

# ПРОГРАММНЫЙ ПАКЕТ ДЛЯ РАСЧЕТА МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ КЕЛЬБГА С УЧЕТОМ КУЛОНОВСКОГО ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МОНТЕ–КАРЛО С ИНТЕГРАЛАМИ ПО ТРАЕКТОРИЯМ И КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

*Демьянов Г.С.,<sup>\*1,2</sup> Левашов П.Р.<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>ОИВТ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>МФТИ, Долгопрудный, Россия  
*\*demyanovgs@jiht.ru*

Программа KelbgLIP [1] представляет собой набор трех подпрограмм, необходимых для моделирования водородной плазмы с интегралами по траекториям методом Монте-Карло или молекулярной динамики. Она позволяет рассчитать кулоновскую матрицу плотности, псевдопотенциал Кельбга, а также потенциальную энергию и действие с учетом кулоновского дальнегодействия. Это дальнеедействие учитывается с помощью решения уравнения Блоха для усредненного по углам потенциала Эвальда [2,3].

Псевдопотенциал Кельбга для квазиклассической молекулярной динамики был также скорректирован на малых расстояниях с помощью улучшенного псевдопотенциала Кельбга [4]. Это улучшение позволяет моделировать невырожденную водородную плазму в широком диапазоне температур.

Итого, KelbgLIP позволяет рассчитывать диагональные и недиагональные элементы матрицы плотности, а также связанные с ними псевдопотенциалы, которые остаются конечными на малых расстояниях, предотвращая коллапс системы. Это делает возможным использование программы как в классических методах моделирования, таких как молекулярная динамика, так и в квантовых методах, например, методом Монте-Карло с интегралами по траекториям, в том числе с учетом обменных эффектов для фермионов. Программа поддерживает атомные единицы измерения.

Данная работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (грант № 23-1-5-119-1).

- 
1. Demyanov G. S., Levashov P. R. // Computer Physics Communications. – 2024. – Т. 305. – С. 109326.
  2. Demyanov G. S., Levashov P. R. // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. – 2022. – Т. 55. – №. 38. – С. 385202.
  3. Demyanov G. S., Levashov P. R. // Physical Review E. – 2022. – Т. 106. – №. 1. – С. 015204.
  4. Filinov A. V. et al. // Physical Review E – 2004. – Т. 70. – №. 4. – С. 046411.