Влияние обрезания кулоновской особенности на свойства систем заряженных частиц

А.С. Ларкин

Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва, Россия, alexanderlarkin@rambler.ru

При численном моделировании систем заряженных частиц технические трудности вызывает сингулярность в кулоновском потенциале межчастичного взаимодействия. Это приводит к необходимости замены истинного взаимодействия искусственным конечным потенциалом. Для этого или обрезают кулоновский потенциал на некоторой глубине, или используют различные потенциалы вроде потенциалов с мягкой сердцевиной [1]. В то же время в [2] было показано, что при учёте квантовых эффектов такой переход может приводить к ошибочным результатам из-за различия в одночастичных спектрах.

В данной работе изучено поведение заряженной квантовой частицы в электрическом поле неподвижного точечного заряда для кулоновского потенциала мягкой сердцевиной (SCC):

 , (1)

 где *e* — электрический заряд, *a* — характерное расстояние, на котором "обрезается" потенциал. Численное моделирование было выполнено с помощью разработанного авторами метода Монте-Карло для функции Вигнера в каноническом ансамбле. Зависимость средней энергии *<H>* от обратной температуры *β* = *1/kT* для частицы в одномерном потенциале (1) представлена на рисунке слева. Видно, что низкотемпературное поведение системы сильно зависит от величины параметра *a*. Зависимость энергии основного состояния *E*0 от параметра *a* представлена на рисунке справа. *E*0совпадает с энергией основного состояния частицы в кулоновском потенциале [3] только при выборе *a* примерно равным боровскому радиусу *a*0.

**

Литература

1. Richard L. Hall, Nasser Saad, Sen, K.D. and Hakan Ciftci (2009), Phys. Rev. A, 2009, 80, 032507.
2. Шпатаковская Г.В., УФН, 2012, 182, 457-494.
3. Guillermo Palma, Ulrich Raff , Canadian Journal of Physics, 2006, 84, 787-800.