

Учет квантовых эффектов ядер в жидкости методом интегралов по траекториям

Н.Д. Кондратюк, Г.Э. Норман, В.В. Стегайлов

Объединённый институт высоких температур РАН

Учет квантовых свойств ядер в модели может играть ключевую роль в предсказании уравнения состояния и транспортных свойств вещества. Примерами подобных систем являются вода и жидкий водород при низких температурах. В данных случаях поведение атомов водорода имеет квантовый характер и не может быть описано средствами классической молекулярной динамики [1-3]. Авторы данной работы также встретили ряд сложностей с воспроизведением свойств жидких углеводородов [4-6].

Метод интегралов по траекториям, основанный на идеях Фейнмана, позволяет учесть квантовую природу ядер в модели. В докладе будут рассмотрены основные подходы, используемые для моделирования квантовых свойств подобных систем, а также представлены первые результаты по верификации реализации в программном пакете LAMMPS на примере жидкой воды (рис. 1). В работе рассчитаны квантовые радиальные функции распределения (рис. 2) и представлена зависимость термодинамических свойств от детализации квантовой модели. Также проведено сравнение с результатами, полученными с использованием программного пакета i-PI.

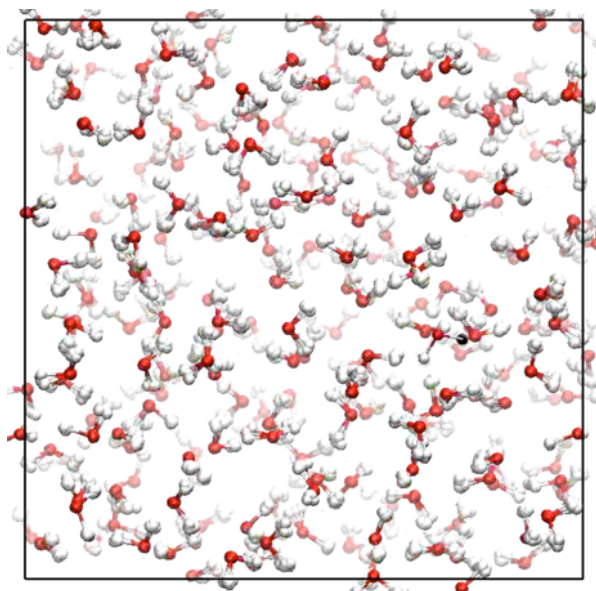


Рис. 1. Расчетная ячейка воды в модели, учитывающей квантовые свойства ядер.

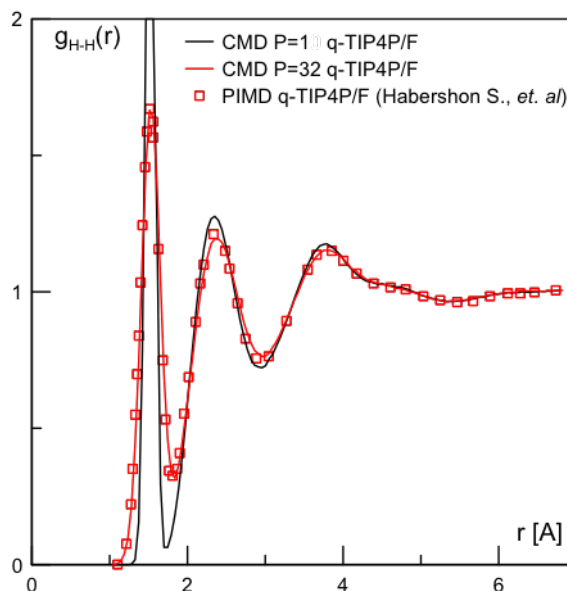


Рис. 2. Радиальная функция распределения для атомов водорода. При учете квантовых поправок (красная линия) атомы водорода более «размыты».

Литература

1. *Tuckerman M.* Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation. Oxford: Oxford University Press, 2010. 696 p.
2. *Habershon S. [et al.]* Ring-polymer molecular dynamics: quantum effects in chemical dynamics from classical trajectories in an extended phase space. // *Annu. Rev. Phys. Chem.* 2013. V. 64. P. 387.
3. *Ceriotti M. [et. al.]* Nuclear Quantum Effects in Water and Aqueous Systems: Experiment, Theory, and Current Challenges // *Chem. Rev.* 2016. V.116(13). P. 7529.
4. *Кондратюк Н.Д., Норман Г.Э., Стегайлов В.В.* Микроскопические механизмы диффузии высших алканов // *Высокомолекулярные соединения. Серия А.* 2016. Т. 58(5). С. 519.
5. *Kondratyuk N.D., Norman G.E. and Stegailov V.V.* Self-consistent molecular dynamics calculation of diffusion in higher n-alkanes // *J. Chem. Phys.* 2016. V. 145. P. 204504.

6. *Kondratyuk N.D., Norman G.E. and Stegailov V.V.* Rheology of liquid n-triacontane. Molecular dynamics simulation // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2016. V. 774. P. 012039.
7. *Kondratyuk N.D., Lankin A.V., Norman G.E. and Stegailov V.V.* Relaxation and transport properties of liquid n-triacontane // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2015. V. 653. P. 012107.