

Усредненный потенциал Эвальда для Юкавовской однокомпонентной плазмы

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

¹ Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва 125412, Россия

² Московский физико-технический институт (государственный университет), Институтский пер., 9, Долгопрудный 141701, Россия

E-mail: onegin.as@phystech.edu

Статья поступила в редакцию 29 ноября 2023 г.

Аннотация. В данной работе производится вывод аналитического выражения для усредненно-го по углам потенциала Эвальда для Юкавовской однокомпонентной плазмы и соответствующей плотности заряда. Полученные результаты верифицируются на известных предельных случаях слабого экранирования (классическая однокомпонентная плазма) и сильного экранирования (чистый потенциал Юкавы). Численно была получена зависимость радиуса действия усредненного потенциала от параметра экранирования и численно показана электронейтральность сферической ячейки с одной частицей. <https://doi.org/10.33849/2023311>

1. ВВЕДЕНИЕ

Юкавовская плазма обладает рядом интересных свойств, которые позволяют описывать различные физические системы, включая пылевую плазму, межзвездную среду и молекулярные облака [1–3]. Юкавовская однокомпонентная плазма (ЮОКП) представляет собой модифицированную версию однокомпонентной плазмы (ОКП), в которой взаимодействие между заряженными частицами описывается потенциалом Юкавы, известным также как потенциал Дебая или экранированный кулоновский потенциал.

Этот потенциал возникает в результате ослабления кулоновского потенциала заряженной частицы полем окружающих ее ионов и электронов, что приводит к уменьшению эффективного радиуса взаимодействия потенциала. В отличие от однокомпонентной плазмы, свойства которой зависят только от одного параметра неидеальности, для описания Юкавовской плазмы необходимо также рассматривать параметр экранирования [4]. При этом, ЮОКП переходит в ОКП при стремлении параметра экранирования к нулю.

ЮОКП, также как и ОКП, требует использования процедуры Эвальда [5], особенно в области слабого экранирования. Влияние дальнедействующих эффектов значительно даже в случае, когда длина экранирования на порядок меньше длины ячейки, несмотря на экранирующий характер потенциала Юкавы. Впервые эта процедура была применена к ЮОКП в работе Хамагучи и Фароки [6] в 1994 году; эти же авторы произвели моделирование ЮОКП методом молекулярной динамики в работе [7], используя 1024 частицы. Аналогичный подход был использован в работе [5] для исследования переносных свойств ЮОКП.

Для того, чтобы повысить эффективность моделирования, в данной работе используется метод, представленный в 2003 году Е. Якубом и К. Ронки [8]. Они предложили усреднить потенциал Эвальда по всем направлениям, чтобы избавиться от излишней анизотропии в потенциале взаимодействия, и получили усредненный по углам потенциал Эвальда (УУПЭ) для кулоновской двухкомпонентной плазмы. Физическая предпосылка такого преобразования состоит в том, что плазма представляет из себя сильно неупорядоченную систему,

то есть является изотропной. В то же время, потенциал Эвальда является анизотропным, и его применение для моделирования изотропных систем приводит к излишним вычислениям.

УУПЭ сохраняет уникальные свойства потенциала Эвальда: он является короткодействующим, учитывая при этом дальнедействующее взаимодействие в плазме. В то же время, УУПЭ имеет очень простую аналитическую форму в случае классических кулоновских систем, что позволяет использовать его в дальнейших преобразованиях, например, для вывода квантового псевдопотенциала [9]. Помимо этого, данный подход позволяет повысить эффективность моделирования на несколько порядков, увеличив таким образом число частиц в моделировании дальнедействующих кулоновских систем до миллиона [10].

В данной работе, производится процедура усреднения по углам потенциала Эвальда в случае ЮОКП. В результате мы получаем изотропный короткодействующий потенциал; при этом радиус действия зависит от параметра экранирования. Мы показываем, что полученный потенциал переходит в УУПЭ для ОКП в пределе слабого экранирования. Также мы находим выражение для плотности заряда, соответствующее УУПЭ ЮОКП, и показываем электронейтральность сферической ячейки с одной частицей.

2. ПАРАМЕТРЫ ПЛАЗМЫ

Для исследования свойств ЮОКП мы рассмотрим N одинаковых точечных зарядов, которые погружены в однородную нейтрализующую фоновую среду. Эти частицы вместе с фоном находятся в кубической ячейке длиной L , на которую наложены периодические граничные условия. Такая система далее называется юкавовской однокомпонентной плазмой (ЮОКП).

ЮОКП, находящуюся в термодинамическом равновесии, можно описывать двумя безразмерными параметрами. Первый из них — параметр экранирования $\kappa = k_D a$, где $a = L(4\pi N/3)^{-\frac{1}{3}}$ — среднее межчастичное расстояние, а k_D^{-1} — длина Дебая. Для удобства мы будем в дальнейшем использовать величину $\xi = k_D L = \kappa L/a$ в качестве параметра экранирования. Второй безразмерный параметр, параметр неидеально-

сти $\Gamma = \frac{(Ze)^2}{k_B T a}$, представляет собой отношение кулоновской энергии взаимодействия частиц, находящихся на расстоянии a , к кинетической энергии на одну частицу $k_B T$.

3. ЭКРАНИРОВАННОЕ УРАВНЕНИЕ ПУАССОНА И ПОТЕНЦИАЛ ЮКАВЫ

Потенциал, создаваемый в некоторой точке кубической ячейки, в случае ЮОКП может быть получен решением экранированного уравнения Пуассона для заряженных частиц и нейтрализующего фонового заряда в кубической ячейке со стороной L и периодическими граничными условиями [6]:

$$(\Delta - k_D^2)\varphi(\mathbf{r}) = 4\pi(Ze) \sum_{j=1}^N \left[\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) - \frac{1}{L^3} \right]. \quad (1)$$

Функция Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ для оператора $\Delta - k_D^2$, определенного в области кубической ячейки объема $V = L^3$ с периодическими граничными условиями, имеет следующий вид:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi} \sum_{\mathbf{n}} \frac{\exp(-k_D |\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{n}L|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{n}L|}, \quad (\mathbf{r}, \mathbf{r}') \in V. \quad (2)$$

Здесь \mathbf{n} — целочисленный трехмерный вектор, обозначение $\mathbf{n} \neq 0$, используемое далее, означает, что член с $\mathbf{n} = (0, 0, 0)$ исключается из суммы. Отметим, что ряд в уравнении (2) сходится абсолютно для любого $k_D > 0$. Тогда решение экранированного уравнения Пуассона (1) может быть записано через функцию Грина:

$$\varphi(\mathbf{r}) = -(Ze) \sum_{j=1}^N \int_V \sum_{\mathbf{n}} \frac{\exp(-k_D |\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{n}L|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \mathbf{n}L|} \times \left[\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) - \frac{1}{L^3} \right] d\mathbf{r}'. \quad (3)$$

Далее для найденного потенциала можно применить процедуру суммирования Эвальда. Использование процедуры Эвальда оправдано даже для экранированного потенциала, поскольку прямой расчет суммы по всем частицам “неудобен для численных целей” [5]. Вычисление вышеуказанного потенциала (3) требует значительных вычислительных затрат, а при слабом экранировании ($\xi \ll 1$) необходимо учитывать больше членов при суммировании по изображениям, чтобы решить проблему дальнего действия.

4. УСРЕДНЕННЫЙ ПО УГЛАМ ПОТЕНЦИАЛ ЭВАЛЬДА ДЛЯ ОКП

Рассмотрим для начала случай $\xi \rightarrow 0$, представляющий из себя классическую ОКП, который был исследован в нашей предыдущей работе [10]. В этом случае, метод усреднения потенциала Эвальда позволил на два порядка увеличить производительность моделирования, при этом практически не ухудшая точность результатов. Далее будут показаны основные шаги вывода УУПЭ в случае ОКП (подробный вывод читатель может найти в [10, 11]); все длины будут приводиться в единицах a , если не сказано иное.

Потенциальная энергия после применения суммирования по Эвальду для ОКП выглядит следующим образом ($\mathbf{x} = \mathbf{r}/L$):

$$\frac{E}{k_B T} = \frac{E_0}{k_B T} + \frac{\Gamma}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N v(\mathbf{x}_{ij}), \quad (4)$$

где $v(\mathbf{x}) = v_1(x) + v_2(\mathbf{x})$ — парный потенциал Эвальда,

$$Lv_1(x) = \frac{\operatorname{erfc}(\sqrt{\pi}x)}{x} - 1, \quad (5)$$

$$Lv_2(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \left[\frac{\operatorname{erfc}(\sqrt{\pi}|\mathbf{x} + \mathbf{n}|)}{|\mathbf{x} + \mathbf{n}|} + \frac{e^{-\pi n^2}}{\pi n^2} \cos(2\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}) \right], \quad (6)$$

а постоянный вклад равен:

$$\frac{E_0}{k_B T} = \frac{\Gamma}{2} N \lim_{r \rightarrow 0} \left(v(r) - \frac{1}{r} \right) = -\Gamma N^{2/3} M_{sc}. \quad (7)$$

В вышеприведенной формуле $M_{sc} = 0.88005944$ — постоянная Маделунга простой кубической решетки (в работе [10] в качестве постоянной Маделунга была использована величина $2 \times 0.88005944 = 1.76011888$).

Первое слагаемое потенциала $Lv_1(x)$ является сферически-симметричным. После применения процедуры усреднения по всем направлениям ко второй анизотропной части, $Lv_2(\mathbf{x})$:

$$v_2^\alpha(x) = \frac{1}{4\pi} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} v(\mathbf{x}) d\zeta, \quad (8)$$

мы получаем сферически-симметричную функцию:

$$Lv_2^\alpha(x) = \frac{1}{2\pi x} \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \frac{1}{n} \left[g(|n - x|) - g(|n + x|) + \frac{e^{-\pi n^2}}{\pi n^2} \sin(2\pi n x) \right], \quad (9)$$

где используется обозначение:

$$g(n) = e^{-\pi n^2} - \pi n \operatorname{erfc}(\sqrt{\pi}n). \quad (10)$$

После разложения в ряд Тейлора при $x = 0$ УУПЭ $Lv^\alpha(x) = Lv_1^\alpha(x) + Lv_2^\alpha(x)$ оказывается, что почти все коэффициенты разложения равны нулю, а усредненный потенциал принимает простую форму:

$$Lv^\alpha(x) = \frac{1}{x} - C_0 + \frac{2\pi x^2}{3}, \quad (11)$$

где

$$C_0 = 3 - \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \left[\frac{\operatorname{erfc}(\sqrt{\pi}n)}{n} + \frac{e^{-\pi n^2}}{\pi n^2} \right] = 2M_{sc} \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/3}. \quad (12)$$

После корректировки потенциала в соответствии с предельным случаем идеального газа ($\Gamma \rightarrow 0$) и сдвигом на величину потенциала в точке, соответствующей радиусу действия потенциала, $r_m = (3/4\pi)^{1/3}$, потенциальная энергия ОКП может быть записана в виде:

$$\frac{E_{\text{ААЕР}}}{k_B T} = \frac{E_{0,a}}{k_B T} + \frac{\Gamma}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_{s,i}} \phi(r_{ij}), \quad (13)$$

где $N_{s,i}$ — это полное число частиц, попавших в сферу объема $4\pi r_m^3/3 = L^3$ с центром в i -ой частице. При этом сдвинутый УУПЭ равен:

$$\phi(r) = \frac{1}{r} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{r}{r_m} \right) \left[\left(\frac{r}{r_m} \right)^2 - 3 \right] \right\}, \quad r < r_m, \quad (14)$$

а постоянный вклад в энергию учитывает взаимодействие с фоном и сдвиг потенциала:

$$\frac{E_{0,a}}{k_B T} = -\frac{3}{20} (Ze)^2 \frac{N(N+5)}{L}. \quad (15)$$

5. ВЫВОД УСРЕДНЕННОГО ПОТЕНЦИАЛА ЭВАЛЬДА ДЛЯ ЮОКП

В работе [7] была применена процедура Эвальда для частиц в кубической ячейке с длиной стороны L и периодическими граничными условиями в случае потенциала Юкавы. В результате, было получено выражение для потенциальной энергии ЮОКП E :

$$\frac{E - E_0}{k_B T} = \frac{\Gamma}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N \psi(\mathbf{x}_{ij}). \quad (16)$$

Постоянный вклад в энергию записывается следующим образом:

$$\frac{E_0}{k_B T} = \frac{\Gamma}{2} N \lim_{r \rightarrow 0} (\psi(r/L) - 1/r), \quad (17)$$

то есть аналогично формуле (7). Потенциал Эвальда для ЮОКП состоит из двух вкладов, $\psi(\mathbf{x}) = \psi_1(\mathbf{x}) + \psi_2(\mathbf{x})$ (во всех последующих формулах используется единица измерения длины a):

$$L\psi_1(\mathbf{x}) = \frac{\eta(x)}{x} \exp(-\xi x) - \frac{4\pi}{\xi^2} \left[1 - \frac{\exp(-\xi^2/4\pi)}{1 + \operatorname{erf}(\xi/2\sqrt{\pi})} \left(1 + \frac{\xi}{\pi} \right) \right] + \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \frac{\eta(|\mathbf{x} - \mathbf{n}|)}{|\mathbf{x} - \mathbf{n}|} \exp(-\xi|\mathbf{x} - \mathbf{n}|), \quad (18)$$

$$L\psi_2(\mathbf{x}) = \frac{2A}{\sqrt{\pi}} \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \cos(2\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}) \times \left[\frac{\pi\sqrt{\pi} \exp(-\pi n^2)}{\xi^2 + 4\pi^2 n^2} + \frac{\xi}{\xi^2 + 4\pi^2 n^2} \frac{F(\sqrt{\pi}n)}{n} \right], \quad (19)$$

где используются следующие обозначения:

$$B = B(\xi) = \frac{1}{1 + \operatorname{erf}(\xi/2\sqrt{\pi})}, \quad (20)$$

$$A = A(\xi) = 2B \exp(-\xi^2/4\pi), \quad (21)$$

$$\eta(x) = \operatorname{Berfc}(\sqrt{\pi}x - \xi/2\sqrt{\pi}), \quad (22)$$

и $F(x)$ — функция Доусона:

$$F(x) = e^{-x^2} \int_0^x e^{t^2} dt. \quad (23)$$

В пределе $\xi \rightarrow 0$, потенциал Эвальда для ЮОКП, $\psi(\mathbf{x})$, стремится к потенциалу Эвальда для ОКП (5), (6):

$$(\psi_1(\mathbf{x}) + \psi_2(\mathbf{x})) \xrightarrow{\xi \rightarrow 0} (v_1(x) + v_2(\mathbf{x})). \quad (24)$$

Потенциал Эвальда для ЮОКП является анизотропным; для того, чтобы упростить вычисления потенциальной энергии для изотропной ЮОКП, по аналогии с ОКП, потенциал $\psi(\mathbf{x})$ далее усредняется по всем направлениям на некотором расстоянии x_{ij} :

$$\psi^\alpha(x_{ij}) = \frac{1}{4\pi} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} \psi(\mathbf{x}_{ij}) d\zeta \equiv \langle \psi(\mathbf{x}_{ij}) \rangle_\alpha, \quad (25)$$

где под $\langle (\dots) \rangle_\alpha$ понимается усреднение по всем направлениям.

В изотропном пространстве направим ось OZ вдоль вектора \mathbf{n} и получим следующие необходимые соотношения:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{x} = nx \cos \theta, \quad |\mathbf{n} + \mathbf{x}| = \sqrt{n^2 + x^2 + 2nx \cos \theta}. \quad (26)$$

Теперь можно проинтегрировать потенциал по углам:

$$\langle \cos(2\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}) \rangle_\alpha = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \cos(2\pi nx \cos \theta) = \frac{\sin(2\pi nx)}{2\pi nx}, \quad (27)$$

$$\left\langle \frac{\eta(|\mathbf{x} + \mathbf{n}|) e^{-\xi|\mathbf{x} + \mathbf{n}|}}{|\mathbf{x} + \mathbf{n}|} \right\rangle_\alpha = B \frac{f(|n - x|) - f(|n + x|)}{2nx\xi}, \quad (28)$$

где

$$f(n) = e^{-\frac{\xi^2}{4\pi}} \operatorname{erf}(\sqrt{\pi}n) + e^{-\xi n} \operatorname{erfc} \left(\frac{2\pi n - \xi}{2\sqrt{\pi}} \right). \quad (29)$$

В итоге получается изотропный потенциал $\psi^\alpha(r) = \psi_1^\alpha(r) + \psi_2^\alpha(r)$, который в данной работе называется усредненным по углам потенциалом Эвальда для Юкавовой однокомпонентной плазмы (УУПЭ ЮОКП):

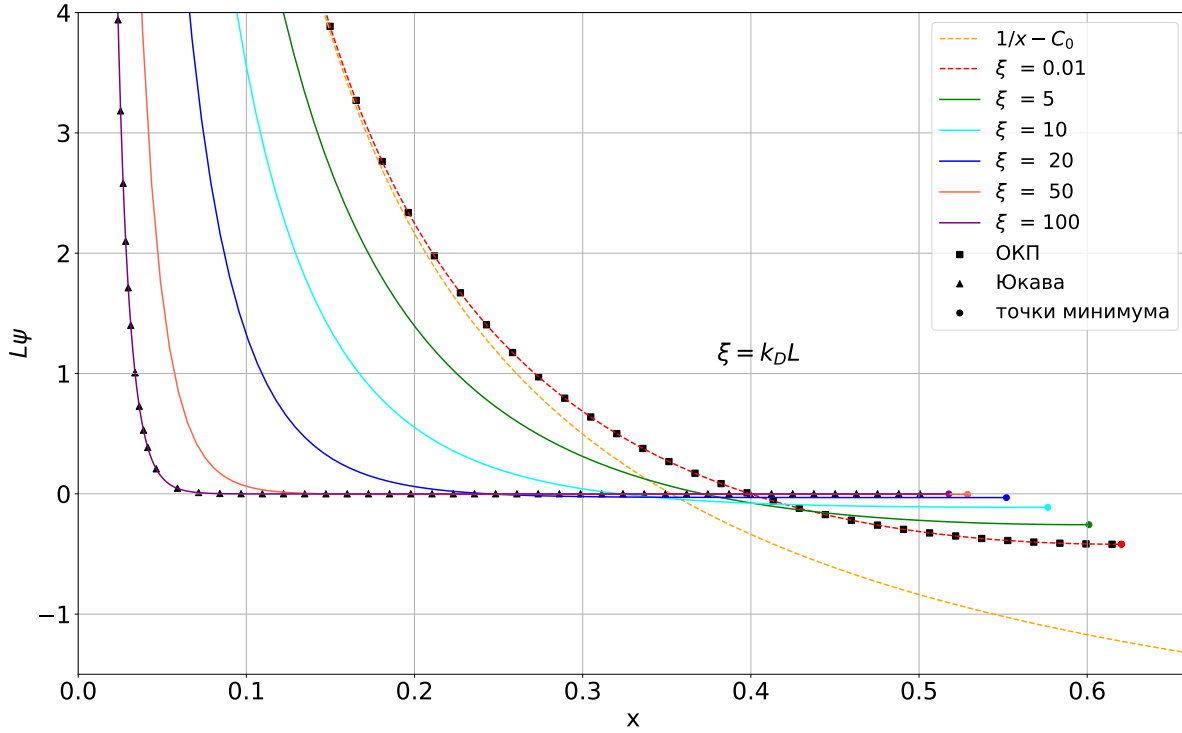


Рисунок 1. На графике приведены УУПЭ ЮОКП для широкого диапазона параметра экранирования, $\xi = 0.01, \dots, 100$. При малых параметрах экранирования УУПЭ ЮОКП совпадает с УУПЭ ОКП, который на графике отмечен квадратиками и на малых расстояниях совпадает со сдвинутым потенциалом Кулона (желтая пунктирная линия). При больших параметрах экранирования УУПЭ ЮОКП совпадает с потенциалом Юкавы (треугольники). Кружочками обозначены точки минимума потенциала.

$$L\psi^\alpha(x) = \frac{\eta(x)}{x} \exp(-\xi x) - \frac{4\pi}{\xi^2} \left[1 - \frac{\exp(-\xi^2/4\pi)}{1 + \operatorname{erf}(\xi/2\sqrt{\pi})} \left(1 + \frac{\xi}{\pi} \right) \right] + \sum_{n \neq 0} \left(B \frac{f(|n-x|) - f(|n+x|)}{2nx\xi} + \frac{2A}{\sqrt{\pi}} \frac{\sin(2\pi nx)}{2\pi nx} \times \left[\frac{e^{-\pi n^2} \pi \sqrt{\pi}}{\xi^2 + 4\pi^2 n^2} + \frac{\xi}{\xi^2 + 4\pi^2 n^2} \frac{1}{n} F(\sqrt{\pi} n) \right] \right). \quad (30)$$

Входящий в эту функцию ряд по n сходится абсолютно, а члены ряда быстро убывают с увеличением n .

6. ВИД УУПЭ ЮОКП ПРИ РАЗНЫХ ПАРАМЕТРАХ ЭКРАНИРОВАНИЯ

На рисунке 1 показан УУПЭ ЮОКП при различных параметрах экранирования, включая два хорошо известных предельных случая — слабого и сильного экранирования. Горизонтальная ось показывает безразмерное расстояние x , вертикальная — величину потенциала, которая безразмерна на длину ячейки, L . Каждая кривая соответствует зависимости потенциала от расстояния для фиксированного параметра экранирования, $\xi = k_D L$. Когда параметр экранирования велик (т.е. $\ln \xi \gg 1$), плазма сильно экранирована, и потенциал взаимодействия близок к потенциалу Юкавы $\exp(-\xi x)/x$. В пределе слабого экранирования (т.е. $\xi \ll 1$), ЮОКП переходит в ОКП.

Переходя к пределу $\xi \rightarrow 0$, можно показать аналитически, что УУПЭ ЮОКП стремится к ОКП УУПЭ (11):

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} [L\psi^\alpha(x)] = Lv^\alpha(x) = \frac{\operatorname{erfc}(\sqrt{\pi} x)}{x} - 1 + \sum_{n \neq 0} \left(\frac{g(|n-x|) - g(|n+x|)}{2\pi nx} + \frac{\sin(2\pi nx)}{2\pi nx} \frac{e^{-\pi n^2}}{\pi n^2} \right), \quad (31)$$

где функция $g(n)$ определена в (10).

На рисунке 1 видно, что кривая для УУПЭ ЮОКП в случае $\xi = 100$ близка к кривой потенциала Юкавы, $\exp(-\xi x)/x$. Более того, при $\xi \leq 0.1 \ll 1$ УУПЭ ЮОКП и ОКП УУПЭ почти одинаковы, что отражает формулу (31). На рисунке 1 также приведены УУПЭ ЮОКП для промежуточных значений ξ .

7. РАДИУС ДЕЙСТВИЯ УУПЭ ЮОКП

Как показано на рисунке 1, все потенциалы для разных ξ обрезаются в разных точках (точки отмечены на графике). Каждый потенциал, рассчитанный по формуле (30), достигает минимума, а затем неограниченно возрастает. Ранее на примерах одно- и двухкомпонентной плазмы [10, 11] было показано, что вследствие процедуры Эвальда радиус действия потенциала находится в точке минимума потенциала, x_{\min} . Далее мы кратко объясним причины возникновения радиуса действия у потенциала, учитывающего дальнедействующие

эффекты (см. раздел 4 работы [11] для подробного объяснения).

При применении процедуры Эвальда потенциальная энергия системы (ОКП или ЮОКП) принимает вид суммы взаимодействий частиц только в основной расчетной ячейке с потенциалом Эвальда; каждая частица взаимодействует с $N - 1$ частицами в основной ячейке. Поскольку мы рассматриваем систему с наложенными на нее периодическими граничными условиями, то потенциал взаимодействия должен быть периодичным, а значит иметь минимум и быть симметричным относительно этого минимума (см. раздел 4 и рисунок 1 в [11]).

Это позволяет при расчетах воспользоваться соглашением о минимальном изображении. Так, вместо расчета суммы взаимодействий между частицами в основной ячейке, рассматривается взаимодействие каждой частицы с ее $N - 1$ ближайшими соседями (которые могут быть как в основной ячейке, так и являться изображениями частиц основной ячейки); далее производится суммирование по всем частицам. В результате при фиксированном положении частиц каждая частица взаимодействует с $N - 1$ соседями, расположенными в кубе с центром в этой частице.

Потенциал Эвальда имеет точки минимумов на гранях основной кубической ячейки; взаимодействия с частицами, которые не попали в эту ячейку, вклад не вносят, поскольку *кулоновское* взаимодействие с периодическими образами уже учтено в потенциале Эвальда (см. рисунок 2 в [11]). Тогда потенциал Эвальда можно рассматривать как короткодействующий потенциал с радиусом действия, который зависит от направления. При этом, этот радиус действия потенциала находится на гранях куба, *как и минимумы потенциала*.

В результате усреднения периодического потенциала Эвальда по направлениям мы получаем функцию, которая уже не является периодичной. УУПЭ имеет точку минимума, r_m , а при $r > r_m$ неограниченно возрастает. Поэтому мы, по аналогии с обычным потенциалом Эвальда, пользуемся соглашением о минимальном изображении. Для этого мы определяем точку минимума потенциала, точку r_m . Эта точка минимума принимает смысл радиуса действия потенциала.

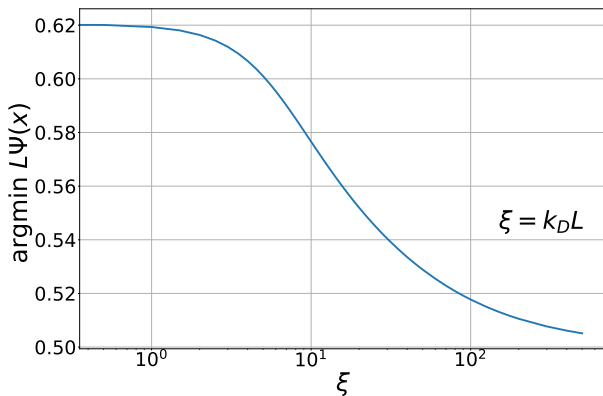


Рисунок 2. Зависимость положения минимума x_{\min} значения $L\psi(x)$ от параметра экранирования, ξ . В пределе слабого экранирования $x_{\min} \xrightarrow{\xi \rightarrow 0} r_m/L = (4\pi/3)^{-1/3}$.

Тогда на этом расстоянии УУПЭ обрезается и взаимодействия на расстоянии $r > r_m$ не учитываются, так же как и в обычном потенциале Эвальда не учитывается взаимодействие с теми частицами, которые находятся за минимумом потенциала. Таким образом, структура УУПЭ похожа на структуру потенциала Эвальда, так как потенциал является короткодействующим, учитывает дальнедействующие кулоновские взаимодействия и имеет минимумы в точках, лежащих на сфере радиуса r_m (но не на гранях кубической ячейки, как в случае обычного потенциала Эвальда). Для расчета полной потенциальной энергии рассматривается взаимодействие каждой i -ой частицы со всеми остальными соседями, которые попали в сферу с центром в i -ой частице, с использованием УУПЭ (см. рисунок 3 в работе [11]); далее производится суммирование по всем i -ым частицам.

В случае ЮОКП радиус действия зависит от параметра экранирования, и мы численно рассчитаем зависимость $x_{\min} = r_m(\xi)/L$. По вертикальной оси на рисунке 2 отложено значение x_{\min} , при котором УУПЭ ЮОКП достигает своего минимума. Обратим внимание, что при $0 < x < 1$ существует только один минимум для каждого ξ . Горизонтальная ось соответствует параметру ξ в логарифмическом масштабе. В результате мы численно рассчитали точки минимума потенциала и получили монотонно убывающую зависимость.

8. ВИД ПЛОТНОСТИ ЗАРЯДА, СООТВЕТСТВУЮЩЕЙ УУПЭ ЮОКП

Рассмотрим, какая плотность заряда создается каждой частицей, взаимодействие которой с некоторой пробной частицей описывается с помощью УУПЭ ЮОКП. Рассмотрим только одну частицу с зарядом Q_1 в сфере радиуса x_{\min} в начале координат. Она создает в некоторой точке \mathbf{r} потенциал $U(\mathbf{r}) = Q_1\psi(|\mathbf{r}|)$. Плотность заряда можно рассчитать из уравнения Пуассона:

$$\rho(\mathbf{r}) = -\Delta U(\mathbf{r})/(4\pi). \quad (32)$$

Таким образом, для определения плотности заряда $\rho(\mathbf{r})$ необходимо вычислить лапласиан потенциала. Для УУПЭ ЮОКП (14) и потенциала Юкавы он имеет следующий вид:

$$L^3 \rho^{\text{OCP}}(\mathbf{x}) = -\frac{Q_1 L^3 \Delta(\phi(\mathbf{x}))}{4\pi} = Q_1 (\delta(\mathbf{x}) - 1), \quad (33)$$

$$L^3 \rho^{\text{Yukawa}}(\mathbf{x}) = -Q_1 L^2 \Delta(\exp(-\xi|\mathbf{x}|)/|\mathbf{x}|)/(4\pi) = Q_1 (\delta(\mathbf{x}) - \xi^2 \exp(-\xi x)/(4\pi x)). \quad (34)$$

Результаты расчета плотности заряда в случае УУПЭ ЮОКП показаны на рисунке 3.

Для малых параметров ξ плотность заряда для УУПЭ ЮОКП похожа на плотность заряда в случае УУПЭ ОКП. Уже при $\xi = 0.1$ начинаются *осцилляции* из-за “соперничества” экранирующих и дальнедействующих эффектов. Более того, с увеличением ξ наблюдается промежуточная стадия. При $\xi = 20, 50, 100, \dots$ плотность заряда УУПЭ ЮОКП начинает напоминать плотность заряда для обычного потенциала Юкавы.

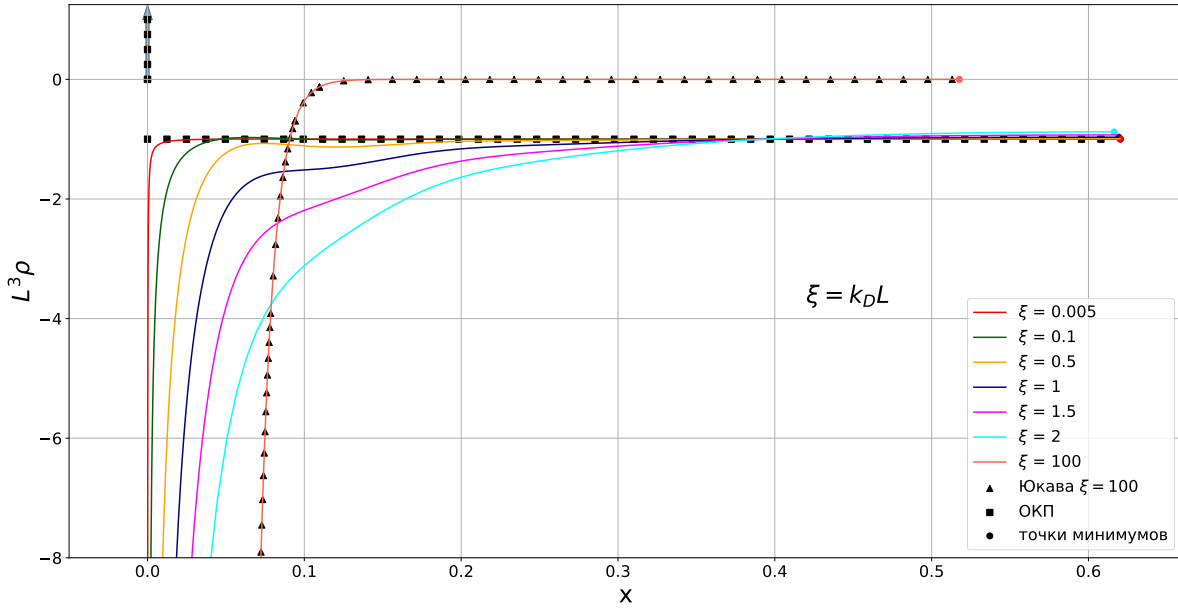


Рисунок 3. Плотность заряда, $L^3 \rho(x) = -Q_1 L^3 \Delta \psi(|\mathbf{x}|)/4\pi$, для единичного заряда, $Q_1 = 1$, в диапазоне $10^{-3} \leq \xi \leq 10^2$. Квадратиками отмечена плотность заряда для УУПЭ ОКП — сумма δ -функции и -1 (см. уравнение (33)), треугольниками — плотность для потенциала Юкавы при $\xi = 100$, которая совпадает с плотностью заряда УУПЭ ЮОКП при $\xi = 100$. При $\xi = 1, 1.5$ проявляются осцилляции плотности из-за учета дальнедействующих и экранирующих эффектов. δ -функция показана вертикальной стрелкой, исходящей из начала координат.

Далее численно проверяется электронейтральность сферической ячейки для одной частицы для широкого диапазона параметра экранирования $0.001 \leq \xi \leq 500$. Для этого мы численно рассчитываем полный заряд, который находится в сферической ячейке:

$$\frac{Q}{Q_1} = \int_0^{x_{\min}} 4\pi x^2 \rho(x) dx, \quad (35)$$

который предполагается равным нулю. Результаты расчета приведены в таблице 1.

Таким образом, полный заряд в сферической ячейке, создаваемый одной частицей единичного заряда Q_1 , с машинной точностью равен нулю, что подтверждает электронейтральность этой ячейки.

Таблица 1. Численная проверка электронейтральности сферической ячейки с одной частицей.

ξ	Q/Q_1
0.001	$0.0310 \cdot 10^{-8}$
0.1	$0.0003 \cdot 10^{-8}$
1	$0.0011 \cdot 10^{-8}$
2	$0.0015 \cdot 10^{-8}$
5	$0.0018 \cdot 10^{-8}$
50	$0.1252 \cdot 10^{-8}$
100	$0.5001 \cdot 10^{-8}$

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе был произведен вывод усредненного по углам потенциала Эвальда для юкавовской однокомпонентной плазмы. Было продемонстрировано, что полученный потенциал стремится к усредненному потенциалу Эвальда в случае классической плазмы в пре-

деле слабого экранирования и к потенциалу Юкавы в пределе сильного экранирования.

Мы рассчитали плотность заряда, соответствующую усредненному по углам потенциалу Эвальда, а также численно получили зависимость радиуса действия от параметра экранирования и показали электронейтральность сферической ячейки с одной частицей. Рассчитанная плотность заряда была верифицирована на двух известных пределах, а в переходной области наблюдались осцилляции плотности.

В работе полученный потенциал представлен в виде быстро сходящегося ряда по целочисленному вектору. В случае кулоновской плазмы усредненный по углам потенциал Эвальда имеет очень простую аналитическую форму вследствие сокращения рядов. На данный момент, нам не удалось получить аналогичную простую аналитическую форму для любого параметра экранирования в случае юкавовской плазмы. Тем не менее, полученный потенциал можно использовать в моделировании с помощью аппроксимаций численных кривых потенциала для необходимого параметра экранирования.

БЛАГОДАРНОСТИ

Данная работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС” (грант № 23-1-5-119-1). Авторы выражают благодарность Межведомственному суперкомпьютерному центру РАН и Центру коллективного пользования “Дальневосточный вычислительный ресурс” ИАПУ ДВО РАН за предоставленное вычислительное время.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Fortov V, Ivlev A, Khrapak S, Khrapak A and Morfill G 2005 *Physics Reports* **421** 1–103

2. Khrapak A G and Khrapak S A 2018 *Physics of Plasmas* **25** 034502
3. Robertson S, Gulbis A A S, Colwell J and Horányi M 2003 *Physics of Plasmas* **10** 3874–3880
4. Donkó Z and Hartmann P 2008 *Phys. Rev. E* **78** 026408
5. Salin G and Caillol J M 2003 *Physics of Plasmas* **10** 1220–1230
6. Hamaguchi S and Farouki R T 1994 *The Journal of Chemical Physics* **101** 9876–9884
7. Farouki R T and Hamaguchi S 1994 *The Journal of Chemical Physics* **101** 9885–9893
8. Yakub E and Ronchi C 2003 *The Journal of Chemical Physics* **119** 11556–11560
9. Demyanov G S and Levashov P R 2022 *Contributions to Plasma Physics* **62** e202200100
10. Demyanov G S and Levashov P R 2022 *Phys. Rev. E* **106** 015204
11. Demyanov G S and Levashov P R 2022 *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **55** 385202