

Квазирешеточная модель. Учет короткодействующих частей межатомных потенциалов и вакансий

А. Ю. Захаров¹, А. А. Шнайдер².

¹Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, Великий Новгород, Россия

тел: (8162) 33-68-91, эл. почта: Anatoly.Zakharov@novsu.ru

²Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, Великий Новгород, Россия

тел: (8162) 33-68-91, эл. почта: schneider@mail.natm.ru

В настоящее время количественное описание статистической термодинамики производится в рамках различных феноменологических моделей. Одной из них является квазирешеточная модель многокомпонентных систем (КРМ), основанная на предложенной и разработанной в [1,2] обобщенной решеточной модели. Перечислим основные положения КРМ.

Короткодействующая часть взаимодействий приводит к ограничению расстояний, на которые могут сближаться частицы, и может быть учтена введением собственных атомных объемов ω_i всех компонентов. Предполагаем, что собственные атомные компоненты в данной пространственной точке зависят от распределения всех компонентов во всем пространстве.

$$\omega_i(\vec{r}) = \omega_i(\{n_1(\vec{r})\}, \dots, \{n_m(\vec{r})\}), \quad (1)$$

где $n_i(\vec{r})$ - локальная плотность числа частиц i -го компонента в точке \vec{r} ($i = 1 \div m$, m - число компонентов).

Дальнодействующая часть взаимодействий порождает плавно меняющиеся в пространстве локальные силовые поля, которые могут быть учтены в приближении эффективного поля. Вакансии проявляются в термодинамических свойствах системы посредством энтропийного вклада в функционал свободной энергии.

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^m \iint_V K_{ij}(\vec{r} - \vec{r}') n_i(\vec{r}) n_j(\vec{r}') d^3 r d^3 r' + T \sum_{i=0}^m \int_V n_i(\vec{r}) \ln \left(\frac{n_i(\vec{r})}{n(\vec{r})} \right) d^3 r, \quad (2)$$

где $K_{ij}(\vec{r} - \vec{r}')$ - потенциальная энергия взаимодействия частиц i -го и j -го компонентов, находящихся в точках \vec{r} и \vec{r}' ; T - абсолютная температура в энергетических единицах; $n(\vec{r}) = \sum_{i=0}^m n_i(\vec{r})$ - суммарная плотность числа частиц и вакансий.

Равновесное распределение компонентов в системе определяется из условия минимума функционала свободной энергии при учете условия упаковки

$$\sum_{i=1}^m \omega_i n_i(\vec{r}) + \omega_0 n_0(\vec{r}) = 1,$$
 (где индекс «0» соответствует вакансии с удельным объемом ω_0) и учете условия сохранения числа частиц компонентов $\int n_i(\vec{r}) d^3 r = N_i$, (где N_i - число частиц каждого из компонентов). Локальный химический потенциал i -го компонента $\mu_i(\vec{r})$ ($i \neq 0$) определяется как вариационная производная функционала свободной энергии по локальной плотности этого компонента.

Дальнейшее рассмотрение КРМ направлено на вычисление термодинамических функций однородных многокомпонентных фаз.

Литература

1. А. Ю. Захаров, С. В. Терехов. Обобщенная решеточная модель фазовых равновесий в многокомпонентных системах. // Математические задачи химической термодинамики. Новосибирск: Наука, 1985. С. 173-181.
2. А. Ю. Захаров, А. Л. Удовский. Обобщенная решеточная модель и ее применение к прогнозированию термодинамических свойств многокомпонентных растворов. // Физика и химия обработки материалов. 2005. № 1. С. 5-17.