

И. И. Наркевич

(БГТУ, г. Минск)

ПОСТРОЕНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ И МЕТОДЕ КОРРЕЛЯТИВНЫХ ФУНКЦИЙ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

Механика деформируемых твердых тел, рассматриваемых с позиции теории *сплошной среды*, составляет содержание теории упругости, основные уравнения которой были установлены Коши и Пуассоном в 20-х годах XIX века. К настоящему времени это направление теоретической физики представляет собой вполне завершенную физическую теорию, в которой, помимо многочисленных традиционных задач теории упругости, рассматриваются вопросы теплопроводности, вязкости, а также теории колебаний и волн. Более того, в рамках этой теории предприняты попытки учета дислокаций и их взаимодействия [1], что означает выход за границы теории упругости, в основе которой лежит представление о реальном материале как модельной сплошной среде. Заметим, что в рамках традиционной теории упругости (локальной и линейной) возникает проблема учета условий совместности деформации сплошной, т.е. модельной среды, которые лежат в основании этой теории и поэтому ограничивают ее применение областью малых деформаций, за пределами которой лежит нерешенная проблема описания деформации реальных тел (с дефектами) с учетом их *пластичности* и фактическим *отсутствием сплошности* материала.

Таким образом, если в качестве конечной цели рассматривать построение способа статистического описания деформированных реальных тел (в кристаллическом и аморфном состояниях), то на этом пути необходимо решить ряд исходных проблем принципиального характера:

1. Учет *дискретности* материала и связанное с этим *отсутствие сплошности*, по крайней мере на самом нижнем микроскопическом уровне теоретического описания.

2. Учет *изменения структуры* деформируемой среды по мере увеличения деформации, накопления дефектов разного типа и связанное с этим "производство" энтропии тела.

3. Расчет свободной энергии деформированного тела, которая, помимо потенциальной энергии деформации (*силовой фактор*), учитывала бы структурные особенности материала (*энтропийный фактор*).

Не вдаваясь в подробности, следует заметить, что развитие физики пластичности и прочности на феноменологическом уровне прошло несколько этапов и к настоящему времени сформировалось понимание о многостадийности и многомасштабности процессов деформирования твердых тел и что полную картину можно получить только на основе комплек-

са взаимосвязанных и сменяющих друг друга моделей на разных масштабных уровнях [2].

Понятно, что поставленные проблемы относятся к области статистической физики и для их решения с неизбежностью надо привлекать современные статистические подходы, такие, как метод коррелятивных функций ББГКИ [3], метод условных распределений профессора Ротта Л.А. [4] и вариационный метод термодинамических потенциалов. Их одновременное использование позволило разработать двухуровневое молекулярно-статистическое описание неоднородных систем [5], которое предполагает применение метода коррелятивных функций для изучения микроструктуры среды в пределах элементарных (примитивных) ячеек метода условных распределений [4] (*микроскопический уровень*), а привлечение вариационного подхода для решения сопутствующей проблемы, т.е. нормировки коррелятивных функций, позволило получить статистическое выражение для свободной энергии как функционала от усредненного по микроячейкам дискретного поля чисел заполнения n_p ячеек ($p = 1, 2, \dots, M$, M - общее число ячеек решетки), которое описывает структуру среды на самом мелком, но уже макроскопическом уровне (*мезоскопический уровень*). Применение двухуровневого подхода для изучения структуры деформированных кристаллов с вакансиями привело к тому, что свободная энергия стала зависеть и от поля смещений u_p^{μ} узлов кристаллической решетки или соответствующего дискретного поля микроскопического тензора деформации $\lambda_p^{\alpha\beta}$ решетки. При замыкании системы интегродифференциальных уравнений на первом уравнении цепочки (с использованием аппроксимированных двухчастичных коррелятивных функций частиц и вакансий) функционал свободной энергии имеет следующий вид [5]:

$$F(\{n_p\}, \{\lambda_p^{\alpha\beta}\}) = \theta \sum_{l=1}^M \left[\sum_{\mu=\square, b} n_l^{\mu} \ln n_l^{\mu} + \frac{1}{2} \sum_{v=\square, b} \sum_{m \neq l} n_{lm}^{\mu\nu} \ln(n_{lm}^{\mu\nu} / n_l^{\mu} n_m^{\nu}) \right] - \theta \sum_{l=1}^M \left[n_l^a \ln Q_l - \frac{1}{2} \sum_{m \neq l} (n_l^a + n_m^a - n_{lm}^{aa}) \ln \langle f_{lm} \rangle_l \right] \quad (1)$$

В выражении (1) величины $n_{lm}^{\mu\nu}$ имеют смысл чисел заполнения пар ячеек с номерами l и m молекулами ($\mu, \nu = a$) и фиктивными (невзаимодействующими) частицами, которые "находятся" в вакантных ячейках ($\mu, \nu = b$). Вспомогательные функционалы Q_l и f_{lm} выражаются интегральным образом через потенциалы средних сил ϕ_{lm} , которые определяют все коррелятивные функции кристалла с точечными дефектами, а следовательно, его структуру и различные равновесные характеристики. Они являются функциями координат в ячейках и функционалами от поля чисел

заполнения n_1^u и поля микроскопического тензора деформации $\lambda_1^{\alpha\beta}$ и удовлетворяют системе нелинейных интегральных уравнений [5].

Наличие полной (замкнутой) системы уравнений, определяющих функционал свободной энергии молекулярной системы, создает основу для решения разнообразных задач по расчету равновесных полей концентрации частиц и деформации решетки кристаллов с дефектами, используя вариационные методы.

Например, для изучения одноосного однородного деформирования кристаллического образца разрабатывается одномерная статистическая модель, исходные положения которой и соответствующая система нелинейных уравнений изложены в статье Жаркевича А.В. (см. стр. сборника).

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Теория упругости. – М.: Наука, 1987. – Т. 7.
2. Владимиров В.И., Романов А.Е. Дисклинации в кристаллах. – Л.: Наука, 1986.
3. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. – М.: Гостехиздат, 1946.
4. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. – М.: Наука, 1979.
5. Наркевич И.И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: Дисс. докт. ф.-м. наук. – С.-П.: СШУ, 1993.

УДК 539.311

А.В. Жаркевич, И.И. Наркевич
(БГТУ, г. Минск)

ОДНОМЕРНАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОДНООСНОГО РАСТЯЖЕНИЯ.- СЖАТИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО КРИСТАЛЛА С ТЕПЛОВЫМИ ВАКАНСИЯМИ

Для статистического моделирования однородного одноосного растяжения-сжатия рассмотрим линейную цепочку, содержащую M узлов, часть которых занята молекулами системы, а остальные представляют собой вакансии (N_a – число молекул, $N_a = M - N_v$ – число вакансий). Воспользуемся общим статистическим выражением для функционала свободной энергии неоднородно деформированной системы с дефектами (вакансиями) [1] (см. также статью Наркевича И.И. в данном сборнике). Учтем, что при однородном деформировании линейной цепочки все числа заполнения n_l^a узлов молекулами будут одинаковыми ($n_l^a = n = N/M$ – концентрация занятых узлов; l – номер узла). Аналогичное утверждение относится и к полю