

заполнения n_1^a и поля микроскопического тензора деформации $\lambda_1^{a\beta}$ 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.: СПбГУ, 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, $N_v = M - N_a$ – 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_1^a узлов молекулами будут одинаковыми ($n_1^a \equiv n = N/M$ – концентрация занятых узлов; l – номер узла). Аналогичное утверждение относится и к полю

относительной деформации λ_1 при однородном растяжении или сжатии такой цепочки, т.е. $\lambda_1 = \lambda = \text{const}$. В результате функционал свободной энергии превращается в функцию двух внутренних параметров (n и λ), подлежащих определению путем варьирования свободной энергии при фиксированных значениях общего числа частиц N и длины цепочки L , что будем учитывать с помощью множителей Лагранжа.

Для выполнения соответствующих усреднений (с использованием функций распределения частиц вблизи узлов цепочки) разложим потенциал Леннард - Джексона и потенциал средних сил в ряд по относительной деформации λ и, ограничившись квадратичными членами разложения, выполним интегрирование в приближении Гаусса. При этом, предполагая наличие сильной локализации унарной функции распределения молекулы вблизи узлов, выполним интегрирование в бесконечных пределах, используя табличный интеграл [2]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(qx+px^2)} dx = \sqrt{\frac{\pi}{p}} e^{(q^2/4p)}, (p > 0). \quad (1)$$

Для чисел заполнения n_{lm}^{aa} пар узлов (с номерами l и m) воспользуемся ранее полученным выражением [1], которое в случае однородной системы имеет следующий вид:

$$n_{lm}^{aa} = n - n_{lm}^{ab}, n_{lm}^{ab} = \frac{1}{2z_{lm}} \left(-1 + \sqrt{1 + 4n(1-n)z_{lm}} \right). \quad (2)$$

Величина $z_{lm} = \langle f_{lm} \rangle_l - 1$ является аналогом функции Майера (в теории разреженных газов), поскольку $f_{lm} = \exp\{-\varphi_{lm}(q)/\Theta\}$, а $\varphi_{lm}(q)$ потенциал средних сил, действующих на молекулу вблизи узла l (q - отклонение от узла) со стороны молекулы, распределенной в соответствии с бинарной функцией вблизи узла m , который может быть свободным (вакансия) либо занятым, с вероятностью, равной концентрации n . Угловые скобки обозначают усреднения по положению молекулы вблизи узла l .

Учтем, что в кристаллическом состоянии концентрация n незначительно отличается от единицы, поэтому концентрация вакантных узлов близка к нулю ($1-n \ll 1$) и, следовательно, все нелинейные выражения, содержащие величину $x = n(1-n)z$, можно разложить и ограничиться учетом первого ненулевого члена разложения. После выполнения соответствующих расчетов получим приближенное выражение для свободной энергии однородно деформированной линейной цепочки с занятыми и вакантными узлами. В приближении взаимодействия молекул в ближайших (соседних) узлах цепочки это выражение имеет следующий вид:

$$F(n, \lambda) = \Theta M \left\{ \left[n \ln n + (1-n) \ln(1-n) \right] + n^2 (1-n)^2 z^2 + \right. \\ \left. + \frac{n^2}{2} \left[1 + (1-n)^2 z \left[\ln 2 + 2\varphi_1 + \frac{\alpha_1^2}{2\beta_1} \right] \right] \right\}. \quad (3)$$

Присутствующие здесь величины φ_1 , α_1 и β_1 являются коэффициентами разложения потенциала $\varphi(\bar{q})$ средних сил:

$$\varphi(q) \cong \varphi_1 + \alpha_1 q + \beta_1 q^2. \quad (4)$$

Для коэффициентов разложения получена нелинейная система уравнений:

$$\begin{cases} \varphi_1 = \Phi_0 + \frac{\alpha^2}{4\beta} - \ln \left(n_{lm}^{aa} \sqrt{\beta / (b + \beta)} / n \right); \\ \alpha_1 = a, \beta_1 = b - b^2 / (b + \beta); \\ \ln \frac{\beta_1}{2\pi} - \frac{\alpha_1^2}{2\beta_1} = 0, \end{cases} \quad (5)$$

где Φ_0 , a и b – коэффициенты разложения потенциала Леннард - Джонса по отклонению молекул от соседних узлов цепочки с однородным растяжением λ или сжатием:

$$\begin{aligned} \Phi_0 &= \frac{4}{\Theta} \left(\frac{1}{R^{12}(1+\lambda)^{12}} - \frac{1}{R^6(1+\lambda)^6} \right); \\ a &= -\frac{24}{\Theta} \left(\frac{2}{R^{13}(1+\lambda)^{12}} - \frac{1}{R^7(1+\lambda)^6} \right); \\ b &= \frac{12}{\Theta} \left(\frac{26}{R^{14}(1+\lambda)^{12}} - \frac{7}{R^8(1+\lambda)^6} \right). \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь R определяет расстояние между соседними узлами цепочки в исходном состоянии, т.е. при $\lambda = 0$, которое может соответствовать недеформированному состоянию или состоянию с предварительным сжатием или растяжением, которое создано соответствующими силами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Наркевич И.И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: Дисс. докт. ф.-м. наук. – С.-П.: СПб У, 1993.
2. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. – М.: Наука, 1971.