

И. И. Наркевич, профессор

## ПОСТРОЕНИЕ НЕЛОКАЛЬНОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ДЕФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛОВ С ДЕФЕКТАМИ, ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ РЕШЕНИЯ

The principles of the statistic theory of an elasticity are worked out, which is developed in the frame of a two-level molecular-statistical description of nonuniform systems. It's simultaneously used a method of correlative functions by Bogolyubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon (BBGKY), a method of conditional distributions by L.A.Rott and a method of thermodynamic functionals. In consequence the statistical expression for a free energy functional is obtained, which depend on a field of a microscopic tensor of the deformation of a crystal lattice with vacancies and a filling numbers field of lattice cells (knots). This expression takes into account structural peculiarities of a crystal with vacancies (entropy factor) besides a potential energy of the deformation (force factor).

Механика деформируемых твердых тел, рассматриваемых с позиции теории *сплошной среды*, составляет содержание теории упругости [1], 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 механики деформирования стержней, пластин и оболочек [2], рассматриваются вопросы теплопроводности, вязкости, а также теории колебаний и волн. Более того, в рамках феноменологической теории упругости предприняты попытки учета наличия дефектов, например дислокаций и их взаимодействия [1], что представляет собой выход за границы теории упругости, в основе которой лежит представление о реальном материале как сплошной среде (модель).

Если оставаться в области справедливости уравнений теории упругости (область малых деформаций, где справедлив закон Гука для изотропных и анизотропных сред), то в рамках этой теории нет нерешенных проблем принципиального характера, все имеющиеся там проблемы связаны с необходимостью решения систем большого числа дифференциальных уравнений в частных производных с разного рода *граничными условиями* и дифференциальными условиями *совместности деформаций* (следствие понятия сплошной среды, т.е. среды без разрывов). Интересно отметить одну особенность (важную для даль-

нейших статистических исследований) этой системы уравнений равновесия среды: имеются технически важные задачи, для которых найдены решения для полей деформации (смещений) и полей напряжений, которые не удовлетворяют точным граничным условиям, однако оказываются достаточно точными для их практического применения. Это свойство лежит в основе принципа упругой равнозначности статически эквивалентных нагрузок - *принцип Сен-Венана* [2]. Имеются также решения, которые удовлетворяют уравнениям равновесия, однако при этом не выполняются условия сплошности материала. Следовательно, уже 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 фактического *отсутствия сплошности* материала.

Таким образом, 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*).

Перечисленные проблемы являются первоочередными, они столь сложны, а поставленная цель столь глобальна, что ее достижение может казаться если не невозможной, то по крайней мере трудно-разрешимой задачей, поскольку свойства описываемого объекта определяются преимущественно кооперативными явлениями [3], присущими системе большого числа взаимодействующих частиц (атомов, молекул, ионов) во внешних силовых полях (под действием внешних силовых нагрузок).

Не вдаваясь в подробности, следует заметить, что развитие физики пластичности и прочности на феноменологическом уровне прошло несколько этапов и к настоящему времени сформировалось пони-

мание о многостадийности и многомасштабности процессов деформирования твердых тел и что полную картину можно получить только на основе комплекса взаимосвязанных и сменяющих друг друга моделей на разных масштабных уровнях [4].

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 [5], метод условных распределений профессора Ротта Л.А. [6] и вариационный метод термодинамических потенциалов [7]. Их одновременное использование позволило разработать двухуровневое молекулярно-статистическое описание неоднородных систем [7, 8], которое предполагает применение метода коррелятивных функций для изучения микроструктуры среды в пределах элементарных (примитивных) ячеек метода условных распределений [6] (*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  $\bar{u}_p$  узлов кристаллической решетки или соответствующего дискретного поля микроскопического тензора деформации  $\lambda_p^{\alpha\beta}$  решетки. При замыкании цепочки интегродифференциальных уравнений на первом уравнении (с использованием аппроксимированных двухчастичных коррелятивных функций частиц и вакансий) функционал свободной энергии имеет следующий вид [9]:

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

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 (не-взаимодействующими) частицами, которые "находятся" в вакантных ячейках ( $\mu, \nu = b$ ). Вспомогательные функционалы  $Q_l$  и  $f_{lm}$  выражаются интегральным образом через потенциалы средних сил  $\Phi_{lm}$ , 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  $n_l^a$  и поля микроскопического тензора деформации  $\lambda_l^{\alpha\beta}$  и удовлетворяют системе нелинейных интегральных уравнений ( $n_l^{aa} + n_{lm}^{ab} = n_l^a$  - условие нормировки для коррелятивных функций):

$$\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_{lm}\right\} = n_{lm}^{aa}\left\langle\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi(\tilde{r}_{lm})\right\}\right\rangle_m^1 + n_{lm}^{ab}\left\langle\exp\left\{-\frac{1}{\theta}\Phi_{lm}\right\}\right\rangle_1^1, \quad (2)$$

$$n_{lm}^{ab} = \frac{1}{2z_{lm}}\left[(n_m^b - n_l^b)z_{lm} - 1\right] + \sqrt{\left[(n_m^b - n_l^b)z_{lm} - 1\right]^2 + 4n_l^a n_m^b z_{lm}}. \quad (3)$$

Наличие полной (замкнутой) системы уравнений, определяющих функционал свободной энергии молекулярной системы, позволяет решать разнообразные задачи по расчету равновесных полей концентрации частиц и деформации решетки кристаллов с дефектами. Для определения этих полей в окрестности одиночного точечного дефекта (например вакансии) нужно рассмотреть часть кристалла как открытую термодинамическую систему с изменяющимся общим числом молекул  $N$  (реальных частиц) и флуктуирующим общим объемом  $V$  и, пользуясь методом множителей Лагранжа, выполнить варьирование функционала  $F^*$  для соответствующего статистического ансамбля

( $V = \sum_{l=1}^M \tilde{\omega}_l$ ,  $\tilde{\omega}_l$  - объемы деформированных ячеек):

$$F^* = F(\{n_p\}, \{\lambda_p^{\alpha\beta}\}) + \alpha \sum_{l=1}^M n_l^a + \beta \sum_{l=1}^M \tilde{\omega}_l. \quad (4)$$

Здесь множители Лагранжа  $\alpha$  и  $\beta$  имеют смысл химического потенциала  $\mu$  и давления  $P$  термостата, с которым рассматриваемая часть кристалла (подсистема) находится в термическом, механическом и химическом равновесии.

Таким образом, развиваемое двухуровневое молекулярно-статистическое описание неоднородных сред позволяет изучать структуру и свойства реальных кристаллов с точечными дефектами на микроскопическом уровне, а затем перейти на макроскопический уровень и изучать структуру дислокационных субструктур, разрабатывая статистическую схему описания взаимодействующих макродефектов (статистический ансамбль дислокаций разного типа).

### ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Теория упругости. М.: Наука, 1987. Т. 7. 246 с.
2. Кац А.М. Теория упругости. М.: Гостехиздат, 1956. 207 с.
3. Вопросы теории дефектов в кристаллах. // Сборник научных трудов под редакцией Вонсовского С.В. и Кривоглаза М.А. Л.: Наука, 1987. 176 с.
4. Владимиров В.И., Романов А.Е. Дисклинации в кристаллах. Л.: Наука, 1986. 223 с.
5. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.: Гостехиздат, 1946. 119 с.
6. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. М.: Наука, 1979. 280 с.
7. Наркевич И.И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред. Дисс. докт. ф.-м. наук. С. - П.: СПГУ, 1993. 242 с.
8. Жаркевич А.В., Клинецевич С.И., Наркевич И.И. Статистико-механическое описание структурных термодинамических и механических свойств неоднородной молекулярной среды. // Весці НАН РБ. Сер. фіз.-мат. навук, 1998. № 4. С.111-117.
9. Наркевич И.И. Метод множителей Лагранжа в проблеме нормировки коррелятивных функций многокомпонентного кристалла с дефектами. // Высокочистые вещества, 1990. № 1. С. 67-75.