

На правах рукописи

**Ларкин Александр Сергеевич**

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

01.04.08 — «Физика плазмы»

**Автореферат**  
диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Москва — 2018

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки  
Объединённом институте высоких температур Российской академии наук

Научный руководитель: доктор физико-математических наук  
**Филинов Владимир Сергеевич**

Официальные оппоненты: **Петрушевич Юрий Васильевич**,  
доктор физико-математических наук,  
Государственный научный центр Российской Федера-  
ции Троицкий институт инновационных и термоядерных  
исследований,  
начальник лаборатории

**Петров Юрий Васильевич**,  
доктор физико-математических наук,  
Федеральное государственное бюджетное учреждение  
науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау  
Российской академии наук,  
старший научный сотрудник

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение  
науки Институт спектроскопии Российской академии на-  
ук

Защита состоится «17» октября 2018 г. в 11 ч. 00 мин. на заседании диссертационного  
совета Д 002.110.02 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения  
науки Объединённого института высоких температур Российской академии наук по ад-  
ресу: 125412, Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, корпус Л-3, экспозиционный зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИВТ РАН или на сайте [https://jiht.ru/science/dissert-council/diss\\_texts/](https://jiht.ru/science/dissert-council/diss_texts/).

Автореферат разослан «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2018 г.

Отзывы на автореферат просьба присылать по адресу: 125412, Москва, ул. Ижорская,  
д. 13, стр. 2, ОИВТ РАН.

И.о. учёного секретаря  
диссертационного совета  
Д 002.110.02, д. ф.-м. н.

Л.М. Василяк

© Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединённый инсти-  
тут высоких температур Российской академии наук, 2018.

## Общая характеристика работы

**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 исследовании 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 PIMC). Стандартные подходы используют представление статистической суммы и термодинамических величин в виде интегралов по путям в координатном пространстве. Однако они 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 PIMC 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, 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 и умеренного вырождения 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.
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.
6. Впервые исследовано влияние квантовых эффектов на функции распределения по импульсам электронов и дырок в модели электрон-дырочной плазмы при изменении отношения массы дырки к массе электрона.

#### **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, CPIMC, PB-PIMC) в условиях слабого и умеренного вырождения.

4. В работе детально описаны численные методы SMPIMC, LAPIMC и NAPIMC. 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 параметрах неидеальности  $0.4 \leq \Gamma \leq 2.0$  и вырождения  $0.3 \leq \chi_e \leq 5.0$ . Эти данные необходимы для построения уравнения состояния 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 могут быть использованы для расчёта пороговых энергий и констант скоростей реакций в плазменных средах, что необходимо при изучении процессов горения, детонации и ядерного синтеза при высоких давлениях.

**Достоверность** 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 непосредственное участие в разработке теоретического формализма и численных методов, описанных в работе. Программный код для методов SMPIMC и NAPIMC был написан автором лично. Расчёты этими методами были проведены и обработаны автором лично. Расчёты методом LAPIMC были обработаны при непосредственном участии автора. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причём вклад диссертанта был определяющим.

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

**Структура и объём работы.** Диссертация состоит из введения, обзора литературы, четырех глав и заключения. Полный объем диссертации составляет **122** страницы текста с **32** рисунками и 4 таблицами. Список литературы содержит **56** наименований.

## Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, формулируется цель, задачи и основные положения, выносимые на защиту. Отражается новизна, научная и практическая значимость работы. Приводится список конференций и публикаций, где докладывались основные результаты работы.

**Обзор литературы** состоит из трёх разделов.

В первом разделе рассматривается общая задача расчёта термодинамических свойств квантового  $(N, V, T)$ -ансамбля. Отмечается ряд трудностей, связанных с некоммутативностью операторов кинетической и потенциальной энергии. Их можно преодолеть, представляя статистическую сумму  $Z(N, V, T)$  и термодинамические величины в виде интегралов по траекториям [10]. При этом каждая частица описывается непрерывной траекторией  $q(t)$  и, таким образом, делокализована в области порядка «тепловой» длины волны Де Бройля  $\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{mkT}}$ .

Во втором разделе рассматриваются численные методы PIMC (Path Integral Monte Carlo), основанные на интегралах по траекториям. Кратко излагается общая идея этих методов. Обсуждается «фермионная проблема знака», возникающая при численном моделировании вырожденных фермионных систем из-за быстрых осцилляций подынтегрального выражения. Дается краткий обзор существующих методов PIMC для расчёта термодинамических свойств неидеальных фермионных систем и рассматриваются их возможности и недостатки.

В третьем разделе кратко рассматривается вигнеровская формулировка квантовой механики. Её основным преимуществом является непосредственная работа в фазовом  $(p, q)$ -пространстве и возможность прямого расчёта функций распределения по импульсам и координатами, а также средних значений операторов. Дается общее определение функции Вигнера и раскрывается её смысл как квантового аналога классического распределения в фазовом пространстве. Приводится краткий обзор приложений вигнеровского формализма к задачам квантовой механики и статистики.

В **первой главе** рассматривается формализм, являющийся теоретическим основанием для разрабатываемых численных методов. Глава состоит из пяти разделов.

В **разделе 1.1** приводятся необходимые сведения из квантовой статистики [11; 12]. Рассматривается наиболее общий квантовый ансамбль и дается определение функции Вигнера  $W(p, q)$  для него:

$$W(p, q) = \int d\xi e^{i(p\xi)/\hbar} \rho(q - \xi/2, q + \xi/2), \quad (1)$$

где  $\rho(q, q')$  — координатная матрица плотности. Среднее значение оператора  $\hat{A}$  может быть вычислено по формуле:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int dpdq W(p, q) A(p, q), \quad (2)$$

где функция Вигнера  $W(p, q)$  является квантовым аналогом классической функции распределения в фазовом пространстве, а символ Вейля оператора  $A(p, q)$  — аналог усредняемой физической величины:

$$A(p, q) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^S} \int ds e^{-i(sq)/\hbar} \langle p - s/2 | \hat{A} | p + s/2 \rangle. \quad (3)$$

Следует отметить, что функцию Вигнера нельзя интерпретировать как вероятность нахождения системы в данной точке фазового пространства, поскольку она может принимать отрицательные значения.

В **разделе 1.2** выводится представление функции Вигнера  $(N, V, T)$ -ансамбля в виде интеграла по траекториям для фермионной или бозонной системы. Для этого статистический оператор  $\hat{\rho} = e^{-\beta\hat{H}}$ , где  $\beta = 1/kT$ , представляется в виде произведения  $M$  «высокотемпературных» операторов:  $e^{-\frac{\beta}{M}\hat{H}} \dots e^{-\frac{\beta}{M}\hat{H}}$ . Затем между этими операторами вставляются полные наборы состояний с определёнными координатами:  $1 = \int dq |q\rangle \langle q|$ . Наконец, совершается переход к пределу  $M \rightarrow \infty$ . В результате получается представление функции Вигнера для  $(N, V, T)$ -ансамбля в виде преобразования



Фурье от интеграла по траекториям:

$$\begin{aligned}
W(p,q) = & Z(N,V,T)^{-1} \sum_{\sigma} \sum_{P_{\sigma}} (\pm 1)^{P_{\sigma}} \int d\xi \int_{z(0)=z(1)=0} Dz(\tau) \exp \left\{ \sum_{a,\sigma} i \rho_{a,\sigma} \xi_{a,\sigma} - \right. \\
& - \sum_{a,\sigma} \pi [P_{\sigma}(\mathbf{q}_{a,\sigma}/\lambda + \xi_{a,\sigma}/2) - (\mathbf{q}_{a,\sigma}/\lambda - \xi_{a,\sigma}/2)]^2 - \sum_{a,\sigma} \int_0^1 d\tau \pi \mathbf{z}_{a,\sigma}^2(\tau) - \\
& \left. - \int_0^1 d\tau \beta U(q(\tau)) \right\}. \tag{4}
\end{aligned}$$

Суммирование  $\sum_{a,\sigma}$  ведётся по всем частицам с данным значением проекции спина  $\sigma$ .  $P_{\sigma}$  обозначает перестановку частиц с одинаковым  $\sigma$ . Символ  $\rho_a$  обозначает комбинацию импульса и тепловой длины волны  $\mathbf{p}_a \lambda / \hbar$ . Выражение (4) само по себе непригодно для расчётов на ЭВМ. Причина состоит в том, что  $3N$ -мерное Фурье в общем случае невозможно выполнить ни аналитически из-за члена с потенциальным взаимодействием, ни численно из-за большой размерности. В работе предлагается два подхода, позволяющих упростить эту формулу и сделать её пригодной для практического использования.

В разделе 1.3 описывается «одноимпульсный» подход, позволяющий свести  $3N$ -мерное преобразование Фурье в формуле (4) к трёхмерному или одномерному. Для этого рассматривается широкий класс операторов, распадающихся на сумму одночастичных операторов, зависящих от импульсов, и произвольной координатной части:

$$\hat{T} = \sum_{a=1}^N a(\mathbf{p}_a) + B(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N). \tag{5}$$

Многие важные в термодинамике величины принадлежат к этому классу: кинетическая и потенциальная энергии, вириал сил и т.д. Для вычисления средних значений таких операторов, а также функций распределения по импульсам и координатам можно использовать «одноимпульсную» функцию Вигнера:

$$W_{SM}(\mathbf{p}; \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N) = \int d\mathbf{p}_2, \dots, d\mathbf{p}_N W(p,q), \quad \mathbf{p} = \mathbf{p}_1. \tag{6}$$

Функция  $W_{SM}$  получается в результате трёхмерного преобразования Фурье от «одноимпульсной» матрицы плотности  $\rho_{SM}(\xi; \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N)$ , определяемой как  $\langle q - \xi/2 | e^{-\beta \hat{H}} | q + \xi/2 \rangle$  при  $\xi = \xi_1, \xi_2 = \dots = \xi_N = 0$ . Если интересоваться физическими величинами и распределениями, зависящими от абсолютных значений импульсов, можно упростить задачу ещё больше, сведя её к одномерному синусному преобразованию. В результате «одноимпульсная» функция Вигнера может быть получена с помощью

трёхмерного или одномерного преобразования Фурье от интеграла по траекториям:

$$\begin{aligned} \rho_{SM}(\xi; q) &= \int_{z(0)=z(1)=0} Dz(\tau) \left[ \prod_{\sigma} D_{\sigma}(\xi; q) \right] \times \\ &\times \exp \left\{ - \sum_{a,\sigma} \int_0^1 d\tau \pi \mathbf{z}_{a,\sigma}^2(\tau) - \int_0^1 d\tau \beta U(q(\tau)) \right\}. \end{aligned} \quad (7)$$

Обменное взаимодействие фермионов учитывается с помощью детерминантов от матриц перестановок:

$$D_{\sigma}(\xi; q) = \det \left| \exp \left\{ \frac{\pi}{\lambda^2} [(\mathbf{q}_{a,\sigma} + \xi_{a,\sigma}/2)^2 - (\mathbf{q}_{b,\sigma} - \xi_{b,\sigma}/2)^2] \right\} \right|. \quad (8)$$

Здесь  $a,\sigma$  и  $b,\sigma$  обозначают номера частиц с заданной проекцией спина, причём  $\xi_a$  и  $\xi_b$  равны нулю при  $a \neq 1$  и  $b \neq 1$  соответственно.

В разделе 1.4 описываются «линейное» и «гармоническое» приближения для функции Вигнера, основанные на разложении потенциальной энергии в ряд Тейлора по переменным  $\xi_a$ . Это позволяет свести многомерное преобразование Фурье в формуле (4) к аналитическому вычислению гауссовых интегралов. Функция Вигнера в «гармоническом» приближении:

$$\begin{aligned} W_{HA}(p, q) &= Z(\beta, V)^{-1} \int_{z(0)=z(1)=0} Dz(\tau) \det |\chi_{ai,bj}^{-1}|^{1/2} \exp \{ -\pi K - \pi P \} \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{4\pi} \rho_{a,i} \chi_{a,i;b,j}^{-1} \rho_{b,j} - \beta \sum_{a>b} \tilde{v}_{ab} + \pi J_{a,i} \chi_{a,i;b,j}^{-1} J_{b,j} \right\} \cos \left\{ \rho_{a,i} \chi_{a,i;b,j}^{-1} J_{b,j} \right\}. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь  $a$  и  $b$  обозначают номера частиц,  $i$  и  $j$  — номера координат  $(x, y, z)$ , по повторяющимся индексам выполняется суммирование. Спиновые переменные не указаны для краткости. Функционалы  $K$ ,  $P$ ,  $J$ ,  $\chi^{-1}$  зависят от траекторий  $z(\tau)$  и координат  $q$ :

$$\begin{aligned} K[z(\tau)] &= \int_0^1 d\tau \dot{z}_{a,i}(\tau) \dot{z}_{a,i}(\tau), & P[q, z(\tau)] &= \frac{\beta}{\pi} \int_0^1 d\tau U(q + \lambda z(\tau)), \\ J_{a,i}[q, z(\tau)] &= \frac{\beta \lambda}{2\pi} \int_0^1 d\tau (\tau - 1/2) \frac{\partial U(q + \lambda z(\tau))}{\partial q_{a,i}}, \\ \chi_{a,i;b,j}[q, z(\tau)] &= \delta_{a,b} \delta_{i,j} + \frac{\beta \lambda^2}{2\pi} \int_0^1 d\tau (\tau - 1/2)^2 \frac{\partial^2 U(q + \lambda z(\tau))}{\partial q_{a,i} \partial q_{b,j}}. \end{aligned} \quad (10)$$

Выражения (9), (10) допускают следующую физическую интерпретацию. Каждая частица представляется семейством траекторий  $(p, q(\tau))$  и имеет эффективный размер порядка  $\lambda$ . Функционал  $K$  определяет форму и размеры этих траекторий. Функционал  $P$  описывает потенциальное взаимодействие частиц с учётом их нелокальности. Квадратичная форма  $\rho \chi^{-1} \rho$  определяет распределение Максвелла, модифицированное за

счёт квантовых поправок от потенциального взаимодействия. Множитель с косинусом делает функцию Вигнера знакопеременной, что отражает интерференцию между различными квантовыми состояниями. Обменное взаимодействие тождественных частиц учитывается с помощью эффективных парных псевдопотенциалов  $\tilde{v}_{ab}$ , зависящих от импульсов и координат. Функция Вигнера в «линейном» приближении  $W_{LA}(p,q)$  отличается от (9) лишь заменой  $\chi$  на единичную матрицу. В разделе также обсуждается применимость «линейного» и «гармонического» приближений для описания различных систем. В частности, данный подход применим для достаточно сильно ионизованных систем, когда вклад связанных состояний (атомов, молекулярных ионов, кластеров) мал.

В разделе 1.5 выводятся эффективные псевдопотенциалы в фазовом  $(p,q)$ -пространстве, учитывающие обменное взаимодействие тождественных частиц в рамках «линейного» и «гармонического» приближений. Для этого анализируются вклады различных перестановок в функцию Вигнера. При слабом и умеренном вырождении наиболее существенны парные перестановки. Когда импульсы и координаты каких-либо двух частиц практически совпадают, этот вклад оказывается численно очень большим. В случае фермионов эта проблема проявляется особенно остро, так как функция Вигнера оказывается сильно осциллирующей. Это приводит к «фермионной проблеме знака» в численных расчётах. Для преодоления этой трудности фазовое  $(p,q)$ -пространство рассматривается с точностью до малых ячеек со сторонами  $\Delta_p$  и  $\Delta_q$  соответственно. Функция Вигнера усредняется с характеристическими функциями, близкими к единице внутри данной ячейки  $(p',q')$  и стремящимися к нулю за её пределами:

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

$$\Phi(\mathbf{p}, \mathbf{q}; \mathbf{p}', \mathbf{q}') = \exp\left\{-\frac{\pi}{\Delta_p}(\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2 - \frac{\pi}{\Delta_q}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')^2\right\}. \quad (11)$$

В идеальном случае обменное взаимодействие бозонов может быть учтено посредством парного псевдопотенциала  $v_{BE,ab}$ , зависящего от относительных импульсов и координат частиц:

$$v_{BE,ab} = -\frac{1}{\beta} \ln \left[ 1 + \delta_{\sigma_a \sigma_b} \exp\left\{-\frac{(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b)^2 (\lambda')^2}{4\pi\hbar^2 \alpha^2} - \frac{\pi}{\lambda'^2} (\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_b)^2 - 3 \ln \alpha\right\} \right]. \quad (12)$$

Безразмерный параметр  $\alpha$  следует выбирать так, чтобы численный расчёт функции распределения по импульсам в широкой области состояний приводил к распределению Бозе. Бозонный псевдопотенциал (12) является притягивающим, что отражает стремление бозонов находится в одном квантовом состоянии. Его типичный вид показан на Рис. 1 слева. Обменное взаимодействие идеальных фермионов может быть

учтено посредством парного псевдопотенциала  $v_{FD,ab}$ :

$$v_{FD,ab} = -\frac{1}{\beta} \ln \left[ 1 - \delta_{\sigma_a \sigma_b} \exp \left\{ -\frac{(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b)^2 (\lambda')^2}{4\pi \hbar^2 \alpha^2} - \frac{\pi}{\lambda'^2} (\mathbf{q}_a - \mathbf{q}_b)^2 \right\} \right]. \quad (13)$$

Безразмерный параметр  $\alpha$  подбирается так, чтобы численный расчёт функции распределения по импульсам в широкой области состояний приводил к распределению Ферми. Фермионный псевдопотенциал (13) отражает принцип Паули, запрещающий двум фермионам находиться в одном квантовом состоянии. Его типичный вид показан на Рис. 1 справа.

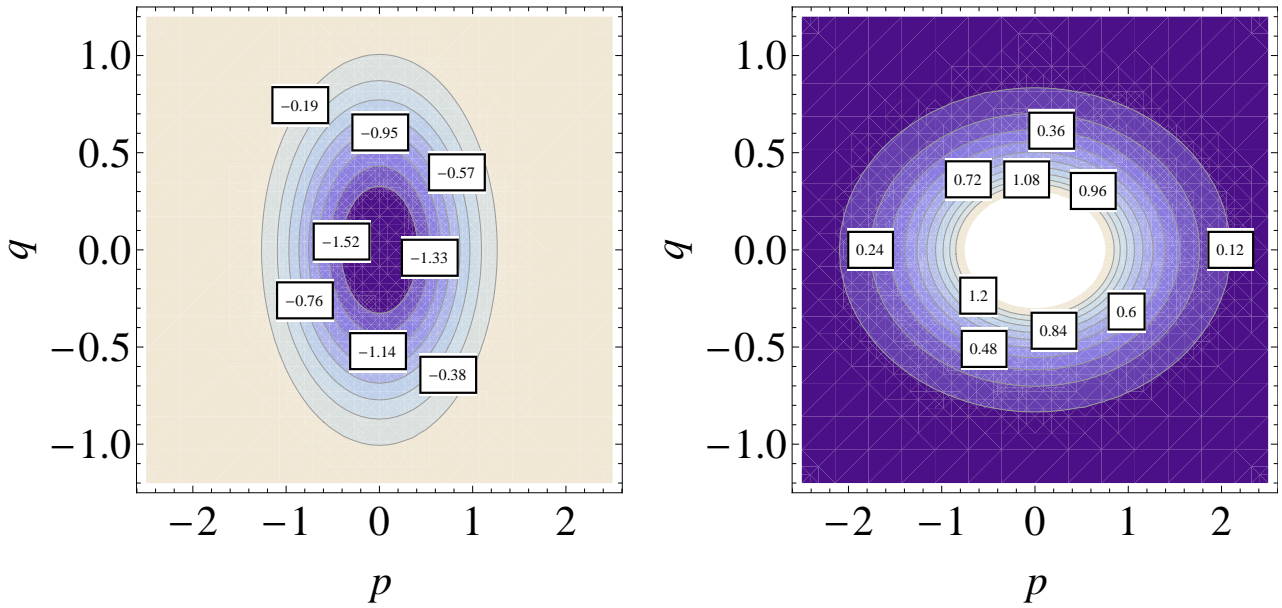


Рис. 1 — Бозонный (слева) и фермионный (справа) обменные псевдопотенциалы.

В неидеальном случае в «линейном» и «гармоническом» приближениях обменное взаимодействие также описывается парными псевдопотенциалами (12) и (13), если заменить  $\mathbf{p}_a$  на  $\tilde{\mathbf{p}}_a$ :

$$\tilde{\mathbf{p}}_a = \mathbf{p}_a + \frac{2\pi \hbar}{\lambda} \mathbf{J}[q, z(\tau)]. \quad (14)$$

Во **второй главе** рассматриваются численные методы SMPIMC, LAPIMC и NAPIMC. Глава состоит из трёх разделов.

В **разделе 2.1** излагается основная идея вычисления методами Монте Карло интегралов общего вида:

$$I = \frac{\int_{\Omega} P(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}{Q}, \quad (15)$$

где  $\Omega$  — область в многомерном пространстве, а  $Q$  — нормировочный множитель. В отличие от численных подходов, вычисляющих интеграл на регулярной сетке, методы Монте Карло оценивают подынтегральное выражение в некоторых случайных точках  $R_m$ . При этом модуль весовой функции  $|P(\mathbf{x})|$  интерпретируется как плотность

вероятности, а средние величины вычисляются с весом  $signP(\mathbf{x})$ . Последовательность случайных точек  $\mathbf{x}$  с распределением  $|P(\mathbf{x})|$  получается с помощью алгоритма Метрополиса-Гастингса [13].

В **разделе 2.2** рассматривается численный метод SMPIMC (Single Momentum Path Integral Monte Carlo), основанный на «одноимпульсном» подходе. Приводится практический алгоритм Метрополиса-Гастингса для вычисления «одноимпульсной» функции Вигнера, а также процедура расчёта средних значений операторов и функций распределения.

В **разделе 2.3** рассматриваются численные методы LAPIMC (Linear Approximation Path Integral Monte Carlo) и HAPIMC (Harmonic Approximation Path Integral Monte Carlo), основанные на «линейном» и «гармоническом» приближениях соответственно. Приводятся практические алгоритмы Метрополиса-Гастингса для расчёта функции Вигнера, а также процедура расчёта средних значений операторов и функций распределения.

В **третьей главе** представлены результаты расчётов термодинамических свойств некоторых модельных систем для тестирования методов SMPIMC, LAPIMC и HAPIMC. Глава состоит из двух разделов.

В **разделе 3.1** рассматриваются простейшие квантовомеханические системы, состоящие из одной частицы во внешнем потенциальном поле. В разделе представлены результаты расчёта некоторых термодинамических величин и распределений для различных одномерных и трёхмерных потенциалов: степенных потенциалов  $V_{2-4} = ax^2 + cx^4$ ,  $V_{3-4} = bx^3 + cx^4$  и «обрезанных» кулоновских потенциалов  $V_{SCC} = -e^2/\sqrt{a_0^2 + x^2}$ . Результаты расчёта средних значений операторов  $\hat{H}$ ,  $\hat{H}^2$  и т.д. сравниваются с результатами «эталонных» методов PIMC для статистической суммы. Кроме того, функции распределения по импульсам и координатам при  $T \rightarrow 0$  сопоставляются с численными решениями уравнения Шрёдингера для основного состояния системы. Можно сделать вывод, что методы SMPIMC и HAPIMC моделируют термодинамические свойства рассмотренных систем с большой точностью в широком диапазоне температур, практически до достижения основного состояния. При дальнейшем уменьшении температуры метод HAPIMC перестаёт работать, так как матрица  $\chi$  из (10) перестаёт быть положительно определённой. В случае кулоновского взаимодействия система должна быть сильноионизованной.

В **разделе 3.2** рассматривается идеальный газ, состоящий из фермионов со спином  $1/2$ . Хотя потенциальное взаимодействие в такой системе отсутствует, обменные эффекты существенным образом влияют на её свойства. Термодинамические свойства идеального фермионного газа характеризуются безразмерным параметром вырождения  $\chi = n\lambda^3$ . Идеальный фермионный газ является удобной системой для проверки правильности учёта обменного взаимодействия в численных методах.

Во-первых, было проведено моделирование идеального фермионного газа методом SMPIMC для проверки правильности учёта обменного взаимодействия. При вырождении  $\chi \leq 3$  метод SMPIMC воспроизводит распределение 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%. Причиной этого являются периодические граничные условия при малых размерах расчётной ячейки (порядка  $0.5\lambda$ ), сильно влияющие на численное преобразование Фурье. Наиболее чувствителен к периодическим граничным условиям «хвост» функции, в то время как интегрально значимая область совпадает с распределением Ферми и при больших вырождениях. В частности, средняя кинетическая энергия рассчитывается с хорошей точностью при  $\chi \approx 10$ .

Во-вторых, было проведено моделирование двухкомпонентного идеального газа методом LAPIMC для проверки фермионного обменного псевдопотенциала (13). По результатам расчётов при умеренных вырождениях ( $1 \leq \chi \leq 10$ ) для параметра  $\alpha_s$  была определена полуэмпирическая зависимость  $\alpha_s^2 = 0.00505 + 0.056n\lambda_s^3$ . На Рис. 2 представлены результаты расчёта функций распределения по импульсам при отношении масс компонент  $m_h/m_e = 2$ . При  $\chi_e = 5.67$ ,  $\chi_h = 2.00$  распределение Ферми получается с хорошей точностью. При  $\chi_e = 10.00$ ,  $\chi_h = 3.54$  согласие численного расчёта с теорией значительно хуже, что связано с влиянием периодических граничных условий и некорректным учётом тройных и высших перестановок парным псевдопотенциалом. В целом псевдопотенциал (13) правильно учитывает обменное взаимодействие при умеренных вырождениях ( $\chi \leq 5$ ). При этом методы LAPIMC и NAPIMC гораздо менее требовательны к вычислительным ресурсам, чем методы типа DPIMC [14] или SMPIMC, учитывающие обменное взаимодействие при помощи детерминантов.

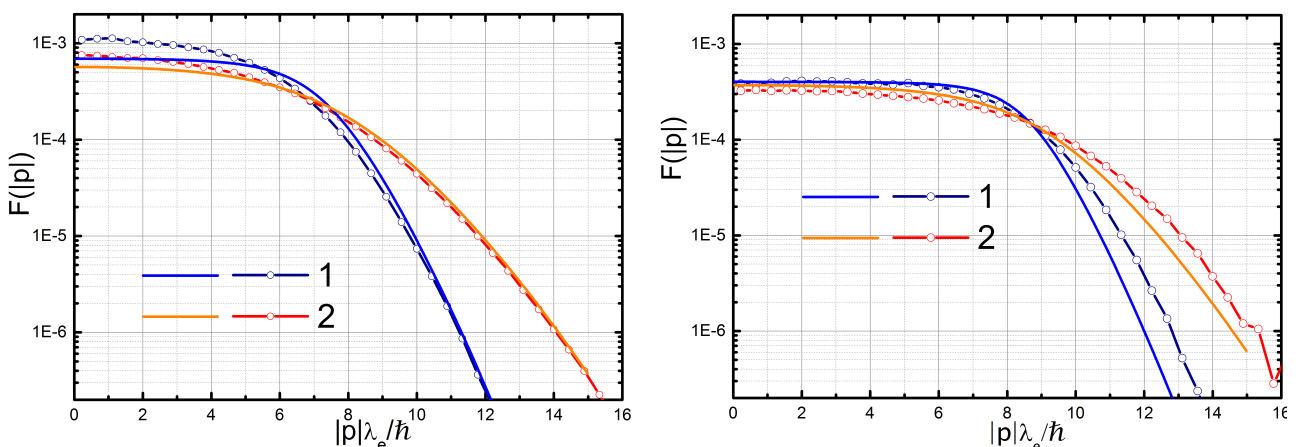


Рис. 2 — Функции распределения по импульсам двухкомпонентного идеального газа.

(1) — компонента с массой  $m_e$ , (2) — компонента с массой  $m_h = 2m_e$ . Слева —  $\chi_e = 5.67$ ,  $\chi_h = 2.00$ ; справа —  $\chi_e = 10.0$ ,  $\chi_h = 3.54$ . Линии с символами — LAPIMC, без символов — распределение Ферми.

В **четвертой главе** представлены результаты расчёта термодинамических 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, состоящие из фермионов со спином  $s = 1/2$ . Частицы первого сорта (электроны) обладают зарядом  $-e$  и массой  $m_e$ , а частицы второго сорта (протоны или дырки) — зарядом  $+e$  и массой  $m_h$ . Предполагается электронейтральность системы в целом:  $N_e = N_h$ . В случае водородной плазмы  $m_h \approx 1836m_e$ . В случае электрон-дырочной плазмы рассматривается упрощённая модель, в которой  $m_h$  составляет порядка нескольких  $m_e$ ; при этом игнорируются диэлектрические свойства среды:  $\epsilon = 1$ . Для описания термодинамического состояния кулоновских систем удобно использовать безразмерные комбинации характерных масштабов: параметры вырождения электронов  $\chi_e = n_e \lambda_e^3$  и протонов  $\chi_h = n_h \lambda_h^3$ , а также параметр неидеальности  $\Gamma = \frac{e^2}{dkT}$  ( $d$  — радиус Вигнера-Зейца). В работе рассмотрена область состояний  $0.8 \leq \Gamma \leq 2.0$  и  $0.3 \leq \chi_e \leq 5.0$ , в которой система представляет собой сильноионизованную плазму.

В **разделе 4.2** представлены результаты расчёта функций распределения по импульсам  $F(|\mathbf{p}|)$  в водородной и электрон-дырочной плазме. Расчёты методом SMPIMC показывают, что при вычислении термодинамических величин, нечувствительных к поведению  $F(|\mathbf{p}|)$  при больших импульсах (давление, внутренняя энергия и т.п.), можно использовать распределение Ферми. С помощью методов LAPIMC и NAPIMC обнаруживается нетривиальное асимптотическое поведение  $F(|\mathbf{p}|)$ . На Рис. 3 показаны электронные и протонные распределения в слабыврожденной водородной плазме. Причина возникновения медленно убывающего «хвоста» состоит, по видимому, в образовании небольшой доли связанных состояний (атомов, молекулярных ионов и т.д.), которые несколько ограничивают доступный электрону объём. В силу принципа Гейзенберга это приводит к росту неопределённости в его импульсе и, соответственно, к увеличению доли частиц с большими значениями импульса. Аналогичное поведение  $F(|\mathbf{p}|)$  наблюдается в умеренно вырожденной электрон-дырочной плазме, причём как для электронов, так и для дырок (Рис. 4). При увеличении  $m_h$  электронные «хвосты» становятся более выраженными, так как тяжёлые дырки локализируются в пространстве и эффективнее связывают электроны. При относительно малых импульсах соответствующие распределения являются фермиевскими, в «переходной» области они могут быть аппроксимированы суммой распределения Ферми и степенной функции  $a/p^8$ , а при ещё больших импульсах — суммой распределения Ферми и функции  $a/p^8 e^{-bp^2}$ . Качественно эти аппроксимации согласуются с аналитическими результатами, полученными для слабонеидеальной плазмы в работах [15] и [16; 17].

В **разделе 4.3** представлены результаты расчёта внутренней энергии и давления в водородной плазме при  $0.8 \leq \Gamma \leq 2.0$ ,  $0.3 \leq \chi_e \leq 5.0$ . Результаты в пределах

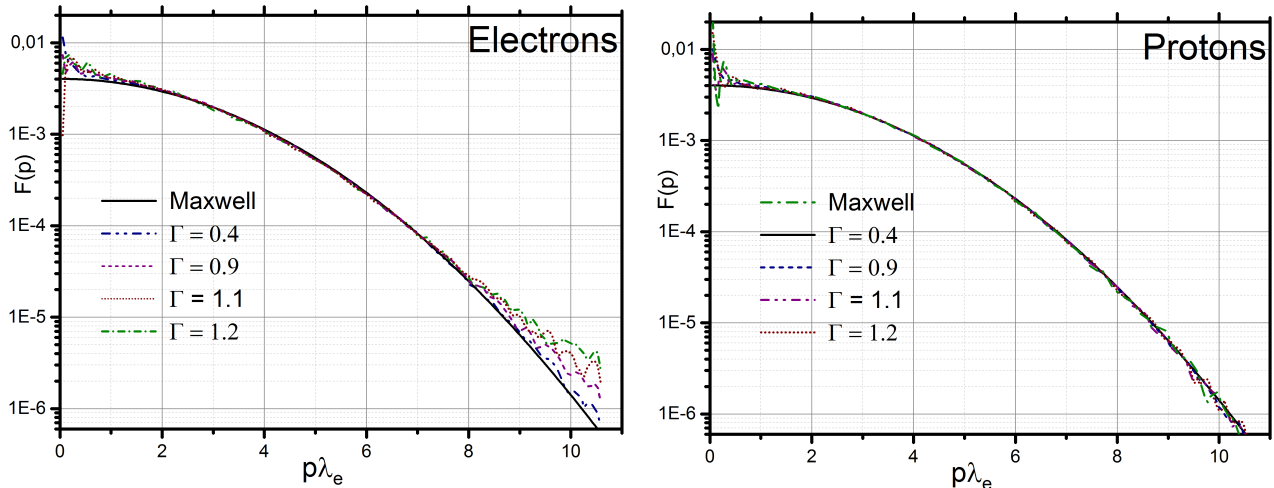


Рис. 3 — Функции распределения по импульсам электронов (слева) и протонов (справа) в водородной плазме при  $\Gamma = 0.4, 0.9, 1.1, 1.2$  и  $\chi_e = 0.3$ . Сплошные линии — распределение Ферми, пунктирные линии — NAIMC.

статистических ошибок согласуются с расчётами, выполненными методом DPIMC [14], и могут быть использованы для уточнения уравнения состояния в рассматриваемой области параметров.

В разделе 4.4 представлены результаты расчёта парных корреляционных функций  $g_{ee}(r)$ ,  $g_{pp}(r)$  и  $g_{ep}(r)$  в водородной плазме, определяющих вероятности обнаружить частицы соответствующих сортов на расстоянии  $r$  друг от друга. Во-первых, подтверждается сильная ионизация плазмы, особенно при больших плотностях (эффект Мотта, или ионизация давлением). Во-вторых, наблюдается образование молекулярных ионов  $H_2^+$  при  $\Gamma \approx 2$  и  $\chi_e \leq 1$ , что следует из локального максимума протон-протонной функции  $g_{pp}$  [18]. В-третьих, при  $\Gamma \geq 1.0$  и  $\chi_e \leq 1.0$  в плазме присутствуют атомы водорода, что следует из локального максимума функции  $g_{ep}r^2$  [18]. Следует отметить, что одновременно с этим наблюдаются отчётливые «хвосты» электронных распределений по импульсам, что косвенно подтверждает роль связанных состояний в их образовании.

В заключении приведены основные результаты работы, которые 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.



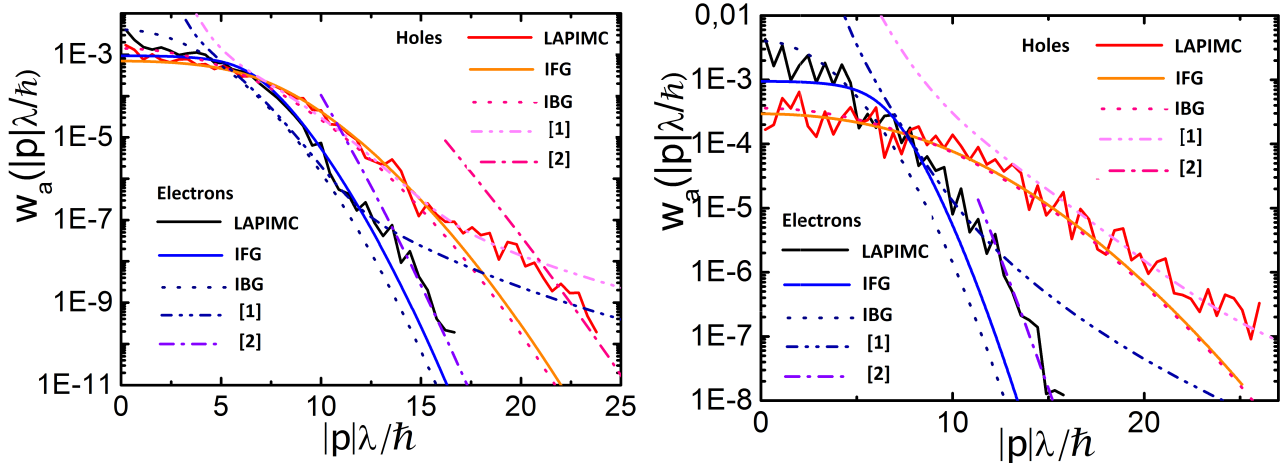


Рис. 4 — Функции распределения по импульсам в электрон-дырочной плазме при  $\chi_e = 4$ ,  $\Gamma = 0.5$  и  $m_h/m_e = 2$  (слева),  $m_h/m_e = 5$  (справа). IFG — распределение Ферми, IBG — распределение Максвелла, [1] — аппроксимация  $IFG + a/p^8$ , [2] — аппроксимация  $IFG + a/p^8 e^{-bp^2}$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

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  $a/p^8 e^{-bp^2}$ .

## Публикации автора по теме диссертации

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.

## Список литературы

10. *Feynman R., Hibbs A.* Quantum mechanics and path integrals. — McGraw-Hill, 1965.
11. *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. — Москва : Наука, 1971. — 416 с.
12. *Tatarskii V. I.* The Wigner representation of quantum mechanics // Soviet Physics Uspekhi. — 1983. — Vol. 26, no. 4. — P. 311.

13. *Hastings W. K.* Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications // *Biometrika*. — 1970. — Vol. 57, no. 1. — Pp. 97–109.
14. 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.
15. *Galitskii V., Yakimets V.* Particle relaxation in a Maxwell gas // *JETP*. — 1966. — Vol. 51. — P. 957.
16. *Eletskaia A., Starostin A., Taran M.* Quantum corrections to the equilibrium rate constants of inelastic processes // *Usp. Fiz. Nauk*. — 2005. — Vol. 48. — Pp. 281–294.
17. Quantum effects in the kinetics of the initiation of detonation condensation waves / A. Emelianov [et al.] // *JETP Lett*. — 2011. — Vol. 94. — Pp. 530–534.
18. *Ebeling W., Fortov V., Filinov V.* Quantum Statistics of Dense Gases and Nonideal Plasmas. — Cham, Switzerland : Springer, 2017.

***Ларкин Александр Сергеевич***

**Численное моделирование термодинамических свойств кулоновских систем  
частиц в вигнеровской формулировке квантовой механики**

Автореферат

Подписано в печать		Формат 60x84/16
Печать офсетная	Уч.-изд.л.	Усл.-печ.л.
Тираж 100 экз.	Заказ N	Бесплатно
ОИВТ РАН. 125412, Москва, Ижорская ул., 13, стр. 2		