

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОТНОЙ ВОДОРОДНОЙ ПЛАЗМЫ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО — ИНТЕГРАЛЫ ПО ТРАЕКТОРИЯМ

*С. В. Шевкунов**

*Санкт-Петербургский государственный технический университет
195251, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 30 октября 2001 г.

В терминах интегралов по траекториям Фейнмана найден путь точного описания обмена в неупорядоченных квантовых системах при конечных температурах, позволяющий избавиться от жестких ограничений на число частиц и выполнить численное моделирование методом Монте-Карло равновесных характеристик электронной компоненты в условиях плотной плазмы. Численно рассчитаны комбинаторные весовые коэффициенты всех диаграмм сцепленных фейнмановских траекторий в системах, включающих до 50 электронов, а также соответствующие им распределения по спиновым состояниям. На основе полученных данных изучен механизм формирования спинового состояния многоэлектронной системы при конечных температурах. Комбинаторные веса диаграмм быстро растут при переходе от коротких к длинным циклам сцепленных траекторий. В системе при конечной температуре этот рост уравнивается уменьшением статистических весов диаграмм с длинными циклами. Методом Монте-Карло — интегралы по траекториям численно моделируется плотная водородная плазма в условиях, соответствующих границе вырождения электронной компоненты. Ячейка периодичности содержит 100 электронов и 100 протонов. Результаты расчетов показывают, что, несмотря на высокую температуру, плотная плазма далека от классического режима. Энергетика плазмы формируется на малых межчастичных расстояниях, где квантовый характер движения электронов является определяющим. Вычислены степень ионизации, корреляционные функции и оценены корреляционные радиусы. Детально изучено формирование протон-электронных пар при охлаждении плазмы.

PACS: 52.25.Jm, 52.65.+z

1. ВВЕДЕНИЕ

За время, прошедшее с опубликования первой работы Метрополиса [1], в статистической механике, благодаря интенсивному развитию методов компьютерного моделирования, сформировалось самостоятельное направление, позволяющее решать "безнадежные" для традиционных подходов задачи. Тепловые и структурные свойства плотной сильно неидеальной плазмы занимают в этом ряду особое место в связи с целым классом важных приложений — от обработки металлов и магнитогазодинамики до проблемы управляемого термоядерного синтеза [2].

При уменьшении плотности коллективизация в системе заряженных частиц не убывает, как в случае с короткодействием, а наоборот, растет вследствие быстрого расширения дебаевской сферы [3].

Экранирование оказывается единственным обстоятельством, препятствующим расходимости термодинамических потенциалов. Идея разложения групповых интегралов по кластерам с более простыми связями с последующей их перегруппировкой, принадлежащая Майеру [4], позволяет написать выражения для вириальных коэффициентов через сходящиеся кластерные интегралы. Суммирование фурье-образов кольцевых диаграмм с помощью конволюционной теоремы приводит к дебаевскому потенциалу средней силы между ионами. Остальные вклады сворачиваются в «диаграммы-прототипы» с дебаевской экранировкой в связях, которая обеспечивает их сходимость. Эти слагаемые являются высшими по степеням плотности поправками к дебаевскому предельному закону. Идеи Майера развиты в последующих работах. В [5] предложен метод перехода к сильно связным диаграммам в разложении по

* E-mail: root@shevk.spb.ru, root@shevk.hop.stu.neva.ru

степеням плотности, в [6] получены кластерные разложения для потенциала средней силы и бинарной функции распределения, в [7] — для функции Урсе-ла. Обобщение теории Майера на непарный потенциал межсионного взаимодействия предложено в [8].

Несмотря на достигнутые успехи в аналитических подходах, теория Майера остается асимптотической теорией плазмы экстремально низких плотностей и высоких температур. Наиболее существенные конкретные результаты для ионных систем получены не с помощью вириальных разложений, а традиционными в теории жидкости методами интегральных уравнений. В [9] уравнение Боголюбова для бинарной функции распределения решалось аналитически в суперпозиционном приближении [10]. В [11] рассмотрено решение интегральных уравнений в гиперцепном приближении для ионной системы, в [12] интегральное уравнение Перкуса-Иевики и гиперцепное приближение использовано для получения бинарной функции распределения. Результаты [11, 12] относятся к области, где кулоновское взаимодействие может рассматриваться как малое возмущение по отношению к близкодействующему отталкиванию ионов. Соответствующая теория возмущений развита в [13] и приводит к высокотемпературному разложению свободной энергии, ведущий член которого включает дебаевский вклад и поправки сферической модели [14].

Уже первые применения метода Монте-Карло [15] позволили продвинуться в исследовании плотной ионной системы вплоть до ее перехода в конденсированное состояние [16–23]. Сравнение результатов расчета методом Монте-Карло с численным решением интегрального уравнения Перкуса-Иевики, с результатами, полученными с помощью сферической модели и гиперцепного приближения в [23], показало, что гиперцепное приближение дает результаты наиболее близкие к результатам метода Монте-Карло. В системе заряженных частиц уже в газовой фазе наблюдается интенсивное кластерообразование, которое отражается на равновесных свойствах плазмы [24–27]. Прохождение точки минимума радиуса корреляций в газовой фазе сопровождается резкими изменениями равновесных термодинамических характеристик ионной системы, напоминающими фазовый переход второго рода. Область около критической точки ионной системы подробно исследовалась в [28–31]. Несимметричные системы классических заряженных частиц методом Монте-Карло исследованы в [32–34]. В последние годы интерес к ионной плазме не ослабевает. В [35] подробно исследуется проблема учета дальнедействи-

ющих взаимодействий и экранирования, в [36] развивается идея замены периодических граничных условий моделированием на поверхности четырехмерной гиперсферы, в [37–44] продолжаются исследования проблемы фазового перехода в конденсированную фазу.

Формирование ионных кластеров детально изучено в [45–56]. На фазовой диаграмме плазмы обнаружена обширная область устойчивости цепочечных ионных кластеров. В ионной системе с нарушенной зарядовой симметрией наблюдается обратная ситуация: потенциал средней силы между ионными триплетами приводит к их расталкиванию и торможению нуклеации [53].

Значительные усилия в исследовании термодинамических характеристик систем классических заряженных частиц привели к формированию относительно полной картины. На этом фоне термодинамические свойства и структура плотной ион-электронной плазмы представляет собой гораздо менее исследованную область. Построение эффективного метода компьютерного моделирования для систем квантовых частиц началось сравнительно недавно и шло достаточно медленно в связи с целым рядом трудностей принципиального характера. Метод моделирования квантовых систем при конечных температурах основан на фейнмановском представлении квантовой механики в терминах интегралов по траекториям [57]. Фосдик [58, 59] применил метод Монте-Карло — интегралы по траекториям (МКИТ) к моделированию простейшей системы атомов гелия. В [60–63] предприняты попытки моделирования электронной компоненты в плазме. Описание обмена в системе электронов до последнего времени представляло основную трудность на пути развития метода МКИТ. Разрабатываемые подходы относились к гипотетическим «бесспиновым фермионам» [64–74] или игнорировали обмен вообще [75–78].

Принципиальным требованием точного описания перестановочной симметрии в системах с конечной температурой является построение полного набора антисимметричных волновых функций. Простая симметризация недостаточна для вычисления равновесных средних, а след статистического оператора в представлении неполного набора не является статистической суммой [79]. В [80, 81] сформулирована точная процедура построения полного набора функций и включения спина в метод МКИТ. В [82, 83] выполнены тестовые расчеты для электронной оболочки молекулы водорода, в [84] — для ионов бериллия и лития, а в [85] — расчеты спино-

вого состояния электронной пары в микрополости в связи с проблемой электридов. Данная работа представляет продолжение публикации [81] и рассматривает применение изложенных в ней идей к численному расчету равновесных свойств плотной водородной плазмы.

2. ПРОБЛЕМА ОПИСАНИЯ ПЕРЕСТАНОВОЧНОЙ СИММЕТРИИ В СИСТЕМЕ С БОЛЬШИМ ЧИСЛОМ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ

Полная волновая функция системы неразличимых фермионов должна быть антисимметрична по одновременным перестановкам спиновых и координатных переменных, при этом ее координатная часть в общем случае не является антисимметричной — тип симметрии зависит от спинового состояния. Только в состоянии с максимальным значением спина системы координатная часть антисимметрична. Именно такой простейший частный случай обычно реализуется в численных статистических расчетах [64–74], хотя, как правило, состояние с максимальным спином соответствует относительно высокой энергии и не является самым представительным.

В отличие от расчета чистых квантовых состояний, статистическое описание системы предполагает суммирование по всем доступным спиновым состояниям и, следовательно, по всем возможным типам перестановочной симметрии координатной функции. Построение базиса в симметризованном пространстве осуществляется с помощью операторов симметрии Юнга [86, 87]. Каждая схема Юнга порождает свой базис неприводимого представления группы перестановок. Полнота объединенного базиса следует из прямого подсчета суммарной размерности всех непересекающихся подпространств, генерируемых всеми возможными схемами Юнга [86].

Можно показать, что пространство полных волновых функций, удовлетворяющих требованию перестановочной симметрии, исчерпывается всеми прямыми произведениями подпространств спиновых и координатных функций, генерируемых операторами Юнга с дуальными (полученными отражением относительно диагонали) схемами. Для частиц со спином $1/2$ каждое такое подпространство соответствует конкретному собственному значению оператора квадрата спина всей системы [87].

Действие оператора симметрии Юнга на волновую функцию N -частичной системы превращает последнюю в линейную комбинацию, включающую, в

зависимости от спинового состояния и четности N , от $2^{N/2}[(N/2)!]^2$ до $N!$ слагаемых. Количество слагаемых в соответствующих матричных элементах статистического оператора равно квадрату этого числа. Для расчета равновесных средних необходимо интегрировать это выражение по всем N переменным, в представлении которых записана статистическая сумма. Аналитическое вычисление многомерного интеграла в общем случае невозможно, а численная реализация таких расчетов из-за быстрого роста $N!$ становится невозможной уже для систем из нескольких фермионов.

В [81] показано, что множество диаграмм сцепленных траекторий может быть сокращено без внесения приближений до гораздо меньшего количества, тогда численное интегрирование становится осуществимой задачей. В результате такого сокращения можно получить управляющие таблицы комбинаторных весов и распределения по спиновым состояниям для каждой диаграммы–прототипа. Однако количество операций, необходимых для расчета управляющих таблиц, растет быстрее чем $N!$ и осуществимо только для $N \leq 10$. В данной работе представлен метод, позволяющий исключить эти ограничения.

Фундаментальным требованием, накладываемым на модификации метода Монте-Карло, является отсутствие вносимых в результате таких модификаций систематических погрешностей. Мы исходили из этого требования при разработке варианта метода для больших чисел частиц. «Большими числами» мы называем такую ситуацию, когда исключены все ограничения на количество частиц, связанные с описанием обмена, остаются только ограничения, обычные для систем, подчиняющихся классической статистике. Для современных компьютеров массового применения верхний предел, обусловленный этими ограничениями, оказывается на уровне нескольких сот — нескольких тысяч частиц. Для моделирования макроскопических систем необходимо применение периодических граничных условий, исключающих проблему краевых эффектов.

Действие оператора Юнга приводит к появлению в матричном элементе статистического оператора порядка $N!$ слагаемых, каждое из которых представляет некоторую перестановку координатных переменных, а в терминах интегралов по траекториям — некоторую структуру сцепленных траекторий [81]. Было бы бессмысленно пытаться численно рассчитать такую линейную комбинацию и тем более ее интегрировать в системах из, например, 100 фер-

мионов, так как линейная комбинация содержала бы $100! \sim 10^{157}$ слагаемых. Суть представленного в данной работе метода состоит в распространении идей существенной выборки на саму процедуру симметризации волновой функции. Предполагается параллельно с блужданием в координатном пространстве осуществить случайный марковский процесс блужданий по элементам множества всех перестановок, генерируемых оператором симметрии Юнга. Хотя комбинаторные веса всех таких перестановок равны ± 1 , их вклады в статистическую сумму и канонические средние сильно зависят от конкретной структуры сцепленных траекторий, которую они порождают. Марковский процесс блужданий в объединенном пространстве координатных переменных и различных способов сцепления траекторий (перестановок) приведет к существенной выборке среди огромного числа слагаемых, содержащихся в юнговском симметризаторе. Перестановки, которые порождают сходные структуры сцепленных фейнмановских траекторий, могут быть объединены в классы, тогда блуждание осуществляется не по отдельным перестановкам, а по целым классам. Различные классы содержат различное количество элементов и поэтому имеют сильно различающиеся комбинаторные веса. В существенную выборку будут вовлечены, в первую очередь, наиболее весомые классы. Важно подчеркнуть, что малые вклады не отбрасываются, однако их учет откладывается. При продолжении марковского процесса в накапливаемую статистику вовлекаются члены с меньшими вкладами, а в пределе бесконечно длинного процесса рассчитываемые квантовомеханические средние совпадают с их точными значениями.

Изменение размещения аргументов в клетках схемы Юнга приводит только к перенумерации вершин в диаграмме сцепленных фейнмановских траекторий квантовых частиц [81]. Поскольку результат интегрирования этих диаграмм не зависит от нумерации вершин, вычисление канонических средних сводится к интегрированию семейства диаграмм для какого-нибудь одного размещения аргументов в схеме Юнга. В качестве такого размещения удобно выбрать основное размещение, когда номер аргумента совпадает с номером клетки схемы [81]. Оператор Юнга представляет собой последовательное применение операторов парной симметризации $(1 + \hat{n}_{ij})$ и антисимметризации $(1 - \hat{n}_{ij})$ по номерам аргументов:

$$\hat{J}(S) = (1 - \hat{n}_a)(1 - \hat{n}_b) \dots (1 + \hat{n}_v)(1 + \hat{n}_w). \quad (1)$$

Здесь $\hat{n}_a, \hat{n}_b, \dots$ — операторы парных перестановок по номерам аргументов, расположенных в одном и

том же столбце схемы Юнга, а $\hat{n}_v, \hat{n}_w, \dots$ такие же операторы для пар аргументов, расположенных в одной и той же строке схемы [81]. После раскрытия скобок произведение (1) приобретает вид

$$\hat{J}(S) = \sum_n \alpha_S(n) \hat{N}_n. \quad (2)$$

Суммирование проводится по всем $N!$ перестановкам аргументов по номерам. Комбинаторные веса перестановок $\alpha_S(n)$ принимают одно из трех значений: $+1, -1, 0$. Если оператор перестановки в сумме (2) представим в виде

$$\hat{N}_n = \hat{N}_k \hat{N}_l \hat{N}_m, \quad (3)$$

где \hat{N}_k, \hat{N}_l — операторы перестановок аргументов соответственно в первом и втором столбцах схемы Юнга, а \hat{N}_m — оператор перестановки аргументов вдоль строк схемы, то

$$\alpha_S(n) = (-1)^{c(k)+c(l)},$$

где $c(k), c(l)$ — четности перестановок \hat{N}_k и \hat{N}_l . Если оператор \hat{N}_n не представим в виде (3), он фактически не содержится в операторе симметрии $\hat{J}(S)$, соответствующем собственному значению оператора квадрата спина $S(S+1)$ и основному размещению аргументов в клетках схемы. В этом случае его комбинаторный вес в сумме (2) $\alpha_S(n) = 0$. Разложение (2) фактически является разложением оператора Юнга по ортам \hat{N}_n в операторном пространстве всех возможных перестановок, а вектор с компонентами

$$\{\alpha_S(n)\} = (\alpha_S(1), \alpha_S(2), \dots, \alpha_S(N!))$$

однозначно задает оператор Юнга.

В [81] показано, что статистическая сумма системы N неразличимых нерелятивистских фермионов со спином $1/2$ записывается в виде

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{N!} \sum_S (2S+1) \sum_n^S (-1)^{c(l)+c(k)} \times \\ &\times \int d^N r \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{N}_n \{\mathbf{r}_i\} \rangle = \\ &= \frac{1}{N!} \sum_S (2S+1) \sum_n \alpha_S(n) \times \\ &\times \int d^N r \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{N}_n \{\mathbf{r}_i\} \rangle, \quad (4) \end{aligned}$$

где $\beta \equiv 1/k_B T$ — обратная температура, k_B — постоянная Больцмана, индекс S около знака суммы означает, что суммирование проводится только по

операторам перестановок, содержащимся в операторе Юнга $\hat{J}(S)$. Каждая перестановка \hat{N}_n порождает при вычислении матричных элементов под интегралом (4) некоторую диаграмму сцепленных виртуальных нумерованных траекторий. Подмножества таких диаграмм, различающихся только нумерацией вершин, образуют классы. Их можно объединить с общим множителем

$$\omega_S(\{\nu_i\}) = \sum_n^{\{\nu_i\}} \alpha_S(n), \quad (5)$$

а суммирование по всем перестановкам $N!$ заменить суммированием по классам с графом-прототипом данного класса $\hat{\Pi}_{\{\nu_i\}}$, где многомерный индекс $\{\nu_i\} = (\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N)$ задает структуру диаграммы: ν_i — количество циклов из i сцепленных траекторий. Знак $\{\nu_i\}$ у знака суммы в (5) означает, что суммирование распространяется только на такие n , для которых операторы \hat{N}_n принадлежат классу с графом-прототипом $\hat{\Pi}_{\{\nu_i\}}$ и содержатся в операторе симметрии $\hat{J}(S)$. Имеем

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_{\{\nu_i\}} \omega(\{\nu_i\}) \times \int d^N \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{\Pi}_{\{\nu_i\}} \{\mathbf{r}_i\} \rangle, \quad (6)$$

где

$$\omega(\{\nu_i\}) = \sum_S (2S+1) \omega_S(\{\nu_i\}).$$

Выражения для канонических средних имеют структуру, сходную с (6).

Возможно построение процедуры блужданий по отдельным перестановкам, однако такой путь не является оптимальным, так как марковские переходы между перестановками, принадлежащими одному классу, фактически не обогащают статистики. Блуждание по перестановкам выгодно заменить блужданием по классам перестановок. В каждом таком классе случайная равновероятная выборка перестановок производится из множества всех перестановок \hat{N}_n с проверкой условия их одновременной принадлежности данному классу $\{\nu_i\}$ и юнговскому оператору $\hat{J}(S)$. Перестановка получает комбинаторный коэффициент $\alpha_{S, \{\nu_i\}}(n) = \alpha_S(n)$, если оба условия выполнены, и $\alpha_{S, \{\nu_i\}}(n) = 0$, если хотя бы одно из условий нарушено. На каждом таком шаге случайного процесса получается несмещенная оценка комбинаторного коэффициента $\omega_S(\{\nu_i\})$:

$$\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l) = \frac{N!}{l} \sum_{k=1}^l \alpha_{S, \{\nu_i\}}(n_k), \quad (7)$$

где l — объем выборки $\{n_k\}$. Принципиально важным является то, что приближенность оценки (7) для $\omega_S(\{\nu_i\})$, полученной в конечной выборке $\{n_k\}$ на единственном шаге марковского процесса, не означает приближенность процедуры расчета в целом, если она построена на комбинаторных весах $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$ вместо $\omega_S(\{\nu_i\})$. Действительно, выражение (5) может быть переписано в виде

$$\begin{aligned} \omega_S(\{\nu_i\}) &= \frac{1}{l(N!)^{l-1}} \sum_{\{n_k\}} \sum_{k=1}^l \alpha_S(n_k) = \\ &= \frac{1}{l(N!)^{l-1}} \sum_{\{n_k\}} \sum_{k=1}^l \alpha_{S, \{\nu_i\}}(n_k) = \\ &= \frac{1}{(N!)^{2l-1}} \sum_{\{n_k\}} \tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l), \quad (8) \end{aligned}$$

где $\{n_k\} = n_1, n_2, \dots, n_l$ — выборка l номеров из сплошного ряда целых чисел от 1 до $N!$, причем номера в ряду $\{n_k\}$ могут повторяться. Суммирование по $\{n_k\}$ в (8) означает суммирование по всем возможным выборкам, а коэффициент $1/l(N!)^{l-1}$ перед суммами учитывает повторяемость слагаемых. В последнем выражении (8) вычисление комбинаторных коэффициентов $\omega_S(\{\nu_i\})$ сведено к суммированию по выборкам $\{n_k\}$ из ряда всех возможных перестановок вместо суммирования по перестановкам внутри класса $\{\nu_i\}$, как в (5). После подстановки (8) в (6) и представления матричного элемента под интегралом в виде произведения высокотемпературных матричных элементов, для которых известны аналитические выражения [57], статистическая сумма принимает вид

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{(N!)^{3l-1}} \sum_{\{\nu_i\}} \sum_{\{n_k\}} \sum_S (2S+1) \tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l) \times \\ &\quad \times \int d^N r(1) d^N r(2) \dots d^N r(M) \times \\ &\quad \times \langle \{\mathbf{r}_i(M)\} | \exp\left(-\frac{\beta \hat{H}}{M}\right) | \{\mathbf{r}_i(1)\} \rangle \times \\ &\quad \times \langle \{\mathbf{r}_i(1)\} | \exp\left(-\frac{\beta \hat{H}}{M}\right) | \{\mathbf{r}_i(2)\} \rangle \dots \\ &\quad \dots \langle \{\mathbf{r}_i(M-1)\} | \exp\left(-\frac{\beta \hat{H}}{M}\right) | \hat{\Pi}_{\{\nu_i\}} \{\mathbf{r}_i(M)\} \rangle. \quad (9) \end{aligned}$$

Выражение (9) является точным, несмотря на то что оно записано в терминах коэффициентов $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$, полученных в конечных выборках. Запись статистической суммы в форме (9) позволяет исключить ограничения по числу частиц,

связанные с обменом, и построить марковский случайный процесс для систем из сотен и даже тысяч частиц.

Каждое микросостояние марковского процесса на основе (9) определяется как комбинация набора $X = (\{\mathbf{r}_i(j)\}, \{\nu_i\}, \{n_k\})$ — координат звеньев ломаных траекторий $\{\mathbf{r}_i(j)\}$, способа сцепления нумерованных траекторий в циклы $\{\nu_i\}$ и выборки L перестановок с номерами $\{n_k\}$ из всех возможных $N!$ перестановок. Значения матричных элементов определяются набором $(\{\mathbf{r}_i(j)\}, \{\nu_i\})$, а значения комбинаторных коэффициентов — набором $(\{\nu_i\}, \{n_k\})$ и не зависят от $\{\mathbf{r}_i(j)\}$. Из теории марковских процессов известно [15], что матрица переходных вероятностей $p(X, Y)$ процесса с заданным предельным распределением $\omega(X)$ определяется неоднозначно. Для получения заданного предельного распределения достаточно выполнения условия детального баланса

$$\omega(X)p(X, Y) = \omega(Y)p(Y, X) \quad (10)$$

и условия эргодичности, заключающегося в требовании, чтобы любое микросостояние было достижимо из любого с помощью последовательности промежуточных переходов с ненулевыми вероятностями. В данной работе алгоритм расчетов состоит в последовательном циклическом выполнении переходов пяти типов:

- 1) сдвиг одной вершины ломаной траектории $\mathbf{r}_i(j)$ с сохранением $\{\nu_i\}, \{n_k\}$,
- 2) сдвиг траектории или цикла сцепленных траекторий как целого с сохранением $\{\nu_i\}, \{n_k\}$,
- 3) поворот траектории или цикла сцепленных траекторий как целого с сохранением $\{\nu_i\}, \{n_k\}$,
- 4) образование нового цикла путем сцепления двух циклов или траекторий с одновременным переходом к другой выборке $\{n_k\}$ и изменением положения части вершин $\{\mathbf{r}_i(j)\}$,
- 5) расщепление цикла на два цикла или траектории с одновременным переходом к другой выборке $\{n_k\}$ и изменением положения части вершин $\{\mathbf{r}_i(j)\}$.

Сдвигаемые вершины, траектории и циклы выбираются случайным образом. Вероятности переходов разыгрываются с помощью генератора случайных чисел в соответствии с алгоритмом Метрополиса [15]. Оптимальные значения предельной длины пространственного сдвига и поворота определяются самой программой на начальном сегменте случайного процесса с помощью специальной системы алгоритмических обратных связей. Этот сегмент не используется для расчета равновесных средних. M шагов первого типа для одной траектории сопровождаются одним шагом второго типа и тремя шага-

ми третьего типа — поворотами вокруг трех декартовых осей. Оптимальная частота повторения шагов третьего и четвертого типов определяются программой на начальном сегменте случайного процесса. Наряду с квантовыми частицами (электронами) в системе присутствуют тяжелые частицы (протоны), к которым применяется стандартная процедура Метрополиса моделирования классических частиц. Все кулоновские взаимодействия каждой частицы с каждой учитываются явно: протоны взаимодействуют между собой и со всеми вершинами электронных траекторий, электроны взаимодействуют через вершины с одинаковыми номерами. В режиме моделирования с периодическими граничными условиями взаимодействия учитываются методом ближайшего образа [15].

Опыт численных расчетов показал, что частота переходов в новые микросостояния в прямых попытках сцепления и расщепления траекторий, как правило, слишком низка и не позволяет накопить необходимый объем статистики. Вероятности таких переходов выбираются нами специальным образом. При этом они остаются подчиненными условию детального баланса (10), обеспечивающему выход на предельное гиббсовское распределение [15]. Попытки сцепления и расщепления совершаются только для пар вершин с одинаковыми номерами и при условии, что расстояние r от вершины, с которой обрывается связь, до вершины, с которой устанавливается новая связь, меньше некоторого фиксированного r_{max} . Сцепление через вершины с номерами, отличными от единицы, сводится к обмену целыми фрагментами траекторий. Если r больше некоторого фиксированного r_{min} , сцепляемые вершины подтягиваются навстречу друг другу с одновременным равномерным растяжением траекторий вдоль фрагмента длиной $M_{str} \leq M$. Оптимальные значения r_{max} , r_{min} и M_{str} устанавливаются на подготовительном этапе моделирования с помощью системы обратных связей.

Шаги четвертого и пятого типов сопровождаются изменением текущих численных значений комбинаторных весовых коэффициентов $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$ и требуют их вычисления. Расчет суммы (7) проводится следующим образом. Формируется схема Юнга из N пустых клеток, отвечающая данному значению спина S , — из $j_1 = N/2 + S$ клеток в первом и $j_2 = N/2 - S$ клеток во втором столбце. С помощью генератора случайных чисел проводится равновероятное случайное размещение номеров от 1 до N в клетках схемы. Такое размещение представляет собой некоторую перестановку \hat{N}_{n_k} , выбранную

случайным равновероятным образом из всех $N!$ возможных перестановок. Далее выясняется комбинаторный вес этой перестановки. Для этого проводится поиск и анализ обратной перестановки $\hat{N}_{n_k}^{-1}$, переводящей данное размещение номеров в клетках схемы Юнга в основное размещение. В [81] показано, что симметризация любой собственной функции оператора координат $f(\{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\})$ с помощью действия некоторой линейной комбинации операторов перестановок \hat{N}_n на аргументы $\{\mathbf{x}_i\}$ равносильна действию той же линейной комбинации, но обратных операторов \hat{N}_n^{-1} , на собственные значения $\{\mathbf{r}_i\}$. Поэтому действие операторов перестановок на $\{\mathbf{r}_i\}$ должно проводиться в обратном порядке: сначала антисимметризация по номерам вдоль столбцов схемы Юнга, затем — симметризация вдоль строк. Такой оператор мы называем альтернативным оператором Юнга. Хотя замена всех перестановок в операторе Юнга меняет тип симметрии волновой функции, значения матричных элементов под интегралом (6) при такой замене остаются неизменными, так как обратным операторам соответствуют диаграммы траекторий с переориентированными звеньями, но ориентация звеньев не влияет на значения матричных элементов статистического оператора [81]. В силу этой инвариантности существуют два эквивалентных способа расчета $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$ — в зависимости от того, как проведена симметризация по $\{\mathbf{r}_i\}$ в базисных волновых функциях: операторами Юнга или операторами Юнга с заменой всех перестановок на обратные. Мы используем второй способ. В этом случае перестановка \hat{N}_{n_k} входит в состав альтернативного оператора Юнга, если она имеет структуру $\hat{N}_{n_k} = \hat{N}_m^{-1} \hat{N}_i^{-1} \hat{N}_k^{-1}$, где первый оператор в правой части осуществляет перестановку вдоль строк схемы, последние два оператора — в пределах соответственно первого и второго столбцов. Следовательно, исконая обратная перестановка должна иметь структуру

$$\hat{N}_{n_k}^{-1} = \hat{N}_k \hat{N}_i \hat{N}_m. \quad (11)$$

Для проверки этого факта проводятся последовательные перестановки номеров вдоль строк схемы с целью переместить все первые j_1 номера в первый, а остальные j_2 — во второй столбец схемы. Если такое размещение удастся, это означает, что условие (11) на структуру оператора $\hat{N}_{n_k}^{-1}$ выполнено. В противном случае перестановка \hat{N}_{n_k} имеет комбинаторный вес

$$\alpha_{S, \{\nu_i\}}(n_k) = 0.$$

При выполнении условия (11) комбинаторный вес

перестановки \hat{N}_{n_k} равен

$$\alpha_{S, \{\nu_i\}}(n_k) = (-1)^{c(k)+c(i)}.$$

Четности $c(k)$ и $c(i)$ перестановок \hat{N}_k и \hat{N}_i рассчитываются следующим образом. Каждой перестановке соответствует свой граф перестановки, подобный диаграмме сцепленных фейнмановских траекторий. Любая парная перестановка приводит к слиянию двух циклов в один или распаду одного цикла на два, т. е. всегда меняет количество циклов в графе на единицу. Поэтому количество циклов $\gamma(k)$ в графе связано с количеством парных перестановок $c(k)$, содержащихся в данной перестановке \hat{N}_k , соотношением

$$(-1)^{N-c(k)} = (-1)^{\gamma(k)},$$

и комбинаторный коэффициент перестановки \hat{N}_{n_k} может быть вычислен через количества циклов как

$$\alpha_{S, \{\nu_i\}}(n_k) = (-1)^{\gamma(k)+\gamma(i)}.$$

Количества циклов $\gamma(k)$ и $\gamma(i)$ в перестановках \hat{N}_k и \hat{N}_i рассчитываются численно. Для этого проводится последовательный анализ номеров, оказавшихся в обоих столбцах схемы Юнга, после выполнения перестановки \hat{N}_m . Наличие номера i в клетке j соответствует звену, направленному от вершины i к вершине j в графе перестановки. Последовательно восстанавливается структура графов и подсчитываются количества циклов в обоих перестановках. Вся процедура повторяется l раз и вычисляется сумма в (7). Расчет повторяется для всех возможных спиновых состояний $S = 0, \dots, N/2$ для четных N или $S = 1/2, \dots, N/2$ для нечетных N , и вычисляется сумма по спиновым состояниям с учетом вырождения по собственным значениям оператора проекции спина:

$$\tilde{\omega}(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l) = \sum_S (2S+1) \tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l).$$

Значения $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$ не хранятся в памяти компьютера, как коэффициенты $\omega_S(\{\nu_i\})$, а вычисляются в процессе марковского блуждания. При увеличении объема выборки l значения $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$ приближаются к $\omega_S(\{\nu_i\})$ тем быстрее, чем больше N . Фактически информация о значении $\omega_S(\{\nu_i\})$ сосредоточена в гораздо меньшем чем $(N!)^l$ количестве элементов, представленных в правой части (8). Это делает применение здесь метода существенной выборки особенно эффективным.

В переходные вероятности между микросостояниями $X = (\{\mathbf{r}_i(j)\}, \{\nu_i\}, \{n_k\})$ и $Y =$

$= (\{\mathbf{r}'_i(j)\}, \{\nu'_i\}, \{n'_k\})$ марковского процесса комбинаторные веса входят в виде отношений [15]:

$$p(X, Y) = \min \left(\frac{|\tilde{\omega}(\{\nu'_i\}, \{n'_k\}, l)|}{|\tilde{\omega}(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)|} \frac{a(\{\mathbf{r}'_i(j)\}, \{\nu'_i\}, \beta)}{a(\{\mathbf{r}_i(j)\}, \{\nu_i\}, \beta)}, 1 \right), \quad (12)$$

где $a(\{\mathbf{r}_i(j)\}, \{\nu_i\}, \beta)$ — цепочка высокотемпературных матричных элементов оператора плотности под интегралом (9).

Как показано выше, для построения принципиально точной процедуры нет необходимости в совпадении $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$ и $\omega_S(\{\nu_i\})$, однако самостоятельный теоретический интерес представляет вопрос о соотношении между этими величинами при варьировании l . Из сравнения (5) и (7) видно, что при $l = N!$ и $\{n_k\} = 1, 2, 3, \dots, N!$ выражение (7) тождественно совпадает с (5). Естественно ожидать, что $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l) \rightarrow \omega_S(\{\nu_i\})$ при $l \rightarrow N!$ равномерно или неравномерно по $\{n_k\}$. Мы не приводим общего доказательства этого утверждения, однако причина такого поведения комбинаторных коэффициентов становится ясной уже из того, что при увеличении объема l выборки $\{n_k\}$ относительная доля возможных комбинаций в последовательности $\{n_k\}$ с повторяющимися числами уменьшается, и большая часть из них оказывается близкой к $\{n_k\} = 1, 2, 3, \dots$, для которой (5) и (7) совпадают точно. Для эффективности численного метода важен не только сам факт сходимости $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$ к $\omega_S(\{\nu_i\})$, но и ее скорость. Только достаточно быстрая сходимость дает возможность проверить правильность численного расчета $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$. Проверка на основе тождества (8) возможна только для достаточно малых N и l , так как правая часть тождества содержит $(N!)^l$ слагаемых. Проверка основана на сравнении численных значений $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$ и $\omega_S(\{\nu_i\})$, полученных с помощью независимых компьютерных программ. Осуществить это можно только для $N \leq 10$, так как для больших N прямой расчет $\omega_S(\{\nu_i\})$ перебором всех возможных перестановок потребовал бы порядка 10^4 – 10^6 часов процессорного времени компьютера средней производительности. Так как алгоритм вычислений не зависит от конкретного значения N , совпадение $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$ и $\omega_S(\{\nu_i\})$ для малых чисел частиц является гарантией того, что рассчитанные через $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$ комбинаторные коэффициенты $\omega_S(\{\nu_i\})$ для любых N , включая те, для которых прямой расчет практически невозмо-

жен, вычислены верно. Мы выполнили такое исследование для различных N . Представление о скорости сходимости дают данные, приведенные в табл. 1. Уже сравнительно небольшая выборка $l = 100$ позволяет получить весовые коэффициенты, отличающиеся от своих точных значений только на 1–2%. Для получения одного такого коэффициента необходимо провести выборку для всех возможных схем Юнга, т. е. выборка имеет объем $l(N/2 + 1)$ для четных и $l((N - 1)/2 + 1)$ для нечетных N . Поскольку точный расчет равновесных средних не требует точного расчета весовых коэффициентов на каждом марковском шаге, существует оптимальный объем выборки l , гарантирующий получение канонических средних с минимальными затратами компьютерного времени. Слишком малые значения l не позволяют распределить вычислительные усилия между состояниями пропорционально их вкладам в равновесные средние. Наоборот, слишком большие l замедляют выполнение каждого шага. По-видимому, оптимальное значение l уменьшается с ростом N . Наш опыт расчетов показывает, что для $N = 100$ оно близко к $l \approx 10$.

Данные для $N = 10$ в табл. 1 дают представление о поведении весовых коэффициентов при варьировании количества сцепленных траекторий. При движении по таблице снизу вверх количество вовлеченных в сцепления траекторий растет, и длины циклов увеличиваются. Видно, что увеличение размера циклов сопровождается ростом весовых комбинаторных коэффициентов по абсолютной величине с одновременной осцилляцией их знаков. Максимальный вес имеет конфигурация, в которой все электроны образуют единый цикл (первая строка табл. 1).

Комбинаторные коэффициенты, представленные в табл. 1, не зависят от температуры. При нагревании вероятность образования длинных циклов уменьшается, так как область пространственной локализации каждой траектории сужается. Результирующее распределение по циклам является компромиссом между двумя встречными тенденциями — ростом величины комбинаторных коэффициентов и одновременным уменьшением температурных весовых множителей $a(\{\mathbf{r}_i(j)\}, \{\nu_i\}, \beta)$ для длинных циклов, причем при повышении температуры вторая тенденция усиливается, сдвигая равновесие к более коротким циклам. Это противоборство двух тенденций разворачивается на фоне частичной компенсации положительных и отрицательных весов, причем роль компенсации усиливается при понижении температуры, когда нарастает вес конфигураций с сильно связанными траекториями.

Таблица 1. Обобщенные комбинаторные веса $\omega'(\{\nu_i\}) = \omega(\{\nu_i\})/\omega(N00\dots 0)$ различных способов распределения нумерованных виртуальных электронных траекторий по циклам (ν_i — количество циклов, состоящих из i сцепленных траекторий) в системе из $N = 10$ электронов, рассчитанные методом случайной выборки перестановок с различными объемами выборки l , и точные значения, полученные прямым перебором всех спиновых состояний и перестановок, содержащихся в операторах симметрии Юнга

	$\{\nu_i\}$	$\omega'(\{\nu_i\})$			Точное значение
		$l = 10$	$l = 100$	$l = 10^7$	
1	0000000001	$-1.058 \cdot 10^5$	$-1.101 \cdot 10^5$	$-1.0086 \cdot 10^5$	$-1.00800 \cdot 10^5$
2	1000000010	$1.232 \cdot 10^5$	$1.222 \cdot 10^5$	$1.2097 \cdot 10^5$	$1.20960 \cdot 10^5$
3	0100000100	$6.867 \cdot 10^4$	$6.212 \cdot 10^4$	$6.3836 \cdot 10^4$	$6.38400 \cdot 10^4$
4	2000000100	$-8.001 \cdot 10^4$	$-7.560 \cdot 10^4$	$-7.3919 \cdot 10^4$	$-7.39200 \cdot 10^4$
5	0010001000	$6.048 \cdot 10^4$	$4.752 \cdot 10^4$	$4.8158 \cdot 10^4$	$4.81600 \cdot 10^4$
6	1100001000	$-7.344 \cdot 10^4$	$-8.042 \cdot 10^4$	$-7.8981 \cdot 10^4$	$-7.89600 \cdot 10^4$
7	3000001000	$3.624 \cdot 10^4$	$3.125 \cdot 10^4$	$3.0791 \cdot 10^4$	$3.08000 \cdot 10^4$
8	0001010000	$4.410 \cdot 10^4$	$4.292 \cdot 10^4$	$4.2057 \cdot 10^4$	$4.20400 \cdot 10^4$
9	1010010000	$-7.112 \cdot 10^4$	$-6.182 \cdot 10^4$	$-6.0707 \cdot 10^4$	$-6.07200 \cdot 10^4$
10	0200010000	$-2.268 \cdot 10^4$	$-2.115 \cdot 10^4$	$-2.1574 \cdot 10^4$	$-2.15800 \cdot 10^4$
11	2100010000	$4.368 \cdot 10^4$	$4.746 \cdot 10^4$	$5.0152 \cdot 10^4$	$5.01600 \cdot 10^4$
12	4000010000	$-1.190 \cdot 10^4$	$-9.961 \cdot 10^3$	$-9.8953 \cdot 10^3$	$-9.90000 \cdot 10^3$
13	0000200000	$1.956 \cdot 10^4$	$2.109 \cdot 10^4$	$2.0264 \cdot 10^4$	$2.02560 \cdot 10^4$
14	1001100000	$-5.897 \cdot 10^4$	$-5.116 \cdot 10^4$	$-5.4729 \cdot 10^4$	$-5.47200 \cdot 10^4$
15	0110100000	$-3.427 \cdot 10^4$	$-3.331 \cdot 10^4$	$-3.4329 \cdot 10^4$	$-3.43200 \cdot 10^4$
16	2010100000	$3.058 \cdot 10^4$	$3.891 \cdot 10^4$	$3.9758 \cdot 10^4$	$3.97600 \cdot 10^4$
17	1200100000	$2.848 \cdot 10^4$	$2.838 \cdot 10^4$	$2.8201 \cdot 10^4$	$2.82000 \cdot 10^4$
18	3100100000	$-2.050 \cdot 10^4$	$-2.222 \cdot 10^4$	$-2.2073 \cdot 10^4$	$-2.20800 \cdot 10^4$
19	5000100000	$2.570 \cdot 10^3$	$2.693 \cdot 10^3$	$-2.6480 \cdot 10^3$	$2.64800 \cdot 10^3$
20	0102000000	$-1.638 \cdot 10^4$	$-1.405 \cdot 10^4$	$-1.5994 \cdot 10^4$	$-1.59900 \cdot 10^4$
21	2002000000	$1.937 \cdot 10^4$	$1.945 \cdot 10^4$	$1.8667 \cdot 10^4$	$1.86600 \cdot 10^4$
22	0021000000	$-1.218 \cdot 10^4$	$-1.422 \cdot 10^4$	$-1.4105 \cdot 10^4$	$-1.41067 \cdot 10^4$
23	1111000000	$4.242 \cdot 10^4$	$4.628 \cdot 10^4$	$4.6498 \cdot 10^4$	$4.64800 \cdot 10^4$
24	3011000000	$-1.876 \cdot 10^4$	$-1.708 \cdot 10^4$	$-1.8265 \cdot 10^4$	$-1.82667 \cdot 10^4$
25	0301000000	$5.145 \cdot 10^3$	$5.324 \cdot 10^3$	$5.4820 \cdot 10^3$	$5.48000 \cdot 10^3$
26	2201000000	$-1.780 \cdot 10^4$	$-1.983 \cdot 10^4$	$-1.9325 \cdot 10^4$	$-1.93200 \cdot 10^4$
27	4101000000	$7.140 \cdot 10^3$	$7.996 \cdot 10^3$	$7.6964 \cdot 10^3$	$7.70000 \cdot 10^3$
28	6001000000	$-5.915 \cdot 10^2$	$-6.475 \cdot 10^2$	$-6.2656 \cdot 10^2$	$-6.26667 \cdot 10^2$
29	1030000000	$7.280 \cdot 10^3$	$7.031 \cdot 10^3$	$6.7988 \cdot 10^3$	$6.80000 \cdot 10^3$

Таблица 1. Продолжение табл. 1

	$\{\nu_i\}$	$\omega'(\{\nu_i\})$			
		$l = 10$	$l = 100$	$l = 10^7$	Точное значение
30	0220000000	$7.420 \cdot 10^3$	$7.322 \cdot 10^3$	$7.3064 \cdot 10^3$	$7.30667 \cdot 10^3$
31	2120000000	$-1.582 \cdot 10^4$	$-1.644 \cdot 10^4$	$-1.7002 \cdot 10^4$	$-1.70000 \cdot 10^4$
32	4020000000	$3.827 \cdot 10^3$	$3.309 \cdot 10^3$	$3.4001 \cdot 10^3$	$3.40000 \cdot 10^3$
33	1310000000	$-8.400 \cdot 10^3$	$-7.924 \cdot 10^3$	$-8.0659 \cdot 10^3$	$-8.06000 \cdot 10^3$
34	3210000000	$1.057 \cdot 10^4$	$9.338 \cdot 10^3$	$9.5715 \cdot 10^3$	$9.56667 \cdot 10^3$
35	5110000000	$-2.450 \cdot 10^3$	$-2.283 \cdot 10^3$	$-2.3407 \cdot 10^3$	$-2.34000 \cdot 10^3$
36	7010000000	$1.773 \cdot 10^2$	$1.4733 \cdot 10^2$	$1.4003 \cdot 10^2$	$1.40000 \cdot 10^2$
37	0500000000	$-3.045 \cdot 10^2$	$-2.648 \cdot 10^2$	$-2.8274 \cdot 10^2$	$-2.82500 \cdot 10^2$
38	2400000000	$2.074 \cdot 10^3$	$1.706 \cdot 10^3$	$1.6962 \cdot 10^3$	$1.69500 \cdot 10^3$
39	4300000000	$-1.313 \cdot 10^3$	$-1.383 \cdot 10^3$	$-1.3752 \cdot 10^3$	$-1.37500 \cdot 10^3$
40	6200000000	$3.780 \cdot 10^2$	$3.614 \cdot 10^2$	$3.4666 \cdot 10^2$	$3.46667 \cdot 10^2$
41	8100000000	$-3.038 \cdot 10^1$	$-3.209 \cdot 10^1$	$-3.2515 \cdot 10^1$	$-3.25000 \cdot 10^1$
42	10000000000	1.000	1.000	1.0000	1.00000

3. СПИН

В табл. 2 представлены распределения по спиновым состояниями

$$\Gamma_{\{\nu_i\}}(S) = (2S + 1) \frac{\omega_S(\{\nu_i\})}{\omega\{\nu_i\}}$$

для различных способов сцепления фейнмановских траекторий $\{\nu_i\}$ в системе 10 электронов. Каждый способ сцепления несет в себе вклады от всех возможных спиновых состояний системы, пропорциональные весам, представленным в таблице из работы [81]. На первый взгляд, в конфигурациях с сильно сцепленными траекториями, т. е. в тех, которые образуются при низких температурах, спин должен уменьшаться, и, следовательно, соответствующие им распределения по спину должны характеризоваться высокими вероятностями состояний с малыми S . Расчет дает более сложную картину. В первой строке табл. 2, отвечающей образованию самого длинного цикла, вероятности состояний с низкими S равны нулю. По мере движения вниз по таблице происходит расщепление траекторий и появляются состояния с низкими значениями спина. В конфигурации с полностью расщепленными траекториями (последняя строка табл. 2) распределе-

ние по спинам тривиально и определяется вырождением по собственным числам оператора проекции спина ($\propto 2S + 1$). Это высокотемпературное состояние соответствует переходу к классическому пределу с полным отсутствием обмена. При варьировании температуры относительные вклады в средний спин различных способов сцепления траекторий также варьируются. При высоких температурах остается только состояние, представленное в последней строке таблицы.

При низких температурах решающим фактором становится взаимная компенсация вкладов с противоположными знаками. На преобладание того или иного способа сцепления траекторий влияет как кулоновское расталкивание между электронами, так и геометрия внешнего поля. Результирующее значение спина, а значит, и перестановочная симметрия в системе определяются конкретной конфигурацией внешнего поля. В условиях пространственно однородной системы с падением температуры спин, как правило, уменьшается. В сильно неоднородной системе спин основного квантового состояния может быть отличным от нуля. Примером такого поведения являются спины электронных оболочек атомов, которые максимальны для элементов из середины периодической таблицы элементов.

Таблица 2. Обобщенные комбинаторные веса различных спиновых состояний системы из $N = 10$ электронов, содержащихся в каждом способе распределения $\{\nu_i\}$ нумерованных виртуальных электронных траекторий по циклам. S — собственное число оператора квадрата спина системы. Условие нормировки: $\sum_S \Gamma_{\{\nu_i\}}(S) = 1$

	$\{\nu_i\}$	$\Gamma_{\{\nu_i\}}(S)$					
		$S = 0$	$S = 1$	$S = 2$	$S = 3$	$S = 4$	$S = 5$
1	0000000001	0	0	0	0	-0.100000	1.100000
2	1000000010	0	0	0	-0.018519	0	1.018519
3	0100000100	0	0	-0.006579	0.019737	-0.098684	1.085526
4	2000000100	0	0	-0.005682	-0.017046	0.085227	0.937500
5	0010001000	0	-0.003322	0.006645	0	-0.099668	1.096346
6	1100001000	0	-0.003039	0	0	0	1.003039
7	3000001000	0	-0.002597	-0.010390	0	0.155844	0.857143
8	0001010000	-0.002379	0.003330	0	0	-0.099905	1.098953
9	1010010000	-0.002196	0	0.006148	-0.018445	0	1.014493
10	0200010000	-0.002317	+0.003244	-0.012975	0.0389249	-0.097312	1.070436
11	2100010000	-0.001994	-0.002791	0	0	0.083732	0.921053
12	4000010000	-0.001684	-0.007071	-0.009428	0.028283	0.212121	0.777778
13	0000200000	0.004739	0	0	0	-0.099526	1.094787
14	1001100000	0.002193	0.003070	0	-0.018421	0	1.013158
15	0110100000	0.004662	-0.003263	0	0.019580	-0.097902	1.076923
16	2010100000	0	0.002817	0	-0.016901	0.084507	0.929578
17	1200100000	0.002128	-0.002979	0	0.017872	0	0.982979
18	3100100000	-0.001812	-0.002536	0	0.015217	0.152174	0.836957
19	5000100000	-0.004532	-0.010574	0	0.063444	0.253776	0.697885
20	0102000000	-0.004690	0.006567	-0.006567	0.019700	-0.098499	1.083490
21	2002000000	0.004019	0.005627	-0.005627	-0.016881	0.084405	0.928457
22	0021000000	-0.002363	-0.003308	0.013233	0	-0.099244	1.091682
23	1111000000	0	0	0.006024	0	0	0.993976
24	3011000000	0.003650	0.005110	-0.005110	0	0.153285	0.843066
25	0301000000	-0.009124	0.012774	-0.019161	0.057482	-0.095803	1.053832
26	2201000000	0	0	0.005435	0.016304	0.081522	0.896739
27	4101000000	0	0	0.004545	0.040909	0.204546	0.750000
28	6001000000	-0.005319	-0.007447	0.01862	0.100532	0.279255	0.614362
29	1030000000	-0.006536	0	0.018301	-0.018301	0	1.006536
30	0220000000	0.006843	-0.003193	0	0.038321	-0.095803	1.053832
31	2120000000	-0.009608	0.002745	0.010980	0	0.082353	0.905882
32	4020000000	0.004902	0.006863	0	0.027451	0.205882	0.754902
33	1310000000	0.004136	0	0.005790	0.034740	0	0.955335
34	3210000000	0	0.004879	0.014634	0.029268	0.146342	0.804878
35	5110000000	0.002849	0.007977	0.019943	0.071795	0.239316	0.658120
36	7010000000	0	0.009524	0.047619	0.133333	0.285714	0.523810
37	0500000000	-0.022124	0.030974	-0.030973	0.092920	-0.092920	1.022124
38	2400000000	0.003687	0.005162	0.015487	0.046460	0.077434	0.851770
39	4300000000	0.003030	0.012727	0.029697	0.063636	0.190901	0.700000
40	6200000000	0.007212	0.023558	0.050481	0.111058	0.252404	0.555288
41	8100000000	0.028205	0.043590	0.089744	0.161539	0.269231	0.423077
42	10000000000	0.027777	0.083333	0.138889	0.194444	0.250000	0.305556

Чтобы исследовать эволюцию спинового состояния многоэлектронной системы с изменением температуры, необходимо упорядочить диаграммы сцепленных траекторий по признаку, который объединяет диаграммы со схожей реакцией их статистических весов на вариации температуры. Универсального решения этой проблемы не существует, так как распределение весов зависит от конкретной геометрии внешнего поля, и необходимо выполнить трудоемкое статистическое моделирование в каждом конкретном случае. Однако можно исследовать общие черты поведения спина в достаточно однородных системах, если упорядочить диаграммы по их степени связности. Если не учитывать осцилляции знака весовых коэффициентов, то распределение по конфигурациям виртуальных траекторий электронов близко к статистическому распределению классических полимерных цепочек. Простейшей количественной характеристикой связности является количество циклов в диаграмме

$$\gamma(\{\nu_i\}) = \sum_{i=1}^N \nu_i.$$

Параметр связности

$$\alpha_C(\{\nu_i\}) \equiv \frac{N - \gamma}{N - 1}$$

принимает значение $\alpha_C = 0$ для диаграмм, в которых нет сцепленных траекторий, с $\gamma = N$. Наоборот, максимально связанная диаграмма представляет собой единственный цикл, состоящий из всех последовательно сцепленных виртуальных траекторий. В этом случае $\gamma = 1$, $\alpha_C = 1$. Для промежуточных состояний $0 < \alpha_C < 1$. Классы, характеризующиеся одинаковыми значениями параметра связности, объединяются в классы связности, количество которых равно числу частиц N в системе. Знак суммарных комбинаторных весов различных классов связности

$$\omega'(\alpha_C) = \sum_{\{\nu_i\}}' \omega'(\{\nu_i\}) \quad (13)$$

зависит от четности $N - \gamma$. Штрих у суммы в (13) означает, что суммируются только диаграммы одинаковой связности

$$\alpha_C = \frac{N - \sum_{i=1}^N \nu_i}{N - 1}.$$

Представление о соотношениях между этими классами для различных N дают данные табл. 3. Численный расчет выполнен прямым перебором всех диаграмм с нумерованными вершинами, причем веса

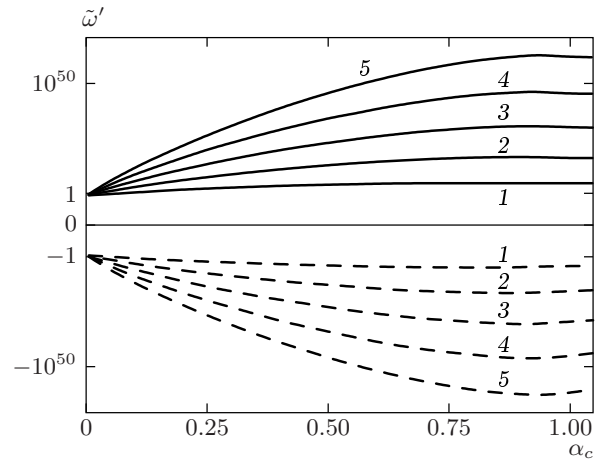


Рис. 1. Зависимости обобщенных комбинаторных весов $\tilde{\omega}'(\alpha_C, \{n_k\}, l)$ от степени связности α_C для различных чисел электронов в системе $N = 10$ (1), 20 (2), 30 (3), 40 (4), 50 (5). Показаны диаграммы с положительными (сплошные линии) и отрицательными (штриховые линии) весовыми коэффициентами. По вертикальной оси — логарифмическая шкала

$\omega'(\{\nu_i\})$ рассчитаны методом случайной выборки. В конечной выборке $\{n_k\}$ объема l формула (13) принимает вид

$$\tilde{\omega}'(\alpha_C, \{n_k\}, l) = \sum_{\{\nu_i\}}' \omega'(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l). \quad (14)$$

На рис. 1 представлены зависимости рассчитанных значений (14) для 10, 20, 30, 40 и 50 электронов. Полный объем выборки для расчета каждой кривой составил $(1-5) \cdot 10^{10}$ диаграмм. Например, в системе 50 электронов для каждой из 204226 диаграмм с нумерованными вершинами методом случайной выборки вычислены соответствующие значения $\tilde{\omega}'(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$ с $l = 10000$. При расчете каждого такого значения объем случайной выборки по всем спиновым состояниям составил $l(N/2) = 2.5 \cdot 10^5$. Затем для каждой из 204226 диаграмм вычислен ее параметр связности и просуммированы веса диаграмм с одинаковыми α_C . Расчет кривой занял 10 часов процессорного времени на компьютере IBM PC Pentium III с тактовой частотой 600 МГц. Из рис. 1 видно, что обобщенные комбинаторные веса диаграмм быстро растут по абсолютной величине с ростом связности. При повышении температуры статистические веса, пропорциональные $a(\{\mathbf{r}_i(j)\}, \{\nu_i\}, \beta)$, сильносвязных диаграмм быстро уменьшаются. Выживают слабо связанные диаграммы. При понижении температуры средняя дли-

Таблица 3. Количество диаграмм сцепленных фейнмановских траекторий, порождаемых применением операторов симметрии Юнга в системах с различными числами электронов N

N	Количество диаграмм нумерованных траекторий	Количество диаграмм ненумерованных траекторий	Количество классов диаграмм с разными α_C
5	120	7	5
10	362800	42	10
20	$2.433 \cdot 10^{18}$	627	20
30	$2.653 \cdot 10^{32}$	5604	30
40	$8.159 \cdot 10^{47}$	37338	40
50	$3.041 \cdot 10^{64}$	204226	50

на фейнмановской траектории увеличивается и слабо связанные диаграммы теряют свое преимущество. В этих условиях вклад сильно связанных диаграмм растет. Одновременно растет чувствительность статистических весовых коэффициентов к положению виртуальных траекторий в пространстве $\{\mathbf{r}_i(j)\}$. Поэтому при низких температурах межэлектронные обменные корреляции усиливаются.

Механизм понижения спина системы при охлаждении становится ясным из кривых распределения по спиновым состояниям, представленных на рис. 2 для диаграмм с положительными весовыми комбинаторными коэффициентами. Аналогичные распределения получаются и для диаграмм с отрицательными весовыми коэффициентами. При достаточно высокой температуре выживает только диаграмма с полностью расцепленными траекториями ($\alpha_C = 0$) и линейным распределением по спиновым состояниям (кривая 1 на рис. 2). Образование циклов сцепленных траекторий (рост α_C) при понижении температуры сопровождается перераспределением в пользу больших значений S (кривые 2, 3, 4 на рис. 2, 3). Результирующее распределение получается суммированием распределений для каждого из возможных α_C со своими весами и знаками. Наиболее весомый после $\alpha_C = 0$ вклад в средние дают диаграммы с минимальным α_C — с одной парой сцепленных траекторий. Обобщенный вес этих диаграмм имеет знак, противоположный весу диаграмм с $\alpha_C = 0$, и отвечающая им кривая распределения по спиновым состояниям с некоторым относительным весом меньше единицы вычитается из кривой 1 рис. 2. В результате этого понижается вероятность, пре-

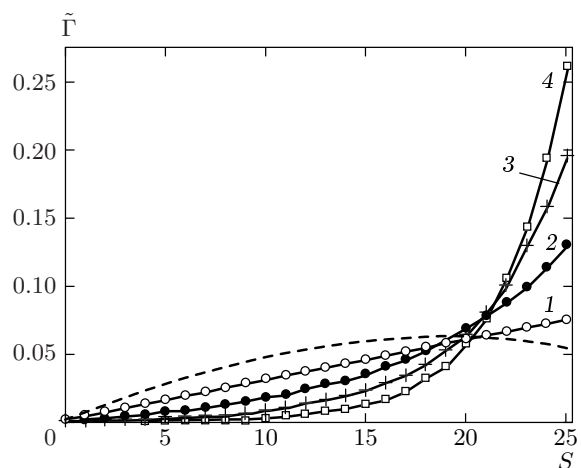


Рис. 2. Комбинаторные распределения $\tilde{\Gamma}(\alpha_C, S, \{n_k\}, l)$ в системе из 50 электронов по спиновым состояниям, содержащимся во всех диаграммах с положительными комбинаторными весовыми коэффициентами и фиксированным значением параметра связности $\alpha_C = 0$ (1), 0.0408 (2), 0.0816 (3), 0.1224 (4). Штриховая линия — ожидаемый вид результирующего распределения при достаточно высокой температуре (схематично)

де всего, больших значений S , и результирующая кривая оказывается выпуклой (пунктир на рис. 2), что соответствует перераспределению весов в пользу малых значений S . Дальнейшее понижение температуры приводит к перераспределению статистических весов в пользу сильно связанных диаграмм. В достаточно однородной системе следует ожидать про-

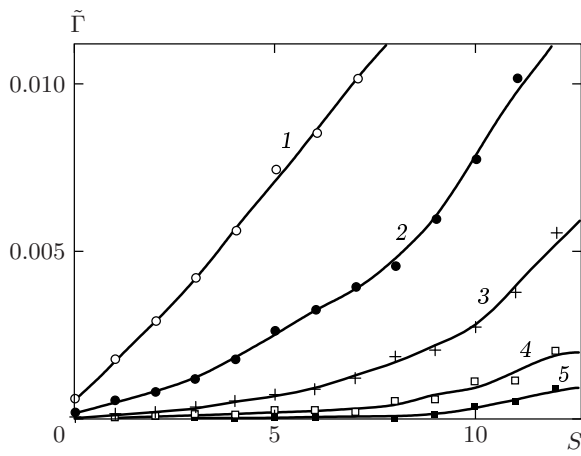


Рис. 3. То же, что на рис. 2, в области низких значений спина и более высоких значений $\alpha_C = 0.0408$ (1), 0.0816 (2), 0.1224 (3), 0.1633 (4), 0.2041 (5)

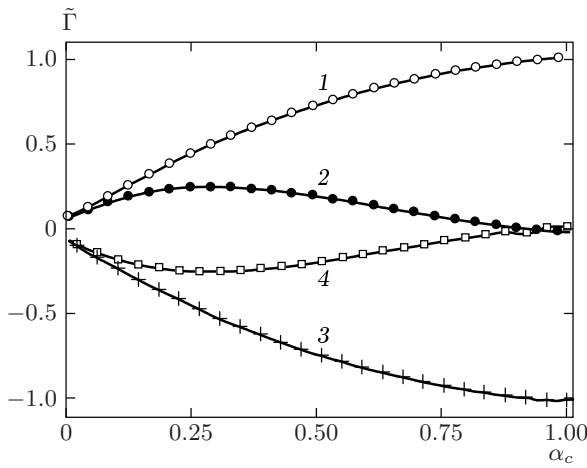


Рис. 4. Кривые $\bar{S}(\alpha_C, S, \{n_k\}, l)$ в системе из 50 электронов как функции параметра связности α_C для двух спиновых состояний с максимальными значениями спинового числа: $S = 25$ (1, 3), 24 (2, 4); 1, 2 — диаграммы с положительными, 3, 4 — с отрицательными обобщенными весами

долженности тенденции уменьшения спина системы. В сильно неоднородном поле диаграммы, комплементарные геометрии внешнего поля, получают преимущество, и картина результирующего распределения по спиновым состояниям может оказаться сложной, а результирующий спин ненулевым.

С ростом связности диаграмм веса состояний с максимально возможными значениями спина $S = N/2$ и $S = N/2 - 1$ монотонно растут по абсолютному значению, в то время как веса спиновых состояний со средними значениями S проходят

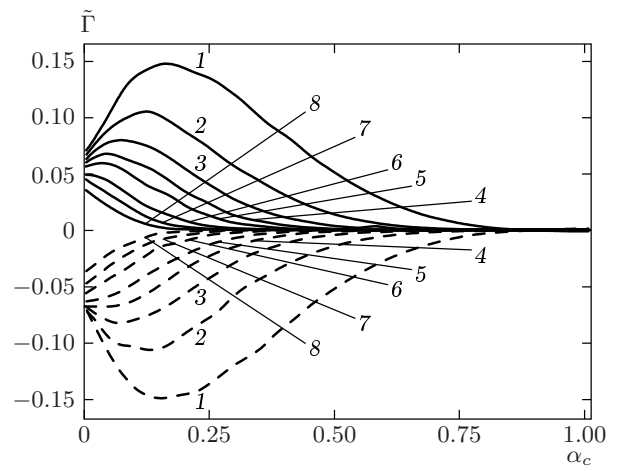


Рис. 5. То же, что на рис. 4, для состояний с низкими значениями спина $S = 23$ (1), 22 (2), 21 (3), 20 (4), 19 (5), 17 (6), 15 (7), 12 (8). Сплошные кривые — диаграммы с положительными, штриховые — с отрицательными обобщенными весами

через экстремум в районе $\alpha_C < 0.25$. При дальнейшем понижении S монотонный рост сменяется монотонным убыванием (рис. 4, 5).

4. ПРОБЛЕМА «ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ЗНАКОВ»

В ряду трудностей, сопровождающих развитие методов компьютерного моделирования систем квантовых частиц, наиболее широко обсуждаемой проблемой является так называемая проблема «отрицательных знаков» [64–78]. Эффективность расчетной процедуры может быть существенно повышена, если микросостояния, дающие близкие знакопеременные вклады, исключить из процесса марковского блуждания. Точный результат будет достигнут, если для каждого конкретного расположения вершин ломаных траекторий провести предварительное суммирование по всем возможным $\{\nu_i\}$. В этом случае взаимная компенсация знакопеременных коэффициентов приведет к понижению веса нефизических конфигураций траекторий и естественному вытеснению их из процесса блужданий. Для больших N проблема может быть решена заменой суммирования по $\{\nu_i\}$ случайными выборками из возможных $\{\nu_i\}$. В данной работе мы применяем более простой в численной реализации метод вытеснения нефизических микросостояний. Идея этого метода состоит в модификации функционального вида $a(\{\mathbf{r}_i(j)\}, \{\nu_i\}, \beta)$ таким образом,

чтобы вероятности микросостояний, противоречащих принципу Паули, оказались низкими и почти не посещались в процессе марковского блуждания. Безусловно, такая модификация неизбежно повлечет определенную систематическую погрешность, так как невозможно абсолютно точно очертить границы скомпенсированных микросостояний, и вытеснение заведомо недопустимых заденет часть физически допустимых виртуальных траекторий. Погрешность может быть сведена к нулю сужением области вытесняемых микросостояний таким образом, чтобы их граница оказалась за пределами области вытеснения. В этом случае не все такие состояния окажутся исключенными из процесса марковского блуждания, и часть вычислительных усилий будет затрачена на их посещение. Чем обширнее область вытесняемых состояний, тем больше шансов затронуть физически реализуемые состояния, но тем меньше статистическая погрешность. Существует оптимальный режим, когда систематическая погрешность значительно меньше статистической погрешности, связанной с затратами на нефизические состояния. Оптимальный режим должен определяться методом проб для каждой конкретной ситуации. В данной работе мы проводим вытеснение нефизических микросостояний заменой $a(\{\mathbf{r}_i(j)\}, \{\nu_i\}, \beta)$ на ее модификацию

$$\begin{aligned} a^{mod}(\{\mathbf{r}_i(j)\}, \{\nu_i\}, \beta) &= \\ &= a(\{\mathbf{r}_i(j)\}, \{\nu_i\}, \beta) \exp(-V_D(\{\mathbf{r}_i(j)\})), \end{aligned} \quad (15)$$

где направляющий потенциал

$$\begin{aligned} V_D(\{\mathbf{r}_i(j)\}) &= \sum_{l < m} \sum_{j=1}^M \left(\nu_D(|\mathbf{r}_l(j) - \mathbf{r}_m(j+1)|) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{l < m} \sum_{j=1}^M (\nu_D(|\mathbf{r}_l(j) - \mathbf{r}_m(j-1)|)) \right) \end{aligned} \quad (16)$$

причем $\mathbf{r}_n(M+1) = \mathbf{r}_k(1)$ для сцепленных траекторий с номерами n и k ,

$$\nu_D(r) = \exp\left(b_0 \left(1 - \frac{r}{r_0}\right)\right),$$

а b_0, r_0 — параметры, контролирующие жесткость и характерный радиус взаимодействия. Оптимальные значения b_0, r_0 устанавливаются программой на начальном сегменте марковского процесса с помощью системы обратных связей, предусмотренных в алгоритме. Значения b_0, r_0 корректируются таким образом, чтобы доля посещаемых микросостояний

с осциллирующими знаками составляла не более 25 % от объема накопленной статистики. Направляющий потенциал (16) вызывает понижение статистических весов состояний с близко расположенными вершинами, через которые осуществляется сцепление траекторий. Именно такие конфигурации порождают вклады с осциллирующими знаками и отвечают сильному перекрыванию волновых функций. В условиях слабо вырожденной плазмы необходимость в выталкивающем потенциале исчезает, и программа автоматически устанавливает $r \approx 0$, что соответствует отключению механизма выталкивания.

При понижении температуры спин системы имеет тенденцию к уменьшению. В терминах одноэлектронного приближения этому соответствует «спаривание» спинов части электронов. Совпадение координатных волновых функций двух электронов, находящихся в разных спиновых состояниях, не противоречит принципу Паули, и состояния с перекрывающимися волновыми функциями пар электронов могут иметь высокие статистические веса. Для расчетов при низких температурах вместо (16) нужно применять модифицированный выталкивающий потенциал, в котором $\nu_D(r)$ действует только между траекториями совпадающей четности:

$$\begin{aligned} V_D(\{\mathbf{r}_i(j)\}) &= \sum_{l,m} \sum_{j=1}^M (\nu_D(|\mathbf{r}_{2l}(j) - \mathbf{r}_{2m}(j+1)|)) + \\ &\quad + \sum_{l,m} \sum_{j=1}^M (\nu_D(|\mathbf{r}_{2l}(j) - \mathbf{r}_{2m}(j-1)|)) + \\ &\quad + \sum_{l,m} \sum_{j=1}^M (\nu_D(|\mathbf{r}_{2l+1}(j) - \mathbf{r}_{2m+1}(j+1)|)) + \\ &\quad + \sum_{l,m} \sum_{j=1}^M (\nu_D(|\mathbf{r}_{2l+1}(j) - \mathbf{r}_{2m+1}(j-1)|)). \end{aligned} \quad (17)$$

5. ЭСТИМАТОРЫ КВАНТОМЕХАНИЧЕСКИХ НАБЛЮДАЕМЫХ В СИСТЕМАХ С ОБМЕНОМ

Вычисление канонических средних различных квантовомеханических наблюдаемых сводится к интегрированию эstimаторов — функций положения фейнмановских траекторий в пространстве. Симметризация по перестановкам усложняет как функцию распределения, так и сами эstimаторы. Этой проблеме посвящен следующий раздел статьи. Кван-

товомеханические равновесные средние выражаются через произведение операторов

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} \left(\hat{A} \exp \left(-\beta \hat{H} \right) \right)}{\text{Tr} \left(\exp \left(-\beta \hat{H} \right) \right)}, \quad (18)$$

где \hat{H} — оператор Гамильтона, а $\beta = 1/k_B T$ — обратная температура. Знаменатель (18) содержит только диагональные матричные элементы статистического оператора, а числитель — еще и недиагональные. Присутствие недиагональных матричных элементов означает, что в представлении интегралов по траекториям функционалы в числителе (1) должны вычисляться на незамкнутых траекториях. Можно избавиться от недиагональных матричных элементов в числителе, если найти такой диагональный в координатном представлении оператор \hat{B} , что

$$\text{Tr} \left(\hat{A} \exp \left(-\beta \hat{H} \right) \right) = \text{Tr} \left(\hat{B} \exp \left(-\beta \hat{H} \right) \right).$$

Диагональные матричные элементы \hat{B} являются эстиматором оператора \hat{A} . Мы покажем общий путь построения эстиматоров в системе с обменом на примере пространственной функции распределения электронной плотности. В чистом квантовом состоянии, описываемом волновой функцией $\Psi(\{\mathbf{x}_i\})$, распределение электронной плотности имеет вид

$$\rho(\mathbf{r}) = \int \Psi(\{\mathbf{x}_i\}) \sum_{k=1}^N \delta(\mathbf{x}_k - \mathbf{r}) \times \Psi^*(\{\mathbf{x}_i\}) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \dots d\mathbf{x}_N. \quad (19)$$

Несмотря на внешнюю схожесть записи (19) с матричным элементом оператора, сумма δ -функций Дирака под интегралом (19) не является оператором, действующим на стоящую за ней волновую функцию, так как само по себе умножение на δ -функцию без интегрирования не имеет смысла. Проблема отсутствия оператора для распределения (19) может быть решена с помощью вспомогательной функции $\rho_\omega(\mathbf{r})$, для которой квантовомеханический оператор существует:

$$\rho_\omega(\mathbf{r}) = \int \Psi(\{\mathbf{x}_i\}) \frac{1}{\omega} \sum_{k=1}^N \theta_\omega(\mathbf{x}_k - \mathbf{r}) \times \Psi^*(\{\mathbf{x}_i\}) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \dots d\mathbf{x}_N. \quad (20)$$

Здесь $\theta_\omega(\mathbf{x}) = 1$ в ω -окрестности точки $\mathbf{x} = 0$ и нуль во всех остальных точках. С одной стороны, из сравнения (19) и (20) следует, что

$$\rho(\mathbf{r}) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \rho_\omega(\mathbf{r}).$$

С другой стороны, (20) является матричным элементом оператора

$$\hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}) = \frac{1}{\omega} \sum_{k=1}^N \theta_\omega(\mathbf{x}_k - \mathbf{r}), \quad (21)$$

для которого в симметризованном по перестановкам представлении можно выполнить статистическое усреднение стандартным образом. В обозначениях [81] имеем

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\text{Tr} \left(\hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}) \exp \left(-\beta \hat{H} \right) \right)}{\text{Tr} \left(\exp \left(-\beta \hat{H} \right) \right)} = \\ &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_S \sum'_{\{m_i\}} \sum'_{\{m'_i\}} \int' d^N r \int' d^N r' \times \\ &\times \langle S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} | \hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}) | S, \{m'_i\}, \{\mathbf{r}'_i\} \rangle \times \\ &\times \langle S, \{m'_i\}, \{\mathbf{r}'_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} \rangle \times \\ &\times d^N r d^N r' / \text{Tr}(\exp(-\beta \hat{H})). \quad (22) \end{aligned}$$

Штрихи у сумм и интеграла означают, что суммирование и интегрирование проводятся по несвязанным перестановкам наборам $\{m_i\}$, $\{m'_i\}$, $\{\mathbf{r}_i\}$, $\{\mathbf{r}'_i\}$. В (22) отсутствуют недиагональные по S матричные элементы из-за ортогональности соответствующих спиновых функций и вследствие того, что оператор $\hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r})$ не действует на спиновые переменные. Используем диагонализированную форму (7) из [81] для полной волновой функции

$$\begin{aligned} \Psi(S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\}; \{\sigma_i\}, \{\mathbf{x}_i\}) &= \\ &= \sum_{n=1}^{N!} (-1)^{g(n)} \tilde{\chi} \left(S, \{m_i\}; \hat{P}_n \{\sigma_i\} \right) f \left(\{\mathbf{r}_i\}, \hat{P}_n \{\mathbf{x}_i\} \right) = \\ &= \sum_{n=1}^{N!} (-1)^{g(n)} \tilde{\chi} \left(S, \hat{P}_n \{m_i\}; \{\sigma_i\} \right) \times \\ &\times f \left(\hat{P}_n \{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{x}_i\} \right) \quad (23) \end{aligned}$$

в записи матричных элементов $\hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r})$ в (22):

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) &= \\ &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_S \sum'_{\{m_i\}} \sum'_{\{m'_i\}} \sum_{n=1}^{N!} \sum_{k=1}^{N!} \sum_{\{\sigma_i = \pm 1/2\}} \int' d^N r \int' d^N r' \times \\ &\times (-1)^{g(n)} \tilde{\chi} \left(S, \hat{P}_n \{m_i\}; \{\sigma_i\} \right) \times \\ &\times (-1)^{g(k)} \tilde{\chi} \left(S, \hat{P}_k \{m'_i\}; \{\sigma_i\} \right) \times \\ &\times \langle \hat{P}_n \{\mathbf{r}_i\} | \hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}) | \hat{P}_k \{\mathbf{r}'_i\} \rangle \times \\ &\times \langle S, \{m'_i\}, \{\mathbf{r}'_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} \rangle / \\ &/ \text{Tr}(\exp(-\beta \hat{H})). \quad (24) \end{aligned}$$

В каждом слагаемом с индексами n и k в (24) проведем замену переменных суммирования $\{\tilde{m}_i\} \equiv \hat{P}_n\{m_i\}$, $\{\tilde{m}'_i\} \equiv \hat{P}_k\{m'_i\}$ и интегрирования $\{\tilde{\mathbf{r}}_i\} \equiv \hat{P}_n\{\mathbf{r}_i\}$, $\{\tilde{\mathbf{r}}'_i\} \equiv \hat{P}_k\{\mathbf{r}_i\}$, а также воспользуемся свойством антисимметрии полной волновой функции в матричных элементах $\exp(-\beta\hat{H})$ относительно этих перестановок. После этого зависимость слагаемых от n и k исчезает и их можно объединить с множителем $(N!)^2$:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) &= \\ &= \lim_{\omega \rightarrow 0} (N!)^2 \sum_S \sum'_{\{\tilde{m}_i\}} \sum'_{\{\tilde{m}'_i\}} \sum_{\{\sigma_i = \pm 1/2\}} \int' d^N \tilde{r} \int' d^N \tilde{r}' \times \\ &\quad \times \tilde{\chi}(S, \{\tilde{m}_i\}; \{\sigma_i\}) \tilde{\chi}(S, \{\tilde{m}'_i\}; \{\sigma_i\}) \times \\ &\quad \times \langle \{\tilde{\mathbf{r}}_i\} | \hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}) | \{\tilde{\mathbf{r}}'_i\} \rangle \times \\ &\quad \times \langle S, \{\tilde{m}_i\}, \{\tilde{\mathbf{r}}_i\} | \exp(-\beta\hat{H}) | S, \{\tilde{m}_i\}, \{\tilde{\mathbf{r}}_i\} \rangle / \\ &\quad / \text{Tr}(\exp(-\beta\hat{H})) = \\ &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_S \sum'_{\{m_i\}} \int' d^N \tilde{r} \int' d^N \tilde{r}' \langle \{\tilde{\mathbf{r}}_i\} | \hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}) | \{\tilde{\mathbf{r}}'_i\} \rangle \times \\ &\quad \times \langle S, \{\tilde{m}_i\}, \{\tilde{\mathbf{r}}_i\} | \exp(-\beta\hat{H}) | S, \{\tilde{m}_i\}, \{\tilde{\mathbf{r}}_i\} \rangle / \\ &\quad / \text{Tr}(\exp(-\beta\hat{H})). \quad (25) \end{aligned}$$

При написании последнего выражения использовано свойство ортогональности модифицированных спиновых функций $\tilde{\chi}(S, \{m_i\}; \{\sigma_i\})$ для несвязанных перестановками наборов $\{m_i\}$, в результате чего суммирование по $\{m'_i\}$ исчезает, а также использованы соотношения (10)–(12) из [81]. В (25) проведено деление на $N!$ с удалением штриха с интеграла по \tilde{r}' .

Матричные элементы $\hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r})$ в несимметризованном координатном представлении в пределе $\omega \rightarrow 0$ имеют вид

$$\begin{aligned} \lim_{\omega \rightarrow 0} \langle \{\mathbf{r}_i\} | \hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}) | \{\mathbf{r}'_i\} \rangle &= \\ &= \sum_{k=1}^N \delta(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}) \prod_i \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_i), \quad (26) \end{aligned}$$

поэтому интегрирование по штрихованным координатам оставляет только диагональные матричные элементы $\exp(-\beta\hat{H})$ в симметризованном по перестановкам представлении:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) &= \sum_S \sum'_{\{m_i\}} \int' d^N r \sum_{k=1}^N \delta(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}) \times \\ &\quad \times \langle S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta\hat{H}) | S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} \rangle / \\ &\quad / \text{Tr}(\exp(-\beta\hat{H})) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \sum_S (2S+1) \sum_n W_S(\hat{P}_n) \int d^N r \sum_{k=1}^N \delta(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}) \times \\ &\quad \times \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta\hat{H}) | \hat{P}_n\{\mathbf{r}_i\} \rangle / \text{Tr}(\exp(-\beta\hat{H})). \quad (27) \end{aligned}$$

При выводе последнего выражения нужно повторить те же выкладки, что и при получении (9) в [81]. Записывая последнее выражение (27) в виде интеграла по траекториям в форме, которую он имеет до взятия предела, и используя свойство инвариантности интеграла относительно циклической перенумерации вершин траекторий, получаем выражение для эstimатора пространственного распределения плотности

$$\rho_e(\mathbf{r}) = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^M \delta(\mathbf{r}_k(j) - \mathbf{r}). \quad (28)$$

Численное усреднение (28) осуществляется с помощью блуждания в пространстве траекторий $\{\mathbf{r}_i(j)\}$ и всех способов их сцепления $\{\nu_i\}$ с функцией распределения

$$\begin{aligned} \omega(x) &= \tilde{\omega}(\{\nu_i\}, \{n_k\}, M) a(\{\mathbf{r}_i(j)\}, \{\nu_i\}, \beta) \times \\ &\quad \times \tilde{\omega}(\{\nu_i\}, \{n_k\}, M) \times \\ &\quad \times \exp \left\{ - \left[\frac{M m_0}{2\beta\hbar^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M (\mathbf{r}_i(j+1) - \mathbf{r}_i(j))^2 + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\beta}{M} \sum_{j=1}^M V(\{\mathbf{r}_i(j)\}) \right] \right\}. \quad (29) \end{aligned}$$

6. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЛОТНОЙ ВОДОРОДНОЙ ПЛАЗМЫ

Численное моделирование выполнено для двух значений плотности: $\rho_1 = 0.696 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ ($T = 37130\text{--}137860 \text{ К}$) и $\rho_2 = 10^{23} \text{ см}^{-3}$ ($T = 347220\text{--}1493000 \text{ К}$). В первом случае плотность плазмы на три порядка меньше плотности конденсированной фазы, а во втором — сравнима с ней. Краевые эффекты исключены применением периодических граничных условий. Все электростатические взаимодействия между частицами учитываются явно методом ближайшего образа. Кубическая ячейка периодичности содержит 100 протонов и 100 электронов. Протоны описываются методами классической статистики, а электроны — квантовой. Каждый электрон представлен замкнутой фейнмановской траекторией, аппроксимированной ломаной с M вершинами ($M = 80, 160, 320$ в

зависимости от температуры). Марковский случайный процесс состоит в последовательности шагов по сдвигу вершин траекторий, сдвигу и повороту траекторий как целого, сцеплению траекторий в циклы и их расцеплению, а также сдвигу протонов. В каждом сеансе расчета выполнено от 200 до 900 миллионов шагов, из которых первые 100–300 миллионов использованы для термализации системы, а остальные — для расчета равновесных средних. На этапе расчета средних происходило от 3 до 10 тысяч сцеплений и расцеплений траекторий. Объем случайной выборки для расчета комбинаторных коэффициентов на одном шаге для каждого из 50 спиновых состояний составлял $l = 10$. На этапе термализации применена процедура последовательного размножения вершин траекторий, ускоряющая процесс на 1–2 порядка. Статистическая погрешность рассчитанных средних оценивалась так же, как в [81], стандартным образом [15] — через флуктуации частичных средних. Для этого в каждом сеансе расчета марковский процесс разделялся на десять равных сегментов и на каждом из них вычислялись частичные средние, корреляции между которыми пренебрежимо малы. Статистическая погрешность рассчитанных корреляционных функций не превышает примерно 1%. Правильность вычислительной процедуры контролировалась для специальных тривиальных случаев, когда в рамках данного метода можно рассматривать более низкие температуры и получить основное квантовое состояние, для которого известно аналитическое решение (атом водорода) или имеются надежные экспериментальные данные (молекула водорода). Результаты сравнения представлены в нашей работе [81]. Дополнительно выполнено тестирование расчетного алгоритма в разреженной системе, состоящей из 100 электронов и 100 фиксированных в пространстве протонов. При охлаждении наблюдается устойчивое формирование 100 слабо взаимодействующих атомов водорода, при этом энергия приобретает значение, отвечающее известному основному квантовому состоянию такой системы.

В системе с плотностью $6.96 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ среднее расстояние между электронами составляет $11.3 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, а тепловая длина волны де Бройля электронов при температуре $T = 37130 \text{ К}$ равна

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi m_e k_B T}} = 3.9 \cdot 10^{-8} \text{ см}.$$

В системе с плотностью 10^{23} см^{-3} среднее расстояние равно $2.2 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, а тепловая длина волны при $T = 347220 \text{ К}$ равна $1.3 \cdot 10^{-8} \text{ см}$. В обоих случаях

роль обменных эффектов существенна, несмотря на относительно высокую температуру.

Микроструктурные характеристики плазмы представлены в форме бинарных корреляционных функций. Корреляционная функция протон–электрон $\rho_{pe}(r)$ (см. табл. 4), имеет смысл плотности вероятности обнаружить электрон на расстоянии r от протона. В координатном представлении и с учетом вырождения по собственным числам оператора проекции спина имеем

$$\begin{aligned} \rho_{pe}(r) = & \sum_S (2S+1) \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_N \times \\ & \times \langle \{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{R}_i\}, S \parallel \sum_{k,n} \delta(r - |\mathbf{x}_k - \mathbf{X}_n|) \times \\ & \times \exp(-\beta \hat{H}) \parallel \{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{R}_i\}, S \rangle / 4\pi r^2 \times \\ & \times \sum_S (2S+1) \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_N \times \\ & \times \langle \{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{R}_i\}, S \parallel \exp(-\beta \hat{H}) \parallel \{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{R}_i\}, S \rangle, \quad (30) \end{aligned}$$

где $\{\mathbf{x}_i\} \equiv \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$ и $\{\mathbf{X}_i\}$ — пространственные переменные электронов и протонов, $\{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{R}_i\}$ — собственные значения оператора координат, $\delta(r)$ — одномерная функция Дирака. Матричные элементы в (30) вычисляются в представлении симметризованных по перестановкам волновых функций в соответствии с собственным числом оператора квадрата спина S системы. Корреляционные функции электрон–электрон $\rho_{ee}(r)$ и протон–протон $\rho_{pp}(r)$ записываются аналогично (30) с точностью до замены $|\mathbf{x}_k - \mathbf{X}_n|$ на $|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_n|$, $|\mathbf{X}_k - \mathbf{X}_n|$ соответственно и суммирования с условием $n \neq k$.

На радиальном распределении электронов в поле протонов в плазме с плотностью ρ_1 при температуре $T < 10^5 \text{ К}$ на расстоянии одного боровского радиуса формируется максимум (рис. 6), отвечающий связанным состояниям протон–электрон. При температуре 37130 К высота максимума составляет 40% от соответствующего максимума в основном состоянии атома водорода. На расстоянии приблизительно $2.2 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ располагается минимум, а на кривой координатных чисел электронов

$$\Delta N(r) = \int_0^r 4\pi x^2 \rho_{ie}(x) dx$$

— точка перегиба (см. рис. 7). Степень ионизации можно оценить, вычислив площадь под максимумом на рис. 6. При 37130 К она составляет $1 - \Delta N_b = 0.55$ (рис. 7).

Кроме связанных состояний протон–электрон, при 37130 К наблюдаются следы более сложных ас-

Таблица 4. Корреляционная функция протон–электрон $\rho_{pe}(r)$ (в ед. 10^{-24} см^{-3}), рассчитанная методом интегралов по траекториям в водородной плазме с плотностью $\rho = 6.960 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Количество звеньев в виртуальной траектории электрона $M = 160$

$r, 10^{-8} \text{ см}$	37130 К	48270 К	62750 К	81570 К	106040 К	137860 К
0.05	0.737	0.455	0.290	0.112	0.0640	0.0418
0.15	0.420	0.253	0.159	0.0624	0.0356	0.0221
0.25	0.296	0.177	0.108	0.0429	0.0245	0.0140
0.35	0.209	0.124	0.0729	0.0304	0.0174	0.00929
0.45	0.149	0.0866	0.0495	0.0217	0.0126	0.00652
0.55	0.107	0.0602	0.0339	0.0157	0.00926	0.00490
0.65	0.0764	0.0420	0.0233	0.0114	0.00687	0.00383
0.75	0.0542	0.0295	0.0162	0.00844	0.00512	0.00308
0.85	0.0383	0.0211	0.0116	0.00635	0.00396	0.00257
0.95	0.0270	0.0151	0.00849	0.00494	0.00318	0.00220
1.05	0.0191	0.0110	0.00639	0.00394	0.00264	0.00194
1.15	0.0137	0.00809	0.00493	0.00322	0.00225	0.00174
1.25	0.00986	0.00615	0.00392	0.00270	0.00198	0.00159
1.35	0.00720	0.00481	0.00322	0.00234	0.00178	0.00148
1.45	0.00534	0.00385	0.00272	0.00206	0.00163	0.00138
1.55	0.00405	0.00314	0.00236	0.00185	0.00152	0.00130
1.65	0.00315	0.00264	0.00209	0.00170	0.00143	0.00124
1.75	0.00251	0.00227	0.00189	0.00158	0.00136	0.00119
1.85	0.00206	0.00200	0.00173	0.00148	0.00129	0.00114
1.95	0.00174	0.00180	0.00160	0.00140	0.00124	0.00110
2.05	0.00151	0.00164	0.00150	0.00134	0.00119	0.00107
2.15	0.00135	0.00152	0.00142	0.00128	0.00115	0.00104
2.25	0.00123	0.00143	0.00135	0.00123	0.00111	0.00102
2.35	0.00114	0.00135	0.00129	0.00119	0.00108	0.00099
2.45	0.00107	0.00128	0.00124	0.00115	0.00105	0.00097
2.55	0.00102	0.00123	0.00120	0.00112	0.00102	0.00096
2.65	0.00099	0.00119	0.00116	0.00109	0.00100	0.00094
2.75	0.00096	0.00115	0.00112	0.00106	0.00098	0.00093
2.95	0.00092	0.00108	0.00106	0.00101	0.00095	0.00091
3.25	0.00088	0.00100	0.00099	0.00096	0.00092	0.00087
3.55	0.00086	0.00094	0.00094	0.00092	0.00088	0.00085
3.85	0.00084	0.00090	0.00090	0.00088	0.00086	0.00083
4.25	0.00082	0.00086	0.00086	0.00085	0.00083	0.00081
4.75	0.00079	0.00082	0.00083	0.00082	0.00080	0.00079

социатов из двух протонов и двух электронов — прототип молекулы водорода. На корреляционной функции протон–протон ρ_{pp} формируется максимум на расстоянии приблизительно $1.1 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ (рис. 8).

Это расстояние примерно на 20% больше равновесного расстояния между протонами в молекуле водорода, что свидетельствует о сильно возбужденных колебательных модах. Такие образования при тем-

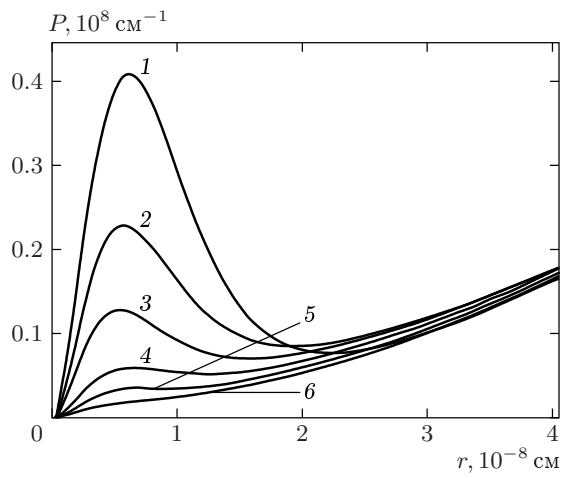


Рис. 6. Радиальные распределения электронов около протона в водородной плазме с плотностью $\rho = 0.696 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$: 1 — 37130 К, 2 — 48270 К, 3 — 62750 К, 4 — 81570 К, 5 — 106040 К, 6 — 137860 К

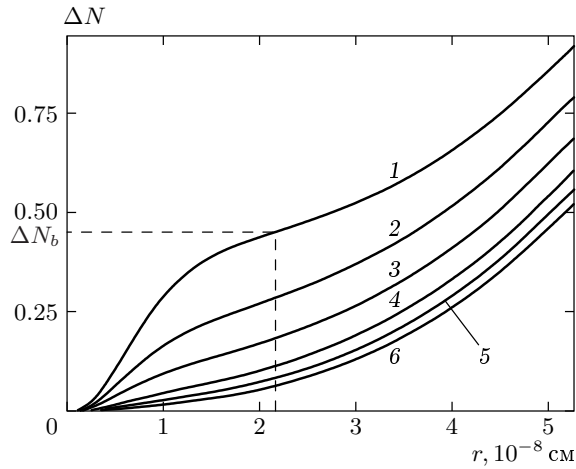


Рис. 7. Текущие координационные числа электронов около протона в плазме с плотностью $\rho = 0.696 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$: 1 — 37130 К, 2 — 48270 К, 3 — 62750 К, 4 — 81570 К, 5 — 106040 К, 6 — 137860 К

пературе выше 50000 К почти полностью исчезают, хотя связанные состояния протон–электрон обнаруживаются вплоть до температуры 150000 К (рис. 6). Из представленных на рис. 8 корреляционных функций видно, что при понижении температуры расстояние между ближайшими электронами увеличивается (сдвиг кривой ρ_{ee} вправо), а между ближайшими протонами почти не меняется. Количество протонов на расстояниях меньших $3 \cdot 10^{-8}$ см больше, чем электронов, причем этот эффект увеличивается при охлаждении. При температурах меньше

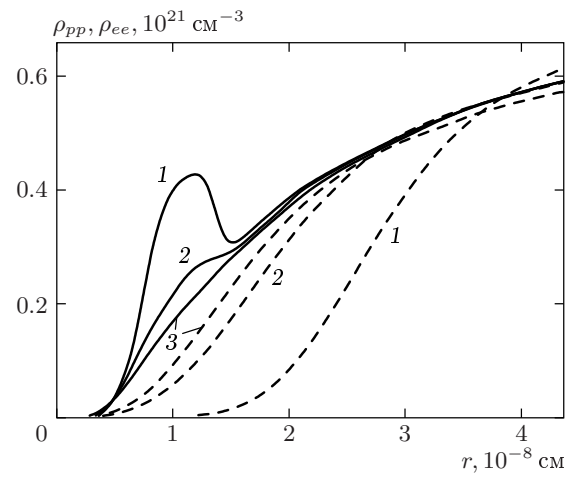


Рис. 8. Корреляционные функции протон–протон (ρ_{pp} , сплошная линия) и электрон–электрон (ρ_{ee} , штриховая линия) в плазме с плотностью $\rho = 0.696 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$: 1 — 37130 К, 2 — 48270 К, 3 — 81570 К,

40000 К требование пространственной делокализации электронов не позволяет им следовать за протонами на расстояния менее 10^{-8} см. Хотя при сближении протонов электроны оказываются преимущественно на периферии, а не между протонами, они продолжают существенно компенсировать электростатическое отталкивание между протонами и на расстояниях меньше боровского радиуса. Это происходит благодаря связанным электронным состояниям, формирующимся и разрушающимся на паре протонов в процессе термических флуктуаций. Это подтверждается формой кривых потенциала средней силы (рис. 9). Потенциал средней силы

$$W_{ee}(r) \equiv -k_B T \ln \frac{\rho_{ee}(r)}{\rho}, \quad (31)$$

где ρ — валовая объемная плотность частиц, имеет смысл взаимодействия пары частиц с учетом не прямых взаимодействий, осуществляемых также и через остальные частицы системы. Отклонение $W_{ee}(r)$ от энергии взаимодействия двух точечных зарядов e^2/r обусловлено квантовыми эффектами и взаимодействием с остальными частицами. Квантовые эффекты проявляют себя на расстояниях, меньших характерной длины пространственной делокализации квантовой частицы, в то время как электростатическое экранирование частицами среды тем сильнее, чем больше r . На расстояниях $r > 2 \cdot 10^{-8}$ см все три типа взаимодействия, W_{ee} , W_{pp} , W_{pe} , сильно ослаблены экранированием. На расстояниях $0.5 \cdot 10^{-8} \text{ см} < r < 2 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ эффек-

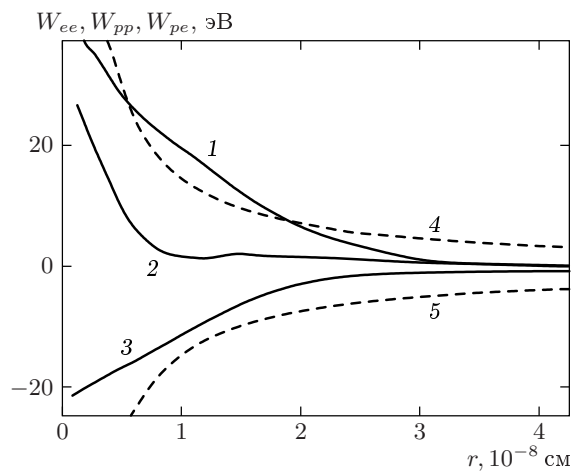


Рис. 9. Потенциалы средней силы в плазме с плотностью $\rho = 0.696 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ при температуре $T = 37130 \text{ К}$ (сплошные линии): 1 — электрон-электрон (W_{ee}), 2 — протон-протон (W_{pp}), 3 — протон-электрон (W_{pe}). Штриховые линии — кулоновская энергия взаимодействия двух точечных классических элементарных зарядов одинаковых (4) и противоположных (5) знаков

тивное отталкивание между электронами усилено по сравнению с простым электростатическим взаимодействием между классическими точечными зарядами. Этот эффект объясняется квантовым характером движения электронов. Наоборот, взаимодействие между протонами сильно ослаблено экранирующим действием электронов. Следы связанных состояний прослеживаются в виде слабого минимума на кривой $W_{pp}(r)$ на расстоянии приблизительно $1.1 \cdot 10^{-8} \text{ см}$. Если определить радиус корреляций как расстояние, на котором потенциал средней силы имеет порядок $k_B T$, а корреляционная функция отличается от валовой плотности в e раз ($\rho_{pe}/\rho \approx e$), то, как следует из данных табл. 4, радиус корреляции между протонами и электронами при температуре 37130 К составляет $1.9 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ и при повышении температуры уменьшается, достигая при 137860 К величины $1.3 \cdot 10^{-8} \text{ см}$. Из сравнения зависимостей на рис. 9 видно, что корреляции между электронами сильнее, чем между протонами и электронами, однако радиусы корреляций близки по величине. Наиболее слабые корреляции — между протонами. Радиус корреляций в положении протонов близок к 10^{-8} см и практически не меняется в исследованном диапазоне температур. Эти данные подтверждают корректность выбранного нами размера ячейки периодичности с ребром

$52.375 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ и применимость метода ближайшего образа. Электростатические взаимодействия в этих условиях сильно экранированы и являются эффективно близкодействующими. Их действие распространяется на диапазон расстояний, где квантовый характер движения частиц является определяющим. В этих условиях калорические характеристики системы в целом формируются на межчастичных расстояниях, где квантовая природа электронной компоненты имеет ведущее значение. Даже понижение плотности плазмы на 2–3 порядка не делает ее более «классической», так как вследствие экранирования энергетика такой системы продолжает формироваться на малых межчастичных расстояниях. Это особенно важно, если учесть, что при такой плотности тепловая длина волны электронов становится значительно меньше среднего расстояния между ближайшими частицами и, согласно формальному критерию, к ней применимо приближение классической статистики. Наши данные говорят о некорректности классического описания в этом диапазоне условий.

Детальное описание обменных эффектов является решающим в плазме с плотностью, приближающейся к плотности конденсированного состояния. Такие состояния возникают на начальной стадии ударного лазерного разогрева дейтерий-третиевой мишени в процессе управляемого термоядерного синтеза. В водородной плазме с плотностью 10^{23} см^{-3} и температурой выше $3 \cdot 10^5 \text{ К}$ отсутствуют какие-либо выраженные следы связанных состояний пары протон-электрон. Корреляционные функции (табл. 5) и радиальные распределения электронов около протонов монотонны, хотя при подробном анализе можно заметить чрезвычайно слабый подъем кривых радиальных распределений в районе одного боровского радиуса (рис. 10). Плотность электронной компоненты около протонов слабо меняется с изменением температуры: при повышении температуры в пять раз плотность электронов около протонов в сфере диаметром два боровских радиуса уменьшается только на 10% (табл. 5). Наиболее чувствительны к температуре корреляции между ионами. На расстоянии одного боровского радиуса соответствующее изменение составляет 60% (рис. 11), однако с увеличением расстояния чувствительность к температуре быстро ослабевает. Радиусы корреляций в плотной плазме малы и уменьшаются с ростом температуры. При температуре 377220 К корреляции протон-электрон имеют характерный радиус $0.35 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ (табл. 5), а радиус корреляций протон-протон не превышает

Таблица 5. Корреляционная функция протон–электрон $\rho_{pe}(r)$ (в ед. 10^{-24} см^{-3}), рассчитанная методом интегралов по траекториям в водородной плазме с плотностью $\rho = 1.0 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$. Количество звеньев в виртуальной траектории электрона $M = 80$

$r, 10^{-8} \text{ см}$	347220 K	416670 K	500000 K	600000 K	720000 K	1036800 K	1493000 K
0.045	0.639	0.551	0.476	0.409	0.359	0.255	0.199
0.075	0.575	0.495	0.434	0.372	0.331	0.244	0.194
0.105	0.521	0.453	0.399	0.342	0.305	0.232	0.189
0.135	0.474	0.414	0.363	0.315	0.280	0.217	0.179
0.165	0.432	0.377	0.330	0.288	0.257	0.202	0.170
0.195	0.392	0.345	0.300	0.263	0.235	0.188	0.160
0.225	0.357	0.315	0.275	0.243	0.218	0.176	0.152
0.285	0.299	0.266	0.233	0.209	0.190	0.158	0.139
0.345	0.253	0.228	0.203	0.183	0.169	0.145	0.130
0.405	0.220	0.199	0.180	0.165	0.154	0.136	0.124
0.465	0.195	0.177	0.163	0.152	0.143	0.129	0.120
0.525	0.175	0.162	0.151	0.142	0.135	0.124	0.117
0.585	0.160	0.150	0.142	0.134	0.129	0.120	0.114
0.645	0.149	0.141	0.134	0.129	0.125	0.117	0.112
0.705	0.140	0.134	0.129	0.124	0.121	0.115	0.110
0.765	0.134	0.128	0.125	0.121	0.118	0.129	0.110
0.825	0.128	0.125	0.121	0.118	0.116	0.111	0.109
0.885	0.124	0.121	0.118	0.116	0.114	0.110	0.108
0.945	0.121	0.118	0.116	0.114	0.112	0.109	0.107
1.005	0.118	0.115	0.114	0.112	0.111	0.108	0.106
1.065	0.116	0.114	0.112	0.111	0.109	0.107	0.106
1.125	0.114	0.112	0.111	0.110	0.108	0.106	0.105
1.185	0.112	0.110	0.110	0.108	0.107	0.106	0.105
1.245	0.110	0.109	0.108	0.108	0.107	0.105	0.104
1.305	0.109	0.108	0.107	0.107	0.106	0.104	0.103
1.365	0.108	0.107	0.106	0.106	0.105	0.104	0.103
1.425	0.107	0.106	0.106	0.105	0.105	0.104	0.103
1.485	0.106	0.106	0.105	0.105	0.104	0.103	0.103
1.545	0.106	0.105	0.105	0.104	0.104	0.103	0.103
1.605	0.105	0.105	0.104	0.104	0.104	0.103	0.103
1.665	0.104	0.104	0.104	0.104	0.103	0.102	0.102
1.725	0.104	0.104	0.103	0.103	0.103	0.102	0.102
1.965	0.102	0.102	0.102	0.102	0.102	0.102	0.101
2.475	0.101	0.101	0.101	0.101	0.101	0.101	0.101

$0.2 \cdot 10^{-8}$ см. На расстоянии 10^{-8} см корреляционная функция протон–протон только на 10% отличается от валовой плотности в системе (рис. 11). Сравнение корреляционных радиусов и среднего

расстояния между соседними частицами показывает, что в плазме с плотностью $\rho_1 = 6.96 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ корреляционный радиус в пять раз, а в плазме с плотностью $\rho_2 = 10^{23} \text{ см}^{-3}$ — в шесть раз меньше

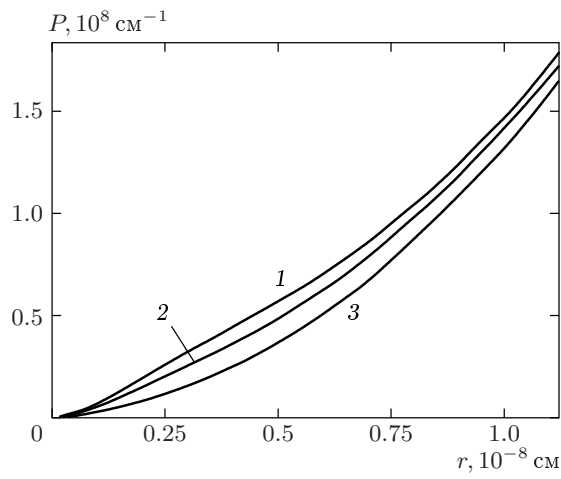


Рис. 10. Радиальные распределения электронов около протона в плазме с плотностью $\rho = 10^{23} \text{ см}^{-3}$; 1 — 347220 К, 2 — 500000 К, 3 — 1493000 К

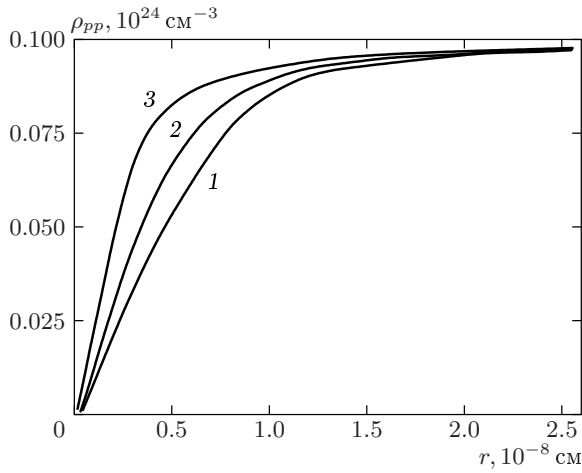


Рис. 11. Корреляционные функции протон-протон в плазме с плотностью $\rho = 10^{23} \text{ см}^{-3}$; 1 — 347220 К, 2 — 600000 К, 3 — 1493000 К

среднего расстояния между частицами, т. е. при нагреве и сжатии плазмы почти пропорционально уменьшился и радиус корреляций. В то же время радиус корреляций в режиме плотной плазмы относительно тепловой длины волны электронов уменьшился в два раза. Несмотря на более высокую температуру, второй режим соответствует более выраженному квантовому характеру движения частиц в плазме. В этой связи интересно проследить влияние температуры на тип перестановочной симметрии волновой функции электронов. Тип перестановочной симметрии однозначно связан с полным спином системы. Поэтому средний квадрат

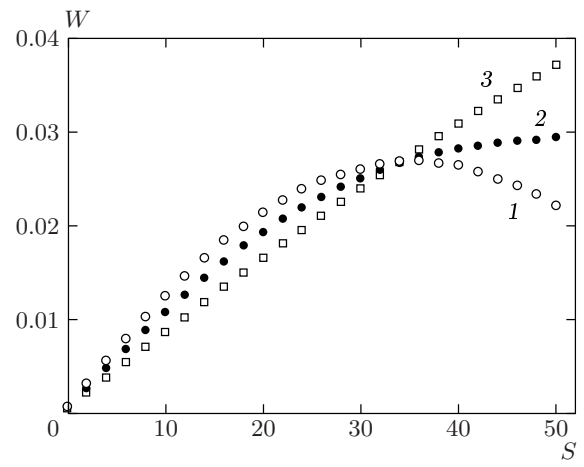


Рис. 12. Распределения по значениям спинового числа S оператора квадрата спина электронов в ячейке периодичности. Плотность плазмы $\rho = 10^{23} \text{ см}^{-3}$; 1 — 347220 К, 2 — 416670 К, 3 — 1493000 К

спина является хорошим индикатором изменений в симметрии волновой функции. На рис. 12 представлены распределения по спиновым числам оператора квадрата спина для электронов в ячейке периодичности. Для высоких температур распределение представляет собой линейно возрастающую функцию, рост которой обусловлен вырождением по собственным числам оператора проекции спина ($\propto 2S + 1$). Это означает статистическую эквивалентность различных спиновых состояний и, следовательно, различных типов перестановочной симметрии. Однако уже при температуре 416670 К линейность нарушается, и состояния с меньшими S приобретают больший статистический вес, что означает частичное «спаривание» спинов электронов. Неожиданным является то, что в плазме высокой плотности спаривание спинов начинается при столь высоких температурах. Следует отметить, что понижение спина системы при охлаждении не является очевидным фактом и зависит от конфигурации поля, в которое погружена система.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Точное статистическое описание многочастичных систем квантовых частиц с обменом сопряжено с необходимостью построения полного набора симметризованных по перестановкам базисных функций. Симметризация приводит к катастрофически быстрому размножению диаграмм сцепленных

фейнмановских траекторий, и уже в системах, содержащих более десяти фермионов, точный расчет становится практически невозможным. В данной работе сформулирован способ преодоления этих трудностей без внесения каких-либо приближений принципиального характера. Новый подход состоит в распространении метода существенной выборки на расчет линейных комбинаций, порождаемых операторами симметрии Юнга. Численные расчеты показали, что, несмотря на огромное количество диаграмм, сходимость достаточно быстрая, и в системе порядка 50 частиц относительно небольшая выборка, охватывающая только порядка 10^{10} диаграмм из общего количества около $3 \cdot 10^{64}$, дает возможность с высокой точностью получить комбинаторные весовые коэффициенты различных способов сцепления фейнмановских траекторий, а также распределения по спиновым состояниям. При конечных температурах процедура статистического расчета в целом остается принципиально точной независимо от объема выборки из линейной комбинации на каждом шаге метода Монте-Карло, так как на последующих шагах статистика обогащается независимыми выборками. Это позволяет проводить минимальные выборки на каждом шаге и фактически снять ограничения на число частиц в системе.

Разработанный метод позволил численно рассчитать все комбинаторные весовые коэффициенты многочастичных обменных интегралов и соответствующие им распределения по спиновым состояниям в системах до 50 электронов, а также выполнить моделирование водородной плазмы со 100 электронами в ячейке периодичности. Существенной особенностью разработанной методики является то, что моделирование методом Монте-Карло оказывается возможным даже тогда, когда слишком большое число частиц не позволяет явно вычислить все комбинаторные весовые коэффициенты — принципиально точная процедура моделирования может быть реализована в конечных выборках перестановок.

Анализ результатов свидетельствует о взаимной компенсации положительных и отрицательных вкладов в статистическую сумму как об основном механизме формирования спинового состояния в системе фермионов при конечных температурах. Уменьшение спина при охлаждении системы происходит в результате частичной компенсации состояний с большими значениями S отрицательными вкладами от диаграмм с длинными циклами сцепленных траекторий. Статистический вес таких диаграмм растет при охлаждении системы.

Расчеты на микроскопическом уровне, представ-

ленные в данной работе, выполнены в условиях, представляющих существенные трудности для традиционных подходов. Сильные межчастичные корреляции и квантовый характер движения электронов являются здесь определяющими. Несмотря на дальнедействующий характер кулоновского взаимодействия, в этих условиях оно сильно экранировано и становится эффективно близкодействующим. Это позволяет проводить расчеты со сравнительно небольшими ячейками периодичности. Несмотря на относительно высокую температуру, энергетические характеристики плотной плазмы формируются на малых межчастичных расстояниях, на которых квантовый характер движения электронов является определяющим. Понижение плотности плазмы не делает ее при этих температурах более «классической», так как энергетика плазмы продолжает формироваться на малых межчастичных расстояниях — даже тогда, когда формальный критерий на основе тепловой длины волны де Бройля предсказывает классический режим.

Движение частиц в плотной плазме сильно скоррелировано, однако радиусы корреляций невелики и сравнимы с атомарными размерами. Радиусы корреляций в плотной водородной плазме уменьшаются с ростом температуры, т. е. меняются в противоположную сторону по отношению к радиусу Дебая в разреженной ионной плазме. Квантовый характер движения электронов делает межэлектронные корреляции менее чувствительными к вариациям температуры. Наиболее чувствительны к температуре корреляции пары протон–протон. В плотной плазме спаривание спинов электронов начинается уже при охлаждении до температуры порядка нескольких сот тысяч градусов.

ЛИТЕРАТУРА

1. N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, and H. A. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
2. In *International Thermonuclear Experimental Reactor (ITER)*, Int. Atomic Energy Agency, Vienna (1990–1993).
3. P. Debye and E. Huckel, *Phys. Z.* **24**, 185 (1923).
4. J. E. Mayer, *J. Chem. Phys.* **18**, 1426 (1950).
5. E. Salpeter, *Ann. Phys.* **5**, 183 (1958).
6. E. J. Meeron, *J. Chem. Phys.* **28**, 630 (1958).
7. G. Stell and J. L. Lebowitz, *J. Chem. Phys.* **49**, 3706 (1968).

8. H. L. Friedman, *Mol. Phys.* **2**, 23 (1959).
9. Г. А. Мартынов, *УФН* **91**, 455 (1967).
10. J. G. Kirkwood and J. C. Poirier, *J. Phys. Chem.* **58**, 591 (1954).
11. J. C. Rasaiah and H. L. Friedman, *J. Chem. Phys.* **48**, 2742 (1968); **50**, 3965 (1969).
12. D. D. Carley, *J. Chem. Phys.* **46**, 3783 (1967).
13. D. Henderson and L. Blum, *Mol. Phys.* **40**, 1509 (1980).
14. E. Waisman and J. L. Lebowitz, *J. Chem. Phys.* **52**, 4307 (1970).
15. В. М. Замалин, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, *Метод Монте-Карло в статистической термодинамике*, Наука, Москва (1977).
16. П. Н. Воронцов-Вельяминов, А. М. Ельяшевич, А. К. Крон, *Электрохимия* **2**, 708 (1966).
17. П. Н. Воронцов-Вельяминов, А. М. Ельяшевич, *Электрохимия* **4**, 1430 (1968).
18. D. N. Card and J. P. Valleau, *J. Chem. Phys.* **52**, 6232 (1970).
19. P. N. Vorontsov-Velyaminov, A. M. Eliashevich, J. C. Rasaiah, and H. L. Friedman, *J. Chem. Phys.* **52**, 1013 (1970).
20. D. J. Adams and I. R. McDonald, *J. Phys. C* **7**, 2761 (1974).
21. Ch. Margheritis and C. Sinistri, *Z. Naturforsch. A* **30**, 83 (1975).
22. G. Ciccotti and G. Jacucci, *Phys. Rev. A* **13**, 426 (1976).
23. J. C. Rasaiah, D. N. Card, and J. P. Valleau, *J. Chem. Phys.* **56**, 248 (1972).
24. В. П. Часовских, П. Н. Воронцов-Вельяминов, *ТВТ* **14**, 379 (1976).
25. П. Н. Воронцов-Вельяминов, В. П. Часовских, *Вестник ЛГУ* **10**, вып. 2, 30 (1975).
26. Е. В. Зеленер, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, *ТВТ* **11**, 922 (1973).
27. П. Н. Воронцов-Вельяминов, В. К. Шифф, *ТВТ* **15**, 1137 (1977).
28. П. Н. Воронцов-Вельяминов, А. М. Ельяшевич, Л. А. Моргенштерн, В. П. Часовских, *ТВТ* **8**, 277 (1970).
29. П. Н. Воронцов-Вельяминов, В. П. Часовских, *ТВТ* **13**, 1153 (1975).
30. П. Н. Воронцов-Вельяминов, В. К. Шифф, *Деп. в ВИНТИ* 12.12.78, № 3783-78.
31. П. Н. Воронцов-Вельяминов, В. К. Шифф, *Деп. в ВИНТИ* 09.03.79, № 2086-79.
32. В. К. Шифф, *Деп. в ВИНТИ* 15.07.80, № 3074-80.
33. В. К. Шифф, *ТВТ* **24**, 1020 (1986).
34. В. К. Шифф, *ТВТ* **26**, 1072 (1988).
35. D. Wolf, P. Keblinski, S. R. Phillpot, and J. Eggebrecht, *J. Chem. Phys.* **110**, 8254 (1999).
36. J. M. Caillol, *J. Chem. Phys.* **99**, 8953 (1993); **111**, 6528 (1999).
37. C. Caccamo and G. Malescio, *J. Chem. Phys.* **90**, 1091 (1989).
38. J. P. Valleau, *J. Chem. Phys.* **95**, 584 (1991).
39. J. P. Valleau, *J. Comp. Phys.* **96**, 193 (1991).
40. J. M. Caillol, *J. Chem. Phys.* **100**, 2161 (1994).
41. Y. Guissani and B. Guillot, *J. Chem. Phys.* **101**, 490 (1994).
42. G. Orkoulas and A. Z. Panagiotopoulos, *J. Chem. Phys.* **101**, 1452 (1994).
43. G. Manificat and J.-M. Caillol, *J. Chem. Phys.* **103**, 4266 (1995).
44. Ph. J. Camp and G. N. Patey, *J. Chem. Phys.* **111**, 9000 (1999).
45. П. Н. Воронцов-Вельяминов, С. В. Шевкунов, *Физика плазмы* **4**, 1354 (1978).
46. С. В. Шевкунов, П. Н. Воронцов-Вельяминов, *ТВТ* **21**, 625 (1983).
47. С. В. Шевкунов, П. Н. Воронцов-Вельяминов, *ТВТ* **20**, 1025 (1982).
48. С. В. Шевкунов, П. Н. Воронцов-Вельяминов, *Деп. в ВИНТИ*, № 2652-79 (1979).
49. С. В. Шевкунов, П. Н. Воронцов-Вельяминов, *Хим. физика* **1**, 83 (1983).
50. С. В. Шевкунов, П. Н. Воронцов-Вельяминов, Н. Б. Громова, *ТВТ* **24**, 998 (1986).
51. A. A. Martsinovski, S. V. Shevkunov, and P. N. Vorontsov-Velyaminov, *Mol. Simulation* **6**, 143 (1991).

52. С. В. Шевкунов, ТВТ **31**, 704 (1993).
53. С. В. Шевкунов, ЖЭТФ **104**, 3032 (1993).
54. J.-M. Caillol and J.-J. Weis, J. Chem. Phys. **102**, 7610 (1995).
55. A. Matro and D. L. Freeman, J. Chem. Phys. **104**, 8690 (1996).
56. K. S. Pitzer, J. Chem. Phys. **104**, 6724 (1996).
57. Р. П. Фейнман, А. Р. Хиббс, *Квантовая механика и интегралы по траекториям*, Мир, Москва (1968) [R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York (1965)].
58. L. D. Fosdick and H. F. Jordan, Phys. Rev. **143**, 58 (1966).
59. H. F. Jordan and L. D. Fosdick, Phys. Rev. **171**, 128 (1968).
60. В. М. Замалин, Г. Э. Норман, Ж. вычислит. матем. и матем. физ. **13**, 408 (1973).
61. В. С. Филинов, ТВТ **11**, 871 (1973); **13**, 251 (1975); **14**, 245 (1976).
62. V. S. Filinov, Phys. Lett. A **54**, 259 (1975).
63. V. S. Filinov and G. E. Norman, Phys. Lett. A **55**, 219 (1975).
64. K. S. Schweizer, R. M. Stratt, D. Chandler, and P. G. Wolynes, J. Chem. Phys. **75**, 1347 (1981).
65. M. Imada, J. Phys. Soc. Jap. **53**, 2861 (1984).
66. D. Chandler and P. G. Wolynes, J. Chem. Phys. **74**, 4078 (1981).
67. E. L. Pollock and D. M. Ceperley, Phys. Rev. B **30**, 2555 (1984).
68. S. R. White and J. W. Wilkins, Phys. Rev. B **37**, 5024 (1988).
69. H. Q. Lin and J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **34**, 1964 (1986).
70. Ch. Chakravarty, J. Chem. Phys. **99**, 8038 (1993).
71. P. Beran, Phys. Rev. B **59**, 9725 (1999).
72. M. Skorobogatiy and J. D. Joannopoulos, Phys. Rev. B **60**, 1433 (1999).
73. P.-N. Roy and G. A. Voth, J. Chem. Phys. **110**, 3647 (1999).
74. P.-N. Roy, S. Jang, and G. A. Voth, J. Chem. Phys. **111**, 5303 (1999).
75. E. V. Shuryak and O. V. Zhirov, Nucl. Phys. B **242**, 393 (1984).
76. L. M. Sese and R. Ledesma, J. Chem. Phys. **102**, 3776 (1995).
77. C. Chakravarty, J. Chem. Phys. **102**, 956 (1995).
78. Y. J. Wong and G. V. Chester, Phys. Rev. B **37**, 9590 (1988).
79. A. P. Lyubartsev and P. N. Vorontsov-Velyaminov, Phys. Rev. A **48**, 4075 (1993).
80. С. В. Шевкунов, Деп. ВИНТИ, № 6370-B87 (1987).
81. С. В. Шевкунов, ЖЭТФ **118**, 36 (2000).
82. С. В. Шевкунов, в сб. *Современные проблемы статистической физики*, под ред. И. Р. Южновского, Наукова думка, Киев (1989), т. 1, с. 379.
83. С. В. Шевкунов, ДАН **369**, 43 (1999).
84. С. В. Шевкунов, ТВТ **29**, 45 (1991).
85. S. V. Shevkunov and P. N. Vorontsov-Velyaminov, Mol. Simulation **7**, 249 (1991).
86. Г. Вейль, *Теория групп и квантовая механика*, Мир, Москва (1983).
87. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1974).