

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
НАУКИ ОБЪЕДИНЁННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР РАН

На правах рукописи

УДК xxx.xxx

Ларкин Александр Сергеевич

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
КУЛОНОВСКИХ СИСТЕМ ЧАСТИЦ В
ВИГНЕРОВСКОЙ ФОРМУЛИРОВКЕ КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКИ**

Специальность 01.04.08 —

«Физика плазмы»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

д. ф.-м. н.

Филинов Владимир Сергеевич

Москва — 2018

Оглавление

	Стр.
Введение	3
Обзор литературы	9
Интегралы по траекториям	10
Численные методы РИМС	12
Вигнеровский подход	16
Глава 1. Функция Вигнера как интеграл по путям	19
1.1 Функция Вигнера в равновесной термодинамике	20
1.2 Представление функции Вигнера в виде интеграла по путям	22
1.3 «Одноимпульсная» функция Вигнера	27
1.4 Линейное и гармоническое приближение	31
1.5 Парный псевдопотенциал для обменного взаимодействия	35
1.5.1 Идеальный газ	35
1.5.2 Учёт взаимодействия	44
Глава 2. Численные методы	47
2.1 Методы Монте Карло	47
2.1.1 Алгоритм Метрополиса-Гастингса	50
2.2 Метод SMPИМС	52
2.2.1 Вычисление средних значений операторов и функций распределения	58
2.2.2 Периодические граничные условия	60
2.2.3 Подбор параметров и сходимость	62
2.2.4 Программная реализация	64
2.3 Методы LAPИМС и NAPIМС	65
2.3.1 Вычисление физических величин и распределений	70
2.3.2 Подбор параметров и сходимость	72
2.3.3 Программная реализация	73
Глава 3. Тестовые расчёты	74

3.1	Одна частица во внешнем поле	74
3.1.1	Одномерный потенциал V_{2-4}	75
3.1.2	Одномерный потенциал V_{3-4}	80
3.1.3	Одномерный потенциал V_{SCC}	84
3.1.4	Трёхмерный потенциал V_{2-4}	88
3.2	Идеальный фермионный газ	91
3.2.1	Проверка метода SMPIMC	91
3.2.2	Проверка обменного псевдопотенциала	95
Глава 4. Численное моделирование кулоновских систем		98
4.1	Двухкомпонентные кулоновские системы	98
4.2	Функции распределения по импульсам	100
4.3	Внутренняя энергия и давление	103
4.4	Парные корреляционные функции	108
Заключение		111
Список сокращений и условных обозначений		113
Словарь терминов		114

Введение

Актуальность темы. Знание свойств веществ при высоких температурах и давлениях необходимо при изучении процессов, протекающих в ударных волнах, недрах звёзд, атмосферах планет-гигантов и других космических объектах. Кроме того, такие экстремальные состояния могут возникать при ядерных взрывах и в экспериментах по ударному сжатию. Для предсказания поведения материалов в подобных условиях нужно знать их уравнения состояния, структуру и транспортные свойства. Особый интерес представляют пороговые энергии и константы скоростей химических и ядерных реакций, необходимые при изучении процессов горения, детонации, термоядерного синтеза при высоких давлениях.

Кроме того, электроны в металлах, электроны и дырки в полупроводниках даже при «нормальных» температурах и давлениях могут демонстрировать поведение, в значительной степени подобное плазменным средам в экстремальных состояниях. Изучение их свойств и, в частности, электропроводности, играет огромную роль в физике твёрдого тела и электронике.

Однако при исследованиях веществ в экстремальных условиях возникают определённые трудности. Во-первых, эксперимент в этом случае является сложным и дорогостоящим мероприятием, требующим применения мощных лазеров, взрывов, ускорителей частиц; зачастую он вовсе неосуществим при современном развитии науки и техники. Во-вторых, такие системы в большинстве случаев являются квантовыми и сильнонеидеальными, так что различные аналитические подходы и модели, основанные на теории возмущений, неприменимы в виду отсутствия физических параметров малости. Поэтому при исследовании таких систем на первое место выходит численное моделирование, позволяющее проводить расчёты различных термодинамических и кинетических свойств кулоновских систем, исходя из первых принципов.

Одними из наиболее мощных численных подходов к моделированию сильнонеидеальных квантовых систем являются методы Монте Карло, основанные на интегралах по траекториям (методы РИМС). Стандартные подходы используют представление статистической суммы и термодинамических величин в виде интегралов по путям в координатном пространстве. Однако, эти подходы не

позволяют проводить вычисления средних значений произвольных квантовых операторов, зависящих от импульсов и координат частиц. Тем более эти методы не могут быть использованы для расчёта кинетических и транспортных свойств вещества. Помимо этого, при моделировании вырожденных плазменных сред стандартными методами РМС возникает известная уже на протяжении нескольких десятилетий «фермионная проблема знака», сильно затрудняющая численный расчёт.

Таким образом, разработка численных методов РМС, позволяющих рассчитывать как термодинамические, так и кинетические свойства сильнонеидеальных квантовых кулоновских систем, является вполне актуальной.

Целью данной работы является разработка новых численных методов, позволяющих рассчитывать как термодинамические, так и кинетические свойства сильнонеидеальных кулоновских систем частиц, подчиняющихся статистике Ферми-Дирака.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Получить представление функции Вигнера для нерелятивистской системы заряженных частиц в условиях термодинамического равновесия, пригодное для непосредственных численных расчётов.
2. Найти способ для преодоления «фермионной проблемы знака» при расчёте равновесной функции Вигнера.
3. Разработать численные методы Монте-Карло, позволяющие рассчитывать термодинамические величины, средние значения квантовых операторов, парные корреляционные функции, а также функции распределения по импульсам для сильнонеидеальных квантовых многочастичных фермионных систем.
4. Реализовать разработанные численные методы в виде программного кода и провести ряд тестовых расчётов.
5. Провести расчёт термодинамических и кинетических свойств водородной плазмы в условиях сильной неидеальности ($\Gamma \geq 1$) и умеренного вырождения ($\chi_e \leq 10$) и сопоставить результаты с имеющимися в литературе данными.

6. Провести аналогичные расчёты для модели электрон-дырочной плазмы в полупроводниках и изучить влияние отношения массы дырки к массе электрона на функции распределения по импульсам.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Представление функции Вигнера для (N, V, T) -ансамбля в виде преобразования Фурье от матрицы плотности, выраженной в виде интеграла по траекториям.
2. Явные выражения для функции Вигнера в виде интеграла по траекториям в «линейном» и «гармоническом» приближениях и их границы применимости.
3. Эффективный псевдопотенциал в фазовом пространстве, описывающий обменное взаимодействие между бозонами.
4. Эффективный псевдопотенциал в фазовом пространстве, реализующий принцип Паули для фермионов при умеренном вырождении.
5. Справедливость распределения Ферми при описании водородной плазмы в широкой области состояний.
6. Отличие асимптотического поведения электронного распределения по импульсу в водородной плазме от фермиевского в условиях образования связанных состояний.
7. Отличие функций распределения по импульсам электронов и дырок от распределений Ферми в электрон-дырочной плазме при отношении m_h/m_e порядка нескольких единиц.
8. Аппроксимации асимптотики функций распределения по импульсам в электрон-дырочной плазме в виде суммы распределения Ферми и функций a/p^8 и $a/p^8 e^{-bp^2}$

Научная новизна:

1. Впервые было получено представление функции Вигнера для канонического (N, V, T) -ансамбля в виде интеграла по траекториям.
2. Впервые эффекты статистики Ферми удалось учесть с помощью парного псевдопотенциала в фазовом пространстве, реализующего принцип Паули. Это позволяет в ряде случаев избежать «фермионной проблемы знака» при расчёте термодинамических свойств вырожденных систем.

3. Впервые для учёта эффектов статистики Бозе-Эйнштейна был предложен парный псевдопотенциал в фазовом пространстве, реализующий эффективное притяжение тождественных бозонов.
4. Были разработаны новые квантовые методы Монте-Карло, позволяющие рассчитывать для неидеальных многочастичных систем фермионов средние значения произвольных квантовых операторов, парные корреляционные функции и функции распределения по импульсам.
5. Проведён анализ влияния квантовых эффектов на функции распределения по импульсам протонов и электронов в сильнонеидеальной водородной плазме с умеренным вырождением ($0.4 \leq \Gamma \leq 2.0$, $0.3 \leq \chi_e \leq 5.0$).
6. Впервые исследовано влияние квантовых эффектов на функции распределения по импульсам электронов и дырок в модели электрон-дырочной плазмы при изменении отношения отношения массы дырки к массе электрона.

Научная и практическая значимость

1. Полученное в работе представление функции Вигнера в виде интеграла по траекториям может быть полезным как для численного моделирования, так и для аналитического исследования функции Вигнера в квазиклассическом пределе и её асимптотического поведения.
2. Предложенный в работе обменный псевдопотенциал позволяет в ряде случаев избежать «фермионной проблемы знака» и более эффективно исследовать сильнонеидеальные вырожденные фермионные системы.
3. Учёт обменного взаимодействия бозонов и фермионов в виде псевдопотенциалов позволяет существенно сократить время расчёта по сравнению с известными методами (RPIMC, DPIMC, SPIMC, PB-PIMC) в условиях слабого и умеренного вырождения.
4. В работе детально описаны численные методы SMPIMC, LAPIMC и NAPIMC, подбор технических параметров расчёта и влияние этих параметров на результат. Эта информация может быть полезной при проведении расчётов указанными методами, а также при усовершенствовании этих методов.
5. В работе были рассчитаны энергия, давление и парные корреляционные функции в сильнонеидеальной водородной плазме при $0.4 \leq \Gamma \leq 2.0$, $0.3 \leq \chi_e \leq 5.0$. Эти данные необходимы для построения уравнения со-

стояния и изучения структуры водородной плазмы в указанной области состояний и могут быть использованы для проверки других независимых расчётов.

6. В работе были исследованы равновесные функции распределения по импульсам в сильнонеидеальных двухкомпонентных кулоновских системах. Эти данные необходимы для расчёта пороговых энергий и констант скоростей реакций в плазменных средах, что необходимо при изучении процессов горения, детонации и ядерного синтеза при высоких давлениях.

Степень достоверности полученных результатов обеспечивается:

1. Соответствием результатов тестовых расчётов формальных термодинамических свойств одночастичных систем с результатами численного решения исходных уравнений квантовой механики.
2. Качественным и количественным согласием результатов расчёта энергии, давления и парных корреляционных функций в водородной плазме с результатами, полученными другими авторами.
3. Качественным согласием результатов расчёта функций распределения по импульсам в водородной плазме с результатами, полученными другими авторами для слабонеидеальной плазмы методами теории возмущений.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на II Всероссийской конференции «Современные проблемы физики плазмы и физической электроники» (Россия, Махачкала, 2015), XLII Международной Звенигородской конференции по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу (Россия, Звенигород, 2015), Scientific-Coordination Workshop on «Non-Ideal Plasma Physics» (Russia, Moscow, 2015), 15th International Conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas (Kazakhstan, Almaty, 2015), XLIII Международной Звенигородской конференции по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу (Россия, Звенигород, 2016), 2nd International Conference and Exhibition on Mesoscopic and Condensed Matter Physics (USA, Chicago, 2016), 59-й научной конференции МФТИ (Россия, Москва, 2016), Scientific-Coordination Session on «Non-Ideal Plasma Physics» (Russia, Moscow, 2016), XXXI International Conference on Equations of State for Matter (Russia, Elbrus, 2016), XLIV Международной Звенигородской конференции по физике плазмы

и управляемому термоядерному синтезу (Россия, Звенигород, 2017), Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Russia, Elbrus, 2017), Strongly Coupled Coulomb Systems (Germany, Kiel, 2017), Scientific-Coordination Session on «Non-Ideal Plasma Physics» (Russia, Moscow, 2017).

Личный вклад. Автор принимал активное участие в разработке формализма и численных методов, описанных в работе. Представление функции Вигнера в виде интеграла по траекториям было получено автором лично. «Линейное» и «гармоническое» приближение для функции Вигнера были разработаны при непосредственном участии автора. «Одноимпульсный» подход к функции Вигнера был предложен и развит автором лично. Выражение для эффективного обменного псевдопотенциала в фазовом пространстве было получено при непосредственном участии автора. Численный метод SMPIMC был разработан, программно реализован и протестирован автором лично. Численный метод NAPIMC был разработан, программно реализован и протестирован автором лично. Численный метод LAPIMC был разработан при участии автора. Расчёты термодинамических величин, парных корреляционных функций и функций распределения по импульсам в водородной и электрон-дырочной плазме методами SMPIMC и NAPIMC были проведены и обработаны автором лично. Автор принимал активное участие в интерпретации результатов, полученных разработанными численными методами.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 9 печатных изданиях [1–9], рекомендованных ВАК.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 114 страниц с 32 рисунками и 4 таблицами. Список литературы содержит 55 наименований.

Обзор литературы

Обзор литературы состоит из трёх разделов.

В первом разделе кратко рассматривается задача расчёта термодинамических свойств квантового (N, V, T) -ансамбля и возникающие при этом трудности, связанные с некоммутативностью операторов кинетической и потенциальной энергии. Затем кратко даётся фейнмановская формулировка квантовой механики через интегралы по траекториям и объясняется её основная идея. В конце раздела приводится представление статистической суммы для квантового (N, V, T) -ансамбля в виде интеграла по траекториям и его физический смысл.

Во втором разделе рассматриваются численные методы РИМС, основанные на интегралах по траекториям. Прежде всего кратко излагается суть процедуры Монте Карло и её приложение к расчёту квантовой статистической суммы с помощью интегралов по траекториям. Затем обсуждается «фермионная проблема знака», являющаяся одним из главных препятствий при численном моделировании систем, содержащих вырожденные фермионы. Наконец, даётся краткий обзор существующих численных методов РИМС для расчёта термодинамических свойств неидеальных фермионных систем, рассматриваются их возможности и недостатки.

В третьем разделе кратко рассматривается вигнеровская формулировка квантовой механики и её преимущества в приложениях квантовой статистики. Прежде всего даётся определение функции Вигнера и раскрывается её смысл как квантового аналога классического распределения в фазовом (p, q) -пространстве. Затем приводится общее интегро-дифференциальное уравнение, описывающее эволюцию функции Вигнера во времени и являющееся аналогом классического уравнения Лиувилля. В конце раздела приводится беглый обзор приложений вигнеровского формализма к задачам квантовой механики и статистики.

Интегралы по траекториям

Термодинамическое состояние квантовомеханической системы, состоящей из частиц, в общем случае описывается статистическим оператором $\hat{\rho}$. В данной работе рассматривается канонический ансамбль с фиксированным числом частиц N , объёмом V и температурой T . В этом случае статистический оператор имеет вид:

$$\hat{\rho} = Z(N, V, T)^{-1} e^{-\beta \hat{H}}, \quad Z(N, V, T) = \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \right), \quad (1)$$

где нормировочный множитель $Z(N, V, T)$ называется статистической суммой, $\beta = 1/kT$ — величина, обратная к температуре. Все равновесные термодинамические величины (давление, энергия, теплоёмкость, сжимаемость, химические потенциалы и т.д.) могут быть получены непосредственно из статистической суммы взятием частных производных по N , V и T [10]. Таким образом, возникает задача о вычислении статистической суммы многочастичной системы.

В общем случае спектр собственных значений гамильтониана неизвестен, поэтому статистическая сумма не может быть вычислена как сумма по спектру собственных энергий. Кроме того, гамильтониан может содержать некоммутирующие между собой слагаемые, что затрудняет его разделение на кинетические и потенциальные части. Преодолеть эти трудности можно, используя вместо операторной формулировки квантовой механики формулировку с помощью интегралов по траекториям. Впервые понятие интеграла по траекториям было введено Винером [11] в 1923 году для описания броуновского движения частиц. В конце 1940-х Фейнман переформулировал квантовую механику, используя интегралы по траекториям вместо операторов, действующих на векторы абстрактного гильбертова пространства [12]. Основным преимуществом фейнмановской формулировки является её наглядность и прямая связь с понятиями классической механики. Например, амплитуда перехода нерелятивистской одночастичной системы из состояния с координатами q_A в состояние с координатами q_B за время T даётся следующим выражением:

$$\langle q_B | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} T} | q_A \rangle = \int_{q(0)=q_A, q(T)=q_B} Dq(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T L(q, \dot{q}, t) dt \right\}, \quad (2)$$

где \hat{H} и $L(q, \dot{q}, T)$ — гамильтониан и лагранжиан системы соответственно, а функциональный интеграл $Dq(t)$ берётся по всевозможным непрерывным траекториям, начинающимся в точке A и заканчивающимися в точке B . Таким образом, переход между двумя состояниями происходит всеми возможными способами, а не только по классической траектории. Для многочастичных систем амплитуды перехода описываются аналогичными выражениями с учётом симметризации для бозонов и антисимметризации для фермионов. Фейнмановская формулировка квантовой механики широко применяется в релятивистской квантовой теории поля, так как на её основе диаграммная теория возмущений строится особенно просто [13].

Статистическая сумма $Z(N, V, T)$ может быть представлена в виде интеграла по траекториям, аналогичного (2), но с «мнимым временем» $i\beta\hbar$ [14]. Например, для простейшей системы, состоящей из одной частицы,

$$Z(N, V, T) = \int_V dq \int_{q(0)=q(\beta\hbar)=q} Dq(t) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} L_E(q, \dot{q}, t) dt \right\}, \quad (3)$$

где $L_E(q, \dot{q}, t) = \frac{m\dot{q}^2}{2} + U(q)$ обозначает лагранжиан с противоположным знаком у потенциальной энергии. Функциональный интеграл (3), в отличие от (2), является полностью вещественным и берётся по всем замкнутым траекториям, проходящим через точку q . Для многочастичных систем имеют место аналогичные выражения с учётом статистики Бозе-Эйнштейна или Ферми-Дирака. Физический смысл представления статистической суммы в виде интеграла по траекториям состоит в том, что частица представляется не одной точкой q , а целой траекторией $q(t)$ и делокализована, таким образом, в области порядка средней длины волны Де Бройля $\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{mkT}}$.

Численные методы РИМС

На представлении статистической суммы в виде интеграла по траекториям основано целое семейство численных методов РИМС (Path Integral Monte Carlo), позволяющих проводить первопринципные расчёты термодинамических свойств квантовых многочастичных систем. В методах РИМС для вычисления

интегралов по траекториям используется процедура Монте Карло, заключающаяся в сведении интеграла к вычислению средних от случайных величин.

В общем случае методы Монте Карло применяются для вычисления многомерных определённых интегралов следующего вида:

$$I = \frac{\int_{\Omega} P(\bar{\mathbf{x}}) f(\bar{\mathbf{x}}) d\bar{\mathbf{x}}}{Q}, \quad Q = \int_{\Omega} P(\bar{\mathbf{x}}) d\bar{\mathbf{x}}, \quad (4)$$

где Ω — область в многомерном пространстве R_m , а весовая функция $P(\bar{\mathbf{x}})$ предполагается неотрицательной. В отличие от детерминированных подходов, использующих для вычисления интеграла I регулярную сетку в R_m , методы Монте Карло оценивают подынтегральное выражение в случайно выбранных точках. Хотя различные случайные выборки точек приводит к различным оценкам интеграла, при большом их числе получается правильное значение I в пределах статистической погрешности. В методах Монте Карло наиболее часто используется выборка по значимости, при которой случайные точки берутся с плотностью вероятности $P(\bar{\mathbf{x}})/Q$. Для получения случайной выборки с заданной плотностью вероятности обычно используется алгоритм Метрополиса-Гастингса, основанный на марковских процессах [15]. При этом отпадает необходимость вычислять нормировочный множитель Q , и интеграл (4) автоматически оказывается правильно нормированным.

Для вычисления методом Монте Карло интегралов по траекториям вида (3) их сводят к многократным интегралам, приближённо заменяя траектории $q(t)$ ломаными линиями. Число звеньев должно быть достаточно большим, чтобы такой интеграл хорошо аппроксимировал исходное выражение. Однако при рассмотрении систем, содержащих фермионы, ситуация усложняется из-за знакопеременных слагаемых в подынтегральном выражении, возникающих при антисимметризации матрицы плотности:

$$\begin{aligned} Z(N, V, T) &= \\ &= \int_V dq \sum_P (-1)^P \int_{q(0)=q, q(\beta\hbar)=Pq} Dq(t) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} L_E(q, \dot{q}, t) dt \right\}, \quad (5) \end{aligned}$$

где сумма берётся по всевозможным перестановкам фермионов одного сорта. Метод Монте Карло можно применять и в этом случае, если представить инте-

грал со знакопеременной весовой функцией в виде:

$$I = \frac{\int_{\Omega} P(\bar{\mathbf{x}})w(\bar{\mathbf{x}})f(\bar{\mathbf{x}})d\bar{\mathbf{x}}/Q}{\int_{\Omega} P(\bar{\mathbf{x}})w(\bar{\mathbf{x}})d\bar{\mathbf{x}}/Q}. \quad (6)$$

где функция $P(\bar{\mathbf{x}})$ предполагается неотрицательной, а функция $w(\bar{\mathbf{x}})$ остаётся знакопеременной. Числитель и знаменатель в выражении (6) являются нормированными интегралами вида (4) с положительной весовой функцией $P(\bar{\mathbf{x}})$, которые могут быть вычислены методом Монте Карло. Например, в качестве P можно взять абсолютную величину весовой функции, а в качестве w — её знак. При этом знаменатель (6) имеет смысл «среднего значения знака». Если весовая функция сильно осциллирует, среднее значение знака близко к нулю. Это приводит к экспоненциальному росту ошибки при вычислении интеграла, и сильно затрудняет расчёты. Эта проблема широко известна в литературе как «фермионная проблема знака» и является одним из главных препятствий при численном моделировании термодинамических свойств систем, содержащих вырожденные фермионы [16].

Одним из наиболее известных методов РИМС для фермионных систем является метод «фиксированных узлов» RРИМС (Restricted РИМС), предложенный в работе [17]. В этом методе, исходя из полуэмпирических соображений, из суммы по перестановкам тождественных частиц исключаются некоторые слагаемые, что позволяет улучшить сходимость метода. Это требует знания узлов матрицы плотности, то есть точек конфигурационного пространства, в которых она обращается в нуль. Однако для макроскопических систем эти узлы известны лишь приблизительно, что приводит к неконтролируемой систематической ошибке. На примере идеального газа было показано, что метод RРИМС приводит к неправильным результатам даже при умеренном вырождении [18]. Тем не менее, метод RРИМС использовался для расчёта термодинамических свойств водородной плазмы [19], водородно-гелиевых смесей [20] и электронного газа на однородном положительно заряженном фоне [21].

Другой широко известный подход к решению «фермионной проблемы знака» заключается в том, чтобы собрать все перестановки тождественных фермионов в одну матрицу и вычислять её детерминант. Это позволяет значительно уменьшить осцилляции знака в подынтегральных выражениях (6) и, тем самым, улучшить сходимость метода Монте Карло. Первые попытки применить

эту идею на практике были предприняты ещё в работе [22] для исследования двумерной электронной системы, однако они не были достаточно эффективными. В работе [23] был предложен метод DPIMC, в котором обменный детерминант включается в меру интеграла (6). С помощью метода DPIMC были исследованы термодинамические свойства сильнонеидеальной водородной плазмы в широком диапазоне температур и плотностей. В частности, были рассчитаны средняя энергия, давление и парные корреляционные функции, и исследован фазовый переход в плотном водороде [23; 24]. Кроме того, метод DPIMC применялся для моделирования электрон-дырочной плазмы в полупроводниках [25].

В последние годы был предложен метод PB-PIMC (Permutation Blocking PIMC) [26], также основанный на использовании обменных детерминантов. Однако, в отличие метода DPIMC, в данном методе обменный детерминант вводится для перестановок на каждом временном шаге траектории $q(t_m)$. При этом для уменьшения числа звеньев M траектории и, соответственно, увеличения скорости расчёта используются разложения статистического оператора $e^{\frac{\beta}{M}\hat{H}}$ высших порядков по $\frac{\beta}{M}$. Это позволяет дополнительно улучшить сходимость по сравнению с методом DPIMC, однако сильно повышает требования к вычислительным ресурсам из-за необходимости многократных вычислений детерминантов матриц перестановок. К настоящему времени с помощью метода PB-PIMC были исследованы термодинамические свойства электронного газа на однородном положительно заряженном фоне [27].

Все рассмотренные выше численные методы PIMC основаны на представлении статистической суммы $Z(N, V, T)$ в виде интеграла по траекториям в координатном пространстве (5). Поэтому они позволяют рассчитывать термодинамические величины, выражающиеся через частные производные от $Z(N, V, T)$, а также средние значения квантовых операторов, зависящих от координат частиц. Однако они не позволяют проводить вычисления средних значений произвольных операторов, поскольку для этого требуется дополнительная информация о импульсах частиц. По этой причине функции распределения по импульсам и энергиям совершенно недоступны всем перечисленным методам PIMC. В то же время равновесные функции распределения по импульсам и энергиям в сильнонеидеальных системах необходимы при изучении кинетических свойств оных. Важную роль при этом играет асимптотическое поведение функций распределения по импульсам частиц в двухкомпонентной кулоновской системе ,

влияющее на константы скоростей реакций в плазме. Ещё в работе [28] было предсказано, что в слабонеидеальной кулоновской системе функция распределения по импульсам имеет асимптотику в виде степенного «хвоста» $1/p^8$, затухающего при значительно больших импульсах. В серии теоретических и экспериментальных работ [29—32] было получено более точное асимптотическое выражение для функций распределения по импульсам. Все эти результаты были получены с помощью теории возмущений для слабонеидеального случая. Поэтому особый интерес представляют функции распределения по импульсам в сильнонеидеальных кулоновских системах.

Недавно был предложен метод СРІМС (Configurational PІМС), основанный на интегралах по траекториям не в координатном пространстве, а в пространстве чисел заполнения [33]. В этом методе траектории зависят от дискретных чисел фермионов n_k в каждом состоянии $|k\rangle$ заданного антисимметризованного базиса. Метод СРІМС хорошо работает для сильновырожденных систем фермионов при относительно слабом межчастичном взаимодействии. В частности, он позволяет получить распределение Ферми для идеального газа с хорошей точностью. К сожалению, область сильного взаимодействия ($\Gamma \geq 1$) метода СРІМС совершенно недоступна из-за новой «проблемы знака», связанной с сильно возрастающими осцилляциями статистического оператора при изменении чисел заполнения фермионов. До настоящего времени методом СРІМС предпринимались попытки изучения термодинамических свойств электронного газа на однородном положительно заряженном фоне [27; 34]. Двухкомпонентные кулоновские системы этим методом не исследовались.

Вигнеровский подход

Вигнеровская формулировка квантовой механики позволяет особенно просто анализировать физические величины, зависящие от импульсов и координат частиц. Этот формализм основан на квантовой функции распределения в фазовом (p, q) -пространстве, называемой функцией Вигнера и определяющейся как преобразование Фурье матрицы плотности $\rho(q, q') = \langle q | \hat{\rho} | q' \rangle$ по разности коор-

динат [35]:

$$W(p,q) = \int d\xi e^{i(p\xi)/\hbar} \rho(q - \xi/2, q + \xi/2). \quad (7)$$

Среднее значение произвольного оператора $\hat{A} = A(\hat{p}, \hat{q})$ по ансамблю, определяемому статистическим оператором $\hat{\rho}$, может быть вычислено по формуле:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int dpdq W(p,q) A(p,q). \quad (8)$$

Функция импульсов и координат $A(p,q)$, которая ставится в соответствие оператору \hat{A} , называется его символом Вейля:

$$A(p,q) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^S} \int ds e^{-i(sq)/\hbar} \langle p - s/2 | \hat{A} | p + s/2 \rangle, \quad (9)$$

где $S = dN$ — общее число координат системы.

Формула (8) аналогична хорошо известной формуле для среднего по ансамблю в классической статистике. При этом функция Вигнера является квантовым аналогом функции распределения в фазовом пространстве $f(p,q)$, а символ Вейля — аналогом усредняемой классической величины. Однако следует отметить, что $W(p,q)$, будучи вещественной функцией, всё же не может быть истолкована как плотность вероятности, поскольку может принимать отрицательные значения.

Временная эволюция функции Вигнера описывается интегро-дифференциальным уравнением, которое является обобщением уравнения Лиувилля на квантовый случай [36]:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial W}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial W}{\partial p} = \Phi(p,q,t), \quad (10)$$

где функция $\Phi(p,q,t)$ является интегральным членом, линейным относительно $W(p,q)$. В квазиклассическом пределе $\hbar \rightarrow 0$ это уравнение переходит в классическое уравнение Лиувилля, так что функция Вигнера распространяется по гамильтоновым траекториям в фазовом пространстве $p(t), q(t)$. Однако учёт высших поправок по \hbar приводит к случайным скачкам импульса при движении по классическим траекториям [37].

Несмотря на то, что вигнеровская формулировка квантовой механики появилась в 30-х гг XX века, только в последние два десятилетия её стали при-

менять для изучения квантовомеханических систем. Так, в упомянутой выше работе [37] был предложен численный метод, позволяющий решать уравнение Вигнера-Лиувилля для нерелятивистских частиц во внешнем поле. Этот метод был протестирован на примере гармонического осциллятора.

В работе [38] было предложено обобщение функции Вигнера на одночастичную систему с релятивистской динамикой и получено соответствующее релятивистское уравнение эволюции. На основе этой работы был разработан метод, позволяющий численно моделировать временную эволюцию функции Вигнера для релятивистской частицы во внешнем поле, и исследована динамика релятивистского гармонического осциллятора [39; 40].

В работах [41; 42] в рамках вигнеровского формализма была исследована динамика микроканонического ансамбля фермионов с кулоновским взаимодействием. Однако использованный метод пригоден только для небольших систем с числом частиц порядка десяти.

В цикле работ [43—45] с помощью вигнеровского подхода было проведено квазиклассическое исследование модели кварк-глюонной плазмы. Было получено уравнение состояния, пространственные и временные корреляционные функции, а так же вычислены некоторые транспортные коэффициенты. Результаты находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными и предсказаниями решёточных моделей КХД.

Наконец, представление функции Вигнера как оператора во вторичном квантовании является удобным аналитическим инструментом при изучении квазиклассической релятивистской плазмы [46].

Глава 1. Функция Вигнера как интеграл по путям

В данной главе рассматривается формализм, являющийся теоретическим основанием для численных методов SMPIMC, LAPIMC и NAPIMC. Глава состоит из пяти разделов.

В разделе 1.1 кратко приводятся необходимые сведения из квантовой статистики. Прежде всего рассматривается вычисление средних значений операторов в наиболее общем смешанном ансамбле. Затем даётся определение функции Вигнера для такого ансамбля и поясняется её физический смысл. Наконец приводятся формулы для вычисления средних по ансамблю значений операторов с помощью функции Вигнера.

В разделе 1.2 приводится вывод общего представления для функции Вигнера канонического ансамбля в виде интеграла по траекториям для бозонных и фермионных систем.

В разделе 1.3 описывается «одноимпульсный» подход к вычислению средних значений операторов и функций распределения для фермионных систем. Прежде всего определяется весьма широкий класс «одноимпульсных» операторов, к которому принадлежат наиболее важные термодинамические величины. Затем доказывается, что для вычисления этих величин достаточно «одноимпульсной» функции Вигнера. Наконец выводится выражение для «одноимпульсной» функции Вигнера для фермионной системы в виде одно- или трёхмерного преобразования Фурье от интеграла по траекториям.

В разделе 1.4 описываются «линейное» и «гармоническое» приближения для функции Вигнера без учёта обменного взаимодействия. Во-первых, показывается, что разложение потенциальной энергии в степенной ряд по Фурье-переменной позволяет выполнить многомерное преобразование Фурье явно. Во-вторых, обсуждается возможность такого разложения и его применимость.

В разделе 1.5 рассматривается эффективный псевдопотенциал в фазовом пространстве, учитывающий обменное взаимодействие фермионов или бозонов в парном приближении. Прежде всего выражение для обменного псевдопотенциала выводится для функции Вигнера идеального газа фермионов или бозонов. Затем оно обобщается на неидеальную систему в рамках «линейного» и «гармонического» приближений.

1.1 Функция Вигнера в равновесной термодинамике

В статистической физике одним из центральных объектов является смешанный ансамбль, основанный на неполном наборе данных о квантовой системе. В общем случае он определяется следующим образом. Пусть задана полная система различных квантовых состояний Ψ_n , в которых может находиться система:

$$\sum_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| = 1, \quad \langle\Psi_n|\Psi_m\rangle = \delta_{n,m} \quad (1.1)$$

В смешанном состоянии определены лишь нормированные вероятности ω_n обнаружить систему в каждом из этих состояний:

$$\sum_n \omega_n = 1. \quad (1.2)$$

Среднее значение произвольной физической величины, представленной оператором \hat{A} , тогда определяется выражением:

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_n \omega_n \langle\Psi_n|\hat{A}|\Psi_n\rangle, \quad (1.3)$$

то есть сначала вычисляется среднее значение оператора в квантовом состоянии Ψ_n , а затем производится усреднение по всем состояниям.

Для изучения смешанных ансамблей обычно вводят статистический оператор $\hat{\rho}$:

$$\hat{\rho} = \sum_n |\Psi_n\rangle\omega_n\langle\Psi_n|, \quad (1.4)$$

с нормировкой $Tr\hat{\rho} = 1$, которая следует из (1.1). Матричные элементы статистического оператора в координатном представлении называются матрицей плотности:

$$\rho(q,q') = \langle q|\hat{\rho}|q'\rangle, \quad (1.5)$$

где q обозначает совокупность координат частиц, образующих систему: $q = (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots)$, а $|q\rangle$ — многочастичные состояния с определёнными координатами.

Среднее значение оператора A получается взятием следа:

$$\langle \hat{A} \rangle = Tr \left(\hat{\rho} \hat{A} \right), \quad (1.6)$$

что следует непосредственно из (1.3).

В работе [35] было предложено координатно-импульсное представление матрицы плотности $W(p, q)$, известное как функция Вигнера. Для смешанного ансамбля функция Вигнера определяется как преобразование Фурье $\rho(q, q')$ по разностной переменной матрицы плотности:

$$W(p, q) = \int d\xi e^{i(p\xi)/\hbar} \rho(q - \xi/2, q + \xi/2). \quad (1.7)$$

Тогда среднее значение произвольного оператора \hat{A} по ансамблю может быть вычислено по формуле:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int dpdq W(p, q) A(p, q). \quad (1.8)$$

Функция импульсов и координат $A(p, q)$ называется символом Вейля оператора \hat{A} :

$$A(p, q) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^S} \int ds e^{-i(sq)/\hbar} \langle p - s/2 | \hat{A} | p + s/2 \rangle, \quad (1.9)$$

где $S = dN$ — общее число степеней свободы системы.

Формула (1.8) аналогична формуле для среднего по классическому ансамблю. При этом символ Вейля является квантовым аналогом усредняемой физической величины, а функция Вигнера — аналогом классической функции распределения в фазовом пространстве $f(p, q)$. Тем не менее, функция Вигнера не может быть интерпретирована как вероятность обнаружить систему в данной точке фазового пространства, поскольку может принимать отрицательные значения [36].

1.2 Представление функции Вигнера в виде интеграла по путям

В случае канонического ансамбля, характеризующегося постоянным числом частиц N , объёмом V и температурой kT , статистический оператор имеет вид:

$$\hat{\rho} = Z(N, V, T)^{-1} e^{-\beta \hat{H}}, \quad Z(N, V, T) = \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \right), \quad (1.10)$$

где нормировочный множитель $Z(N, V, T)$ называется статистической суммой, а $\beta = 1/kT$ — величина, обратная к температуре. Гамильтониан системы, состоящей из N частиц одного сорта, в общем случае имеет вид:

$$\hat{H} = \sum_{a=1}^N \frac{\hat{\mathbf{p}}_a^2}{2m} + U(\hat{\mathbf{q}}_1, \hat{\mathbf{q}}_2, \dots, \hat{\mathbf{q}}_N). \quad (1.11)$$

Оператор потенциальной энергии $U(\hat{\mathbf{q}}_1, \hat{\mathbf{q}}_2, \dots, \hat{\mathbf{q}}_N)$ в общем случае описывает взаимодействие частиц как между собой, так и с внешним полем.

Функция Вигнера канонического ансамбля систем (1.11) определяется следующим образом:

$$W(p, q) = Z(N, V, T)^{-1} \int d\xi e^{i(p\xi)/\hbar} \langle q - \xi/2 | e^{-\beta \hat{H}} | q + \xi/2 \rangle, \quad (1.12)$$

где состояния с определёнными координатами $|q\rangle$ симметричны или антисимметричны относительно перестановки любых двух частиц, в зависимости от того, являются те бозонами или фермионами. Поскольку операторы кинетической и потенциальной энергии в гамильтониане некоммутативны, статистический оператор $e^{-\beta \hat{H}}$ не может быть представлен в виде произведения операторов $e^{-\beta \hat{K}}$ и $e^{-\beta \hat{U}}$. Поэтому функция Вигнера для канонического ансамбля, вообще говоря, не может быть вычислена аналитически. Однако можно использовать метод интегралов по траекториям аналогично тому, как это делается для статистической суммы [14]

Для этого представим статистический оператор как произведение достаточно большого числа M операторов $e^{-\epsilon \hat{H}}$ с $\epsilon = \beta/M$:

$$e^{-\beta \hat{H}} = e^{-\epsilon \hat{H}} \cdot e^{-\epsilon \hat{H}} \cdot \dots \cdot e^{-\epsilon \hat{H}}. \quad (1.13)$$

По сути, $e^{-\epsilon\hat{H}}$ представляет собой статистический оператор, соответствующий температуре $M \cdot T$. Затем вставим между этими операторами $M-1$ соотношений полноты для N -частичных состояний с определёнными координатами:

$$1 = \int dq |q\rangle \langle q|. \quad (1.14)$$

В результате исходная матрица плотности, входящая в (1.12), будет записана в виде $dN \cdot (M-1)$ -кратного интеграла от произведения M «высокотемпературных» матриц плотности:

$$\begin{aligned} \langle q - \xi/2 | e^{-\beta\hat{H}} | q + \xi/2 \rangle &= \\ &= \int dq^1 dq^2 \dots dq^{M-1} \langle q^0 | e^{-\epsilon\hat{H}} | q^1 \rangle \langle q^1 | e^{-\epsilon\hat{H}} | q^2 \rangle \dots \langle q^{M-1} | e^{-\epsilon\hat{H}} | q^M \rangle, \end{aligned} \quad (1.15)$$

где для начальной и конечной координат введены обозначения $q^0 = q - \xi/2$ и $q^M = q + \xi/2$.

Рассмотрим одну «высокотемпературную» матрицу плотности, отвечающую m -й координате. При больших M параметр ϵ мал, так что статистический оператор может быть разложен в степенной ряд: $e^{-\epsilon\hat{H}} = 1 + \epsilon\hat{K} + \epsilon\hat{U} + O(\epsilon^2)$. Тогда, используя соотношения полноты для для N -частичных состояний с определёнными импульсами:

$$1 = \int \frac{dp}{(2\pi\hbar)^S} |p\rangle \langle p|, \quad (1.16)$$

можно представить матричный элемент «высокотемпературного» оператора с точностью до слагаемых порядка ϵ^2 в виде:

$$\begin{aligned} \langle q^m | e^{-\epsilon\hat{H}} | q^{m+1} \rangle &\approx \\ &\approx \int \frac{dp^m}{(2\pi\hbar)^S} \langle q^m | p^m \rangle \langle p^m | q^{m+1} \rangle \exp \left\{ -\epsilon \sum_{a=1}^N \frac{\mathbf{p}_a^2}{2m} - \epsilon U(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N) \right\}. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Состояния с определёнными координатами и импульсами частиц симметричны или антисимметричны относительно перестановки частиц одного сорта, в зависимости от статистики. Однако при вычислении полной матрицы плотности (1.15) необязательно симметризовать (антисимметризовать) каждое промежуточное состояние, достаточно это сделать для «конечного» состояния $|q^M\rangle$. [47]. В результате выражение для матричных элементов (1.17) можно упростить,

используя несимметризованные волновые функции $\langle q|p\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}(pq)}$ и вычисляя гауссовы интегралы по \mathbf{p}^m :

$$\begin{aligned} \langle q^m | e^{-\epsilon \hat{H}} | q^{m+1} \rangle &\approx \\ &\approx \lambda_\epsilon^{-d} \exp \left\{ -\pi \lambda_\epsilon^{-2} \sum_{a=1}^N (\mathbf{q}_a^{m+1} - \mathbf{q}_a^m)^2 - \epsilon U(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N) \right\}. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Величина λ_ϵ связана со средней тепловой длиной волны Де Бройля λ соотношением $\lambda_\epsilon^2 = \lambda^2/M$, где

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}}. \quad (1.19)$$

В случае, когда имеется несколько сортов частиц с разными массами, каждому сорту соответствует своя длина волны λ .

Подставляя «высокотемпературные» матричные элементы (1.18) в формулу для полной матрицы плотности (1.15), получим следующее выражение в виде многократного интеграла:

$$\begin{aligned} \langle q - \xi/2 | e^{-\beta \hat{H}} | q + \xi/2 \rangle &= C(M) \sum_P (\pm 1)^P \lambda^{-S} \int \frac{dq^1}{\lambda^S} \frac{dq^2}{\lambda^S} \dots \frac{dq^{M-1}}{\lambda^S} \\ &\times \exp \left\{ -\sum_{m=0}^{M-1} \pi M (q^{m+1} - q^m)^2 / \lambda^2 - \sum_{m=0}^{M-1} \epsilon U(q^m) \right\}. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Символ P обозначает перестановки тождественных частиц, причём верхний знак в $(\pm 1)^P$ соответствует статистике Бозе-Эйнштейна, а нижний — статистике Ферми-Дирака. Начальная координата $q^0 = q - \xi/2$, конечная $q^M = P(q + \xi/2)$. Константа $C(M) = M^{S(M-1)/2}$ зависит только от числа разбиений статистического оператора M и числа степеней свободы S .

Перейдём к пределу $M \rightarrow \infty$. В этом случае последовательность координат q^1, q^2, \dots, q^{M-1} переходит в траекторию $q(\tau)$, разность соседних координат $q^{m+1} - q^m$ переходит в производную траектории $\dot{q}(\tau)$, суммы по промежуточным координатам переходят в интегралы по τ . Подробнее:

$$\frac{m}{M} \rightarrow \tau, \quad q^m \rightarrow q(\tau), \quad \frac{q^{m+1} - q^m}{1/M} \rightarrow \dot{q}(\tau), \quad \frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M-1} \rightarrow \int_0^1 d\tau. \quad (1.21)$$

Многократный интеграл по q^1, q^2, \dots, q^{M-1} перейдет в интеграл по траекториям $q(\tau)$, начинающимся в точке $q - \xi/2$ и заканчивающимся в точке $P(q + \xi/2)$:

$$C(M) \int \frac{dq^1}{\lambda^S} \frac{dq^2}{\lambda^S} \dots \frac{dq^{M-1}}{\lambda^S} \rightarrow \int_{q(0)=q-\xi/2, q(1)=q+\xi/2} Dq(\tau). \quad (1.22)$$

Таким образом, полная матрица плотности представляется в виде интеграла по траекториям:

$$\begin{aligned} \langle q - \xi/2 | e^{-\beta \hat{H}} | q + \xi/2 \rangle &= \lambda^{-S} \sum_P (\pm 1)^P \int_{q(0)=q-\xi/2, q(1)=q+\xi/2} Dq(\tau) \\ &\times \exp \left\{ - \int_0^1 d\tau \pi \frac{\dot{q}(\tau)^2}{\lambda^2} - \int_0^1 d\tau \beta U(q(\tau)) \right\}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

В выражении (1.23) переменные ξ входят в меру функционального интеграла. Однако при вычислении функции Вигнера 1.12 нужно будет выполнить преобразование Фурье по этим переменным. Поэтому устраним зависимость меры интеграла от координат q и ξ , выполнив замену

$$q(\tau) = \lambda z(\tau) + (1 - \tau)(q - \xi/2) + \tau P(q + \xi/2), \quad z(0) = z(1) = 0. \quad (1.24)$$

Выражение под экспонентой в (1.23) тогда преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned} &\int_0^1 d\tau \frac{\pi}{\lambda^2} [\lambda \dot{z}(\tau) + P(q + \xi/2) - (q - \xi/2)]^2 + \int_0^1 d\tau \beta U(q(\tau)) = \\ &= \int_0^1 d\tau \pi \dot{z}^2(\tau) + \pi \lambda^{-2} [P(q + \xi/2) - (q - \xi/2)]^2 - \int_0^1 d\tau \beta U(q(\tau)), \end{aligned} \quad (1.25)$$

где для краткости оставлено обозначение $q(\tau)$.

Подставим полученные формулы (1.23), (1.25) в выражение для функции Вигнера (1.12):

$$\begin{aligned} W(p, q) &= Z(N, V, T)^{-1} \lambda^{-S} \sum_P (\pm 1)^P \int d\xi \int_{z(0)=z(1)=0} Dz(\tau) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (p\xi) - \right. \\ &\left. - \frac{\pi}{\lambda^2} [P(q + \xi/2) - (q - \xi/2)]^2 - \int_0^1 d\tau \pi \dot{z}^2(\tau) - \int_0^1 d\tau \beta U(q(\tau)) \right\}, \end{aligned} \quad (1.26)$$

где интеграл берётся по переменным ξ и всевозможным замкнутым траекториям $z(\tau)$. Множитель $Z(N,V,T)^{-1}$ обеспечивает нормировку функции Вигнера. Первое слагаемое под экспонентой происходит из преобразования Фурье и обеспечивает зависимость функции Вигнера от импульсов частиц p . Второе слагаемое под экспонентой содержит как зависимость от координат q , так и переменную ξ . Для тождественной перестановки оно сводится к $-\pi\xi^2/\lambda^2$; для других перестановок оно зависит от координат и описывает обменное взаимодействие. Третье слагаемое под экспонентой зависит от производных траекторий $z(\tau)$ и контролирует пространственные размеры траектории. Последнее слагаемое описывает потенциальное взаимодействие частиц, представляемых траекториями в пространстве.

До сих пор мы не учитывали спин частиц. Так как гамильтониан системы (1.11) не содержит спиновых взаимодействий, то частицы с различными спинами можно рассматривать как независимые подсистемы. Тогда можно уточнить формулу для функции Вигнера (1.26), введя спиновый индекс σ :

$$\begin{aligned}
W(p,q) = & Z(N,V,T)^{-1} \sum_{\sigma} \sum_{P_{\sigma}} (\pm 1)^{P_{\sigma}} \int d\xi \int_{z(0)=z(1)=0} Dz(\tau) \exp \left\{ \sum_{a,\sigma} i\rho_{a,\sigma} \xi_{a,\sigma} - \right. \\
& - \sum_{a,\sigma} \pi [P_{\sigma}(\mathbf{q}_{a,\sigma}/\lambda + \xi_{a,\sigma}/2) - (\mathbf{q}_{a,\sigma}/\lambda - \xi_{a,\sigma}/2)]^2 - \sum_{a,\sigma} \int_0^1 d\tau \pi \dot{\mathbf{z}}_{a,\sigma}^2(\tau) - \\
& \left. - \int_0^1 d\tau \beta U(q(\tau)) \right\}, \tag{1.27}
\end{aligned}$$

где для удобства сделана замена $\xi \rightarrow \lambda\xi$. Суммирование по a,σ означает суммирование по всем частицам с данным значением проекции спина σ от 1 до N_{σ} , где $N_{\sigma} = N/(2s+1)$ — равновесное число частиц в данном спиновом состоянии. Символ P_{σ} обозначает перестановку частиц с одинаковым значением σ , символ $\rho_a = \mathbf{p}_a \lambda / \hbar$ — безразмерный импульс.

В случае многокомпонентной системы функция Вигнера может быть представлена выражением, аналогичным (1.27). При этом каждому сорту частиц будет соответствовать своя масса m_s , тепловая длина волны Де Бройля $\lambda_s = \sqrt{2\pi\hbar^2/m_s kT}$ и сумма по перестановкам $P_{s,\sigma}$.

К сожалению, выражение (1.27) само по себе непригодно для расчётов на ЭВМ. Причина состоит в том, что импульсы p входят в это выражение только через преобразование Фурье $i\rho\xi$, которое численно выполнить технически

невозможно из-за большой размерности интеграла $S = dN$. Метод Монте Карло использовать также нельзя, поскольку подынтегральное выражение быстро осциллирует без затухания при изменении импульса. Выполнить преобразование Фурье аналитически в общем случае также невозможно из-за члена с потенциальным взаимодействием. Поэтому необходим подход, позволяющий как-либо упростить формулу (1.27) и сделать её пригодной для практического использования.

1.3 «Одноимпульсная» функция Вигнера

Как было сказано в конце раздела 1.2, представление функции Вигнера (1.27) само по себе непригодно для расчётов на ЭВМ из-за невозможности выполнить многомерное преобразование Фурье. Однако для многих практически важных задач оно может быть сведено к трёхмерному или даже одномерному преобразованию Фурье в рамках следующего подхода, основанного на «одноимпульсной» функции Вигнера.

Рассмотрим многочастичный оператор \hat{A} , который можно представить в виде суммы одинаковых одночастичных операторов \hat{a} , зависящих от импульсов частиц:

$$\hat{A} = \sum_{a=1}^N a(\hat{\mathbf{p}}_a). \quad (1.28)$$

В частности, такую структуру имеет оператор кинетической энергии системы \hat{K} . Так как все частицы одного сорта в условиях термодинамического равновесия абсолютно тождественны, средние значения оператора \hat{a} для любых двух частиц с номерами a и b совпадают:

$$\langle a(\hat{\mathbf{p}}_a) \rangle = \langle a(\hat{\mathbf{p}}_b) \rangle, \quad a, b = 1, 2, \dots, N. \quad (1.29)$$

Следовательно, среднее значение оператора \hat{A} может быть выражено через среднее значение какого-либо одночастичного оператора, например для первой частицы:

$$\langle A(\hat{p}) \rangle = \int dpdq N a(\mathbf{p}_1) W(p, q), \quad (1.30)$$

где $A(p)$ и $a(\mathbf{p})$ — символы Вейля, получаемые из соответствующих операторов $A(\hat{p})$ и $a(\hat{\mathbf{p}})$ заменой \hat{p} на p . Таким образом, для вычисления среднего значения операторов вида (1.28) достаточно знать зависимость функции Вигнера от импульса какой-либо одной из частиц.

Теперь рассмотрим многочастичный оператор \hat{B} , зависящий только от координат всех частиц и инвариантный относительно их перестановок:

$$\hat{B} = B(\hat{\mathbf{q}}_1, \hat{\mathbf{q}}_2, \dots, \hat{\mathbf{q}}_N). \quad (1.31)$$

В частности, таким оператором является оператор потенциальной энергии системы \hat{U} . Среднее значение оператора \hat{B} может быть вычислено следующим образом:

$$\langle B(\hat{q}) \rangle = \int dpdq B(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N) W(p, q), \quad (1.32)$$

где символ Вейля $U(q)$ получается из \hat{U} заменой \hat{q} на q . Видно, что для вычисления среднего значения операторов вида (1.31) зависимость функции Вигнера от импульсов частиц не требуется вовсе.

Таким образом, если некоторый оператор \hat{T} распадается на сумму операторов вида (1.28), (1.31):

$$\hat{T} = \sum_{a=1}^N a(\hat{\mathbf{p}}_a) + B(\hat{\mathbf{q}}_1, \hat{\mathbf{q}}_2, \dots, \hat{\mathbf{q}}_N), \quad (1.33)$$

для вычисления его среднего значения достаточно знать «одноимпульсную» функцию Вигнера:

$$W_{SM}(\mathbf{p}; \hat{\mathbf{q}}_1, \hat{\mathbf{q}}_2, \dots, \hat{\mathbf{q}}_N) = \int dp_2, \dots, dp_N W(p, q), \mathbf{p} = \mathbf{p}_1, \quad (1.34)$$

то есть функцию Вигнера, проинтегрированную по импульсам всех частиц, кроме одной. Среднее значение оператора \hat{T} вычисляется по формуле:

$$\langle \hat{T} \rangle = \int d\mathbf{p} d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_N [Na(\mathbf{p}) + B(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N)] W(p, q). \quad (1.35)$$

С другой стороны, импульсы всех частиц входят в определение функции Вигнера (1.12) только через преобразование Фурье. Поэтому интегрирование функции Вигнера по импульсам $\mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N$ приводит к появлению дельта-функ-

ций от переменных ξ_a , в результате чего имеем:

$$\begin{aligned} W_{SM}(\mathbf{p}; \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N) &= \\ &= Z(N, V, T)^{-1} \int d\xi e^{i\rho\xi/\hbar} \rho_{SM}(\xi; \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N), \end{aligned} \quad (1.36)$$

где ρ_{SM} обозначает «одноимпульсную» матрицу плотности, получаемую из полной матрицы плотности ρ :

$$\begin{aligned} \rho_{SM}(\xi; \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N) &= \langle q - \xi/2 | e^{-\beta\hat{H}} | q + \xi/2 \rangle, \\ \xi &= \xi_1, \quad \xi_2 = \dots = \xi_N = 0. \end{aligned} \quad (1.37)$$

Выражение (1.36) представляет собой трёхмерное преобразование Фурье от недиагональных элементов матрицы плотности, которое в принципе может быть выполнено численно на ЭВМ. Если интересоваться физическими величинами и функциями распределения, зависящими от абсолютных значений импульсов, можно упростить задачу ещё больше и свести (1.36) к одномерному преобразованию Фурье. Действительно, «одноимпульсная» матрица плотности (1.37) в силу изотропности зависит только от абсолютной величины ξ . Выбирая ось OZ вдоль импульса \mathbf{p} , переходя к сферическим координатам по ξ и интегрируя по углам, получаем:

$$W_{SM}(|\mathbf{p}|; q) = \frac{4\pi}{|\mathbf{p}|} \int_0^\infty d\xi \xi \rho_{SM}(\xi; q) \sin |\mathbf{p}| \xi. \quad (1.38)$$

Таким образом, при вычислении средних значений величин и функций распределения, зависящих от абсолютных значений импульсов, «одноимпульсная» функция Вигнера может быть получена с помощью синусного преобразования Фурье от (1.37).

Поскольку в данной работе в дальнейшем будут рассматриваться только системы, состоящие из фермионов со спином $1/2$, то упростим выражение для ρ_{SM} , собрав все перестановки тождественных частиц в детерминанты. Для этого заметим, что в вырожденной системе среднее расстояние между частицами не превышает λ , и траектории, представляющие частицы, сильно перепутаны друг с другом. Из-за этого потенциальная энергия $U(q(\tau))$ для различных перестановок не должна сильно отличаться от таковой для тождественной пере-

становки. Оценим эту разность для системы с кулоновским взаимодействием, используя выражение (1.24):

$$\begin{aligned} & \beta U (\lambda z(\tau) + (1 - \tau)(q - \xi/2) + \tau P(q + \xi/2)) - \beta U (\lambda z(\tau) + q + \xi(\tau - 1/2)) \approx \\ & \approx \frac{1}{(n\lambda^3)} \sqrt{\frac{\beta Ry}{\pi}}, \end{aligned} \quad (1.39)$$

где n обозначает плотность частиц. В случае же, когда система вырождена слабо, обменное взаимодействие также мало (1.27), так что вклад перестановок в потенциальную энергию также оказывается незначительным. Таким образом, мы пренебрегаем перестановками под знаком потенциала:

$$\begin{aligned} & \beta U (\lambda z(\tau) + (1 - \tau)(q - \xi/2) + \tau P(q + \xi/2)) \rightarrow \\ & \rightarrow \beta U (\lambda z(\tau) + q + \xi(\tau - 1/2)). \end{aligned} \quad (1.40)$$

Это значительно упрощает «одноимпульсную» матрицу плотности (1.27), так как перестановки теперь не связаны с потенциальной энергией и могут быть вынесены за знак функционального интеграла:

$$\begin{aligned} \rho_{SM} (\xi; \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N) &= \sum_{\sigma} \sum_{P_{\sigma}} (\pm 1)^{P_{\sigma}} \int_{z(0)=z(1)=0} Dz(\tau) \\ & \times \exp \left\{ - \sum_{a,\sigma} \pi [P_{\sigma}(\mathbf{q}_{a,\sigma}/\lambda + \xi_{a,\sigma}/2) - (\mathbf{q}_{a,\sigma}/\lambda - \xi_{a,\sigma}/2)]^2 \right\} \\ & \times \exp \left\{ - \sum_{a,\sigma} \int_0^1 d\tau \pi \dot{\mathbf{z}}_{a,\sigma}^2(\tau) - \int_0^1 d\tau \beta U(q(\tau)) \right\}. \end{aligned} \quad (1.41)$$

Перестановки частиц с одинаковой проекцией спина стоят под знаком экспоненты, поэтому их можно собрать в детерминант матрицы с размерностью $N_{\sigma} \times N_{\sigma}$:

$$D_{\sigma} (\xi; q) = \det \left| \exp \left\{ \frac{\pi}{\lambda^2} [(\mathbf{q}_{a,\sigma} + \xi_{a,\sigma}/2)^2 - (\mathbf{q}_{b,\sigma} + \xi_{b,\sigma}/2)^2] \right\} \right|, \quad (1.42)$$

где a, b обозначают номера частиц с проекцией спина σ , причём ξ_a, ξ_b равны нулю при $a \neq 1$ и $b \neq 1$.

Таким образом, «одноимпульсная» функция Вигнера может быть получена с помощью преобразования Фурье (1.36) или (1.38) «одноимпульсной» мат-

рицы плотности, которая представляется интегралом по траекториям:

$$\begin{aligned} \rho_{SM}(\xi; q) = & \int_{z(0)=z(1)=0} Dz(\tau) \left[\prod_{\sigma} D_{\sigma}(\xi; q) \right] \times \\ & \times \exp \left\{ - \sum_{a, \sigma} \int_0^1 d\tau \pi \dot{\mathbf{z}}_{a, \sigma}^2(\tau) - \int_0^1 d\tau \beta U(q(\tau)) \right\}. \end{aligned} \quad (1.43)$$

Каждому значению проекции спина σ соответствует свой детерминант D_{σ} . При этом зависимость от переменной ξ содержится как в детерминантах, так и в потенциальном слагаемом под экспонентой.

Если система содержит фермионы разных сортов, то каждому сорту будут соответствовать $2s + 1$ детерминантов (1.42), по одному на каждое значение проекции спина σ . Для бозонов учёт перестановок с помощью детерминантов неприменим, и суммирование по перестановкам должно осуществляться с помощью метода Монте Карло [48].

1.4 Линейное и гармоническое приближение

Как было сказано в конце раздела 1.2, аналитически выполнить преобразование Фурье в формуле (1.27) в общем случае невозможно из-за члена с потенциальным взаимодействием. Исключение составляет лишь ситуация, когда потенциал является линейной либо квадратичной функцией координаты, так что преобразование Фурье сводится к гауссовым интегралам. В общем случае можно разложить потенциальную энергию $U(q(\tau))$ в ряд Тейлора по степеням ξ , так как множитель $\exp(-\pi\xi^2)$ в формуле (1.27) обеспечивает достаточно быстрое убывание подинтегральной функции. Если при этом ограничиться членами первого или второго порядка, то интеграл по ξ может быть взят аналитически. В этом разделе рассматривается соответствующее «линейное» и «гармоническое» приближение для функции Вигнера для тождественной перестановки в (1.27). Обменное взаимодействие будет учтено в следующем разделе.

Разложим потенциальную энергию $U(q(\tau))$ в ряд Тейлора по степеням ξ до второго порядка включительно при тождественной перестановке P :

$$U(\lambda z(\tau) + q + \xi(\tau - 1/2)) \approx U(\lambda z(\tau) + q) + (\tau - 1/2)\lambda_a \xi_{a,i} \frac{\partial U(\lambda z(\tau) + q)}{\partial q_{a,i}} + \frac{1}{2}(\tau - 1/2)^2 \lambda_a \xi_{a,i} \lambda_b \xi_{b,j} \frac{\partial^2 U(\lambda z(\tau) + q)}{\partial q_{a,i} \partial q_{b,j}}. \quad (1.44)$$

Индексами $a, b = 1, 2, \dots, N$ обозначены номера частиц, индексами $i, j = 1, 2, 3$ — номера пространственных компонент векторов, причём по повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Здесь и далее спиновые переменные для краткости не выписываются. Подставляя (1.44) в формулу (1.27), получим следующее выражение:

$$W(p, q) = Z(N, V, T)^{-1} \int_{z(0)=z(1)=0} Dz(\tau) \int d\xi \exp \left\{ i(\rho_{a,i} + 2\pi i J_{a,i}[q, z(\tau)]) \xi_{a,i} - \pi \xi_{a,i} \chi_{a,i;b,j} \xi_{b,j}[q, z(\tau)] - \pi K[z(\tau)] - \pi P[q, z(\tau)] \right\}, \quad (1.45)$$

где функционалы K , P , J и χ^{-1} зависят от траекторий $z(\tau)$ и координат q . При этом K , P — скаляры, J — вектор размерности dN , χ — матрица размерности $dN \times dN$:

$$\begin{aligned} K[z(\tau)] &= \int_0^1 d\tau \dot{z}_{a,i}(\tau) \dot{z}_{a,i}(\tau), \\ P[q, z(\tau)] &= \frac{\beta}{\pi} \int_0^1 d\tau U(q + \lambda z(\tau)), \\ J_{a,i}[q, z(\tau)] &= \frac{\beta \lambda}{2\pi} \int_0^1 d\tau (\tau - 1/2) \frac{\partial U(q + \lambda z(\tau))}{\partial q_{a,i}}, \\ \chi_{a,i;b,j}[q, z(\tau)] &= \delta_{a,b} \delta_{i,j} + \frac{\beta \lambda^2}{2\pi} \int_0^1 d\tau (\tau - 1/2)^2 \frac{\partial^2 U(q + \lambda z(\tau))}{\partial q_{a,i} \partial q_{b,j}}. \end{aligned} \quad (1.46)$$

Интеграл по ξ в (1.45) имеет вид общего гауссова интеграла размерности $D = 3N$:

$$\int d^D x \exp \left\{ -\mathbf{x}^T \|\mathbf{A}\| \mathbf{x} + i \mathbf{b}^T \mathbf{x} \right\} = \frac{\pi^{D/2}}{[\det |\mathbf{A}|]^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{4} \mathbf{b}^T \|\mathbf{A}\|^{-1} \mathbf{b} \right\}, \quad (1.47)$$

где \mathbf{x} — вещественный D -мерный вектор, \mathbf{b} — комплексный D -мерный вектор, $\|\mathbf{M}\|$ — симметричная вещественная матрица $D \times D$. Интеграл (1.47) существует, только если матрица $\|\mathbf{M}\|$ положительно определена. Применяя (1.47) к (1.45), получим формулу для функции Вигнера в «гармоническом» приближении, учитывающую только тождественную перестановку:

$$\begin{aligned}
W_{HA}(p, q) = & Z(\beta, V)^{-1} \int_{z(0)=z(1)=0} Dz(\tau) \det \left| \chi_{ai,bj}^{-1}[q, z(\tau)] \right|^{1/2} \times \\
& \exp \left\{ -\frac{1}{4\pi} \rho_{a,i} \chi_{a,i;b,j}^{-1}[q, z(\tau)] \rho_{b,j} + \pi J_{a,i}[q, z(\tau)] \chi_{a,i;b,j}^{-1}[q, z(\tau)] J_{b,j}[q, z(\tau)] \right\} \times \\
& \cos \left\{ \rho_{a,i} \chi_{ai,bj}^{-1}[q, z(\tau)] J_{b,j}[q, z(\tau)] \right\} \times \exp \{ -\pi K[z(\tau)] - \pi P[q, z(\tau)] \}. \quad (1.48)
\end{aligned}$$

Константа $2\pi^{3N/2}$ здесь отброшена, так как она не зависит ни от каких физических величин и при расчёте средних значений операторов сокращается. Так как функция Вигнера вещественна [36], часть экспоненты в (1.47), зависящая от мнимого аргумента, была заменена на косинус.

Рассмотрим область применимости «гармонического» приближения (1.48). В его основе лежит предположение о том, что потенциальная энергия на траектории может быть разложена в ряд Тейлора по ξ до второго порядка (1.44) с достаточной точностью. Грубая оценка вклада высших членов может быть проведена следующим образом. Член $-\pi\xi^2$ обеспечивает быстрое затухание экспоненты при больших значениях ξ , так что основной вклад даёт область $|\xi| \leq \pi^{-1/2} \approx 0.6$. Аргумент функции потенциальной энергии $U(q(\tau))$ содержит ξ , умноженное на величину $(\tau - 1/2)$, по модулю меньшую 0.5. Используя теорему о среднем, оценим интегралы по τ от высших членов ряда:

$$\frac{1}{n!} \frac{\partial^n U(q_0)}{\partial q^n} \int_0^1 d\tau \left(\tau - \frac{1}{2} \right)^n = \frac{1}{n!} \frac{(1 + (-1)^n)}{(n+1)2^{n+1}} \frac{\partial^n U(q^*)}{\partial q^n}, \quad (1.49)$$

где q^* обозначает некоторую точку, лежащую на траектории $q(\tau)$. Численные значения интеграла быстро убывают с ростом n : при $n = 2, 4, 6$ интеграл равен $1/24, 1/1920$ и $1/322560$ соответственно. Однако малость интегралов по τ в (1.46) может быть скомпенсирована большими значениями производных потенциала, что имеет место, например, когда образуются связанные многочастичные состояния. Более того, в этом случае матрица χ может оказаться не

положительно определённой, что делает формулу (1.48) неприменимой. Таким образом, мы ожидаем, что гармоническое приближение применимо для достаточно сильно ионизованной системы, когда вклад связанных состояний (атомов, молекулярных ионов, кластеров) мал. Помимо оценки (1.49) правомерность гармонического приближения может быть проверена численными расчётами для различных модельных систем с негармоническим потенциалом. Такой анализ рассмотрен в главе 3.

В «линейном» приближении вместо матрицы χ стоит единичная матрица и выражение для функции Вигнера выглядит значительно проще:

$$W_{LA}(p, q) = Z(\beta, V)^{-1} \int_{z(0)=z(1)=0} Dz(\tau) \exp \left\{ -\frac{1}{4\pi} \rho_{a,i} \rho_{a,i} \right\} \cos \left\{ \rho_{a,i} J_{a,i}[q, z(\tau)] \right\} \times \exp \left\{ -\pi K[z(\tau)] - \pi P[q, z(\tau)] \right\}. \quad (1.50)$$

Как и «гармоническое», «линейное» приближение применимо только для сильноионизованной системы.

Хотя выражения (1.48) и (1.50) весьма громоздки, они имеют интересную физическую интерпретацию. Так, каждая частица представляется не точкой (p, q) в фазовом пространстве, а целым семейством траекторий $(p, q(\tau))$. Множитель $\exp \left\{ -\pi K[z(\tau)] - \pi P[q, z(\tau)] \right\}$ в точности такой же, что в подынтегральном выражении для статистической суммы (3) и, по сути, описывает вклад диагональных элементов матрицы плотности в функцию Вигнера. При этом член $-\pi K$ определяет размеры траектории $q(\tau)$, так что каждая частица имеет эффективный размер порядка λ . Член $-\pi P$ описывает влияние потенциального взаимодействия частиц с учётом их нелокальности. Множитель $\exp \left\{ -\frac{1}{4\pi} \rho_{a,i} \chi_{a,i;b,j}^{-1} \rho_{b,j} \right\}$ определяет зависимость функции Вигнера от импульса. В случае идеального газа он приводит к распределению Максвелла $\exp \left\{ -\sum_a \mathbf{p}_a^2 / 2m \right\}$. Взаимодействие частиц между собой и с внешним полем приводит к модификации этого распределения: импульсы различных частиц начинают коррелировать друг с другом, а также с координатами. При этом «эффективная масса» частицы на траектории $m_{eff}[q, z(\tau)]$ может быть определена через собственные значения матрицы χ :

$$\det \left| \chi_{a,i;b,j} - \frac{m_{eff}}{m} \delta_{a,i;b,j} \right| = 0. \quad (1.51)$$

Множитель с косинусом также обеспечивает корреляцию между импульсами и траекториями координатами, а так же делает функцию Вигнера знакопеременной, что является проявлением интерференции между различными квантовыми состояниями. Из всего этого следует, что взаимодействие частиц в квантовой системе может влиять на равновесные функции распределения по импульсам даже без учёта обменного взаимодействия.

1.5 Парный псевдопотенциал для обменного взаимодействия

При выводе выражений для функции Вигнера в «гармоническом» и «линейном» приближении (1.48), (1.50) учитывалась только тождественная перестановка частиц. В этом разделе приводится обобщение этих выражений на нетождественные перестановки и показывается, что обменное взаимодействие можно учесть с помощью парного псевдопотенциала, зависящего от относительного импульса частиц и расстояния между ними. Сначала получим выражение для «обменного псевдопотенциала» в случае идеального газа, состоящего из невзаимодействующих фермионов или бозонов одного сорта. После этого обобщим результат на неидеальные системы.

1.5.1 Идеальный газ

Рассмотрим систему, состоящую из N невзаимодействующих частиц одного сорта. Её гамильтониан:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} + \dots + \frac{\hat{\mathbf{p}}_N^2}{2m}. \quad (1.52)$$

Для краткости здесь и далее будем опускать спиновые индексы σ . Вычислим функцию Вигнера для системы (1.52) непосредственно из определения (1.12). Для этого воспользуемся соотношением полноты для N -частичных состояний с определёнными импульсами (1.16). Так как такие состояния являются соб-

ственными для гамильтониана, статистический оператор может быть вычислен точно:

$$W_0(p, q) = \int \frac{d^{3N} \bar{p} d^{3N} q}{(2\pi\hbar)^{3N}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (p\xi) - \frac{\beta}{2m} (\bar{p})^2 \right\} \langle q - \xi/2 | p \rangle \langle p | q + \xi/2 \rangle. \quad (1.53)$$

N -частичные состояния с определёнными координатами и импульсами выражаются через одночастичные состояния $|\mathbf{q}\rangle$, $|\mathbf{p}\rangle$ следующим образом:

$$\begin{aligned} |q\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (\pm 1)^P |\mathbf{q}_{P1}\rangle |\mathbf{q}_{P2}\rangle \dots |\mathbf{q}_{PN}\rangle, \\ |p\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (\pm 1)^P |\mathbf{p}_{P1}\rangle |\mathbf{p}_{P2}\rangle \dots |\mathbf{p}_{PN}\rangle. \end{aligned} \quad (1.54)$$

Символом P обозначены перестановки частиц с одинаковой проекцией спина и сумма берётся по всевозможным перестановкам. Символ Pa обозначает номер частицы, с которой переставляется a -я частица. Знак «+» соответствует статистике Бозе-Эйнштейна, знак «−» соответствует статистике Ферми-Дирака. Как было показано в разделе 1.2, при вычислении функции Вигнера (1.53) можно ограничиться симметризацией (антисимметризацией) только состояния $|q + \xi/2\rangle$, а для оставшихся состояний рассматривать только тождественную перестановку, например $|\mathbf{q}_1\rangle |\mathbf{q}_2\rangle \dots |\mathbf{q}_N\rangle$. В результате (1.53) может быть преобразована к виду:

$$\begin{aligned} W_0(p, q) &= \sum_P (\pm 1)^P \int \frac{d^{3N} \bar{p} d^{3N} q}{(2\pi\hbar)^{3N}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (p\xi) - \frac{i}{\hbar} \left(\bar{p} \frac{\xi}{2} \right) - \frac{i}{\hbar} \left(\bar{p} \frac{P\xi}{2} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\beta}{2m} (\bar{p})^2 + \frac{i}{\hbar} (\bar{p} (q - Pq)) \right\}. \end{aligned} \quad (1.55)$$

Поскольку суммирование ведётся по всем частицам, можно переписать $\bar{p} (P\xi)$ в виде $(P^{-1}\bar{p}) \xi$, где символ $P^{-1}a$ обозначает обратную перестановку частицы, то есть номер частицы, которая переходит в a -ю частицу. Интеграл по переменной ξ приводит к дельта-функции, так что получается следующее выражение для

функции Вигнера идеального газа:

$$W_0(p, q) = \sum_P (\pm 1)^P \int d^3 \bar{\mathbf{p}}_1 \dots d^3 \bar{\mathbf{p}}_N \left[\prod_{a=1}^N \delta^{(3)} \left(\mathbf{p}_a - \frac{\bar{\mathbf{p}}_a + \bar{\mathbf{p}}_{P^{-1}a}}{2} \right) \right] \times \\ \times \exp \left\{ - \sum_{a=1}^N \frac{\beta}{2m} \bar{\mathbf{p}}_a^2 + \sum_{a=1}^N \frac{i}{\hbar} \bar{\mathbf{p}}_a (\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_{Pa}) \right\}, \quad (1.56)$$

где сумма берётся по всевозможным перестановкам частиц P . Рассмотрим вклады от различных перестановок.

В случае тождественной перестановки $Pa = a$, и интеграл сводится к замене $\bar{\mathbf{p}}_a \rightarrow \mathbf{p}_a$. Таким образом, тождественная перестановка частицы приводит к максвелловкой функции:

$$w_{P1}(\mathbf{p}_a, \mathbf{q}_a) = + \exp \left\{ - \frac{\beta}{2m} \mathbf{p}_a^2 \right\}. \quad (1.57)$$

Так как взаимодействие отсутствует, то это выражение не зависит от координаты.

В случае парной перестановки $Pa = b$ и $Pb = a$, так что можно сделать замену переменных: $\bar{\mathbf{p}}_{ab} = (\bar{\mathbf{p}}_a + \bar{\mathbf{p}}_b)/2$, $\bar{\rho}_{ab} = \bar{\mathbf{p}}_a - \bar{\mathbf{p}}_b$. Гауссов интеграл по $\bar{\rho}_{ab}$ легко вычислить, а интеграл по $\bar{\mathbf{p}}_{ab}$ приводит к дельта-функции от относительного импульса частиц. Таким образом, парная перестановка частиц a и b даёт следующий вклад в функцию Вигнера:

$$w_{P2}(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b, \mathbf{q}_a, \mathbf{q}_b) = (\pm 1) \delta^{(3)} \left(\frac{(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b) \lambda'}{2\pi\hbar} \right) \exp \left\{ - \frac{\beta}{2m} (\mathbf{p}_a^2 + \mathbf{p}_b^2) - \frac{\pi}{\lambda'^2} (\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_b)^2 \right\}. \quad (1.58)$$

Величина $\lambda' = \lambda/\sqrt{2}$ может быть интерпретирована как тепловая длина волны Де Бройля для центра масс частиц a и b .

Высшие перестановки, в которых меняются местами три, четыре и более частиц, имеют структуру гауссовых экспонент, умноженных на знакопеременные косинусы, и могут быть вычислены аналогично. Соответствующие выражения и их вывод весьма громоздки и не приводятся здесь.

Заметим, что парная перестановка (1.58) даёт существенный вклад в функцию Вигнера только в том случае, когда импульсы и координаты каких-либо

двух частиц практически совпадают. В случае статистики Ферми-Дирака этот вклад оказывается отрицательным, а в случае статистики Бозе-Эйнштейна — положительным. Практическая трудность состоит в том, что выражение (1.58) бесконечно из-за дельта-функции $\delta^{(3)}(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b)$. В случае фермионов эта проблема проявляется особенно остро, так как функция Вигнера при этом оказывается знакопеременной и сильно осциллирующей, что приводит к «фермионной проблеме знака» в численных расчётах [16].

Преодолеть эту трудность можно, если рассматривать фазовое (p, q) -пространство с точностью до достаточно малых ячеек со сторонами Δ_p и Δ_q по импульсам и координатам соответственно. Точнее, усредним функцию Вигнера $W(p, q)$ по всему фазовому пространству вместе с характеристическими функциями $\Phi(\mathbf{p}, \mathbf{q}; \mathbf{p}', \mathbf{q}')$, стремящимися к нулю, если импульс \mathbf{p} и координата \mathbf{q} частицы находятся вне ячейки с центром в точке с импульсом \mathbf{p}' и координатой \mathbf{q}' :

$$W'(p', q') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}} \int d^{3N}p d^{3N}q W(p, q) \Phi(\mathbf{p}_1, \mathbf{q}_1; \mathbf{p}'_1, \mathbf{q}'_1) \cdots \Phi(\mathbf{p}_N, \mathbf{q}_N; \mathbf{p}'_N, \mathbf{q}'_N). \quad (1.59)$$

Характеристическую функцию $\Phi(\mathbf{p}, \mathbf{q}; \mathbf{p}', \mathbf{q}')$ аппроксимируем гауссовой экспонентой следующего вида:

$$\Phi(\mathbf{p}, \mathbf{q}; \mathbf{p}', \mathbf{q}') = \exp\left\{-\frac{\pi}{\Delta_p}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2 - \frac{\pi}{\Delta_q}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')^2\right\}, \quad (1.60)$$

которая оказывается порядка единицы внутри данной ячейки фазового пространства и быстро убывает за её пределами.

Для начала рассмотрим систему, состоящую только из двух невзаимодействующих частиц a и b . Усреднённая функция Вигнера $W'(p', q')$ в данном случае состоит из двух частей:

$$W'(p', q') = (I) \pm (II), \quad (1.61)$$

возникающих из тождественной и парной перестановки соответственно. Относительный знак «+» соответствует бозонам, знак «-» соответствует фермионам. Вычислим эти вклады по отдельности.

Тождественная перестановка даёт, распадающийся на интегралы по импульсам и координатам для каждой частицы. Частице a отвечает следующее выражение:

$$(I)_a = \int \frac{d^3\mathbf{p}_a d^3\mathbf{q}_a}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{-\frac{\beta}{2m}\mathbf{p}_a^2 - \frac{\pi}{\Delta_p}(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}'_a)^2 - \frac{\pi}{\Delta_q}(\mathbf{q}_a - \mathbf{q}'_a)^2\right\}, \quad (1.62)$$

которое, в свою очередь, разделяется на интегралы по координате и импульсу. Эти интегралы легко вычислить, сделав замену переменных $\mathbf{p}_a = \mathbf{p}'_a + \rho_a$ и $\mathbf{q}_a = \mathbf{q}'_a + \eta_a$:

$$(I)_a = \frac{(\Delta_p\Delta_q)^3}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{(1 + \alpha_p^2)^{3/2}} \exp\left\{-\frac{\beta}{2m}\left(1 - \frac{\alpha_p^2}{1 + \alpha_p^2}\right)\mathbf{p}'_a{}^2\right\}, \quad (1.63)$$

где $\alpha_p = \frac{\Delta_p\lambda}{2\pi\hbar}$ — безразмерный коэффициент, определяющий соотношение между Δ_p и λ . Частице b соответствует такое же выражение с заменой \mathbf{p}'_a на \mathbf{p}'_b . Таким образом, тождественная перестановка даёт следующий вклад в функцию Вигнера, усреднённую по ячейкам фазового пространства:

$$(I) = \left(\frac{\Delta_p\Delta_q}{2\pi\hbar}\right)^{3\cdot 2} (1 + \alpha_p^2)^{-3} \exp\left\{-\frac{\beta}{2m}\left(1 - \frac{\alpha_p^2}{1 + \alpha_p^2}\right)(\mathbf{p}'_a{}^2 + \mathbf{p}'_b{}^2)\right\}. \quad (1.64)$$

Отметим, что в результате «огрубления» функции Вигнера эффективная кинетическая энергия частиц уменьшается.

Вклад парной перестановки существенно сложнее, и распадается на две части $(II)_p$ и $(II)_q$, содержащие интегралы по импульсам и координатам соответственно. Сначала рассмотрим импульсную часть:

$$(II)_p = \int d^3\mathbf{p}_a d^3\mathbf{p}_b \delta^{(3)}\left(\frac{(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b)\lambda'}{2\pi\hbar}\right) \exp\left\{-\frac{\beta}{2m}(\mathbf{p}_a^2 + \mathbf{p}_b^2) - \frac{\pi}{\Delta_p}(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}'_a)^2 - \frac{\pi}{\Delta_p}(\mathbf{p}_b - \mathbf{p}'_b)^2\right\}. \quad (1.65)$$

Интеграл по \mathbf{p}_b берётся с помощью дельта-функции, после чего оставшийся гауссов интеграл нетрудно вычислить, сделав замену $\mathbf{p}_a = \mathbf{p}'_a + \rho_a$:

$$(II)_p = \frac{(2\pi\hbar)^3}{\lambda^3} \Delta_p^3 (1 + \alpha_p^2)^{-3/2} \exp\left\{-\frac{\beta}{2m} \left(1 - \frac{\alpha_p^2}{1 + \alpha_p^2}\right) (\mathbf{p}'_a + \mathbf{p}'_b)\right\} \times \\ \times \exp\left\{-\frac{\pi}{2\Delta_p^2} \left(1 - \frac{\alpha_p^2}{1 + \alpha_p^2}\right) (\mathbf{p}'_a - \mathbf{p}'_b)^2\right\}, \quad (1.66)$$

где вместо дельта-функции от относительного импульса частиц стоит гауссова экспонента с характерной шириной Δ_p . Теперь вычислим координатную часть:

$$(II)_q = \int d^3\mathbf{q}_a d^3\mathbf{q}_b \exp\left\{-\frac{\pi}{\lambda^2} (\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_b)^2 - \Delta_q (\mathbf{q}_a - \mathbf{q}'_a)^2 - \frac{\pi}{\Delta_q} (\mathbf{q}_b - \mathbf{q}'_b)^2\right\}. \quad (1.67)$$

Это выражение разделяется на отдельные интегралы для пространственных компонент, сводящиеся к обобщённым гауссовым интегралам с симметричной матрицей $\|\mathbf{A}\|$ и вещественным вектором \mathbf{b} при $D = 2$:

$$\int d^D x \exp\left\{-\mathbf{x}^T \|\mathbf{A}\| \mathbf{x} + \mathbf{b}^T \mathbf{x}\right\} = \frac{\pi^{D/2}}{[\det \|\mathbf{A}\|]^{1/2}} \exp\left\{\frac{1}{4} \mathbf{b}^T \|\mathbf{A}\|^{-1} \mathbf{b}\right\}. \quad (1.68)$$

Элементы матрицы $\|\mathbf{A}\|$ и вектора \mathbf{b} таковы:

$$A_{11} = A_{22} = \frac{\pi}{\Delta_q^2} (1 + 2\alpha_q^2), \quad A_{12} = A_{21} = \frac{\pi}{\Delta_q^2} (-2\alpha_q^2), \\ B_1 = \frac{2\pi}{\Delta_q^2} \mathbf{q}'_a, \quad B_2 = \frac{2\pi}{\Delta_q^2} \mathbf{q}'_b, \quad (1.69)$$

где безразмерный коэффициент $\alpha_q = \frac{\Delta_q}{\lambda}$ определяет соотношение между Δ_q и λ . Обратную матрицу $\|\mathbf{A}^{-1}\|$ и детерминант $\det \|\mathbf{A}\|$ легко вычислить непосред-

СТВЕННО:

$$\begin{aligned}
A_{11}^{-1} &= A_{22}^{-1} = \frac{\Delta_q^2}{\pi} \frac{1}{1 + 4\alpha_q^2} (1 + 2\alpha_q^2), \\
A_{12}^{-1} &= A_{21}^{-1} = \frac{\Delta_q^2}{\pi} \frac{1}{1 + 4\alpha_q^2} (2\alpha_q^2), \\
\det |\mathbf{A}| &= \left(\frac{\pi}{\Delta_q^2} \right)^2 (1 + 4\alpha_q^2).
\end{aligned} \tag{1.70}$$

В результате для координатной части парной перестановки получается следующее выражение:

$$(II)_p = \Delta_q^{3 \cdot 2} (1 + 4\alpha_q^2)^{-3/2} \exp \left\{ -\frac{\pi}{\lambda'^2} \frac{1}{1 + 4\alpha_q^2} (\mathbf{q}'_a - \mathbf{q}'_b)^2 \right\}. \tag{1.71}$$

Объединяя вместе результаты (1.66) и (1.71), найдём вклад парной перестановки в функцию Вигнера, усреднённую по ячейкам фазового пространства:

$$\begin{aligned}
(II) &= (I) \times \left(\frac{(1 + \alpha_p^2)}{\alpha_p^2 (1 + 4\alpha_q^2)} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{\pi}{2\Delta_p^2} \left(1 - \frac{\alpha_p^2}{1 + \alpha_p^2} \right) (\mathbf{p}'_a - \mathbf{p}'_b)^2 - \right. \\
&\quad \left. - \frac{\pi}{\lambda'^2} \frac{1}{1 + 4\alpha_q^2} (\mathbf{q}'_a - \mathbf{q}'_b)^2 \right\}.
\end{aligned} \tag{1.72}$$

Таким образом, усреднённая функция Вигнера для системы, состоящей из двух невзаимодействующих частиц, описывается следующим выражением:

$$\begin{aligned}
W'(p', q') &= \left(\frac{\Delta_p \Delta_q}{2\pi \hbar} \right)^{3 \cdot 2} (1 + \alpha_p^2)^{-3} \exp \left\{ -\frac{\beta}{2m} \left(1 - \frac{\alpha_p^2}{1 + \alpha_p^2} \right) (\mathbf{p}'_a + \mathbf{p}'_b)^2 \right\} \times \\
&\quad \left[1 \pm \left(\frac{(1 + \alpha_p^2)}{\alpha_p^2 (1 + 4\alpha_q^2)} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{\pi}{2\Delta_p^2} \left(1 - \frac{\alpha_p^2}{1 + \alpha_p^2} \right) (\mathbf{p}'_a - \mathbf{p}'_b)^2 - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{\pi}{\lambda'^2} \frac{1}{1 + 4\alpha_q^2} (\mathbf{q}'_a - \mathbf{q}'_b)^2 \right\} \right].
\end{aligned} \tag{1.73}$$

Первые два множителя, общие для всех перестановок, относятся к нормировке усреднённой функции Вигнера и не проявляются при вычислении средних значений квантовых операторов. Следующий общий множитель представляет собой максвелловское распределение, в котором кинетическая энергия частиц

уменьшена из-за усреднения по ячейкам фазового пространства. При достаточно малом Δ_p этим уменьшением можно пренебречь и рассматривать обычное распределение Максвелла. Наконец, второе слагаемое в квадратных скобках описывает вклад парной перестановки. Оно становится существенным, когда импульсы частиц различаются на величину порядка Δ_p , а координаты — на величину порядка λ .

В случае статистики Бозе-Эйнштейна усреднённая функция Вигнера для двух частиц (1.73) всегда положительна, поэтому выражение в квадратных скобках можно представить в виде:

$$W'(p',q') = \exp\left\{-\frac{\beta}{2m} \left(\mathbf{p}'_a + \mathbf{p}'_b\right) - \beta v_{BE,ab}\right\}, \quad (1.74)$$

где символом $v_{BE,ab}$ обозначена часть (1.61), описывающая перестановки частиц a и b :

$$v_{BE,ab} = -\frac{1}{\beta} \ln \left[1 + \left(\frac{(1 + \alpha_p^2)}{\alpha_p^2(1 + 4\alpha_q^2)} \right)^{3/2} \exp\left\{-\frac{\pi}{2\Delta_p^2} \left(1 - \frac{\alpha_p^2}{1 + \alpha_p^2}\right) (\mathbf{p}'_a - \mathbf{p}'_b)^2 - \frac{\pi}{\lambda^2} \frac{1}{1 + 4\alpha_q^2} (\mathbf{q}'_a - \mathbf{q}'_b)^2\right\} \right]. \quad (1.75)$$

Из выражения (1.74) следует, что функция $v_{BE,ab}$ имеет смысл псевдопотенциала, учитывающего обменное взаимодействие двух бозонов и зависящего от относительных импульсов и координат двух частиц. При этом размеры ячейки фазового пространства Δ_p и Δ_q должны быть малы по сравнению с характерными квантовыми масштабами импульсов $\frac{2\pi\hbar}{\lambda}$ и координат λ ; других условий на них не накладывается.

В случае статистики Ферми-Дирака усреднённая функция Вигнера (1.73) в общем случае знакопеременна. Однако можно обойти эту проблему, подобрав Δ_p и Δ_q таким образом, чтобы она не принимала отрицательных значений. Для этого размеры ячейки фазового пространства должны удовлетворять следующему соотношению:

$$\frac{\Delta_p \Delta_q}{2\pi\hbar} = \frac{1}{2}, \quad (1.76)$$

имеющему вид соотношения неопределённости Гейзенберга «импульс-координата». При этом размер координатной ячейки Δ_q должен быть мал по сравнению

в характерным квантовым масштабом длин λ для того, чтобы правильно описывать зависимость обменного взаимодействия от координат частиц. Таким образом, усреднённая функция Вигнера для двух фермионов также может быть записана в виде (1.74), однако с другим обменным псевдопотенциалом:

$$v_{FD,ab} = -\frac{1}{\beta} \ln \left[1 - \exp \left\{ -\frac{\pi}{2\Delta_p^2} \left(1 - \frac{\alpha_p^2}{1 + \alpha_p^2} \right) (\mathbf{p}'_a - \mathbf{p}'_b)^2 - \frac{\pi}{\lambda'^2} \frac{1}{1 + 4\alpha_q^2} (\mathbf{q}'_a - \mathbf{q}'_b)^2 \right\} \right], \quad (1.77)$$

где Δ_p и Δ_q удовлетворяют условию (1.76).

В общем случае N -частичной системы обменное взаимодействие можно учесть аналогичным образом, рассматривая различные перестановки в парном приближении [47]. При этом каждой паре частиц должен соответствовать обменный псевдопотенциал, зависящий от относительных импульсов и координат частиц аналогично (1.75) и (1.77). Таким образом, усреднённая функция Вигнера для системы из N невзаимодействующих частиц имеет вид:

$$W'_0(p,q) = \exp \left\{ -\sum_{a=1}^N \frac{\beta}{2m} \bar{\mathbf{p}}_a^2 - \beta \sum_{a=1}^N \sum_{b=a+1}^N v_{ab} \right\}, \quad (1.78)$$

где v_{ab} обозначает бозонный либо фермионный парный обменный псевдопотенциал. Однако точные выражения типа (1.75) и (1.77) в N -частичном случае вывести затруднительно из-за того, что каждая частица взаимодействует с остальными и нормировочные интегралы вычислить аналитически очень сложно. Поэтому имеет смысл определить обменные потенциалы $v_{BE,ab}$ и $v_{FD,ab}$ с помощью полуэмпирических параметров, определяемых из численных расчётов для идеального газа (см. Главу 3).

Так, бозонный обменный псевдопотенциал $v_{BE,ab}$ получим из (1.1), предполагая $\alpha_p \ll 1$ и $\alpha_q \ll 1$:

$$v_{BE,ab} = -\frac{1}{\beta} \ln \left[1 + \exp \left\{ -\frac{(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b)^2 (\lambda')^2}{4\pi \hbar^2 \alpha^2} - \frac{\pi}{\lambda'^2} (\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_b)^2 - 3 \ln \alpha \right\} \right]. \quad (1.79)$$

Для удобства предэкспоненциальный множитель внесён под экспоненту. Малый безразмерный параметр α следует выбирать так, чтобы численный рас-

чёт функции распределения по импульсам приводил к распределению Бозе. Бозонный псевдопотенциал (1.79) является притягивающим и конечным во всём (p, q) -пространстве, что отражает стремление бозонов находится в одном и том же квантовом состоянии. На Рис. 1.1 показан типичный вид псевдопотенциала $v_{BE,ab}$.

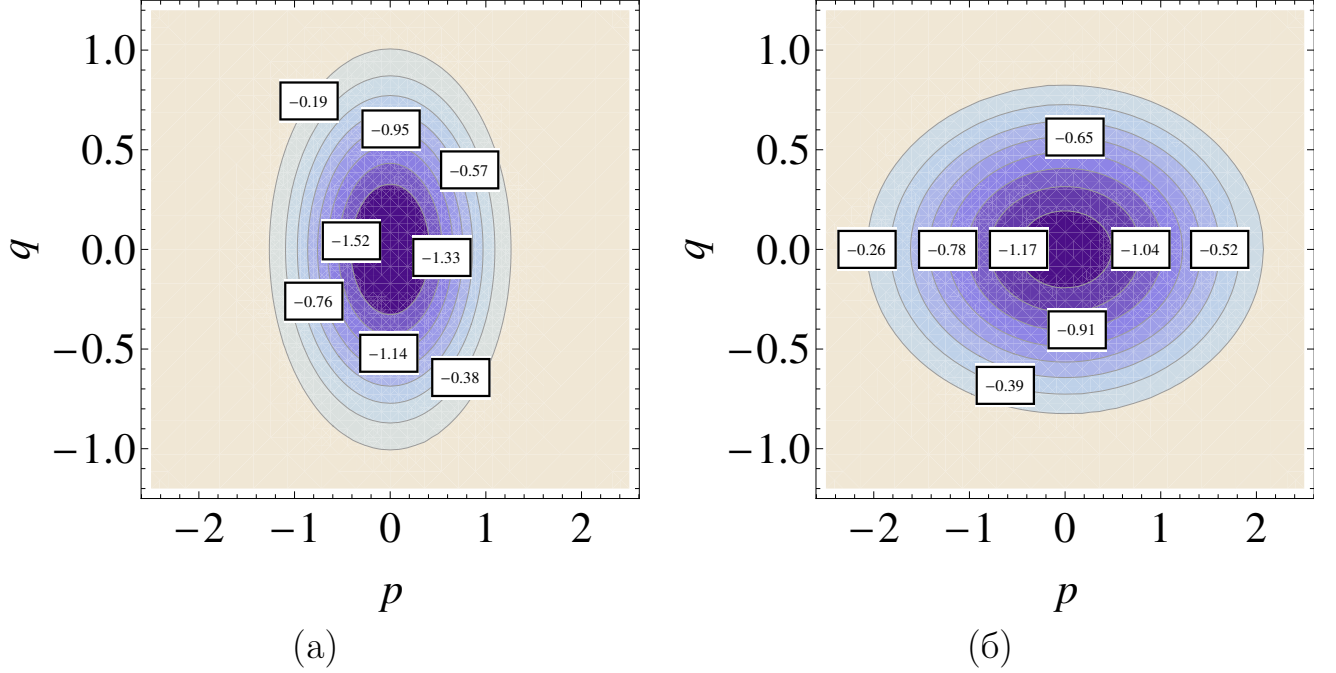


Рисунок 1.1 — Бозонный обменный псевдопотенциал $v_{BE,ab}$ в одномерном случае при значениях параметра α^2 0.04 (а) и 0.16 (б).

Фермионный обменный псевдопотенциал получим из (1.77), положив предэкспоненциальный множитель равным единице и полагая $\alpha_q \ll 1$:

$$v_{FD,ab} = -\frac{1}{\beta} \ln \left[1 - \exp \left\{ -\frac{(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b)^2 (\lambda')^2}{4\pi\hbar^2\alpha^2} - \frac{\pi}{\lambda'^2} (\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_b)^2 \right\} \right]. \quad (1.80)$$

Безразмерный параметр α подбирается так, чтобы численный расчёт функции распределения по импульсам приводил к распределению Ферми. Вообще говоря, α зависит от плотности частиц N/V и температуры T . Более подробно это обсуждается в разделе 3.2. Фермионный псевдопотенциал (1.80) отражает принцип Паули, запрещающий двум фермионам находиться в одном квантовом состоянии. Так, псевдопотенциал $v_{FD,ab}$ оказывается бесконечен, если две частицы попадают в одну точку фазового пространства. На Рис. 1.2 показан типичный вид обменного псевдопотенциала $v_{FD,ab}$ в фазовом пространстве.

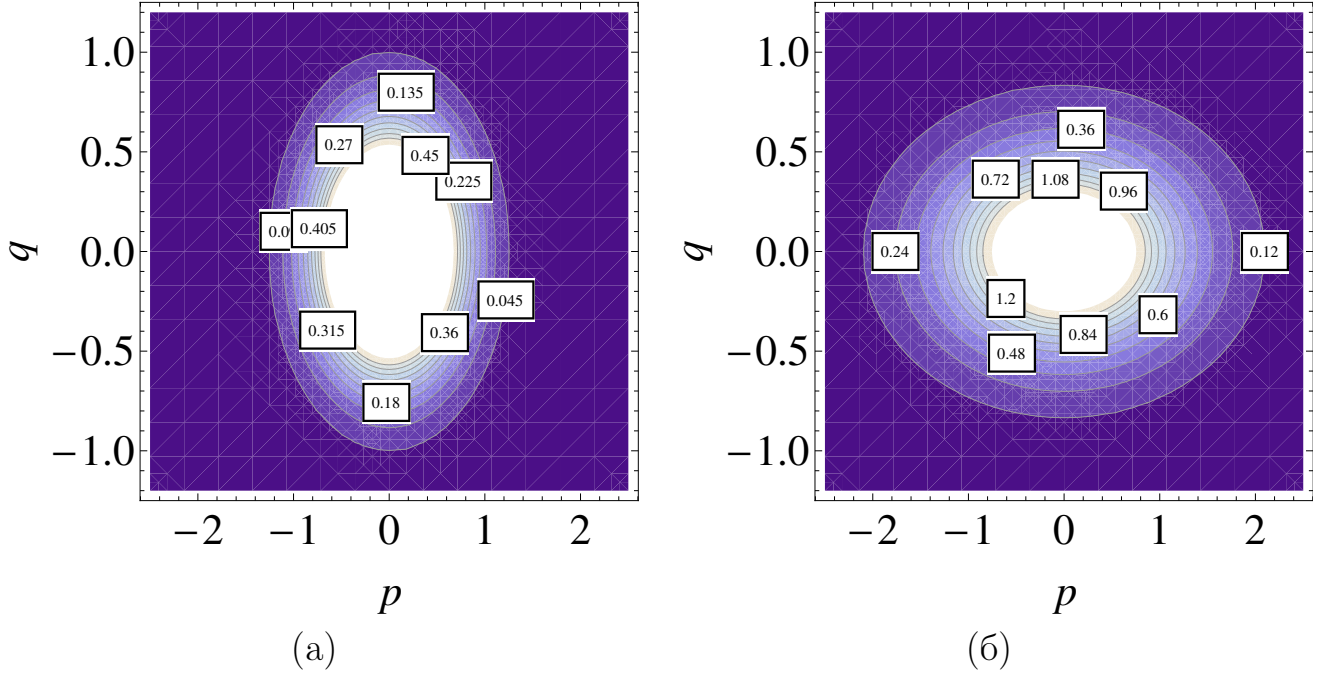


Рисунок 1.2 — Фермионный обменный псевдопотенциал $v_{FD,ab}$ в одномерном случае при значении параметра α^2 0.04 (а) и 0.16 (б).

1.5.2 Учёт взаимодействия

Как было только что показано, при вычислении функции Вигнера идеального газа обменное взаимодействие может быть приближённо учтено с помощью парного псевдопотенциала v_{ab} , зависящего от расстояния между частицами, их относительного импульса, температуры и объёма. Обобщим теперь этот результат на систему N частиц, взаимодействующих между собой или с внешним полем. Для этого воспользуемся «линейным» и «гармоническим» приближениями для функции Вигнера, описанными в разделе 1.4.

Как и в идеальном случае, можно записать последовательные вклады в функцию Вигнера различных перестановок аналогично (1.56). Единственное отличие состоит в том, что переменная преобразования Фурье ξ содержится не только в члене $i(p\xi)/\hbar$, но и в разложении потенциальной энергии (1.44). Поэтому после взятия интеграла по ξ в «линейном» приближении дельта-функция будет зависеть от комбинации импульсов частиц p с первыми производными потенциала вдоль траектории:

$$\tilde{\mathbf{p}}_a = \mathbf{p}_a + \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \mathbf{J}[q, z(\tau)]. \quad (1.81)$$

В «линейном» приближении вклады тождественных и парных перестановок аналогичны (1.57) и (1.58), отличаясь только наличием функционалов K , P , J в «максвелловском» множителе, а также заменой p на \tilde{p} в дельта-функциях. Поэтому в силе остаются все рассуждения, приведшие к формулам (1.78), (1.79) и (1.80). Таким образом, в «линейном» приближении функция Вигнера имеет вид:

$$W_{LA}(p, q) = Z(\beta, V)^{-1} \int_{z(0)=z(1)=0} Dz(\tau) \exp \left\{ - \sum_{a=1}^N \frac{\beta}{2m} \mathbf{p}_a^2 - \beta \sum_{a>b} \tilde{v}_{ab} \right\} \times \\ \times \cos \left\{ \rho_{a,i} J_{a,i}[q, z(\tau)] \right\} \exp \{ -\pi K[z(\tau)] - \pi P[q, z(\tau)] \}, \quad (1.82)$$

причём обменный потенциал зависит также от производной потенциальной энергии взаимодействия:

$$\tilde{v}_{BE,ab} = -\frac{1}{\beta} \ln \left[1 + \exp \left\{ -\frac{(\tilde{\mathbf{p}}_a - \tilde{\mathbf{p}}_b)^2 (\lambda')^2}{4\pi \hbar^2 \alpha^2} - \frac{\pi}{\lambda'^2} (\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_b)^2 - 3 \ln \alpha \right\} \right]; \\ \tilde{v}_{FD,ab} = -\frac{1}{\beta} \ln \left[1 - \exp \left\{ -\frac{(\tilde{\mathbf{p}}_a - \tilde{\mathbf{p}}_b)^2 (\lambda')^2}{4\pi \hbar^2 \alpha^2} - \frac{\pi}{\lambda'^2} (\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_b)^2 \right\} \right]. \quad (1.83)$$

В «гармоническом» приближении под экспонентой возникает дополнительный член вида $\xi^T (\chi - E) \xi$, где E — единичная матрица, так что интеграл по ξ приводит не к дельта-функции, а к гауссовой экспоненте:

$$\delta^{(3N)} \left(p_a - \frac{\bar{p}_a + P^{-1} \bar{p}}{2} \right) \rightarrow \\ \rightarrow \exp \left\{ -\frac{1}{4} \left(p - \frac{\tilde{p} + P^{-1} \tilde{p}}{2} \right)_{a,i} (\chi - E)_{a,i;b,j}^{-1} \left(p - \frac{\tilde{p} + P^{-1} \tilde{p}}{2} \right)_{b,j} \right\}. \quad (1.84)$$

Однако в рамках применимости «гармонического» приближения обратная матрица $(\chi - E)^{-1}$ оказывается численно велика, так что отличием экспоненты от дельта-функции можно пренебречь. Таким образом, в «гармоническом» при-

ближении функция Вигнера:

$$\begin{aligned}
W_{HA}(p, q) &= Z(\beta, V)^{-1} \int_{z(0)=z(1)=0} Dz(\tau) \det \left| \chi_{ai,bj}^{-1}[q, z(\tau)] \right|^{1/2} \times \\
&\exp \left\{ -\frac{1}{4\pi} \rho_{a,i} \chi_{a,i;b,j}^{-1}[q, z(\tau)] \rho_{b,j} - \beta \sum_{a>b} \tilde{v}_{ab} + \pi J_{a,i}[q, z(\tau)] \chi_{a,i;b,j}^{-1}[q, z(\tau)] J_{b,j}[q, z(\tau)] \right\} \times \\
&\cos \left\{ \rho_{a,i} \chi_{ai,bj}^{-1}[q, z(\tau)] J_{b,j}[q, z(\tau)] \right\} \times \exp \{ -\pi K[z(\tau)] - \pi P[q, z(\tau)] \}, \quad (1.85)
\end{aligned}$$

где обменный псевдопотенциал определяется формулой (1.83). Отметим, что в этой формуле явно видны три механизма, влияющие на равновесное распределение по импульсам: обменное взаимодействие за счёт псевдопотенциала \tilde{v}_{ab} , квантовая интерференция за счёт косинуса и изменение эффективной массы частицы на траектории за счёт взаимодействия (1.51).

Глава 2. Численные методы

В данной главе рассматриваются методы численного моделирования термодинамических свойств неидеальных квантовых систем частиц, основанные на функции Вигнера. Глава состоит из трёх разделов.

В разделе 2.1 излагается основная идея методов Монте Карло для вычисления многомерных интегралов, обсуждаются статистические ошибки методов и описывается общий алгоритм Метрополиса-Гастингса.

В разделе 2.2 детально рассматривается численный метод SMPMC, обсуждается его сходимость и подбор технических параметров в различных ситуациях, а также приводятся комментарии к программной реализации метода.

В разделе 2.3 детально рассматриваются численные методы LAPMC и NARMC, обсуждаются их сходимости и подбор технических параметров в различных условиях, а также приводятся комментарии к программным реализациям методов.

2.1 Методы Монте Карло

Методы Монте Карло часто используются для вычисления многомерных определённых интегралов следующего вида:

$$I = \frac{\int_{\Omega} P(\bar{\mathbf{x}})f(\bar{\mathbf{x}})d\bar{\mathbf{x}}}{Q}, \quad (2.1)$$

где Ω — область в многомерном пространстве R_m , а Q — нормировочный множитель:

$$Q = \int_{\Omega} P(\bar{\mathbf{x}})d\bar{\mathbf{x}}. \quad (2.2)$$

Здесь весовая функция $P(\bar{\mathbf{x}})$ предполагается неотрицательной, в то время как усредняемая функция $f(\bar{\mathbf{x}})$ — произвольной. В отличие от детерминированных численных подходов, вычисляющих интеграл на регулярной сетке в пространстве R_m , методы Монте Карло оценивают подынтегральное выражение в случайных точках R_m . Хотя различные случайные выборки точек приводят к раз-

личным оценкам интеграла, при большом их числе получается правильное значение I в пределах статистической погрешности. Методы Монте Карло особенно эффективны для интегралов с большой размерностью, когда детерминированные методы неприменимы.

Существуют различные способы выборки случайных точек: равновероятная выборка, стратифицированная выборка и выборка по значимости. Наиболее широко в методах Монте Карло используется выборка по значимости. При выборке по значимости случайные точки $\bar{\mathbf{x}}$, в принципе, могут быть взяты с произвольным распределением $\bar{P}(\bar{\mathbf{x}})$. Однако для уменьшения статистической погрешности при вычислении I распределение $\bar{P}(\bar{x})$ должно быть близким к $P(\bar{x})$. При этом отпадает необходимость вычислять нормировочный множитель Q , что обычно крайне трудно сделать на практике. Действительно, пусть задана выборка случайных точек с распределением $P(\bar{x})$:

$$\bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{x}}_2, \dots, \bar{\mathbf{x}}_N \in \Omega. \quad (2.3)$$

Среднее значение по выборке равно:

$$I \approx I_N \equiv \langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\bar{\mathbf{x}}_i). \quad (2.4)$$

Тогда, согласно закону больших чисел, значение интеграла I может быть аппроксимировано I_N :

$$I = \lim_{N \rightarrow \infty} I_N. \quad (2.5)$$

Погрешность δI_N может быть оценена следующим образом. По определению, дисперсия подынтегральной функции:

$$\text{Var} f \equiv \sigma_N^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N [f(\bar{\mathbf{x}})_i - \langle f \rangle]^2, \quad (2.6)$$

что приводит, согласно (2.4), к следующему выражению для дисперсии I_N :

$$\text{Var} I_N = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \text{Var} f = \frac{\sigma_N^2}{N}. \quad (2.7)$$

Таким образом, дисперсия I_N асимптотически стремится к нулю при $N \rightarrow \infty$ по закону $1/N$. Соответственно, погрешность I_N может быть оценена так:

$$\delta I_N = \frac{\sigma_N}{\sqrt{N}}, \quad (2.8)$$

и не зависит от размерности интеграла. В этом заключается основное преимущество методов Монте Карло перед большинством детерминированных методов, экспоненциально зависящих от размерности. Отметим, что случайная выборка может не учитывать все тонкости подынтегрального выражения (2.1), что может привести к недооценке погрешности по формуле (2.8).

Рассмотрим теперь обобщение (2.4) на интегралы со знакопеременной весовой функцией. В общем случае такой интеграл можно представить в виде:

$$I = \frac{\int_{\Omega} P(\bar{\mathbf{x}})w(\bar{\mathbf{x}})f(\bar{\mathbf{x}})d\bar{\mathbf{x}}}{\int_{\Omega} P(\bar{\mathbf{x}})w(\bar{\mathbf{x}})d\bar{\mathbf{x}}}, \quad (2.9)$$

где функция $P(\bar{\mathbf{x}})$ предполагается неотрицательной, а функция $w(\bar{\mathbf{x}})$ знакопеременна. Например, в качестве P можно взять абсолютную величину весовой функции, а в качестве w — её знак. Умножая числитель и знаменатель (2.9) на Q , определённое согласно (2.2), получим следующее выражение:

$$I = \frac{\int_{\Omega} P(\bar{\mathbf{x}})w(\bar{\mathbf{x}})f(\bar{\mathbf{x}})d\bar{\mathbf{x}}/Q}{\int_{\Omega} P(\bar{\mathbf{x}})w(\bar{\mathbf{x}})d\bar{\mathbf{x}}/Q}, \quad (2.10)$$

числитель и знаменатель которого являются интегралами вида (2.1) с положительной весовой функцией $P(\bar{\mathbf{x}})$ и нормировкой Q . Они могут быть приближённо вычислены с помощью случайной выборки точек (2.3):

$$\langle w \cdot f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w(\bar{\mathbf{x}}_i) f(\bar{\mathbf{x}}_i), \quad \langle w \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w(\bar{\mathbf{x}}_i), \quad (2.11)$$

в результате чего интеграл I можно аппроксимировать следующим выражением:

$$I \approx \frac{\langle w \cdot f \rangle}{\langle w \rangle}. \quad (2.12)$$

В частности, если функция $w(\bar{\mathbf{x}})$ является знаком весовой функции, знаменатель (2.12) имеет смысл «среднего значения знака». В том случае, когда весовая

функция сильно осциллирует, среднее значение знака близко к нулю. Это приводит к большой ошибке при вычислении интеграла I , так что требуется большая случайная выборка $\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_N$ для надёжной аппроксимации (2.12). Подобная проблема, известная как «проблема знака», является одним из главных препятствий при расчётах методами Монте Карло.

2.1.1 Алгоритм Метрополиса-Гастингса

Алгоритм Метрополиса-Гастингса позволяет получать последовательности случайных точек $\bar{\mathbf{x}}$ с произвольным распределением $P(\bar{\mathbf{x}})$, если только можно вычислить значение функции $P(\bar{\mathbf{x}})$. Такие последовательности могут быть использованы для вычисления интегралов вида (2.1) и (2.10) методами Монте Карло.

Алгоритм Метрополиса-Гастингса основан на марковском процессе, который автоматически достигает стационарного распределения $\pi(\bar{\mathbf{x}})$, совпадающего с $P(\bar{\mathbf{x}})$. Марковский процесс полностью определяется вероятностями перехода $P(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')$ от текущего состояния $\bar{\mathbf{x}}$ к следующему состоянию $\bar{\mathbf{x}}'$. Для того, чтобы получаемые состояния имели стационарное распределение $\pi(\bar{\mathbf{x}})$, необходимо выполнение двух условий:

1. **Существование стационарного распределения π .** Достаточным условием является детальный баланс, который требует обратимости каждого перехода $\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}'$. Иными словами, вероятность находиться в состоянии $\bar{\mathbf{x}}$ и перейти в состояние $\bar{\mathbf{x}}'$ должна быть равна вероятности находиться в состоянии $\bar{\mathbf{x}}'$ и перейти в состояние $\bar{\mathbf{x}}$:

$$\pi(\bar{\mathbf{x}})P(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}') = \pi(\bar{\mathbf{x}}')P(\bar{\mathbf{x}}' \rightarrow \bar{\mathbf{x}}). \quad (2.13)$$

2. **Единственность стационарного распределения π .** Это условие выполняется, если марковский процесс обладает свойством эргодичности: (i) система не должна возвращаться в одно и то же состояние за фиксированное число шагов и (ii) ожидаемое количество шагов для возврата в прежнее состояние должно быть конечным.

Вероятности перехода $P(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')$ должны быть устроены так, чтобы стационарное распределение марковского процесса $\pi(\bar{\mathbf{x}})$ было равно $P(\bar{\mathbf{x}})$. Для этого перепишем уравнение детального баланса (2.13) в виде:

$$\frac{P(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')}{P(\bar{\mathbf{x}}' \rightarrow \bar{\mathbf{x}})} = \frac{P(\bar{\mathbf{x}}')}{P(\bar{\mathbf{x}})}. \quad (2.14)$$

Основная идея алгоритма Метрополиса-Гастингса состоит в том, чтобы разделить переход $\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}'$ на два этапа. Пусть цепь Маркова находится в состоянии $\bar{\mathbf{x}}$. На первом этапе выбирается случайным образом с вероятностью $g(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')$ состояние $\bar{\mathbf{x}}'$. На втором этапе $\bar{\mathbf{x}}'$ либо принимается с вероятностью $A(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')$ в качестве нового состояния, либо отклоняется, и цепь остаётся в прежнем состоянии $\bar{\mathbf{x}}$. Полная вероятность перехода $P(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')$ равна произведению этих вероятностей:

$$P(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}') = g(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')A(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}'). \quad (2.15)$$

Подставляя это выражение в уравнение детального баланса (2.14), получим следующее соотношение, которому должна удовлетворять вероятность принятия нового состояния:

$$\frac{A(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')}{A(\bar{\mathbf{x}}' \rightarrow \bar{\mathbf{x}})} = \frac{P(\bar{\mathbf{x}}') g(\bar{\mathbf{x}}' \rightarrow \bar{\mathbf{x}})}{P(\bar{\mathbf{x}}) g(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')}. \quad (2.16)$$

Одно из возможных решений было предложено Гастингсом [15]:

$$A(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}') = \min \left(1, \frac{P(\bar{\mathbf{x}}') g(\bar{\mathbf{x}}' \rightarrow \bar{\mathbf{x}})}{P(\bar{\mathbf{x}}) g(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')} \right), \quad (2.17)$$

В результате алгоритм Метрополиса-Гастингса может быть сформулирован следующим образом:

1. Произвольно выбирается начальное состояние $\bar{\mathbf{x}}$.
2. С вероятностью $g(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')$ выбирается состояние $\bar{\mathbf{x}}'$.
3. С вероятностью $A(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')$ состояние $\bar{\mathbf{x}}'$ принимается либо отклоняется. В случае принятия $\bar{\mathbf{x}}'$ становится следующим членом последовательности, в случае отклонения следующим членом последовательности становится $\bar{\mathbf{x}}$.
4. Этапы 2 и 3 повторяются до тех пор, пока не получится последовательность из N состояний $\bar{\mathbf{x}}_i$.

При достаточно большом N получится набор случайных точек $\bar{\mathbf{x}}_i$ с распределением, асимптотически стремящимся к $P(\bar{\mathbf{x}})$. Для этого значение N должно превосходить время автокорреляции марковского процесса [49]. Некоторое число начальных состояний $\bar{\mathbf{x}}_i$ следует отбросить, чтобы цепь Маркова «забыла» своё исходное состояние. Тогда оставшиеся точки будут представлять собой случайную выборку с распределением $P(\bar{\mathbf{x}})$.

В алгоритме Метрополиса-Гастингса вероятность $g(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')$, в принципе, произвольна. На практике её подбирают для конкретной задачи так, чтобы получить наиболее быструю сходимость метода. Как было показано теоретически, оптимальной является ситуация, когда доля принятых состояний составляет от 23% до 50% [50].

2.2 Метод SMPIMC

Метод SMPIMC (Single Momentum Path Integral Monte Carlo), основанный на «одноимпульсном» подходе из раздела 1.3, может быть использован для расчёта термодинамических свойств неидеальных систем, состоящих из фермионов разных сортов. Рассмотрим детально этот метод, для чего перепишем основные формулы «одноимпульсного» подхода в терминах раздела 2.1 и приведём практический алгоритм вычисления функций распределения по импульсам, средних значений операторов и парных корреляционных функций. После этого обсудим технические детали метода и его сходимость. Для краткости ограничимся случаем однокомпонентной системы, состоящей из фермионов со спином $1/2$. На многокомпонентную систему все рассуждения распространяются непосредственно, и там, где это необходимо, будут даны соответствующие указания.

Представим выражение (1.43) для «одноимпульсной» матрицы плотности в более удобном виде, определив функционалы K и P :

$$\rho_{SM}(\xi; q) = \int_{z(0)=z(1)=0} Dz(\tau) \left[\prod_{\sigma} D_{\sigma}(\xi; q) \right] \exp \left\{ -\pi K[z(\tau)] - \pi P[q, z(\tau)] \right\},$$

$$K[z(\tau)] = \sum_{a, \sigma} \int_0^1 d\tau \dot{\mathbf{z}}_{a, \sigma}^2(\tau), \quad P[q, z(\tau)] = \frac{\beta}{\pi} \int_0^1 d\tau U(q + \lambda z(\tau)). \quad (2.18)$$

Здесь и далее сумма по a берётся по всем частицам, а сумма по σ — по проекциям спина $+1/2$ и $-1/2$ соответственно. Выражение (2.18) представляет собой интеграл по замкнутым траекториям от функционала этих траекторий. Для расчётов на ЭВМ нужно представить его в дискретизованной форме, аналогичной (1.20). В результате получим следующее приближённое выражение для «одноимпульсной» матрицы плотности:

$$\rho_{SM}(\xi; q) \approx \int dz^1 \dots dz^{M-1} \left[\prod_{\sigma} D_{\sigma}(\xi; q) \right] \exp \left\{ -\pi K^M[z(\tau)] - \pi P^M[q, z(\tau)] \right\},$$

$$K^M[z(\tau)] = M \sum_{m=0}^{M-1} \sum_{a, \sigma} (\mathbf{z}^{m+1} - \mathbf{z}^m)^2, \quad P^M[q, z(\tau)] = \frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M-1} \frac{\beta}{\pi} U(q + \lambda z^m).$$
(2.19)

Каждая траектория $z(\tau)$ приближённо представляется замкнутой ломаной линией с M звеньями, причём вершины z^m являются $3N$ -мерными координатами, по которым берётся интеграл. Функционалы K и P заменяются соответствующими суммами функций, вычисленных в точках z^m . При достаточно большом M дискретизованные выражения (2.19) аппроксимируют (2.18) с точностью $O(1/M^2)$.

Если интересоваться величинами, зависящими от абсолютных значений импульсов, то, согласно (1.38), «одноимпульсная» функция Вигнера может быть вычислена как синусное преобразование Фурье от ρ_{SM} :

$$W_{SM}(|\mathbf{p}|; q) = \frac{4\pi}{|\mathbf{p}|} \int_0^{\infty} d\xi \xi \rho_{SM}(\xi; q) \sin |\mathbf{p}| \xi. \quad (2.20)$$

В «одноимпульсном» подходе нас интересует в основном одночастичная функция распределения по импульсам $F(|\mathbf{p}|)$ и средние значения операторов вида (1.33):

$$F(|\mathbf{p}|) = \int dq^1 dq^2 \dots dq^{M-1} W_{SM}(|\mathbf{p}|; q),$$

$$\langle \hat{T} \rangle = \int d\mathbf{p} d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_N [Na(\mathbf{p}) + B(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N)] W(p, q). \quad (2.21)$$

Обозначим через $f(\xi)$ «одноимпульсную» матрицу плотности $\rho_{SM}(\xi; q)$, проинтегрированную по координатам всех частиц. Тогда $F(|\mathbf{p}|)$ может быть вычисле-

на как синусное преобразование Фурье от $f(|\xi|)$:

$$F(|\mathbf{p}|) = \frac{4\pi}{|\mathbf{p}|} \int_0^\infty d\xi \xi f(\xi) \sin |\mathbf{p}|\xi, \quad f(\xi) = \int d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_N \rho_{SM}(\xi; q). \quad (2.22)$$

Среднее значение части оператора \hat{T} , зависящей от импульса, может быть вычислено усреднением одночастичного оператора $a(\hat{\mathbf{p}})$ с функцией распределения $F(|\mathbf{p}|)$ согласно (2.21). Среднее значение части \hat{T} , зависящей от координат, может быть вычислено усреднением $B(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N)$ с функцией ρ_{SM} , проинтегрированной по ξ :

$$\left\langle \sum_{a=1}^N a(\hat{\mathbf{p}}_a) \right\rangle = N \int d\mathbf{p} a(\mathbf{p}) F(|\mathbf{p}|),$$

$$\langle B(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N) \rangle = \int d\xi \int d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_N B(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N) \rho_{SM}(\xi; q). \quad (2.23)$$

Из выражений (2.22) и (2.23) следует, что вычисление средних значений операторов, а также функций распределения в «одноимпульсном» подходе сводится к вычислению интегралов вида (2.9). При этом в качестве переменных $\bar{\mathbf{x}}$ выступают переменная ξ , координаты \mathbf{q}_a и переменные \mathbf{z}_a^m , так что пространство R_m имеет размерность $3 + 3N + 3N(M - 1)$. Роль весовой функции играет знакопеременная «одноимпульсная» матрица плотности $\rho_{SM}(\xi; q)$. Выберем в качестве неотрицательной функции $P(\bar{\mathbf{x}})$ абсолютную величину ρ_{SM} , а в качестве $w(\bar{\mathbf{x}})$ — её знак:

$$P(\bar{\mathbf{x}}) = |\rho_{SM}(\xi; q)|,$$

$$w(\bar{\mathbf{x}}) = \text{sign}(\rho_{SM}(\xi; q)). \quad (2.24)$$

Таким образом, для вычисления термодинамических величин и функций распределения может быть использована общая схема Монте Карло. Вместо непосредственного вычисления многомерных интегралов вида (2.9) можно усреднять соответствующие величины, умноженные на весовой множитель $w(\bar{\mathbf{x}})$, по выборке случайных конфигураций \bar{x} с вероятностным распределением $P(\bar{\mathbf{x}})$. Требуемые выборки можно получать с помощью алгоритма Метрополиса-Гастингса, изложенного в разделе 2.1. Рассмотрим его в данном случае.

На первом этапе необходимо задать начальную конфигурацию системы $\bar{\mathbf{x}}$, то есть исходные координаты частиц q , Фурье-координату ξ и координаты вершин траекторий z^m . В принципе, это можно сделать любым способом, так как цепь Маркова всё равно «забудет» начальное состояние через некоторое число шагов N_0^{MC} . Однако лучше выбирать исходное состояние близким к равновесному, чтобы число N_0^{MC} было как можно меньше. Если интересоваться физическими системами без чёткой внутренней структуры (газами, плазмой или жидкостями), то разумным является равновероятное заполнение объёма, предоставленного частицам. Координаты вершин траекторий было бы оптимально подобрать таким образом, чтобы траектория имела характерный размер порядка тепловой длины волны Де Бройля. Однако на практике проще пожертвовать временем расчёта и использовать «классическое» начальное состояние $z = 0$. Начальная Фурье-координата ξ также полагается равной нулю.

На втором этапе необходимо с некоторой вероятностью $g(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')$ выбрать состояние $\bar{\mathbf{x}}'$ — кандидат на роль нового состояния. Для этого вводится три типа шагов:

1. Изменение координаты случайной частицы с номером a : $\mathbf{q}'_a = \mathbf{q}_a + \delta\mathbf{q}$.
2. Изменение случайно выбранной m -й вершины траектории, представляющей частицу с номером a : $\mathbf{z}'_a{}^m = \mathbf{z}_a{}^m + \delta\mathbf{z}$.
3. Изменение Фурье-координаты: $\xi' = \xi + \delta\xi$.

Вероятности выбора кандидатов на роль нового состояния $g(q \rightarrow q')$, $g(z \rightarrow z')$, $g(\xi \rightarrow \xi')$, в принципе, могут быть любыми, однако на практике их следует выбирать из соображений лучшей сходимости метода. Например, если $\delta\mathbf{q}$, $\delta\mathbf{z}$, $\delta\xi$ взять слишком большими, то доля принятых шагов оказывается малой. Если же $\delta\mathbf{q}$, $\delta\mathbf{z}$, $\delta\xi$ взять слишком малыми, то соседние состояния цепи Маркова оказываются сильно скоррелированными. Оптимальным является такой выбор $g(q \rightarrow q')$, $g(z \rightarrow z')$, $g(\xi \rightarrow \xi')$, чтобы доля принятых состояний составляла от 23% до 50% [50]. В данной работе вероятности шагов выбраны следующим образом. Шаг с изменением координаты частицы:

$$g(q \rightarrow q') = \begin{cases} 1, & \text{если } |q_x|, |q_y|, |q_z| \leq \Delta_q \\ 0, & \text{если } |q_x|, |q_y|, |q_z| > \Delta_q \end{cases} \quad (2.25)$$

Здесь Δ_q — постоянный положительный параметр, который выбирается так, чтобы показатель экспоненты в (2.19) менялся при изменении q_a на величину

порядка единицы. Для газов и сильноионизованных плазменных сред разумным выбором является $\Delta_q \approx r_s$, где r_s — параметр Вигнера-Зейца, имеющий смысл среднего расстояния между частицами (см. раздел 4.1). Для частиц в сильном поле имеет смысл выбрать Δ_q между характерными масштабами действия потенциальных сил и r_s , исходя из физических соображений. Шаг с изменением траектории, представляющей частицу:

$$g(z \rightarrow z') = \begin{cases} 1, & \text{если } |z_x|, |z_y|, |z_z| \leq \Delta_z \\ 0, & \text{если } |z_x|, |z_y|, |z_z| > \Delta_z \end{cases} \quad (2.26)$$

Здесь Δ_z — постоянный положительный параметр, который выбирается так, чтобы показатель экспоненты в (2.19) менялся при изменении z_a^m на величину порядка единицы. Естественно выбрать его равным ширине соответствующей гауссовой экспоненты: $\Delta_z = 1/\sqrt{2\pi M}$. Шаг с изменением Фурье-координаты:

$$g(\xi \rightarrow \xi') = \begin{cases} 1, & \text{если } |\xi_x|, |\xi_y|, |\xi_z| \leq \Delta_\xi \\ 0, & \text{если } |\xi_x|, |\xi_y|, |\xi_z| > \Delta_\xi \end{cases} \quad (2.27)$$

Здесь Δ_ξ — постоянный положительный параметр, который также выбирается равным ширине экспоненты: $\Delta_\xi = 1/\sqrt{2\pi}$. В результате такого выбора доля принятых шагов составляет от 30% до 60%, что близко к оптимальному случаю.

На третьем этапе необходимо либо принять новую конфигурацию $\bar{\mathbf{x}}'$ с вероятностью $A(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')$, либо оставить прежнюю конфигурацию $\bar{\mathbf{x}}$. Чтобы удовлетворить принципу детального баланса, вероятность $A(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')$ должна быть вычислена по формуле (2.17). Однако при выборе вероятностей шагов (2.25), (2.26) и (2.27) выражение для вероятности принятия упрощается, так как $g(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}') = g(\bar{\mathbf{x}}' \rightarrow \bar{\mathbf{x}})$:

$$A(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}') = \min \left(1, \frac{P(\bar{\mathbf{x}}')}{P(\bar{\mathbf{x}})} \right), \quad (2.28)$$

где функции $P(\bar{\mathbf{x}})$, $P(\bar{\mathbf{x}})'$ определены в (2.24). При другом, более общем выборе вероятностей шагов $g(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')$ следует использовать формулу (2.17).

При выполнении данной процедуры будет получена последовательность конфигураций $\{\bar{\mathbf{x}}_i\}$, слабо коррелированных между собой. Первые $N_{МС0}$ конфигураций следует отбросить для того, чтобы цепь Маркова «забыла» искус-

ственное начальное состояние и пришла в равновесную область. В результате останется N_{MC} случайных конфигураций $\bar{\mathbf{x}}_i$ с желаемым распределением $P(\bar{\mathbf{x}})$ из (2.24). Эти конфигурации в пространстве переменных $\{q, z, \xi\}$ можно использовать для расчёта средних значений операторов и функций распределения согласно схеме (2.21).

Таким образом, алгоритм метода SMPIMC таков:

1. Задаётся начальная конфигурация системы $\bar{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{x}}_0$. N частиц размещаются случайным образом по всему объёму V так, чтобы распределение их координат \mathbf{q}_a было равновероятным. Траектории, представляющие частицы, стянуты в точки, так что $\mathbf{z}_a^m = 0$. Фурье-координата равна нулю, так что $\xi = 0$.
2. Случайным образом выбирается шаг: с вероятностью P_q — изменение координаты одной из частиц (1), с вероятностью P_z — деформация траектории (2), представляющей одну из частиц, с вероятностью $P_\xi = 1 - P_q - P_z$ — изменение Фурье-переменной (3).
3. В случае шагов (1) и (2) случайным образом выбирается одна из частиц a с вероятностью $1/N$.
4. С вероятностями (2.25), (2.26 и (2.27) соответственно изменяется состояние частицы a : $\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}'$.
5. Состояние $\bar{\mathbf{x}}'$ принимается с вероятностью (2.28), где $P(\bar{\mathbf{x}}) = |\rho_{SM}(\xi; q)|$, либо отклоняется. В случае принятия устанавливается $\bar{\mathbf{x}}_1 = \bar{\mathbf{x}}'$, в случае отклонения — $\bar{\mathbf{x}}_1 = \bar{\mathbf{x}}$.
6. Пункты 2 – 5 повторяются до тех пор, пока не получится последовательность из $N_{MC0} + N_{MC}$ конфигураций $\bar{\mathbf{x}}_i$.
7. Первые N_{MC0} конфигураций отбрасываются.
8. Требуемые физические величины вычисляются усреднением по N_{MC} конфигурациям с помощью формулы (2.21).

Отметим, что в случае многокомпонентной системы алгоритм SMPIMC строится аналогично. Отличие состоит в том, что каждому сорту частиц соответствует своя переменная ξ_s и обменный детерминант $D_{s,\sigma}$. Сорт частицы, состояние которой будет меняться на данном шаге, выбирается случайным образом.

2.2.1 Вычисление средних значений операторов и функций распределения

Рассмотрим процедуру вычисления среднего значения оператора \hat{T} . Прежде всего, координатная часть этого оператора $B(q)$ усредняется непосредственно по формуле (2.12), в которой роль f и w играют функции (2.24):

$$\langle B(q) \rangle \approx \frac{1}{N_{MC}} \frac{\sum_{i=1}^{N_{MC}} B(q) \text{sign}(\rho_{SM}(\xi; q))}{\sum_{i=1}^{N_{MC}} \text{sign}(\rho_{SM}(\xi; q))}. \quad (2.29)$$

При использовании алгоритма Метрополиса-Гастингса распределение $P(\bar{x})$ автоматически оказывается правильно нормированным, так как получается в результате вероятностного процесса. Поэтому нет необходимости помнить о множителях типа $Z(N, V, T)^{-1}$ в определении функции Вигнера: в любом случае они сокращаются.

Импульсная часть оператора \hat{T} усредняется по формуле (2.23) с функцией распределения $F(|\mathbf{p}|)$, которая получается одномерным синус-преобразованием Фурье из функции $f(|\xi|)$ согласно (2.22). Для расчёта $f(|\xi|)$ ось $|\xi|$ разбивается на N_ξ одномерных ячеек длиной d_ξ . Каждой из ячеек ставится в соответствие значение функции $f(|\xi|)$, изначально равное нулю. Затем для каждой конфигурации $\bar{\mathbf{x}}_i$ вычисляется значение $|\xi|_i$, которое попадает в одну из ячеек, например k -ю. Тогда к значению k -й ячейки прибавляется весовой множитель $\text{sign}(\rho_{SM}(\xi; q))$, рассчитанный для данной конфигурации. После перебора всех N_{MC} конфигураций полученные значения $f(|\xi|_k)$ для каждой ячейки делятся на средний знак. В результате получается гистограмма $f(|\xi|_k)$, с точностью до нормировки отражающая функцию $f(|\xi|)$. Формально это можно записать так:

$$f(|\xi|_k) = \frac{\sum_{i=1}^{N_{MC}} \delta_{|\xi|_k, |\xi|_i} \text{sign}(\rho_{SM}(\xi; q))}{\sum_{i=1}^{N_{MC}} \text{sign}(\rho_{SM}(\xi; q))}, \quad (2.30)$$

Функция распределения по импульсам $F(|\mathbf{p}|)$ получается из $f(|\xi|)$ с помощью одномерного синус-преобразования Фурье (2.22), которое можно выполнить численно. Для этого ось $|\mathbf{p}|$ разбивается на N_p одномерных ячеек длиной

d_p , которая подбирается так, чтобы получить необходимое разрешение по импульсам. Ось абсолютных значений $|\xi|$ разбивается на то же число N_p одномерных ячеек длиной $d'_\xi = \frac{\pi}{d_p(N_p+1)}$. Так как функция $f(|\xi|)$ на больших расстояниях затухает по экспоненциальному закону, можно обрезать интеграл в (2.22) сверху при $|\xi| = d'_\xi N_p$. Переходя от непрерывных переменных $|\mathbf{p}|$ и $|\xi|$ к дискретным $|\mathbf{p}|_k = d_p k$ и $|\xi|_l = d'_\xi l$, $k, l = 1, 2, \dots, N_p$, получим дискретное синус-преобразование Фурье:

$$F(|\mathbf{p}|_k) = \frac{1}{N_p + 1} \sum_{l=1}^{N_p} \left(\frac{2\pi}{|\mathbf{p}|_k} |\mathbf{p}\xi|_l f(|\xi|_l) \right) \sin \left(\frac{\pi k l}{N_p + 1} \right), \quad (2.31)$$

которое можно выполнить численно с помощью известного алгоритма FFT. После этого гисторамму $F(|\mathbf{p}|_k)$ следует надлежащим образом нормировать:

$$F(|\mathbf{p}|) \approx \frac{F(|\mathbf{p}|_k)}{\int_0^{d_p N_p} d|\mathbf{p}| 4|\mathbf{p}|^2 \pi F(|\mathbf{p}|_k)}, \quad (2.32)$$

в результате чего получается функция распределения $F(|\mathbf{p}|)$.

Парные корреляционные функции $g(r)$ вычисляются аналогично. Именно, ось расстояний между частицами $r = |\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_b|$ разбивается на N_q одномерных ячеек длиной d_q , каждой из которых ставится в соответствие значение функции $g(r_k)$, изначально равное нулю. Затем для каждой конфигурации $\bar{\mathbf{x}}_i$ вычисляются расстояния между всевозможными парами частиц $|\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_b|$, попадающие в соответствующие ячейки. К значению k -й ячейки прибавляется весовой множитель $sign(\rho_{SM}(\xi; q))$, рассчитанный для данной конфигурации, и после перебора всех N_{MC} конфигураций полученные значения $g(r_k)$ делятся на на средний знак. В результате получается гистограмма $g(r_k)$, которая после нормировки даёт парную корреляционную функцию:

$$g(r_k) = \frac{\sum_{i=1}^{N_{MC}} \delta_{r_k, r_i} sign(\rho_{SM}(\xi; q))}{\sum_{i=1}^{N_{MC}} sign(\rho_{SM}(\xi; q))}. \quad (2.33)$$

Таким образом, расчёт средних значений операторов, функций распределения по импульсам и корреляционных функций происходит следующим образом:

1. Вычисляется гистограмма $f(|\xi|_k)$ по формуле (2.30).

2. С помощью алгоритма FFT для (2.31) вычисляется гистограмма $F(|\mathbf{p}|_k)$.
3. Гистограмма $F(|\mathbf{p}|_k)$ нормируется согласно (2.32), что даёт функцию распределения по импульсам $F(|\mathbf{p}|)$.
4. Импульсные части операторов вычисляются усреднением соответствующих одноимпульсных операторов с распределением $F(|\mathbf{p}|)$.
5. Координатные части операторов усредняются непосредственно по формуле (2.29).
6. Парная корреляционная функция $g(r)$ вычисляется через построение соответствующей гистограммы и нормировку (2.33).

В том случае, когда система состоит из частиц разных сортов, расчёт термодинамических свойств выполняется аналогично. Отличие состоит в том, что каждому сорту частиц соответствуют свои функции $f(|\xi|)$, $F(|\mathbf{p}|_k)$, а каждой паре сортов — свои парные корреляционные функции.

2.2.2 Периодические граничные условия

Как правило, реальные термодинамические системы состоят из огромного (макроскопического) числа частиц. В то же время существующие ЭВМ позволяют моделировать лишь системы с относительно малым ($N \leq 1000$) числом частиц при числе звеньев траекторий $M \leq 100$. Поэтому при заданной плотности $n = N/V$ приходится существенно ограничивать объём и рассматривать системы с размерами, не превышающими среднее межчастичное расстояние более чем на порядок. Из-за этого существенную роль начинают играть поверхностные эффекты, связанные с тем, что значительная доля частиц находится у границы и менее эффективно взаимодействует с остальной системой. Чтобы практически исключить влияние нежелательных поверхностных эффектов и конечного числа частиц, на систему накладываются периодические граничные условия [25]. Рассмотрим их применение в методе SMPIMC.

Основная идея периодических граничных условий показана на Рис. 2.1. Объём, в котором производится расчёт и называемый «основной ячейкой Монте Карло», показан жёлтым квадратом. Эта ячейка вместе с находящимися в

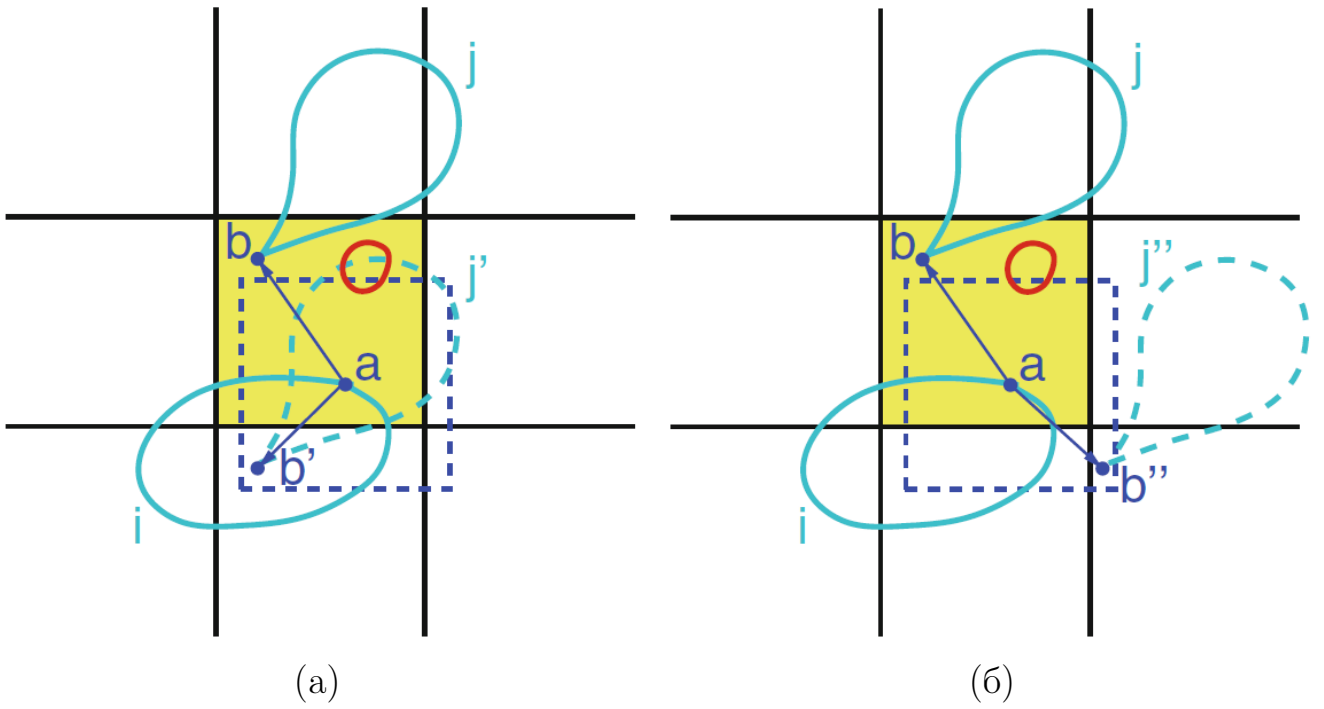


Рисунок 2.1 — Периодические граничные условия.

ней частицами повторяется в направлениях X , Y , Z с периодом $L = V^{1/3}$. Координаты частиц \mathbf{q}_a представлены точками, а траектории $\mathbf{z}_a(\tau)$ — замкнутыми кривыми. Штриховыми линиями обозначены некоторые периодические изображения частиц и траекторий. Основной вклад дают конфигурации, характерный размер траекторий которых оказывается порядка тепловой длины волны λ (см. раздел 1.2). При большом вырождении средний размер траектории сопоставим с размерами ячейки. Траектории из основной ячейки могут проникать в соседние, так же как траектории из соседних ячеек могут частично попадать в основную.

При шагах, изменяющих координаты частиц q и траектории z , а также при расчёте координатных частей операторов используется указанная на Рис. 2.1 схема. В качестве координат \mathbf{q}_a берутся координаты частиц в основной ячейке. Каждая частица взаимодействует с ближайшими образами других частиц: вместо расстояния ab от данной частицы a до частицы b берётся расстояние \bar{ab} до ближайшего образа частицы b . Точно так же производится вычисление парных корреляционных функций.

При шагах, изменяющих переменную Фурье ξ , берутся координаты \mathbf{q}_+ и \mathbf{q}_- , лежащие в основной ячейке Монте Карло. Затем вычисляется их разность $\bar{\xi} = \mathbf{q}_+ - \mathbf{q}_-$, которая может оказаться вне основной ячейки. В качестве ξ берётся образ $\bar{\xi}$, лежащий в основной ячейке. Было установлено, что моделированию

методом SMPIMC идеального газа данная процедура позволяет получить распределение Ферми с наибольшей точностью.

2.2.3 Подбор параметров и сходимость

Минимальное число частиц N в основной ячейке Монте Карло определяется, исходя из следующих условий. Во-первых, оно должно быть настолько большим, чтобы влияние граничных эффектов на функцию $f(|\xi|)$ было незначительным. Во-вторых, оно должно быть достаточным для правильного учёта взаимодействия частиц. В частности, парные корреляционные функции должны показывать отсутствие корреляций на расстояниях, меньших половины длины ячейки $L/2$. В-третьих, длина ячейки L должна превосходить тепловую длину волны λ , иначе неправильно учитывается обменное взаимодействие и D_σ сильно осциллирует, что приводит к знаменитой «фермионной проблеме знака». В ходе расчётов методом SMPIMC было обнаружено, что наиболее существенным фактором является влияние граничных эффектов на функцию ξ . Так, при $\chi = 4$ необходимо рассматривать как минимум 100 частиц, чтобы получить распределение Ферми с точностью до 10%. В то же время влияние граничных эффектов на потенциальное и обменное взаимодействие частиц начинает себя проявлять только при $n\lambda^3 \geq 10$ при том же числе частиц.

Число звеньев траекторий M выбирается так, чтобы на протяжении одного звена потенциальная энергия практически не менялась. На практике требуемое значение M определяется так: проводится серия расчётов некоторой термодинамической величины в одинаковых условиях при различных M , и выбирается наименьшее значение M , при котором термодинамическая величина остаётся постоянной с требуемой точностью. Вообще говоря, M зависит от потенциала межчастичного взаимодействия, плотности частиц и температуры. Например, для идеального газа можно вовсе отказаться от траекторий, поскольку потенциальная энергия равна нулю. Для гармонического потенциала $U(q) = \frac{m\omega^2 q^2}{2}$ до температур $kT \leq \frac{\hbar\omega}{15}$ можно выбрать $10 \leq M \leq 30$, в зависимости от температуры. Аналогичный выбор применим и к различным степенным потенциалам, таким как $U(q) = aq^3 + bq^4$. Сложнее обстоит ситуация в случае кулоновского

потенциала $U(r) = -\frac{e^2}{r}$, бесконечного в нуле и для которого не существует классического предела. Если система полностью ионизована, то достаточно выбрать $M \approx 20$, однако в условиях, когда начинается образование связанных состояний, необходимо сильно увеличивать M вплоть до нескольких сотен. То же самое касается кулоновского потенциала с мягкой сердцевиной $U(q) = -\frac{e^2}{a^2+r^2}$, для которого звено траектории должно быть существенно меньше характерной длины a . Использование псевдопотенциалов, учитывающих квантовые эффекты во взаимодействии, позволяет рассчитывать кулоновские системы [51]. Например, при использовании потенциала Кельбга (4.2) достаточно положить $M = 20$.

Вероятности выбора типа шага P_q , P_z и P_ξ подбираются так, чтобы алгоритм Метрополиса-Гастингса как можно быстрее достиг области равновесных конфигураций. При этом наиболее существенными являются шаги с изменением координаты частицы q , поскольку именно они отвечают за получение пространственной структуры. Шаги с деформацией траектории менее существенны, однако из-за большого числа переменных z^m их следует производить чаще. Наконец, шаги с изменением Фурье-переменной ξ мало влияют на конфигурацию и требуются в основном для получения функции $f(|\xi|)$. Например, при расчётах функций распределения по импульсам в двухкомпонентных кулоновских системах разумным выбором является $P_q = 0.2$, $P_z = 0.75$ и $P_\xi = 0.05$. Для идеального газа можно исключить шаги с деформацией траектории, и подходящий выбор: $P_q = 0.9$, $P_z = 0$, $P_\xi = 0.1$. Изменение этих вероятностей в разумных пределах не оказывает значительного влияния на сходимость метода.

Число начальных шагов N_{MC0} , отбрасываемых при вычислении средних величин, выбирается так, чтобы полностью исключить влияние начальной конфигурации. Достижение равновесия обнаруживается по стабилизации рассчитываемых средних значений операторов, например, потенциальной энергии, вблизи некоторого значения. Полное число шагов N_{MC} выбирается таким, чтобы получить средние величины, а также функции распределения и корреляционные функции с наименьшей погрешностью. Так, при расчёте функций распределения по импульсам двухкомпонентной плазмы с псевдопотенциалом Кельбга при $N = 128$, $M = 20$ вполне достаточно взять $N_{MC} = 10^7$ шагов, из них отбрасывая первые $N_{MC0} = 10^5$.

Длина d_q и общее число N_q координатных ячеек, используемых при расчёте парных корреляционных функций, подбираются так, чтобы с хорошим раз-

решением отобразить области с нетривиальным поведением корреляционных функций. При этом произведение $d_q N_q$ не должно превышать половину длины ячейки $L/2$, иначе граничные эффекты будут оказывать влияние на «хвост» корреляционной функции. Например, при расчётах одно- и двухкомпонентных систем было достаточно $N_q = 100$ ячеек с размером $L/200$.

Длина d_ξ и общее число N_ξ ячеек, используемых при расчёте функции $f(|\xi|)$, выбираются так, чтобы гистограмма $f(|\xi|)_k$ была достаточно гладкой и отображалась целиком. При этом длину d_ξ не следует брать слишком малой, так как при этом возникнут большие статистические флуктуации в гистограмме. После построения гистограммы функции $f(|\xi|)$ её следует дополнить пустыми ячейками до общего числа N_p . Тогда алгоритм FFT приводит к N_p ячейкам длиной $d_p = \frac{\pi}{d_\xi(N_p+1)}$. Число N_p выбирается достаточно большим, чтобы обеспечить хорошее разрешение для функции распределения по импульсам $F(\mathbf{p})$.

2.2.4 Программная реализация

Для численного моделирования термодинамических свойств квантовых систем методом SMPIMC был написан оригинальный программный код на языке FORTRAN. Данный код является универсальным и позволяет моделировать многокомпонентные системы фермионов с различными потенциалами межчастичного взаимодействия в произвольном внешнем потенциальном поле. В качестве исходных данных задаются: размерность пространства, число сортов частиц, число частиц каждого сорта, массы частиц, температура, объём, потенциальная энергия межчастичного взаимодействия, внешний потенциал. Также настраиваются технические параметры: число шагов алгоритма, вероятности шагов, а также разбиение осей импульсов, координат и Фурье-переменных на ячейки. Программа выдаёт средние значения рассматриваемых операторов, парные корреляционные функции, а также функции $f(\xi)$ для каждого сорта частиц. Все вычисляемые величины могут быть получены на промежуточных этапах без остановки программы, что позволяет контролировать сходимость метода. Преобразование Фурье функции $f(\xi)$ осуществляется с помощью алгоритма FFT из библиотеки FFTPACK 5.1 (<https://www.sc.fsu.edu>).

2.3 Методы LAPIMC и HAPIMC

Методы LAPIMC (Linear Approximation Path Integral Monte Carlo) и HAPIMC (Harmonic Approximation Path Integral Monte Carlo) позволяют рассчитывать термодинамические свойства неидеальных систем, состоящих из фермионов или бозонов разных сортов. Эти методы основаны соответственно на «линейном» и «гармоническом» приближениях для полной функции Вигнера, описанных в разделах 1.4 и 1.5. Рассмотрим детально оба метода, для чего перепишем основные формулы «линейного» и «гармонического» приближений в терминах раздела 2.1 и приведём практические алгоритмы вычисления средних значений операторов, функций распределения по импульсам и парных корреляционных функций. После этого обсудим технические детали методов и их сходимость. Для краткости ограничимся случаем однокомпонентной системы, состоящей из фермионов или бозонов. На многокомпонентную систему все рассуждения распространяются непосредственно, и, где это необходимо, будут даны соответствующие указания.

Обратимся к выражениям для функции Вигнера в «линейном» и «гармоническом» приближениях (1.82) и (1.85), представляющим собой интегралы по замкнутым траекториям от соответствующих функционалов. Для расчётов на ЭВМ их необходимо представить в дискретизованной форме, аналогичной (1.20):

$$\begin{aligned}
W_{LA}(p,q) &\approx Z(\beta,V)^{-1} \int dz^1 \dots dz^{M-1} \exp \left\{ - \sum_{a=1}^N \frac{\beta}{2m} \mathbf{p}_a^2 - \beta \sum_{a>b} \tilde{v}_{ab} \right\} \times \\
&\times \cos \left\{ \rho_{a,i} J_{a,i}^M \right\} \exp \left\{ -\pi K^M - \pi P^M \right\}, \\
W_{HA}(p,q) &\approx Z(\beta,V)^{-1} \int dz^1 dz^2 \dots dz^{M-1} \det \left| \chi_{ai,bj}^{M-1} \right|^{1/2} \times \\
&\times \exp \left\{ -\frac{1}{4\pi} \rho_{a,i} \chi_{a,i;b,j}^{M-1} \rho_{b,j} - \beta \sum_{a>b} \tilde{v}_{ab} + \pi J_{a,i}^M \chi_{a,i;b,j}^{M-1} J_{b,j}^M \right\} \times \\
&\times \cos \left\{ \rho_{a,i} \chi_{ai,bj}^{M-1} J_{b,j}^M \right\} \times \exp \left\{ -\pi K^M - \pi P^M \right\}, \tag{2.34}
\end{aligned}$$

где каждая траектория $z(\tau)$ заменяется ломаной линией с M звеньями, по вершинам z^m которой берётся $3N(M-1)$ -мерный интеграл. Функционалы K , P , J и χ аппроксимируются следующими выражениями:

$$\begin{aligned}
K^M[z(\tau)] &= M \sum_{m=0}^{M-1} \sum_{a=1}^N (\mathbf{z}_a^{m+1} - \mathbf{z}_a^m)^2, \\
P[q, z(\tau)] &= \frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M-1} \frac{\beta}{\pi} U(q + \lambda z(\tau)), \\
J_{a,i}[q, z(\tau)] &= \frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M-1} \frac{\beta \lambda}{2\pi} (\tau - 1/2) \frac{\partial U(q + \lambda z(\tau))}{\partial q_{a,i}}, \\
\chi_{a,i;b,j}[q, z(\tau)] &= \delta_{a,b} \delta_{i,j} + \frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M-1} \frac{\beta \lambda^2}{2\pi} (\tau - 1/2)^2 \frac{\partial^2 U(q + \lambda z(\tau))}{\partial q_{a,i} \partial q_{b,j}}. \tag{2.35}
\end{aligned}$$

При достаточно большом значении M дискретизованные выражения (2.34), (2.35) воспроизводят (1.82), (1.85) с точностью $O(1/M^2)$.

Среднее значение произвольного оператора \hat{A} получается усреднением соответствующего символа Вейля $A(p, q)$ с функцией Вигнера и сводится к вычислению интегралов вида (2.9), как это следует из (1.8) и (2.34). В качестве переменных $\bar{\mathbf{x}}$ при этом выступают импульсы \mathbf{p}_a , координаты \mathbf{q}_a , а также вершины траекторий \mathbf{z}_a^m . Пространство R_m , следовательно, имеет размерность $3N + 3N + 3N(M-1)$. Роль весовой функции играет знакопеременная функция Вигнера $W(p, q)$ в «линейном» или «гармоническом» приближении. В качестве неотрицательной функции распределения $P(\bar{\mathbf{x}})$ возьмём абсолютную величину $W(p, q)$, в качестве весовой функции $w(\bar{\mathbf{x}})$ — знак $W(p, q)$:

$$\begin{aligned}
P(\bar{\mathbf{x}}) &= |W(p, q)|, \\
w(\bar{\mathbf{x}}) &= \text{sign}(W(p, q)). \tag{2.36}
\end{aligned}$$

Таким образом, для вычисления средних значений операторов и функций распределения может быть использована общая схема Монте Карло, согласно которой нужно усреднять символы Вейля, умноженные на весовой множитель $w(\bar{\mathbf{x}})$, по выборке случайных конфигураций \bar{x} с вероятностным распределением $P(\bar{\mathbf{x}})$. Для получения случайной выборки можно использовать алгоритм Метрополиса-Гастингса. Рассмотрим его в данном случае.

На первом этапе необходимо задать начальную конфигурацию системы $\bar{\mathbf{x}}$, то есть импульсы \mathbf{p}_a , координаты \mathbf{q}_a и вершины траекторий \mathbf{z}_a^m . В принципе, это можно сделать произвольным образом, поскольку цепь Маркова в любом случае достигнет области равновесных конфигураций и «забудет» начальное состояние. Однако имеет смысл выбрать его близким к равновесному, чтобы число шагов N_0^{MC} , необходимое для установления равновесия, было как можно меньшим. Импульсы частиц следует задавать случайным образом, чтобы их функция распределения наиболее точно воспроизводила $P(\bar{\mathbf{x}})$. Оптимальным было бы распределение \mathbf{p}_a по Максвеллу, однако в данной работе используется более простой выбор $\mathbf{p}_a = 0$, практически не влияющий на время расчёта. Если интересоваться системами без чёткой внутренней структуры (газ, жидкость, плазма), то следует распределить координаты частиц \mathbf{q}_a по объёму равновероятно. Вершины траекторий оптимально выбрать так, чтобы характерный размер траекторий был порядка тепловой длины волны λ . Однако на практике проще использовать «классическую» начальную конфигурацию $\mathbf{z}_a^m = 0$.

На втором этапе необходимо с вероятностью $g(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')$ выбрать состояние $\bar{\mathbf{x}}'$, претендующее на роль нового состояния. Для этого вводится три типа шагов:

1. Изменение импульса случайной частицы с номером a : $\mathbf{p}'_a = \mathbf{p}_a + \delta\mathbf{p}$.
2. Изменение координаты случайной частицы с номером a : $\mathbf{q}'_a = \mathbf{q}_a + \delta\mathbf{q}$.
3. Изменение случайно выбранной m -й вершины траектории, представляющей частицу с номером a : $\mathbf{z}'_a^m = \mathbf{z}_a^m + \delta\mathbf{z}$.

Вероятности шагов каждого типа $g(p \rightarrow p')$, $g(q \rightarrow q')$, $g(z \rightarrow z')$, в принципе, могут быть любыми, однако на практике их следует выбирать из соображений лучшей сходимости метода. Например, если изменения конфигурации $\delta\mathbf{p}$, $\delta\mathbf{q}$, $\delta\mathbf{z}$ будут слишком велики, то доля принятых шагов окажется слишком мала. Если же $\delta\mathbf{p}$, $\delta\mathbf{q}$, $\delta\mathbf{z}$ будут слишком малы, то случайная выборка будет сильно коррелирована. Как было показано в работе [50], оптимальным является такой выбор шагов, чтобы доля принятых состояний составляла от 23% до 50%. В данной работе вероятности шагов выбраны следующим образом. Шаг с изменением импульса частицы:

$$g(p \rightarrow p') = \begin{cases} 1, & \text{если } |p_x|, |p_y|, |p_z| \leq \Delta_p \\ 0, & \text{если } |p_x|, |p_y|, |p_z| > \Delta_p \end{cases} \quad (2.37)$$

Здесь Δ_p — постоянный положительный параметр, который выбирается так, чтобы показатель экспоненты в (2.34) в среднем менялся при изменении \mathbf{p}_a на величину порядка единицы. Разумно выбрать его равным ширине распределения Максвелла: $\Delta_p = \sqrt{2mkT}$. Шаг с изменением координаты частицы:

$$g(q \rightarrow q') = \begin{cases} 1, & \text{если } |q_x|, |q_y|, |q_z| \leq \Delta_q \\ 0, & \text{если } |q_x|, |q_y|, |q_z| > \Delta_q \end{cases} \quad (2.38)$$

Здесь Δ_q — постоянный положительный параметр, который выбирается так, чтобы показатель экспоненты в (2.34) в среднем менялся при изменении \mathbf{q}_a на величину порядка единицы. Для газов и сильноионизованных плазменных сред разумно выбрать $\Delta_q \approx r_s$, где r_s — параметр Вигнера-Зейца (см. раздел ...). Для частиц во внешнем поле Δ_q следует выбирать между характерными масштабами действия потенциальных сил и r_s , исходя из физических соображений. Шаг с изменением траектории, представляющей частицу:

$$g(z \rightarrow z') = \begin{cases} 1, & \text{если } |z_x|, |z_y|, |z_z| \leq \Delta_z \\ 0, & \text{если } |z_x|, |z_y|, |z_z| > \Delta_z \end{cases} \quad (2.39)$$

Здесь Δ_z — постоянный положительный параметр, который выбирается так, чтобы показатель экспоненты в (2.34) в среднем менялся при изменении z_a^m на величину порядка единицы. Естественно выбрать его равным ширине соответствующей гауссовой экспоненты: $\Delta_z = 1\sqrt{2\pi M}$. В результате такого выбора доля принятых шагов оказывается близка к оптимальной.

На третьем этапе следует либо принять конфигурацию $\bar{\mathbf{x}}'$ с вероятностью $A(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')$, либо отклонить её и оставить прежнюю конфигурацию $\bar{\mathbf{x}}$. Чтобы выполнялся принцип детального баланса, вероятность $A(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}')$ должна описываться общим соотношением (2.17), которое в данном случае упрощается:

$$A(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}') = \min \left(1, \frac{P(\bar{\mathbf{x}}')}{P(\bar{\mathbf{x}})} \right), \quad (2.40)$$

так как $g(\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}') = g(\bar{\mathbf{x}}' \rightarrow \bar{\mathbf{x}})$.

При последовательном выполнении данных этапов будет получен набор конфигураций $\{\bar{\mathbf{x}}_i\}$. Если отбросить первые N_{MC0} конфигураций, чтобы цепь Маркова «забыла» начальное состояние, то оставшиеся N_{MC} конфигураций бу-

дуют случайными с распределением $P(\bar{\mathbf{x}})$. Эту последовательность конфигураций можно использовать для расчёта средних значений операторов и различных функций распределения по общей схеме (2.11).

Таким образом, алгоритм метода НАРИМС таков:

1. Задаётся начальная конфигурация системы $\bar{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{x}}_0$. N частиц размещаются случайным образом по всему объёму V так, чтобы распределение их координат \mathbf{q}_a было равновероятным. Импульсы частиц \mathbf{p}_a полагаются равными нулю. Траектории, представляющие частицы, стянуты в точки, так что $\mathbf{z}_a^m = 0$.
2. Случайным образом выбирается шаг: с вероятностью P_p — изменение импульса одной из частиц (1), с вероятностью P_q — изменение координаты одной из частиц (2), с вероятностью P_z — деформация траектории (3).
3. Случайным образом выбирается одна из частиц с вероятностью $1/N$.
4. С вероятностями (2.37), (2.38) и (2.39) соответственно производится изменение состояния частицы a : $\bar{\mathbf{x}} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}'$.
5. Производится расчёт функционалов K^M , P^M , J^M и χ^M по формулам (2.35) для конфигураций $\bar{\mathbf{x}}$ и $\bar{\mathbf{x}}'$.
6. Вычисляется детерминант матрицы χ^M и её главные миноры.
7. Если матрица χ^M положительно определена, то вычисляется обратная матрица $\{\chi^M\}^{-1}$. Иначе конфигурация $\bar{\mathbf{x}}'$ отклоняется и следует вернуться к пункту 2.
8. Вычисляются квадратичные формы $p^T \{\chi^M\}^{-1} p$ и $J^T \{\chi^M\}^{-1} J$.
9. Состояние $\bar{\mathbf{x}}'$ принимается с вероятностью (2.40), либо отклоняется. В случае принятия устанавливается $\bar{\mathbf{x}}_1 = \bar{\mathbf{x}}'$, в случае отклонения — $\bar{\mathbf{x}}_1 = \bar{\mathbf{x}}$.
10. Пункты 2 – 9 повторяются до тех пор, пока не получится последовательность из $N_{MC0} + N_{MC}$ конфигураций $\bar{\mathbf{x}}_i$.
11. Первые N_{MC0} конфигураций отбрасываются.
12. Требуемые физические величины вычисляются усреднением по N_{MC} конфигурациям с помощью общей формулы (2.11).

Алгоритм метода LАРИМС устроен практически так же. Отличие состоит в том, что χ^M заменяется единичной матрицей, и пункты 6 и 7 отсутствуют. Метод НАРИМС гораздо более требователен к компьютерным ресурсам, чем

метод LAPIMS, так как операции линейной алгебры с $3N$ -мерными матрицами обладают наибольшей вычислительной сложностью.

2.3.1 Вычисление физических величин и распределений

Рассмотрим процедуру расчёта среднего значения оператора \hat{A} . Прежде всего следует получить явное выражение для символа Вейля $A(p,q)$ этого оператора. Если импульсная и координатная части оператора разделяются, то $A(p,q)$ получается из \hat{A} заменой $\hat{p} \rightarrow p$ и $\hat{q} \rightarrow q$. В общем случае нужно вычислять символ Вейля непосредственно из определения (1.9), используя коммутационные соотношения между импульсами и координатами. Для вычисления среднего значения оператора его символ Вейля следует усреднить по общей формуле Монте Карло (2.12), в которой роль f и w играют функции (2.36):

$$\langle \hat{A} \rangle \approx \frac{\sum_{i=1}^{N_{MC}} A(p,q) \text{sign}(W(p,q))}{\sum_{i=1}^{N_{MC}} \text{sign}(W(p,q))}. \quad (2.41)$$

При этом множители типа $Z(N,V,T)^{-1}$ и $C(M)$, входящие в $W(p,q)$, сокращаются.

Для расчёта функции распределения по импульсам $F(|\mathbf{p}|)$ ось $|\mathbf{p}|$ разбивается на N_p одномерных ячеек длиной d_p . Каждой ячейке ставится в соответствие значение функции $F(|\mathbf{p}|_k)$, изначально равное нулю. Затем для каждой конфигурации $\bar{\mathbf{x}}_i$ вычисляются значения импульсов $|\mathbf{p}_a|$, которые попадают в соответствующие ячейки $|\mathbf{p}_a|_k$. Тогда к значению k -й ячейки прибавляется значение весового множителя $w(\bar{\mathbf{x}}_i)$, вычисленного для данной конфигурации. После перебора всех N_{MC} конфигураций полученные значения каждой ячейки делятся на среднее значение $w(\bar{\mathbf{x}})$. В результате получается гистограмма $F(|\mathbf{p}|_k)$:

$$F(|\mathbf{p}|_k) = \frac{\sum_{i=1}^{N_{MC}} \delta_{|\mathbf{p}|_k, |\mathbf{p}|_i} w(\bar{\mathbf{x}}_i)}{\sum_{i=1}^{N_{MC}} w(\bar{\mathbf{x}}_i)}, \quad (2.42)$$

после нормировки дающая функция распределения по импульсу:

$$F(|\mathbf{p}|) \approx \frac{1}{N} \frac{F(|\mathbf{p}|_k)}{\int_0^{d_p N_p} d|\mathbf{p}| 4\pi |\mathbf{p}|^2 F(|\mathbf{p}|_k)}. \quad (2.43)$$

Парные корреляционные функции $g(r)$ вычисляются аналогично. Ось расстояний между частицами $r = |\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_b|$ разбивается на N_q одномерных ячеек длиной d_q , каждой из которых ставится в соответствие значение функции $g(r_k)$. Затем для каждой конфигурации $\bar{\mathbf{x}}_i$ вычисляются расстояния между всевозможными парами частиц, попадающие в соответствующие ячейки: $r_k = d_q k$. К значению k -й ячейки прибавляется весовой множитель $w(\bar{\mathbf{x}}_i)$, вычисленный для данной конфигурации, и после перебора всех N_{MC} конфигураций полученные значения $g(r_k)$ делятся на среднее значение $w(\bar{\mathbf{x}})$:

$$g(r_k) = \frac{\sum_{i=1}^{N_{MC}} \delta_{r_k, r_i} w(\bar{\mathbf{x}}_i)}{\sum_{i=1}^{N_{MC}} w(\bar{\mathbf{x}}_i)}. \quad (2.44)$$

Нормировка гистограммы $g(r_k)$ даёт парную корреляционную функцию $g(r)$.

В случае многокомпонентной системы расчёт термодинамических величин и распределений выполняется аналогично. Отличие состоит в том, что каждому сорту частиц ставятся в соответствие свои функции распределения по импульсам, и вводятся парные корреляционные функции между частицами разных сортов.

2.3.2 Подбор параметров и сходимость

Для уменьшения числа частиц в ячейке Монте Карло в методах LARIMC и NARIMC вводятся периодические граничные условия, аналогичные используемым в методе SMPIMC (см. раздел 2.2). Минимальное N определяется двумя условиями. Во-первых, граничные эффекты не должны оказывать существенного влияния на потенциальное и обменное взаимодействие частиц. Во-вторых, длина ячейки L должна существенно превосходить тепловую длину волны λ , так как в противном случае осцилляции косинуса в формулах (2.34) будут неприемлемо велики. На практике N следует выбирать таким, чтобы простран-

ственные корреляции отсутствовали на расстояниях, меньших половины длины ячейки, и функция распределения по импульсам для идеальной системы воспроизводила распределение Бозе или Ферми. Например, для водородной плазмы при $\chi_e \leq 10$ достаточно двух-трёх сотен частиц.

Число звеньев траекторий M подбирается так, чтобы на протяжении одного звена потенциальная энергия практически не менялась. Соответствующая процедура и оптимальные значения M те же, что и в методе SMPIMC (см. раздел 2.2).

Вероятности выбора типа шага P_p , P_q и P_z следует подбирать так, чтобы (i) алгоритм как можно быстрее достиг область равновесных конфигураций и (ii) состояния $\bar{\mathbf{x}}_i$ были слабо коррелированы между собой. Шаги с деформацией траекторий менее существенны, чем шаги с изменением импульсов и координат, однако из-за большого числа переменных z^m их следует выполнять чаще. Хотя общий рецепт для выбора вероятностей шагов привести нельзя, можно руководствоваться следующим соображением: чем сильнее квантовые эффекты влияют на потенциальное взаимодействие, тем больше должна быть вероятность P_z . Так, при расчётах термодинамических свойств в двухкомпонентных кулоновских системах с псевдопотенциалом Кельбга удачным является выбор: $P_p = 0.1$, $P_q = 0.1$ и $P_z = 0.8$. Изменение этих вероятностей в разумных пределах не оказывает существенного влияния на сходимость методов.

Отбрасываемое число начальных конфигураций N_{MC0} выбирается так, чтобы полностью устранить влияние начальной конфигурации на результаты расчёта. Например, при расчёте методом НАРIMC функций распределения по импульсам в слабовырожденной водородной плазме достаточно отбросить 10^5 первых шагов из 10^7 .

Размеры ячеек d_p и d_q , используемых при расчёте импульсных и пространственных распределений, а также их числа N_p и N_q выбираются так, чтобы отобразить нетривиальное поведение соответствующих функций с необходимым разрешением. Более детально их подбор рассмотрен в разделе 2.2 при обсуждении параметров метода SMPIMC.

2.3.3 Программная реализация

Для численного моделирования термодинамических свойств квантовых систем методами LAPIMC и NAPIMC было разработано оригинальное программное обеспечение на языке FORTRAN. Оно является универсальным и позволяет исследовать многокомпонентные системы как фермионов, так и бозонов с различными потенциалами взаимодействия. В качестве исходных данных задаются: размерность пространства, число сортов частиц, число частиц каждого сорта, массы частиц, температура, объём. Также настраиваются технические параметры: число шагов алгоритма, вероятности шагов, максимальные изменения импульсов, координат и траекторий на каждом шаге, а также разбиение осей импульсов и координат на ячейки. На выход поступают средние значения рассматриваемых операторов, парные корреляционные функции, а также функции распределения по импульсам. Все вычисляемые величины могут быть получены на промежуточных этапах без остановки программы, что позволяет контролировать сходимость метода непосредственно. Для выполнения операций с векторами и матрицами используется Библиотека численного анализа НИВЦ МГУ (<http://num-anal.srcc.msu.ru>).

Глава 3. Тестовые расчёты

В данной главе представлены результаты тестировых расчётов методами SMPIMC, LAPIMC и NAPIMC, выполненных для некоторых модельных квантовых систем. Глава состоит из двух разделов.

В разделе 3.1 рассматриваются формальные термодинамические свойства частицы, движущейся во внешнем потенциальном поле. Результаты, полученные с помощью методов SMPIMC, LAPIMC и NAPIMC, сопоставляются с прямыми квантовомеханическими расчётами и результатами других численных методов.

В разделе 3.2 рассматривается идеальный фермионный газ. Правильность учёта обменного взаимодействия детерминантами в методе SMPIMC и обменными псевдопотенциалами в методах LAPIMC и NAPIMC проверяется сопоставлением полученных функций распределения по импульсам с точными аналитическими выражениями.

3.1 Одна частица во внешнем поле

В этом разделе рассматриваются простейшие квантовомеханические системы, состоящие из одной частицы во внешнем потенциальном поле. Гамильтониан в этом случае имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}), \quad (3.1)$$

где $V(q)$ обозначает потенциальную энергию. Для простоты наличие спина у частицы не учитывается.

Хотя термодинамика одной частицы не представляет особого физического интереса, такие системы удобны для тестирования различных численных методов. Во-первых, результаты расчёта средних значений операторов \hat{H} и \hat{H}^2 и т.д. могут быть сопоставлены с результатами проверенных численных методов PIMC. Во-вторых, при очень низкой температуре можно сравнить функции распределения по импульсам и координатам с численными решениями урав-

нения Шрёдингера для основного состояния системы. Таким образом можно проверить справедливость формализма, развитого в главе 1, а также непосредственно отладить программное обеспечение. Кроме того, система (3.1) может рассматриваться как модель газа во внешнем поле, не учитывающая межчастичное взаимодействие и эффекты квантовой статистики.

3.1.1 Одномерный потенциал V_{2-4}

В качестве первого примера рассмотрим частицу в одномерном симметричном потенциале четвёртой степени:

$$V_{2-4}(x) = ax^2 + cx^4, \quad (3.2)$$

где \bar{a} и \bar{c} — неотрицательные параметры. В случае $\bar{c} = 0$ этот потенциал описывает гармонический осциллятор. При этом выражение «гармонического» приближения (1.48) является точным, и метод НАРІМС должен приводить к тем же результатам, что и стандартные методы РІМС [17; 23]. Если же $\bar{c} \neq 0$, то осциллятор является ангармоническим, и система (3.2) может быть использована для проверки метода НАРІМС путём сопоставления полученных результатов с «эталонными» результатами РІМС. Отметим, что на практике удобно ввести безразмерные параметры a и c так, чтобы $\bar{a} = a \frac{x_{osc}^2}{E_{osc}}$, $\bar{c} = \frac{x_{osc}^4}{E_{osc}}$, где $E_{osc} = \hbar\omega$ и $x_{osc} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ — известные выражения для кванта энергии гармонического осциллятора и осцилляторной длины.

На Рис. 3.1 показан вид потенциала (3.2) при $a = 0.5$ и различных значениях параметра c . Линия 1 соответствует $c = 0$, в то время как другие линии соответствуют последовательно возрастающей степени ангармонизма, который в данном случае не может рассматриваться как малое возмущение.

Зависимость средней энергии $\langle \hat{H} \rangle$ от обратной температуры $\beta = 1/kT$ представлена на Рис. 3.2. Результаты, полученные с помощью метода НАРІМС, совпадают с результатами «эталонного» метода РІМС в пределах статистической ошибки. При температурах ниже $0.3E_{osc}$ энергия осциллятора стремится к энергии основного состояния E_0 . С ростом ангармонизма потенциальная яма

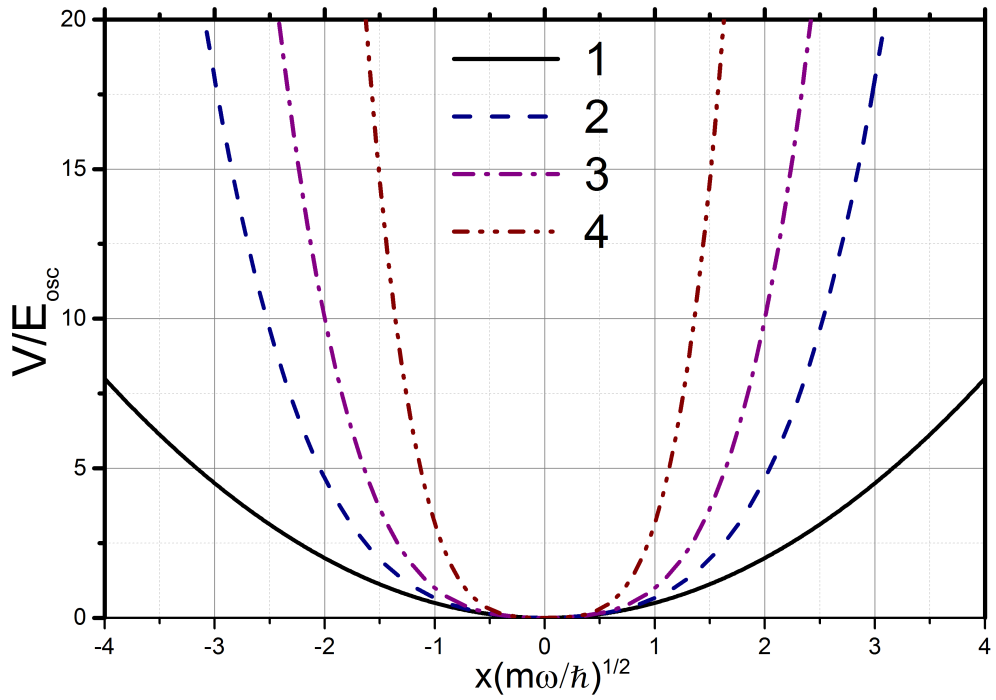


Рисунок 3.1 — Потенциал $V_{2-4}(x)$ при $a = 0.5$ и $c = 0$ (1), $c = 0.17$ (2), $c = 0.50$ (3), $c = 2.67$ (4).

становится всё уже, поэтому энергия основного состояния возрастает от линии 1 к линии 4. В результате система оказывается в основном состоянии при более высокой температуре.

Зависимость $\langle \hat{H}^2 \rangle$ от $\beta = 1/kT$ представлена на Рис. 3.3. При температурах выше E_{osc} снова наблюдается полное согласие между результатами методов НАРИМС и РИМС, однако при более низких температурах возникает существенное расхождение, вызванное статистической ошибкой обоих методов, которая стремительно возрастает с увеличением степени ангармонизма. Причина этого заключается в том, что оператор \hat{H}^2 содержит четвёртые степени координаты, так что основной вклад в среднее значение $\langle \hat{H}^2 \rangle$ дают достаточно большие x . Однако в алгоритмах НАРИМС и РИМС такие конфигурации получаются относительно редко, что приводит к большой статистической ошибке.

Это хорошо видно из Рис. 3.4, на котором представлены волновые функции основного состояния $\Psi_0(x)$, извлечённые из координатных распределений при низкой температуре. Для сравнения там же показаны волновые функции основного состояния, полученные с помощью численного решения стационарного уравнения Шрёдингера в среде Mathematica 9.0 [52]. Небольшое расхождение результатов объясняется двумя причинами. Во-первых, метод НАРИМС даёт волновые функции основного состояния лишь приближённо, поскольку ра-

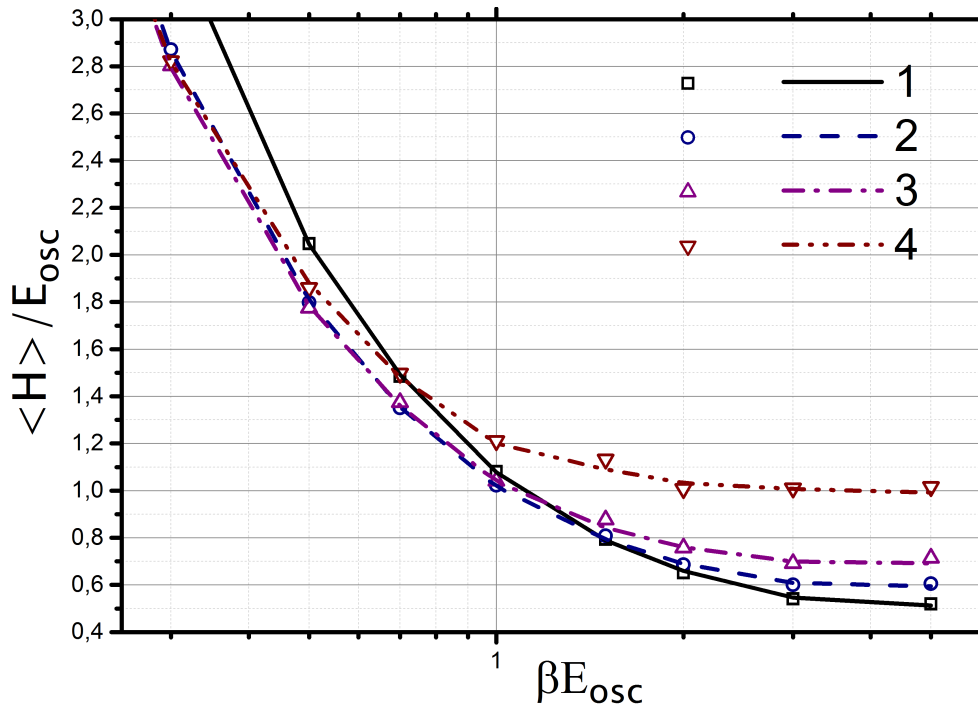


Рисунок 3.2 — Зависимость $\langle \hat{H} \rangle$ от $\beta = 1/kT$ для осциллятора $V_{2-4}(x)$ при $a = 0.5$ и $c = 0$ (1), $c = 0.17$ (2), $c = 0.50$ (3), $c = 2.67$ (4). Символы — НАРИМС, линии — РИМС.

ботает при конечной температуре. Во-вторых, использовались различные граничные условия: в случае НАРИМС — периодические, а в случае численного решения уравнения Шрёдингера — нулевые.

Наконец, в Табл. 1 выписаны отдельно значения средней энергии и среднего квадрата энергии для основного состояния ангармонического осциллятора с потенциалом $V_{2-4}(x)$. В столбцах $\langle \hat{H} \rangle_{num}$ и $\langle \hat{H}^2 \rangle_{num}$ приводятся результаты, полученные методом НАРИМС при температуре $0.2E_{osc}$, а в столбцах $\langle \hat{H} \rangle_{theor}$ и $\langle \hat{H}^2 \rangle_{theor}$ — результаты численного решения стационарного уравнения Шрёдингера. Для энергии расхождение составляет менее одного процента, для квадрата энергии — менее десяти процентов.

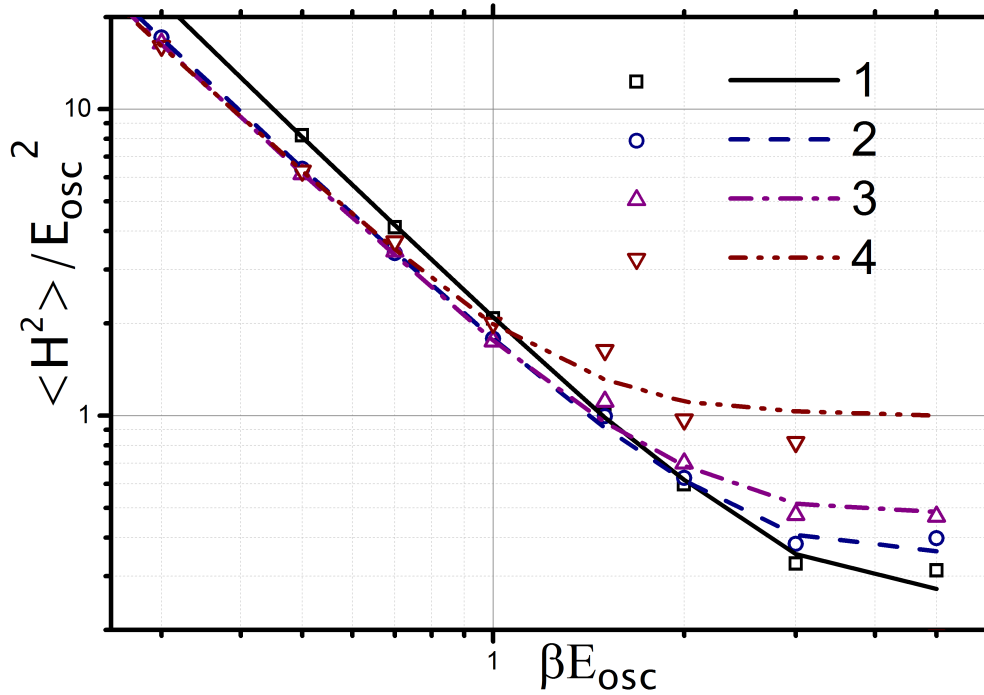


Рисунок 3.3 — Зависимость $\langle \hat{H}^2 \rangle$ от $\beta = 1/kT$ для осциллятора $V_{2-4}(x)$ при $a = 0.5$ и $c = 0$ (1), $c = 0.17$ (2), $c = 0.50$ (3), $c = 2.67$ (4). Символы — НАРИМС, линии — РИМС.

Таблица 1 — Средняя энергия и средний квадрат энергии основного состояния осциллятора $V_{2-4}(x)$.

a	c	$\langle \hat{H} \rangle_{theor}$	$\langle \hat{H} \rangle_{num}$	$\langle \hat{H}^2 \rangle_{theor}$	$\langle \hat{H}^2 \rangle_{num}$
0.50	0.00	0.50	0.49	0.25	0.24
0.50	0.17	0.59	0.58	0.35	0.33
0.50	0.50	0.70	0.68	0.49	0.46
0.50	2.67	1.03	1.04	1.05	1.14

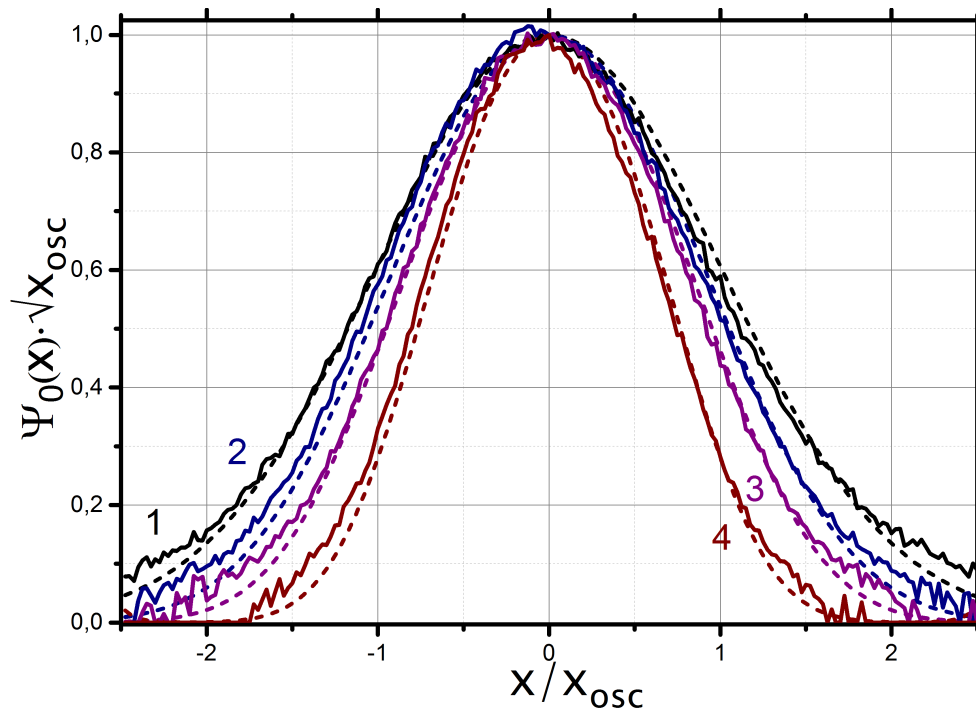


Рисунок 3.4 — Волновые функции основного состояния $\Psi_0(x)$ осциллятора $V_{2-4}(x)$ при $a = 0.5$ и $c = 0$ (1), $c = 0.17$ (2), $c = 0.50$ (3), $c = 2.67$ (4). Сплошные линии — НАРИМС, пунктирные — решения уравнения Шрёдингера.

3.1.2 Одномерный потенциал V_{3-4}

В качестве второго примера рассмотрим частицу, движущуюся в одномерном несимметричном потенциале четвёртой степени:

$$V_{3-4}(x) = E_{34} (b(x/\sigma)^3 + (x/\sigma)^4), \quad (3.3)$$

где E_{34} и σ являются характерными масштабами энергии и длины, а безразмерный параметр b определяет относительный вклад взаимодействий x^3 и x^4 . Этот потенциал описывает ангармонический осциллятор, который может быть использован для проверки метода НАРИМС.

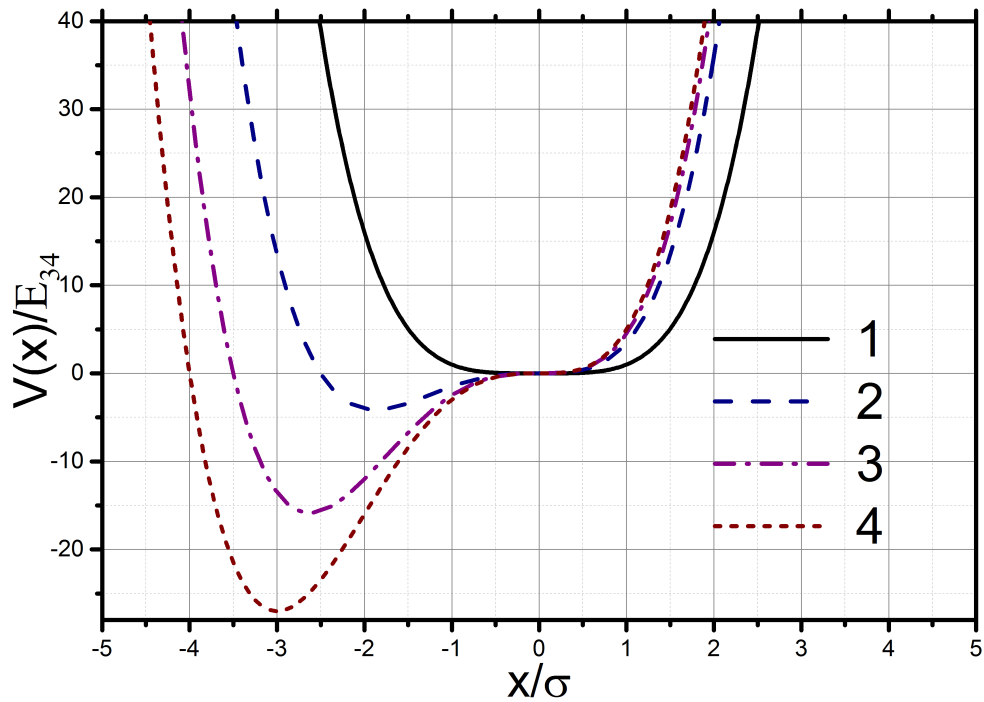


Рисунок 3.5 — Потенциал $V_{3-4}(x)$ при $b = 0$ (1), $b = 1.67$ (2), $b = 2.33$ (3), $b = 6$ (4).

На Рис. 3.5 показан вид потенциала (3.3) при различных значениях параметра b . В случае 1 взаимодействие x^3 отсутствует и потенциал является полностью симметричным. В остальных случаях вклад взаимодействия x^3 отличен от нуля, что приводит к возникновению несимметричной потенциальной ямы. Существенным отличием потенциала $V_{3-4}(x)$ от $V_{2-4}(x)$ является то, что при $b \neq 0$ его производные немонотонны и меняют знак на противоположный вблизи минимума.

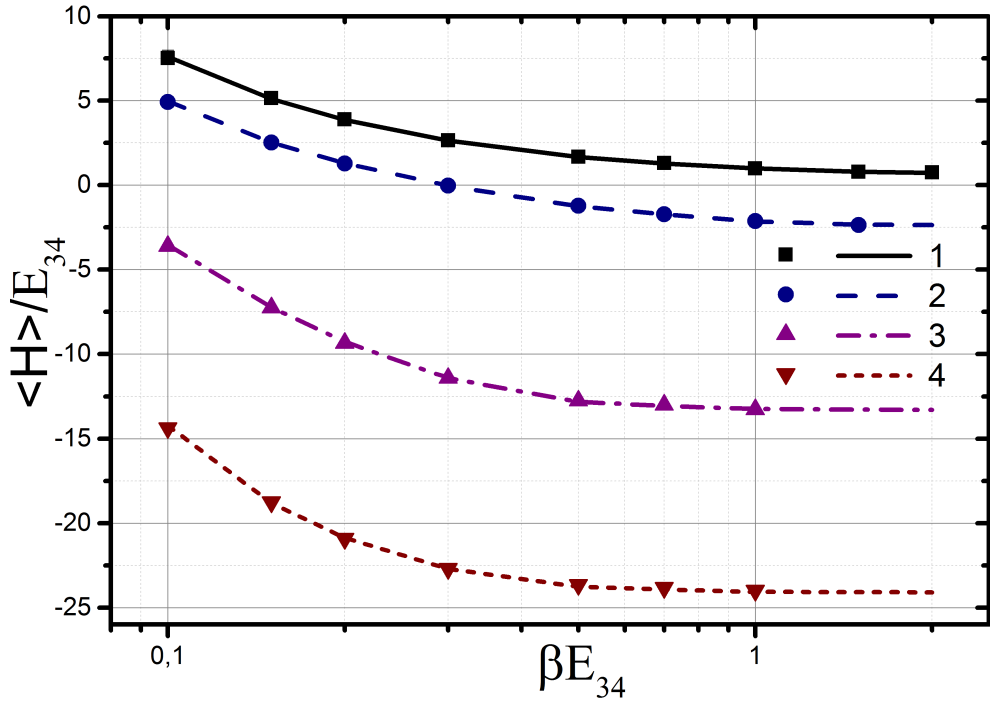


Рисунок 3.6 — Зависимость $\langle \hat{H} \rangle$ от $\beta = 1/kT$ для осциллятора $V_{3-4}(x)$ при $b = 0$ (1), $b = 1.67$ (2), $b = 2.33$ (3), $b = 6$ (4). Символы — НАРИМС, линии — РИМС.

Зависимость средней энергии $\langle \hat{H} \rangle$ от обратной температуры $\beta = 1/kT$ представлена на Рис. 3.6. Результаты, полученные с помощью метода НАРИМС, совпадают с результатами «эталонного» метода РИМС в пределах статистической ошибки. При температурах ниже $2E_{34}$ система находится практически в основном состоянии. С увеличением параметра b энергия основного состояния уменьшается, так как растёт глубина потенциальной ямы.

Зависимость $\langle \hat{H}^2 \rangle$ от $\beta = 1/kT$ представлена на Рис. 3.7. Вплоть до температуры E_{34} наблюдается хорошее согласие между результатами методов НАРИМС и РИМС.

Зависимости средней кинетической $\langle \hat{K} \rangle$ и потенциальной $\langle \hat{P} \rangle$ энергий от $\beta = 1/kT$ представлены на Рис. 3.8. Изменение параметра b слабо влияет на кинетическую энергию, приводя к небольшому уменьшению при температурах ниже $2E_{34}$. В то же время потенциальная энергия сильно зависит как от b , так и от температуры, и даёт основной вклад в полную энергию.

Отметим, что для больших b и малых kT результаты НАРИМС на Рис. 3.6, 3.7 и 3.8 отсутствуют. Это связано с тем, что число траекторий $z(\tau)$, на которых матрица χ перестаёт быть положительно определённой, становится значитель-

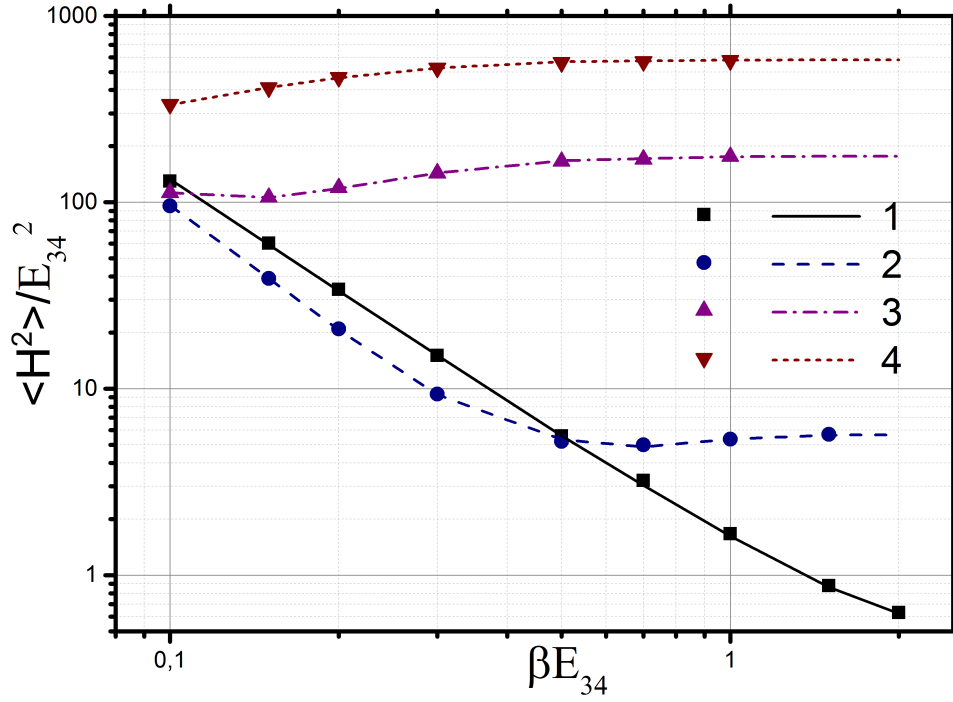


Рисунок 3.7 — Зависимость $\langle \hat{H}^2 \rangle$ от $\beta = 1/kT$ для осциллятора $V_{3-4}(x)$ при $b = 0$ (1), $b = 1.67$ (2), $b = 2.33$ (3), $b = 6$ (4). Символы — НАРИМС, линии — РИМС.

ным, и метод НАРИМС перестаёт работать:

$$1 + \frac{\beta\lambda^2}{\pi} \int_0^1 d\tau \left(\tau - \frac{1}{2} \right)^2 \frac{\partial^2 V(y)}{\partial y^2} \Big|_{y=x+\lambda z(\tau)} \leq 0. \quad (3.4)$$

Такая ситуация может возникнуть при низких температурах для потенциалов с отрицательными вторыми производными, что ограничивает применимость метода для расчёта систем со связанными состояниями.

Наконец, волновые функции основного состояния $\Psi_0(x)$, извлечённые из координатных распределений при достаточно низкой температуре E_{34} , представлены на Рис. 3.9. Видно, что частицы локализованы вблизи потенциальной ямы. С увеличением b волновая функция основного состояния сужается, и локализация частиц усиливается.

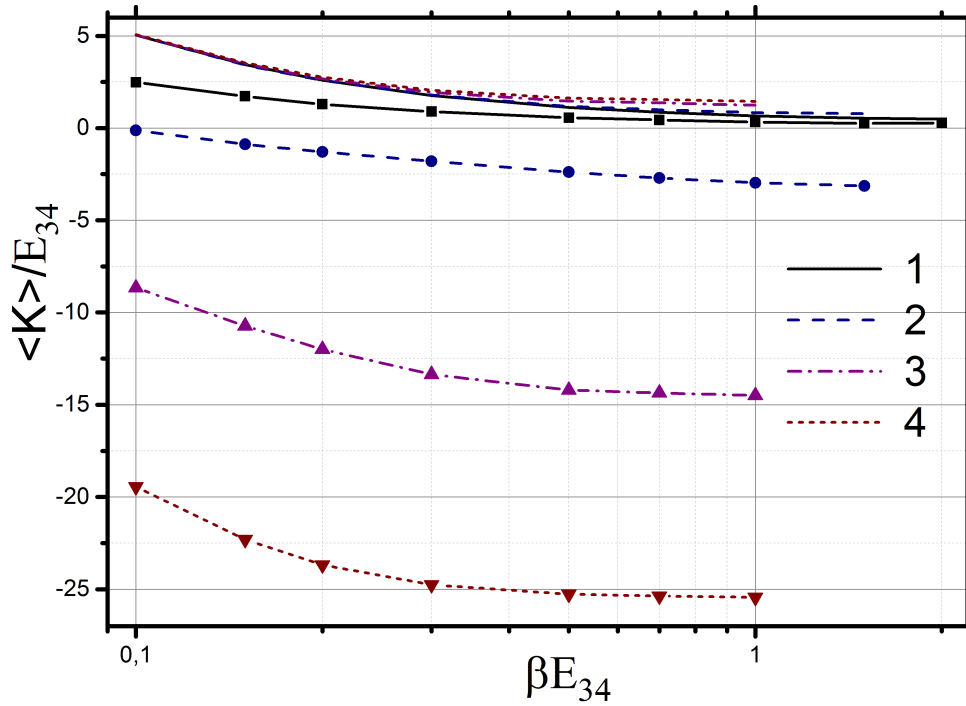


Рисунок 3.8 — Зависимость $\langle \hat{K} \rangle$ (линии без символов) и $\langle \hat{P} \rangle$ (линии с символами) от $\beta = 1/kT$ для осциллятора $V_{3-4}(x)$ при $b = 0$ (1), $b = 1.67$ (2), $b = 2.33$ (3), $b = 6$ (4).

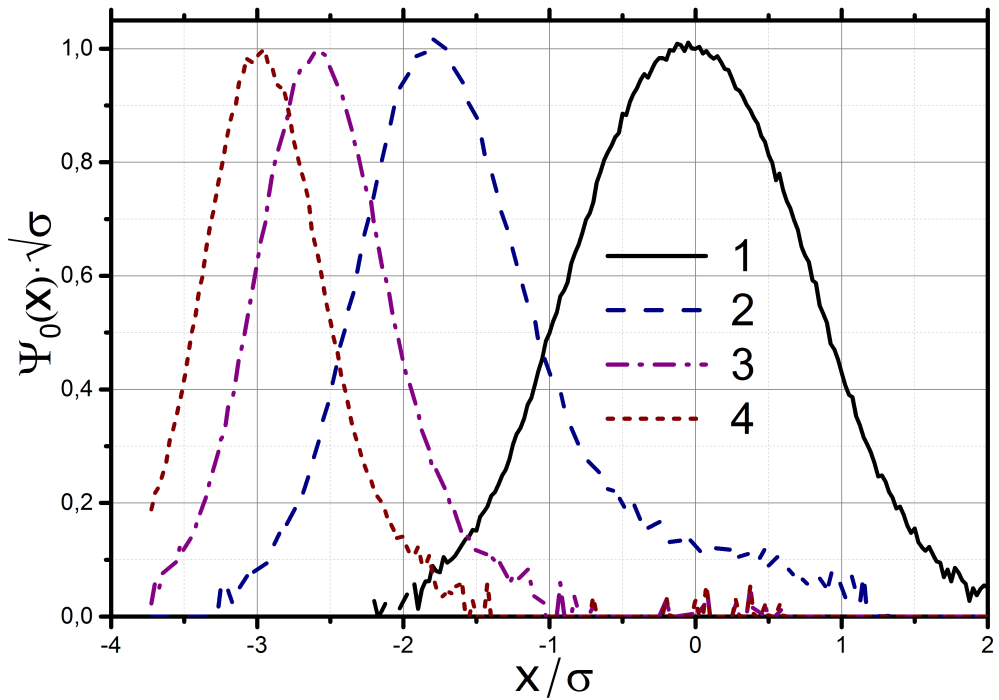


Рисунок 3.9 — Волновые функции основного состояния $\Psi_0(x)$ осциллятора $V_{3-4}(x)$ при $b = 0$ (1), $b = 1.67$ (2), $b = 2.33$ (3), $b = 6$ (4).

3.1.3 Одномерный потенциал V_{SCC}

В качестве третьего примера рассмотрим частицу в одномерном кулоновском потенциале с мягкой сердцевиной [53]:

$$V_{SCC}(x) = -\frac{e^2}{\sqrt{x_0^2 + x^2}}, \quad (3.5)$$

где e является величиной электрического заряда, а x_0 — характерным масштабом расстояний. На расстояниях, много больших x_0 , потенциал $V_{SCC}(x)$ совпадает с обычным кулоновским потенциалом. Система (3.5) может быть использована для проверки метода НАРИМС.

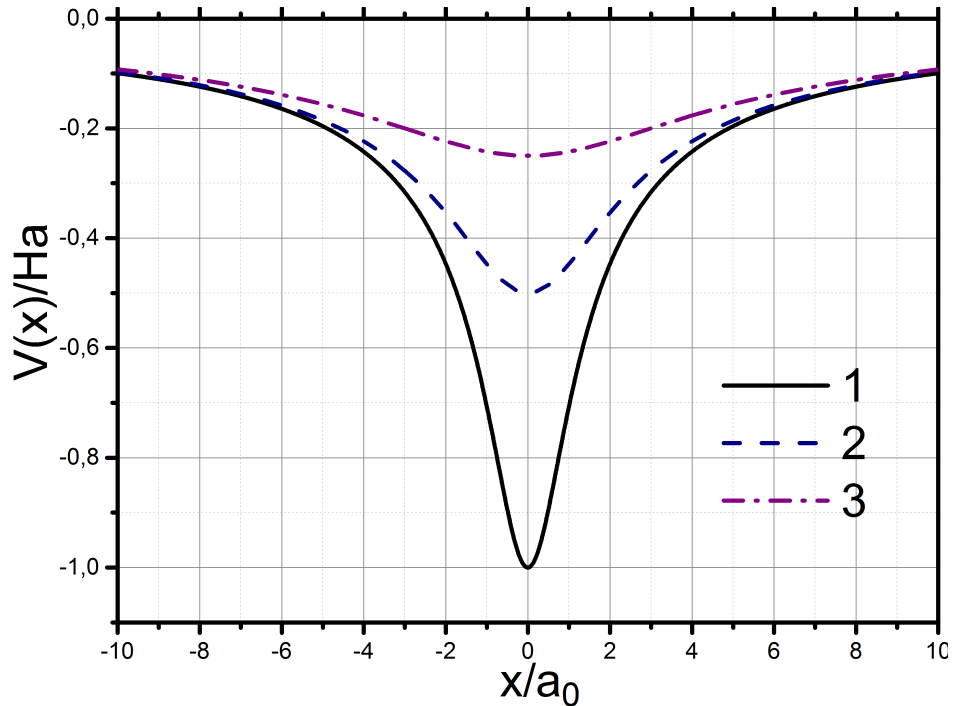


Рисунок 3.10 — Потенциал $V_{SCC}(x)$ при $x_0 = a_0$ (1), $x_0 = 2a_0$ (2), $x_0 = 3a_0$ (3).

На Рис. 3.10 показан вид потенциала V_{SCC} при различных значениях параметра x_0 : a_0 , $2a_0$ и $3a_0$. Величина $a_0 = \hbar/me^2$ является боровским радиусом, который в одномерном случае описывается той же формулой, что и в трёхмерном [54]. Вторые производные потенциала V_{SCC} отрицательны при $x^2 > 0.5x_0^2$, то есть в большей части пространства.

Зависимость средней энергии $\langle \hat{H} \rangle$ от обратной температуры $\beta = 1/kT$ для частицы в потенциале V_{SCC} представлена на Рис. 3.11. Результаты, полученные с помощью метода НАРИМС, совпадают с результатами «эталонного» мето-

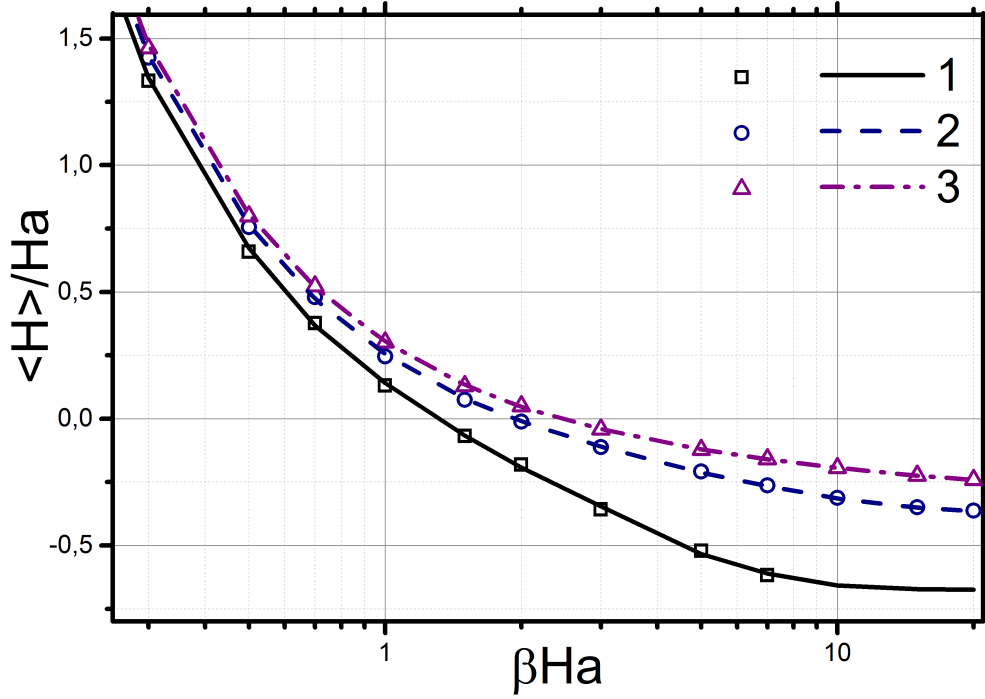


Рисунок 3.11 — Зависимость $\langle \hat{H} \rangle$ от $\beta = 1/kT$ для частицы в потенциале V_{SCC} при $x_0 = a_0$ (1), $x_0 = 2a_0$ (2), $x_0 = 3a_0$ (3). Символы — НАРИМС, линии — РИМС.

да РИМС в пределах статистической ошибки. В приведённых расчётах основное состояние не было достигнуто, так как вторые производные V_{SCC} отрицательны в значительной части пространства. В результате для большого числа траекторий матрица χ не является положительно определённой (3.4), и метод НАРИМС перестаёт работать при приближении к основному состоянию системы. Именно поэтому на рисунке отсутствуют точки при $\beta \text{Ha} \geq 10$ для $x_0 = a_0$.

Зависимость $\langle \hat{H}^2 \rangle$ от $\beta = 1/kT$ представлена на Рис. 3.12. Относительная погрешность в данном случае близка к таковой для $\langle \hat{H} \rangle$ и оказывается значительно меньшей, чем в случае степенных потенциалов $V_{2-4}(x)$ и $V_{3-4}(x)$. Причина состоит в том, что оператор \hat{H}^2 содержит только отрицательные степени координаты. Поэтому основной вклад дают сравнительно малые x , в то время как для степенных потенциалов определяющими являются «хвосты» волновых функций. Заметим также, что при температурах, превышающих 1 Ha, термодинамическое поведение системы практически не зависит от x_0 , что оправдывает использование V_{SCC} вместо кулоновского потенциала в квазиклассических расчётах.

Наконец, зависимости средней кинетической $\langle \hat{K} \rangle$ и потенциальной $\langle \hat{P} \rangle$ энергий от $\beta = 1/kT$ представлены на Рис. 3.13. Средняя кинетическая энер-

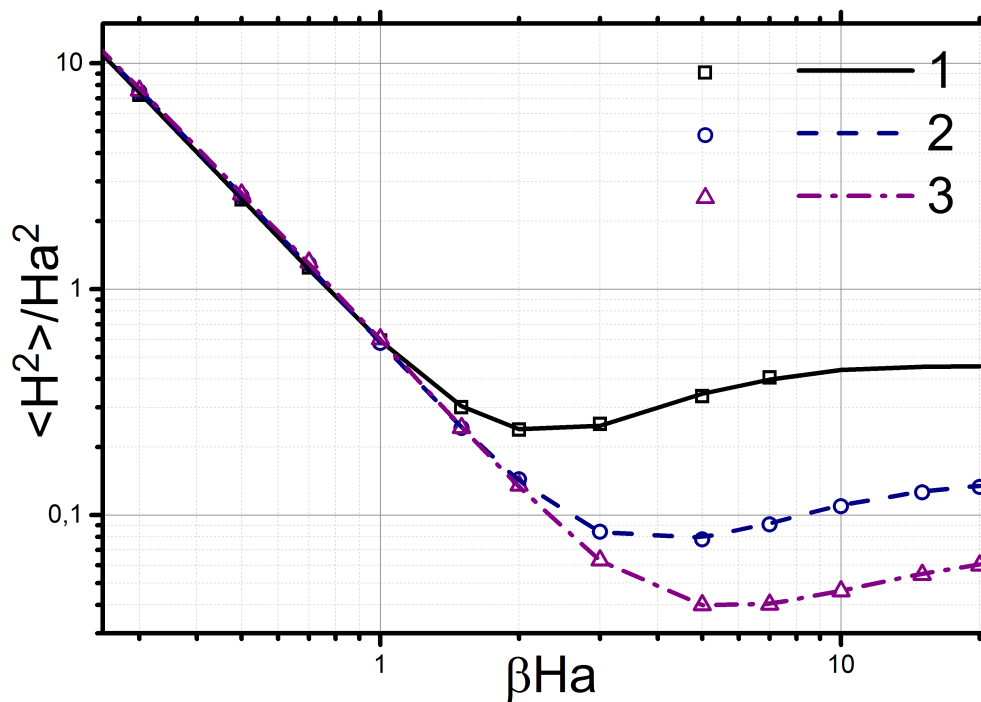


Рисунок 3.12 — Зависимость $\langle \hat{H}^2 \rangle$ от $\beta = 1/kT$ для частицы в потенциале V_{SCC} при $x_0 = a_0$ (1), $x_0 = 2a_0$ (2), $x_0 = 3a_0$ (3). Символы — НАРІМС, линии — РІМС.

гия практически не зависит от x_0 вплоть до очень низких температур, когда практически достигается основное состояние. Напротив, средняя потенциальная энергия при низких температурах сильно убывает.

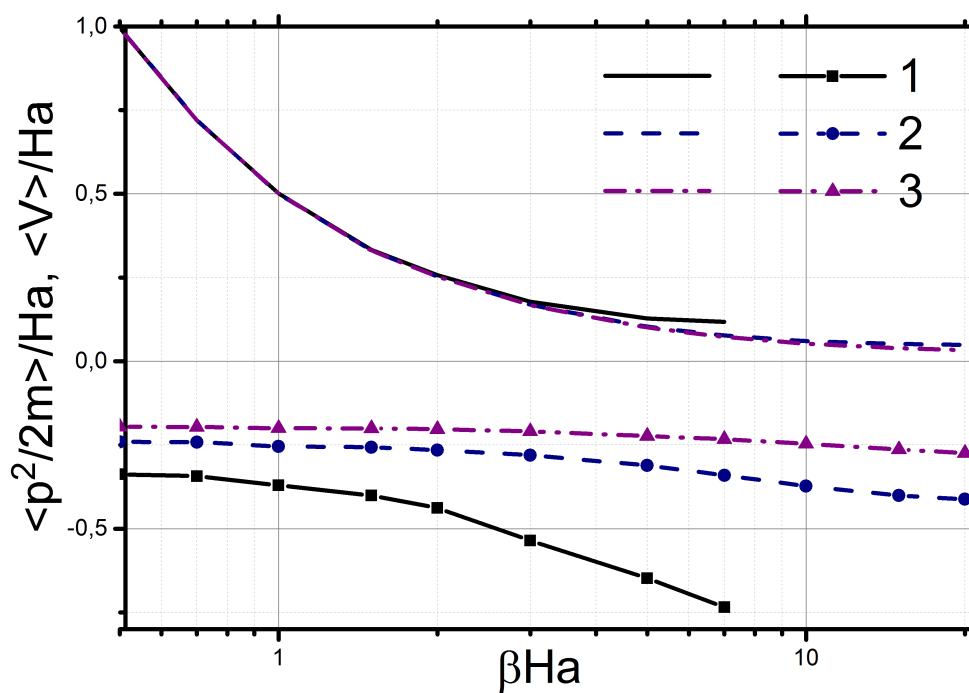


Рисунок 3.13 — Зависимость $\langle \hat{K} \rangle$ (линии) и $\langle \hat{P} \rangle$ (линии с символами) от $\beta = 1/kT$ для частицы в потенциале V_{SCC} при $x_0 = a_0$ (1), $x_0 = 2a_0$ (2), $x_0 = 3a_0$ (3).

3.1.4 Трёхмерный потенциал V_{2-4}

В качестве простейшей трёхмерной системы рассмотрим частицу в потенциале следующего вида:

$$V_{2-4}(r) = \bar{a}r^2 + \bar{c}r^4, \quad (3.6)$$

где r обозначает длину радиус-вектора (x, y, z) . Этот потенциал является трёхмерным аналогом потенциала (3.2) и описывает сферически симметричный ангармонический осциллятор, определяемый параметрами \bar{a} и \bar{c} . На практике удобно определить безразмерные параметры a и c так, чтобы $\bar{a} = a \frac{x_{osc}^2}{E_{osc}}$, $\bar{c} = \frac{x_{osc}^4}{E_{osc}}$, где $E_{osc} = \hbar\omega$ и $x_{osc} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ — квант энергии гармонического осциллятора и осцилляторная длина. В случае $c = 0$ ангармонический член в $V_{2-4}(r)$ отсутствует, так что формулы «гармонического» приближения (1.48) оказываются точными. При $c \neq 0$ система (3.6) может быть использована для проверки метода НАРИМС путём сопоставления полученных результатов с «эталонными» результатами РИМС.

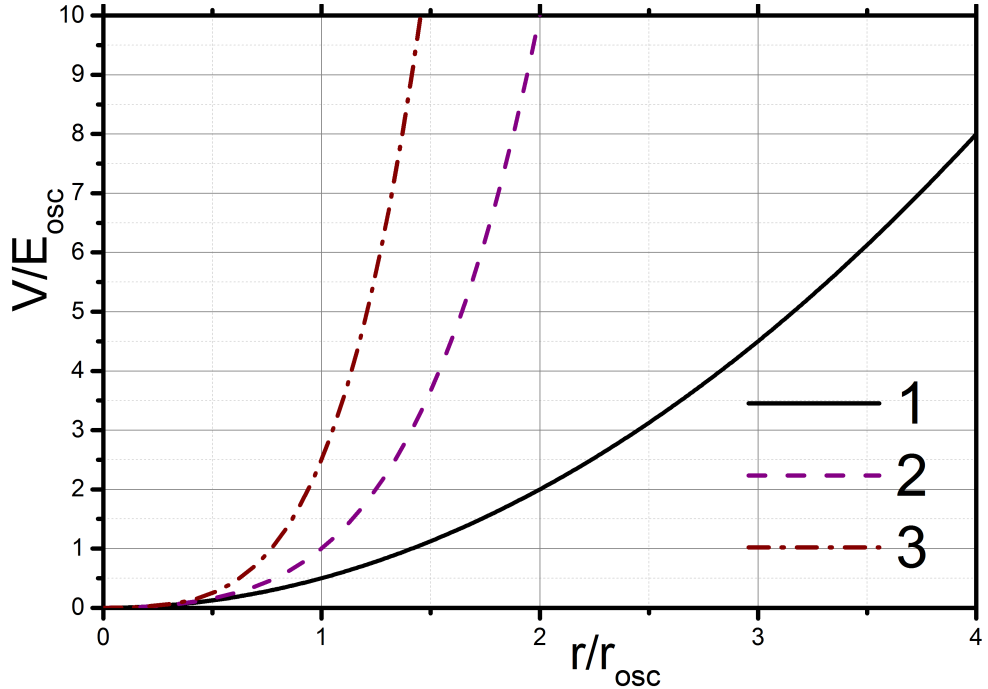


Рисунок 3.14 — Трёхмерный потенциал $V_{2-4}(r)$ при $a = 0.5$ и $c = 0$ (1), $c = 0.5$ (2), $c = 2.0$ (3).

На Рис. 3.14 показан вид потенциала (3.6) при $a = 0.5$ и различных значениях параметра c . Линия 1 соответствует $c = 0$, то есть трёхмерному гармо-

ническому осциллятору. Две другие линии соответствуют достаточно большим степеням ангармонизма, который нельзя рассматривать как малое возмущение.

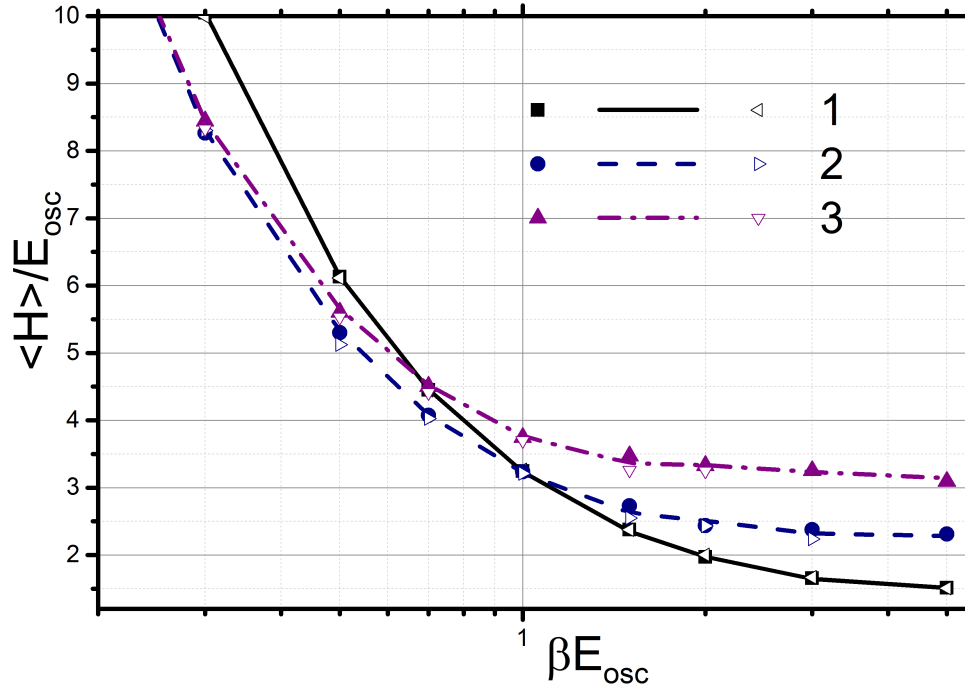


Рисунок 3.15 — Зависимость $\langle \hat{H} \rangle$ от $\beta = 1/kT$ для трёхмерного осциллятора $V_{2-4}(r)$ при $a = 0.5$ и $c = 0$ (1), $c = 0.5$ (2), $c = 2.0$ (3). Символы — НАРИМС (сплошные) и SMPIMC (пустые), линии — PIMC.

Зависимость средней энергии $\langle \hat{H} \rangle$ от обратной температуры $\beta = 1/kT$ для трёхмерного осциллятора с потенциалом $V_{2-4}(r)$ представлена на Рис. 3.15. Результаты, полученные с помощью методов НАРИМС и SMPIMC, с большой точностью совпадают между собой, а также с результатами «эталонного» метода PIMC. Термодинамическое поведение трёхмерного осциллятора $V_{2-4}(r)$ в целом аналогично поведению одномерного осциллятора $V_{2-4}(x)$, отличаясь от последнего лишь количественно.

На Рис. 3.16 представлены результаты расчёта функции распределения по импульсу $F(|\mathbf{p}|)$, полученные методом SMPIMC при $a = 0.5$, $c = 0.5$ и различных температурах. При $kT \geq E_{osc}$ распределение практически максвелловское, однако при уменьшении температуры становится всё шире, стремясь к распределению в основном состоянии. Результаты метода НАРИМС оказываются такими же и не приводятся здесь.

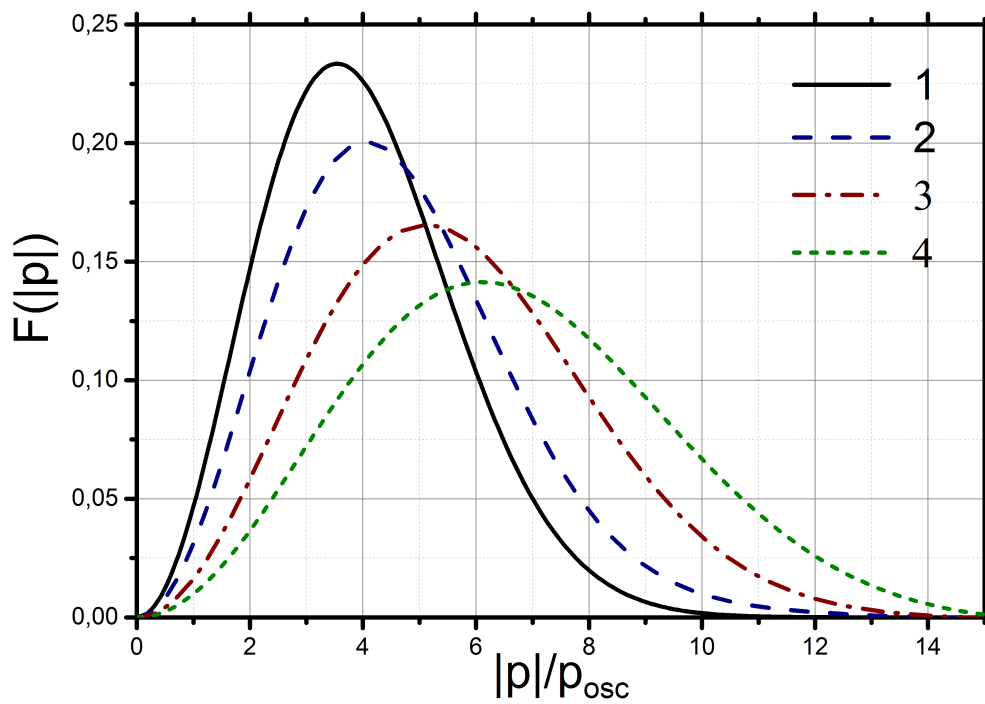


Рисунок 3.16 — Функции распределения по импульсу трёхмерного осциллятора $V_{2-4}(r)$ при $a = 0.5$, $c = 0.5$ и $kT = 1.00E_{osc}$ (1), $kT = 0.67E_{osc}$ (2), $kT = 0.50E_{osc}$ (3), $c = 0.33$ (4).

3.2 Идеальный фермионный газ

В этом разделе рассматривается простейшая система, состоящая из фермионов со спином $s = 1/2$ — идеальный фермионный газ. Хотя явное межчастичное взаимодействие в такой системе отсутствует, обменные эффекты существенным образом влияют на её свойства. В частности, в условиях термодинамического равновесия импульсы частиц описываются распределением Ферми вместо распределения Максвелла [55]:

$$F(|\mathbf{p}|) = \frac{g}{2\pi^2\hbar^3} \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/kT} + 1}, \quad (3.7)$$

где $\epsilon = p^2/2m$ — кинетическая энергия одной частицы, а $g = 2s + 1$ — спиновый статистический вес. Химический потенциал μ связан с числом частиц, объёмом и температурой через интегральное уравнение:

$$\frac{N}{V} = \frac{g(mkT)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{z}dz}{e^{z-\mu/kT} + 1}, \quad (3.8)$$

которое может быть решено численно.

Термодинамические свойства идеального Ферми ведут себя подобно относительно безразмерного параметра вырождения $\chi = n\lambda^3$. В случае $\chi \ll 1$ среднее расстояние между частицами существенно превышает характерные квантовые масштабы, так что обменным взаимодействием можно пренебречь. Напротив, при $\chi \geq 1$ волновые функции различных фермионов перекрываются, и система становится вырожденной. Имея в виду дальнейшие приложения к плазме, будем измерять массу частиц в электронных массах m_e , расстояния — в боровских радиусах a_0 , а энергию — в единицах Хартри $\text{Ha} = e^2/a_0$.

3.2.1 Проверка метода SMPIMC

Моделирование идеального фермионного газа методом SMPIMC было проведено при различных значениях параметра вырождения χ : 1.33, 1.98, 3.15, 4.95

и 6.99, что соответствует плотностям na_0^3 , равным 0.030, 0.045, 0.071, 0.111 и 0.157 соответственно при температуре $kT = 0.5Ha$.

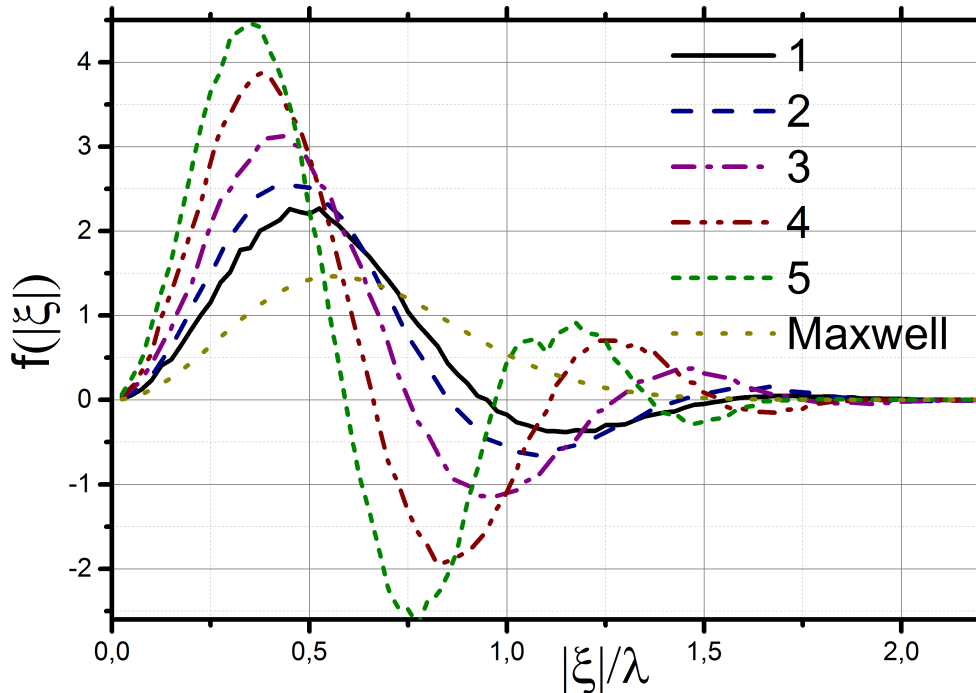


Рисунок 3.17 — «Одноимпульсная» матрица плотности идеального газа при $\chi = 1.33$ (1), $\chi = 1.98$ (2), $\chi = 3.15$ (3), $\chi = 4.95$ (4), $\chi = 6.99$ (5).

На Рис. 3.17 показана сферически симметричная «одноимпульсная» матрица плотности $f(|\xi|)$. В отличие от прообраза максвелловского распределения, представляющего собой гауссову экспоненту, $f(|\xi|)$ осциллирует с затуханием, причём осцилляции становятся всё более выраженными с ростом χ . Преобразованием Фурье очень чувствительно к характеру осцилляций преобразуемой функции, поэтому необходимо следить за тем, чтобы периодические граничные условия не влияли на функцию $f(|\xi|)$. Это влияние проиллюстрировано на Рис. 3.18 для случая $\chi = 3.15$. Число частиц в ячейке Монте Карло N изменялось от 20 до 75, в то время как плотность N/V оставалась постоянной. Видно, что при малых N поверхностные эффекты сильно искажают функцию $f(|\xi|)$, асимптотически стремящуюся к некоторому предельному значению при увеличении N . В данном случае $N = 100$ вполне достаточно для устранения влияния периодических граничных условий. Однако с увеличением вырождения необходимое число частиц N стремительно растёт, соответственно увеличивается и вычислительная сложность метода SMPIMC. Так, при $\chi = 5$ выбор $N = 125$ явно недостаточен, так как осцилляции $f(|\xi|)$ не успевают полностью затухнуть на протяжении основной ячейки.

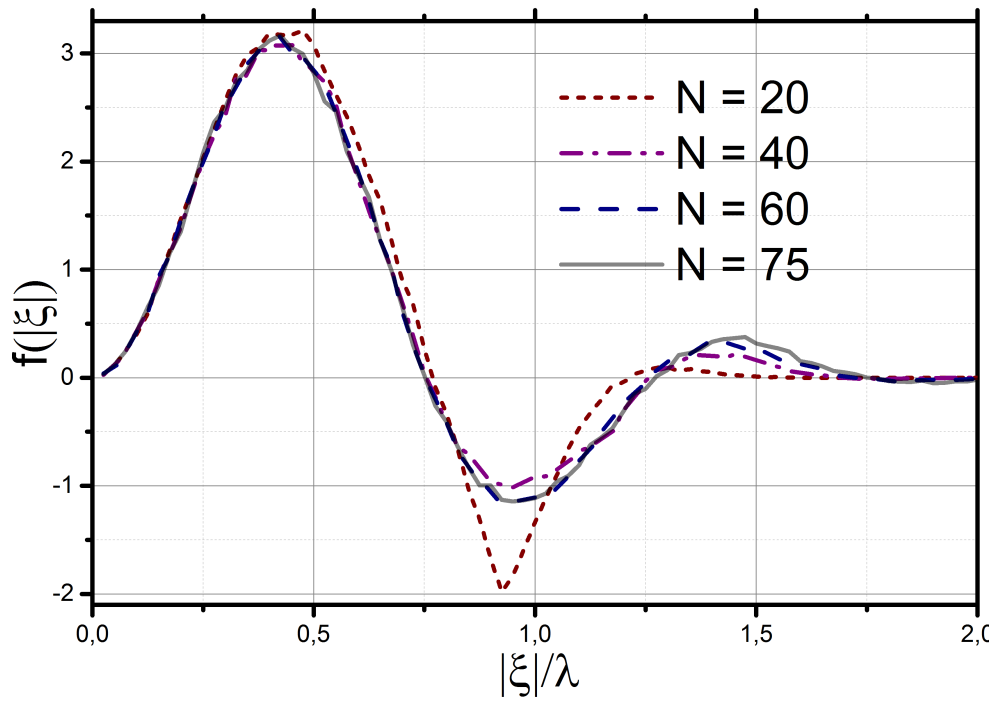


Рисунок 3.18 — Влияние периодических граничных условий на $f(|\xi|)$ при $\chi = 3.15$.

На Рис. 3.19 показаны функции распределения по импульсам $F(|\mathbf{p}|)$, полученные преобразованием Фурье из $f(|\xi|)$. При относительно слабом вырождении $\chi \leq 3$ метод SMPIMC воспроизводит функцию распределения Ферми с ошибкой порядка 1% на «хвосте». С ростом вырождения точность расчёта падает: при $\chi \approx 5$ эта ошибка составляет уже 10%, а при $\chi \approx 7$ — более 20%, что связано с влиянием периодических граничных условий. При этом наиболее чувствителен к граничным условиям «хвост» функции, в то время как интегрально значимая область совпадает с распределением Ферми и при больших вырождениях.

В частности, граничные условия не влияют на расчёт средней кинетической энергии при указанных параметрах вырождения, как это видно из Табл. 2. Погрешность метода SMPIMC при этом не превышает 1% и обусловлена, главным образом, ошибкой при нормировке функции распределения и статистической погрешностью.

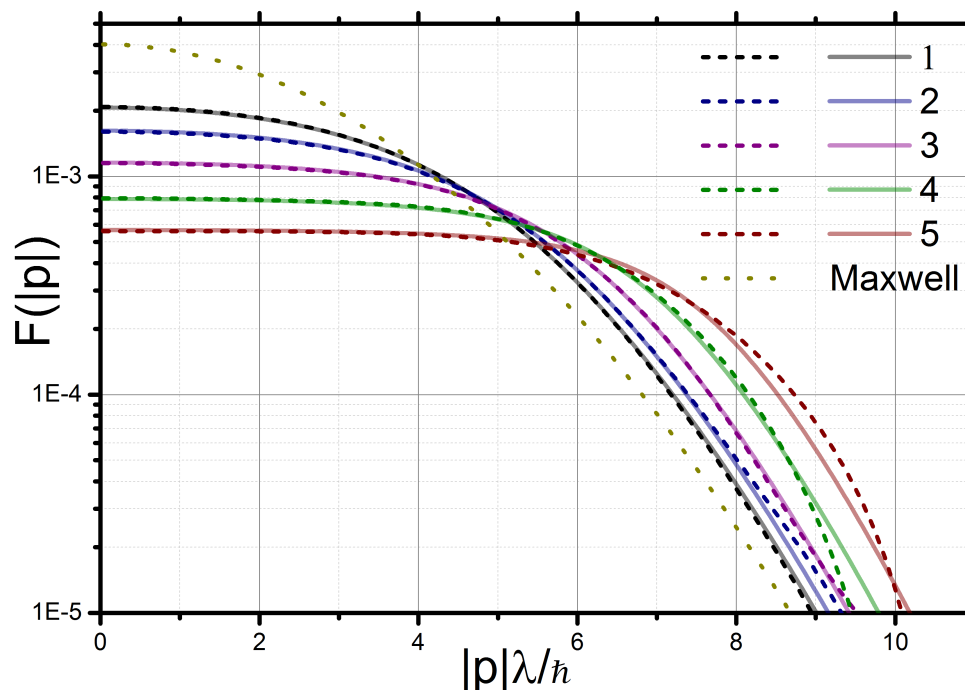


Рисунок 3.19 — Функция распределения по импульсам идеального газа при $\chi = 1.33$ (1), $\chi = 1.98$ (1), $\chi = 3.15$ (1), $\chi = 4.95$ (1), $\chi = 6.99$ (1). Пунктирные линии — SMPIMC, сплошные — распределение Ферми, точки — распределение Максвелла.

Таблица 2 — Средняя кинетическая энергия идеального газа.

kT/Ha	na_0^3	χ	$\langle \hat{K} \rangle_{theor}/NkT$	$\langle \hat{K} \rangle_{num}/NkT$
0.5	0.030	1.33	0.92	0.90
0.5	0.045	1.98	1.01	1.01
0.5	0.071	3.15	1.15	1.15
0.5	0.111	4.95	1.35	1.32
0.5	0.157	6.99	1.57	1.58

3.2.2 Проверка обменного псевдопотенциала

Для проверки фермионного обменного псевдопотенциала, полученного в разделе 1.5, рассмотрим двухкомпонентный идеальный газ, состоящий из фермионов двух сортов с массами m_e и m_h . Поскольку различные компоненты между собой не взаимодействуют, они образуют две независимые подсистемы с параметрами вырождения $\chi_e = n_e \lambda_e^3$ и $\chi_h = n_h \lambda_h^3$. Импульсы частиц каждой из компонент описываются распределениями Ферми (3.7), в которых следует заменить N на N_e или N_h соответственно, причём предполагается, что $N_e = N_h = N/2$.

Фермионный обменный псевдопотенциал имеет в данном случае вид:

$$v_{ab}^s \approx -kT \ln \left\{ 1 - \delta_{\sigma_{a,s}\sigma_{b,s}} \exp\left(-\frac{2\pi|\mathbf{q}_{a,s} - \mathbf{q}_{b,s}|^2}{\lambda_s^2}\right) \exp\left(-\frac{|(\mathbf{p}_{a,s} - \mathbf{p}_{b,s})\lambda_s|^2}{(2\pi\hbar)^2\alpha_s^2}\right) \right\}, \quad (3.9)$$

где индексы a и b нумеруют частицы одного сорта, s — сорт частиц e или h , $\sigma_{a,s}$ — спиновое состояние частицы, $\lambda_s = \sqrt{2\pi\hbar\beta/m_s}$ — тепловая длина волны. Безразмерный коэффициент α_s является полуэмпирическим параметром, зависящим от степени вырождения. Основываясь на результатах расчётов функций распределения по импульсам при умеренных вырождениях ($1 \leq \chi \leq 10$), была подобрана линейная зависимость $\alpha_s^2 = 0.00505 + 0.056n\lambda_s^3$. Ниже представлены некоторые результаты этих расчётов для случая $m_h = 2m_e$.

На Рис. 3.20 представлены функции распределения по импульсам $F(|\mathbf{p}|)$ при вырождении $\chi_e = 5.67$ и $\chi_h = 2.00$ соответственно. Результаты расчёта методом LARIMC сопоставлены с теоретическими распределениями Ферми, (3.7). Численное моделирование с хорошей точностью воспроизводит распределение Ферми при величинах импульсов, превосходящих $6\hbar/\lambda_e$. Хотя при малых импульсах имеется значительная статистическая погрешность, связанная с тем, что в соответствующие ячейки Δ_p попадает мало конфигураций, данная область значений $|\mathbf{p}|$ при вычислении большинства термодинамических величин не даёт существенного вклада из-за малого множителя $4\pi\mathbf{p}^2$.

На Рис. 3.21 представлены функции $F(|\mathbf{p}|)$ при вырождении $\chi_e = 10.00$ и $\chi_h = 3.54$ соответственно. В этом случае согласие численного расчёта с теорией значительно хуже и связано с влиянием периодических граничных условий,

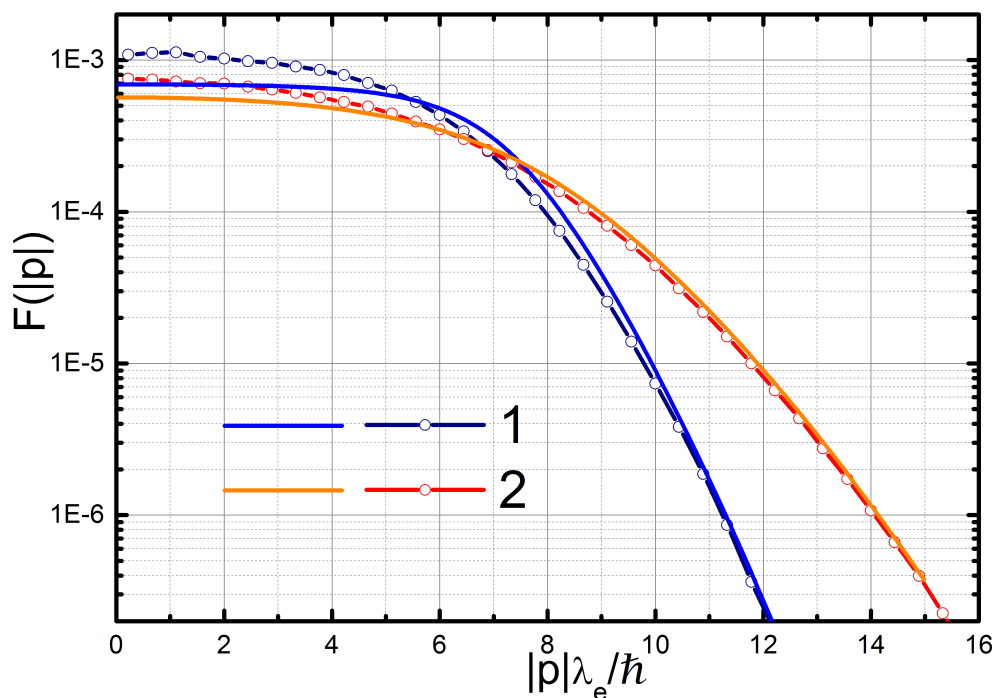


Рисунок 3.20 — Функции распределения по импульсам двухкомпонентного идеального газа при $\chi_e = 5.67$ (1), $\chi_h = 2.00$ (2). Линии с символами — LAPIMC, без символов — распределение Ферми.

так как тепловая длина волны сопоставима с размерами ячейки Монте Карло. Кроме того, парный псевдопотенциал может некорректно учитывать тройные и высшие перестановки при большой плотности. Возможно, более тщательный подбор параметра α_s может несколько улучшить ситуацию.

В целом можно сделать вывод, что парный псевдопотенциал потенциал (3.9) позволяет правильно учитывать обменное взаимодействие при $\chi \leq 5$. При этом методы LAPIMC и NARIMC гораздо менее требовательны к вычислительным ресурсам, чем методы типа DPIMC или SMPIMC, учитывающие обменное взаимодействие при помощи детерминантов.

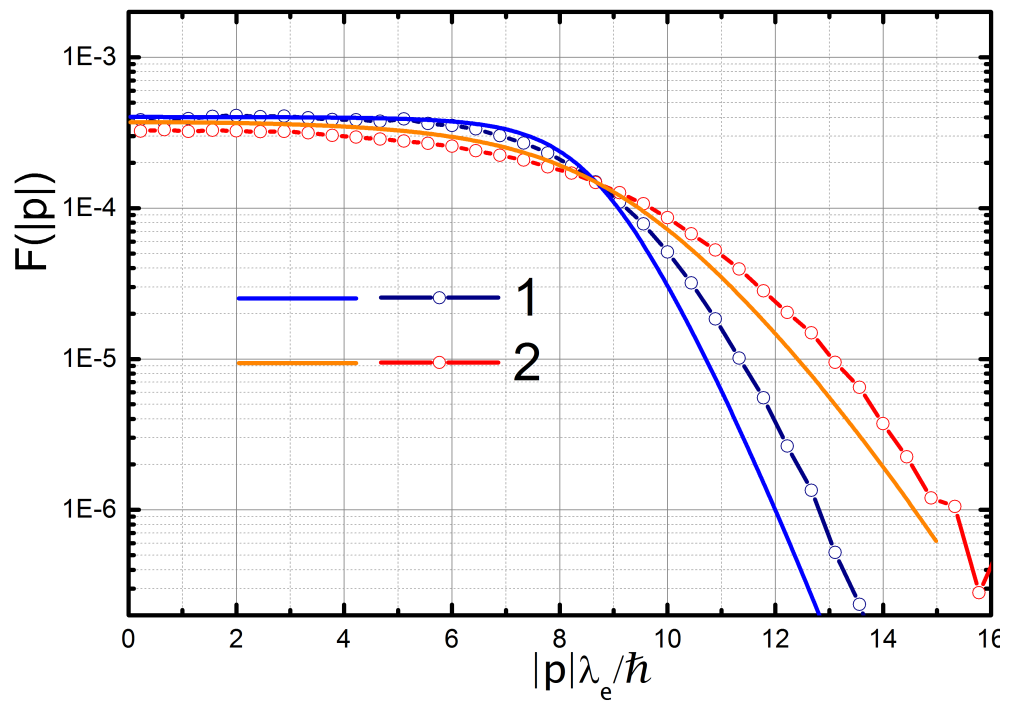


Рисунок 3.21 — Функции распределения по импульсам двухкомпонентного фермионного газа при $\chi_e = 10.0$ (1), $\chi_h = 3.54$ (2). Линии с символами — LAPIMS, без символов — распределение Ферми.

Глава 4. Численное моделирование кулоновских систем

В данной главе представлены результаты расчёта термодинамических и кинетических свойств сильнонеидеальных кулоновских систем на примере водородной и электрон-дырочной плазмы. Глава состоит из четырёх разделов.

В разделе 4.1 с общей точки зрения рассматриваются двухкомпонентные кулоновские системы. Поясняется физический смысл основных понятий и параметров, характеризующих термодинамическое состояние таких систем.

В разделе 4.2 исследуются функции распределения по импульсам в двухкомпонентных кулоновских системах. Во-первых, приводятся результаты расчёта методами NAPIMC и SMPIMC для сильнонеидеальной водородной плазмы со слабым и умеренным вырождением. Во-вторых, приводятся результаты расчёта методом LAPIMC для электрон-дырочной плазмы с умеренным вырождением.

В разделе 4.3 приводятся результаты расчёта методом SMPIMC внутренней энергии и давления сильнонеидеальной водородной плазмы со слабым и умеренным вырождением и производится их сопоставление с результатами других авторов.

В разделе 4.4 рассматриваются парные корреляционные функции в водородной и электрон-дырочной плазме, вычисленные методами SMPIMC и LAPIMC и обсуждается их качественное поведение.

4.1 Двухкомпонентные кулоновские системы

Рассмотрим систему, состоящую из фермионов двух сортов со спином $s = 1/2$ и взаимодействующих по закону Кулона. Будем считать, что частицы первого сорта обладают отрицательным зарядом $-e$ и массой m_e , в то время как частицы второго сорта — положительным зарядом $+e$ и массой m_h . Числа частиц каждого сорта обозначим N_e и N_h соответственно, причём $N_e = N_h = N/2$.

Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$\begin{aligned}
H(p, q) = & \sum_{a=1}^{N_e} \frac{\mathbf{p}_{ea}^2}{2m_e} + \sum_{a=1}^{N_h} \frac{\mathbf{p}_{ha}^2}{2m_h} + \sum_{a=1}^{N_e} \sum_{b=a+1}^{N_e} \frac{(-e)(-e)}{|\mathbf{q}_{ea} - \mathbf{q}_{eb}|} + \sum_{a=1}^{N_h} \sum_{b=a+1}^{N_h} \frac{(-e)(-e)}{|\mathbf{q}_{ha} - \mathbf{q}_{hb}|} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{a=1}^{N_e} \sum_{b=1}^{N_h} \frac{(-e)(+e)}{|\mathbf{q}_{ea} - \mathbf{q}_{hb}|},
\end{aligned} \tag{4.1}$$

где индексы e и h относятся к частицам первого и второго сортов соответственно. Будем называть частицы первого сорта «электронами», а второго — «протонами» или «дырками», имея в виду приложения к водородной плазме или электрон-дырочной плазме соответственно. В связи с этим удобно выражать длины в боровских радиусах $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$, а энергию — в Хартри $\text{Ha} = \frac{\hbar^2}{m_e a_0^2}$. В случае водородной плазмы $m_h \approx 1836 m_e$. В случае электрон-дырочной плазмы будем рассматривать упрощённую модель, в которой m_h составляет порядка нескольких масс электрона; при этом будем пренебрегать диэлектрическими свойствами среды, полагая $\epsilon = 1$.

В системе (4.1) имеется несколько масштабов длин, соотношения между которыми определяют её термодинамические свойства. Радиус Вигнера-Зейца $d = \frac{3}{4\pi n_e}^{1/3}$ характеризует среднее межчастичное расстояние. Длина Ландау $l = \frac{e^2}{kT}$ определяет расстояние между частицами, на котором их взаимная потенциальная энергия равна кинетической энергии. Средние тепловые длины волн Де Бройля $\lambda_e = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{m_e kT}}$ и $\lambda_h = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{m_h kT}}$ характеризуют квантовые размеры частиц. Боровский радиус a_0 определяет размеры связанных состояний. На практике удобно использовать безразмерные комбинации этих характерных длин: параметр Бракнера $r_s = d/a_0$, параметры вырождения электронов $\chi_e = n_e \lambda_e^3$ и протонов $\chi_h = n_h \lambda_h^3$, а также параметр неидеальности $\Gamma = \frac{e^2}{dkT}$. Например, при $\chi_e \geq 1$ электроны в плазме являются вырожденными, а $\Gamma \geq 1$ система является сильнонеидеальной.

Как было упомянуто в разделах 2.2 и 2.3, при моделировании методами РИМС вместо истинного кулоновского потенциала следует использовать специальные псевдопотенциалы, учитывающие квантовые эффекты при $r_{ab} \leq a_0$. Одним из наиболее известных псевдопотенциалов такого рода является потенциал

Кельбга [51], зависящий от температуры:

$$\Phi(r_{ab}) = \frac{e_a e_b}{r_{ab}} \left[1 - e^{-r_{ab}^2/\lambda_{\epsilon ab}^2} + \sqrt{\pi} r_{ab}/\lambda_{\epsilon ab} [1 - \text{erf}(r_{ab}/\lambda_{\epsilon ab})] \right], \quad (4.2)$$

где $\lambda_{\epsilon ab}^2 = \hbar^2 \epsilon / 2\mu_{ab}$, $\mu_{ab}^{-1} = m_a^{-1} + m_b^{-1}$, $\epsilon = \beta/M$. Заметим, что потенциал Кельбга конечен при $r_{ab} \rightarrow 0$, что является следствием принципа неопределённости Гейзенберга.

4.2 Функции распределения по импульсам

В этом разделе рассматриваются функции распределения по импульсам в водородной и электрон-дырочной плазме. Расчёты проводились для условий, когда система является сильнонеидеальной ($0.8 \leq \Gamma \leq 2.0$) и слабо или умеренно вырожденной ($0.3 \leq \chi_e \leq 5.0$). В этом случае волновые функции электронов в значительной степени перекрываются (так как d сопоставимо с λ_e), что приводит к делокализации электронов и сильной ионизации системы.

Если бы межчастичное взаимодействие отсутствовало, то импульсы электронов и протонов описывались бы распределениями Ферми (3.7). Однако кулоновское притяжение электронов и протонов может формировать состояния близкие к связанным, и несколько ограничивать доступный электронам объём. В силу принципа неопределённости Гейзенберга это приводит к росту неопределённости в значении импульсов и, следовательно, может изменить равновесные функции распределения.

На Рис. 4.1 представлены функции распределения по импульсам электронов в водородной плазме при $\Gamma = 0.8$ (а) и $\Gamma = 1.2$ (б) и различных вырождениях, рассчитанные методом SMPIMC. Несмотря на то, что плазма в данных условиях является сильнонеидеальной, функция распределения электронов с большой точностью совпадает с распределением Ферми. Из расчётов методом SMPIMC следует, что такое поведение сохраняется вплоть до $\Gamma = 3.0$. К сожалению выяснилось, что метод SMPIMC не позволяет исследовать «хвосты» функций распределения из-за сильного влияния периодических граничных условий на точность преобразования Фурье, так что надёжный расчёт возможен лишь

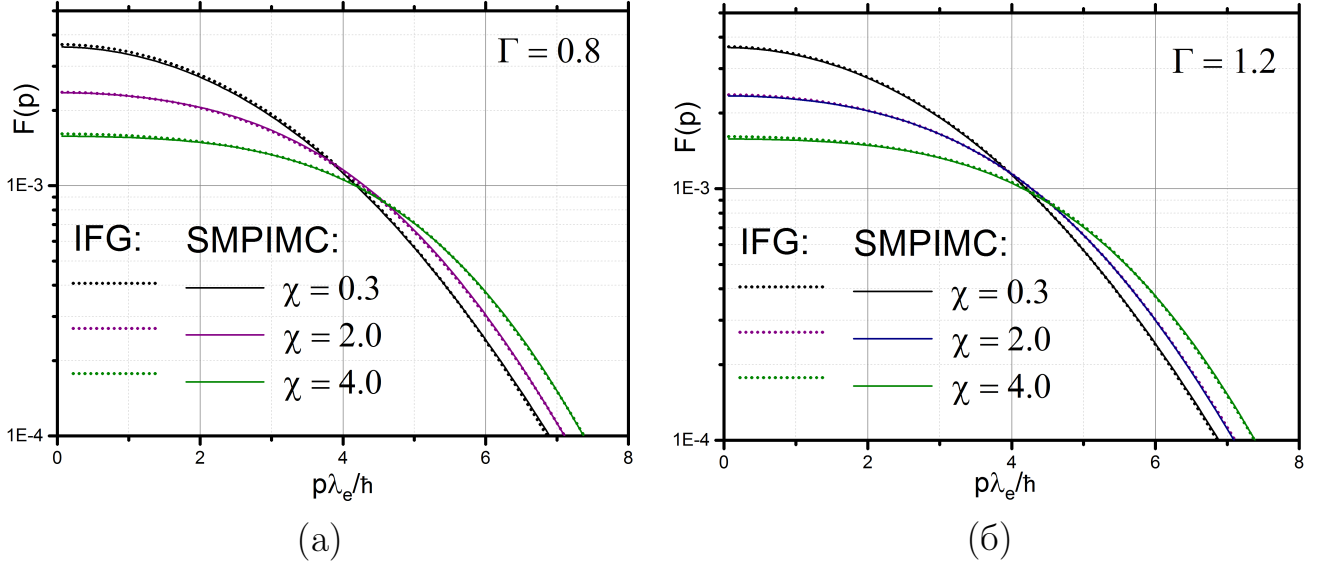


Рисунок 4.1 — Функции распределения по импульсам электронов в водородной плазме при $\Gamma = 0.8$ (а) и $\Gamma = 1.2$ (б), $\chi_e = 0.3, 2.0, 4.0$. Сплошные линии — SMPIMC, пунктирные линии — распределение Ферми.

в двух порядках по $F(|\mathbf{p}|)/F(0)$. Тем не менее, полученные результаты позволяют сделать важный вывод: в сильноионизованной водородной плазме импульсы электронов с большой точностью удовлетворяют распределению Ферми. Протоны при этом остаются максвелловскими. Поэтому при расчёте термодинамических величин, нечувствительных к «хвостам» функции распределения по импульсам, можно использовать распределение Ферми. Таковыми являются, например, давление, средняя кинетическая и полная энергии и т.д.. Более подробно термодинамические величины обсуждаются в разделе 4.2.

На Рис. 4.2 представлены функции распределения по импульсам электронов (а) и протонов (б) в слабовыврожденной сильнонеидеальной водородной плазме при $\chi_e = 0.3$ и $\Gamma = 0.4, 0.9, 1.1, 1.2$, рассчитанные методом НАРИМС. Электронная функция распределения совпадает с распределением Ферми в трёх порядках, однако при $|\mathbf{p}_e| \geq 8\hbar/\lambda_e$ наблюдается «хвост», который становится всё более выраженным с ростом Γ . Например, при $\Gamma = 1.2$ вероятность электрона иметь импульс $|\mathbf{p}_e| = 10\hbar/\lambda_e$ в пять раз превышает таковую в идеальном газе. В то же время протоны остаются классическими и распределены по Максвеллу. По-видимому, «хвост» электронного распределения связан с образованием связанных состояний, поскольку в этом случае объём, эффективно доступный электронам, существенно уменьшается, приводя к росту неопределённости в импульсе.

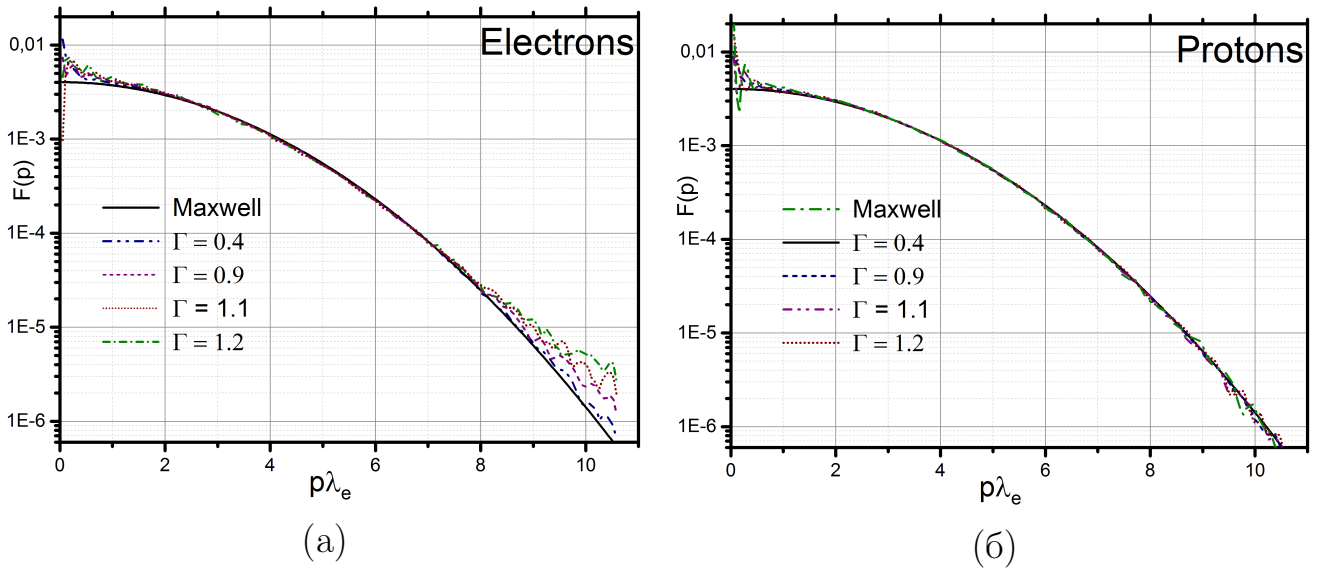


Рисунок 4.2 — Функции распределения по импульсам электронов (а) и протонов (б) в водородной плазме при $\Gamma = 0.4, 0.9, 1.1, 1.2$ и $\chi_e = 0.3$. Сплошные линии — распределение Ферми, пунктирные линии — LARIMC.

На Рис. 4.3(а) представлены функции распределения по импульсам в вырожденной электрон-дырочной плазме при $\chi_e = 4$, $\Gamma = 2$ и отношении масс $m_h/m_e = 2$, рассчитанные методом LARIMC. Электронная функция распределения совпадает с распределением Ферми в четырёх порядках, однако при больших импульсах наблюдается «хвост», в результате чего доля электронов с $|\mathbf{p}_e| \geq 15\hbar/\lambda_e$ на порядок превышает таковую в идеальном газе. В «переходной» области $12\hbar/\lambda_e \leq |\mathbf{p}_e| \leq 13\hbar/\lambda_e$ она может быть аппроксимирована суммой распределения Ферми и степенной функции a/p^8 , а при $|\mathbf{p}_e| \geq 13\hbar/\lambda_e$ — суммой распределения Ферми и функции $a/p^8 e^{-bp^2}$. Качественно эти аппроксимации согласуются с аналитическими результатами, полученными для слабонеидеальной плазмы в работах [28] и [29–32]. Функция распределения дырок ведёт себя аналогично.

Наконец, на Рис. 4.3(б) представлены функции распределения, вычисленные в тех же условиях, но при большей массе дырки: $m_h/m_e = 5$. Отличие от предыдущего случая состоит в том, что «хвост» электронного распределения значительно более выражен, и отклонение от распределения Ферми появляется уже в третьем порядке. Это можно объяснить тем, что тяжёлые дырки сильнее локализованы в пространстве, в результате чего связанное состояние (кластер) оказывается более компактным и сильнее ограничивает объём, доступный элект-

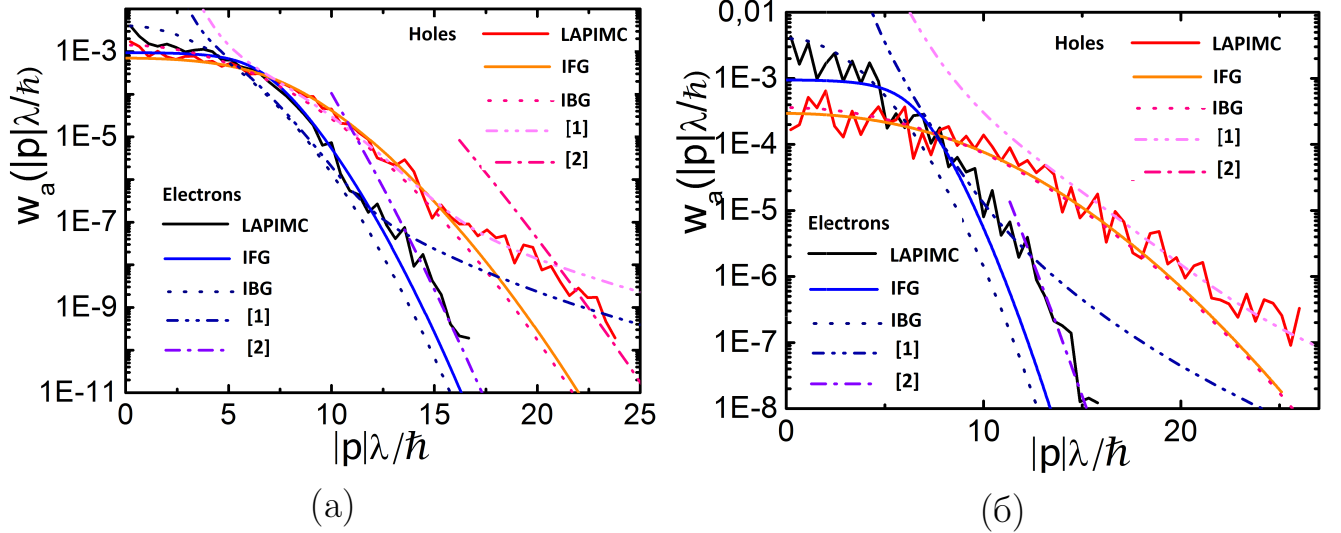


Рисунок 4.3 — Функции распределения по импульсам в электрон-дырочной плазме при $\chi_e = 4$, $\Gamma = 0.5$ и $m_h/m_e = 2$ (а), $m_h/m_e = 5$ (б). IFG — распределение Ферми, IBG — распределение Максвелла, [1] — аппроксимация $\text{IFG} + a/p^8$, [2] — аппроксимация $\text{IFG} + a/p^8 e^{-bp^2}$.

трону. Заметим, что в водородной плазме это проявляется особенно сильно, поскольку протоны оказываются практически точечными.

4.3 Внутренняя энергия и давление

В данном разделе представлены результаты расчёта внутренней энергии и давления в водородной плазме, выполненные методом SMPIMC. Исследованная область состояний $0.8 \leq \Gamma \leq 2.0$, $0.3 \leq \chi_e \leq 5.0$ соответствует сильно-неидеальной, умеренно вырожденной плазме с большой степенью ионизации. Полная внутренняя энергия рассчитывалась как сумма средней кинетической и потенциальной энергий: $E = \langle \hat{K} \rangle + \langle \hat{U} \rangle$. Давление вычислялось через среднюю кинетическую энергию и вириал сил [10]:

$$p = \frac{2}{3V} \langle \hat{K} \rangle + \frac{1}{3V} \sum_{a \neq b} \langle (\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_b) \mathbf{F}_{ab} \rangle, \quad (4.3)$$

где F_{ab} — сила кулоновского взаимодействия между частицами a и b . Согласно результатам раздела 4.2, электроны с большой точностью подчиняются распре-

делением Ферми, в то время как протоны являются максвелловскими. Поэтому средние кинетические энергии электронов и протонов с большой точностью равны соответствующим энергиям в идеальном газе.

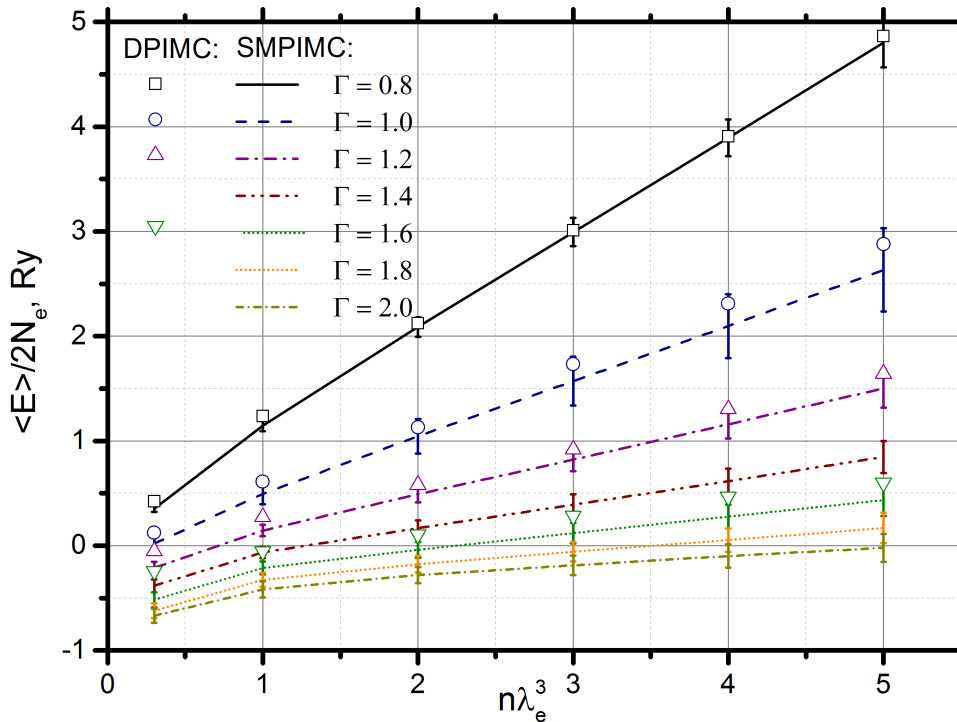


Рисунок 4.4 — Полная энергия в водородной плазме при различных Γ и χ_e . Сплошные линии — SMPIMC. Символы — DPIMC [23].

На Рис. 4.4 показана полная внутренняя энергия, приходящаяся на одну частицу в водородной плазме, при различных Γ и χ_e . Во-первых, внутренняя энергия уменьшается при увеличении Γ , так как усиливается притяжение между электронами и протонами. Во-вторых, с ростом вырождения внутренняя энергия увеличивается, так как обменное взаимодействие усиливается, в то время как кулоновское ослабевает. В-третьих, при существенном вырождении E является практически линейной функцией χ_e , однако при слабом вырождении эта зависимость более резкая, что связано с образованием связанных состояний в данной области состояний. К сожалению, ошибка метода SMPIMC при этом резко возрастает, что не позволяет продвинуться в область меньших вырождений. Для сравнения на рисунке также приведены результаты расчёта полной внутренней энергии методом DPIMC [23], в пределах статистических ошибок согласующиеся с расчётами SMPIMC.

На Рис. 4.5 показано давление в водородной плазме, умноженное на объём и отнесённое к одной частице при различных Γ и χ_e . Как и внутренняя энергия,

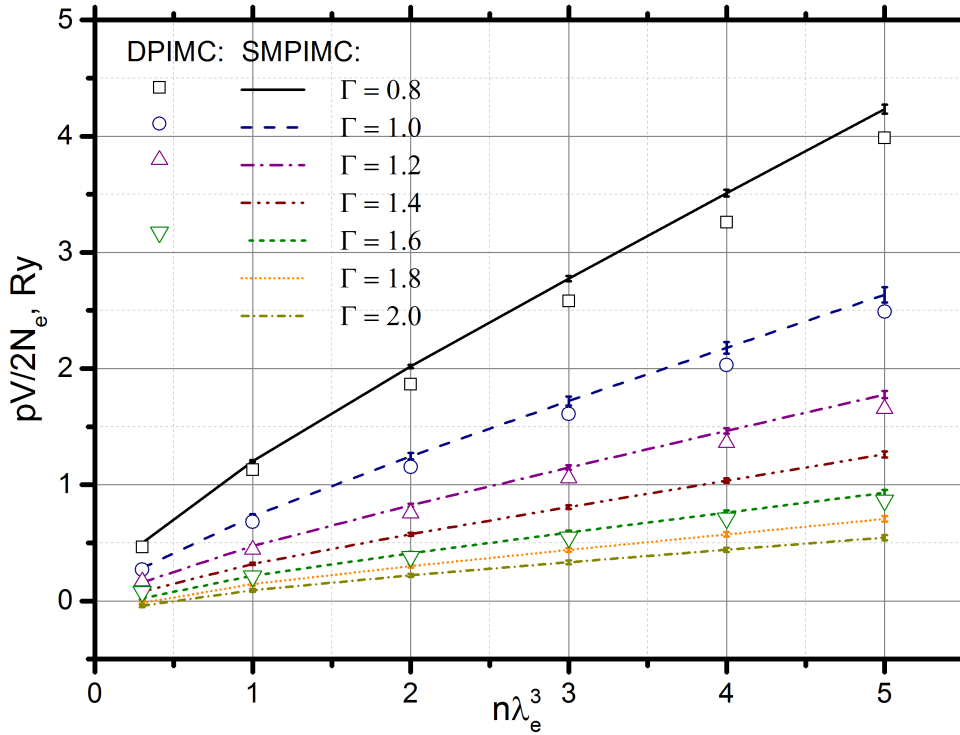


Рисунок 4.5 — Давление в водородной плазме при различных Γ и χ_e . Сплошные линии — SMPIMC. Символы — DPIMC [23].

давление уменьшается при увеличении Γ из-за притяжения между электронами и протонами и возрастает при увеличении χ_e из-за обменного взаимодействия. При существенном вырождении pV является почти линейной функцией χ_e , а при слабом вырождении эта зависимость более резкая из-за возникновения связанных состояний. Для сравнения на рисунке также приведены результаты расчёта давления методом DPIMC [23], причём результаты SMPIMC несколько превышают результаты DPIMC, особенно при больших Γ .

Наконец, вычисленные значения полной внутренней энергии и давления представлены в Табл. 3 и 4 вместе со статистическими ошибками метода Монте Карло. Отметим, что отрицательное значение давления, полученное при $\Gamma = 2.0$ и $\chi_e = 0.8$ объясняется, скорее всего, погрешностью метода. Результаты, собранные в данных таблицах, подтверждают и расширяют результаты, полученные методом DPIMC в работе [23] и показанные на Рис. 4.4 и 4.5.

Таблица 3 — Верхнее число в ячейке — полная энергия, отнесённая к одной частице E/N . Нижнее — давление, умноженное на объём, отнесённое к одной частице pV/N .

χ_e	$\Gamma = 0.8$	$\Gamma = 1.0$	$\Gamma = 1.2$	$\Gamma = 1.4$
0.8	0.35 ± 0.03	0.20 ± 0.08	-0.21 ± 0.05	-0.38 ± 0.06
	0.50 ± 0.01	0.29 ± 0.01	0.16 ± 0.01	0.08 ± 0.01
1.0	1.15 ± 0.05	0.50 ± 0.10	0.14 ± 0.05	-0.06 ± 0.06
	1.20 ± 0.01	0.73 ± 0.02	0.47 ± 0.01	0.32 ± 0.01
2.0	2.09 ± 0.09	1.05 ± 0.17	0.49 ± 0.08	0.17 ± 0.08
	2.02 ± 0.02	1.25 ± 0.03	0.82 ± 0.01	0.57 ± 0.01
3.0	2.99 ± 0.14	1.52 ± 0.23	0.82 ± 0.11	0.39 ± 0.10
	2.77 ± 0.02	1.72 ± 0.04	1.15 ± 0.2	0.81 ± 0.02
4.0	3.89 ± 0.18	2.10 ± 0.31	1.16 ± 0.14	0.62 ± 0.12
	3.51 ± 0.03	2.18 ± 0.05	1.46 ± 0.02	1.04 ± 0.02
5.0	4.80 ± 0.24	2.63 ± 0.40	1.50 ± 0.18	0.85 ± 0.15
	4.23 ± 0.04	2.64 ± 0.07	1.78 ± 0.03	1.26 ± 0.03

Таблица 4 — Верхнее число в ячейке — полная энергия, отнесённая к одной частице E/N . Нижнее — давление, умноженное на объём, отнесённое к одной частице pV/N .

χ_e	$\Gamma = 1.6$	$\Gamma = 1.8$	$\Gamma = 2.0$
0.8	-0.52 ± 0.07	-0.62 ± 0.07	-0.67 ± 0.07
	0.02 ± 0.01	-0.02 ± 0.01	-0.04 ± 0.01
1.0	-0.21 ± 0.06	-0.33 ± 0.07	-0.42 ± 0.08
	0.22 ± 0.01	0.15 ± 0.01	0.09 ± 0.01
2.0	-0.04 ± 0.08	-0.17 ± 0.08	-0.28 ± 0.08
	0.41 ± 0.01	0.30 ± 0.01	0.22 ± 0.01
3.0	0.12 ± 0.10	-0.06 ± 0.09	-0.19 ± 0.09
	0.59 ± 0.02	0.44 ± 0.02	0.33 ± 0.02
4.0	0.28 ± 0.11	0.05 ± 0.11	-0.10 ± 0.11
	0.76 ± 0.02	0.57 ± 0.02	0.44 ± 0.02
5.0	0.44 ± 0.15	0.17 ± 0.15	-0.02 ± 0.13
	0.93 ± 0.03	0.71 ± 0.02	0.55 ± 0.02

4.4 Парные корреляционные функции

В данном разделе рассматриваются парные корреляционные функции в сильнонеидеальной водородной плазме, рассчитанные методом SMPIMC. Они определяют вероятность обнаружить частицы сортов a и b на расстоянии r друг от друга:

$$g_{ab}(r) = \frac{C_{ab}}{Z} \sum_{\sigma} \int_V dq \delta(r_{1,a} - q_{1,a}) \delta(r_{2,b} - q_{2,b}) \rho(q, \sigma; \beta), \quad (4.4)$$

где Z — статистическая сумма, $\rho(q, \sigma; \beta)$ — функция распределения по координатам, а C_{ab} — нормировочный множитель, равный $N_e!(N_e - 1)!$ для g_{ee} , $N_p!(N_p - 1)!$ для g_{pp} и $N_e!N_p!$ для g_{ep} соответственно. Если частицы не взаимодействуют, то соответствующие корреляционные функции тождественно равны единице. Неравенство $g_{ab}(r) > 1$ говорит о преимущественном притяжении, $g_{ab}(r) < 1$ — о преимущественном отталкивании частиц на данном расстоянии.

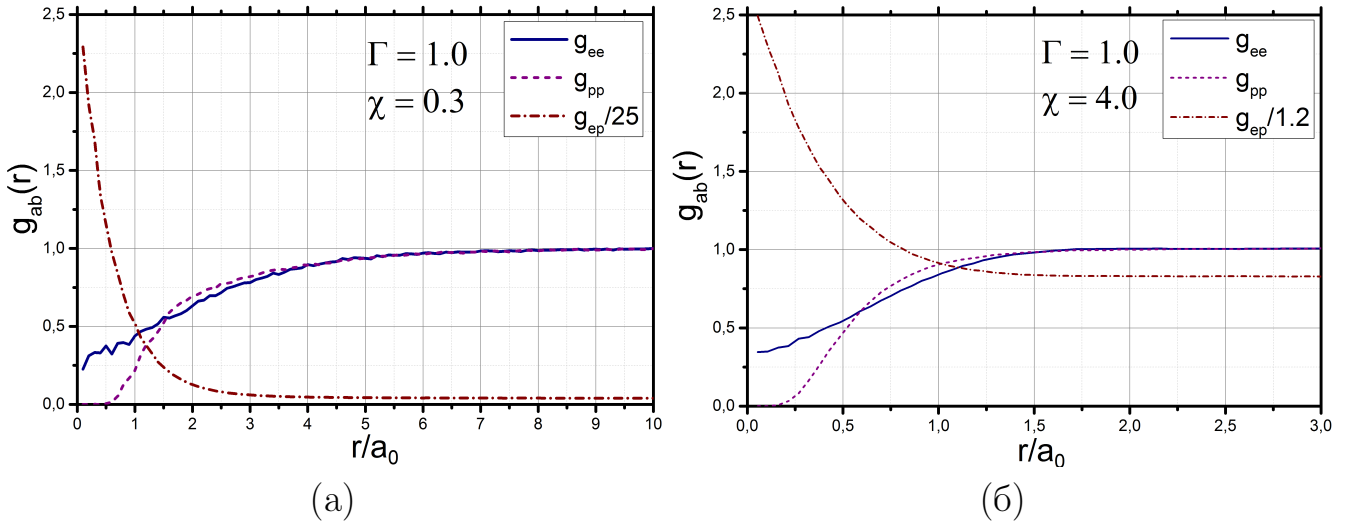


Рисунок 4.6 — Парные корреляционные функции в водородной плазме при $\Gamma = 1.0$, $\chi_e = 0.3$ (а) и $\Gamma = 1.0$, $\chi_e = 4.0$ (б).

На Рис. 4.6(а) представлены парные корреляционные функции в слабо-вырожденной водородной плазме при $\Gamma = 1.0$ и $\chi_e = 0.3$. Корреляционная функция g_{ep} резко возрастает на малых расстояниях из-за кулоновского притяжения; для наглядности её масштаб был уменьшен в 25 раз. В то же время корреляционные функции g_{ee} и g_{pp} спадают при $r \leq 7a_0$ из-за кулоновского и обменного отталкивания. Заметим, что g_{ee} , в отличие от g_{pp} , не обращается в

нуль на малых расстояниях благодаря квантовому туннелированию электронов с противоположными спинами.

На Рис. 4.6(б) представлены парные корреляционные функции в водородной плазме при том же значении Γ , но при значительно большем вырождении $\chi_e = 4.0$. Качественно характер пространственных корреляций между частицами не изменился. Однако теперь вероятность сближения электрона и протона существенно ниже из-за нелокальности электронов, чей характерный размер $\lambda_e \approx 2.5a_0$ превосходит область корреляций.

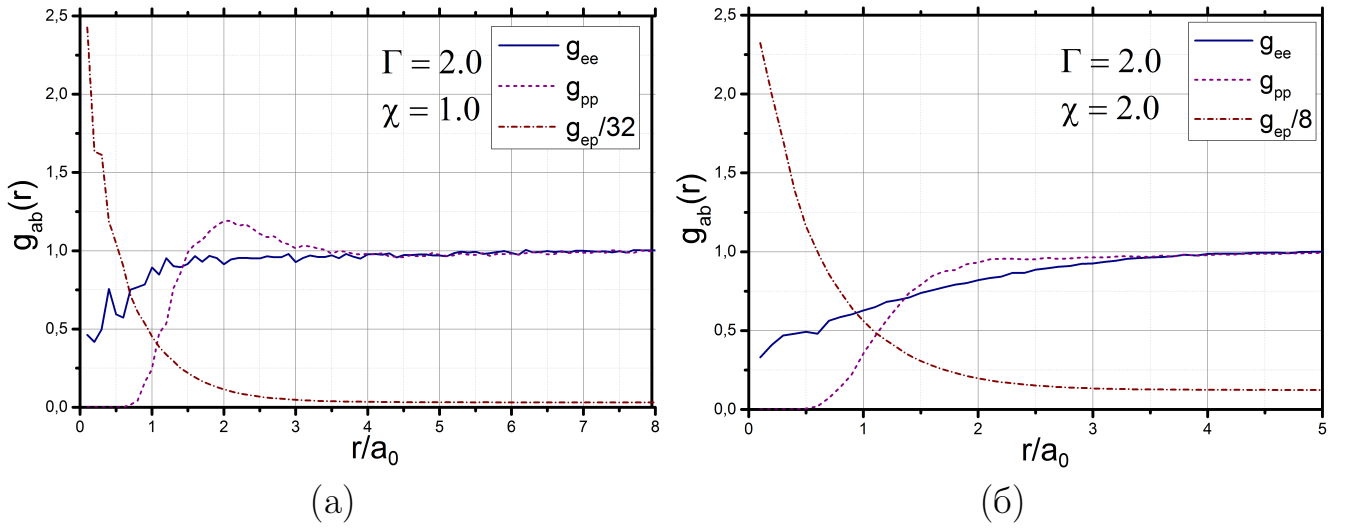


Рисунок 4.7 — Парные корреляционные функции в водородной плазме при $\Gamma = 2.0$, $\chi_e = 1.0$ (а) и $\Gamma = 2.0$, $\chi_e = 2.0$ (б).

На Рис. 4.7(а) представлены парные корреляционные функции в водородной плазме при существенно большем параметре неидеальности $\Gamma = 2.0$ и $\chi_e = 1.0$. Несмотря на вырождение, функция g_{ep} на малых расстояниях оказывается существенно больше, чем в случае $\Gamma = 1.0$, $\chi_e = 0.3$. Кроме того, функция g_{pp} имеет максимум при $r \approx 2a_0$, что свидетельствует об образовании связанных состояний протон-протон, а именно — молекулярных ионов H_2^+ [56].

На Рис. 4.7(б) представлены парные корреляционные функции при том же значении Γ , однако при большем вырождении $\chi_e = 2.0$. Видно, что вероятность сближения протонов и электронов существенно уменьшилась из-за большей нелокальности последних. Кроме того, отсутствуют признаки связанных состояний «протон-протон»: функция g_{pp} монотонно возрастает от нуля до единицы.

Свидетельством того, что в плазме присутствуют неионизованные атомы водорода, является локальный максимум функции $g_{ep}r^2$ на расстоянии поряд-

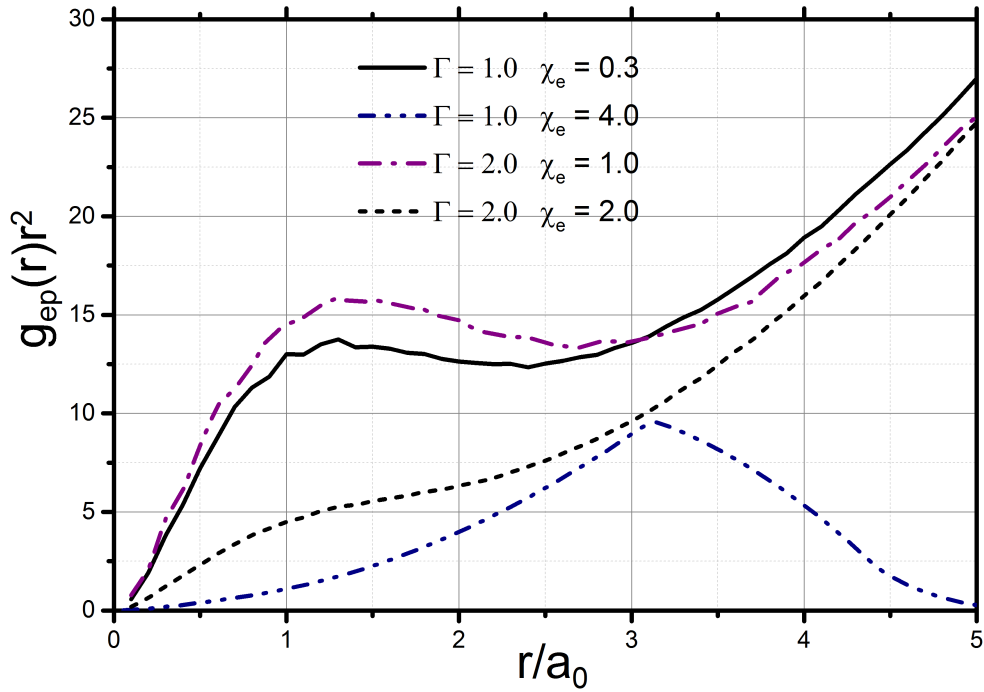


Рисунок 4.8 — Функция $g_{ep}r^2$ при различных значениях Γ и χ_e . Все графики приведены к одному масштабу.

ка одного боровского радиуса. Это непосредственно следует из рассмотрения волновых функций атома водорода и их вероятностной интерпретации [56]. На Рис. 4.8 показаны функции $g_{ap}r^2$ для всех условий, рассмотренных выше. В случаях $\Gamma = 1.0$, $\chi_e = 0.3$ и $\Gamma = 2.0$, $\chi_e = 1.0$ наблюдается отчётливый пик при $1.0 \leq r \leq 2.5$, что свидетельствует о наличии в плазме атомов. Однако при большем вырождении он существенно уменьшается ($\Gamma = 2.0$, $\chi_e = 2.0$), пока не исчезнет вовсе ($\Gamma = 1.0$, $\chi_e = 4.0$). Дело в том, что при увеличении плотности плазмы волновые функции электронов, находящихся в соседних атомах, начинают перекрываться, в результате чего электрон получает возможность покинуть атом благодаря квантовому туннелированию. Этот эффект известен как эффект Мотта, или ионизация давлением.

Отметим, что убывание функции $g_{ep}r^2$ в случае $\Gamma = 1.0$, $\chi_e = 4.0$ при $r \geq 3$ является граничным эффектом и не содержит физического смысла.

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем.

1. Получено представление функции Вигнера для (N, V, T) -ансамбля в виде преобразования Фурье от матрицы плотности, выраженной в виде интеграла по траекториям.
2. Получены явные выражения для функции Вигнера в виде интеграла по траекториям в «линейном» и «гармоническом» приближениях и исследованы их границы применимости.
3. Предложен эффективный псевдопотенциал в фазовом пространстве, учитывающий обменное взаимодействие бозонов.
4. Предложен эффективный псевдопотенциал в фазовом пространстве, явно реализующий принцип Паули и описывающий обменное взаимодействие при $\chi \leq 10$.
5. Разработаны, реализованы и отлажены численные методы SMPIMC, LAPIMC и NAPIMC, позволяющие рассчитывать средние значения квантовых операторов, парные корреляционные функции, а также функции распределения по импульсам для сильнонеидеальных квантовых систем фермионов.
6. Исследованы функции распределения по импульсам, полная внутренняя энергия и парные корреляционные функции в сильнонеидеальной водородной плазме при слабом и умеренном вырождении.
7. Показано, что распределения по импульсам электронов в сильнонеидеальной водородной плазме с большой точностью описываются распределениям Ферми. Однако асимптотическое поведение электронного распределения в водородной плазме отличается от фермиевского и проявляется в виде медленно затухающего «хвоста», связанного с образованием связанных состояний.
8. Показано, что функции распределения по импульсам электронов и дырок в электрон-дырочной плазме отличаются от соответствующих распределений Ферми при отношении m_h/m_e порядка нескольких единиц асимптотическим поведением, аппроксимируемым функциями a/p^8 и $a/p^8 e^{-bp^2}$.

Результаты работы опубликованы в 9 статьях в рецензируемых журналах [1–9], а также в трудах и тезисах конференций, указанных во введении.

Список сокращений и условных обозначений

a, b, \dots - номера частиц

i, j, \dots - пространственные координаты

σ - проекция спина частицы

$\delta_{n,m}$ - единица при $n = m$ и нуль в остальных случаях.

e — элементарный электрический заряд

m_e - масса электрона

m_h - масса протона или дырки

a_0 - боровский радиус

N_a - энергия Хартри

β - величина, обратная к температуре

χ - параметр вырождения системы

Γ - параметр неидеальности системы

λ - средняя (тепловая) длина волны Де Бройля

$W(p,q)$ - функция Вигнера

\bar{x} - совокупность переменных, задающих состояние системы

PIMC - Path Integral Monte Carlo

SMPIMC - Single Momentum Path Integral Monte Carlo

LAPIMC - Linear Approximation Path Integral Monte Carlo

HAPIMC - Harmonic Approximation Path Integral Monte Carlo

RPIMC - Restricted Path Integral Monte Carlo

DPIMC - Direct Path Integral Monte Carlo

PB-PIMC - Permutation Blocking Path Integral Monte Carlo

CPIMC - Configurational Path Integral Monte Carlo

КХД - квантовая хромодинамика

FFT - Fast Fourier Transform

Словарь терминов

Кинетические свойства - в этой работе термин обозначает распределение частиц по импульсам и энергиям, теплопроводность и т.п.

Кулоновская система - система, состоящая из электрически заряженных частиц, которые взаимодействуют по закону Кулона

Принцип Паули - принцип, запрещающий двум фермионам одновременно находиться в одном квантовом состоянии

Сильнонеидеальная система - система, в которой энергия взаимодействия частей сопоставима или превосходит их кинетическую энергию

Функция Вигнера - квантовый аналог функции распределения в фазовом (p, q) -пространстве

Ячейка Монте Карло - объём, в котором производится расчёт

Список литературы

1. *Larkin A., Filinov V., Fortov V.* Path Integral Representation of the Wigner Function in Canonical Ensemble // Contributions to Plasma Physics. — 2016. — Apr. — Vol. 56. — Pp. 187–196.
2. *Larkin A., Filinov V., Fortov V.* Momentum distribution functions of strongly correlated systems of particles: Wigner approach and path integrals // Journal of Physics: Conference Series. — 2016. — Nov. — Vol. 774. — P. 012146.
3. *Larkin A., Filinov V.* Phase Space Path Integral Representation for Wigner Function // Journal of Applied Mathematics and Physics. — 2017. — Jan. — Vol. 05. — Pp. 392–411.
4. *Larkin A., Filinov V., Fortov V.* SOLUTION OF THE SIGN PROBLEM IN PAIR APPROXIMATION // MATHEMATICA MONTISNIGRI. — 2017. — Vol. XXXIX.
5. *Larkin A., Filinov V.* MOMENTUM DISTRIBUTION FUNCTIONS OF WEAKLY-DEGENERATE HYDROGEN PLASMA // MATHEMATICA MONTISNIGRI. — 2017. — Vol. XL.
6. *Larkin A., Filinov V., Fortov V.* Peculiarities of momentum distribution functions of strongly correlated charged fermions // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. — 2017. — Apr. — Vol. 51.
7. *Larkin A., Filinov V., Fortov V.* Pauli blocking by effective pair pseudopotential in degenerate Fermi systems of particles // Contributions to Plasma Physics. — 2017. — Nov. — Vol. 57.
8. *Larkin A., Filinov V.* Quantum tails in the momentum distribution functions of non-ideal Fermi systems // Contributions to Plasma Physics. — 2018. — Mar. — Vol. 58. — Pp. 107–113.
9. *Filinov V., Larkin A.* ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF STRONGLY CORRELATED PLASMA MEDIA // MATHEMATICA MONTISNIGRI. — 2017. — Vol. XLI.

10. *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. — Москва : Наука, 1971. — 416 с.
11. *Wiener N.* Differential-Space // Studies in Applied Mathematics. — 1923. — Oct. — Vol. 2, 1-4. — Pp. 131–174.
12. *Feynman R. P.* Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics // Rev. Mod. Phys. — 1948. — Apr. — Vol. 20, issue 2. — Pp. 367–387. — DOI: 10.1103/RevModPhys.20.367. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.20.367>.
13. *Peskin M., Schroeder D.* An Introduction to Quantum Field Theory. — Avalon Publishing, 1995. — (Advanced book classics). — URL: <https://books.google.ru/books?id=i35LALN0GosC>.
14. *Feynman R., Hibbs A.* Quantum mechanics and path integrals. — McGraw-Hill, 1965. — (International series in pure and applied physics). — URL: <https://books.google.ru/books?id=14ApAQAAMAAJ>.
15. *Hastings W. K.* Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications // Biometrika. — 1970. — Vol. 57, no. 1. — Pp. 97–109. — DOI: 10.1093/biomet/57.1.97. — eprint: /oup/backfile/content-public/journal/biomet/57/1/10.1093_biomet_57.1.97/1/57-1-97.pdf. — URL: <http://dx.doi.org/10.1093/biomet/57.1.97>.
16. Sign problem in the numerical simulation of many-electron systems / E. Y. Loh [et al.] // Phys. Rev. B. — 1990. — May. — Vol. 41, issue 13. — Pp. 9301–9307. — DOI: 10.1103/PhysRevB.41.9301. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.41.9301>.
17. *Ceperley D. M.* Fermion nodes // Journal of Statistical Physics. — 1991. — June 1. — Vol. 63, no. 5. — Pp. 1237–1267. — DOI: 10.1007/BF01030009. — URL: <https://doi.org/10.1007/BF01030009>.
18. *Filinov V. S.* Analytical contradictions of the fixed-node density matrix // High Temperature. — 2014. — Sept. 1. — Vol. 52, no. 5. — Pp. 615–620. — DOI: 10.1134/S0018151X14040105. — URL: <https://doi.org/10.1134/S0018151X14040105>.

19. *Militzer B., Ceperley D.* Path integral Monte Carlo simulation of the low-density hydrogen plasma // Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics. — 2011. — ЯНВ. — Т. 63, № 6 II. — С. 066404/1—066404/10. — DOI: 10.1103/PhysRevE.63.066404.
20. The properties of hydrogen and helium under extreme conditions / J. M. McMahon [et al.] // Rev. Mod. Phys. — 2012. — Nov. — Vol. 84, issue 4. — Pp. 1607–1653. — DOI: 10.1103/RevModPhys.84.1607. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.84.1607>.
21. Path-Integral Monte Carlo Simulation of the Warm Dense Homogeneous Electron Gas / E. W. Brown [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2013. — Apr. — Vol. 110, issue 14. — P. 146405. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.146405. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.146405>.
22. *Imada M., Takahashi M.* Quantum Monte Carlo Simulation of a Two-Dimensional Electron System —Melting of Wigner Crystal— // Journal of the Physical Society of Japan. — 1984. — Vol. 53, no. 11. — Pp. 3770–3781. — DOI: 10.1143/JPSJ.53.3770.
23. Phase transition in strongly degenerate hydrogen plasma / V. S. Filinov [et al.] // Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters. — 2001. — Oct. 1. — Vol. 74, no. 7. — Pp. 384–387. — DOI: 10.1134/1.1427127. — URL: <https://doi.org/10.1134/1.1427127>.
24. Thermodynamic Properties and Plasma Phase Transition in dense Hydrogen / V. Filinov [et al.] // Contributions to Plasma Physics. — 2004. — Sept. — Vol. 44. — Pp. 388–394.
25. Correlation effects in partially ionized mass asymmetric electron-hole plasmas / V. Filinov [et al.] // Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics. — 2007. — Apr. — Vol. 75. — P. 036401.
26. Permutation blocking path integral Monte Carlo: A highly efficient approach to the simulation of strongly degenerate non-ideal fermions / T. Dornheim [et al.] // New Journal of Physics. — 2015. — Apr. — Vol. 17.

27. Ab initio quantum Monte Carlo simulations of the uniform electron gas without fixed nodes / S. Groth [et al.] // *Phys. Rev. B.* — 2016. — Feb. — Vol. 93, issue 8. — P. 085102. — DOI: 10.1103/PhysRevB.93.085102. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.085102>.
28. *Galitskii V., Yakimets V.* Particle relaxation in a Maxwell gas // *JETP.* — 1966. — Vol. 51. — P. 957. — DOI: 10.1088/0305-4470/36/22/317.
29. Quantum corrections to the distribution function of particles over momentum in dense media / A. Starostin [et al.] // *Phys. A.* — 2002. — Vol. 305. — Pp. 287–296.
30. *Eletskii A., Starostin A., Taran M.* Quantum corrections to the equilibrium rate constants of inelastic processes // *Usp. Fiz. Nauk.* — 2005. — Vol. 48. — Pp. 281–294.
31. Quantum effects in the kinetics of the initiation of detonation condensation waves / A. Emelianov [et al.] // *JETP Lett.* — 2011. — Vol. 94. — Pp. 530–534.
32. Calculation of thermal ignition time of hydrogen–air mixtures taking into account quantum corrections / I. Kochetov [et al.] // *High Temperature.* — 2016. — Vol. 54. — Pp. 563–568.
33. *Schoof T., Groth S., Bonitz M.* Introduction to Configuration Path Integral Monte Carlo // *Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics.* — 2014. — Vol. 82. — Pp. 153–194. — DOI: 10.1007/978-3-319-05437-7_5.
34. Ab initio quantum Monte Carlo simulations of the uniform electron gas without fixed nodes: The unpolarized case / T. Dornheim [et al.] // *Phys. Rev. B.* — 2016. — May. — Vol. 93, issue 20. — P. 205134. — DOI: 10.1103/PhysRevB.93.205134. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.205134>.
35. *Wigner E.* On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium // *Phys. Rev.* — 1932. — June. — Vol. 40, issue 5. — Pp. 749–759. — DOI: 10.1103/PhysRev.40.749. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.40.749>.

36. *Tatarskii V. I.* The Wigner representation of quantum mechanics // Soviet Physics Uspekhi. — 1983. — Vol. 26, no. 4. — P. 311. — URL: <http://stacks.iop.org/0038-5670/26/i=4/a=R02>.
37. *L. Kamskii V., Medvedev Y., Filinov V.* The method of stochastic dynamics in the Wigner formulation of quantum mechanics // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 1996. — Feb. — Vol. 36. — Pp. 923–934.
38. *Zavialov O. I., Malokostov A. M.* Wigner function for free relativistic particles // Theoretical and Mathematical Physics. — 1999. — Apr. 1. — Vol. 119, no. 1. — Pp. 448–453. — DOI: 10.1007/BF02557343. — URL: <https://doi.org/10.1007/BF02557343>.
39. *Larkin A., Filinov V.* Wigner dynamics of quantum semi-relativistic oscillator // Physics Letters A. — 2013. — Feb. — Vol. 377.
40. *Larkin A., Filinov V.* Wigner’s pseudo-particle relativistic dynamics in external potential field // Physics Letters A. — 2014. — May. — Vol. 378.
41. A Benchmark Study of the Wigner Monte Carlo Method / J. Michel Sellier [et al.] // Monte Carlo Methods and Applications. — 2014. — Mar. — Vol. 20.
42. *Sellier J., Dimov I.* On the simulation of indistinguishable fermions in the many-body Wigner formalism // Journal of Computational Physics. — 2015. — Jan. — Vol. 280. — Pp. 287–294.
43. Color path-integral Monte Carlo simulations of quark-gluon plasma / V. Filinov [et al.] // Physics Letters A. — 2012. — Feb. — Vol. 376. — Pp. 1096–1101.
44. Color path-integral Monte-Carlo simulations of quark-gluon plasma: Thermodynamic and transport properties / V. S. Filinov [et al.] // Phys. Rev. C. — 2013. — Mar. — Vol. 87, issue 3. — P. 035207. — DOI: 10.1103/PhysRevC.87.035207. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.87.035207>.

45. Color path integral equation of state of the quark–gluon plasma at nonzero chemical potential / V. S. Filinov [et al.] // Plasma Physics and Controlled Fusion. — 2015. — Vol. 57, no. 4. — P. 044004. — URL: <http://stacks.iop.org/0741-3335/57/i=4/a=044004>.
46. *Hakim R.* Introduction to relativistic statistical mechanics: Classical and quantum. — Jan. 2011. — 538 pp.
47. *Хуанг К.* Статистическая механика. — Москва : Мир, 1966. — 521 с.
48. *Zamalin V., Norman G.* The Monte-Carlo Method in Feynman's Formulation of Quantum Statistics // USSR Comp. Math. and Math. Phys. — 1973. — Vol. 13, issue 2. — Pp. 169–173.
49. *Newman M., Barkema G.* Monte Carlo methods in statistical physics. — Oxford : Clarendon Press, 1999. — URL: <http://adsabs.harvard.edu/abs/1999mcms.book.....N>.
50. *Roberts G. O., Gelman A., Gilks W. R.* Weak convergence and optimal scaling of random walk Metropolis algorithms // Ann. Appl. Probab. — 1997. — Feb. — Vol. 7, no. 1. — Pp. 110–120. — DOI: 10.1214/aoap/1034625254. — URL: <https://doi.org/10.1214/aoap/1034625254>.
51. Temperature-dependent quantum pair potentials and their application to dense partially ionized hydrogen plasmas / A. V. Filinov [et al.] // Phys. Rev. E. — 2004. — Oct. — Vol. 70, issue 4. — P. 046411. — DOI: 10.1103/PhysRevE.70.046411. — URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.70.046411>.
52. *Research W.* Mathematica 9.0. — Champaign, Illinois, 2015.
53. Energies and wave functions for a soft-core Coulomb potential / R. Hall [et al.] // Physical Review A. — 2009. — Aug. — Vol. 80.
54. *Palma G., Raff U.* The one-dimensional hydrogen atom revisited // Canadian Journal of Physics. — 2006. — Sept. — Vol. 84, no. 9. — Pp. 787–800. — DOI: 10.1139/P06-072.
55. *Ландау Л., Лифшиц Е.* Статистическая Физика I. — Москва : Физматлит, 2010. — 616 с.
56. *Ebeling W., Fortov V., Filinov V.* Quantum Statistics of Dense Gases and Nonideal Plasmas. — Jan. 2017. — ISBN 978-3-319-66636-5.

