

## Расчет равновесных свойств неидеальных кулоновских систем методом молекулярной динамики

*Я.С. Лавриненко<sup>1,2</sup>, И.М. Морозов<sup>1,2</sup>, И.А. Валугев<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур Российской академии наук

Теоретическое изучение сильно неидеальных систем заряженных частиц, таких как электрон-ионная неидеальная плазма, ионные жидкости, пылевая плазма, и т.п., часто основывается на атомистическом моделировании методами классической молекулярной динамики (МД) или Монте-Карло (МК) [1-4]. Отличительной чертой моделирования подобных систем методами МД и МК является использование дальнедействующего кулоновского потенциала, который предъявляет высокие требования к вычислительным системам в силу медленного убывания потенциала на больших расстояниях. В общем случае, область применения метода МД ограничена классическими системами, но ее можно расширить путем замены кулоновского потенциала эффективными квантовыми потенциалами. Примерами таких псевдопотенциалов являются потенциалы, предложенные в работах [5-7]. Альтернативой применению псевдопотенциалов может стать применение метода молекулярной динамики с волновыми пакетами (МДВП) [8].

В данной работе рассмотрен метод классической молекулярной динамики в применении к задачам моделирования кластерной наноплазмы и расчета уравнения состояния водородной плазмы. Особое внимание уделено электрон-электронному потенциалу взаимодействия и его влиянию на равновесные свойства рассматриваемых систем.

Для моделирования кластерной наноплазмы использовался псевдопотенциал совпадающий с кулоновским на расстояниях  $r \geq r_0$ , и задаваемый функцией  $\frac{1}{r} \operatorname{erf}\left(-\frac{r}{\lambda}\right)$  на расстояниях меньше  $r_0$ . В результате расчетов были получены значения минимального заряда кластера и спектры электронных колебаний для кластеров различного радиуса. Рассмотрены системы, в которых ионная подсистема кластера представлен в виде однородно заряженного шара. Показано, что замена точечных ионов на однородное распределение заряда не влияет на зависимость минимального заряда кластера от его размера, полученную в [9], но оказывает влияние на спектр электронных колебаний.

Проведены расчеты термодинамических параметров и проводимости неидеальной водородной плазмы при температурах  $T = 2 \cdot 10^4 - 5 \cdot 10^5 \text{ K}$  и параметрах неидеальности от 0.01 до 6. Проведено сравнение полной энергии и давления водородной плазмы рассчитанных с методом классической МД и методом РМС. Определены диапазоны применимости метода классической МД с использованием псевдопотенциалов, в которых результаты МД расчета согласуются с результатами, полученными методом РМС.

### Литература

1. Hansen J. P., McDonald I. R. Microscopic simulation of a strongly coupled hydrogen plasma //Physical Review A. 1981. Т. 23. N 4. С. 2041.
2. Pschiwul T., Zwicknagel G. Numerical simulation of the dynamic structure factor of a two-component model plasma //Journal of Physics A: Mathematical and General. 2003. Т. 36. N 22. С. 6251.
3. Morozov I. V., Norman G. E. Collisions and Langmuir waves in nonideal plasmas //Journal of Experimental and Theoretical Physics. 2005. Т. 100. N 2. С. 370-384.
4. Benedict L. X. et al. Molecular dynamics simulations of electron-ion temperature equilibration in an S f 6 plasma //Physical review letters. 2009. Т. 102. N 20. С. 205004.
5. Зеленер Б.В., Норман Г.Э., Филинов В.С. К статистической теории неидеальной плазмы // ТВТ. 1972. Т. 10. № 6. С. 1043.
6. Deutsch C. Nodal expansion in a real matter plasma //Physics letters A. 1977. Т. 60. N 4. С. 317-318.
7. Filinov A. V., Bonitz M., Ebeling W. Improved Kelbg potential for correlated Coulomb systems //Journal of Physics A: Mathematical and General. 2003. Т. 36. N 22. С. 5957.
8. Klakow D., Toepffer C., Reinhard P. G. Semiclassical molecular dynamics for strongly coupled Coulomb systems //The Journal of chemical physics. 1994. Т. 101. N 12. С. 10766-10774.
9. Reinholz H. et al. Size Dependence of Minimum Charge of Excited Nano-Plasmas //Contributions to Plasma Physics. 2013. Т. 53. N 4-5. С. 263-269.