

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОДОРОДНОЙ ПЛАЗМЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ УЛУЧШЕННОГО ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА КЕЛЬБГА В РАМКАХ КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

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

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

*onegin.as@phystech.edu

В этой работе мы представляем квазиклассическое молекулярное моделирование двухкомпонентной плазмы в режиме слабого вырождения и в широком диапазоне параметров неидеальности. Мы используем улучшенный псевдопотенциал Кельбга [1], который позволяет учесть квантовый принцип неопределенности и точное описание образования связанных состояний, а также принцип Паули, запрещающий электронам с одинаковым спином находиться в одном и том же состоянии. Мы также используем улучшенный псевдопотенциал Кельбга-ААЕР [2], который позволяет учитывать взаимодействие со всеми периодическими изображениями.

Мы сравниваем наши результаты с Path integral Monte-Carlo моделированием Филинова и Боница [3], исследуем устойчивость водородной плазмы, решая задачу образования кластеров при 50 кК [4], и изучаем зависимость равновесного давления (с учетом объемных эффектов [5]) и энергии от числа частиц. Полученные данные подтверждают эффективность псевдопотенциального описания системы с сильными дальнедействующими взаимодействиями. Данная работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (грант № 23-1-5-119-1).

1. A. V. Filinov, V. O. Golubnychiy, M. Bonitz, W. Ebeling, and J. W. Dufty. Temperature- dependent quantum pair potentials and their application to dense partially ionized hydrogen plasmas. Phys. Rev. E, 70:046411, Oct 2004.
2. GS Demyanov and PR Levashov. KelbgLIP: Program implementation of the high- temperature kelbg density matrix for path integral and molecular dynamics simulations with long-range coulomb interaction. Computer Physics Communications, 305:109326, 2024.
3. AV Filinov and Michael Bonitz. Equation of state of partially ionized hydrogen and deu- terium plasma revisited. Physical Review E, 108(5):055212, 2023.
4. GS Demyanov and PR Levashov. Stability of a nondegenerate two- component weakly coupled plasma arXiv:2309.15208, 2023
5. AS Onegin, GS Demyanov, and PR Levashov. Pressure of coulomb systems

with volume- dependent long-range potentials. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 57(20):205002, 2024.