

Усредненный по углам потенциал Эвальда для потенциала Юкавы: аналитическое выражение и сравнение с суммированием Эвальда

Г. С. Демьянов и П. Р. Левашов

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

E-mail: demyanovgs@jiht.ru

Статья поступила в редакцию 21 ноября 2025 г.

Аннотация. В работе получено явное аналитическое выражение для усредненного по углам потенциала Эвальда юкавовой однокомпонентной плазмы. В отличие от предыдущей работы, основанной на усреднении сумм Эвальда, где были получены громоздкие выражения, в данной работе используется альтернативный подход, при котором усреднение по углам выполняется до применения процедуры суммирования Эвальда. Такой метод позволяет получить компактную аналитическую формулу, корректную при произвольных значениях параметра экранирования потенциала Юкавы и непрерывно переходящую в известное выражение для кулоновской плазмы при бесконечно малом экранировании. Проведено сравнение с ранее полученными выражениями, показано их аналитическое тождество, которое подтверждено численным анализом.

1. ВВЕДЕНИЕ

Процедура усреднения потенциала Эвальда по направлениям была предложена в ряде работ как эффективный способ устранения анизотропии, неизбежно возникающей при использовании периодических граничных условий в кубической расчетной ячейке [1–5]. Такая анизотропия приводит к излишним вычислениям при моделировании изотропных плазменных систем, а именно, при учете дальнедействующих взаимодействий. Угловое усреднение позволяет заменить исходный анизотропный потенциал Эвальда короткодействующей сферически симметричной функцией, что существенно упрощает последующие вычисления [4]. Благодаря этим свойствам данный подход получил широкое распространение, в том числе в квантовом моделировании с интегралами по траекториям [6], и оказался особенно полезным в задачах с большим числом частиц [4].

Юкавовская однокомпонентная плазма (ЮОКП) представляет собой модельную систему, в которой взаимодействие частиц описывается экранированным кулоновским потенциалом [7]. В отличие от классической однокомпонентной плазмы (ОКП) [8], термодинамика которой полностью определяется параметром неидеальности, при описании ЮОКП также необходимо задавать параметр экранирования. Несмотря на затухающую форму потенциала Юкавы, влияние дальних взаимодействий остается существенным при малых значениях параметра экранирования, т.е. в области, близкой к кулоновскому пределу, и потому применение процедуры Эвальда остается необходимым, что подтверждается практическими расчетами [9, 10].

В предыдущей работе авторов [11] была предпринята попытка получить усредненный по углам потенциал Эвальда (УУПЭ) для ЮОКП по аналогии с кулоновским случаем [4], используя усреднение сумм Эвальда для ЮОКП. Хотя сам усредненный потенциал был получен в виде ряда, вывести компактное аналитическое выражение, подобное известной формуле для ОКП и удобное для прямого использования в расчетах энергии и дальнейшего применения, например, в квантовом случае [12], не удалось.

Данная работа также ставит задачу аналитически получить УУПЭ для ЮОКП, однако основана на дру-

гой идее, предложенной в [13, 14], и заключающейся в выполнении углового усреднения до применения процедуры суммирования Эвальда. Такой подход позволяет избежать появления сложных анизотропных слагаемых и существенно упрощает структуру конечного выражения. Таким образом, цель этой работы состоит в получении замкнутого аналитического выражения для усредненного по углам потенциала для ЮОКП при суммировании взаимодействий со всеми изображениями и демонстрации его эквивалентности ранее полученному УУПЭ для ЮОКП, который был представлен в [11] в виде ряда.

2. ЮКАВОВСКАЯ ОДНОКОМПОНЕНТНАЯ ПЛАЗМА

Рассмотрим систему N одинаковых точечных положительных зарядов Ze , помещенных в однородный компенсирующий фон. Частицы и фон находятся в кубической ячейке со стороной L и объемом $V = L^3$, на которую наложены периодические граничные условия. Далее такую систему будем называть юкавовой однокомпонентной плазмой (ЮОКП). В качестве характерного межчастичного масштаба используем радиус Вигнера-Зейтца:

$$r_a = L \left(\frac{4\pi N}{3} \right)^{-\frac{1}{3}}. \quad (1)$$

Состояние ЮОКП в термодинамическом равновесии задается двумя безразмерными параметрами. Первый параметр описывает экранирование и определяется величиной κ . Для удобства далее также будем пользоваться эквивалентным параметром

$$\xi = \kappa L, \quad (2)$$

который однозначно связан с κ . Второй параметр характеризует степень неидеальности системы:

$$\Gamma = \frac{(Ze)^2}{k_B T r_a}, \quad (3)$$

Он представляет собой отношение характерной кулоновской энергии взаимодействия двух частиц, разделенных расстоянием r_a , к тепловой энергии на частицу $k_B T$.

Парный потенциал в ЮОКП имеет вид потенциала Юкавы:

$$\phi(\mathbf{r}, \kappa) = \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}|}. \quad (4)$$

При использовании периодических граничных условий вклад всех изображений частиц суммируется по целочисленным векторам $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$, а влияние компенсирующего фона реализуется вычитанием нулевой моды Фурье-разложения парного потенциала (4). В результате потенциальная энергия ЮОКП может быть записана в следующей форме [7]:

$$U_{\text{ОСР}}(\mathbf{R}, \kappa) = U_{0,\text{ОСР}}(\kappa) + \frac{(Ze)^2}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \psi(\mathbf{r}_{ij}, \kappa), \quad (5)$$

где постоянное слагаемое

$$U_{0,\text{ОСР}}(\kappa) = \frac{(Ze)^2 N}{2} \lim_{r \rightarrow 0} \left(\psi(\mathbf{r}, \kappa) - \frac{1}{r} \right) \quad (6)$$

обеспечивает корректный учет взаимодействия частиц со своими же изображениями, а парный потенциал

$$\psi(\mathbf{r}, \kappa) = \sum_{\mathbf{n}} \phi(\mathbf{r} + \mathbf{n}L, \kappa) - \frac{\phi(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}, \kappa)}{V} \quad (7)$$

определен как сумма потенциала Юкавы по всем изображениям с учетом взаимодействия с фоном. Фурье-компонента потенциала Юкавы равна

$$\phi(\mathbf{k}, \kappa) = \frac{4\pi}{k^2 + \kappa^2}. \quad (8)$$

В пределе слабого экранирования $\kappa \rightarrow 0$ (или, эквивалентно, $\xi \rightarrow 0$) парный потенциал переходит в кулоновский:

$$\phi(\mathbf{r}, \kappa) \rightarrow \frac{1}{r}, \quad \kappa \rightarrow 0, \quad (9)$$

а Фурье-компонента принимает вид $4\pi/k^2$. Тогда периодический потенциал (7) и энергия (5) после применения к ним процедуры суммирования Эвальда могут быть использованы для описания классической ОКП [15]. Отметим, что ряд в выражении (7) при $\kappa > 0$ сходится абсолютно для всех значений $\mathbf{r} \neq \mathbf{n}L$ и сходится равномерно на любом компактном множестве, не содержащем точек $\mathbf{n}L$. Тем самым исчезает проблема условной сходимости, характерная для обычных кулоновских сумм.

Применим к потенциалу (7) процедуру суммирования Эвальда, аналогично работе [7]. Для этого можно добавить и вычесть вспомогательное гауссово экранирование зарядов, после чего исходная решетчатая сумма преобразуется в сумму двух быстро сходящихся рядов: по векторам прямой решетки $\psi_1(\mathbf{r}, \kappa)$ и по векторам обратной решетки $\psi_2(\mathbf{r}, \kappa)$:

$$\psi(\mathbf{r}, \kappa) = \psi_1(\mathbf{r}, \kappa) + \psi_2(\mathbf{r}, \kappa). \quad (10)$$

Перейдем к безразмерным переменным:

$$\mathbf{x} = \frac{\mathbf{r}}{L}, \quad \xi = \kappa L. \quad (11)$$

Явные выражения имеют вид [7]:

$$L\psi_1(\mathbf{x}) = \frac{\eta(x)}{x} \exp(-\xi x) -$$

$$- \frac{4\pi}{\xi^2} \left[1 - \frac{\exp(-\xi^2/4\pi)}{1 + \operatorname{erf}(\xi/2\sqrt{\pi})} \left(1 + \frac{\xi}{\pi} \right) \right] + \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} \frac{\eta(|\mathbf{x} - \mathbf{n}|)}{|\mathbf{x} - \mathbf{n}|} \exp(-\xi|\mathbf{x} - \mathbf{n}|), \quad (12)$$

$$L\psi_2(\mathbf{x}) = \frac{2A}{\sqrt{\pi}} \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} \cos(2\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}) \times \left[\frac{\pi \sqrt{\pi} \exp(-\pi n^2)}{\xi^2 + 4\pi^2 n^2} + \frac{\xi}{\xi^2 + 4\pi^2 n^2} \frac{F(\sqrt{\pi} n)}{n} \right], \quad (13)$$

где $\operatorname{erf}(x)$ — функция ошибок. Здесь $n = |\mathbf{n}|$, а функции и коэффициенты определены как

$$B = B(\xi) = \frac{1}{1 + \operatorname{erf}(\xi/2\sqrt{\pi})}, \quad (14)$$

$$A = A(\xi) = 2B \exp(-\xi^2/4\pi), \quad (15)$$

$$\eta(x) = B \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\pi} x - \frac{\xi}{2\sqrt{\pi}}\right), \quad (16)$$

где $\operatorname{erfc}(x)$ — дополнительная функция ошибок, а $F(x)$ — функция Доусона:

$$F(x) = e^{-x^2} \int_0^x e^{t^2} dt. \quad (17)$$

Переходя к пределу $\xi \rightarrow 0$, получаем восстановление стандартного потенциала Эвальда ОКП [8]:

$$\psi_1(\mathbf{x}) + \psi_2(\mathbf{x}) \xrightarrow{\xi \rightarrow 0} v(\mathbf{r}), \quad (18)$$

где $v(\mathbf{r})$ — потенциал Эвальда, включающий взаимодействие с фоном [8]. Соответственно, потенциальная энергия ОКП записывается следующим образом:

$$U_{\text{ОСР}}^E(\mathbf{R}) = U_{0,\text{ОСР}} + \frac{(Ze)^2}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N v(\mathbf{r}_{ij}), \quad (19)$$

где

$$U_{0,\text{ОСР}} = \frac{(Ze)^2 N}{2} \lim_{r \rightarrow 0} \left(v(\mathbf{r}) - \frac{1}{r} \right), \quad (20)$$

$$v(\mathbf{r}) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{n}} \frac{\operatorname{erfc}(\sqrt{\pi} |\mathbf{r}/L + \mathbf{n}|)}{|\mathbf{r}/L + \mathbf{n}|} + \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} \frac{\exp(-\pi^2 n^2 / \sqrt{\pi}^2)}{\pi n^2} \cos(2\pi \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}/L) - \frac{1}{L}. \quad (21)$$

Таким образом, выражения для ψ_1 и ψ_2 задают корректный потенциал Эвальда для ЮОКП при произвольном экранировании и непрерывно переходят к известным формулам ОКП при $\xi \rightarrow 0$.

3. УСРЕДНЕНИЕ ПО УГЛАМ ПОТЕНЦИАЛА ЭВАЛЬДА

Процедура усреднения потенциала Эвальда в случае кулоновской ОКП была произведена в работе [4]. Кратко напомним ее основные выводы. Усредненный

по углам потенциал Эвальда (УУПЭ) определяется следующим преобразованием:

$$v^a(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} v(\mathbf{r}) d\zeta, \quad (22)$$

где θ — азимутальный угол, а ζ — полярный, с помощью которого мы получаем сферически-симметричную функцию:

$$Lv^a(x) = \frac{\operatorname{erfc}(\sqrt{\pi}x)}{x} - 1 + \frac{1}{2\pi x} \times \sum_{n \neq 0} \frac{1}{n} \left[g(|n-x|) - g(|n+x|) + \frac{e^{-\pi n^2}}{\pi n^2} \sin(2\pi n x) \right], \quad (23)$$

где используется обозначение:

$$g(n) = e^{-\pi n^2} - \pi n \operatorname{erfc}(\sqrt{\pi}n). \quad (24)$$

После разложения УУПЭ (23) в ряд Тейлора при $x = 0$ оказывается, что почти все коэффициенты разложения равны нулю, и УУПЭ принимает простую форму:

$$\tilde{v}^a(r) = \frac{1}{r} + \frac{2U_{0,\text{ОСР}}}{N(Ze)^2} + \frac{2\pi r^2}{3V}. \quad (25)$$

Далее этот потенциал может быть сдвинут для равенства нулю в точке минимума r_m , а потенциальная энергия ОКП принимает следующий вид [4]:

$$\beta U^a(\mathbf{R}) = -\frac{3\Gamma}{20} N^{2/3} (N+5) + \frac{\Gamma}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j \in S(\mathbf{r}_i) \\ i \neq j}} r_a \tilde{\varphi}(r_{ij}), \quad (26)$$

где суммирование производится по шару объема $4\pi r_m^3/3 = L^3$ с центром в положении i -ой частицы. При этом сдвинутый УУПЭ имеет следующий вид:

$$\tilde{\varphi}(r) = \frac{1}{r} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{r}{r_m} \right) \left[\left(\frac{r}{r_m} \right)^2 - 3 \right] \right\}, \quad r < r_m. \quad (27)$$

Таким образом, ключевая идея вывода УУПЭ в случае ОКП состоит в обнулении старших коэффициентов разложения УУПЭ. Рассмотрим далее аналогичную процедуру для УУПЭ в случае взаимодействия с юкавовским потенциалом.

4. ЗАМКНУТАЯ АНАЛИТИЧЕСКАЯ ФОРМА УУПЭ ДЛЯ ЮОКП

Для получения усредненного по углам потенциала Эвальда в юкавовской однокомпонентной плазме выполним усреднение парного потенциала $\psi(\mathbf{x}_{ij})$ по всем углам:

$$\psi^a(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} \psi(\mathbf{r}) d\zeta. \quad (28)$$

Эта процедура была проделана в работе [11] и было получено следующее выражение для УУПЭ ЮОКП:

$$L\psi^a(x) = \frac{\eta(x)}{x} \exp(-\xi x) - \frac{4\pi}{\xi^2} \left[1 - \frac{\exp(-\xi^2/4\pi)}{1 + \operatorname{erf}(\xi/2\sqrt{\pi})} \left(1 + \frac{\xi}{\pi} \right) \right] +$$

$$+ \sum_{n \neq 0} \left(B \frac{f(|n-x|) - f(|n+x|)}{2nx\xi} + \frac{2A \sin(2\pi nx)}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{2\pi nx} \right) \times \left[\frac{e^{-\pi n^2} \pi \sqrt{\pi}}{\xi^2 + 4\pi^2 n^2} + \frac{\xi}{\xi^2 + 4\pi^2 n^2} \frac{1}{n} F(\sqrt{\pi}n) \right]. \quad (29)$$

Важно отметить, что предельный переход $\xi \rightarrow 0$ приводит к восстановлению усредненного по углам потенциала Эвальда для кулоновской ОКП в виде (23). Однако дальнейшее разложение выражения (23) в ряд при $x = 0$ приводит к чрезмерно сложным выражениям для коэффициентов разложения Тейлора, поэтому не удастся получить аналогичную краткую аналитическую форму записи УУПЭ ЮОКП, как в случае ОКП (25).

Оказывается, что в случае ЮОКП получить УУПЭ можно намного проще, не производя процедуру Эвальда. Это было проиллюстрировано в работе 1983 года Angelie и Gilles [14], где описывается намного более простой и элегантный способ вывода УУПЭ (25) в случае ОКП. При этом данная работа ссылается на неопубликованный отчет Paris 1969 года [13], в котором, видимо, впервые была произведена подобная процедура вывода УУПЭ. Далее мы приведем эту процедуру.

Применим процедуру усреднения потенциала по углам сразу к (7), отделив не требующий усреднения вклад при $\mathbf{n} = \mathbf{0}$:

$$\psi^a(r, \kappa) = \phi(r, \kappa) + \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} \int_{-1}^1 \frac{d(\cos \theta)}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\zeta \phi(\mathbf{r} + \mathbf{n}L, \kappa) - \frac{4\pi}{V\kappa^2}. \quad (30)$$

Теперь вычислим среднее каждой компоненты ряда:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\zeta \phi(\mathbf{r} + \mathbf{n}L, \kappa) &= \\ &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \frac{\exp(-\kappa \sqrt{r^2 + L^2 n^2 + 2rnL \cos \theta})}{\sqrt{r^2 + L^2 n^2 + 2rnL \cos \theta}} = \\ &= \frac{\sinh(\kappa r)}{\kappa r} \phi(\mathbf{n}L, \kappa). \end{aligned} \quad (31)$$

При взятии интеграла было учтено, что $r < nL$. Таким образом, получаем следующее выражение для усредненного по углам потенциала:

$$\psi^a(r, \kappa) = \phi(r, \kappa) + \frac{\sinh(\kappa r)}{\kappa r} \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} \phi(\mathbf{n}L, \kappa) - \frac{\phi(\mathbf{0}, \kappa)}{V}, \quad (32)$$

где

$$\phi(\mathbf{0}, \kappa) = \frac{4\pi}{\kappa^2}. \quad (33)$$

Рассматривая выражение (6) для постоянного слагаемого в энергии, можно выразить ряд по всем целочисленным векторам:

$$U_{\text{ОСР},0}(\kappa) = \frac{(Ze)^2 N}{2} \left[\sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} \phi(\mathbf{n}L, \kappa) - \frac{4\pi}{V\kappa^2} \right], \quad (34)$$

откуда

$$\sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} \phi(\mathbf{n}L, \kappa) = \frac{2U_{\text{ОСР},0}(\kappa)}{(Ze)^2 N} + \frac{4\pi}{V\kappa^2}. \quad (35)$$

Подставив (34) в (32), получаем УУПЭ в случае ЮОКП:

$$\psi^a(r, \kappa) = \frac{e^{-\kappa r}}{r} + \frac{2U_{\text{ОСР},0}(\kappa) \sinh(\kappa r)}{(Ze)^2 N} + \frac{4\pi}{V\kappa^2} \left[\frac{\sinh(\kappa r)}{\kappa r} - 1 \right], \quad (36)$$

которая может быть использована далее в расчетах на прямую. Отметим, что, как и в случае кулоновской системы (см. детали в [3, 4], УУПЭ ЮОКП должен быть усечен в точке минимума, положение которой в зависимости от параметра ξ исследовалось в предыдущей работе [11].

Сложная функциональная зависимость $\psi^a(r, \kappa)$ в (36) показывает, что путь вывода, который можно проделать с кулоновским потенциалом, обречен на провал в случае потенциала Юкавы, так как пришлось бы угадать из коэффициентов разложения функциональную форму в виде (36). Вычисляя теперь предел при $\kappa \rightarrow 0$, получаем формулу (25) для ОКП:

$$\psi^a(r, \kappa \rightarrow 0) = \frac{1}{r} + \frac{2U_{\text{ОСР},0}(0)}{(Ze)^2 N} + \frac{2\pi r^2}{3V} = \tilde{v}^a(r). \quad (37)$$

Как видно, такой способ вывода УУПЭ для ОКП не только намного проще в сравнении с использованным в [4], но и приводит к выражению для УУПЭ в случае потенциала Юкавы.

Отметим, что формула (36) была приведена в работе [16], посвященной исследованию распределения электрических микрополей в электрон-ионной плазме. Тем не менее, в данной работе рассматривается однокомпонентная система с юкавовским потенциалом взаимодействия. Далее мы иллюстрируем, что УУПЭ (29), полученный с помощью прямого усреднения потенциала Эвальда, совпадает с формулой (36), полученной без использования суммирования по Эвальду.

Для подтверждения справедливости формулы (36), мы построим графики УУПЭ для ЮОКП с различными параметрами экранирования с помощью этого выражения и его представления после применения процедуры Эвальда (29). Результаты расчетов представлены на рисунке 1. Оказалось, что при любых значениях параметра экранирования при $r < L$ эти функции совпали с численной точностью. При этом снова отметим, что физический смысл эти функции имеют в области $0 < r \leq r_{\min}$, где $r_{\min}$ — точка минимума УУПЭ ЮОКП [11]. Таким образом, мы подтверждаем, что в действительности удалось просуммировать ряды в формуле (29), результатом чего является формула (36).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе получено явное аналитическое выражение для усредненного по углам потенциала Эвальда юкавовской однокомпонентной плазмы. Показано, что прямое усреднение по углам потенциала Юкавы приводит к компактной форме, существенно упрощающей использование по сравнению с исходным представлением в виде сумм Эвальда.

Проведено сопоставление полученной формулы с ранее известным выражением, основанным на усреднении сумм Эвальда по направлениям. Установлено полное совпадение обоих подходов после аналитического приведения, что подтверждается также численной про-

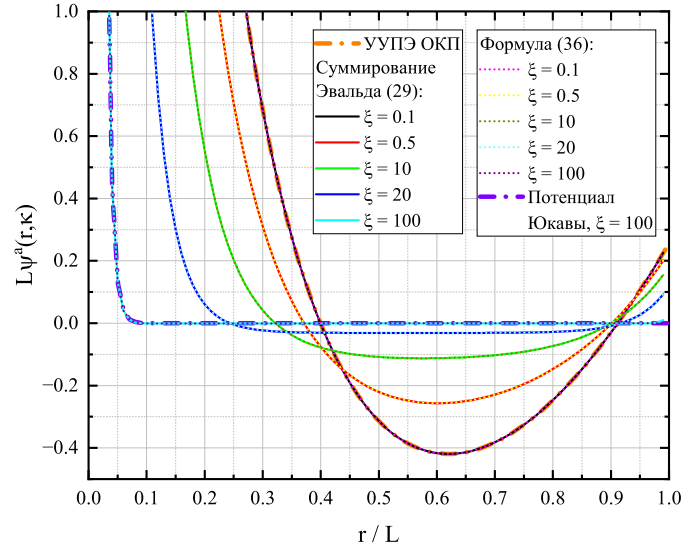


Рисунок 1. Сравнение усредненного по углам потенциала Эвальда, вычисленного путем прямого численного суммирования рядов (29) (сплошные линии), с аналитическим выражением (36) (пунктир). Кривые приведены для различных параметров экранирования ξ . Видно, что аналитическая формула полностью воспроизводит численное суммирование во всем диапазоне r/L , а расхождение отсутствует при любых значениях ξ , что подтверждает корректность вывода полученного выражения.

веркой в широком диапазоне значений параметра экранирования ξ .

Исследован кулоновский предел, а именно показано, что при $\xi \rightarrow 0$ усредненный потенциал Эвальда ЮОКП непрерывно переходит в усредненный потенциал Эвальда кулоновской однокомпонентной плазмы. Произведенный вывод УУПЭ для ЮОКП позволяет применять данное выражение в расчетах термодинамических и структурных характеристик экранированных плазменных систем.

БЛАГОДАРНОСТИ

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Caillol J M 1999 *The Journal of Chemical Physics* **111** 6538–6547
2. Yakub E and Ronchi C 2003 *The Journal of Chemical Physics* **119** 11556–11560
3. Demyanov G S and Levashov P R 2022 *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **55** 385202
4. Demyanov G S and Levashov P R 2022 *Phys. Rev. E* **106** 015204
5. Jha P K, Sknepnek R, Guerrero-García G I and Olvera de la Cruz M 2010 *Journal of Chemical Theory and Computation* **6** 3058–3065
6. Dornheim T, Chuna T M, Bellenbaum H M, Moldabekov Z A, Tolias P and Vorberger J 2025 *Phys. Rev. E* **112** 035203

7. Hamaguchi S and Farouki R T 1994 *The Journal of Chemical Physics* **101** 9876–9884
8. Brush S G, Sahlin H L and Teller E 1966 *The Journal of Chemical Physics* **45** 2102–2118
9. Salin G and Caillol J M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 065002
10. Salin G and Caillol J M 2000 *The Journal of Chemical Physics* **113** 10459–10463
11. Онегин А С, Демьянов Г С и Левашов П Р 2023 *Вестник ОИВТ РАН* **11** 43–49
12. Demyanov G S and Levashov P R 2022 *Contributions to Plasma Physics* **62** e202200100
13. Paris D 1969 Rapport CEA-DAM *Technical Report* D0.0048 (Paris: Commissariat à l'Énergie Atomique)
14. Angelie A, Gilles D and CEA Centre d'Etudes de Limeil 1983 *Colloquium on collisions and radiation* 30 p.
15. Hansen J P 1973 *Phys. Rev. A* **8** 3096–3109
16. Potekhin A Y, Chabrier G and Gilles D 2002 *Phys. Rev. E* **65** 036412