МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМ. Х.И. АМИРХАНОВА ДФИЦ РАН
ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ЧЕЛЯБИНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, КРИТИЧЕСКИЕ И НЕЛИНЕЙНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

СБОРНИК ТРУДОВ

международной конференции
15-20 сентября 2019 г., Махачкала

Конференция проводится при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ

Махачкала 2019

УДК 537.61
ББК 22.334
Ф-16

Ф-16 Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах. Сборник трудов международной конференции (15-20 сентября 2019 г., Махачкала). – Махачкала: АЛЕФ, 2019. – 458 с.

ISBN 978-5-00128-284-6

В настоящий сборник включены материалы, представленные на международную конференцию "Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах".

Конференция проводится Министерством науки и высшего образования РФ, Институтом физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, Дагестанским государственным университетом, Челябинским государственным университетом.

Материалы воспроизведены с авторских оригиналов, в связи с чем Оргкомитет конференции не несет ответственности за допущенные опечатки и стилистические погрешности.

ISBN 978-5-00128-284-6

Описание динамических свойств равновесной жидкости Юкава на основе самосогласованного подхода

И.И.Файрушин, А.В.Мокшин
Институт физики К(П)ФУ, Казань, Россия
e-mail: fairushin_ilnaz@mail.ru

Совокупность частиц взаимодействие, которых осуществляется через потенциал Юкавы, привлекает большой интерес исследователей ввиду широкой распространённости таких систем в природе и возможности их получения в лабораторных условиях [1].

Потенциал Юкавы задается следующим выражением

$$u(r) = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 r} e^{-r/\lambda_d}, \qquad (1)$$

где q – заряд частиц, ε_0 – электрическая постоянная, λ_d – Дебаевский радиус экранирования. Простая аналитическая форма выражения (1) делает Юкава-систему удобным инструментом не только для проведения численных экспериментов с использованием метода молекулярной динамики (МД), но и для апробации различных теоретических моделей, описывающих динамические коллективные свойства взаимодействующих частиц. Основными характеристиками, определяющими свойства данной системы, являются параметры неидеальности

$$\Gamma = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 k_B T a}$$

и экранировки

$$\kappa = \frac{a}{\lambda_d},$$

где k_B – постоянная Больцмана, T – температура, a – половина среднего расстояния между соседними частицами (радиус ячейки Вигнера-Зейтца). В зависимости от значений указанных параметров, система может находится в различных фазовых состояниях [2]. В настоящей работе рассматриваются набор значений этих параметров, который соответствует жидкому состоянию. При помощи метода МД в работе получены данные о координатах и скоростях 64 000 частиц, взаимодействующих через потенциал Юкавы. Начальное положение частиц задавалось случайным образом, временной шаг составлял 0,01 от обратной величины плазменной частоты ω_p. Концентрация частиц, их заряд и масса, а также температура системы и длина экранирования выбирались такими чтобы $\Gamma = 20$ и 100, а $\kappa = 1$ и 2.

Наиболее полным образом коллективные и структурные свойства неупорядоченных систем описываются так называемым динамическим структурным фактором (ДСФ). В экспериментах ДСФ измеряется при спектроскопии неупругого рассеяния нейтронов или рентгеновских лучей.

Если известны конфигурационные данные (координаты и скорости) системы частиц, ДСФ рассчитывается через Фурье-преобразование временной-корреляционной функции (ВКФ) флуктуации плотности числа частиц:

$$S(k,\omega)=\frac{S(k)}{2\pi}\int_0^{\infty}F(k,t)\exp(i\omega\cdot t)dt.$$

Существуют различные теоретические методы описания ДСФ, одним из них является т.н. самосогласованный подход. Детальное описание, которого изложено в работе [3]. Аналитическое соотношение для ДСФ в рамках этого подхода имеет следующий вид

$$S(k,\omega)=\frac{S(k)}{2\pi}\frac{\Delta_1^2(k)\Delta_2^2(k)\Delta_3^2(k)}{\Delta_4^2(k)-\Delta_3^2(k)}\frac{\left[4\Delta_4^2(k)-\omega^2\right]^{1/2}}{\omega^6+A_1(k)\omega^4+A_2(k)\omega^2+A_3(k)}, \tag{2}$$

где $\Delta_i^2(k)$ – частотно-релаксационные параметры различных порядков. Вспомогательные переменные $A_1(k)$, $A_2(k)$ и $A_3(k)$ – выражаются через $\Delta_i^2(k)$.

Согласно базовому определению частотно-релаксационные параметры могут быть вычислены с использованием данных моделирования МД [3]. Анализ k-зависимостей данных параметров позволил установить следующие приближенные соотношения, их связывающие

$$\Delta_3^2(k)=\frac{3}{2}\Delta_2^2(k)+\frac{2\omega_p^2}{\sqrt{\Gamma\kappa}},\quad \text{при}\quad 0<k\le 4k_m, \tag{3}$$

$$\Delta_4^2(k)=\frac{3}{2}\Delta_3^2(k),\quad \text{при}\quad 0<k\le 4k_m. \tag{4}$$

Здесь k_m – определяет положение первого максимума в статическом структурном факторе. Важным обстоятельством является то, что выражения (3) и (4) справедливы в широком диапазоне значений волнового числа и универсальны для разных величин исходных параметров системы Юкавы. Для расчетов $\Delta_1^2(k)$ и $\Delta_2^2(k)$ использованы их следующие микроскопические выражения

$$\Delta_1^2(k)=\frac{\omega_p^2(ka)^2}{3\Gamma S(k)},$$

$$\Delta_2^2(k)=\frac{\omega_p^2(3S(k)-1)(ka)^2}{3\Gamma S(k)}+\int\nabla_l^2u(\mathbf{r})[1-\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})]g(r)d^3\mathbf{r}.$$

ДСФ связан со спектром ВКФ продольного потока следующим выражением

$$C_L(k,\omega)=3\Gamma\left(\frac{\omega/\omega_p}{ka}\right)^2S(k,\omega).$$

Зависимость положений максимумов $C_L(k,\omega)$ от волнового числа определяет дисперсию акустических коллективных возбуждений, а соответствующее дисперсионное соотношение принимает вид:

$$\omega_L(k)=\pm\sqrt{B_+(k)+B_-(k)-\frac{A_1(k)}{6}}\,f(k), \qquad (5)$$

где $B_\pm(k)=\sqrt[3]{\frac{54A_3(k)-A_1^3(k)}{216}\pm\sqrt{\frac{(27A_3(k)-A_1^3(k))A_3(k)}{432}}}$, $f(k)=\frac{\theta(k-k_m)+3\theta(k_m-k)}{3}$.

На рис. 1 показаны, соответствующие разным значениям Γ и κ, дисперсионные кривые продольных коллективных возбуждений в жидкости Юкава. Видно, что выполняется хорошее согласие с предельными соотношениями, советующими гидродинамическому режиму и режиму свободной частицы. Так, в длинноволновом пределе, кривые имеют тангенс угла наклона, соответствующий скорости ионо-звуковых волн, а в пределе больших k, соответствующий наиболее вероятной скорости частицы.

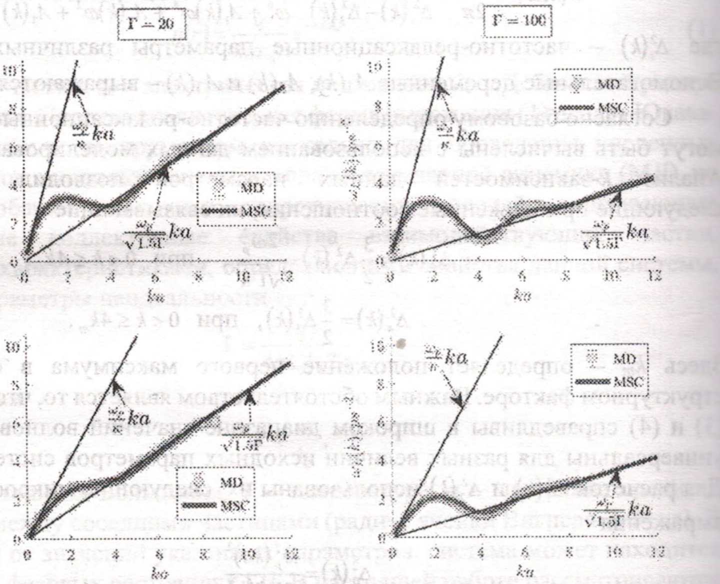

Рис. 1. Графики дисперсионных зависимостей, построенные с использованием данных моделирования (MD) и рассчитанных с помощью соотношения (5) (MSC).

Работа поддержана Российским научным фондом (проект № 19-12-00022).

[1] В.Е.Фортов, Г.Е.Морфилл (ред.). Комплексная и пылевая плазмы. Из лаборатории в космос, ФИЗМАТЛИТ, Москва (2012).

[2] S.Hamaguchi, R.T.Farouki, D.H.E.Dubin. Journal of chemical physics 105, 7641 (1996).

[3] A.V.Mokshin, B.N.Galimzyanov, J. Phys.: Condens. Matter 30, 085102 (2018).