

## Расчёт квантовых функций распределения методом Монте-Карло в фазовом пространстве

А.С. Ларкин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Объединённый институт высоких температур РАН

Известно, что в классической статистике кинетические энергии взаимодействующих частиц распределены по Максвеллу. Учёт квантовых эффектов может, однако, изменять форму равновесного распределения по кинетическим энергиям. Именно, взаимодействие частицы с окружением ограничивает объём конфигурационного пространства, доступного частице. Благодаря принципу неопределённости Гейзенберга это должно приводить к росту вероятности частице иметь большие значения импульса и, соответственно, кинетической энергии. Такие квантовые эффекты могут играть большую роль при изучении кинетики горения, детонации, колебательной релаксации и даже ядерного синтеза при высоких давлениях и относительно низких температурах. Также они важны при изучении транспортных свойств систем многих частиц.

Нас интересуют главным образом сильнонеидеальные системы частиц, в которых величина взаимодействия не является малым параметром. В этом случае неприменимы методы, основанные на теории возмущений, и необходим принципиально иной подход. Этому удовлетворяет метод интегралов по траекториям, известных в квантовой механике как интегралы Фейнмана, а в квантовой статистике - как интегралы по мере Винера. Кратко напомним, в чём он состоит, поскольку в нашей работе он играет центральную роль. В квантовой статистике термодинамические величины могут быть определены из статсуммы - следа статистического оператора  $\rho$ . Мы ограничимся рассмотрением канонического ансамбля системы, состоящей из  $N$  нерелятивистских частиц, взаимодействующих друг с другом и/или с внешним полем:

$$Z = \text{Tr}[e^{-\beta \hat{H}}]$$

где  $\beta$  - величина, обратная к температуре системы  $kT$ . Гамильтониан системы складывается из операторов кинетической и потенциальной энергии. Основная трудность при вычислении статсуммы состоит в том, что операторы кинетической и потенциальной энергии не коммутируют, так что статистический оператор при конечной температуре нельзя разложить на соответствующие сомножители. Решение этой проблемы состоит в том, чтобы разбить статистический оператор на произведение очень большого, в пределе - бесконечного, числа  $M$  высокотемпературных операторов. Затем между этими операторами вводятся полные наборы промежуточных состояний частиц с определёнными координатами:

$$e^{-\beta \hat{H}} = e^{-\varepsilon \hat{H}} \cdot 1 \cdot e^{-\varepsilon \hat{H}} \cdot 1 \dots 1 \cdot e^{-\varepsilon \hat{H}}, 1 = \int d^{3N} q |q\rangle \langle q|$$

Это приводит к тому, что статсумма представляется многократным интегралом от произведения высокотемпературных матриц плотности, каждая из которых может быть легко вычислена явно, поскольку в ней есть параметр малости  $1/M$ :

$$\langle q | q' \rangle = \lambda^{-3N} \exp\{-\pi(q - q')^2 / \lambda^2\}$$

Наконец, перейдём к пределу, когда число промежуточных состояний бесконечно велико. При этом последовательность индексов  $m$  перейдёт в непрерывный безразмерный параметр  $\tau$ , аналогичный времени в механике, последовательность промежуточных координат - в траекторию, зависящую от этого параметра, разность ближайших координат - в производную траектории. Наконец, сам многократный интеграл перейдёт в интеграл по всевозможным замкнутым траекториям. В статистике эти интегралы известны как интегралы по мере Винера. Наглядная физическая интерпретация такова. Каждая частица представлена не точкой, как в классической статистике, а замкнутой траекторией в конфигурационном пространстве, причём кинетическая и потенциальная энергия частиц вычисляются вдоль траекторий. Термодинамические средние, такие как полная энергия, давление, теплоёмкость и т.д.

выражаются через аналогичные формулы, которые нетрудно получить, дифференцируя подынтегральное выражение для статсуммы по температуре, объёму и т.д..

Напомним, что нашей целью является расчёт распределения частиц по импульсам. Кроме того, хотелось бы определять непосредственно средние значения произвольных операторов - функций от импульса и координаты. К сожалению, описанный выше метод не позволяет его вычислить, поскольку он использует лишь конфигурационное пространство, в то время как нам требуется метод, работающий в фазовом пространстве. Естественно поэтому обратиться к формализму, основанному на использовании функции Вигнера в статистике. Вместо матрицы плотности в координатном представлении вводится функция Вигнера, определяющаяся как Фурье-преобразование по разностной переменной от матрицы плотности:

$$W(p, q) = Z^{-1} \int d^{3N} \xi \langle q - \xi/2 | e^{-\beta \hat{H}} | q + \xi/2 \rangle e^{ip\xi/\hbar}$$

Операторам соответствуют функции от импульса и координаты - символы Вейля. Среднее значение произвольного оператора вычисляется по формуле, аналогичной формуле классической статистики. При этом символ Вейля играет роль наблюдаемой величины, а функция Вигнера - роль классической функции распределения по импульсу и координате. Отличие состоит в том, что она может быть знакопеременной. Таким образом, расчёт средних значений операторов и функции распределения по импульсу сводится к вычислению функции Вигнера. Здесь снова возникает трудность, связанная с некоммутативностью операторов кинетической и потенциальной энергии. Для того, чтобы её преодолеть, мы используем метод интегралов по траекториям, упомянутый ранее. Как и при вычислении статсуммы, разобьём статистический оператор на очень большое число сомножителей и подставим полные наборы состояний с определёнными координатами. В результате матрица плотности выражается через многократный интеграл от произведения высокотемпературных сомножителей. Подставляя явные выражения для них, получим следующую формулу для матричного элемента. Наконец, перейдём к пределу бесконечного числа разбиений, при этом снова появятся время, траектории и скорости на траекториях. В результате мы приходим к желаемому представлению функции Вигнера в виде интеграла по траекториям. Так же как и в интеграле для статсуммы, частица представлена не точкой, а замкнутой траекторией, но теперь в фазовом пространстве. К сожалению, полученная формула непригодна для практического применения непосредственно. Именно, она предписывает выполнение 3N-мерного преобразования Фурье, что в случае уже десятков частиц невыполнимо на практике. Решить эту проблему можно двумя путями. Во-первых, можно использовать гармоническое приближение - разложение потенциальной энергии в ряд по переменной  $\xi$ , чтобы свести задачу к гауссовым интегралам и выполнить преобразование Фурье явно. Во-вторых, можно вместо полной функции Вигнера использовать функцию, в которой выполнено интегрирование по всем импульсам, кроме одного. Этот метод точен, но позволяет рассчитывать средние значения операторов лишь специального вида. Рассмотрим подробнее оба метода.

Начнём с гармонического приближения. Оно заключается в том, что в интеграле для функции Вигнера мы раскладываем потенциальную энергию в степенной ряд до второго порядка включительно, тем самым получая по переменной  $\xi$  квадратичную форму под экспонентой. Соображения, по которым это может быть правомерно, таковы. Во-первых, подынтегральная функция быстро затухает при больших значениях  $\xi$ . Во-вторых, очень грубая оценка n-го члена разложения содержит интеграл по "времени"  $\tau$ , который уже в 3-м и 4-м членах очень мал. Конечно, это не является обоснованием гармонического приближения, однако даёт надежду на то, что оно может быть разумным. После разложения потенциала Фурье-преобразование сводится к обобщённому гауссову интегралу, который легко вычисляется аналитически. Окончательный результат выписан здесь. Формула довольно громоздка, однако в ней можно выделить части, допускающие ясную интерпретацию. Эта часть точно такая же, как в интеграле для статсуммы. Следующая часть представляет собой квадратичную форму по импульсам с матрицей, зависящей от вторых производных потенциала на траекториях. Возникает также косинус, зависящий от импульса, первых и вторых производных вдоль траекторий, который обеспечивает корреляцию импульсов и координат, а также знакопеременность функции Вигнера. В том случае, когда частицы ни с чем не взаимодействуют, матрица  $\chi$  оказывается единичной, а вектор  $J$  равен нулю. Поэтому косинус и детерминант тождественно равны единице, квадратичная форма от вектора  $J$  равна нулю, и функция Вигнера даёт распределение Максвелла.

В общем случае, однако, компоненты импульсов различных частиц перемешиваются, что должно приводить к изменению распределения по импульсам.

Теперь рассмотрим альтернативный подход, который основан на использовании «одноимпульсной» функции Вигнера. Представим, что перед нами стоит задача вычислить среднее значение оператора следующей структуры: операторы импульса входят в него совершенно равноправно. В частности, такими операторами являются кинетическая и потенциальная энергии системы. При этом среднее значение одночастичного оператора  $A_1$  для частицы  $a$  равно среднему для частицы  $b$ . Разумно ввести «одноимпульсный» символ Вейля, в котором содержится импульс одной-единственной частицы, например, первой. Тогда при вычислении среднего значения такого оператора можно использовать «одноимпульсную» функцию, то есть интеграл от функции Вигнера по всем импульсам, кроме первого:

$$W_{sm}(p_1, q) = \int d^{3N} p_2 \cdots d^{3N} p_N W(p, q)$$

Теперь вспомним, что в определении функции Вигнера импульс связан преобразованием Фурье с переменной  $\xi$ . По всем импульсам, кроме первого, интегралы оказываются тривиальными и дают дельта-функции. Это чрезвычайно упрощает задачу, поскольку вместо  $3N$ -мерного преобразования Фурье в «одноимпульсной» функции Вигнера осталось лишь трёхмерное преобразование, которое на практике может быть сделано численно. В отличие от метода гармонического приближения, «одноимпульсная» функция Вигнера позволяет вычислять средние значения операторов и функции распределения по импульсам точно, то есть без всяких приближений и допущений. Однако очевидно, что не все величины могут быть так получены. В то же время, гармоническое приближение позволяет рассчитать истинную функцию Вигнера, но лишь когда потенциальная энергия может быть разложена в ряд.

Перейдем к практической реализации описанных методов. Конечно, интегралы по путям не могут быть вычислены аналитически, поэтому необходимо использовать численные методы. Основная трудность заключается в том, что нужно вычислить очень многомерные интегралы с размерностью от нескольких десятков до нескольких тысяч. По этой причине, численные методы с использованием сетки в пространстве совершенно бесполезны. К счастью, существуют численные методы Монте-Карло зарекомендовавшие себя в преодолении таких проблем. Мы провели серию тестовых численных расчетов для проверки полученных идей и формул. Таким образом, мы изучили термодинамические свойства некоторых простых систем.

Рассмотрим трехмерный ангармонический осциллятор, сферически симметричный. Мы рассчитали среднюю энергию (рис.1) методом гармонического приближения - квадраты, "одноимпульсной" функции Вигнера - звездочки, и обычных интегралов Вигнера для статсуммы- сплошные линии. Все методы находятся в хорошем согласии друг с другом. Кроме того, мы рассчитали функцию распределения импульса (рис.2) для наибольшего значения ангармонического фактора при различных температурах, распределение Максвелла показано красной линией. С уменьшением температуры распределение импульса становится всё более отличным от него.

Рассмотрим идеальный ферми-газ. Это важная, тестовая система для одноимпульсного метода импульса Монте-Карло. Во-первых, она имеет точное аналитическое решение для функции распределения по импульсам - распределение Ферми. Во-вторых, обменные эффекты играют важную роль в изучении плотной материи, а в ферми-газе эти эффекты играют ключевую роль. Термодинамика ферми-газа определяется его вырождением, которое можно количественно оценить с помощью параметра вырождения - произведение концентрации и куба тепловой волны Де Бройля. Когда этот параметр намного меньше, чем 1, обменные эффекты пренебрежимо малы, в противном случае они имеют решающее значение. Мы вычислили функцию распределения по импульсу идеального ферми-газа для параметра вырождения от одного до семи. Результаты показаны на рис.3, где они сравниваются с аналитическим распределением Ферми, показанным линиями. Результаты наших расчетов хорошо согласуются с теорией, все отклонения вызваны поверхностными эффектами и могут быть устранены за счет увеличения числа частиц в расчетной ячейке.

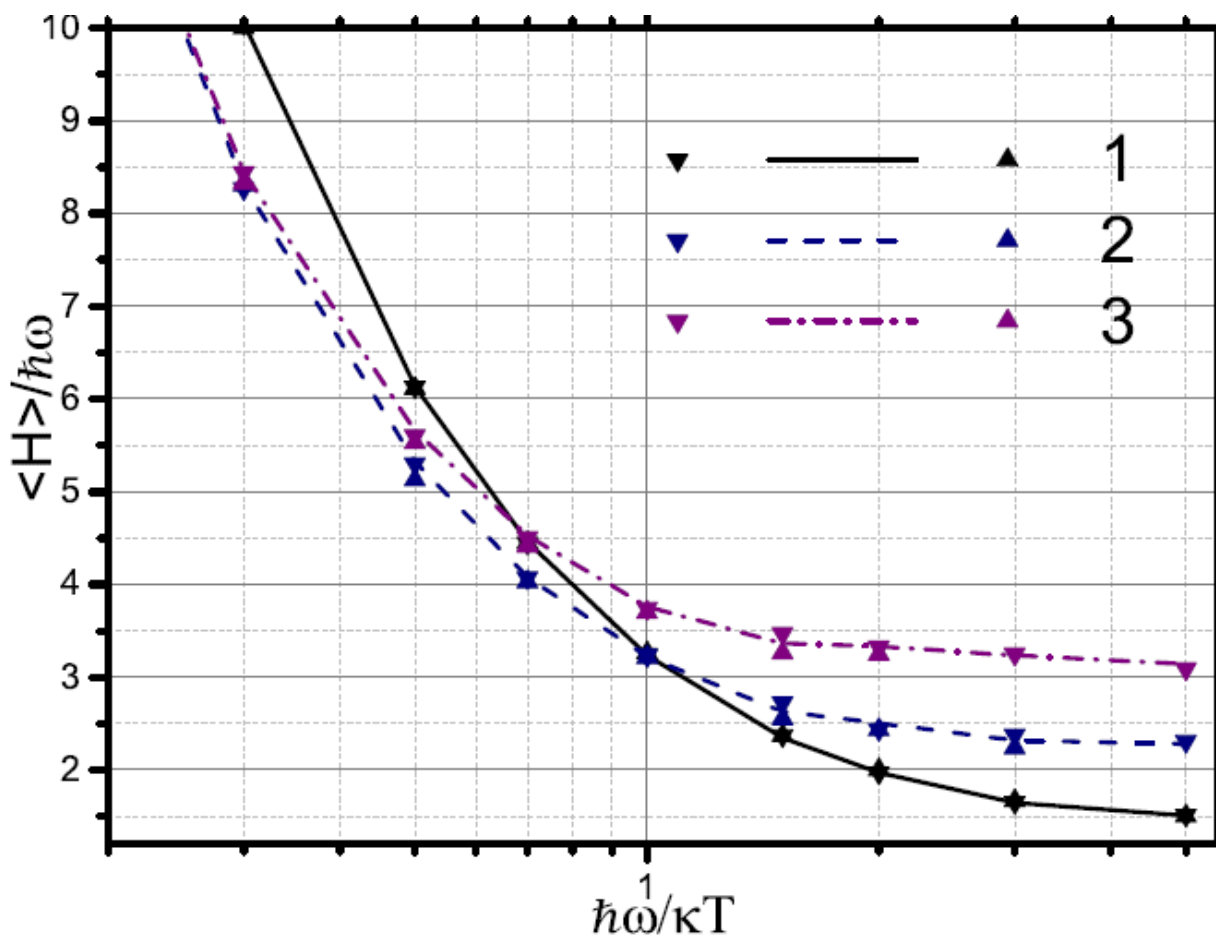


Рисунок 1

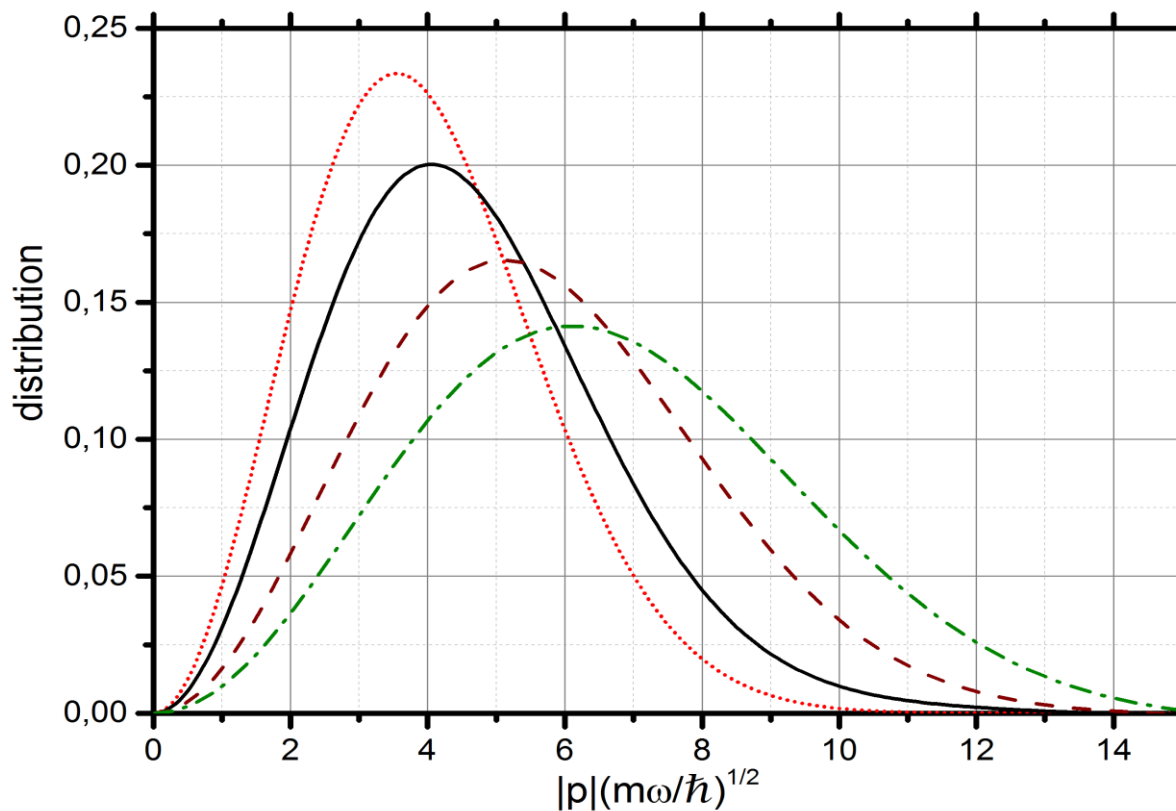


Рисунок 2

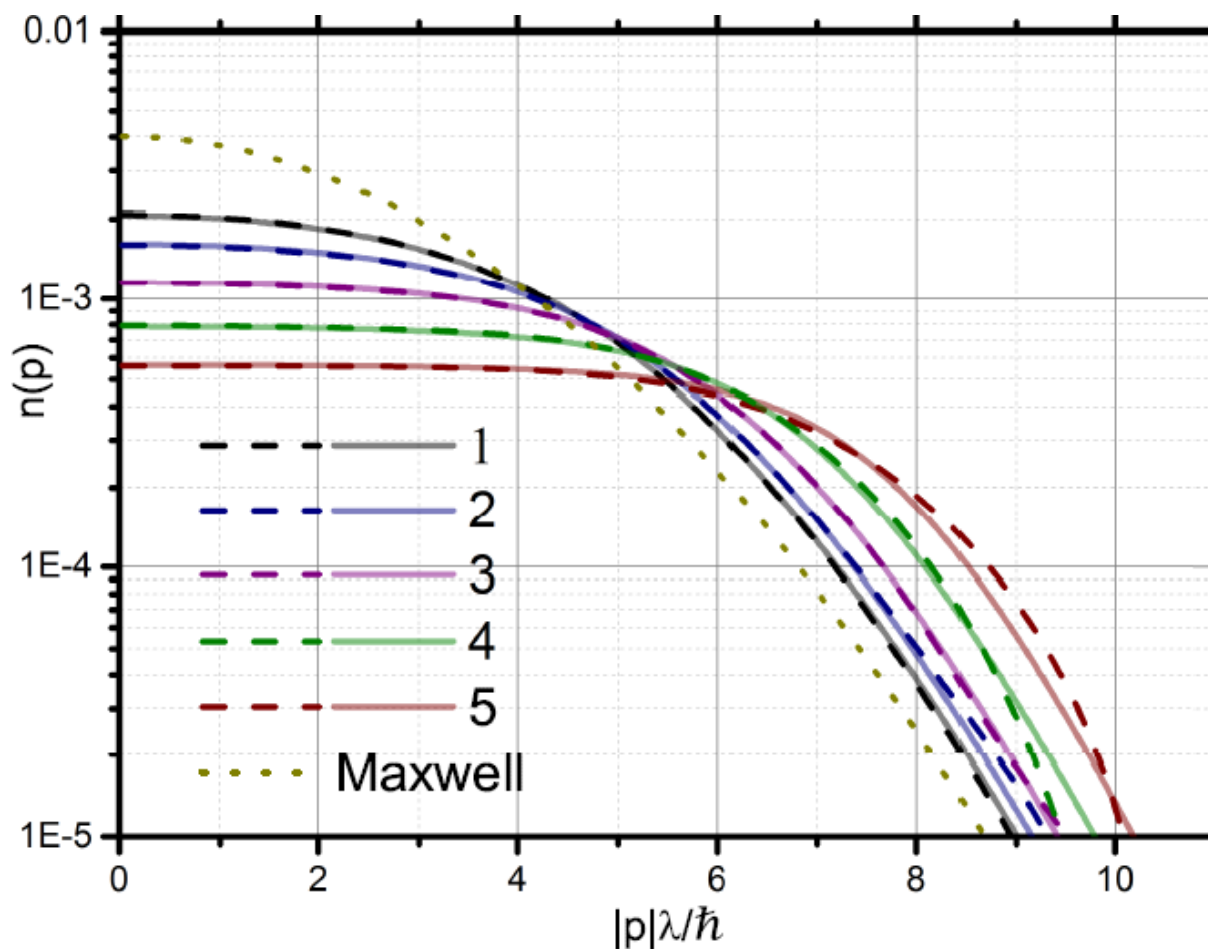


Рисунок 3

#### Литература

1. *Eletskii AV, Starostin AN, Taran MD* (2005) Quantum corrections to the equilibrium rate constants of inelastic processes. *Physics–Uspekhi* 48:3, 281–294.
2. *Larkin AS, Filinov VS, Fortov VE* (2015) Path integral representation of the Wigner function in canonical ensemble. *Contributions to Plasma Physics, Vol 56, 3-4*, 187–196.
3. *Filinov VS, Bonitz M, Ivanov YuB, Ilgenfritz E-M, Fortov VE*, (2015) Color path integral equation of state of the quark-gluon plasma at nonzero chemical potential. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 57, 0440041.
4. *Filinov VS, Bonitz M, Ivanov YuB, Ilgenfritz E-M, Fortov VE*, (2015) Color path integral equation of state of the quark-gluon plasma at nonzero chemical potential. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 57, 0440041.
5. *Larkin AS, Filinov, VS*, (2014) Wigners pseudo-particle relativistic dynamics in external potential field. *Physics Letters A*, 378, 1876–1882.