

**Влияние граничных условий на расчет равновесных свойств неидеальных кулоновских систем методом молекулярной динамики**

Я. С. Лавриненко<sup>1,2</sup>, И. В. Морозов<sup>1,2</sup>, И. А. Валуев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

<sup>2</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

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]. Для обоих методов существует проблема постановки корректных граничных условий при моделировании пространственно бесконечных (однородных) систем с дальнедействующим кулоновским потенциалом. При моделировании кристаллических систем данная проблема решается с помощью суммирования Эвальда, но при моделировании неупорядоченной плазмы или жидкости использования этого метода приведет к возникновению ошибок, связанных с возникновением нефизичной периодичности. Типичными граничными условиями для непериодических систем является метод ближайшего образа, также некоторые авторы предпочитают отражающие стенки [5].

Выбор граничных условий становится более сложным в методе молекулярной динамики с волновыми пакетами (МДВП) [6] где электрон представляется гауссовым волновым пакетом переменной ширины. Применение метода МДВП к неограниченным системам приводит к расплыванию волновых пакетов для слабосвязанных электронов [7]. Данный эффект является естественным для гауссовой волновой функции в неограниченном пространстве, но модель расширенной системы должна обеспечивать корректные ограничения плотности разрешенных состояний. Отражающие граничные условия, рассмотренные в данной работе, могут быть использованы для обеспечения финитного поведения волновой функции.

В данной работе с использованием классической МД проведено исследование сходимости термодинамических величин при увеличении размеров моделируемой системы для различных граничных условий. Моделирование больших систем требует больших вычислительных мощностей, в связи с чем для расчетов использовался пакет программ, адаптированный для исполнения на графических ускорителях (GPU). Для большой системы предполагается, что влияние границ будет уменьшаться с увеличением размера системы. В работе исследовалось предельное поведение величин при размерах, где граничные эффекты незначительны. Особое внимание уделено граничным условиям с

гармоническими отражающими стенками, которые могут быть применены как для МДВП так и для классической МД.

### **Литература**

- [1] *Hansen J. P., McDonald I. R.* Microscopic simulation of a strongly coupled hydrogen plasma – *Physical Review A*. – 1981. – Т. 23. – №. 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. – №. 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. – №. 2. – С. 370-384.
- [4] *Benedict L. X., Glosli J. N., Richards D. F., Streitz F. H.* Molecular Dynamics Simulations of Electron-Ion Temperature Equilibration in an SF6 Plasma – *Physical review letters*. – 2009. – Т. 102. – №. 20. – С. 205004.
- [5] *Mayorov S. A., Tkachev A. N., Yakovlenko S. I.* Metastable supercooled plasma - *Physics-Uspexhi*. – 1994. – Т. 37. – №. 3. – С. 279-288.
- [6] *Klakow D., Toepffer C., Reinhard P. G.* Semiclassical molecular dynamics for strongly coupled Coulomb systems – *The Journal of chemical physics*. – 1994. – Т. 101. – №. 12. – С. 10766-10774.
- [7] *Morozov I. V., Valuev I. A.* Localization constraints in Gaussian wave packet molecular dynamics of nonideal plasmas – *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. – 2009. – Т. 42. – №. 21. – С. 214044.