

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕВЫРОЖДЕННОЙ ВОДОРОДНОЙ ПЛАЗМЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДИФИЦИРОВАННОГО ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА КЕЛЬБГА, УЧИТЫВАЮЩЕГО ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Г. С. Демьянов, А. С. Онегин, П. Р. Левашов

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),
Долгопрудный, Московская область, Россия

В данной работе представлены результаты квазиклассического моделирования термодинамических свойств водородной плазмы в условиях слабого вырождения и умеренной неидеальности. Основной акцент сделан на разработке метода, который корректно учитывает как дальнедействующий характер кулоновских взаимодействий, так и квантовые эффекты, включая принцип Паули и принцип неопределенности. Центральным элементом исследования является вывод псевдопотенциала Кельбга-УУЭ для двухкомпонентной кулоновской системы [1], основанного на усредненном по углу потенциале Эвальда (УУПЭ) [2]. Такой подход позволяет получить явное выражение для псевдопотенциала [1], учитывающего кулоновское дальнедействие методом Эвальда, а также соответствующую кулоновскую матрицу плотности. Это можно сделать благодаря простому аналитическому виду УУПЭ.

Для повышения точности описания электрон-протонных и электрон-электронных взаимодействий в условиях сильного взаимодействия в псевдопотенциал внесены температурные поправки на малых расстояниях с помощью улучшенного псевдопотенциала Кельбга [3]. Кроме того, введение эффективного размера частиц для электронов с одинаковой проекцией спина обеспечивает выполнение принципа Паули, предотвращая коллапс плазмы и образование нефизических кластеров [3] при температурах ниже характерной температуры образования молекул, 50 кК.

Разработанный метод реализован в программном пакете KelbgLIP [4], который позволяет рассчитывать псевдопотенциалы для всех типов взаимодействий в системе (электрон-электрон с различными проекциями спина, электрон-протон, протон-протон) и проводить квазиклассическое моделирование методом молекулярной динамики с использованием пакета LAMMPS. В рамках работы были вычислены функции энергии, давления и радиального распределения для невырожденной водородной плазмы в широком диапазоне температур (от 600 кК до 1 кК) при фиксированном параметре вырождения, равном 0,01. Показано образование атомов, молекул и других водородных комплексов, при этом их состав был проанализирован в зависимости от параметра неидеальности.

Полученные результаты согласуются с данными, полученными методом квантового Монте-Карло с использованием интегралов по траекториям [5]. При этом предложенный метод требует значительно меньших вычислительных ресурсов, что позволяет моделировать системы, состоящие из тысяч частиц, и рассчитывать термодинамический предел. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 24-19-00746).

Литература

1. **Demyanov, G. S.** Accounting for long-range interaction in the Kelbg pseudopotential [Text] / G. S. Demyanov, P. R. Levashov // *Contributions to Plasma Physics*. – 2022. – Vol. 62, No. 10. – P. e202200100. – doi: 10.1002/ctpp.202200100.
2. **Demyanov, G. S.** Systematic derivation of angular-averaged Ewald potential [Text] / G. S. Demyanov, P. R. Levashov // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. – 2022. – Vol. 55, No. 38. – P. 385202. – doi: 10.1088/1751-8121/ac870b.
3. **Filinov, A. V.** Temperature-dependent quantum pair potentials and their application to dense partially ionized hydrogen plasmas [Text] / A. V. Filinov, V. O. Golubnychiy, M. Bonitz, W. Ebeling, J. W. Dufty // *Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*. – 2004. – Vol. 70, No. 4. – P. 046411. – doi: 10.1103/PhysRevE.70.046411.

4. **Demyanov, G. S.** KelbgLIP: Program implementation of the high-temperature Kelbg density matrix for path integral and molecular dynamics simulations with long-range Coulomb interaction [Text] / G. S. Demyanov, P. R. Levashov // *Computer Physics Communications*. – 2024. – Vol. 305. – P. 109326. – doi: 10.1016/j.cpc.2024.109326.
 5. **Filinov, A. V.** Equation of state of partially ionized hydrogen and deuterium plasma revisited [Text] / A. V. Filinov, M. Bonitz // *Physical Review E*. – 2023. – Vol. 108, No. 5. – P. 055212. – doi: 10.1103/PhysRevE.108.055212.
-