

УДК 536.758+539.311

**И. И. Наркевич, С. И. Лобко, А. В. Жаркевич, П. П. Казаков**

**МОЛЕКУЛЯРНО-СТАТИСТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ  
НЕОДНОРОДНО ДЕФОРМИРОВАННЫХ ОБРАЗЦОВ.  
2. РАСЧЕТ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МОЛЕКУЛ  
И ВАКАНСИЙ В ОДНОМЕРНОЙ ОДНОРОДНО ДЕФОРМИРОВАННОЙ  
СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РАСТЯЖЕНИЯ-СЖАТИЯ**

*В рамках двухуровневого молекулярно-статистического изучения термодинамических и механических свойств конденсированных систем разработана одномерная статистическая модель однородного растяжения-сжатия кристалла с вакансиями. Микро- и макроструктуры модели описываются с помощью коррелятивных функций распределения реальных молекул (частиц сорта  $r$  (real)) и вакансий, учет которых осуществляется с помощью подсистемы фиктивных частиц (квазичастиц сорта  $f$  (fictitious)), которые не взаимодействуют с молекулами и между собой. Получено нелинейное интегральное уравнение для потенциалов средних сил, определяющих одно- и двухчастичные коррелятивные функции двухкомпонентной статистической системы реальных и фиктивных частиц. Аналитическое решение интегрального уравнения найдено в рамках модифицированного подхода за счет вакансий приближения Гаусса.*

В последнее время появилась возможность построения статистической теории деформированных кристаллических решеток с дефектами [1, 2], для которых при изучении микроструктуры в принципе не могут быть применены традиционные методы теории упругости, в основании которой лежит понятие сплошной, т. е. модельной, среды. Поэтому ее применение ограничено областью малых деформаций, за пределами которой лежит нерешенная проблема описания нелинейной деформации реальных тел (с дефектами) с учетом их пластичности и фактическим отсутствием сплошности материала. Если в качестве конечной цели рассматривать построение способа 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).

Поскольку поставленные проблемы относятся к области статистической физики, для их решения надо привлекать современные статистические подходы, такие, как метод коррелятивных функций ББГКИ (Боголюбов, Борн, Грин, Кирквуд, Ивон) [3], метод условных распределений Л. А. Ротта [4] и вариационный метод термодинамических потенциалов [5], одновременное использование которых позволило разработать двухуровневое молекулярно-статистическое описание неоднородных систем [6], в том числе и кристаллов с дефектами [7, 8].

Для практической реализации возможностей двухуровневого молекулярно-статистического описания кристаллических образцов с вакансиями желательнее иметь такую точно решаемую статистическую модель, исследование свойств которой возможно аналитическими методами. Поскольку состояние деформированного кристалла с вакансиями в общем случае описывается достаточно сложным нелинейным интегральным уравнением с полевыми параметрами (поле микроскопического тензора деформации и поле концентрации вакантных узлов решетки) [6–8], для решения поставленной задачи ограничимся здесь рассмотрением однородно деформированных линейных образцов, подверженных одноосному растяжению-сжатию.

**Описание одномерной статистической модели одноосного однородного деформирования.** Для статистического моделирования однородного одноосного растяжения-сжатия рассмотрим линейную цепочку (рис. 1), содержащую  $M$  микроячеек (объемом  $\omega_l = \omega$ ,  $l = 1, 2, \dots, M$ ), по которым распределено  $N$  молекул. Поскольку  $N < M$ , подсистема вакантных ячеек (вакансий) в развиваемой статистической схеме позволяет рассчитывать на описание вкладов от всевозможных неточечных дефектов в реальных кристаллах, которые образуются за счет "конденсации" вакансий под действием внутренних силовых полей.

В состоянии однородного растяжения с относительной деформацией  $\lambda_l = \lambda$  при концентрации молекул  $n_l^r = n_r \equiv n$  ( $n = N/M$ ) (рис. 1) система уравнений (9) из [1] в приближении взаимодействия только ближайших соседей преобразуется к следующему виду ( $x$  и  $x'$  – координаты молекул, отсчитываемые от центров своих ячеек недеформированной решетки с параметром  $R_0$ ):

Белорусский государственный технологический университет, г. Минск; э-почта: root@bgtu.minsk. by. Поступила 13.02.2002.

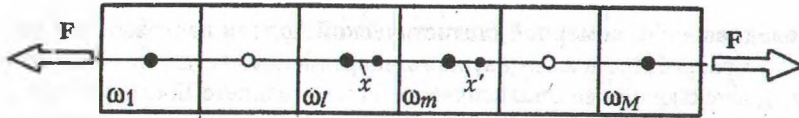


Рис. 1. Схема расположения узлов с занятыми (черные кружочки) и вакантными (светлые кружочки) узлами.  $R = R_0(1 + \lambda)$

$$n \exp \{-\varphi(x)\} \cong n_{\text{гр}} \frac{\int_{\omega_m} \exp \{-\Phi(\bar{r})\} \exp \{-\varphi(x')\} dx'}{\int_{\omega_m} \exp \{-\varphi(x')\} dx'} + n_{\text{гф}} \frac{\int_{\omega_l} \exp \{-\varphi(x)\} \exp \{-\varphi(-x)\} dx}{\int_{\omega_l} \exp \{-\varphi(-x)\} dx} \quad (1)$$

Для сокращения записи в (1) и в последующих соотношениях используются переопределенные потенциалы средних сил ( $\varphi$ ) и межмолекулярного взаимодействия ( $\Phi$ ), включающие в себя температуру  $\theta$ , причем потенциал  $\varphi$  зависит от деформации  $\lambda$  и концентрации  $n$ , а потенциал  $\Phi$  явно зависит от деформации  $\lambda$  как от параметра

$$\varphi(x) \equiv \frac{1}{\theta} \varphi_{lm}(q_l, n, \lambda), \quad \Phi(\bar{r}) = \frac{1}{\theta} \Phi(\bar{r}_{lm}, \lambda) = \frac{4}{\theta} \left( \frac{1}{\bar{r}^{12}} - \frac{1}{\bar{r}^6} \right) \quad (2)$$

Здесь взаимное расстояние  $\bar{r}$  для двух молекул, находящихся вблизи соседних узлов (центров ячеек) деформированной цепочки (на это указывает знак тильда над буквой  $r$ ), выражено через деформацию  $\lambda$  и координаты  $x$  и  $x'$  молекул:

$$\bar{r} = (R_0 + x - x')(1 + \lambda), \quad \lambda = \Delta R / R_0 = (R - R_0) / R_0.$$

Следует заметить, что расстояния и температура рассчитываются, как это обычно делается, в единицах параметров потенциала Леннарда-Джонса ( $\sigma$  - параметр длины;  $\epsilon$  - энергетический параметр, т. е. глубина потенциальной ямы для  $\Phi(r)$ , так что  $\theta = kT/\epsilon$ ).

Поскольку рассматривается однородная деформация цепочки, общее функциональное выражение для двухъячейковых чисел заполнения упрощается (см. формулу (56) в [9]) для всех пар соседних ячеек

$$n_{\text{гф}} = \frac{1}{2z} \left( -1 + \sqrt{1 + 4n_{\text{г}} n_{\text{ф}} z} \right), \quad z \equiv \langle \exp \{-\varphi^{\text{г}}(x)\} \rangle_l - 1 = \langle \exp \{-\varphi(x)\} \rangle_l - 1, \quad (3)$$

где

$$\exp \{-\varphi^{\text{г}}(x)\} = \frac{\int_{\omega} \exp \{-\Phi(\bar{r})\} \exp \{-\varphi(x')\} dx'}{\int_{\omega} \exp \{-\varphi(-x')\} dx'} \quad (4)$$

Поскольку усреднение в (1), а следовательно, и в (3), (4) проводится с помощью вспомогательной (см. формулу (10) из [1]) одночастичной функции  $\hat{F}_{11}^*(x)$ , величина  $z$  является средним значением функции Майера, которая широко используется в теории неидеальных газов.

Применим метод последовательных приближений и учтем, что концентрация вакансий  $n_{\text{ф}}$  в объеме кристалла мала ( $n_{\text{ф}} = 1 - n_{\text{г}} < 10^{-3}$  вдали от линии плавления), поэтому разложим (3) в ряд и ограничимся первыми его членами по  $y = 4n(1 - n)z$ :

$$n_{\text{гф}} \cong n(1 - n)[1 - n(1 - n)z]. \quad (5)$$

В качестве первого шага при использовании метода итераций для решения интегрального уравнения (1) учтем, что  $n_{\text{гг}} = n - n_{\text{гф}} \gg n_{\text{гф}}$ , поэтому в правой части (1) можно пренебречь вторым слагаемым и переписать (1) в виде, соответствующем первой итерации с пробной функцией  $\varphi_0(x)$ , подставленной в правую часть интегрального уравнения. Тогда для потенциала средних сил  $\varphi_1(x)$  получим

$$\exp \{-\varphi_1(x)\} \cong \frac{n_{\text{гг}}}{n} \int_{-R_0/2}^{R_0/2} \exp \{-\Phi(\bar{r})\} \exp \{-\varphi_0(x')\} dx' / \int_{-R_0/2}^{R_0/2} \exp \{-\varphi_0(x')\} dx', \quad n_{\text{гг}} = n - n_{\text{гф}} \quad (6)$$

Уравнение (6) все еще остается достаточно сложным, поскольку оно сильно нелинейное за счет потенциала  $\Phi(\bar{r})$  и, более того, искомым потенциал  $\varphi_1(x)$  зависит от концентрации  $n$  и относительной деформации  $\lambda$ , от которой явно зависит взаимное расстояние  $\bar{r}$  для двух молекул, находящихся вблизи соседних узлов деформированной цепочки из  $M$  микроячеек.

**Аналитическое исследование одномерной статистической модели растяжения-сжатия в приближении Гаусса.** Учитывая, что при разработке нового научного направления всегда желательно иметь точно решаемую модельную задачу, допускающую ее аналитическое исследование с последующим уточнением и обобщением результатов, разложим потенциалы  $\varphi_0(x)$ ,  $\varphi_1(x)$  и  $\Phi(\bar{r})$  в ряд по отклонениям  $x$  и  $x'$  молекул от центров своих ячеек недеформированной кристаллической решетки и ограничимся тремя первыми членами разложений, что соответствует модифицированному приближению Гаусса для коррелятивных функций распределения молекул в статистическом подходе, учитывающем наличие подсистемы вакансий (квазичастиц):

$$\begin{aligned}\varphi_0(x) &\approx \varphi_0 + \alpha_0 x + \beta_0 x^2, & \varphi_1(x) &\approx \varphi_1 + \alpha_1 x + \beta_1 x^2, \\ \Phi(\bar{r}) &\approx \Phi_0 + a(x - x') + b(x - x')^2,\end{aligned}\quad (7)$$

где коэффициенты разложения потенциала Леннарда-Джонса, зависящие от деформации  $\lambda$ , имеют вид

$$\begin{aligned}\Phi_0 &= \Phi(R) = \frac{4}{\theta} \left( \frac{1}{R_0^{12} (1 + \lambda)^{12}} - \frac{1}{R_0^6 (1 + \lambda)^6} \right), \\ a &= \frac{d\Phi(R)}{dR} (1 + \lambda) = -\frac{24}{\theta} \left( \frac{2}{R_0^{13} (1 + \lambda)^{12}} - \frac{1}{R_0^7 (1 + \lambda)^6} \right), \\ b &= \frac{d^2\Phi(R)}{dR^2} \frac{(1 + \lambda)^2}{2} = \frac{12}{\theta} \left( \frac{26}{R_0^{14} (1 + \lambda)^{12}} - \frac{7}{R_0^8 (1 + \lambda)^6} \right).\end{aligned}\quad (8)$$

Выполненное разложение потенциалов (после их подстановки в интегральное уравнение (1)) позволяет при вычислении интегралов воспользоваться известным справочным табличным интегралом [10]

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-(sx + px^2)\} dx = \sqrt{\frac{\pi}{p}} \exp\left\{\frac{s^2}{4p}\right\}, \quad p > 0. \quad (9)$$

Для этого нужно интегрирование в пределах каждой ячейки заменить интегрированием в бесконечных пределах, а это допустимо, поскольку, как известно, функции распределения молекул в кристаллическом состоянии сильно локализованы вблизи узлов решетки, так что среднеквадратичное отклонение составляет порядка 10% от параметра решетки, т. е.  $\sqrt{\langle x^2 \rangle} \sim 0.1R_0$ . После такого вычисления интегралов в правой части (6) и приравнивания коэффициентов при одинаковых степенях  $x$  получим систему уравнений для искомых коэффициентов разложения потенциала  $\varphi_1$ :

$$\varphi_1 = \Phi_0 + \frac{\alpha_0^2}{4\beta_0} - \frac{(\alpha_0 - a)^2}{4(b + \beta_0)} - \ln \left( \frac{n_{\text{гг}}}{n} \sqrt{\frac{\beta_0}{b + \beta_0}} \right), \quad \alpha_1 = a + \frac{b(\alpha_0 - a)}{(b + \beta_0)}, \quad \beta_1 = b - \frac{b^2}{(b + \beta_0)}, \quad (10)$$

где  $n_{\text{гг}} = n - n_{\text{гф}} \approx n^2 [1 + (1 - n)^2 z]$ .

Функция  $F_{11}$  распределения молекулы вблизи узла и вспомогательная функция  $\hat{F}_{11}^*$  в первом приближении имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}F_{11}(x) &= n \frac{\exp\{-(\varphi_1 + \alpha_1 x + \beta_1 x^2)\} \exp\{-(\varphi_1 - \alpha_1 x + \beta_1 x^2)\}}{Q} = n \sqrt{\frac{2\beta_1}{\pi}} \exp\{-2\beta_1 x^2\}, \\ \hat{F}_{11}^*(x) &= \frac{\exp\{-(\varphi_1 + \alpha_1 x + \beta_1 x^2)\}}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\{-(\varphi_1 + \alpha_1 x + \beta_1 x^2)\} dx} = \sqrt{\frac{\beta_1}{\pi}} \exp\left\{-\left(\frac{\alpha_1^2}{4\beta_1}\right)\right\} \exp\{-(\alpha_1 x + \beta_1 x^2)\}.\end{aligned}\quad (11)$$

**Расчет одночастичных коррелятивных функций одномерной статистической модели растяжения-сжатия.** Воспользуемся общим функциональным статистическим выражением [6, 11] для свободной энергии неоднородной многокомпонентной системы молекул сортов  $\mu$ , содержащей подсистему вакансий. Применим его к разрабатываемой статистической модели одноосного растяжения-сжатия [1] и вычислим соответствующие интегралы в квадратичном приближении по отклонению  $x$  молекул от узлов (центров микроячеек). Получим следующее выражение для свободной энергии деформированной цепочки в первом приближении по малому параметру, роль которого играет второе слагаемое в уравнении (1):

$$F \equiv \theta M [n \ln n + (1 - n) \ln (1 - n) + n^2 (1 - n)^2 z^2] +$$

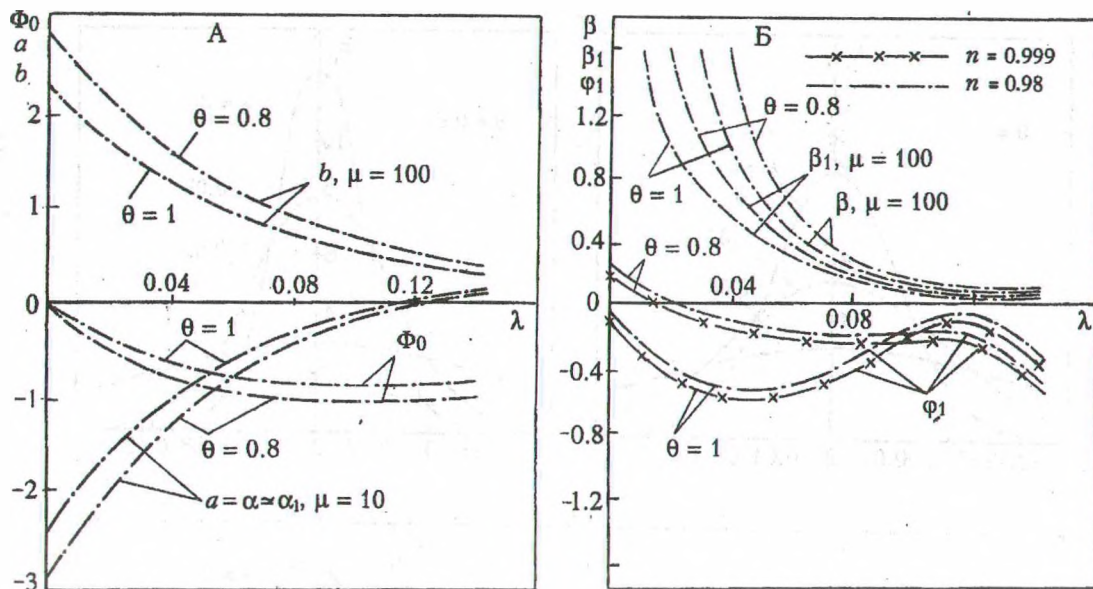


Рис. 2. Зависимость коэффициентов разложения потенциала Леннарда-Джонса  $\Phi_0$ ,  $a$  и  $b$  (А) и потенциала средних сил  $\beta$ ,  $\beta_1$  и  $\phi_1$  (Б) от деформации  $\lambda$  (при  $R_0 = 1$ )

$$+ \theta M \left[ \frac{n}{2} \left( \ln \left( \frac{\beta_1}{2\pi} \right) - \frac{\alpha_1^2}{\beta_1} \right) + \frac{n^2}{2} (1 + (1-n)^2 z) \left( \ln 2 + 2\phi_1 + \frac{\alpha_1^2}{2\beta_1} \right) \right]. \quad (12)$$

Система трех уравнений (10) устанавливает связь между шестью коэффициентами разложения пробного потенциала  $\phi_0(x)$  и потенциала  $\phi_1(x)$ , ( $\phi_0$ ,  $\alpha_0$ ,  $\beta_0$ ,  $\phi_1$ ,  $\alpha_1$ ,  $\beta_1$ ), которые находятся при решении нелинейного интегрального уравнения методом итераций.

Коэффициент  $\phi_0$  определяется из условия нормировки вспомогательной функции  $F_{11}^*$  и в окончательные уравнения не входит, потому система содержит только пять неизвестных коэффициентов. Следовательно, нужно установить еще два уравнения связи для коэффициентов разложения. Воспользуемся имеющейся возможностью относительной свободы в выборе пробной функции  $\phi_0(x)$  при организации итерационной процедуры. Учтем, что итерационная процедура на ЭВМ заканчивается, если найденная функция  $\phi_1$  с достаточной точностью совпадает с предыдущей функцией  $\phi_0$ , используемой в правой части решаемого интегрального уравнения. Поэтому заманчивым представлялось уже на первой итерации решения интегрального уравнения в приближении Гаусса положить  $\phi_1(x) = \phi_0(x)$  и, следовательно, приравнять попарно коэффициенты  $\alpha$  и  $\beta$ , т. е. положить  $\alpha_1 = \alpha_0$ ,  $\beta_1 = \beta_0$ . Проведенный анализ такой возможности показал, что в используемом приближении  $\beta_1 \neq \beta_0$ , и недостающие уравнения связи решили устанавливать с помощью вариационного метода, основанного на экстремальных свойствах термодинамических потенциалов равновесных систем, например свободной энергии.

Из выражения (12) видно, что во вторых квадратных скобках оно содержит линейный по концентрации  $n$  член, который в строгом выражении для свободной энергии, видимо, должен отсутствовать, поскольку вклад от парных взаимодействий в пределе при концентрации  $n$ , стремящейся к нулю (когда можно пренебречь корреляцией в заполнении пар ячеек), должен быть квадратичным по  $n$ . Поэтому, приравняв к нулю коэффициент при  $n/2$  (в круглых скобках), получаем дополнительное уравнение связи между коэффициентами  $\alpha_1$  и  $\beta_1$

$$\ln \left( \frac{\beta_1}{2\pi} \right) - \frac{\alpha_1^2}{\beta_1} = 0. \quad (13)$$

Поскольку второе уравнение из системы (10) имеет решение при  $\alpha_1 = \alpha_0 = a$ , она упрощается

$$\phi_1 = \phi_0 + \frac{\alpha_0^2}{4\beta_0} - \ln \left( \frac{n_{\text{гг}}}{n} \sqrt{\frac{\beta_0}{b + \beta_0}} \right), \quad (14)$$

$$\beta_1 = b - b^2 / (b + \beta_0), \quad (15)$$

где

$$n_{\text{гг}} \approx n^2 [1 + (1-n)^2 z], \quad z = \sqrt{\frac{1}{2}} \exp \left\{ - \left( \phi_1 + \frac{\alpha_1^2}{4\beta_1^2} \right) \right\} - 1,$$

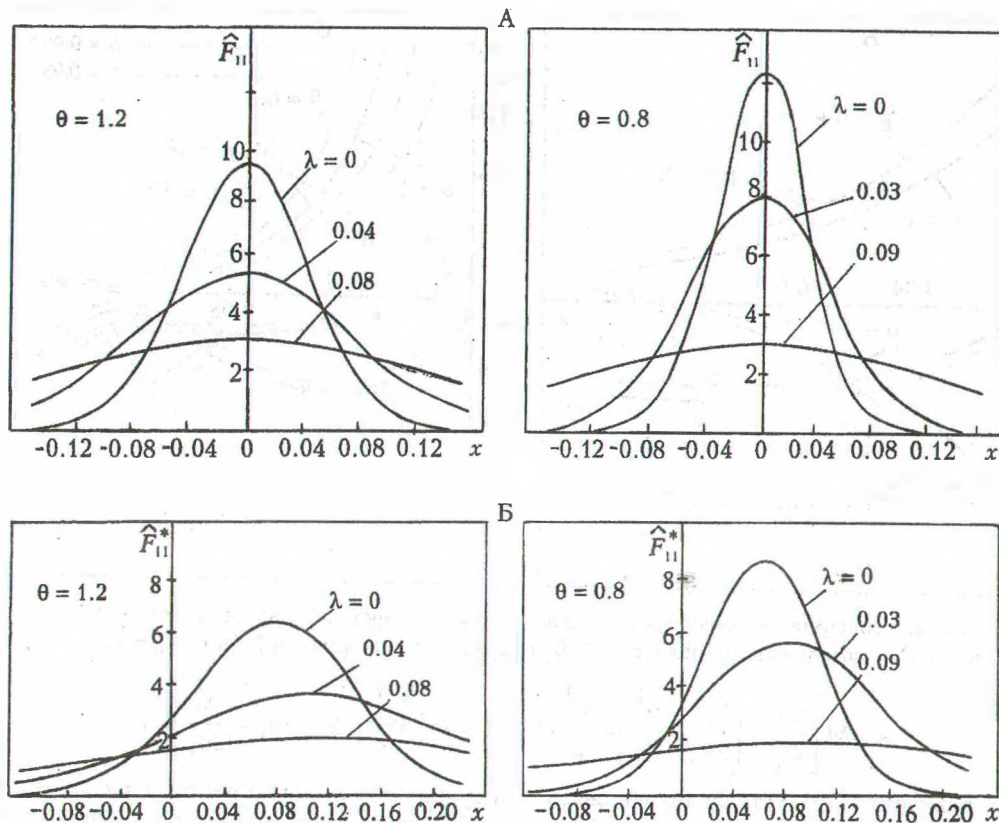


Рис. 3. Нормированная унарная функция  $\hat{F}_{11}(x)$  (А) и вспомогательная функция  $\hat{F}_{11}^*(x)$  (Б), показывающие распределение частицы в окрестности узла микроячейки с учетом того, что соседняя ячейка вакантна при различных деформациях  $\lambda$  и температуре  $\theta$

и совместно с уравнением (13) образует полную систему из трех уравнений для коэффициентов  $\Phi_1$ ,  $\beta_1$  и  $\beta_0$ . Величины  $\Phi_0$ ,  $a$  и  $b$ , входящие в уравнения (14), (15), являются коэффициентами разложения переопределенного потенциала Леннарда-Джонса, включающего в себя температуру (см. формулу (2)) (рис. 2, А). Поэтому они являются известными функциями деформации  $\lambda$  и температуры  $\theta$ .

Для решения системы нелинейных уравнений разработана блок-схема и составлена программа для ЭВМ с использованием пакета программ "Математика 3.0". Численное решение системы (13)–(15) выполнялось в такой последовательности:

- 1) задавались значения приведенной температуры  $\theta$  (в единицах параметра  $\varepsilon$ ), концентрации  $n$  и деформации  $\lambda$  (при  $R_0 = 1$  в единицах параметра  $\sigma$ );
- 2) по формулам (8) рассчитывались коэффициенты  $\Phi_0$ ,  $a$  и  $b$ ;
- 3) в приближении  $\alpha \cong a$  с помощью пакета "Математика 3.0" решалось трансцендентное уравнение (13) относительно коэффициента  $\beta_1$ , а затем определялся коэффициент  $\beta_0$  из уравнения (15);
- 4) нелинейное трансцендентное относительно коэффициента  $\Phi_1$  уравнение (14) решалось также с использованием пакета "Математика 3.0";
- 5) найденные значения всех коэффициентов использовались для расчета функций распределения и двухъячейковых чисел заполнения пар соседних ячеек.

Результаты аналогичных расчетов при других значениях деформации  $\lambda$  позволили установить зависимость всех коэффициентов от относительной деформации  $\lambda$  (при заданных значениях температуры  $\theta$  и концентрации  $n$ ). Эти зависимости графически представлены на рис. 2.

Полученные решения позволяют установить влияние температуры и концентрации вакансий на структуру распределения частиц линейной цепочки. В использованном двухуровневом подходе структура цепочки описывается с помощью нормированных унарной функции распределения  $\hat{F}_{11}(x)$  и вспомогательной функции распределения  $\hat{F}_{11}^*(x)$ , входящей в нелинейное интегральное уравнение для потенциалов средних сил. В квадратичном приближении по смещениям (приближение Гаусса) для линейной цепочки эти функции имеют следующий вид (см. формулы (11)):

$$\hat{F}_{11}(x) = n \sqrt{\frac{2\beta_1}{\pi}} \exp\{-2\beta_1 x^2\}, \quad (16)$$

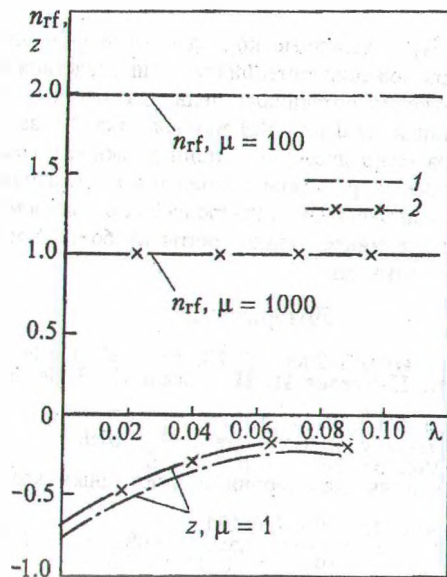


Рис. 4. Зависимость коррелятора  $z$  и двухъячейковых чисел заполнения  $n_{rf}$  от деформации  $\lambda$  (при фиксированных температуре  $\theta = 1$  и концентрациях  $n$ : 1 -  $n_1 = 0.98$ ; 2 -  $0.999$ )

$$\hat{F}_{11}^*(x) = \sqrt{\frac{\beta_1}{\pi}} \exp\left\{-\left(\frac{\alpha_1^2}{4\beta_1}\right)\right\} \exp\left\{-\left(\alpha_1 x + \beta_1 x^2\right)\right\}. \quad (17)$$

Аналитическое выражение для функции (16) с учетом зависимости коэффициента  $\beta_1$  от деформации  $\lambda$  (рис. 2, Б) показывает, что с увеличением деформации при растяжении линейной цепочки функция распределения  $\hat{F}_{11}(x)$  "размывается" (рис. 3, А), а среднеквадратичное отклонение молекулы от узла при этом увеличивается, поскольку

$$\langle x^2 \rangle = \int x^2 \hat{F}_{11}(x) dx = n \sqrt{\frac{2\beta_1}{\pi}} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{(2\beta_1)^3}} = \frac{n}{8\beta_1}. \quad (18)$$

Функция (17) описывает распределение молекулы в ячейке, соседствующей с вакантным узлом цепочки. Из (17) видно, что она асимметрична по отношению к узлу, т. е. центру ячейки (рис. 3, Б). В этом случае зависимость среднеквадратичного отклонения от деформации  $\lambda$  имеет более сложный вид, поскольку оно выражается уже через два коэффициента -  $\alpha_1$  ( $\alpha_1 \cong a$ ) и  $\beta_1$ : значения коэффициента  $\beta_1$  и модуля коэффициента  $\alpha_1$  уменьшаются при увеличении  $\lambda$  (рис. 2). На рис. 4 изображена зависимость коррелятора  $z$  и двухъячейковых чисел заполнения  $n_{rf}$  от деформации  $\lambda$ , которые определяют вероятность того, что рядом с занятой ячейкой находится вакансия. Видно, что величина  $n_{rf}$  при возрастании  $\lambda$  остается практически постоянной при фиксированной концентрации  $n$ . Однако понятно, что при деформировании концентрация вакансий  $c = 1 - n$  изменяется, что приведет к соответствующей зависимости  $n_{rf}$  от  $\lambda$ . Для установления ее вида предстоит решить вариационную задачу по отысканию минимума свободной энергии деформированной цепочки.

Таким образом, приведенные расчеты показывают, что предложенная одномерная статистическая модель одноосного растяжения-сжатия позволяет в явном виде учесть влияние межчастичного взаимодействия, температуры и деформации на микроструктуру, а следовательно, и на термодинамические свойства. Поскольку свободная энергия зависит от деформации  $\lambda$ , это влияние скажется и на механических свойствах деформируемого образца. Это означает, что созданы условия для построения основ статистической теории упругости, которая будет свободна от модельного феноменологического представления о сплошности материала (на микроуровне среда обладает дискретностью структуры) и будет способна описывать нелинейные участки диаграммы растяжения-сжатия, которые, как известно, отвечают за нелинейную упругость.

#### Обозначения

$N$  - число частиц данной системы;  $M$  - число микроячеек, на которые мысленно разбивается весь объем системы;  $\lambda$  - относительная деформация образца;  $n$  - концентрация молекул в микроячейках;  $\omega$  - объем микроячейки;  $\omega_M$  - объем последней микроячейки;  $\phi$  - потенциал средних сил взаимодействия частиц в микроячейках;  $\Phi$  - парный межмолекулярный потенциал Леннарда-Джонса;  $\theta = kT/\epsilon$  - безразмерная температура ( $k$  - постоянная Больцмана,  $T$  - абсолютная температура,  $\epsilon$  - глубина потенциальной ямы, описывающей взаимодействие двух частиц (молекул) среды);  $x, x'$  и  $q$  - координата-скаляр точки среды относительно центра ячейки недеформированной решетки образца;  $R$  - параметр деформированной решетки;  $R_0$  - параметр недеформированной решетки;  $r$  - взаимное расстояние для двух молекул, находящихся вблизи соседних узлов (центров ячеек) образца;  $z$  - среднее значение функции Майера;

$s, p$  – параметры табличного интеграла;  $F_{11}$  – условные коррелятивные функции распределения молекулы вблизи узла ячейки;  $\Phi_0, \alpha_0, \beta_0$  – коэффициенты разложения потенциала взаимодействия средних сил  $\Phi_0(x)$ ;  $\Phi_1, \alpha_1, \beta_1$  – то же,  $\Phi_1(x)$ ;  $\Phi_0, a, b$  – коэффициенты разложения потенциала Леннарда-Джонса;  $F$  – свободная энергия деформированной цепочки. Индексы:  $g$  – занятая частицей (real particle) микроячейка;  $f$  – занятая фиктивной частицей (fictitious particle) (вакантная) ячейка;  $l, m$  – номера микроячеек;  $\sim$  – принадлежность соответствующих величин к деформированному образцу;  $lm$  – пары ячеек;  $gl$  – две микроячейки с номерами  $l$  и  $m$  заполнены одной частицей (молекулой);  $fl$  – микроячейка с номером  $l$  заполнена одной частицей, а микроячейка с номером  $m$  пустая (вакантная);  $11$  – первое статистическое приближение, при котором все микроячейки заняты не более чем одной частицей (молекулой);  $\wedge$  – нормированность на единицу; \* – вспомогательность.

#### Литература

1. Наркевич И. И., Жаркевич А. В. // ИФЖ. 2000. Т. 73, № 6. С. 1313–1319.
2. Жаркевич А. В., Клинецвич С. И., Наркевич И. И. // Весці НАН Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. 1998. № 4. С. 111–117.
3. Боголюбов Н. Н. Избранные труды. Т. 2. Киев, 1970.
4. Ротт Л. А. Статистическая теория молекулярных систем. М., 1979.
5. Abraham F. F. // Phys. Rep. 1979. Vol. 53, No. 2. Pp. 93–156.
6. Наркевич И. И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. СПб., 1993.
7. Narkevich I. I. // Physica A. 1988. Vol. 150. Pp. 659–671.
8. Наркевич И. И. // Весці АН БССР. Сер. фіз.-мат. навук. 1988. № 5. С. 86–92.
9. Наркевич И. И. // Высокочистые вещества. 1990. № 1. С. 67–75.
10. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., 1971.
11. Наркевич И. И. // Тр. БГТУ. Сер. фіз.-мат. навук и інформатики. 2000. Вып. 8. С. 93–97.