

Решение уравнения Блоха для усредненного по углам потенциала Эвальда в первом порядке теории возмущений

Г.С. Демьянов
МФТИ

Моделирование термодинамических свойств кулоновских систем обычно производится совместно с периодическими граничными условиями для уменьшения конечноразмерных эффектов [1, 2]. Наличие таких условий предполагает учет взаимодействия между частицами не только в основной ячейке, но также и между частицами основной ячейки и их периодическими образами, что приводит к потенциалу Эвальда [3]. Однако этот потенциал представляется в виде трехмерного ряда, что значительно усложняет моделирование вместе с этим потенциалом. Более того, для применения этого подхода к моделированию двухкомпонентной системы необходимо получить аналитическое или численное решение уравнения Блоха на матрицу плотности из-за сингулярного поведения кулоновского потенциала на малых расстояниях.

В данной работе приводится пошаговый вывод усредненного по углам потенциала Эвальда (УУПЭ) в случае двухкомпонентной кулоновской системы [4, 5]. В отличие от оригинального потенциала Эвальда, УУПЭ имеет очень простую аналитическую форму, включая все дальнедействующие взаимодействия оригинального потенциала. Это позволило найти соответствующее УУПЭ аналитическое решение уравнения Блоха в первом порядке теории возмущений с помощью подхода Г. Кельбга [6, 7]. Полученная кулоновская матрица плотности содержит эффекты дальнего действия и может быть применена в моделировании методом Монте-Карло с интегралами по траекториям для расчета термодинамических свойств плазмы [8]. Диагональная часть матрицы плотности содержит псевдопотенциал взаимодействия, который может быть использован в квазиклассическом моделировании плазмы методом молекулярной динамики.

- [1] G. S. Demyanov, A. S. Onegin, and P. R. Levashov, *Contributions to Plasma Physics*, p. e202300164 (2024).
- [2] T. Dornheim, S. Groth, and M. Bonitz, *Physics Reports* 744, 1 (2018), ISSN 0370-1573.
- [3] S. G. Brush, H. L. Sahlin, and E. Teller, *The Journal of Chemical Physics* 45, 2102 (1966).
- [4] G. S. Demyanov and P. R. Levashov, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 55, 385202 (2022).
- [5] G. S. Demyanov and P. R. Levashov, *Phys. Rev. E* 106, 015204 (2022).
- [6] G. Kelbg, *Annalen der Physik* 467, 219 (1963).
- [7] G. S. Demyanov and P. R. Levashov, *Contributions to Plasma Physics* 62, e202200100 (2022).
- [8] G. Demyanov and P. Levashov, arXiv preprint arXiv:2309.15208 (2023).