

Термодинамические характеристики двумерных и трехмерных систем с экранированным кулоновским потенциалом взаимодействия

О.С. Ваулина, К.Г. Косс, О.Ф. Петров, В.Е. Фортов

ОИВТ РАН, Москва, Россия

В данной работе представлены результаты численного исследования термодинамических свойств (таких, как плотности энергии U и теплоемкости $C_V = (\partial U / \partial T)_V$) неидеальных диссипативных систем частиц, взаимодействующих с экранированным кулоновским потенциалом. Были рассмотрены двух- и трехмерные системы с параметрами, близкими к параметрам в экспериментах с лабораторной пылевой плазмой. Расчеты были выполнены методом молекулярной динамики Ланжевена.

В работе представлена аппроксимация для плотности энергии двумерных и трехмерных неидеальных систем, полученная с помощью полуэмпирической теории “скачков”, разработанной для молекулярных жидкостей и основанная на аналогиях между твердым телом и жидкостью. По этой теории, разность между потенциальной U_p и решеточной U_0 составляющими энергии жидкости может быть представлена в виде

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

где a_0 , a_1 – некоторые коэффициенты, зависящие от типа решетки и спектра реализующихся в ней осцилляций, m – размерность системы, а ε_f – характерная энергия частицы по одной степени свободы. Параметры предложенной аппроксимации (1) были получены из совмещения аналитических кривых (1) с результатами численного расчета энергии U_p .

Полученная аппроксимация использовалась для вывода аналитических выражений для давления, изотермической сжимаемости и теплоемкости из соотношений термодинамики. С целью проверки пригодности предложенной для U_a аппроксимации были выполнены расчеты теплоемкости $C_V^a = (\partial U_a / \partial T)_V$, - в численном эксперименте и аналитически, из уравнения (1)

$$C_V \cong C_V^a = 1 + \frac{2\Gamma_c^* + (U_a - U_0 - T)\Gamma_c^* T^{-1} \exp(\varepsilon_f/T)}{\Gamma_c^* \{1 + \exp(\varepsilon_f/T)\}}. \quad (2)$$

Сравнение полученных результатов с численными расчетами показало, что полученные аппроксимации хорошо описывают термодинамические свойства рассмотренных неидеальных систем.