

УДК 536.758+539.311

ДВУХУРОВНЕВОЕ МОЛЕКУЛЯРНО-СТАТИСТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ДЕ- ФОРМИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛОВ С ТЕПЛОВЫМИ ВАКАНСИЯМИ

И.И.Наркевич, А.В.Жаркевич

Белорусский государственный технологический университет
220050, г. Минск, ул. Свердлова 13а
E-mail: root@bgtu.minsk.by

Разрабатываются основы статистической теории упругости, которая развивается в рамках двухуровневого молекулярно-статистического описания неоднородных систем. Одновременно используются метод коррелятивных функций Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда-Ивона (ББГКИ), метод условных распределений профессора Ротта Л.А. и метод термодинамических функционалов.

В результате получено статистическое выражение для функционала свободной энергии, которое явно зависит от поля микроскопического тензора деформации решетки кристалла с вакансиями и поля чисел заполнения ячеек (узлов) решетки. Это выражение помимо потенциальной энергии деформации (силовой фактор) учитывает структурные особенности кристалла с вакансиями (энтропийный фактор).

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 дальнейших 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 ре-

шения, 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 фактическим *отсутствием 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 трудноразрешимой задачей, поскольку свойства описываемого объекта определяются преимущественно кооперативными явлениями [3], присутствующими в 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 понимание 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 уровне (с использованием аппроксимированных двухчастичных коррелятивных функций частиц и вакансий) функционал свободной энергии имеет следующий вид [9]

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

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_l^μ 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):

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

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

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 α и β имеют смысл химического потенциала μ 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).

Список литературы

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., Клинецвич 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.