

ЛИТЕРАТУРА

1. Наркевич И.И. Построение нелокальной статистической теории деформированных кристаллов с дефектами, проблемы и перспективы решения // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. Вып. VIII. 2000. С. 93–97.
2. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Молекулярно-статистическое описание неоднородно деформированных образцов. 1. Постановка задачи и метод ее решения // Инженерно-физический журнал. – Минск, 2000. Т. 73. – № 6. – С. 1313–1319.
3. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Молекулярно-статистическое описание неоднородно деформированных образцов. 2. Расчет функций распределения молекул и вакансий в одномерной однородно деформированной статистической модели растяжения–сжатия // Инженерно-физический журнал. – Минск, 2002. Т. 75. – № 4. – С. 170–176.
4. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. – М.: Наука, 1979.
5. Наркевич И.И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред. Дисс. докт. физ.-мат. наук. – С.-П.: СПбГУ, 1993. – 242 с.
6. Наркевич И.И., Жаркевич А.В., Казаков П.П. Исследование структуры одномерной статистической модели одноосного деформирования молекулярного кристалла // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. Вып. IX. 2001. С. 65–71.
7. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Расчет функций распределения и свободной энергии одномерной статистической модели одноосного растяжения–сжатия молекулярного кристалла // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. Вып. IX. 2001. С. 71–77.

УДК 539.311

А.В.Жаркевич, ассистент; Д.А.Павленко, студент

**ПРИМЕНЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ГИББСА ПРИ ТЕОРЕТИЧЕСКОМ
ПОСТРОЕНИИ ДИАГРАММЫ НАПРЯЖЕНИЕ – ДЕФОРМАЦИЯ
ДЛЯ ОДНОМЕРНОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РАСТЯЖЕНИЯ – СЖАТИЯ**

A one dimension molecular crystal deformation diagram was built as a result of the numerical solution of the variation equation.

В результате варьирования выражения для свободной энергии F [1–4] одномерной статистической модели однородного деформирования молекулярного кристалла было получено нелинейное уравнение относительно концентрации n частиц (молекул) и микродеформации λ , которые являются внутренними параметрами разрабатываемой модели (см. в предыдущей статье этого сборника уравнение (10)). Оно решалось численно на ЭВМ с использованием программного продукта «Математика 3.0» графическим способом. Для молекулярной цепочки длиной L , содержащей N молекул, распределенных по $M > N$ узлах при заданных значениях набора внешних параметров системы, включающего безразмерную температуру θ , молекулярную длину $l = L/N$ (аналог молекулярного объема) и длину $R_0 = L_0/M_0$ недеформированного звена цепочки, выбирался интервал значений n , соответствующий области заведомо кристаллического состояния $n \in (0,9,1)$. С помощью уравнения связи для внутренних параметров ($\lambda = \lambda(n)$) определялся соответствующий интервал допустимых значений микродеформаций λ

молекулярной цепочки ($\lambda = (R - R_0)/R_0$). Затем для каждой пары значений n и λ рассчитывались три коэффициента разложения потенциала Леннард-Джонса (Φ_0, a, σ) и графически решалось трансцендентное вариационное уравнение $\mathcal{F}(n, \lambda) = 0$ по отношению к искомому равновесному значению концентрации n . При этом одновременно рассчитывались три коэффициента разложения потенциала средних сил ($\phi_1, \alpha_1, \beta_1$), вспомогательный коррелятор z и все входящие в вариационное уравнение производные. Процесс его решения при заданных значениях температуры θ и молекулярной длины l иллюстрируется кривыми, которые приведены на рис. 1. Решением нелинейного уравнения, определяющем равновесное значение концентрации n (и микродеформации λ), является точка пересечения графика функции $\mathcal{F}(n, \lambda(n))$ с осью концентрации вакансий $c = 1 - n$.

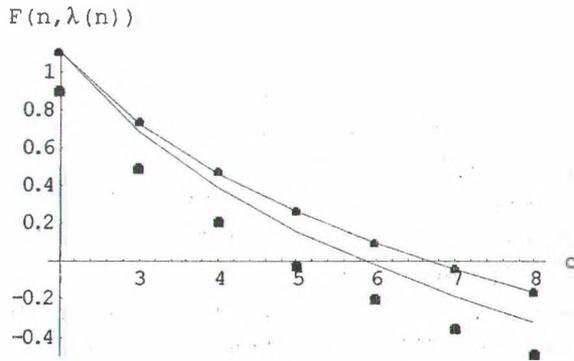


Рис. 1. Зависимость $\mathcal{F}(n, \lambda(n))$ от концентрации вакансий $c = 1 - n$ (с учетом уравнения связи $\lambda = (l \cdot n)/R_0 - 1$) при фиксированных параметрах $R_0 = 1, \theta = 1$: при заданной молекулярной длине $l = 0.98$ (кривая —), $l = 1.0$ (кривая •••), $l = 1.1$ (кривая -•-). На графике значения, по которым построены кривые, увеличены в $10^{10}, 10^8$ и 10^5 раз соответственно

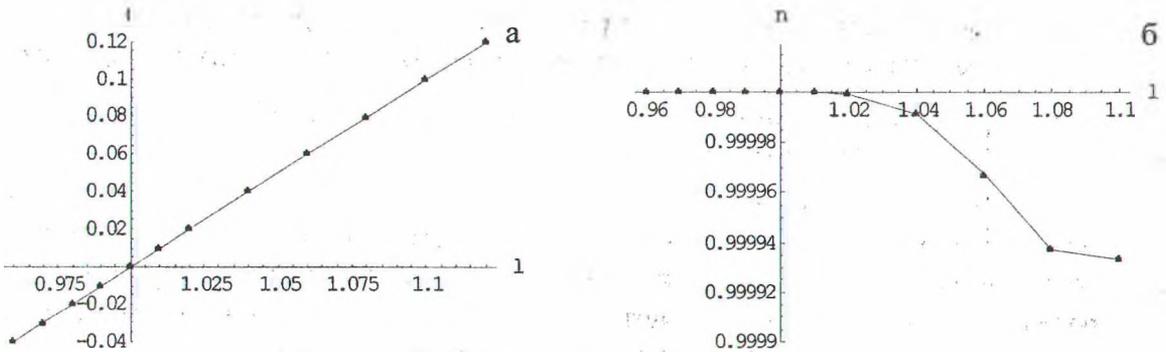


Рис. 2. Зависимость микродеформации λ микроячеек (а) и чисел заполнения n частицами микроячеек (б) от молекулярной длины l при фиксированных параметрах $R_0 = 1$ и $\theta = 1$

По результатам численного решения вариационного уравнения были получены зависимости равновесных значений концентрации n , микродеформации λ и соответственно свободной энергии F молекулярной цепочки от длины l , которые представлены графически на рис. 2 и 3а. Видно, что микродеформация λ зависит от l практически линейно (рис. 2а). Однако концентрация n при деформировании цепочки является явно

нелинейной функцией l (рис. 2б), что, возможно, связано с появлением пластических деформаций при растяжении, поскольку концентрация вакансий $c=1-n$ резко возрастает.

Логически последовательным и завершающим этапом создания статистической теории упругости является теоретическое построение диаграммы деформирования образца, т. е. отыскание зависимости напряжения σ от величины относительной макродеформации ε . Поскольку в экспериментах обычно деформирование происходит при изобарно-изотермических внешних условиях, то для описания структурных, термодинамических и механических свойств макроскопических систем удобно использовать не свободную энергию, а термодинамический потенциал Гиббса G . Для рассматриваемого здесь одномерного случая он определяется следующим образом:

$$G = F(L) + p_0^* L, \quad (1)$$

где p_0^* – фиксированное значение одномерного аналога внешнего давления среды, т. е. силы, обеспечивающей цепочке из N молекул длину $L = L_0$. Для удобства сопоставления с трехмерным случаем для этой силы используем обычное обозначение для давления (p_0^*), а для соответствующей деформирующей силы – обычное обозначение для напряжения (σ^*). Поскольку свободная энергия $F = fN/n$, а $L = lN$, то удобнее использовать $g = G/N = f/n + p_0 l$. Аналог нормального напряжения σ^* , т.е. деформирующая сила, находится по формуле

$$\sigma^* = \frac{1}{L_0} \frac{\partial G}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{l_0} \frac{\partial g}{\partial \varepsilon}. \quad (2)$$

Относительную макродеформацию ε цепочки выразим через молекулярную длину l :

$$\varepsilon = (L - L_0)/L_0 = (l - l_0)/l_0. \quad (3)$$

В результате для σ^* получим

$$\sigma^* = \frac{1}{l_0} \frac{\partial g}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{l_0} \frac{\partial g}{\partial l} \frac{\partial l}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial g}{\partial l} = \frac{\partial(f/n)}{\partial l} + p_0^*. \quad (4)$$

Построенные с применением программного продукта «Математика 3.0» зависимости величины $g = G/N$, т.е. термодинамического потенциала Гиббса (формула (1)) и деформирующей силы (формула (4)) от молекулярной длины l , представлены на рис. 3б и 4. Левая ветвь потенциала (рис. 3б) отвечает за сжатие, а правая – за растяжение образца. Практически симметричный участок этой кривой в некоторой окрестности минимума функции $g(l)$ определяет область упругих деформаций, описываемых законом Гука. Далее зависимость $g(l)$ становится практически линейной. Вид зависимости σ^* от l хорошо согласуется с классической кривой деформирования при одноосном растяжении – сжатии линейных образцов. На правой ветви, отвечающей растяжению образца (см. рис. 4), четко прослеживаются области, напоминающие соответствующие участки упругой и пластической деформаций, а также текучести на экспериментальных диаграммах напряжение – деформация.

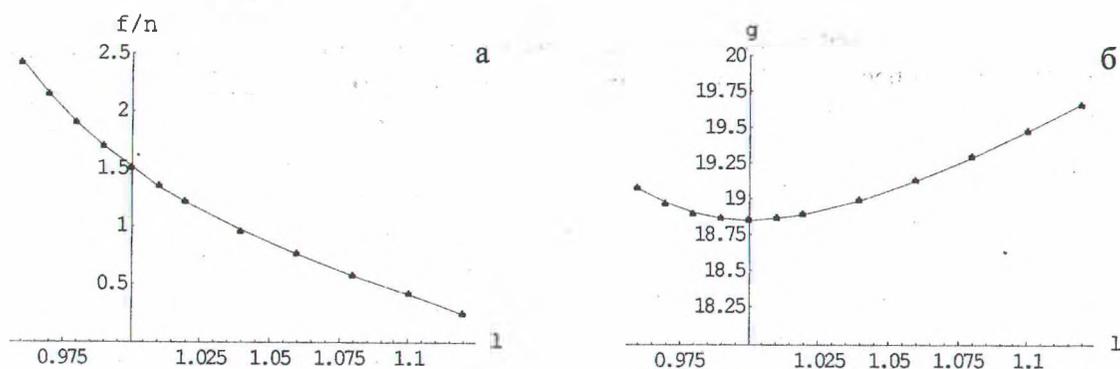


Рис. 3. Зависимость равновесной свободной энергии f/n (а) и термодинамического потенциала Гиббса g (б), приходящихся на одну частицу, от молекулярной длины l при фиксированных параметрах $R_0 = 1$ и $\theta = 1$

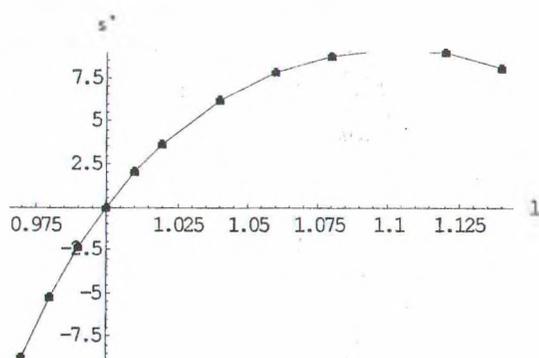


Рис. 4. Диаграмма растяжения – сжатия одномерного образца

Полученные результаты позволяют надеяться на то, что разрабатываемая статистическая теория упругости позволит комплексно описывать структурные, термодинамические и механические свойства не только одномерных цепочек, что актуально в настоящее время, но и плоских, а также объемных образцов, имеющих важное значение для теории упругости.

ЛИТЕРАТУРА

1. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Молекулярно-статистическое описание неоднородно деформированных образцов. 1. Постановка задачи и метод ее решения // Инженерно-физический журнал. – Минск, 2000. Т. 73.– № 6. – С. 1313–1319.
2. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Молекулярно-статистическое описание неоднородно деформированных образцов. 2. Расчет функций распределения молекул и вакансий в одномерной однородно деформированной статистической модели растяжения–сжатия // Инженерно-физический журнал. – Минск, 2002. Т. 75. – № 4. – С. 170–176.
3. Наркевич И.И., Жаркевич А.В., Казаков П.П. Исследование структуры одномерной статистической модели одноосного деформирования молекулярного кристалла // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. Вып. IX. 2001. С. 65–71.
4. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Расчет функций распределения и свободной энергии одномерной статистической модели одноосного растяжения–сжатия молекулярного кристалла // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. Вып. IX. 2001. С. 71–77.