ТЕРМОДИНАМИКА ДЕБАЕВСКИХ СИСТЕМ В СЛАБО И УМЕРЕННО НЕИДЕАЛЬНЫХ РЕЖИМАХ

1,2С.А. Храпак, 1А.Г. Храпак

1Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия, khrapak@mail.ru
2Институт внеземной физики Общества Макса Планка, Гархинг, Германия,
 skhrapak@mpe.mpg.de

Для улучшения точности традиционной модели Дебая-Хюккеля при расчете термодинамических свойств неидеальной ОСР плазмы было предложено приближение «Debye-Hückel plus hole» (DHH). Этот термин обычно ассоциируется с работой Нордхольма [1], хотя близкие аргументы были использованы ранее Грязновым и Иосилевским [2]. Ниже мы применяем приближение DHH к модельным системам Юкавы. Основная идея приближения DHH состоит в том, что вблизи пробной частицы плотность частиц *n* должна зануляться, чтобы не стать отрицательной при линеаризации: *n* {0, *r* ≤ *h*; *n*0(1-*Qφ*/*T*), *r* > *h*}. Нейтрализующий фон описывается больцмановским распределением и может быть линеаризован: *nb**nb*0(1+*eφ*/*T*). Сшивая решение уравнения Пуассона для потенциала *φ* на границе дырки *r* = *h* и используя граничные условия, получаем уравнение для определения радиуса дырки

,

где *x* = *kbh*, *kb*= , *κ* = *akb*, *a* = (3/4π*n*0)1/3, Γ = *Q*2/*aT*, *Q* – заряд частицы.

Внутренняя энергия на одну частицу в единицах *Т* в приближении DHH равна

.

Это дает

.

В случае OCP (*κ* = 0) это выражение сводится к  и совпадает с выражениями, полученными в [1,2]. В режиме сильной неидеальности Г >> 1, DHH приближение приводит к правильной зависимости *u* ~ Γ, но со слишком малым коэффициентом пропорциональности (0.750 вместо 0.899).

Сопоставление с результатами MD моделирования *u* [3] при *κ* ≤ 1 показывают, что модель DHH достаточно точна вплоть до Γ/Γ*m* ~ 10−2 (Γ*m* – параметр неидеальности при котором имеет место кристаллизация). В этом режиме типичное отклонение DHH от результатов MD моделирования не превышает нескольких процентов. При больших Г, DHH систематически переоценивает внутреннюю энергию. Вблизи фазового перехода жидкость-твердое тело различие между результатами DHH и MD моделирования составляют ~ 15% при *κ* = 0, и уменьшаются до ~ 10% at *κ* = 1. При *κ* > 1 качественная картина сохраняется. Модель DHH обладает хорошей точностью вплоть до Γ/Γ*m* ~ 10-2. Здесь различие между результатами DHH и MD моделирования не превышает 1%. При больших Г, DHH также систематически переоценивает *u*. Вблизи перехода жидкость-твердое тело ошибка DHH составляет ~ 5% при *κ* = 2.0. С увеличением *κ*, *u* ~ −Γ*κ*/2 и точность модели DHH возрастает. Уже при *κ* = 5.0 результаты DHH и MD моделирования практически неразличимы.

Литература

1. S. Nordholm, Chem. Phys. Lett. **105**, 302 (1984).
2. V.K. Gryaznov and I.L. Iosilevskiy, Numerical methods in fluid mechanics **4**, 166 (1973); arXiv: 0903.4913, 2009.
3. S. Hamaguchi, R.T. Farouki, and D.H.E. Dubin, Phys. Rev. E **56**, 4671 (1997).