

Демьянов Георгий Сергеевич

**Эффективный учет дальнего действия в
моделировании классических и квантовых
кулоновских систем с помощью усредненного по
углам потенциала Эвальда**

1.3.9 – физика плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в *Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Объединённый институт высоких температур РАН (ОИВТ РАН)*.

Научный руководитель: **Левашов Павел Ремирович**
д.ф.-м.н., заместитель директора ОИВТ РАН по научной работе

Официальные оппоненты: **Потехин Александр Юрьевич**
д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН

Петров Юрий Васильевич
д.ф.-м.н., профессор, старший научный сотрудник института теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН

Ведущая организация: Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Защита состоится «_____» _____ 2025 г. в _____ часов на заседании диссертационного совета 24.1.193.01 при *ФГБУН ОИВТ РАН*, расположенном по адресу: 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, экспо-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте *ФГБУН ОИВТ РАН*.

Автореферат разослан «_____» _____ 2025 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
к.ф.-м.н.,

А. В. Тимофеев

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Кулоновские системы являются основой наших представлений об окружающем мире на уровне атомных ядер и электронов. Методы моделирования кулоновских систем широко применяются для расчетов теплофизических свойств веществ, разработки новых материалов, исследования процессов в электролитах и сложных биологических системах, интерпретации экспериментальных данных и многих других задач. Вследствие ограниченности компьютерных мощностей на первый план выходит проблема разработки эффективных алгоритмов расчета кулоновских систем и обработки результатов численных экспериментов с помощью квантово-статистических подходов.

Природа дальнего действия кулоновского взаимодействия в веществе и его сингулярное поведение на малых расстояниях вызывают ряд трудностей при построении методов моделирования кулоновских систем. Несмотря на активное развитие в последние 70 лет методов численного эксперимента, существует ряд нерешенных до сих пор проблем. Формально проблема кулоновского дальнего действия решается с помощью подхода Эвальда, в котором энергия системы представляется в виде суммы бесконечных рядов по координатам частиц. Особая сложность возникает при рассмотрении двухкомпонентных кулоновских систем вследствие коллапса таких систем при описании с помощью классической механики. Эти факторы ограничивают число частиц несколькими десятками тысяч даже для модельных систем, таких как однокомпонентная плазма (ОКП). В случае же двухкомпонентных систем в настоящее время не существует строго обоснованных подходов, учитывающих одновременно дальнее действие и квантовые эффекты. Все это влияет на точность получаемых уравнений состояния кулоновских систем, которые впоследствии используется, например, при рассмотрении процессов в астрофизических объектах.

При расчете термодинамических свойств в моделировании проявляется их зависимость от числа частиц, тогда как основной интерес представляют свойства в термодинамическом пределе, то есть предел термодинамических функций при стремлении числа частиц и объема к бесконечности при фиксированной концентрации (или плотности). Вследствие трудностей учета кулоновского дальнего действия и отсутствия характерной длины взаимодействия, достижение высокой производительности с помощью усечения на некотором расстоянии потенциала невозможно, что является стандартной практикой при использовании короткодействующих потенциалов (например, Леннарда–Джонса или мягких сфер). Из-за этого в моделировании кулоновских систем зачастую используется небольшое число частиц в сравнении с упомянутыми потенциалами, особенно при сильном вырождении. Поэтому эффективность расчета кулоновских взаимодействий для достижения термодинамического предела является еще одной актуальной проблемой.

Цель диссертационной работы состоит в разработке эффективных методов моделирования, учитывающих дальнее действие в классических и квантовых кулоновских системах, с помощью усреднения потенциала Эвальда по углам, а также программная реализация этих методов и расчет с их помощью энергии, давления

и структурных свойств однокомпонентной и невырожденной водородной плазмы.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. Был аналитически выведен усредненный по углам потенциал Эвальда (УУ-ПЭ) для одно- и двухкомпонентных кулоновских систем, а также получены соответствующие формулы для потенциальной энергии. Кроме того, выведены выражения для потенциальной энергии ОКП с усеченным кулоновским потенциалом (без дальногодействия), а также поправки к вириальному давлению для потенциалов, зависящих от объема, — как в случае обычного, так и УУПЭ.

2. Разработан и отлажен параллельный код для моделирования методом Монте–Карло (МК) ОКП с различными типами потенциалов взаимодействия, позволяющий вычислять среднее значение потенциальной энергии и радиальные функции распределения.

3. Проведено моделирование ОКП методом МК, позволившее определить ее термодинамический предел, получить уравнение состояния в табличном и аппроксимированном виде в диапазоне $0.01 \leq \Gamma \leq 170$, а также показать преимущества учета дальногодействия при моделировании.

4. Получена кулоновская высокотемпературная матрица плотности с учетом дальногодействия, а также связанный с ней псевдопотенциал для невырожденной водородной плазмы.

5. Реализован и протестирован программный код для расчета кулоновской матрицы плотности с учетом дальногодействия, а также действия и энергии водородной плазмы с использованием интегралов по траекториям. Получены псевдопотенциалы взаимодействия между всеми частицами водородной плазмы с учетом температурных и дальногодействующих эффектов.

6. Выполнено моделирование невырожденной слабонеидеальной водородной плазмы методами МК, включая метод интегралов по траекториям. Оценена вероятность образования связанных состояний и найдено значение энергии в термодинамическом пределе при $\Gamma = 0.01$ для верификации метода расчета.

7. Предложено решение проблемы нефизической кластеризации водородной плазмы при температурах ниже 50 кК, заключающееся в учете конечного размера электронов при взаимодействии между электронами с одинаковой проекцией спина. Это позволяет приближенно учесть принцип Паули и избежать коллапса системы.

8. Проведено моделирование невырожденной водородной плазмы при $\chi = 0.01$ в диапазоне параметра неидеальности $0.1 \leq \Gamma \leq 3$. Получены зависимости радиальных функций распределения, степени ионизации и состава плазмы от параметра Γ , а также построено уравнение состояния в термодинамическом пределе в табличном виде.

Научная новизна работы состоит в следующем:

1. Впервые представлен математически обоснованный вывод УУПЭ и соответствующих выражений для потенциальной энергии в случае одно- и двухкомпонентной плазмы.

2. Впервые потенциальная энергия ОКП выражена через усеченный кулоновский потенциал с периодическими граничными условиями (без учета дальногодей-

ствия).

3. Впервые произведено моделирование МК ОКП с помощью УУПЭ с использованием до миллиона частиц и получено согласие термодинамического предела энергии с аналитическим результатом кластерного разложения при слабом взаимодействии ($\Gamma = 0.1$) с точностью до четырех значащих цифр.

4. Впервые исследовано влияние дальнего действия на сходимость по числу частиц энергии ОКП.

5. Впервые аналитически получена высокотемпературная кулоновская матрица плотности и соответствующий квантовый псевдопотенциал Кельбга с учетом дальнего действия, а также предложен метод суммирования взаимодействий с интегралами по траекториям.

6. Впервые приближенно решена проблема образования нефизических кластеров водородной плазмы, нарушающих принцип Паули, в квазиклассическом моделировании с улучшенным псевдопотенциалом Кельбга.

7. Впервые рассчитано уравнение состояния невырожденной водородной плазмы с полученным псевдопотенциалом с учетом кулоновского дальнего действия.

Научная и практическая значимость

1. Предложенная в работе методика расчета с помощью УУПЭ повышает эффективность расчетов межчастичных кулоновских взаимодействий на два порядка по сравнению с использованием обычного потенциала Эвальда.

2. Полученное в работе уравнение состояния ОКП может быть использовано для астрофизических приложений.

3. Полученная в работе матрица плотности и псевдопотенциал, а также метод суммирования взаимодействий с интегралами по траекториям вместе с их программной реализацией могут быть напрямую использованы в моделировании или встроены в программные коды других методов, в том числе с учетом вырождения, для эффективного учета дальнего действия.

4. Решение проблемы кластеризации в водородной плазме может служить преодолением низкотемпературного барьера квазиклассического моделирования невырожденных двухкомпонентных систем при использовании точной матрицы плотности.

5. В работе был рассмотрен случай невырожденной водородной плазмы при параметре неидеальности порядка единицы, рассчитаны ее энергия и давление, а также радиальные функции распределения. Эти данные могут быть полезны при дальнейшем уточнении уравнения состояния водорода в термодинамическом пределе.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

1. УУПЭ, выраженный в аналитической форме для одно- и двухкомпонентной плазмы, с демонстрацией повышения эффективности численных расчетов и улучшения сходимости энергии по числу частиц в области сильного взаимодействия в случае ОКП.

2. Формулы для потенциальной энергии и давления классических одно- и двухкомпонентных кулоновских систем, учитывающие дальнее действие через УУПЭ, и для ОКП без дальнего действия, включая поправки к вириальному дав-

лению для потенциала Эвальда и УУПЭ.

3. Табличное и аналитическое уравнение состояния флюида ОКП в зависимости от параметра неидеальности, полученное в термодинамическом пределе из моделирования с использованием миллиона частиц.

4. Кулоновская высокотемпературная матрица плотности с учетом дальнего действия, связанный с ней псевдопотенциал для невырожденной водородной плазмы и их программная реализация.

5. Табличное уравнение состояния невырожденной сильно взаимодействующей водородной плазмы, зависимости степени ионизации, состава и радиальных функций распределения от параметра неидеальности при параметре вырождения 0.01, а также решение проблемы кластеризации в квазиклассическом моделировании с улучшенным псевдопотенциалом Кельбга, в том числе с учетом дальнего действия.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на Научно-координационной Сессии «Исследования неидеальной плазмы» в 2022 и 2024 годах (Россия, Москва), XXXVIII Fortov International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Россия, Кабардино-Балкария, 2023), 65-ой Всероссийской научной конференции МФТИ (Россия, Москва, 2023), Забабахинских Научных Чтениях в 2023 и 2025 годах (Россия, Снежинск), XXXIX Fortov International Conference on Equations of State for Matter (Россия, Кабардино-Балкария, 2023), Школе-конференции по теоретической физике конденсированного состояния и неравновесных процессов (Россия, Саров, 2024), 66-ой Всероссийской научной конференции МФТИ (Россия, Москва, 2024), семинаре Теоретического отдела им. Л.М. Бибермана ОИВТ РАН в 2022, 2023 и 2025 годах (Россия, Москва), Конкурсе научных работ студентов и молодых ученых ОИВТ РАН (Россия, Москва, 2023), семинаре кафедры теоретической физики МФТИ (Россия, Долгопрудный, 2023), II Всероссийской Школе НЦФМ по газодинамике и физике взрыва (Россия, Саров, 2025), 67-ой Всероссийской научной конференции МФТИ (Россия, Москва, 2025).

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 24 печатных работах, из них 9 статей в рецензируемых журналах [1—9], 3 препринта [10—12] и 11 тезисов докладов.

Личный вклад автора. Диссертация написана автором лично. Положения, выносимые на защиту, сформулированы лично автором. Выводы УУПЭ и потенциальной энергии в случае одно- и двухкомпонентной плазмы проделаны лично автором. Выводы высокотемпературной матрицы плотности, соответствующих недиагонального и диагонального псевдопотенциалов с учетом дальнего действия проделаны лично автором. Программная реализация метода МК, в том числе с интегралами по траекториям, для моделирования одно- и двухкомпонентной плазмы с помощью различных потенциалов и псевдопотенциалов взаимодействия реализована и протестирована лично автором. Решение проблемы образования некорректных соединений при квазиклассическом моделировании низкотемпературной водородной плазмы с улучшенным псевдопотенциалом Кельбга, а также нарушения принципа Паули предложено и реализовано лично автором. Програм-

ма KelbgLIP, вместе с документацией для расчетов свойств водородной плазмы и псевдопотенциалов взаимодействия, реализована, представлена в открытом доступе и протестирована лично автором. Расчеты, представленные в диссертации, произведены автором лично. Публикация полученных результатов осуществлялась совместно с соавторами, при этом вклад диссертанта был определяющим.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из предисловия, списка сокращений и обозначений, введения, 5 глав, заключения, 1 приложения и списка литературы. Общий объем диссертации 204 страницы, включая 35 рисунков и 17 таблиц. Список литературы включает 214 наименований на 24 страницах.

Содержание работы

Работа состоит из пяти глав. Первые две главы посвящены теоретическому описанию рассматриваемых систем, а именно классических кулоновских систем с акцентом на ОКП, а также квантовым невырожденным системам с акцентом на невырожденную водородную плазму. В третьей главе рассматриваются численные методы моделирования, алгоритмы расчета взаимодействий, а также различных термодинамических величин. Последние две главы посвящены результатам моделирования ОКП и невырожденной водородной плазмы. Вместо отдельной традиционной главы с общим обзором литературы, в начале каждой главы представлен обзор работ, относящихся непосредственно к ее теме.

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе исследуются термодинамические свойства классических электронейтральных кулоновских систем; вводятся параметры плазмы: неидеальности $\Gamma = (Ze)^2/(r_a kT)$ и вырождения $\chi = n_e \Lambda^3$, где Z — зарядовое число, $\beta = (k_B T)^{-1}$ — обратная температура, $r_a = (4\pi N_e/3)^{-1/3} L$ — радиус ионной сферы (или «среднее» расстояние между электронами), $n_e = N_e/V$ — концентрация электронов, $\Lambda = (2\pi \hbar^2 \beta / m_e)^{1/2}$ — тепловая длина волны де Бройля электронов, $V = L^3$ — объем кубической ячейки, N_e — число электронов, $e > 0$ — заряд электрона. Рассматривается задача вычисления потенциальной энергии системы из N точечных зарядов q_i (двухкомпонентная система), а также однокомпонентной системы с нейтрализующим фоном; координаты всех частиц обозначены $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$. При наложении периодических граничных условий (ПГУ) потенциальная энергия является условно сходящимся рядом. Для его суммирования применяется метод Эвальда, выводятся формулы для энергии и потенциала Эвальда, обсуждается проблема дипольного слагаемого и способы ее устранения. Рассматривается также правило ближайшего изображения для расчета межчастичных взаимодействий при ПГУ.

Далее впервые в данной работе выводится энергия ОКП в случае усеченного кулоновского потенциала. В результате, получены выражения потенциальной

энергии для кубической:

$$U_{\text{ОСР}}^{\text{C}, \text{C}}(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{(Ze)^2}{r_{ij}} - \frac{(Ze)^2 N^2}{2L} C_C, \quad (1)$$

и сферической, $\mathcal{S}(\mathbf{r}_i)$:

$$U_{\text{ОСР}}^{\text{C}, \mathcal{S}}(\mathbf{R}) = \frac{(Ze)^2}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j \in \mathcal{S}(\mathbf{r}_i) \\ i \neq j}} \left[\frac{1}{r_{ij}} - \frac{1}{r_m} \right] + \frac{(Ze)^2 N(N-1)}{2r_m} - \frac{(Ze)^2 N^2}{2L} C_S, \quad (2)$$

областей, по которым производится суммирование взаимодействий; здесь $r_m \approx 0.62L$, а константы C_C и C_S равны $\ln(26 + 15\sqrt{3}) - \pi/2$ и $2\pi(3/(4\pi))^{2/3}$, соответственно. Эти формулы позволяют проанализировать роль дальнего действия.

Центральным результатом работы является вывод УУПЭ:

$$\tilde{\varphi}(r) = \begin{cases} \frac{1}{r} \left[1 + \frac{1}{2} (r/r_m) ((r/r_m)^2 - 3) \right], & r \leq r_m \\ 0, & r > r_m, \end{cases} \quad (3)$$

который сохраняет свойства потенциала Эвальда при значительно более простом аналитическом виде. Для ОКП корректное выражение для энергии:

$$U_{\text{ОСР}}^{\text{a}}(\mathbf{R}) = -\frac{3(Ze)^2}{20r_m} N(N+5) + \frac{(Ze)^2}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j \in \mathcal{S}(\mathbf{r}_i) \\ i \neq j}} \tilde{\varphi}(r_{ij}) \quad (4)$$

было получено впервые в данной работе. На рис. 1 показано сравнение потенциала Эвальда по различным направлениям и УУПЭ.

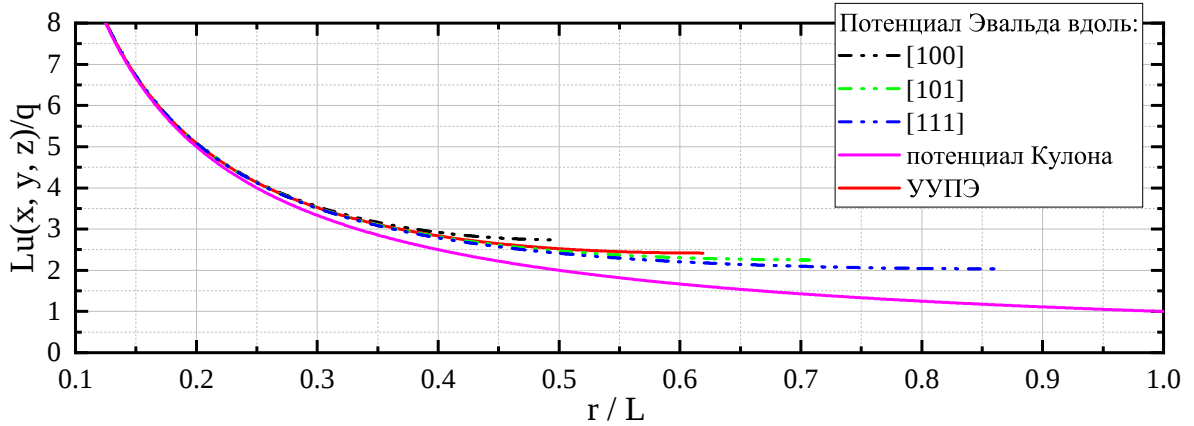


Рис. 1: Потенциал взаимодействия двух частиц с зарядами $q_1 = -q_2 = -q < 0$.

Далее выводятся выражения для термодинамических функций ОКП в каноническом ансамбле. Особое внимание уделено давлению: термодинамическое и вириальное определения эквивалентны лишь для чисто кулоновского потенциала. В случае потенциала Эвальда или УУПЭ, потенциальная энергия зависит от объема, $U = U(\mathbf{R}, V)$, вследствие чего возникает дополнительный вклад в давление:

$$P_W^{\text{corr}} = P_W - \frac{1}{3V} \left\langle L \left(\frac{\partial U}{\partial L} \right)_{T, \mathbf{r}_i} \right\rangle, \quad (5)$$

что при подстановке потенциала Эвальда и УУПЭ приводит к известной формуле:

$$\beta P = N/V + \frac{\langle \beta U(\mathbf{R}) \rangle}{3V}. \quad (6)$$

Таким образом, для построения УРС ОКП достаточно зависимости $\langle \beta U(\mathbf{R}) \rangle(\Gamma)$.

В конце главы рассмотрен предел Дебая–Хюккеля, $\Gamma \ll 1$, для энергии и радиальной функции распределения (РФР) ОКП.

Результаты первой главы опубликованы в рецензируемых изданиях [1; 2; 5; 6; 8; 9] и сборниках тезисов.

Во второй главе рассматриваются термодинамические свойства двухкомпонентных систем, для описания которых необходимо использовать матрицу плотности. Обсуждаются псевдопотенциалы водородной плазмы; в частности, получаемые из расчета суммы Слейтера. Решение уравнения Блоха в первом порядке теории возмущений для кулоновского потенциала приводит к псевдопотенциалу Кельбга, $\Phi_0(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}'_{ij}; \beta)$, широко применяемому благодаря строгому выводу. В случае УУПЭ, то есть с учетом дальнего действия, возникает вклад $\Phi_1(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}'_{ij}; r_m, \beta)$. В результате, впервые в данной работе был получен Кельбг–УУЭ псевдопотенциал:

$$\Phi(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}'_{ij}; r_m, \beta) = \Phi_0(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}'_{ij}; \beta) + \Phi_1(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}'_{ij}; r_m, \beta), \quad (7)$$

где

$$\Phi_1(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}'_{ij}; r_m, \beta) = \frac{1}{\pi} \int_0^1 \frac{d\alpha}{d_{ij}(\alpha)} \times I(d_{ij}(\alpha)/\lambda_{ij}, r_m/\lambda_{ij}, \alpha), \quad (8)$$

$$I(x_{ij}(\alpha), x_m, \alpha) = \frac{1}{4x_m^3} \left[2\sqrt{\pi} \sqrt{(1-\alpha)\alpha} (f_1(x_{ij}(\alpha)) - f_1(-x_{ij}(\alpha))) + f_2(x_{ij}(\alpha)) - f_2(-x_{ij}(\alpha)) \right], \quad (9)$$

$$f_1(x_{ij}(\alpha)) \equiv [4(1-\alpha)\alpha - (2x_m - x_{ij}(\alpha))(x_m + x_{ij}(\alpha))] \exp\left(-\frac{(x_m + x_{ij}(\alpha))^2}{4(1-\alpha)\alpha}\right), \quad (10)$$

$$f_2(x_{ij}(\alpha)) \equiv \pi \left[-3x_{ij}(\alpha) (2(\alpha-1)\alpha + x_m^2) - 2x_m^3 + x_{ij}^3(\alpha) \right] \operatorname{erf}\left(\frac{x_m + x_{ij}(\alpha)}{2\sqrt{(1-\alpha)\alpha}}\right), \quad (11)$$

где $\lambda_{ij} = \sqrt{\hbar^2 \beta / (2\mu_{ij})}$ — приведенная тепловая длина волны де Бройля, μ_{ij} — приведенная масса. В диагональном случае

$$\Phi(r; r_m, \beta) = \Phi_0(r; \beta) + \Phi_1(r; r_m, \beta), \quad (12)$$

где

$$\Phi_1(r; r_m, \beta) = \frac{4}{r\pi} \left[I_{\text{all}}(r/\lambda, r_m/\lambda) - I_{\text{all}}(-r/\lambda, r_m/\lambda) - \frac{r}{4\lambda} \pi^{3/2} \right], \quad (13)$$

$$I_{\text{all}}(x, x_m) = I_{\text{exp}}(x, x_m) + I_{\text{erf}}(x, x_m) + I_{\text{mod}}(x, x_m), \quad (14)$$

$$I_{\text{exp}}(x, x_m) = \frac{\pi e^{-(x_m+x)^2} (x_m+x)}{128x_m^3 |x_m+x|} (2x^2 x_m - 2x^3 + 10xx_m^2 - 5x + 6x_m^3 + 3x_m), \quad (15)$$

$$I_{\text{erf}}(x, x_m) = \frac{\pi^{3/2}}{256x_m^3} \operatorname{erf}(|x_m+x|) \left(4(x_m+x) \left((x^2+3)x_m - x(x^2+3) + 5xx_m^2 + 3x_m^3 \right) - 3 \right), \quad (16)$$

$$I_{\text{mod}}(x, x_m) = \frac{\pi |x_m+x|}{16x_m^3 (x_m+x)} (x^3 - 3xx_m^2 + x - 2x_m^3). \quad (17)$$

Преимущество Кельбг–УУЭ псевдопотенциала заключается в его экспоненциальном затухании при $r > r_m$ (рис. 2), что отражает учет кулоновского дальнего действия.

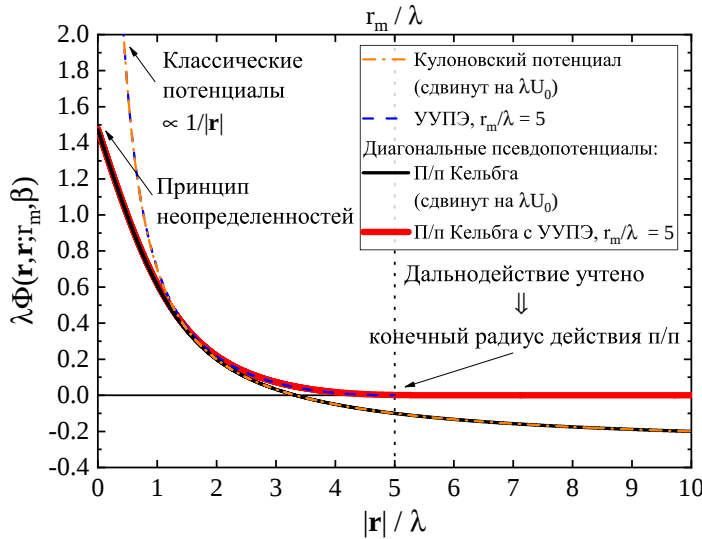


Рис. 2: Потенциалы и псевдопотенциалы взаимодействия. При $r \rightarrow 0$ учет принципа неопределенности устраняет расхожимость. При $r \gg \lambda$ квантовые эффекты исчезают, и кулоновский потенциал совпадает с псевдопотенциалами Кельбга и Кельбга–УУЭ. Учет дальнодействия ограничивает область взаимодействия радиусом r_m .

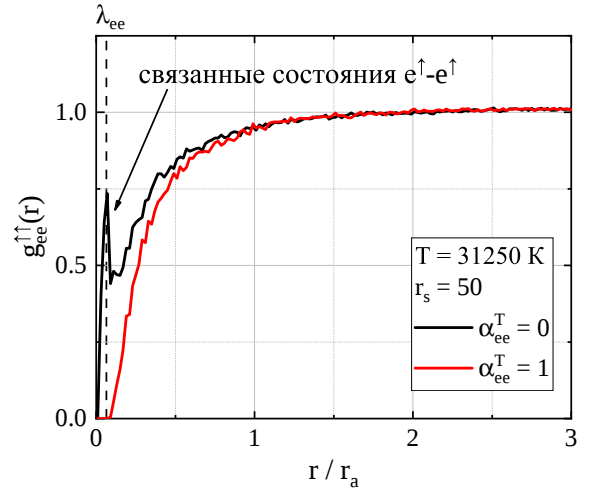


Рис. 3: Некорректные связанные состояния электронов с одинаковым спином при $T < 52$ К: без модификации (черная кривая) и после введения параметра $\alpha_{ee}^T = 1$ в (18) (красная кривая).

Полученная матрица плотности позволяет перейти к представлению с интегралами по траекториям и вывести выражения для энергии и действия, которые могут быть использованы в моделировании МК. Для невырожденных систем расчет можно упростить; для корректного описания низкотемпературного поведения системы в случае водородной плазмы используется улучшенный псевдопотенциал Кельбга, предложенным А. В. Филиновым с соавторами. Для учета обмена электронов используется симметризованная (синглетное состояние) и антисимметризованная (триплетное состояние) двухчастичная матрица плотности, при этом недиагональный псевдопотенциал аппроксимируется диагональными вкладами. Такое приближение может приводить к появлению некорректных связанных состояний при $T < 52$ К (см. рис. 3, а также упомянутую выше работу А. В. Филинова с соавторами). Для исправления такого поведения в данной работе вводится модификация силы:

$$\mathbf{f}_{ee}^T(\mathbf{r}; r_m, \beta) \rightarrow -e^2 \frac{r^2}{(r - \alpha_{ee}^T \lambda_{ee})^2} \nabla \Phi_{ee}^I(\mathbf{r}, \mathbf{r}; r_m, \beta) + \frac{1}{\beta} \nabla \ln \left(1 - \exp \left[-\frac{r^2}{\lambda_{ee}^2} \right] \right), \quad (18)$$

где α_{ee}^T усиливает кулоновское отталкивание на масштабе λ_{ee} между электронами с одинаковой проекцией спина, что, таким образом, форсирует выполнение принципа Паули и стабилизирует плазму (рис. 3). В завершение главы приводятся формулы для расчета давления и энергии с учетом и без учета дальнодействия. Реализация выполнена автором данной работы в программе KelbgLIP (Kelbg-matrix with Long Interactions Package).

Результаты второй главы опубликованы в рецензируемых изданиях [3; 4; 7], препринте [11] и сборниках тезисов.

В третьей главе описаны методы моделирования ОКП и водородной плазмы

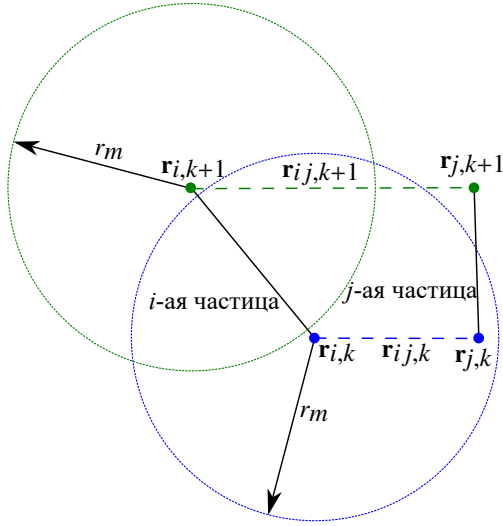


Рис. 4: Метод первого слоя: взаимодействие учитывается только для k -ых бусин.

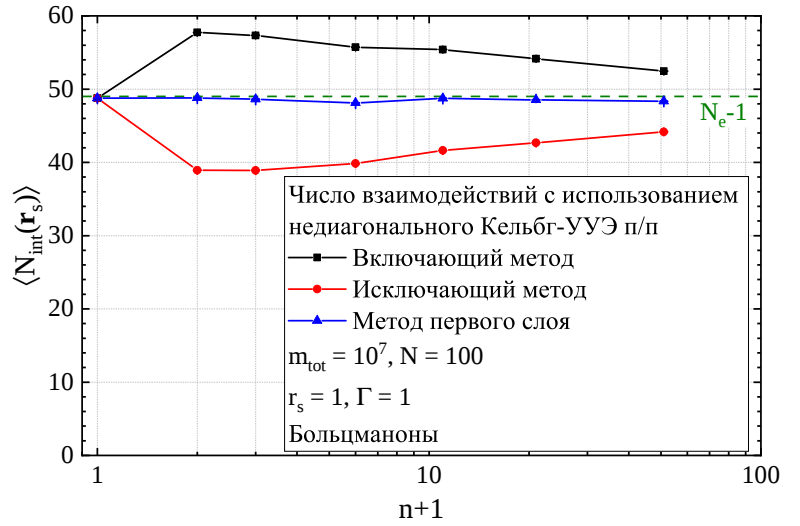


Рис. 5: Среднее число взаимодействий для трех методов раскрытия неопределенности.

с помощью МК и МД. Для ОКП используется классический метод МК. Особое внимание уделено вычислению энергии с УУПЭ, так как радиус взаимодействия r_m превышает половину длины ячейки. Для водорода применяется метод МК с интегралами по траекториям (МКИТ), где при суммировании по шару возникает неопределенность взаимодействия «бусин» $\mathbf{r}_{i,k}$. Рассмотрены три метода ее устранения: включающий, исключающий и метод первого слоя (рис. 4). Последний дает среднее число взаимодействий, слабо зависящее от числа разбиений (рис. 5), и используется в расчетах. Моделирование МД невырожденной водородной плазмы производится с помощью программного комплекса LAMMPS в каноническом ансамбле с термостатом Нозе–Гувера.

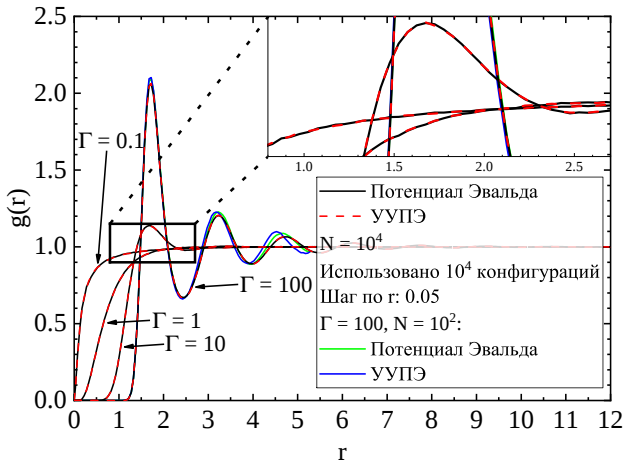


Рис. 6: РФР $g(r)$ для $\Gamma = 0.1, 1, 10, 100$ и $N = 10^4$, рассчитанная с потенциалом Эвальда (черные линии) и УУПЭ (красные линии). Для $\Gamma = 100, N = 10^2$ (зеленая и синяя линии) наблюдаются расхождения.

Средние и погрешности вычисляются блочным методом: равновесный участок моделирования делится на блоки, для которых определялись средние значения и стандартное отклонение. Для анализа зависимости энергии ОКП от числа частиц N предложена аппроксимация

$$\frac{\beta E_{\text{оср}}}{N} \left(\frac{1}{N} \right) = \left(\frac{\beta E_{\text{оср}}}{N} \right)_{\infty} + b \left(\frac{1}{N} \right)^{\gamma},$$

где $(\beta E_{\text{оср}}/N)_{\infty}$ — энергия в термодинамическом пределе, b, γ — коэффициенты подгонки. Для водорода применялись линейные и квадратичные аппроксимации.

В финале главы описан кластерный анализ состава плазмы: частицы объединяются в кластеры $\text{H}, \text{H}_2, \text{H}^-, \text{H}_2^+, \text{H}_3^+, \text{H}_3^{2+}$, свободные протоны и электроны. Усредне-

ние по конфигурациям дает равновесный состав и степень ионизации как отношение числа свободных электронов к их общему числу.

В четвертой главе приведены результаты моделирования ОКП методом МК. Для проверки корректности УУПЭ рассчитаны постоянные Маделунга для ОЦК- и ГЦК-решеток. Показана сходимость по числу частиц, что подтверждает применимость УУПЭ к упорядоченным структурам. Верификация при конечных значениях $0.1 \leq \Gamma \leq 100$ выполнена сравнением РФР $g(r)$ для УУПЭ и потенциала Эвальда; результаты отлично согласуются между собой (рис. 6).

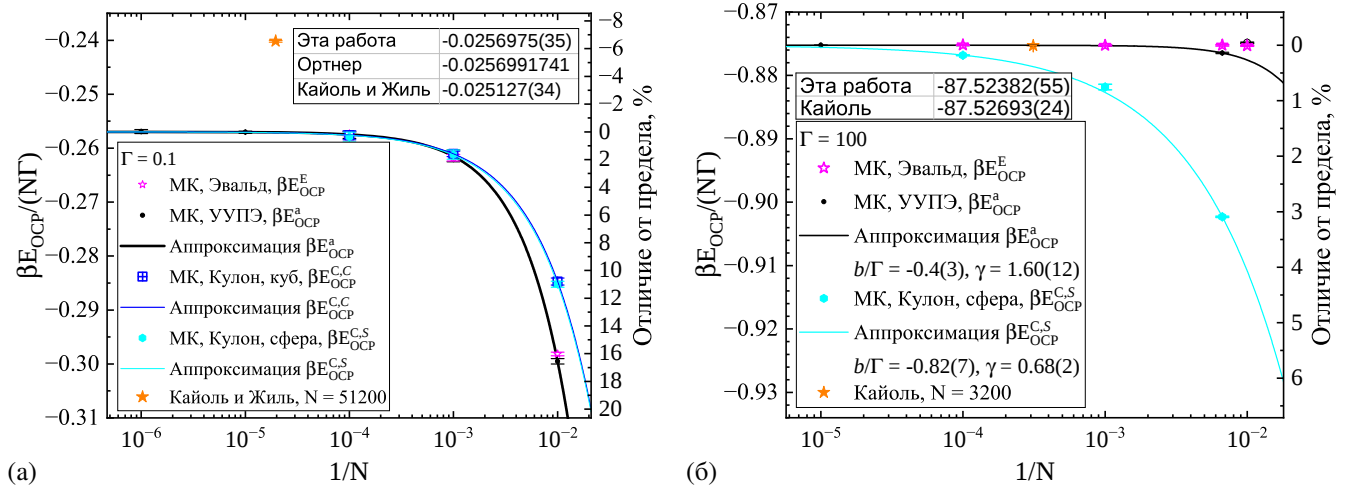


Рис. 7: Зависимость энергии ОКП от числа частиц N для $\Gamma = 0.1, 100$ при использовании различных потенциалов. Показаны данные Кайоля и Жиль, а также результат кластерного разложения Ортнера.

Далее исследована сходимость энергии по числу частиц. При слабом взаимодействии ($\Gamma \ll 1$) все потенциалы дают близкие результаты (рис. 7а). В области $\Gamma \geq 10$ учет дальногодействия значительно ускоряет сходимость: при $\Gamma = 100$ для $N \sim 100$ энергия с УУПЭ отличается от термодинамического предела (ТДП) менее чем на 1%, тогда как с кулоновским потенциалом отличие составляет несколько процентов (рис. 7б). Таким образом, учет дальногодействия дает выигрыш в порядок по скорости сходимости.

С помощью МК моделирования с УУПЭ получены значения энергии ОКП в ТДП в области $0.01 \leq \Gamma \leq 170$ при числе частиц до 10^6 . Результаты согласуются с пределом Дебая–Хюккеля при $\Gamma = 0.01$, с разложением Ортнера при $\Gamma = 0.1$ и с данными Кайоля при больших Γ . На основе этих данных построены уравнения состояния (УРС) ОКП. В качестве моделей использованы:

1. Выражение Кайоля; полученные в данной работе коэффициенты дают корректное поведение в области $0.1 \leq \Gamma < 3$. В результате новое УРС применимо при $\Gamma \in [0.1, 170]$ и согласуется с данными МК и гиперцепным приближением, см. рис. 8;

2. Модель Потехина и Шабрие (см. таблицу 1):

$$\left(\frac{\beta E_{\text{ОКП}}}{N}\right)_{\infty} = \frac{A_1 \Gamma^{3/2}}{\sqrt{\Gamma + A_2}} + \frac{A_3 \Gamma^{3/2}}{\Gamma + 1} + \frac{B_1 \Gamma^2}{\Gamma + B_2} + \frac{B_3 \Gamma^2}{\Gamma^2 + B_4}, \quad (19)$$

справедливая для $\Gamma \in [0, 170]$ и согласующаяся с асимптотикой Ортнера (рис. 8).

Таким образом, использование УУПЭ позволило произвести моделирование кулоновских систем с числом частиц до миллиона. В частности, это объясняется тем, что расчет постоянной Маделунга для ОЦК-решетки выполняется более чем в 200 раз быстрее в сравнении с обычным потенциалом Эвальда. Это открывает возможность достоверного моделирования кулоновских систем в ТДП при $N \sim 10^6$, что ранее было практически недостижимо.

Результаты четвертой главы опубликованы в рецензируемых изданиях [2; 5], препринте [12] и сборниках тезисов.

В пятой главе приведены результаты моделирования водородной плазмы методами МК и МД. Сначала рассмотрена область слабой неидеальности $\Gamma \leq 0.01$ при $\chi = 10^{-6}$. Сравнены классическое моделирование с УУПЭ, моделирование МКИТ с разбиениями и без них, с учетом и без учета дальнего действия в псевдопотенциале Кельбга. Результаты методов согласуются между собой и с приближением Дебая–Хюккеля, а также уравнением Танака–Ичимару. Показано, что при $\Gamma \leq 0.01$ классический подход применим, несмотря на формальную неустойчивость системы. Это объясняется следующим фактом.

Аналитическая оценка вероятности образования связанных состояний в МК моделировании показала, что при $\Gamma = 0.01$ и числе шагов $m_{\text{tot}} = 10^7$ они практически не возникают (рис. 9). При уменьшении Γ вероятность убывает как Γ^3 , поэтому для $\Gamma \leq 0.01$ система устойчива в моделировании. При $\Gamma > 0.01$ образование атомов вызывает скачки энергии и рост статистической ошибки, что делает МК неэффективным и требует применения МД.

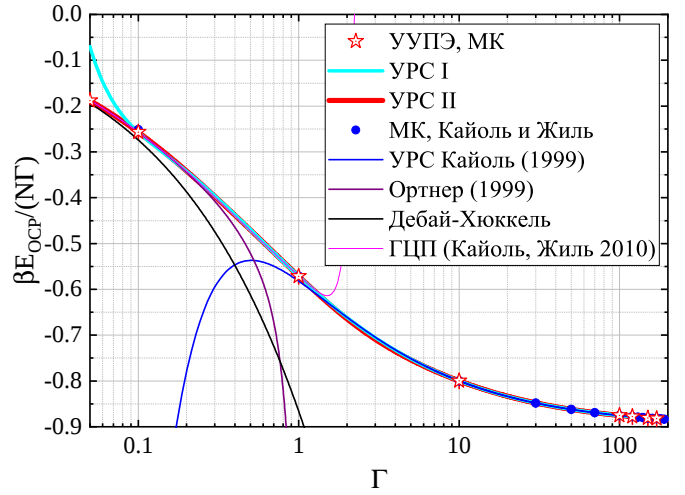


Рис. 8: Потенциальная энергия ОКП на частицу в зависимости от Γ . Красные звезды — данные МК из этой работы, синие точки — данные Кайоля, фиолетовая кривая — разложение Ортнера, черная — предел Дебая–Хюккеля.

Таблица 1: Коэффициенты в уравнении состояния (19). В первом столбце значения из работ Кайоля, Потехина и Шабрие, во втором — новые результаты МК с УУПЭ. $A_3 = -\sqrt{3}/2 - A_1/\sqrt{A_2}$.

	Кайоль, Потехин, Шабрие	Новое УРС
A_1	-0.907347	-0.7678971255
A_2	0.62849	0.5059769059
B_1	4.50×10^{-3}	-0.1336099542
B_2	170	3.588111959
B_3	-8.4×10^{-5}	-0.1440005434
B_4	3.70×10^{-3}	5.177602644

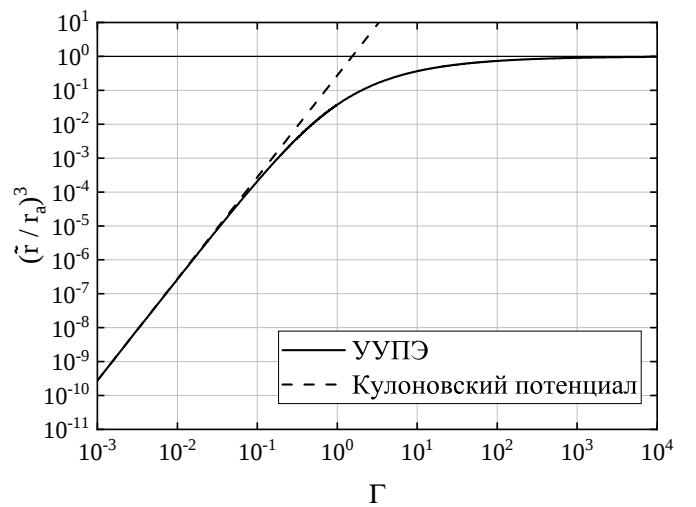
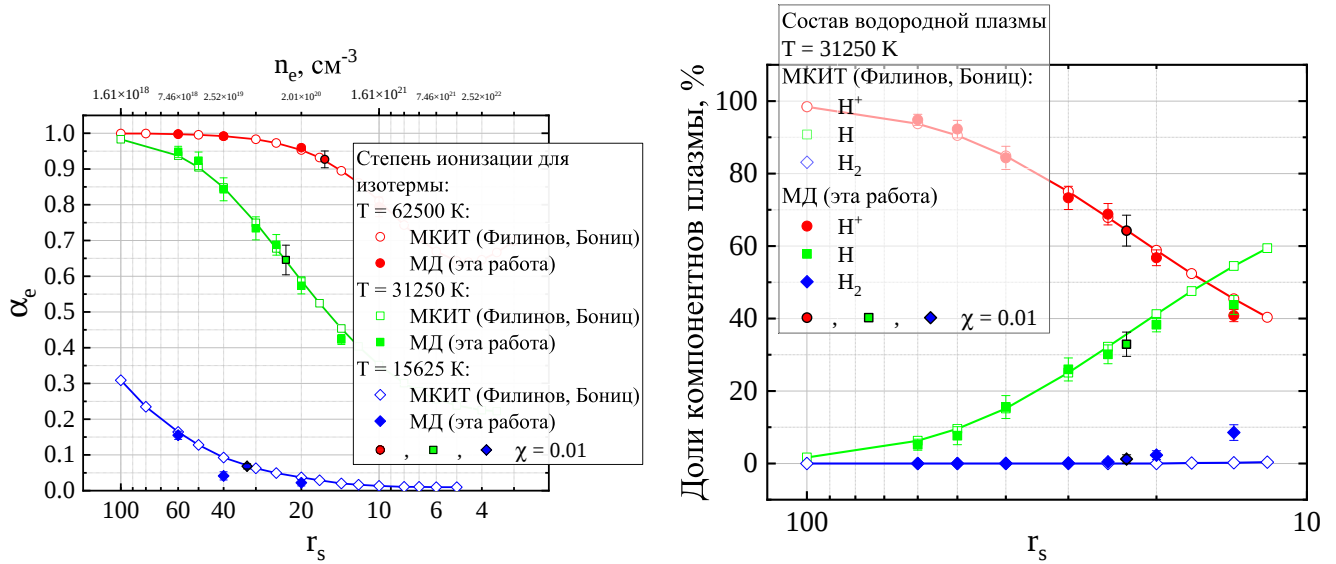


Рис. 9: Вероятность перехода в связанное состояние при различных Γ в МК моделировании. Сплошная линия — УУПЭ, пунктирная — кулоновский потенциал.

Далее производится МД моделирование невырожденной плазмы с улучшенным псевдопотенциалом Кельбга с и без учета дального действия. Метод проверен сравнением с результатами МКИТ, полученными А. В. Филиновым и Боницом; при $T \geq 62.5$ кК и $\chi < 0.01$ результаты МД и МКИТ совпадают в пределах 1%. При меньших температурах энергия и давление в МД занижены из-за чрезмерного образования молекул (см. рис. 10), что, по-видимому, связано с отличием градиента улучшенного псевдопотенциала от точного. В то же время, принцип Паули всегда выполняется и некорректные кластеры не образуются.



(а) Степень ионизации на трех изотермах.

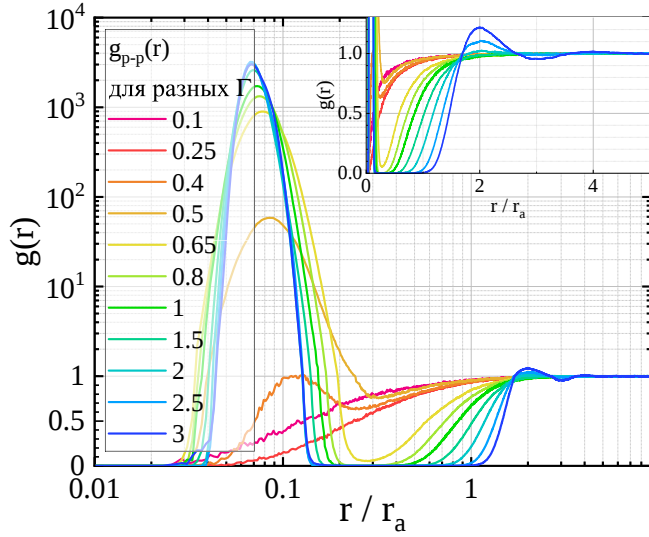
(б) Состав плазмы (H^+ , H , H_2) при $T = 31250$ К.

Рис. 10: Сравнение результатов МКИТ (пустые символы) и МД (закрашенные) для ионизации и состава водородной плазмы.

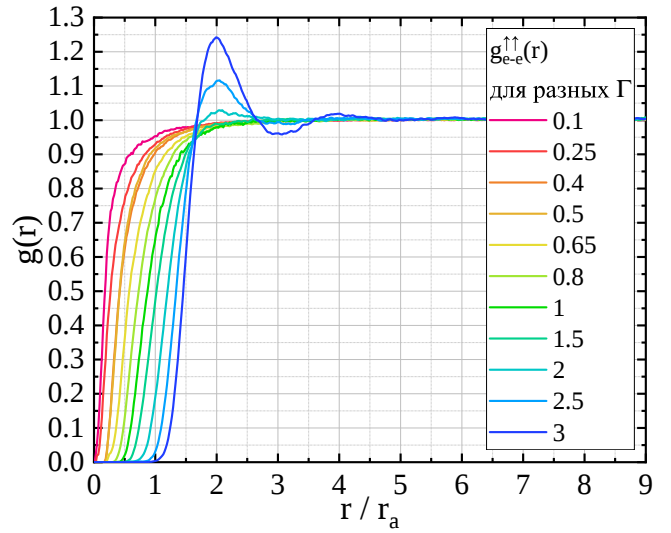
Затем рассмотрено моделирование с учетом дального действия при фиксированном $\chi = 0.01$. Для анализа рассчитаны РФР (см. рис. 11). При $\Gamma \leq 0.25$ молекулы отсутствуют, при $\Gamma = 0.5$ появляется пик в $g_{p-p}(r)$, отражающий связанные состояния, а при $\Gamma \geq 2$ видны осцилляции, соответствующие ближнему порядку (рис. 11а). Электроны с одинаковой проекцией спина не образуют связанных состояний, а при $\Gamma \geq 2$ также проявляется ближний порядок (см. рис. 11б).

Степень ионизации α_e (рис. 12а) равна 1 при $k_B T > 13.6$ эВ, уменьшается при $k_B T < 13.6$ эВ, достигает 0.5 при 30 кК и обращается в ноль при $\Gamma \geq 0.8$. Соответственно, в составе плазмы (рис. 12б) при 13.6 эВ $> k_B T > 4.52$ эВ формируются только атомы; в области 25–40 кК появляются молекулы и небольшое число комплексов H^- , H_2^+ . При 6–10 кК атомов становится меньше, доля молекул достигает максимума, а при более низких температурах растет доля H_3^+ и H^- .

Наконец, исследована сходимость энергии по числу частиц. При $\Gamma \leq 0.5$ учет дального действия не ускоряет сходимость; более того, результаты без учета дального действия сходятся быстрее (рис. 13а). При $\Gamma > 0.5$ зависимость энергии от N становится нерегулярной из-за фиксированного состава при конечных N (рис. 13б), что требует использования $N \geq 10^3$ или методов моделирования с переменным числом частиц. При $\Gamma \geq 0.65$ для оценки термодинамического предела аппроксимации проводятся по некоторым выбранным точкам. Полученные

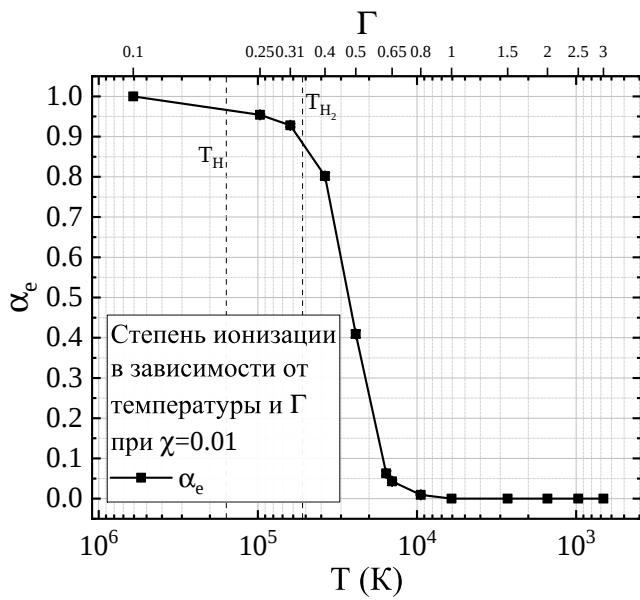


(а) РФР протон–протон $g_{p-p}(r)$.

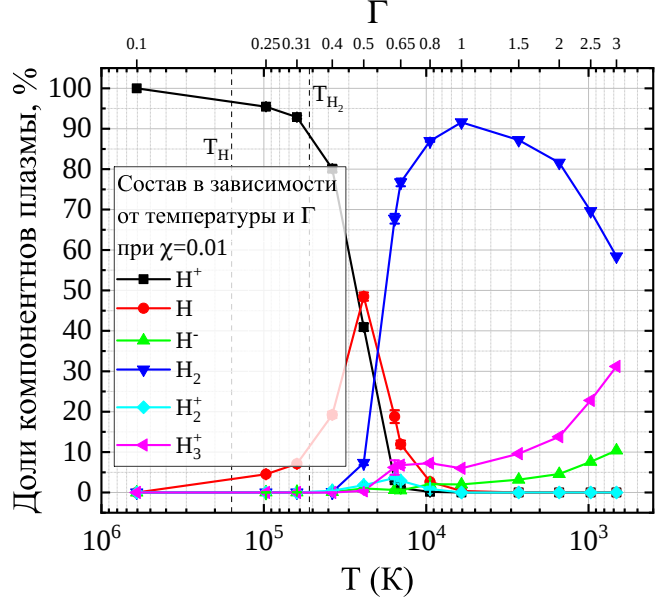


(б) РФР электрон–электрон с одинаковыми проекциями спина $g_{e-e}^{\uparrow\uparrow}(r)$.

Рис. 11: РФР невырожденной плазмы при $\chi = 0.01$ и $N = 10^3$.



(а) Степень ионизации.



(б) Состав плазмы.

Рис. 12: Ионизация и состав невырожденной водородной плазмы при $\chi = 0.01$ и $N = 10^3$.

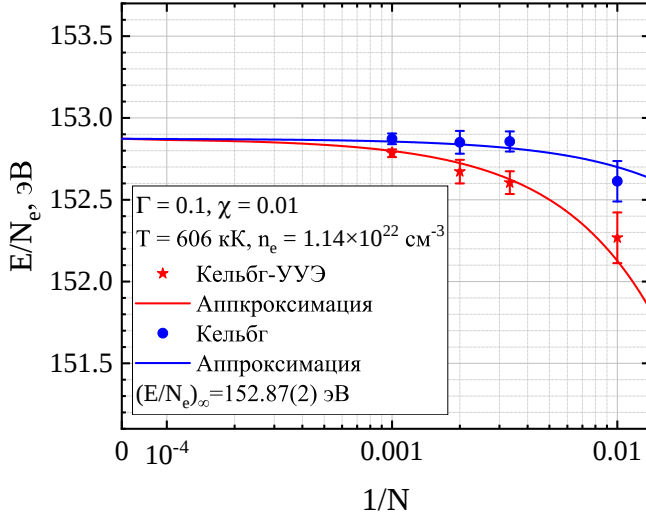
значения энергии и давления приведены в таблице 2.

Результаты пятой главы опубликованы в рецензируемых изданиях [7], препринтах [10; 11] и сборниках тезисов.

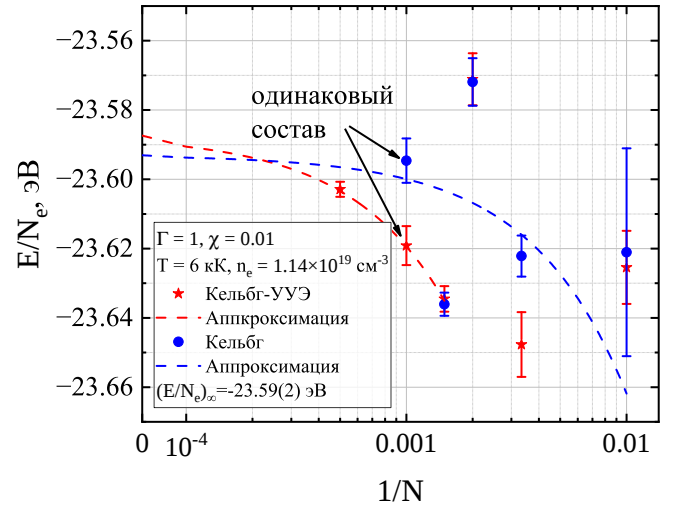
В заключении сформулированы основные результаты работы:

1. Получен аналитический вид УУПЭ для одно- и двухкомпонентных кулоновских систем, и соответствующие им формулы для потенциальной энергии, формула для потенциальной энергии ОКП с усеченным кулоновским потенциалом, то есть без учета кулоновского дальнего действия, и поправки к вириальному давлению для потенциала, зависящего от объема, а именно в случае обычного и усредненного по углам потенциала Эвальда.

2. Реализован и отлажен численный метод для моделирования методом МК с



(a) $\Gamma = 0.1$



(б) $\Gamma = 1$

Рис. 13: Зависимость полной энергии на один электрон для невырожденной водородной плазмы от обратного числа частиц для (слева) $\Gamma = 0.1$ и (справа) $\Gamma = 1$ при $\chi = 0.01$. По горизонтальной оси в промежутке $(10^{-4}, 0.014)$ используется логарифмический масштаб; при $1/N < 10^{-4}$ используется линейный масштаб. Хорошо видно, что при сильной неидеальности зависимость от числа частиц является скачкообразной, из-за чего получить надежный термодинамический предел не представляется возможным при использовании $N \leq 10^3$.

Таблица 2: Значения энергии и давления невырожденной водородной плазмы при $\chi = 0.01$ в термодинамическом пределе. В скобках показана погрешность последних цифр.

Γ	T , кК	n_e , см^{-3}	$(E/N_e)_\infty$, эВ	$(P)_\infty$, бар	r_s
0.1	606	1.14×10^{22}	152.87(2)	$1885.7(4) \times 10^3$	5.21
0.25	97.0	7.29×10^{20}	22.17(2)	$18.509(8) \times 10^3$	13.0
0.4	37.9	1.78×10^{20}	4.1(1)	1725(6)	20.8
0.5	24.2	9.12×10^{19}	-6.03(9)	456(2)	26.0
0.65	14.3	4.15×10^{19}	-20.21(3)	82.4(13)	33.9
0.8	9.47	2.23×10^{19}	-22.60(1)	34.0(12)	41.7
1	6.06	1.14×10^{19}	-23.59(2)	12.6(3)	52.1
1.5	2.69	3.38×10^{18}	-24.715(3)	2.939(8)	78.1
2	1.52	1.42×10^{18}	-25.3068(3)	1.18(2)	104
2.5	0.97	7.29×10^{17}	-25.623(5)	0.632(9)	130

различными потенциалами взаимодействия однокомпонентной и водородной плазмы, в том числе с интегралами по траекториям, позволяющий рассчитывать среднее значение потенциальной энергии и радиальные функции распределения.

3. Произведено моделирование методом МК ОКП, с помощью которого был рассчитан ТДП энергии ОКП, получено уравнение состояния в табличном и аппроксимированном виде и показано преимущество учета дальногодействия в моделировании.

4. Получен аналитический вид кулоновской высокотемпературной матрицы плотности с учетом дальногодействия и связанный с ней Кельбг-УУЭ псевдопотенциал для невырожденной водородной плазмы.

5. Реализован и протестирован программный код KelbgLIP для расчета кулоновской матрицы плотности с учетом дальногодействия, действия и энергии водородной плазмы с интегралами по траекториям, а также псевдопотенциалов вза-

имодействия между всеми частицами водородной плазмы, в том числе с учетом температурных и дальнодействующих эффектов.

6. Произведено моделирование невырожденной слабонеидеальной водородной плазмы с помощью методов МК, в том числе с интегралами по траекториям, оценена вероятность образования связанных состояний, а также получен термодинамический предел энергии при $\Gamma = 0.01$, который совпал со значением из теории Дебая–Хюккеля.

7. Предложено решение проблемы нефизической кластеризации водородной плазмы при температурах меньше 50 кК с помощью учета конечного размера электронов в силах взаимодействия между электронами с одинаковой проекцией спина, что позволяет приближенно учесть принцип Паули и избежать коллапса системы «в точку».

8. Произведено моделирование невырожденной водородной плазмы при $\chi = 0.01$ в диапазоне неидеальности $0.1 \leq \Gamma \leq 3$, получена зависимость степени ионизации и состава от Γ , а также получено табличное уравнение состояния в ТДП.

Результаты работы опубликованы в 9 статьях в рецензируемых журналах [1—9], 3 препринтах [10—12] и 11 тезисах докладов.

Основные публикации по теме диссертации

1. *Demyanov G. S., Levashov P. R.* Systematic derivation of angular-averaged Ewald potential // *J. Phys. A: Math. Theor.* — 2022. — Август. — Т. 55, № 38. — С. 385202.
2. *Demyanov G. S., Levashov P. R.* One-component plasma of a million particles via angular-averaged Ewald potential: A Monte Carlo study // *Phys. Rev. E.* — 2022. — Июль. — Т. 106, вып. 1. — С. 015204.
3. *Demyanov G. S., Levashov P. R.* Accounting for long-range interaction in the Kelbg pseudopotential // *Contrib. Plasma Phys.* — 2022. — Т. 62, № 10. — e202200100.
4. *Демьянов Г. С., Левашов П. Р.* Систематический вывод функционала и псевдопотенциала Кельбга // *Вестник ОИВТ.* — 2022. — Т. 7, № 1. — С. 30—39.
5. *Demyanov G. S., Onegin A. S., Levashov P. R.* N-convergence in one-component plasma: Comparison of Coulomb, Ewald, and angular-averaged Ewald potentials // *Contrib. Plasma Phys.* — 2024. — Т. 64, № 6. — e202300164.
6. *Onegin A. S., Demyanov G. S., Levashov P. R.* Pressure of Coulomb systems with volume-dependent long-range potentials // *J. Phys. A: Math. Theor.* — 2024. — Май. — Т. 57, № 20. — С. 205002.
7. *Demyanov G., Levashov P.* KelbgLIP: Program implementation of the high-temperature Kelbg density matrix for path integral and molecular dynamics simulations with long-range Coulomb interaction // *Comput. Phys. Commun.* — 2024. — Т. 305. — С. 109326. — ISSN 0010-4655.
8. *Demyanov G. S., Onegin A. S., Levashov P. R.* Reply to Comment on ‘Pressure of Coulomb systems with volume-dependent long-range potentials’ // *J. Phys. A: Math. Theor.* — 2025. — Февр. — Т. 58, № 8. — С. 088002.
9. *Demyanov G. S., Onegin A. S., Levashov P. R.* Comment on “A random batch Ewald method for charged particles in the isothermal–isobaric ensemble” [*J. Chem. Phys.* 157, 144102 (2022)] // *J. Chem. Phys.* — 2025. — Май. — Т. 162, № 17. — С. 177101. — ISSN 0021-9606.
10. *Demyanov G. S., Levashov P. R.* Stability of a Nondegenerate Two-Component Weakly Coupled Plasma. — 2023. — arXiv: 2309.15208 [physics.plasm-ph].
11. *Demyanov G. S., Levashov P. R.* Molecular dynamics of nondegenerate hydrogen plasma using improved Kelbg pseudopotential with electron finite-size correction. — 2025. — arXiv: 2508.19820 [physics.plasm-ph].
12. *Demyanov G. S., Levashov P. R.* One-Component Plasma Equation of State Revisited via Angular-Averaged Ewald Potential. — 2025. — arXiv: 2509.02390 [physics.plasm-ph].

Научное издание

Демьянов Георгий Сергеевич

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук на тему:

Эффективный учет дальнего действия в моделировании классических и квантовых кулоновских систем с помощью усредненного по углам потенциала Эвальда

Подписано в печать «_____» _____ 2025 г..

Формат 60 × 90 1/16.

Тираж 100 экз.

Заказ _____.