

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ РАССМОТРЕНИЕ УСРЕДНЕННОГО ПО УГЛАМ ПОТЕНЦИАЛА ЭВАЛЬДА ДЛЯ РАСЧЕТА СВОЙСТВ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ПЛАЗМЫ С УЧЕТОМ ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ

*Демьянов Г.С.,^{*1,2} Левашов П.Р.^{1,2}*

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МФТИ, Долгопрудный, Россия

**demyanov.gs@phystech.edu*

Дальнодействующая природа кулоновского потенциала создает трудности при численном моделировании и теоретическом рассмотрении двухкомпонентной плазмы. Часто моделирование проводится в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Используя метод суммирования Эвальда, можно получить выражение для энергии такой системы как взаимодействие между частицами только в основной ячейке с короткодействующим потенциалом Эвальда.

Следуя подходу Якуба и Рончи [1], потенциал Эвальда может быть усреднен по направлениям для получения усредненного по углам потенциала Эвальда для расчета энергии неупорядоченных систем. Окончательное выражение потенциала было впервые представлено в оригинальной работе [1], а его подробный вывод и анализ представлены в нашей недавней работе [2].

С физической точки зрения, усредненный потенциал описывает взаимодействие двух сфер; каждая сфера содержит точечный заряд в центре и равномерно распределенный заряд той же величины, но противоположного знака. Радиус каждой сферы равен $r_m = (3/(4\pi))^{1/3}L$, где L — длина кубической ячейки. Усредненный потенциал учитывает дальнодействующее взаимодействие между частицами подобно оригинальному потенциалу Эвальда.

Благодаря своей простой форме, усредненный потенциал может быть использован для получения псевдопотенциалов, учитывающих квантовые эффекты, а также эффекты дальнодействия. Следуя Кельбгу [3], мы получили [4, 5] обобщенное выражение псевдопотенциала Кельбга в случае усредненного по углам потенциала Эвальда. В отличие от привычного псевдопотенциала Кельбга, он быстро распадается на больших расстояниях. Мы считаем, что полученный псевдопотенциал будет полезен в методах Монте-Карло с интегралами по траекториям.

-
1. E. Yakub, C. Ronchi // J. Chem. Phys. 2003, 119, 11556.
 2. G. S. Demyanov, P. R. Levashov // J. Phys. A Math. Theor. 2022, 55, 385202.
 3. G. Kelbg // Ann. Phys. 1963, 467, 219.

4. G. S. Demyanov and P. R. Levashov // Derivation of the Kelbg potential/functional, <https://arxiv.org/abs/2205.09885> (2022).
5. G. S. Demyanov and P. R. Levashov // Contrib. Plasma Phys. 2022, e202200100.