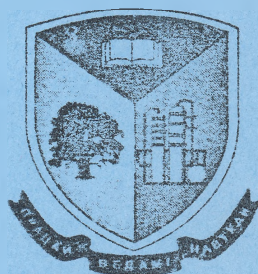


ISSN 1683-0377



Белорусского  
государственного  
технологического  
университета

ТРУДЫ

Серия VI

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ  
НАУКИ  
И ИНФОРМАТИКА

ВЫПУСК XI

Минск 2003

## ЛИТЕРАТУРА

1. Наркевич И.И. Построение нелокальной статистической теории деформированных кристаллов с дефектами, проблемы и перспективы решения // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. Вып. VIII. 2000. С. 93–97.
2. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Молекулярно-статистическое описание неоднородно деформированных образцов. 1. Постановка задачи и метод ее решения // Инженерно-физический журнал. – Минск, 2000. Т. 73. – № 6. – С. 1313–1319.
3. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Молекулярно-статистическое описание неоднородно деформированных образцов. 2. Расчет функций распределения молекул и вакансий в одномерной однородно деформированной статистической модели растяжения–сжатия // Инженерно-физический журнал. – Минск, 2002. Т. 75. – № 4. – С. 170–176.
4. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. – М.: Наука, 1979.
5. Наркевич И.И. Молекулярно-статистическая теория неоднородных конденсированных сред. Дисс. докт. физ.-мат. наук. – С.-П.: СПГУ, 1993. – 242 с.
6. Наркевич И.И., Жаркевич А.В., Казаков П.П. Исследование структуры одномерной статистической модели одноосного деформирования молекулярного кристалла // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. Вып. IX. 2001. С. 65–71.
7. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Расчет функций распределения и свободной энергии одномерной статистической модели одноосного растяжения–сжатия молекулярного кристалла // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. Вып. IX. 2001. С. 71–77.

УДК 539.311

А.В.Жаркевич, ассистент; Д.А.Павленко, студент

# ПРИМЕНЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ГИББСА ПРИ ТЕОРЕТИЧЕСКОМ ПОСТРОЕНИИ ДИАГРАММЫ НАПРЯЖЕНИЕ – ДЕФОРМАЦИЯ ДЛЯ ОДНОМЕРНОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РАСТЯЖЕНИЯ – СЖАТИЯ

A one dimension molecular crystal deformation diagram was built as a result of the numerical solution of the variation equation.

В результате варьирования выражения для свободной энергии  $F$  [1–4] одномерной статистической модели однородного деформирования молекулярного кристалла было получено нелинейное уравнение относительно концентрации  $n$  частиц (молекул) и микродеформации  $\lambda$ , которые являются внутренними параметрами разрабатываемой модели (см. в предыдущей статье этого сборника уравнение (10)). Оно решалось численно на ЭВМ с использованием программного продукта «Математика 3.0» графическим способом. Для молекулярной цепочки длиной  $L$ , содержащей  $N$  молекул, распределенных по  $M > N$  узлах при заданных значениях набора внешних параметров системы, включающего безразмерную температуру  $\theta$ , молекулярную длину  $l = L/N$  (аналог молекулярного объема) и длину  $R_0 = L_0/M_0$  недеформированного звена цепочки, выбирался интервал значений  $n$ , соответствующий области заведомо кристаллического состояния  $n \in (0.9, 1)$ . С помощью уравнения связи для внутренних параметров ( $\lambda = \lambda(n)$ ) определялся соответствующий интервал допустимых значений микродеформаций  $\lambda$

молекулярной цепочки ( $\lambda = (R - R_0)/R_0$ ). Затем для каждой пары значений  $n$  и  $\lambda$  рассчитывались три коэффициента разложения потенциала Леннард-Джонса ( $\Phi_0, a, b$ ) и графически решалось трансцендентное вариационное уравнение  $\mathcal{F}(n, \lambda) = 0$  по отношению к искомому равновесному значению концентрации  $n$ . При этом одновременно рассчитывались три коэффициента разложения потенциала средних сил ( $\phi_1, \alpha_1, \beta_1$ ), вспомогательный коррелятор  $z$  и все входящие в вариационное уравнение производные. Процесс его решения при заданных значениях температуры  $\theta$  и молекулярной длины  $l$  иллюстрируется кривыми, которые приведены на рис. 1. Решением нелинейного уравнения, определяющем равновесное значение концентрации  $n$  (и микродеформации  $\lambda$ ), является точка пересечения графика функции  $\mathcal{F}(n, \lambda(n))$  с осью концентрации вакансий  $c = 1 - n$ .

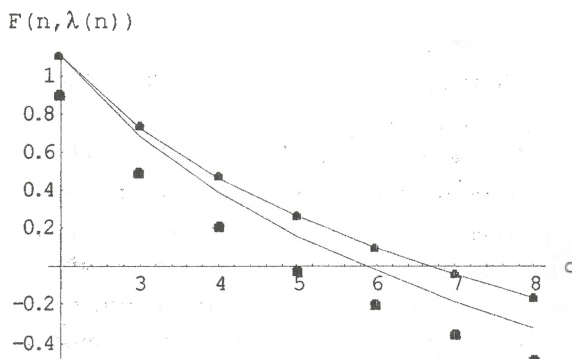


Рис. 1. Зависимость  $\mathcal{F}(n, \lambda(n))$  от концентрации вакансий  $c = 1 - n$  (с учетом уравнения связи  $\lambda = (l \cdot n)/R_0 - 1$ ) при фиксированных параметрах  $R_0 = 1$ ,  $\theta = 1$ : при заданной молекулярной длине  $l = 0.98$  (кривая —),  $l = 1.0$  (кривая ...),  $l = 1.1$  (кривая -·-). На графике значения, по которым построены кривые, увеличены в  $10^{10}$ ,  $10^8$  и  $10^5$  раз соответственно

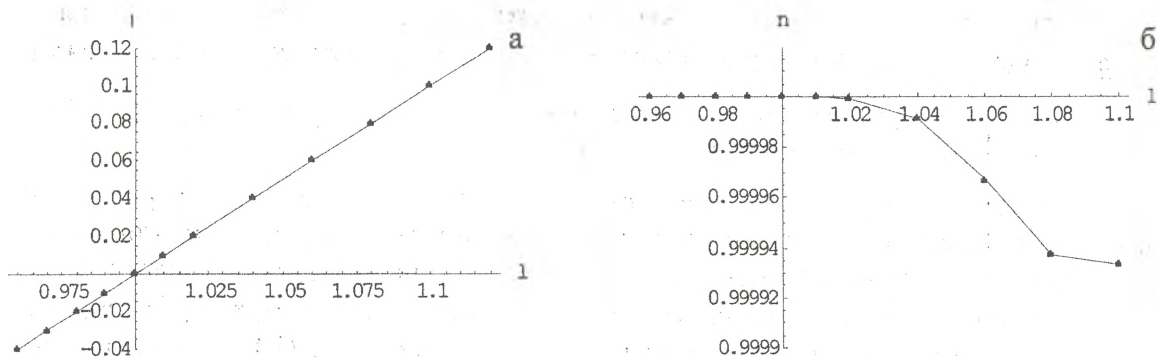


Рис. 2. Зависимость микродеформации  $\lambda$  микроячеек (а) и чисел заполнения  $n$  частями микроячеек (б) от молекулярной длины  $l$  при фиксированных параметрах  $R_0 = 1$  и  $\theta = 1$

По результатам численного решения вариационного уравнения были получены зависимости равновесных значений концентрации  $n$ , микродеформации  $\lambda$  и соответственно свободной энергии  $F$  молекулярной цепочки от длины  $l$ , которые представлены графически на рис. 2 и 3а. Видно, что микродеформация  $\lambda$  зависит от  $l$  практически линейно (рис. 2а). Однако концентрация  $n$  при деформировании цепочки является явно



нелинейной функцией  $l$  (рис. 2б), что, возможно, связано с появлением пластических деформаций при растяжении, поскольку концентрация вакансий  $c=1-n$  резко возрастает.

Логически последовательным и завершающим этапом создания статистической теории упругости является теоретическое построение диаграммы деформирования образца, т. е. отыскание зависимости напряжения  $\sigma$  от величины относительной макродеформации  $\varepsilon$ . Поскольку в экспериментах обычно деформирование происходит при изобарно-изотермических внешних условиях, то для описания структурных, термодинамических и механических свойств макроскопических систем удобно использовать не свободную энергию, а термодинамический потенциал Гиббса  $G$ . Для рассматриваемого здесь одномерного случая он определяется следующим образом:

$$G = F(L) + p_0^* L, \quad (1)$$

где  $p_0^*$  – фиксированное значение одномерного аналога внешнего давления среды, т. е. силы, обеспечивающей цепочке из  $N$  молекул длину  $L = L_0$ . Для удобства сопоставления с трехмерным случаем для этой силы используем обычное обозначение для давления ( $p_0^*$ ), а для соответствующей деформирующей силы – обычное обозначение для напряжения ( $\sigma^*$ ). Поскольку свободная энергия  $F = fN/n$ , а  $L = lN$ , то удобнее использовать  $g = G/N = f/n + p_0^* l$ . Аналог нормального напряжения  $\sigma^*$ , т.е. деформирующая сила, находится по формуле

$$\sigma^* = \frac{1}{L_0} \frac{\partial G}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{l_0} \frac{\partial g}{\partial \varepsilon}. \quad (2)$$

Относительную макродеформацию  $\varepsilon$  цепочки выразим через молекулярную длину  $l$ :

$$\varepsilon = (L - L_0)/L_0 = (l - l_0)/l_0. \quad (3)$$

В результате для  $\sigma^*$  получим

$$\sigma^* = \frac{1}{l_0} \frac{\partial g}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{l_0} \frac{\partial g}{\partial l} \frac{\partial l}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial g}{\partial l} = \frac{\partial (f/n)}{\partial l} + p_0^*. \quad (4)$$

Построенные с применением программного продукта «Математика 3.0» зависимости величины  $g = G/N$ , т.е. термодинамического потенциала Гиббса (формула (1)) и деформирующей силы (формула (4)) от молекулярной длины  $l$ , представлены на рис. 3б и 4. Левая ветвь потенциала (рис. 3б) отвечает за сжатие, а правая – за растяжение образца. Практически симметричный участок этой кривой в некоторой окрестности минимума функции  $g(l)$  определяет область упругих деформаций, описываемых законом Гука. Далее зависимость  $g(l)$  становится практически линейной. Вид зависимости  $\sigma^*$  от  $l$  хорошо согласуется с классической кривой деформирования при одноосном растяжении – сжатии линейных образцов. На правой ветви, отвечающей растяжению образца (см. рис. 4), четко прослеживаются области, напоминающие соответствующие участки упругой и пластической деформаций, а также текучести на экспериментальных диаграммах напряжение – деформация.

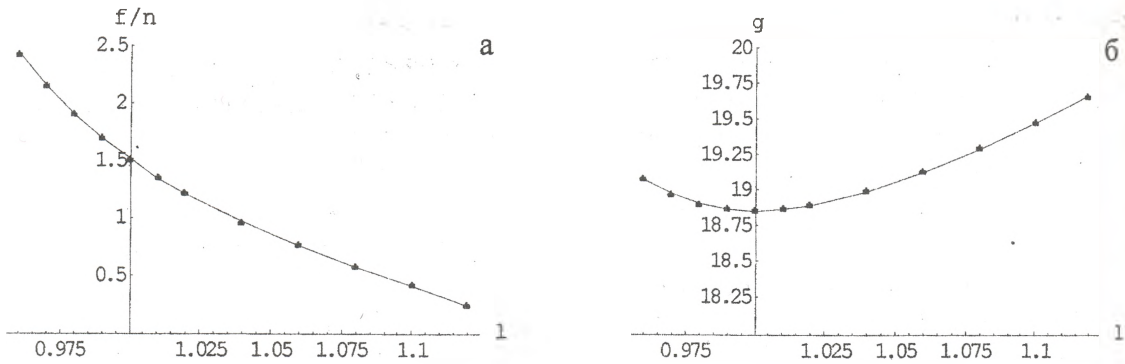


Рис. 3. Зависимость равновесной свободной энергии  $f/n$  (а) и термодинамического потенциала Гиббса  $g$  (б), приходящихся на одну частицу, от молекулярной длины  $l$  при фиксированных параметрах  $R_0 = 1$  и  $\theta = 1$

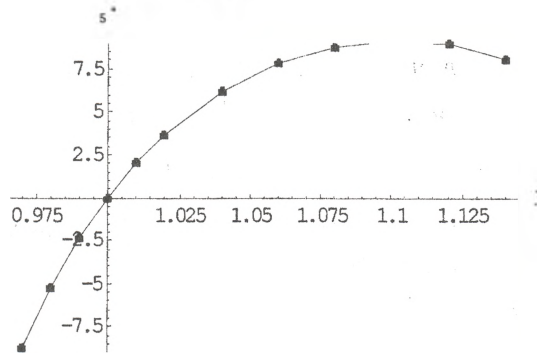


Рис. 4. Диаграмма растяжения – сжатия одномерного образца

Полученные результаты позволяют надеяться на то, что разрабатываемая статистическая теория упругости позволит комплексно описывать структурные, термодинамические и механические свойства не только одномерных цепочек, что актуально в настоящее время, но и плоских, а также объемных образцов, имеющих важное значение для теории упругости.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Молекулярно-статистическое описание неоднородно деформированных образцов. 1. Постановка задачи и метод ее решения // Инженерно-физический журнал. – Минск, 2000. Т. 73. – № 6. – С. 1313–1319.
2. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Молекулярно-статистическое описание неоднородно деформированных образцов. 2. Расчет функций распределения молекул и вакансий в одномерной однородно деформированной статистической модели растяжения–сжатия // Инженерно-физический журнал. – Минск, 2002. Т. 75. – № 4. – С. 170–176.
3. Наркевич И.И., Жаркевич А.В., Казаков П.П. Исследование структуры одномерной статистической модели одноосного деформирования молекулярного кристалла // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. Вып. IX. 2001. С. 65–71.
4. Наркевич И.И., Жаркевич А.В. Расчет функций распределения и свободной энергии одномерной статистической модели одноосного растяжения–сжатия молекулярного кристалла // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. Вып. IX. 2001. С. 71–77.