине ячеек объемом $\omega_l^* = \omega^*$ (точка A^{*}). Если учесть, что вектора центров ячеек и их смещений обозначены как $\vec{R}_l$ и $\vec{U}_l$ соответственно, то для радиус-вектора $\vec{r} = \vec{r}^* + \vec{u}$ точки A ($r \subset \omega_l$) можно записать следующее выражение:

$$\vec{r}_l = \vec{R}_l^* + \vec{U}_l + \vec{q}_l = \vec{R}_l^* + \vec{U}_l + (1 + \hat{\Lambda}_l) \vec{q}_l^*. \quad (2)$$

Здесь тензор $\hat{\Lambda}_l$ с компонентами $\lambda_l^{\alpha\beta}$ определяет деформацию среды (решетки) в окрестности центра ячейки с номером l объемом ω_l ($l = 1, 2, \dots M$). С помощью выражения (2) выразим радиус-вектор взаимного положения двух точек с радиусами $\vec{r}_l$ и $\vec{r}_m$ через компоненты тензора деформации для ячеек ω_l и ω_m :

$$\vec{r}_{lm} = \vec{r}_l - \vec{r}_m = \vec{R}_{lm}^* + \vec{U}_{lm} + (1 + \hat{\Lambda}_l) \vec{q}_l^* - (1 + \hat{\Lambda}_m) \vec{q}_m^*. \quad (3)$$

Воспользуемся далее замкнутым интегральным уравнением для потенциалов средних сил [1], определяющих взаимодействие в деформированной решетке и примем во внимание однократное заполнение всех ячеек, кроме центральной, соответствующей вакансии. В этом случае наборы чисел заполнения n_l^{μ} и вероятностей заполнения пар ячеек $n_{lm}^{\mu\nu}$ имеют следующий вид:

$$n_l^a = \begin{cases} 0, & \text{если } l = 0; \\ 1, & \text{если } l \neq 0; \end{cases} \quad (4)$$

$$n_{lm}^{aa} = \begin{cases} 0, & \text{если } l \text{ или } m \text{ равно нулю,} \\ 1, & \text{если } l \text{ или } m \text{ не равно нулю.} \end{cases} \quad (5)$$

В результате при l и m , не равных нулю, получим замкнутое интегральное уравнение вида

$$e^{-\varphi_{lm}/\Theta} = \frac{\int e^{-\frac{1}{\Theta}\Phi(|r_{lm}|)} e^{-\frac{1}{\Theta} \sum_{n \neq l, m}^N \varphi_{mn}} D_m dq_m^*}{\int_{\omega_m} e^{-\frac{1}{\Theta} \sum_{n \neq l, m}^N \varphi_{mn}} D_m dq_m^*}, \quad (6)$$

где $\varphi_{lm} = \varphi_{lm}(q_l^*, \{\lambda_p^{\alpha\beta}\})$ - потенциал средней силы взаимодействия частицы в положении $q_l^* \in \omega_l$ с частицей, распределенной в любой ячейке ω_m , при условии, что поле деформации определяется набором компонент $\lambda_p^{\alpha\beta}$ (φ_{mn} - аналогичный потенциал для ячеек m и n); D_m - якобиан перехода к новым переменным, который в соответствии с (1) равен определителю вида

$$D_m = \begin{vmatrix} 1 + \lambda_m^{11} & \lambda_m^{12} & \lambda_m^{13} \\ \lambda_m^{21} & 1 + \lambda_m^{22} & \lambda_m^{23} \\ \lambda_m^{31} & \lambda_m^{32} & 1 + \lambda_m^{33} \end{vmatrix}. \quad (7)$$

Для последующих численных расчетов нужно получить удобное для программирования на ЭВМ выражение для потенциалов φ , которое устанавливает связь с полем компонент тензора деформации. Поскольку явная функциональная связь между φ и $\lambda^{\alpha\beta}$ неизвестна, то в духе приближения линейной реакции разложим функционал φ по компонентам $\lambda^{\alpha\beta}$ и ограничимся линейными членами по $\lambda^{\alpha\beta}$, т.е.

$$\varphi_{lm}(q_l^*, \{\lambda_p^{\alpha\beta}\}) \cong \varphi_{lm}(q_l) + \sum_{p, \alpha, \beta} b_{lm}^{\alpha\beta, p} \lambda_p^{\alpha\beta}, \quad (8)$$

$$\text{где } b_{lm}^{\alpha\beta, p} = \left. \frac{\partial \varphi_{lm}}{\partial \lambda_p^{\alpha\beta}} \right|_{\hat{\Lambda} = 0} - \text{значение функциональной производной}$$

при нулевом поле деформации.

Далее получим систему уравнений для коэффициентов разложения $b_{lm}^{\alpha\beta, p}$, которые удовлетворяют исходному замкнутому интегральному уравнению (6). Для удобства дифференцирования перепишем (6) в следующем виде (знак "звездочка" далее будем опускать):

$$\begin{aligned}
& e^{-\Phi_{lm}/\Theta} \int_{\omega_m} e^{-\sum_{n \neq l, m}^N \Phi_{mn}/\Theta} D_m dq_m = \\
& = \int_{\omega_m} e^{-\Phi(r_{lm})/\Theta} e^{-\sum_{n \neq l, m}^N \Phi_{mn}/\Theta} D_m dq_m
\end{aligned} \tag{9}$$

Выполним дифференцирование (9) по $\lambda_p^{\alpha\beta}$ с учетом разложения (8) для потенциалов Φ_{lm} и аналогичного разложения для потенциалов Φ_{mn} , а также выражения (3) для взаимного расстояния r_{lm} . Получим

$$\begin{aligned}
& e^{-\Phi_{lm}/\Theta} \left(-b_{lm}^{\alpha\beta, P} / \Theta \right) \int_{\omega_m} e^{-\sum_n \Phi_{mn}/\Theta} D_m dq_m + \\
& + e^{-\Phi_{lm}/\Theta} \int_{\omega_m} e^{-\sum_n \Phi_{mn}/\Theta} \left(-\sum b_{mn}^{\alpha\beta, P} / \Theta \right) D_m dq_m + \\
& + e^{-\Phi_{lm}/\Theta} \int_{\omega_m} e^{-\sum_n \Phi_{mn}/\Theta} \left(\partial D_m / \partial \lambda_p^{\alpha\beta} \right) dq_m = \\
& = -\frac{1}{\Theta} \int_{\omega_m} e^{-\Phi(r_{lm})/\Theta} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r_{lm}} \right) \cdot \frac{\partial r_{lm}}{\partial \lambda_p^{\alpha\beta}} e^{-\sum_n \Phi_{mn}} D_m dq_m - \\
& - \frac{1}{\Theta} \int_{\omega_m} e^{-\Phi(r_{lm})/\Theta} e^{-\sum_n \Phi_{mn}} \sum_n b_{mn}^{\alpha\beta, P} \cdot D_m dq_m + \\
& + \int_{\omega_m} e^{-\Phi(r_{lm})/\Theta} e^{-\sum_n \Phi_{mn}/\Theta} \frac{\partial D_m}{\partial \lambda_p^{\alpha\beta}} dq_m.
\end{aligned} \tag{10}$$

Положим далее в уравнении (10) все компоненты тензора $\hat{\Lambda}$ равными нулю и учтем, что при $\lambda_p^{\alpha\beta} \rightarrow 0$ якобиан $D_m \rightarrow 1$. Введем обозначение

$$D_m^{\alpha\beta,p} = \left. \frac{\partial D_m}{\partial \lambda_p^{\alpha\beta}} \right|_{\hat{\Lambda}=0}, \quad (11)$$

затем разделим левую и правую части уравнения (10) на знаменатель исходного интегрального уравнения (6) (при $\hat{\Lambda}=0$) и введем по определению правило усреднения некоторой функции $f(q)$ по микрообъему ω_m в виде, который следует из полученного из (10) уравнения:

$$\langle f(q_m) \rangle_m = \frac{\int_{\omega_m} f(q_m) e^{-\sum_n \varphi_{mn}/\Theta} dq_m}{\int_{\omega_m} e^{-\sum_n \varphi_{mn}/\Theta} dq_m}. \quad (12)$$

Учитывая вышеизложенное, перепишем полученное из (10) при $\hat{\Lambda}=0$ уравнение:

$$\begin{aligned} & e^{-\varphi_{lm}/\Theta} \left[b_{lm}^{\alpha\beta,p} + \left\langle \sum_{n \neq l,m} b_{mn}^{\alpha\beta,p} \right\rangle_m - \Theta D_m^{\alpha\beta,p} \right] = \\ & = \left\langle \left[e^{-\Phi(r_{lm})/\Theta} \frac{\partial \Phi}{\partial r_{lm}} \frac{\partial r_{lm}}{\partial \lambda_p^{\alpha\beta}} \right]_{\Lambda=0} \right\rangle_m + \\ & + \left\langle e^{-\Phi(r_{lm})/\Theta} \cdot \sum_{n \neq l,m} b_{mn}^{\alpha\beta,p} \right\rangle_m - \Theta D_m^{\alpha\beta,p} e^{-\varphi_{lm}/\Theta}. \end{aligned} \quad (13)$$

При записи последнего уравнения учтено уравнение (6) при $\hat{\Lambda}=0$, а также тот факт, что производная $D_m^{\alpha\beta,p}$ не зависит от q_m .

После очевидных сокращений и деления уравнения (13) на $\exp\{-\varphi_{lm}/\Theta\}$ получим в окончательном виде систему линейных уравнений относительно искомых коэффициентов $b_{lm}^{\alpha\beta,p}$:

$$b_{lm}^{\alpha\beta,p}(q_l) = \left\langle e^{-(\Phi(r)-\varphi_{lm}(q_l))/\Theta} \cdot \Phi'(r) \frac{\partial r}{\partial \lambda_p^{\alpha\beta}} \right\rangle_{\Lambda=0} +$$

$$+ \sum_{n \neq l, m} \left\langle \left(e^{-(\Phi(r) - \varphi_{lm}(q_l)) / \Theta} - 1 \right) b_{mn}^{\alpha\beta, p}(q_m) \right\rangle_m. \quad (14)$$

Здесь r - взаимное расстояние между двумя точками при $\hat{\Lambda}$ равном нулю, т.е. в базисной (недеформированной) решетке, а $\Phi'(r)$ - первая производная от потенциала $\Phi(r)$ по r .

Если принять во внимание выражение (3) для вектора $\vec{r}_{lm}$, то следует отметить, что производная $\partial r_{lm} / \partial \lambda_p^{\alpha\beta}$ отлична от нуля только при p равном l или m , и, следовательно, систему уравнений (14) можно рассматривать как конечно-разностный аналог интегрального уравнения типа Фредгольма 2-го рода (с дельтаобразным источником в микрообъемах ω_l и ω_m). Уравнение такого вида уже встречалось в развиваемом подходе при описании неоднородностей плотности [7].

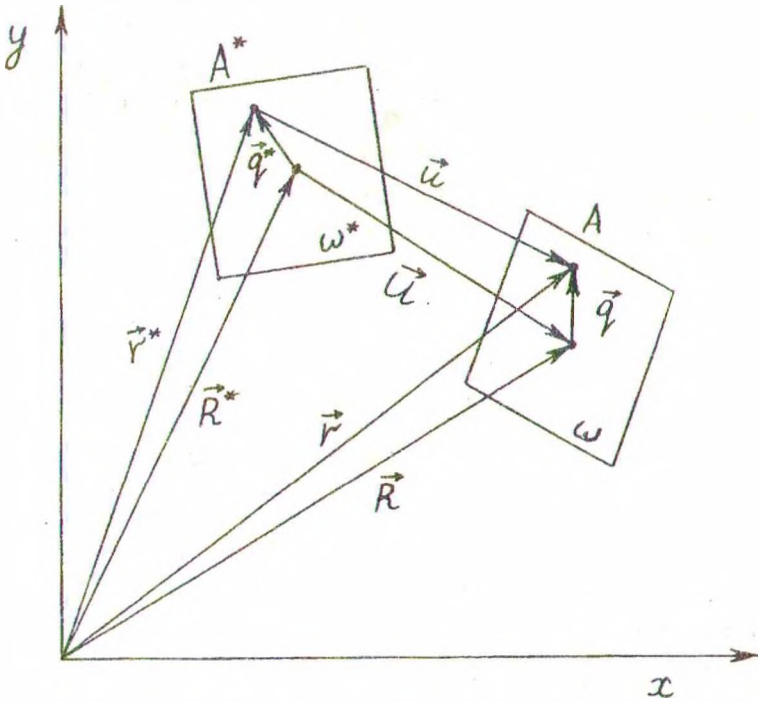


Рис. 1. Схематичное расположение радиус-векторов, определяющих положение некоторой точки в кристалле с деформированной и регулярной базисной решеткой

$\vec{R}^*$ - радиус-вектор положения центра недеформированной ячейки; $\vec{q}^*$ и $\vec{q}$ - положение точек A^* и A в регулярной базисной и в деформированной ячейках относительно их центров соответственно; $\vec{u}$ - вектор смещения точек A^* и A ; $\vec{U}_l$ - радиус-вектор смещения центров ячеек; $\vec{r}^*$ и $\vec{r}$ - радиус-векторы положений точек A^* и A соответственно.

ЛИТЕРАТУРА

1. Наркевич И.И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред // Дис. докт. физ.-мат. наук. - С-П.: СПГУ, 1993.
2. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. М.: Наука, 1979.
3. Evans R. The nature of the liquid-vapors interface and other topics in the statistical mechanics of nonuniform, classical fluids // *Advances in Physics*. - 1979. - Vol. 28, № 2. - P. 143-200.
4. Жаркевич А.В., Клинецевич С.И., Наркевич И.И. Единое статистико-механическое описание структурных, термодинамических свойств неоднородной молекулярной среды // *Весті АН РБ, сер. фіз.-мат. наук* (в печати).
5. Narkevich I.I. A statistical study of the defect crystal lattice relaxation // *Physica A*. - 1988, № 150. - P. 659-571.
6. Мейз Дж. Теория и задачи механики сплошной среды. М., 1974.
7. Наркевич И.И., Клинецевич С.И., Ротт Л.А. Влияние флуктуаций поля плотности на взаимодействие частицы со средой в приближении линейной реакции. I. Постановка задачи и метод ее решения // *Весті АН БССР, сер. фіз.-мат. наук*. - 1984, № 5. - С. 91-94.

УДК 537.84

А.Н.Вислович, доцент;

М.М.Тихонов, студент

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТОКОВ И МАГНИТОВ В МАГНИТНОЙ ЖИДКОСТИ

The general expression to the description of interactions of flat sources of a magnetic field has been developed. From the expression received it simple follows basic effects of influence of a magnetic fluid on interactions

Одной из немногих точных моделей, которые позволяют составить представление о силах магнитостатического взаимодействия в текучей среде с высокой магнитной проницаемостью, является модель неограниченных плоских источников, с периодическим распределением намагниченности либо тока. Эта модель использовалась в ряде работ для изучения различных частных аспектов магнитостатических сил в магнитных жидкостях [1, 2]. В настоящей работе разработан наиболее общий подход к описанию взаимодействия плоских источников поля.