ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1984, т. 25, № 2

УДК 536.75

УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМ ТВЕРДЫХ ДИСКОВ И СФЕР

И. П. Базаров, П. Н. Николаев

(кафедра квантовой статистики и теории поля)

Исследование уравнений состояния систем твердых дисков и сфер имеет важное значение в силу того, что они широко используются при описании уравнений состояния плотных газов и жидкостей в качестве нулевого приближения [1]. Кроме того, для них известны уравнения состояния, определенные на основе машинного эксперимента [2], поэтому исследование данных систем каким-либо методом позволяет определить эффективность этого метода.

В работе [3] исследовались уравнения состояния системы твердых стержней, дисков, сфер на основе предложенного нового метода определения свободной энергии. Для системы твердых стержней получен результат, совпадающий с точным решением, а для систем твердых дисков и сфер получено улучшение согласия теоретических и экспериментальных данных по сравнению со случаем использования вириального уравнения состояния. В [4] предложена модификация этого метода для двух- и трехмерных систем, позволяющая улучшить сходимость рядов. Уравнение для свободной энергии записывается в форме

$$F=F_0-\theta nN\ln q,\qquad F_0=-\theta N\ln(Q_0/N!)^{1/N}, \tag{1}$$

где Q_0 — статистический интеграл в нулевом приближении, N — число частиц в системе,

$$q=(Q/Q_0)^{1/(nN)}, \tag{2}$$

n равно показателю степени, соответствующему обращению q в ноль при стремлении объема системы к объему плотной упаковки. Для рассматриваемого здесь случая n совпадает с размерностью пространства.

В качестве нулевого выберем приближение самосогласованного поля, которое допускает два решения: $\rho=\mathrm{const}$ и ρ периодическое (ρ — одночастичная функция распределения). Для свободной энергии проведем кластерное разложение, которое для $\rho=\mathrm{const}$ имеет вид

$$F=F_0-\theta nN\ln(1-B_2/(nv)-\ldots),$$

где B_i — вириальные коэффициенты. Отсюда несложно определить уравнение состояния:

$$\frac{pv}{\theta}=1+\frac{B_2/v+\ldots}{1-B_2/(nv)+\ldots}.$$

Соответствующее разложение можно записать и для случая, когда ρ — периодическая функция [3].

Результаты расчетов приведены на рис. 1 и 2 (сплошные линии) для систем твердых дисков и сфер соответственно. Уравнение состояния однородной фазы найдено с учетом шести вириальных коэффициентов для системы твердых дисков и семи — для системы твердых сфер, а уравнение состояния упорядоченной фазы — с учетом корреляций [3, 5]. Данные метода молекулярной динамики изображены на рисунках пунктирными линиями [2]. Как видно, согласие расчетов с машинным экспериментом хорошее.

Таким образом, кластерное разложение, использующее в качестве нулевого приближение самосогласованного поля, позволяет описать

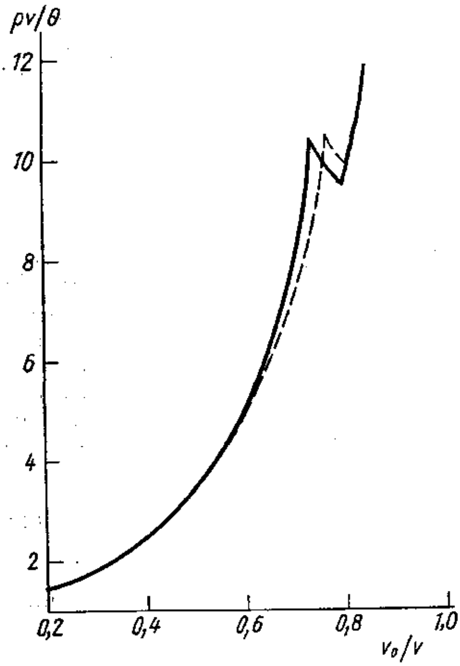

Рис. 1

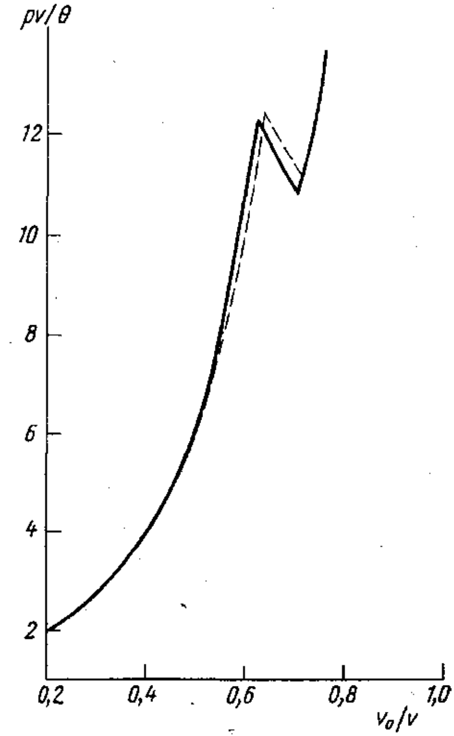

Рис. 2

фазовый переход в системе твердых дисков и сфер, а также указывает на отсутствие фазового перехода в системе твердых стержней [3].

В заключение отметим, что если n рассматривать как варьируемый параметр, то можно добиться хорошего согласия теории и машинного эксперимента при значительно меньшем числе используемых вириальных коэффициентов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1. М.: Мир, 1978. [2] Hoover W. G., Young D. A. J. Chem. Phys., 1968, **49**, N 8, p. 3688. [3] Базаров И. П., Николаев П. Н. Журн. физ. химии, 1983, **57**, № 7, с. 1609. [4] Базаров И. П., Николаев П. Н. Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон., 1983, **24**, № 6, с. 101. [5] Базаров И. П., Николаев П. Н. Корреляционная теория кристалла. М.: Изд-во МГУ, 1981.

Поступила в редакцию
12.09.83