

# Моделирование неидеальной плазмы методом молекулярной динамики с волновыми пакетами

Морозов И.В., Валуев И.А.

*ОИВТ РАН*

Метод молекулярно-динамического (МД) моделирования широко применяется для изучения равновесной и неравновесной неидеальной плазмы [1]. В то же время применение МД ограничено областью невырожденной и полностью ионизованной плазмы. Зачастую такая модель является слишком грубой для описания реальных экспериментальных условий. Одна из возможностей улучшить метод МД, не потеряв его эффективности, рассматривать электроны в виде гауссовских волновых пакетов. В этом случае отпадает проблема выбора псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия, улучшается точность моделирования элементарных актов соударений частиц, а при использовании антисимметризованных волновых пакетов добавляется учет обменного взаимодействия. Данный метод получил название молекулярной динамики с волновыми пакетами (МДВП, Wave Packet MD).

В настоящее время для МДВП разработана теоретическая база [2], проведены расчеты методом МД без антисимметризации [3] и методом Монте-Карло с антисимметризацией [4]. Однако, имеющиеся реализации метода имеют два существенных недостатка: большое время расчета при учете антисимметризации (невозможно реализовать динамику необходимого числа частиц) и расплывание свободных волновых пакетов. В настоящем докладе излагается опыт создания эффективного алгоритма МДВП, а также предлагаются пути решения проблемы расплывания волновых пакетов. Приведены расчеты динамической проводимости неидеальной плазмы. Ожидается, что новый метод позволит уточнить результаты, полученные ранее методом МД, а также перейти к более высоким концентрациям электронов (вблизи границы вырождения), где применение классической МД невозможно.

1. И.В. Морозов, Г.Э. Норман // ЖЭТФ, 2005, т. **127**, вып. 2, с. 412.
2. M. Knaup, P.-G. Reinhard, C. Toepffer // Contrib. Plasma Phys., 1999, v. **39**, p. 57.
3. M. Knaup, P.G. Reinhard, C. Toepffer, G. Zwicknagel // J. Phys. A, 2003, v. **36**, p. 6165.
4. G. Zwicknagel, T. Pschiwul // J. Phys. A, 2006, v. **39**, p. 4359.