

# Термодинамические свойства двумерных систем с изотропными парными потенциалами взаимодействия

О.С. Ваулина, К.Г. Косс (Адамович)

*ОИВТ РАН, Москва, Россия*

В данной работе представлены результаты численного исследования термодинамических свойств (плотности энергии  $U$ , давления  $P$ , приведенной изотермической сжимаемости  $\beta_V = n^{-1} (\partial P / \partial T)_V$  и теплоемкости  $C_V = (\partial U / \partial T)_V$ ) неидеальных диссипативных систем частиц, представляющих собой монослой, с параметрами, близкими к параметрам в эксперименте с пылевой плазмой ВЧ-разряда. Расчеты были выполнены методом молекулярной динамики Ланжевена.

Моделирование проводилось для различных типов потенциала межчастичного взаимодействия  $\phi(r)$ , представляющих собой комбинации степенных и экспоненциальных функций, - данные формы потенциала обычно используются для моделирования отталкивания между взаимодействующими частицами:

$$\phi(r) = \phi_c [b_1 \exp(-\kappa_1 r/l_p) + b_2 (l_p/r)^n \exp(-\kappa_2 r/l_p)]. \quad (1)$$

Здесь  $b_{1(2)}$ ,  $\kappa_{1(2)} = l_p/\lambda_{1(2)}$  и  $n$  - варьируемые параметры, а  $\phi_c = (Q)^2/r$  - кулоновская потенциальная энергия частицы с зарядом  $Q$ .

В работе представлена аппроксимация для плотности энергии двумерной неидеальной системы, полученная с помощью полуэмпирической теории "скачков", разработанной для молекулярных жидкостей и основанная на аналогиях между твердым телом и жидкостью [1]. По этой теории, разность между потенциальной  $U_p$  и решеточной  $U_0$  составляющими энергии жидкости может быть представлена в виде

$$(U_p - U_0) = a_0 T + a_1 \varepsilon_f \{1 + a_2 \exp(\varepsilon_f/T)\}, \quad (2)$$

где  $a_0$ ,  $a_1$ ,  $a_2$  - некоторые коэффициенты, зависящие от типа решетки и спектра реализующихся в ней осцилляций, а  $\varepsilon_f$  - характерная энергия частицы по одной степени свободы. Параметры предложенной аппроксимации (2) были получены из совмещения аналитических кривых (2) с результатами численного расчета энергии  $U_p$ .

Полученная аппроксимация использовалась для вывода аналитических выражений для давления, изотермической сжимаемости и теплоемкости из соотношений термодинамики. Сравнение полученных результатов с численными расчетами показало, что полученные аппроксимации хорошо описывают термодинамические свойства рассмотренных неидеальных систем.