

# РЕАЛИЗАЦИЯ РАСЧЕТА ДАВЛЕНИЯ ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ ПЛАЗМЫ

*Онегин А.С.,<sup>\*1,2</sup> Демьянов Г.С.,<sup>1,2</sup> Levashov П.Р.<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>ОИВТ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>МФТИ, Долгопрудный, Россия

\**onegin.as@phystech.edu*

Электростатическая энергия бесконечной электрически нейтральной системы заряженных частиц представляет собой условно сходящийся ряд, сумма которого зависит от порядка суммирования. Эвальд предложил решение этой проблемы для систем с трансляционной симметрией. В результате выражение для энергии принимает вид суммы по всем частицам в ячейке с некоторым эффективным анизотропным потенциалом взаимодействия — потенциалом Эвальда. В 2022 г. [1] Г.С. Демьянов и П.Р. Левашов предложили теоретическое обоснование усредненного по углу потенциала Эвальда (УУЭП), впервые введенного Э. Якубом и К. Дж. Рончи [2, 3], и показали его эффективность при расчете энергии однокомпонентной плазмы (ОКП) для миллиона частиц [4].

В данной работе мы вычисляем давление для равновесной ОКП, полученной методом Монте-Карло [5], четырьмя способами. Первый метод заключается в дифференцировании статистической суммы по объему. Выражение производной получается аналитически масштабированием расчетной ячейки с некоторым параметром и последующим дифференцированием по этому параметру. Во втором методе применяется вириальная теорема к системе, частицы которой взаимодействуют по парному потенциалу. В данной работе мы проводим расчеты этими двумя методами для потенциала Эвальда и УУЭП и анализируем различия в результатах давления.

- 
1. Demyanov G. S. and Levashov P. R. J. Phys. A: Math. Theor. 55, 385202 (2022)
  2. Yakub E. and Ronchi C. J. Chem. Phys. 119, 11556 (2003)
  3. Yakub E. and Ronchi C. J. Low Temp. Phys. 139, 633 (2005)
  4. Demyanov G. S. and Levashov P. R. Phys. Rev. E, 106(1), 015204 (2022)
  5. Brush S. G., Sahlín H. L., Teller, E. J. Chem. Phys., 45(6), 2102-2118 (1966)