

ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В ЭЛЕКТРОННОМ ГАЗЕ. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ ИНТЕГРАЛОВ ПО ТРАЕКТОРИЯМ ФЕЙНМАНА

*С. В. Шевкунов**

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

Поступила в редакцию 23 декабря 2005 г.

Термически возбужденные квантовые состояния электронного газа в трехмерном пространстве на нейтрализующем фоне в области значений радиуса Вигнера – Зейтца $5 < r_s < 15$ моделируются в терминах интегралов по траекториям с явным учетом кулоновского и обменного взаимодействий. Численный расчет выполнен методом Монте-Карло с включением перестановочной симметрии и спиновой переменной. Проанализирована эволюция пространственных корреляционных функций электронов с вариациями температуры и плотности системы. В области низких плотностей квантовые эффекты приводят к ослаблению пространственных корреляций, в то время как в области высоких плотностей, наоборот, к их усилению. Граница между состояниями с противоположными эффектами для электронов отвечает плотности примерно $2.5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$. На диаграмме плотность – температура определено положение границы между флюидным и газоподобным состояниями системы. Слабая анизотропия многочастичных корреляций приводит к усилению коллективных сферических мод во флюидном состоянии системы. Сильная зависимость от температуры эффективного псевдопотенциала рассеяния электронов на малых расстояниях обусловлена обменными эффектами. Характерный радиус экранированных межэлектронных взаимодействий в области сильных корреляций отклоняется от зависимости Томаса – Ферми (пропорциональной $\sqrt{r_s}$) и приближается к линейной по r_s зависимости. На малых расстояниях обмен приводит к существенному отклонению эффективного взаимодействия от потенциала Юкавы, полученного в приближении среднего поля. Кулоновское взаимодействие способно повысить уровень Ферми на порядок и более, причем эффект усиливается с понижением плотности.

PACS: 52.65.Pp, 61.20.Ja

1. ВВЕДЕНИЕ

Относительно высокая плотность электронов проводимости в металлах обуславливает высокие (по сравнению с тепловой энергией) значения энергии Ферми и статистическое распределение, близкое к основному квантовому состоянию многоэлектронной системы. В этих условиях кулоновское взаимодействие между электронами, а также эффекты, связанные с конечной температурой, выражены слабо и могут учитываться приближенно как малые поправки. Присутствие сильного периодического поля кристаллической решетки упрощает описание электронной системы: пространственная

симметрия решений уравнения Шредингера [1] позволяет провести классификацию волновых функций электронов проводимости в терминах зон Бриллюэна, получить плотность состояний, распределение энергии в обратном пространстве, построить поверхность Ферми. Наряду с этим значительный интерес для теории представляют системы, в которых электронный газ находится в слабонеоднородном поле, а его плотность на несколько порядков ниже, чем в металлах. Близкие к этим условия реализуются в полупроводниках с низкой концентрацией электронов в зоне проводимости в области температур, при которых среднестатистический размер волновых пакетов делокализованных электронов превышает характерный размер пространственной неоднородности кристаллической решетки. Наряду

*E-mail: root@svsh.tu.neva.ru

с трехмерным электронным газом теоретический интерес представляет также двумерный электронный газ, примером которого являются электроны в выращиваемых на подложке методом эпитаксии гетероструктурах типа GaAs/GaAlAs [2–5], а также на поверхности жидкого гелия [6].

В слабонеоднородном поле движение электронов направляется в основном межэлектронными взаимодействиями и обменными эффектами, которые в этом случае являются существенными и должны описываться достаточно детально. В невырожденном или находящемся на границе вырождения электронном газе межэлектронные корреляции при понижении плотности становятся сильно зависящими от температуры, причем с уменьшением плотности пространственные корреляции не ослабевают, как в системах электронейтральных частиц, а наоборот, усиливаются. Усиление корреляций приводит к формированию дальнего порядка, и электронный газ структурируется в кристалл Вигнера с объемно-центрированной кубической решеткой в трехмерном случае [7]. Плавление кристалла Вигнера при увеличении плотности происходит даже при нулевой абсолютной температуре и является сугубо квантовым эффектом, связанным с увеличением энергии Ферми по сравнению с энергией кулоновского взаимодействия.

В основе макроскопических свойств неидеальных систем лежат межчастичные корреляции. Электронный газ на однородном нейтрализующем фоне представляет простейшую модель для исследования влияния термических флуктуаций на пространственные корреляции электронов. Последнее время основные усилия в исследовании этой модели были сосредоточены в области малых плотностей. В то же время область средних плотностей между кристаллическим состоянием Вигнера и сильновырожденным состоянием электронов проводимости в металлах изучена менее подробно. Если проводить аналогию с характером межчастичных корреляций в молекулярных системах, то можно ожидать, что область средних плотностей электронного газа соответствует области между обычным газообразным и кристаллическим состояниями. Полная аналогия здесь невозможна в силу того, что при увеличении плотности квантовые эффекты в электронном газе приводят к эффективному «разогреву» (увеличению энергии Ферми) электронов, что оказывает разрушительное действие на пространственную упорядоченность, в то время как в системах классических частиц увеличение плотности, как правило, приводит к усилению межчастичных корреляций и

большей степени упорядочения. В области средних плотностей следует ожидать, что характер межэлектронных корреляций близок к корреляциям в обычных жидкостях. Принципиальный интерес представляют положение границ этой области и роль квантовых эффектов.

Вычисление равновесных характеристик систем сильно взаимодействующих квантовых частиц является одной из наиболее сложных проблем статистической механики. В случае заряженных частиц дальнедействующий характер кулоновских взаимодействий делает невозможным применение групповых разложений, традиционных для плотных газов [8–10], а в области сильных корреляций невозможно применение приближений теории среднего поля. В плотном электронном газе энергия системы формируется в основном на малых межчастичных расстояниях, где квантовый характер движения имеет ключевое значение.

Трудности квантово-статистического описания многочастичных квантовых систем стимулируют создание различных приближенных подходов. Наиболее известным примером приближения теории среднего поля является теория функционала плотности (DFT) [11]. В этом приближении эффекты, связанные с обменом и квантовой делокализацией, выражаются феноменологическими формулами, известными как приближение локальной плотности (LDA) [11] и градиентные поправки на неоднородность пространственного распределения (GDA) [12]. Существует множество вариаций теории функционала плотности [13–16], а также родственные теории, в которых многочастичная задача заменяется движением одной квантовой частицы в некотором усредненном поле остальных частиц, а взаимодействие между электронами — взаимодействием с некоторой непрерывной средой («желе»). Одноэлектронное приближение предполагает полное отсутствие кулоновских межчастичных корреляций, которые в этом случае могут учитываться только в виде поправок. Такой подход позволяет применять формализм чисел заполнения, однако детальное описание пространственных корреляций находится за рамками одноэлектронного приближения.

В квантовом методе Монте-Карло (методе Монте-Карло для функции Грина), нацеленном на поиск основного квантового состояния, уравнение Шредингера записывается в «мнимом времени», после чего оно принимает вид уравнения диффузии, а стационарные решения становятся экспоненциально затухающими во времени с постоянной времени, зависящей от энергии состояния. «Выживает» наиболее

медленно затухающее решение, отвечающее основному квантовому состоянию. Это решение получают численным моделированием диффузии гипотетических частиц в среде с источниками и стоками, мощность которых определяется оператором потенциальной энергии [17–19]. Перестановочную симметрию в таком подходе описывают приближенно, накладывая на искомое решение условия наличия узлов в предписанных точках, положения которых находят в терминах детерминантов Слэтера для бесспиновых частиц [20–22]. Численным моделированием диффузии в мнимом времени проводится проецирование пробной волновой функции с заданной структурой узлов на искомую волновую функцию основного состояния, т. е. рассчитывается проекция искомой функции на пробную.

Формулировка квантовой механики в терминах континуальных интегралов [23] позволила построить на ее основе численный метод моделирования в квантовой статистике, свободный от одноэлектронного приближения и приближений теории среднего поля. Если в формализме Шредингера состояния квантовой системы описываются бесконечным набором волновых функций, нахождение которых в общем случае представляет колоссальные вычислительные трудности, а статистико-механический расчет при конечных температурах предполагает еще и усреднение по этим функциям, то в формулировке Фейнмана микросостояние системы задается положением виртуальных траекторий в трехмерном пространстве, а расчет равновесных средних сводится к усреднению по таким микросостояниям с известной функцией распределения. Решение уравнения Шредингера заменяется вычислением интеграла по траекториям. Квантово-механическое интегрирование и статистико-механическое суммирование по состояниям оказываются объединенными здесь в единый интеграл.

2. ПРОБЛЕМА ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА ИНТЕГРАЛА ФЕЙНМАНА

Хотя общего доказательства теоремы единственности интеграла Фейнмана до сих пор не найдено [24], по крайней мере в несингулярных полях проблема корректности определения континуального интеграла, по всей видимости, может быть принципиально решена, и актуальной задачей становится развитие методов его численного расчета. Существующие здесь препятствия подразделяются на три категории: трудности, связанные с необходи-

мостью интегрировать функционалы с осциллирующими знаками, трудности, связанные с поиском оптимальной формы записи высокотемпературных (коротковременных) матричных элементов в допредельном представлении континуального интеграла, и проблемы, связанные с учетом обмена в системе неразличимых частиц.

Интеграл Фейнмана для оператора эволюции в реальном времени определен на осциллирующих комплексных функционалах. С формальных позиций переход к квантово-статистическому описанию со статистическим оператором $\exp(-\beta\hat{H})$, где \hat{H} — оператор Гамильтона, $\beta = 1/k_B T$ — обратная температура, а k_B — постоянная Больцмана, означает замену вещественного времени t в квантовом операторе эволюции $\exp[-(i/\hbar)t\hat{H}]$ на «мнимое время» $t = -i\hbar\beta$. В результате такой замены функционалы, рассчитываемые на траекториях в фейнмановском интеграле, из комплексных и осциллирующих превращаются в вещественные и положительно определенные, и проблемы осциллирующих знаков, по крайней мере для различимых частиц, в квантовой статистике не существует, но она вновь возникает только при расчете равновесных средних в системах с обменом.

Полная волновая функция системы, состоящей из N неразличимых квантовых частиц, зависит от координатных $\{\mathbf{x}_i\}$ и спиновых $\{\sigma_i\}$ переменных. Собственная функция операторов координат, проекции спина и квадрата спина определяется соответствующими наборами собственных значений $\{\mathbf{r}_i\}$, $\{m_i\}$ и $S(S+1)$: $\psi(S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\}; \{\sigma_i\}, \{\mathbf{x}_i\})$. Можно показать [25], что суммирование по несвязанным перестановками \hat{P}_n собственным значениям $\{m_i\}$, $\{\mathbf{r}_i\}$, $S(S+1)$ диагональных элементов матрицы приводит к статистической сумме вида

$$Z = \sum_S (2S+1) \sum_n W_S \left(\hat{P}_n \right) \times \int d^N x \left\langle \{\mathbf{r}_i\} \left| \exp \left(-\beta \hat{H} \right) \right| \hat{P}_n \{\mathbf{r}_i\} \right\rangle, \quad (1)$$

где W_S — комбинаторные коэффициенты. Матричные элементы в выражении (1) записываются в виде континуальных интегралов по виртуальным траекториям $\hat{R}(t)$, соединяющим точки $R = R^{(1)} = \{\mathbf{r}_i\}$ и $R^{(n)} = \hat{P}_n \{\mathbf{r}_i\}$ в $3N$ -мерном пространстве. Только циклические траектории дают вклад в статистическую сумму:

$$Z = \sum_S (2S + 1) \int dR \sum_n W_S (\hat{P}_n) \times \int_{R^{(1)}}^{R^{(n)}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \Phi \left([\tilde{R}(t)] \right) \right) D\tilde{R}(t), \quad (2)$$

где $\Phi([\tilde{R}(t)])$ — функционал действия на траектории $\tilde{R}(t)$ с точностью до формальной замены времени t на мнимую обратную температуру, т. е. $t \rightarrow -i\hbar\beta$. Конец любой трехмерной виртуальной траектории $\mathbf{r}_i(t)$ является началом другой траектории — образуется кольцевая структура, топологически подобная графу перестановки \hat{P}_n [25, 26].

Континуальный интеграл определяется как предельный многомерный интеграл [23]:

$$\int dR \int_{R^{(1)}}^{R^{(n)}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \Phi \left([\tilde{R}(t)] \right) \right) D\tilde{R}(t) = \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\frac{M m_0}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{3NM/2} \times \int dR(1) dR(2) \dots dR(M) \times \exp \left(\frac{i}{\hbar} \Phi \left(R(1), \dots, R(M) \right) \right), \quad (3)$$

где m_0 — масса частицы,

$$R(k) \equiv \{\mathbf{r}_i(k)\} = \tilde{R}(kt/M), \quad k = 1, 2, 3, \dots, M,$$

а действие $\Phi(R(1), R(2), \dots, R(M))$ вычисляется на ломаной, соединяющей точки $R(1), R(2), \dots, R(M)$. Каждому звену такой ломаной отвечает высоко-температурный матричный элемент статистического оператора, явное выражение для которого известно [23], а траектории в целом соответствует произведение таких матричных элементов. В численных расчетах виртуальные траектории аппроксимируются ломаными с конечным числом звеньев, а интеграл Фейнмана преобразуется в обычный многомерный интеграл, который вычисляется методом Монте-Карло.

Первые попытки построения численного метода расчета термодинамических состояний на основе фейнмановских интегралов по траекториям связываются с работами Фосдика и Иордана [27, 28]. В работе [27] в интервале температур от 2 до 273 К рассчитана слэтеровская сумма системы двух атомов ${}^4\text{He}$ с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса. В работе [28] рассчитаны корреляционные функции бесспиновых бозе- и ферми-частиц.

В работах [29–37] предприняты первые попытки применения метода интегралов по траекториям для моделирования электронной компоненты в водородной плазме. Этот метод с учетом спиновой переменной электронов получил развитие в работе [38], а уравнение состояний рассчитывалось в [39].

3. СПИНОВАЯ ПЕРЕМЕННАЯ В ФОРМАЛИЗМЕ ФЕЙНМАНА ДЛЯ НЕРАЗЛИЧИМЫХ ЧАСТИЦ

Эффекты, связанные с квантово-механической неразличимостью (обменом), могут оказывать существенное влияние на формирование упорядоченных фаз в квантовых жидкостях и поэтому должны описываться достаточно детально. Представление о степени этого влияния можно получить из сравнения данных работах [40] и [41]: для бесспиновых фермионов на плоскости образование кристалла Вигнера получено квантовым методом Монте-Карло при значении радиуса Вигнера–Зейтца $r_s = 37$, а для бозонов — при $r_s = 60$.

Наличие перестановочной симметрии порождает микросостояния, в которых кольцевые фейнмановские траектории оказываются сцепленными в циклы. Каждый способ сцепления характеризуется некоторой диаграммой и комбинаторным весом. Для бесспиновых частиц вычисление комбинаторных весов диаграмм не представляет трудностей и прямое суммирование весовых коэффициентов диаграмм можно заменить блужданием по диаграммам. Проблема существенно усложняется для частиц с ненулевым спином. Хотя гамильтониан нерелятивистской системы непосредственно не действует на спиновые переменные, энергия системы существенно зависит от ее спинового состояния. Неразличимость фермионов требует, чтобы полная волновая функция системы была антисимметричной по одно-временной перестановке в паре спиновых и координатных переменных, при этом отдельно по спиновым и отдельно по координатным переменным волновая функция может обладать симметрией сложного типа, не сводящейся к простой симметрии или антисимметрии [42]. Можно показать [43], что такому требованию удовлетворяют все функции в форме билинейных комбинаций спиновых и координатных функций, полученных симметризацией операторами Юнга [42] со взаимно транспонированными схемами. В случае частиц со спином 1/2 состоянию, являющемуся собственной функцией оператора квадрата спина, однозначно соответствует опре-

деленная схема Юнга спиновой части и дуальная ей схема Юнга координатной части волновой функции. Квадрат спина системы однозначно определяет тип перестановочной симметрии координатной части волновой функции. Таким образом, результат действия гамильтониана и статистического оператора на координатные переменные существенно зависит от спинового состояния системы. Яркой иллюстрацией этой зависимости является простейшая система двух атомов водорода. В состоянии с равным нулю спином (синглетном) атомы притягиваются, формируя связанное состояние молекулы водорода, а в состоянии со спином равным единице (триплетном) расталкиваются.

Статистико-механический расчет влечет дополнительные проблемы, связанные с необходимостью суммировать по квантовым состояниям. Равновесные средние должны вычисляться в представлении полного набора линейно независимых волновых функций. Главная трудность здесь состоит не столько в симметризации по перестановкам частиц как таковой, сколько в построении полного ортогонального набора симметризованных функций. Процедура симметризации на основе операторов Юнга позволяет решить эту проблему для неразличимых частиц со спином. Каждый оператор Юнга порождает базис неприводимого представления группы перестановок и соответствующее ему подпространство симметризованных функций. Объединение таких взаимно ортогональных подпространств обладает полнотой, а их базисные функции взаимно ортогональны [43].

Хотя путь построения базисных функций на основе операторов Юнга хорошо известен, его последовательная численная реализация наталкивается на колоссальные проблемы вычислительного характера. Принципиально точный учет спиновой переменной в численных расчетах методом интегралов по траекториям представлял до последнего времени существенные трудности. В первых работах моделировались «бесспиновые электроны» [28–37], перестановочная симметрия координатной части волновой функции описывалась в терминах детерминантов Слэтера или обмен вообще игнорировался.

В работах [25, 26] для неразличимых фермионов со спином $1/2$ сформулирована принципиально точная процедура включения перестановочной симметрии в формализм интегралов по траекториям. Численный расчет смешанных квантовых состояний в системах с обменом и спиновой переменной выполнен для молекулы водорода [44, 45], для ионов лития и бериллия [46], а также для электронной пары

в термостате [47, 48]. Проблемы численного расчета интеграла Фейнмана в сингулярных полях исследовались в задачах о термически возбужденных состояниях сжатого атома водорода [49] и рассеянии позитронов на атомах гелия [50]. В работах [38, 51, 52] решена проблема вычисления весовых коэффициентов диаграмм сцепленных траекторий в системах с большим количеством частиц. Рассчитаны [38] равновесные характеристики водородной плазмы в состоянии на грани вырождения электронной компоненты, а в работе [39] разработан метод интегралов по траекториям для расчета давления.

Полный набор линейно независимых симметризованных по перестановкам волновых функций строится записью полной волновой функции нерелятивистских электронов в виде билинейной комбинаций спиновых $\chi_J^n(S, \{m_i\}; \{\sigma_i\})$ и координатных $f_J^k(S, \{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\})$ волновых функций, симметризованных юнговскими операторами со взаимно транспонированными схемами Юнга [42] и различными n - и k -размещениями аргументов в клетках схем Юнга. Суммируя диагональные матричные элементы

$$\begin{aligned} \int d^N r \langle S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} | \hat{F} | S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} \rangle = \\ = N! \sum_{\{\sigma_i = \pm 1/2\}} \tilde{\chi}(S, \{m_i\}, \{\sigma_i\}) \times \\ \times \sum_{nk} b_{nk} \chi_J^n(S, \{m_i\}; \{\sigma_i\}) \times \\ \times \int d^N r \int d^N x f(\{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\}) \hat{F} f_J^k(S, \{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\}) \quad (4) \end{aligned}$$

по несвязанным перестановкам $\{\mathbf{r}_i\}$ и $\{m_i\}$, а также по S , получаем след оператора $\hat{F} = \exp(-\beta \hat{H})$ — статистическую сумму системы [25, 26]:

$$\begin{aligned} Z = \sum_S (2S + 1) \times \\ \times \left(\sum_{\{\sigma_i = \pm 1/2\}} \tilde{\chi}(S, \{m_i\}; \{\sigma_i\}) \times \right. \\ \left. \times \sum_{nk} b_{nk} \chi_J^n(S, \{m_i\}; \{\sigma_i\}) \right) G(\hat{J}(S)) = \\ = \sum_S (2S + 1) \tilde{W}_S G(\hat{J}(S)), \quad (5) \end{aligned}$$

где $\hat{J}(S)$ — операторы симметрии Юнга. Весовые коэффициенты

$$\tilde{W}_S = \sum_{\{\sigma_i = \pm 1/2\}} \tilde{\chi}(S, \{m_i\}; \{\sigma_i\}) \times \sum_{nk} b_{nk} \chi_J^n(S, \{m_i\}; \{\sigma_i\}) \quad (6)$$

и линейный функционал

$$G(\hat{P}_k) = \int d^N r \int d^N x f^* (\{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\}) \times \hat{F} f (\{\mathbf{r}_i\}; \hat{P}_k \{\mathbf{x}_i\}) \quad (7)$$

определены в пространстве операторов перестановок и их линейных комбинаций. Можно показать [25, 26], что

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_S (2S + 1) \sum_n^S (-1)^{c(n)} \times \int d^N r \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{P}_n \{\mathbf{r}_i\} \rangle, \quad (8)$$

где верхний индекс «S» у знака суммы означает, что суммирование проводится по всем перестановкам \hat{P}_n , содержащимся в юнговском симметризаторе, отвечающем спину S, а $c(n)$ — сумма четностей перестановок в столбцах схемы Юнга. Редукция к немым (с нумерованными вершинами) графам осуществляется численно на компьютере: графы, отвечающие перестановкам одного и того же класса и характеризующиеся графом-представителем данного класса \hat{P}_k , группируются с общим множителем $\omega_S(k)$:

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_S (2S + 1) \sum_k \omega_S(k) \times \int d^N r \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{P}_k \{\mathbf{r}_i\} \rangle = \frac{1}{N!} \sum_k \omega(k) \int d^N r \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{P}_k \{\mathbf{r}_i\} \rangle, \quad (9)$$

где

$$\omega(k) = \sum_S (2S + 1) \omega_S(k)$$

— сумма по всем спиновым состояниям. Каждый класс k представлен немым графом, который, в свою очередь, однозначно задается разбиением на немые циклы:

$$Z = \frac{1}{N!} \sum_{\{\nu_i\}} \omega(\{\nu_i\}) \times \int d^N r \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{P}_{\{\nu_i\}} \{\mathbf{r}_i\} \rangle, \quad (10)$$

где ν_i — количество циклов из i вершин.

Расчет управляющих таблиц $\omega(\{\nu_i\})$ прямым суммированием всех перестановок, содержащихся в операторе симметрии Юнга, возможен только для малых чисел частиц ($N < 10$). В работе [38] это ограничение снято заменой прямого суммирования по перестановкам расчетом в конечных случайных выборках. Осуществляется блуждание по классам перестановок. В каждом таком классе случайная равновероятная выборка перестановок проводится из множества всех перестановок \hat{P}_n с проверкой условия их одновременной принадлежности данному классу $\{\nu_i\}$ и юнговскому оператору $\hat{J}(S)$. Перестановка \hat{P}_n получает весовой коэффициент

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

где $c(k)$, $c(l)$ — четности перестановок вдоль столбцов схемы Юнга, если оба условия выполнены, и $\alpha_{S, \{\nu_i\}}(n) = 0$, если хотя бы одно из условий нарушено. Несмещенная оценка комбинаторного коэффициента $\omega_S(\{\nu_i\})$ равна

$$\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l) = \frac{N!}{l} \sum_{k=1}^l \alpha_{S, \{\nu_i\}}(n_k), \quad (11)$$

где l — объем выборки $\{n_k\}$. Приближенность оценки (11) для $\omega_S(\{\nu_i\})$, полученной в конечной выборке $\{n_k\}$ на единственном шаге марковского процесса блужданий в пространстве фейнмановских траекторий, 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 [38],

$$\begin{aligned} \omega_S(\{\nu_i\}) &= \frac{1}{l(N!)^{l-1}} \sum_{\{n_k\}} \sum_{k=1}^{l\{\nu_i\}} \alpha_S(n_k) = \\ &= \frac{1}{l(N!)^{l-1}} \sum_{\{n_k\}} \sum_{k=1}^l \alpha_{S, \{\nu_i\}}(n_k) = \\ &= \frac{1}{(N!)^{2l-1}} \sum_{\{n_k\}} \tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l), \quad (12) \end{aligned}$$

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. После подстановки выражения (12) в (10) и представления матричного элемента под интегралом в виде произведения высокотемпературных матричных элементов статистическая сумма принимает вид

$$\begin{aligned}
Z = & \frac{1}{(N!)^{2l}} \sum_{\{\nu_i\}} \sum_{\{n_k\}} \sum_S (2S+1) \tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l) \times \\
& \times \int d^N r(1) d^N r(2) \dots d^N r(M) \langle \{\mathbf{r}_i(M)\} \rangle \times \\
& \times \left| \exp\left(-\frac{\beta \hat{H}}{M}\right) \right| \langle \{\mathbf{r}_i(1)\} \rangle \langle \{\mathbf{r}_i(1)\} \rangle \left| \exp\left(-\frac{\beta \hat{H}}{M}\right) \right| \times \\
& \times \langle \{\mathbf{r}_i(2)\} \rangle \dots \langle \{\mathbf{r}_i(M-1)\} \rangle \times \\
& \times \left| \exp\left(-\frac{\beta \hat{H}}{M}\right) \right| \hat{\Pi}_{\{\nu_i\}} \langle \{\mathbf{r}_i(M)\} \rangle. \quad (13)
\end{aligned}$$

Выражение (13) является точным, несмотря на то что оно написано в терминах коэффициентов $\tilde{\omega}_S(\{\nu_i\}, \{n_k\}, l)$, рассчитываемых в конечных выборках. Причина этого в том, что формула (13) охватывает все такие выборки. С учетом явного вида [23] высокотемпературных матричных элементов численный расчет канонических средних осуществляется блужданием в пространстве траекторий $\{\mathbf{r}_i(j)\}$ и всех способов их сцепления $\{\nu_i\}$ с функцией распределения

$$\begin{aligned}
\omega(x) = & \tilde{\omega}(\{\nu_i\}, \{n_k\}, M) a(\{\mathbf{r}_i(j)\}, \{\nu_i\}, \beta) \propto \\
& \propto \tilde{\omega}(\{\nu_i\}, \{n_k\}, M) \times \\
& \times \exp \left[- \left(\frac{M m_0}{2\beta \hbar^2} \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^M [\mathbf{r}_i(j+1) - \mathbf{r}_i(j)]^2 \right) + \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{\beta}{M} \sum_{j=1}^M V(\{\mathbf{r}_i(j)\}) \right) \right], \quad (14)
\end{aligned}$$

где $V(\{\mathbf{r}_i\})$ — оператор потенциальной энергии. Выражение (14) является точным в пределе $M \rightarrow \infty$. В численных расчетах задают конечное, но достаточно большое значение M . Шаги по сдвигу вершин, а также сцеплению и расцеплению траекторий проводятся на компьютере в соответствии со стандартной процедурой Метрополиса [29]. Расчет равновесных средних осуществляется усреднением по последовательности полученных таким образом конфигураций. Объем случайной выборки обычно составляет от нескольких миллионов до сотен миллионов конфигураций. Проблема «отрицательных знаков» решалась вытеснением изображающей точки из областей конфигурационного пространства со скомпенсированными вкладами методом, подробно описанным в работе [38].

4. ЭСТИМАТОР КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ

В формализме интегралов по траекториям эстиматором квантово-механической наблюдаемой оператора \hat{A} называются матричные элементы соответствующего ему диагонального в симметризованном по перестановкам координатном представлении оператора \hat{B} , такого что

$$\text{Tr} \left[\hat{A} \exp(-\beta \hat{H}) \right] = \text{Tr} \left[\hat{B} \exp(-\beta \hat{H}) \right]. \quad (15)$$

Благодаря диагональности оператора \hat{B} только диагональные матричные элементы статистического оператора $\exp(-\beta \hat{H})$ и, значит, только замкнутые (циклические) фейнмановские траектории дают вклад в (15). Расчет равновесных средних сводится к усреднению эстиматоров только по замкнутым траекториям и, следовательно, может выполняться параллельно для всех величин, функциональный вид эстиматоров которых известен.

В чистом квантовом состоянии с волновой функцией $\Psi(\{\mathbf{x}_i\})$ бинарная корреляционная функция электронов имеет вид

$$\begin{aligned}
\rho_2(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = & \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \dots d\mathbf{x}_N \Psi(\{\mathbf{x}_i\}) \times \\
& \times \sum_{k,l=1}^N \delta(\mathbf{x}_k - \mathbf{r}_a) \delta(\mathbf{x}_l - \mathbf{r}_b) \Psi^*(\{\mathbf{x}_i\}), \quad (16)
\end{aligned}$$

где $\delta(\mathbf{x})$ — функция Дирака. Проблема отсутствия самосопряженного оператора для квантово-механической наблюдаемой (16) решается с помощью вспомогательной функции $\rho_\omega(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$, для которой квантово-механический оператор существует:

$$\begin{aligned}
\rho_\omega(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = & \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \dots d\mathbf{x}_N \Psi(\{\mathbf{x}_i\}) \frac{1}{\omega^2} \times \\
& \times \sum_{k,l=1}^N \theta_\omega(\mathbf{x}_k - \mathbf{r}_a) \theta_\omega(\mathbf{x}_l - \mathbf{r}_b) \Psi^*(\{\mathbf{x}_i\}), \quad (17)
\end{aligned}$$

где $\theta_\omega(\mathbf{x}) = 1$ в ω -окрестности точки $\mathbf{x} = 0$ и $\theta_\omega(\mathbf{x}) = 0$ во всех остальных точках. С одной стороны, из сравнения выражений (16) и (17) следует, что

$$\rho_2(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \rho_\omega(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b),$$

а с другой стороны, (17) является диагональным матричным элементом оператора

$$\begin{aligned}
\hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b; \{\mathbf{x}_i\}) = & \\
= & \frac{1}{\omega^2} \sum_{k,l=1}^N \theta_\omega(\mathbf{x}_k - \mathbf{r}_a) \theta_\omega(\mathbf{x}_l - \mathbf{r}_b). \quad (18)
\end{aligned}$$

Поэтому для смешанного квантового состояния в обозначениях работы [25] имеем

$$\begin{aligned} \rho_2(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) &= \frac{\lim_{\omega \rightarrow 0} \text{Tr} \left[\hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b; \{\mathbf{x}_i\}) \exp(-\beta \hat{H}) \right]}{\text{Tr} \left[\exp(-\beta \hat{H}) \right]} = \\ &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_S \sum'_{\{m_i\}} \sum'_{\{m'_i\}} \int' d^N r \int' d^N r' \times \\ &\times \langle S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} | \hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b; \{\mathbf{x}_i\}) | S, \{m'_i\}, \{\mathbf{r}'_i\} \rangle \times \\ &\times \langle S, \{m'_i\}, \{\mathbf{r}'_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} \rangle \times \\ &\times d^N r d^N r' / \text{Tr} \left[\exp(-\beta \hat{H}) \right]. \quad (19) \end{aligned}$$

Штрихи у знаков сумм и интегралов означают, что суммирование и интегрирование проводятся по несвязанным перестановкам наборам $\{m_i\}$, $\{m'_i\}$, $\{\mathbf{r}_i\}$, $\{\mathbf{r}'_i\}$. Из-за ортогональности соответствующих спиновых функций и вследствие того, что оператор $\hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \{\mathbf{x}_i\})$ не действует на спиновые переменные, в выражении (19) отсутствуют недиагональные по S матричные элементы. Используем диагонализированную форму (7) из работы [25] для полной волновой функции

$$\begin{aligned} \Psi(S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\}; \{\sigma_i\}, \{\mathbf{x}_i\}) &= \\ &= \sum_{n=1}^{N!} (-1)^{g(n)} \tilde{\chi}(S, \{m_i\}; \hat{P}_n \{\sigma_i\}) f(\{\mathbf{r}_i\}, \hat{P}_n \{\mathbf{x}_i\}) = \\ &= \sum_{n=1}^{N!} (-1)^{g(n)} \tilde{\chi}(S, \hat{P}_n \{m_i\}; \{\sigma_i\}) \times \\ &\times f(\hat{P}_n \{\mathbf{r}_i\}, \{\mathbf{x}_i\}) \quad (20) \end{aligned}$$

в записи матричных элементов оператора $\hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b; \{\mathbf{x}_i\})$ в (19):

$$\begin{aligned} \rho_2(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) &= \\ &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_S \sum'_{\{m_i\}} \sum'_{\{m'_i\}} \sum_{n=1}^{N!} \sum_{k=1}^{N!} \sum_{\{\sigma_i = \pm 1/2\}} \int' d^N r \int' d^N r' \times \\ &\times (-1)^{g(n)} \tilde{\chi}(S, \hat{P}_n \{m_i\}; \{\sigma_i\}) \times \\ &\times (-1)^{g(k)} \tilde{\chi}(S, \hat{P}_k \{m'_i\}; \{\sigma_i\}) \times \\ &\times \langle \hat{P}_n \{\mathbf{r}_i\} | \hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b; \{\mathbf{x}_i\}) | \hat{P}_k \{\mathbf{r}'_i\} \rangle \times \\ &\times \langle S, \{m'_i\}, \{\mathbf{r}'_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} \rangle \times \\ &\times S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} / \text{Tr} \left[\exp(-\beta \hat{H}) \right], \quad (21) \end{aligned}$$

где $\tilde{\chi}$ и f — спиновая и координатная части. В каждом слагаемом по n и k в (21) проведем замену переменных суммирования,

$$\{\tilde{m}_i\} \equiv \hat{P}_n \{m_i\}, \quad \{\tilde{m}'_i\} \equiv \hat{P}_k \{m'_i\}$$

и интегрирования,

$$\{\tilde{\mathbf{r}}_i\} \equiv \hat{P}_n \{\mathbf{r}_i\}, \quad \{\tilde{\mathbf{r}}'_i\} \equiv \hat{P}_k \{\mathbf{r}'_i\},$$

а также воспользуемся свойством антисимметрии полной волновой функции в матричных элементах $\exp(-\beta \hat{H})$ относительно этих перестановок, после чего зависимость слагаемых от n и k аннулируется и их можно объединить с множителем $(N!)^2$:

$$\begin{aligned} \rho_2(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) &= \\ &= \lim_{\omega \rightarrow 0} (N!)^2 \sum_S \sum'_{\{\tilde{m}_i\}} \sum'_{\{\tilde{m}'_i\}} \sum_{\{\sigma_i = \pm 1/2\}} \int' d^N \tilde{r} \int' d^N \tilde{r}' \times \\ &\times \tilde{\chi}(S, \{\tilde{m}_i\}; \{\sigma_i\}) \tilde{\chi}(S, \{\tilde{m}'_i\}; \{\sigma_i\}) \times \\ &\times \langle \{\tilde{\mathbf{r}}_i\} | \hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b; \{\mathbf{x}_i\}) | \{\tilde{\mathbf{r}}'_i\} \rangle \times \\ &\times \langle S, \{\tilde{m}'_i\}, \{\tilde{\mathbf{r}}'_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | S, \{\tilde{m}_i\}, \{\tilde{\mathbf{r}}_i\} \rangle / \text{Tr} \left[\exp(-\beta \hat{H}) \right] = \\ &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_S \sum'_{\{\tilde{m}_i\}} \int' d^N \tilde{r} \int' d^N \tilde{r}' \langle \{\tilde{\mathbf{r}}_i\} | \times \\ &\times \hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b; \{\mathbf{x}_i\}) | \{\tilde{\mathbf{r}}'_i\} \rangle \langle S, \{\tilde{m}_i\}, \{\tilde{\mathbf{r}}_i\} | \times \\ &\times \exp(-\beta \hat{H}) | S, \{\tilde{m}'_i\}, \{\tilde{\mathbf{r}}'_i\} \rangle / \text{Tr} \left[\exp(-\beta \hat{H}) \right]. \quad (22) \end{aligned}$$

При написании последнего выражения использованы соотношения (10)–(12) из работы [25] и выполнено деление на $N!$ с удалением штриха с интеграла по \tilde{r}' .

Матричные элементы оператора $\hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b; \{\mathbf{x}_i\})$ в несимметризованном координатном представлении в пределе $\omega \rightarrow 0$ имеют вид

$$\begin{aligned} \lim_{\omega \rightarrow 0} \langle \{\mathbf{r}_i\} | \hat{\Theta}_\omega(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b; \{\mathbf{x}_i\}) | \{\mathbf{r}'_i\} \rangle &= \\ &= \sum_{k,l=1}^N \delta(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_a) \delta(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_b) \prod_i \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_i), \quad (23) \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
\rho_2(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) &= \sum_S \sum'_{\{m_i\}} \int' d^N r \sum_{k,l=1}^N \delta(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_a) \delta(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_b) \times \\
&\quad \times \langle S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) \times \\
&\quad \times | S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} \rangle / \text{Tr} \left[\exp(-\beta \hat{H}) \right] = \\
&= \sum_S (2S+1) \sum_n W_S(\hat{P}_n) \int d^N r \times \\
&\quad \times \sum_{k,l=1}^N \delta(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_a) \delta(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_b) \times \\
&\quad \times \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{P}_n \{ \mathbf{r}_i \} \rangle / \text{Tr} \left[\exp(-\beta \hat{H}) \right]. \quad (24)
\end{aligned}$$

При написании последнего выражения нужно повторить те же выкладки, что и при получении формулы (9) в работе [25]. В соответствии с признаком (15), множитель перед матричными элементами статистического оператора является эстиматором бинарной корреляционной функции

$$\rho_2(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b; \{\mathbf{r}_i\}) = \sum_{k,l=1}^N \delta(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_a) \delta(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_b), \quad (25)$$

который в допредельной (discrete) форме континуального интеграла приобретает вид функции положения вершин $\{\mathbf{r}_i(j)\}$ ломаных траекторий:

$$\begin{aligned}
\rho_2(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b; \{\mathbf{r}_i(j)\}) &= \\
&= \frac{1}{M} \sum_{k,l=1}^N \sum_{j=1}^M \delta(\mathbf{r}_k(j) - \mathbf{r}_a) \delta(\mathbf{r}_l(j) - \mathbf{r}_b). \quad (26)
\end{aligned}$$

В однородной изотропной системе бинарная корреляционная функция зависит только от расстояния $r = |\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|$,

$$\rho_2(r) = \frac{1}{4\pi r^2 \rho} \int d\mathbf{r}_a d\mathbf{r}_b \delta(r - |\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|) \rho_2(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b), \quad (27)$$

и нормирована на плотность электронов $\rho = N/V$ в объеме V :

$$\frac{1}{V} \int_0^\infty dr 4\pi r^2 \rho_2(r) = \rho. \quad (28)$$

5. ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТРАЕКТОРИЙ НА НЕЙТРАЛИЗУЮЩЕМ ФОНЕ

Расчет поля фонового заряда в системе с периодическими граничными условиями сводится к вычислению электрического потенциала в центре равномерно заряженной ячейки кубической формы с

ребром a и зарядом Q . Потенциал поля в центре может быть представлен в виде суммы поля зарядов внутри сферы, вписанной в кубическую ячейку, и остальных зарядов:

$$\varphi_+ = \frac{Q}{a} \left[\frac{\pi}{2} + \left(1 - \frac{\pi}{6}\right) \int_\omega \frac{1}{r} \frac{dV}{V_\omega} \right], \quad (29)$$

где r — расстояние от центра ячейки до элемента объема dV , а объемный интеграл вычисляется по области ω , имеющей объем V_ω . Область ω есть внутренность кубической ячейкой с единичным ребром за вычетом сферы, вписанной в эту ячейку. Объемный интеграл в выражении (29) рассчитан численно:

$$\begin{aligned}
\varphi_+ &= \frac{Q}{a} \left[\frac{\pi}{2} + \left(1 - \frac{\pi}{6}\right) \lim_{\Delta V_i \rightarrow 0} \sum_i \frac{1}{r_i} \frac{\Delta V_i}{V_\omega} \right] = \\
&= \frac{Q}{a} \left[\frac{\pi}{2} + \left(1 - \frac{\pi}{6}\right) \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_\omega \right]. \quad (30)
\end{aligned}$$

Расчет среднего $\langle 1/r \rangle_\omega$ выполнен методом Монте-Карло в равномерной выборке из 10^{10} точек. Для контроля точности параллельно с расчетом (30) проводился стохастический расчет объема $V_\omega = 1 - \pi/6$ по формуле

$$V_\omega = \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\frac{\gamma_\omega}{\gamma} \right),$$

где γ — объем выборки, а γ_ω — количество точек, попавших в область ω . Накопление сумм для вычисления интеграла в (29) продолжалось до тех пор, пока рассчитанное значение $\tilde{\pi} = 6(1 - \gamma_\omega/\gamma)$ не совпадало с точным значением числа π в восьми значащих цифрах. В расчетах получено $\tilde{\pi} = 3.1415927$ при точном значении $\pi = 3.1415926536\dots$, а соответствующее значение потенциала в этой выборке $\varphi_+ = 2.380077Q/a$. Энергия взаимодействия электрона с полем нейтрализующего фона равна

$$u_+ [\text{эВ}] = -34.2713N/a [\text{Å}],$$

где N — количество электронов в ячейке периодичности.

Равновесная средняя потенциальная энергия электрона рассчитывалась как

$$u = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i \neq j} \frac{1}{M} \sum_{l=1}^M \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i(l) - \mathbf{r}_j(l)|} \right\rangle + u_+, \quad (31)$$

где e — элементарный заряд, $\langle \dots \rangle$ означает каноническое среднее, которое вычислялось в пространстве

фейнмановских траекторий с функцией распределения

$$\omega(x) \propto \tilde{\omega}(\{\nu_i\}, \{n_k\}, M) \times \exp \left\{ - \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^M \frac{m_e M}{2\beta\hbar^2} [\mathbf{r}_k(l) - \mathbf{r}_k(l+1)]^2 - \frac{\beta}{M} \sum_{i<k=1}^N \sum_{l=1}^M \frac{e^2}{|\mathbf{r}_k(l) - \mathbf{r}_i(l)|} - \beta N e \varphi_+ \right\}, \quad (32)$$

$\varphi_+ = u_+/e$, а $\{\mathbf{r}_i\} \equiv \mathbf{r}_i(1), \mathbf{r}_i(2), \dots, \mathbf{r}_i(M)$ — последовательность M вершин ломаной, представляющей i -ю виртуальную траекторию в системе N электронов. Равновесная средняя кинетическая энергия электрона рассчитывалась через основной эстиматор кинетической энергии:

$$\langle k \rangle = \frac{3}{2} M k_B T - \frac{m_e M}{2N\beta^2\hbar^2} \times \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^M (\mathbf{r}_i(l) - \mathbf{r}_i(l+1))^2 \right\rangle, \quad (33)$$

где m_e — масса электрона.

6. ОБЛАСТЬ РАСЧЕТОВ

Классическая однокомпонентная плазма представляет собой наиболее грубую модель электронного газа. Эта модель состоит из одинаковых взаимодействующих точечных зарядов e ,двигающихся согласно классической статистике на нейтрализующем фоне равномерно распределенных зарядов противоположного знака. Поскольку вероятности событий в таком ансамбле зависят от температуры T и расстояний r_{ij} между частицами только в комбинации $\exp(-e^2/r_{ij}k_B T)$, все макроскопические термодинамические и структурные характеристики однокомпонентной плазмы определяются единственным безразмерным параметром $\Gamma = e^2/ak_B T$, где радиус a определяется условием $4\pi\rho a^3/3 = 1$. Комбинация $u/k_B T\Gamma$, где u — внутренняя энергия системы в расчете на одну частицу, является в этой системе универсальной функцией Γ , прецизионный расчет которой методом Монте-Карло можно найти, например, в работе [53].

Модель электронного газа на нейтрализующем фоне отличается от модели классической однокомпонентной плазмы учетом квантовой природы частиц. С понижением температуры средняя кинетическая энергия электронов выходит на конечное значе-

ние ε_0 порядка энергии Ферми ε_F . В приближении невзаимодействующих электронов

$$\varepsilon_0 = \frac{3}{5}\varepsilon_F = \frac{3}{5}(3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_e} \rho^{2/3}.$$

Эта энергия в статистическом распределении электронов по состояниям аналогична «разогреву» классической однокомпонентной плазмы до температуры

$$T^* = \frac{2\varepsilon_0}{3k_B} = \frac{2}{5}(3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_e k_B} \rho^{2/3}. \quad (34)$$

Из выражения (34) видно, что эффективная «температура» T^* электронного газа, обусловленная обменными эффектами, с уменьшением плотности убывает быстрее (пропорционально $\rho^{2/3}$), чем ослабевает кулоновское взаимодействие между частицами (пропорциональное $\rho^{1/3}$). Поэтому при уменьшении плотности следует ожидать усиления пространственных корреляций и перехода электронного газа в упорядоченное состояние. Тот же вывод следует из структуры гамильтониана системы,

$$\hat{H} = -\frac{1}{r_s^2} \sum_i \nabla_i^2 + \frac{2}{r_s} \sum_{i<j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \text{const}, \quad (35)$$

где $r_s = a/a_0$ — радиус Вигнера–Зейтца, a_0 — радиус Бора. Для малых r_s (большая плотность) в гамильтониане превалирует кинетическая энергия и электроны ведут себя как идеальный газ. Наоборот, в пределе больших r_s при достаточно низких температурах электроны упорядочиваются в кристалл Вигнера [7]. Различают двумерный и трехмерный кристаллы Вигнера. Формирование кристалла Вигнера в экспериментах, как правило, идентифицируют косвенными методами по резкому изменению транспортных свойств, в частности, проводимости. Экспериментальное определение положения границ кристаллического состояния Вигнера для электронного газа затруднено из-за эффектов, связанных с влиянием поля, на фоне которого происходит движение электронов в реальных системах. Внешние воздействия способны смещать температуру кристаллизации на порядки, в том числе и за счет стабилизации электронных орбиталей в сильном магнитном поле [54]. Этим объясняется существенный разброс в экспериментальных оценках положения границ кристаллического состояния Вигнера для электронов.

Более надежные данные получены методами компьютерного моделирования. Согласно оценкам работы [53], классическая однокомпонентная плазма в трехмерном пространстве кристаллизуется при

$\Gamma > 172$. В то же время, согласно данным работы [55], эта линия на фазовой диаграмме электронного газа является границей кристаллического состояния Вигнера со стороны высоких температур и низких плотностей. Граница со стороны высоких плотностей находится в районе $\rho = 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, т. е. соответствует значению $r_s \approx 200$. Согласно формуле (34), при такой плотности эффективная температура электронов равна $T^* = 30 \text{ К}$. Со стороны высоких температур кристаллическое состояние Вигнера ограничено значением $5 \cdot 10^{-5} \text{ Ry}$, или $T_{max} = 8 \text{ К}$ [55]. Сравнение этого значения с величиной $T^* = 30 \text{ К}$, отвечающей максимальной плотности кристалла Вигнера, показывает, что кристаллическое состояние сохраняет устойчивость даже при $T^* > T_{max}$, т. е. при значениях эффективного плазменного параметра электронов $\Gamma^* = e^2/ak_B T^* < 172$. Классическая однокомпонентная плазма в этой области значений Γ находится в неупорядоченном состоянии.

В представленной работе расчеты выполнены в температурном интервале $279 \text{ К} < T < 50000 \text{ К}$ и в интервале плотностей

$$4.63 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3} < \rho < 1.25 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3},$$

что соответствует интервалу $15.15 > r_s > 5.05$. Область расчетов отстоит от границ кристаллизации Вигнера по плотности на три порядка (на один порядок по r_s), а по температуре на полтора порядка и охватывает как термически слабозбужденные ($T/T^* < 1$), так и сильновозбужденные ($T/T^* > 1$) квантовые состояния. Кристаллизация Вигнера в области представленных расчетов невозможна из-за относительно высоких плотности и температуры. Исследованная область соответствует неидеальной неупорядоченной квантовой системе и охватывает как вырожденные, так и невырожденные состояния с сильноразвитыми межчастичными корреляциями. Цель представленного исследования состоит в получении данных о межэлектронных корреляциях, влиянии квантовых эффектов на их формирование и определении границ области сильных корреляций на фазовой диаграмме системы.

7. ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ

Расчеты равновесных средних выполнены методом Монте-Карло [36]. Электроны представлены взаимодействующими фейнмановскими траекториями в виде замкнутых ломаных, состоящих из M звеньев. Основные расчеты проводились при $M = 160$,

а в контрольных точках — при $M = 640$. На систему накладывались периодические граничные условия. Ячейка периодичности содержала 100 электронов. Для расчета каждого термодинамического состояния численно генерировались марковские случайные процессы длиной $4 \cdot 10^6$ макрошагов. На начальном этапе термализации системы (10^6 макрошагов) применялась процедура последовательного удвоения числа вершин M , а для сканирования по термодинамическим состояниям — процедура последовательного охлаждения системы. Один макрошаг включал M попыток сдвига случайным образом выбранных вершин ломаной, одной попытки сдвига и одной попытки поворота случайным образом выбранной траектории (или группы сцепленных траекторий) на величины, определяемые генератором равномерно распределенных случайных чисел. Максимальные величины пространственных сдвигов и поворотов определялись на подготовительном этапе с помощью саморегулирующегося алгоритма, анализирующего накопленную статистику на предыдущем отрезке марковской траектории. Совершались попытки сцепления и расщепления траекторий. Комбинаторные весовые коэффициенты рассчитывались блужданием по диаграммам оператора симметрии Юнга [38]. При выполнении шагов по сцеплению и расщеплению использована процедура равномерного распределения деформационных напряжений в траектории, описанная ранее [38]. Проблема «отрицательных знаков» в условиях вырожденных состояний решалась путем вытеснения изображающей точки системы из областей со скомпенсированными вкладами, при этом радиус направляющего потенциала для каждого термодинамического состояния определялся на подготовительном этапе моделирования методом итераций с использованием непрерывной функции памяти [38].

7.1. Пространственные корреляции на средних расстояниях

В области значений плотности $4.63 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3} < \rho < 1.25 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ при понижении температуры бинарная корреляционная функция электронов меняется от монотонной к осциллирующей (рис. 1). Осцилляции корреляционной функции развиваются и при изотермическом сжатии электронного газа (рис. 2). Положение максимумов почти не зависит от температуры и определяется плотностью системы. Первые два максимума располагаются в точках $r_1 \approx \rho^{-1/3}$ и $r_2 \approx 2\rho^{-1/3}$. Величина отношения $r_2/r_1 = 2$ свидетельствует об отсутствии элемен-

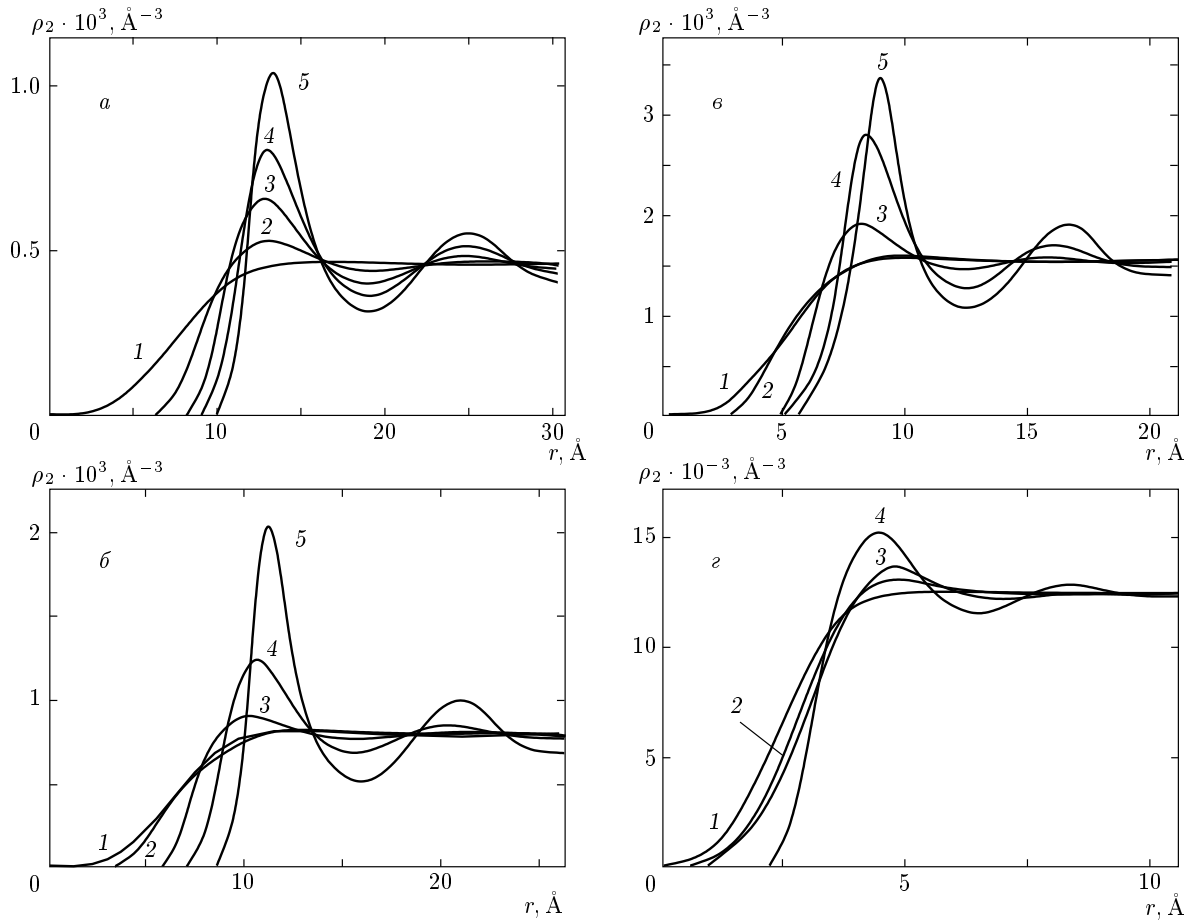


Рис. 1. Бинарные корреляционные функции в электронном газе различной плотности: *a* — $4.63 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ (1 — 5000 К, 2 — 797 К, 3 — 472 К, 4 — 463 К, 5 — 279 К); *б* — $8.00 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ (1 — 50000 К, 2 — 2959 К, 3 — 1036 К, 4 — 613 К, 5 — 363 К); *в* — $1.56 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ (1 — 8450 К, 2 — 3846 К, 3 — 1347 К, 4 — 797 К, 5 — 472 К); *г* — $1.25 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ (1 — 50000 К, 2 — 38460 К, 3 — 29590 К, 4 — 17510 К, 5 — 13470 К); $M = 160$

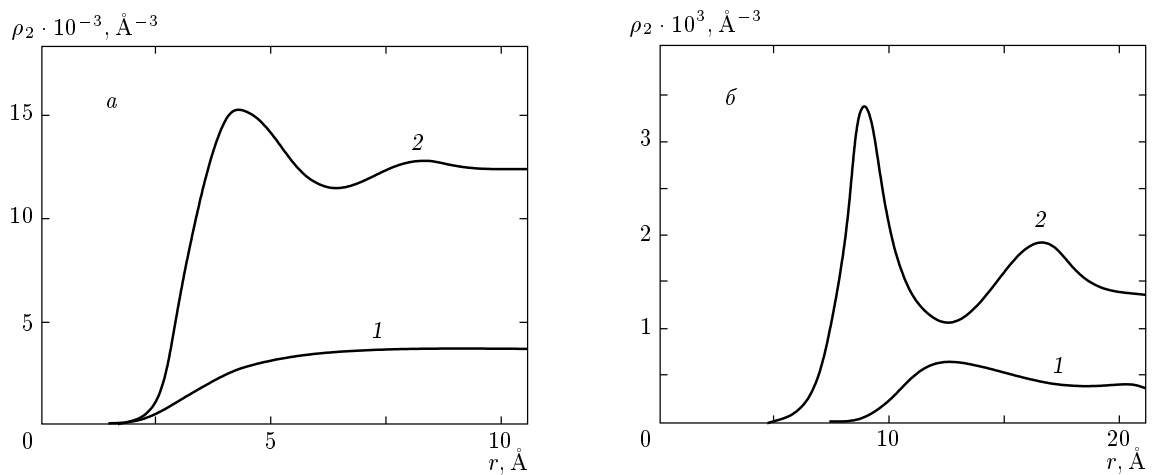


Рис. 2. Эволюция бинарной корреляционной функции в электронном газе различной плотности в результате сжатия системы при двух значениях температуры: *a* — 17510 К (1 — $3.70 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$, 2 — $1.25 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$); *б* — 472 К (1 — $4.63 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, 2 — $8.00 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$); $M = 160$

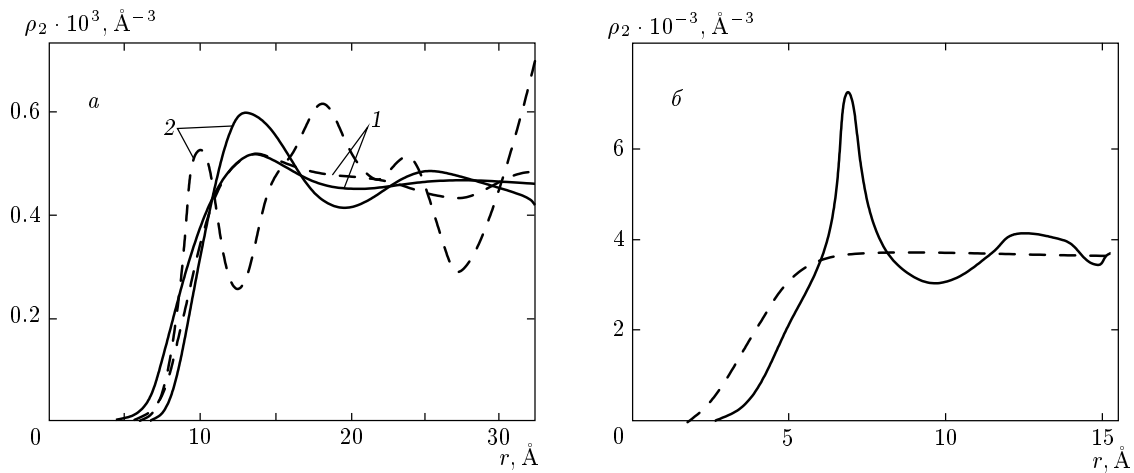


Рис. 3. Бинарные корреляционные функции в системах квантовых и классических частиц различной плотности: *a* — $4.63 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ (1 — 1347 К, 2 — 1036 К); *б* — $3.70 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ (13466 К). Сплошная линия — электроны ($M = 160$), штриховые — классическая однокомпонентная плазма на нейтрализующем фоне

тов объемно-центрированной кубической кристаллической структуры типа трехмерного кристалла Вигнера или элементов кристаллической структуры какого-либо другого типа, так как в таких корреляциях присутствовали бы отношения наиболее вероятных расстояний $r_2/r_1 = 2\sqrt{3}, 2\sqrt{2}/\sqrt{3}, \dots$. Форма бинарных корреляционных функций свидетельствует о том, что взаимное положение электронов в этой области состояний характеризуется наличием концентрических сферических слоев равной толщины и относительно слабой корреляцией между электронами в соседних слоях. Целочисленные отношения радиусов слоев указывают на то, что слои не являются частью кристаллической структуры, так как в кристаллической структуре присутствовал бы набор некрatных межузловых расстояний.

Кратные значения положений максимумов корреляционной функции электронов согласуются с результатами полуфеноменологических расчетов [56] основного состояния двумерного полностью спин-поляризованного электронного газа при $r_s = 10$. Расчет [56] построен на основе двухэлектронного уравнения Шредингера с эффективным потенциалом взаимодействий в виде поля электрона в сфере Вигнера–Зейтца с равномерно распределенным положительным зарядом. Согласно работе [56], спиновая переменная играет решающую роль в формировании корреляций электронов на малых расстояниях: максимумы корреляционной функции на кратных расстояниях получены только в полностью спин-поляризованном состоянии.

Образование элементов объемной кристалличес-

кой структуры возможно только при наличии достаточно сильной анизотропии многочастичных корреляций. Слабая анизотропия тройных корреляций в электронном газе выражается в слабой зависимости вероятности обнаружить три частицы в точках $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$ от угла между векторами $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1$ при условии, что расстояния $|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$ и $|\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1|$ отвечают положениям соседних максимумов бинарной корреляционной функции $\rho_2(r)$. Причина слабой анизотропии многочастичных корреляций в электронном газе состоит в квантово-механической пространственной делокализации электронов. Этот вывод следует из сравнения корреляционных функций электронного газа и соответствующей классической однокомпонентной плазмы. Из рис. 3а видно, что положения первых максимумов на бинарных корреляционных функциях классической и квантовой систем совпадают только в области слабых корреляций (кривые 1). При понижении температуры (кривые 2) в области относительно низких плотностей форма бинарной корреляционной функции классической системы претерпевает качественные изменения: вместо образовавшегося максимума появляются новые максимумы, расположенные на некрatных расстояниях. В то же время бинарная корреляционная функция квантовой системы качественно не меняется — существующие на кратных расстояниях максимумы только растут, но не смещаются. Более простая форма бинарной корреляционной функции для квантовых частиц свидетельствует о существенном ослаблении анизотропии корреляций высших порядков.

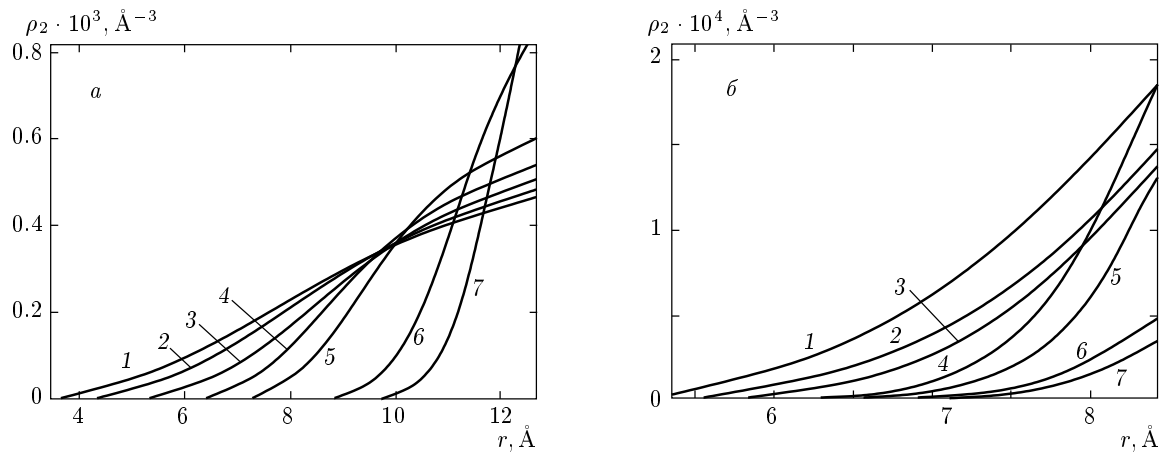


Рис. 4. Бинарные корреляционные функции электронов (а) и классических точечных зарядов (б) на нейтрализующем фоне в области малых межчастичных расстояний в состояниях с плотностью $4.63 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$: 1 — 2276 К; 2 — 1751 К; 3 — 1347 К; 4 — 797 К; 5 — 613 К; 6 — 363 К; 7 — 279 К

Противоположная картина наблюдается в области относительно высоких плотностей. Из рис. 3б видно, что в этой области с понижением температуры бинарная корреляционная функция в квантовой системе раньше, чем в системе классических частиц, переходит в режим осциллирующего поведения — обменное «отталкивание» способствует упорядочению системы. Таким образом, в состояниях с низкой плотностью квантовые эффекты препятствуют, а в плотных, наоборот, способствуют упорядочению. Граничное значение плотности $\rho \approx 2.5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ разделяет области с различными механизмами и противоположными результатами влияния квантовых эффектов на структурирование электронного газа и, по существу, является фундаментальной характеристикой этой системы.

Бинарные корреляции в изотропной среде изотропны уже в силу своего определения. Пространственная делокализация приводит к эффективно-му ослаблению взаимодействий квантовых частиц, что прежде всего отражается на угловых зависимостях корреляций третьего и более высоких порядков. Ослабление анизотропии трехчастичных корреляций означает ослабление корреляций между электронами в соседних «сольватных» слоях. Вращения этих слоев вокруг их общего центра в электронном газе оказываются слабо скоррелированными за счет квантово-механической делокализации. Отсутствие существенных энергетических барьеров относительно вращению соседних сферических слоев вокруг общего центра при заблокированном радиальном движении обусловлено их относительной однородно-

стью. Радиальные движения затруднены, так как они означали бы локальные сжатия и расширения системы.

Нетрудно усмотреть прямую параллель такого характера корреляций в электронном газе с явлением послышного плавления кластера, состоящего из небольшого количества электронов в сферически-симметричной потенциальной яме (модель квантовой точки), обнаруженным в работе [57], согласно которой в области низких температур формируется слоистая структура кластера. При повышении температуры сначала «размораживаются» вращательные движения сферических слоев. Слои, сохраняя свою целостность, вращаются вокруг общего центра. Радиальные флуктуационные движения включаются только при дальнейшем повышении температуры. По всей видимости, преобладающим характером диффузионных смещений в плотном электронном газе являются вращения сферических слоев. Такие типы коллективных движений сопровождаются наименьшими изменениями энергии и поэтому наиболее вероятны. Кристаллизацию Вигнера при понижении плотности трехмерного электронного газа следует интерпретировать в этих терминах как «замораживание» коллективных сферических мод. Неоднородность слоев усиливается и барьеры вращению растут, когда среднее расстояние между электронами в слое увеличивается по сравнению с размером области пространственной локализации электрона.

При понижении температуры устойчивость сферических мод усиливается вплоть до их «заморажи-

вания» в кристалле Вигнера. Усиление сферических коллективных мод за счет пространственной делокализации в системах квантовых частиц следует понимать как тенденцию, а не сужение всего многообразия типов движений до одного. Тем не менее наличие такой тенденции должно учитываться при построении динамических моделей электронного газа.

7.2. Корреляции на малых межчастичных расстояниях

В системе с плотностью $\rho = 4.63 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ тепловая длина волны де Бройля $\lambda = h/\sqrt{2\pi m_e k_B T}$ становится равной среднему расстоянию между электронами $\rho^{-1/3} = 12.92 \text{ \AA}$ при температуре 3328 К. На рис. 4а приведены корреляционные функции на малых расстояниях при температурах $279 \text{ К} < T < 2276 \text{ К}$, отвечающих вырожденным и слабыврожденным состояниям электронов. Эффекты, связанные с квантовым характером движения электронов, видны из сравнения кривых на рис. 4а с аналогичными кривыми на рис. 4б, рассчитанными при тех же температурах и плотности для однокомпонентной классической плазмы. Вероятность сближения электронов на расстояния в диапазоне $5 \text{ \AA} < r < 8 \text{ \AA}$ в несколько раз меньше, чем в системе классических точечных зарядов, причем с понижением температуры это различие увеличивается, и в сильновырожденной системе (кривые 6 и 7 на рис. 4а) корреляции становятся чрезвычайно жесткими. Результирующая форма корреляционных функций является следствием двух встречных тенденций: квантово-механическая делокализация делает сближение электронов более вероятным, а обменные эффекты, наоборот, приводят к их эффективному «отталкиванию». Как видно из представленных зависимостей, даже в слабыврожденной системе вероятность сближения электронов меньше, чем в аналогичной системе классических частиц.

Расчеты для систем с большей плотностью (здесь не приведены) демонстрируют усиление обменного отталкивания между электронами. В вырожденных системах при конечных температурах проникновения электронов на расстояния меньше $0.8\rho^{-1/3}$ практически не происходит. При понижении температуры и приближении к состоянию полного вырождения растет количество электронных пар со «спаренными» спинами и обменное «отталкивание» ослабевает. Эта тенденция отражается на потенциале средней силы взаимодействующих электронов.

7.3. Потенциал средней силы на малых расстояниях

Потенциал средней силы

$$W(r; \rho, T) = -k_B T \ln(\rho_2(r)/\rho) + \text{const} \quad (36)$$

имеет смысл такой энергии взаимодействия двух гипотетических классических частиц, при которой относительное движение в вакууме этих частиц характеризуется той же бинарной корреляционной функцией $\rho_2(r)$, что и движение двух электронов в электронном газе. Потенциал средней силы является зависимостью свободной энергии системы от пространственной координаты r и в неявном виде содержит как взаимодействия, опосредованные через другие частицы, так и квантовые эффекты пространственной делокализации и обмена. Сравнение потенциала средней силы с кулоновским потенциалом позволяет выделить эффекты, связанные с квантовой природой электронов и экранированием взаимодействий. Функция $W(r; \rho, T)$ численно рассчитывалась по формуле (36) с условием нормировки $W(r; \rho, T) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. На рис. 5 представлена эволюция потенциала средней силы при варьировании температуры и плотности системы в окрестности границы между флюидным и газобразным состояниями. Форма кривой $W(r; \rho, T)$ позволяет различить две области расстояний: порядка среднего расстояния до ближайшего соседа $0 < r < \rho^{-1/3}$ и область непрямых корреляций $r > \rho^{-1/3}$. В первой области существенно влияние квантово-механической делокализации электронов и обмена, во второй — экранирования. Вариации потенциала $W(r; \rho, T)$ во второй области малы по сравнению с его значениями в первой области, а форма кривых почти повторяет «перевернутые» кривые на рис. 1. Поэтому на рис. 5 показана только область малых расстояний $0 < r < \rho^{-1/3}$.

Согласно теории среднего поля Томаса–Ферми, энергия экранированного взаимодействия в электронном газе имеет вид потенциала Юкавы

$$W_{TF}(r) = \frac{e^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{\sigma_0}\right), \quad (37)$$

где σ_0 — радиус экранирования Ферми. Выражение (24) получается обратным преобразованием Фурье длинноволновой асимптотики решения уравнения Пуассона

$$W_{TF}(\mathbf{k}) = -\frac{4\pi e^2}{k^2 + \sigma_0^{-2}}$$

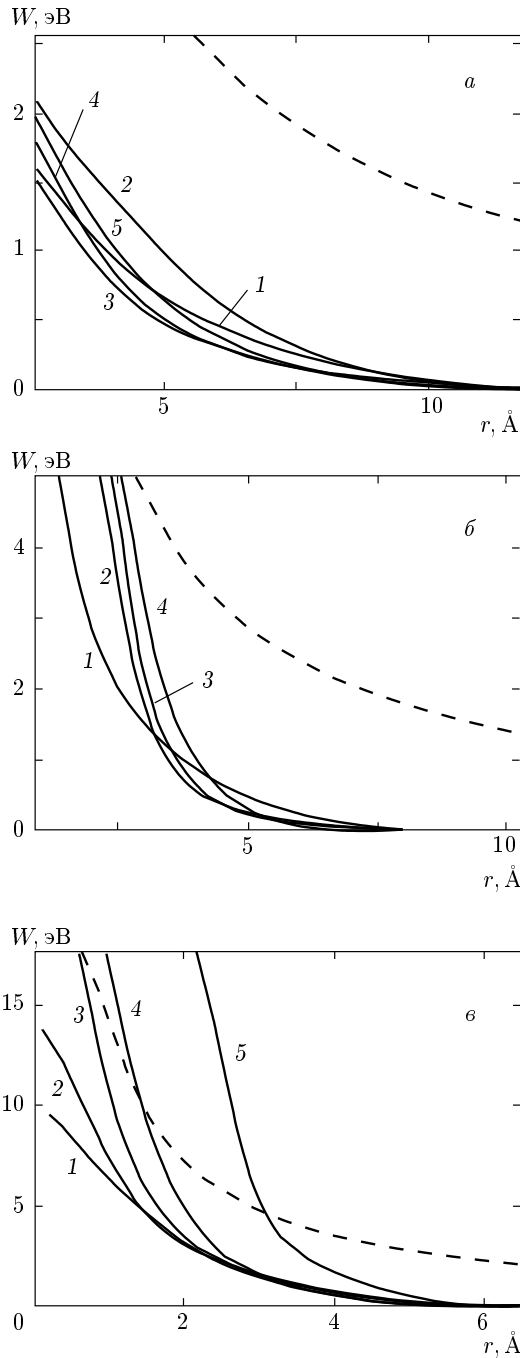


Рис. 5. Потенциал средней силы взаимодействующих электронов на нейтрализующем фоне в состояниях с различной плотностью: *a* — $4.63 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ (1 — 3846 К, 2 — 2959 К, 3 — 2276 К, 4 — 1751 К, 5 — 1347 К); *b* — $1.56 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ (1 — 8450 К, 2 — 3846 К, 3 — 2959 К, 4 — 1751 К); *c* — $3.70 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ (1 — 38460 К, 2 — 29590 К, 3 — 22760 К, 4 — 17510 К, 5 — 13470 К); $M = 160$. Штриховая линия — электростатическая энергия взаимодействия двух элементарных точечных зарядов

в пространстве волновых векторов \mathbf{k} при радиусе экранирования Ферми

$$\sigma_0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi e^2} \frac{\partial \varepsilon_F}{\partial \rho}},$$

который в приближении невзаимодействующих электронов для ε_F имеет вид

$$\sigma_0 = \sqrt{\frac{\pi^{1/3} 3^{2/3}}{6} \frac{\hbar^2}{2m_e e^2} \rho^{-1/6}},$$

или

$$\sigma_0[\text{см}] = 2.303 \cdot 10^{-4} \rho^{-1/6}. \quad (38)$$

Подстановка в (38) значений $\rho = 37.04 \cdot 10^{20}$, $15.63 \cdot 10^{20}$, $4.629 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ дает соответственно $\sigma_0 = 5.85$, 6.76 , 8.28 \AA , что по порядку величины близко к характерному радиусу r_r экранирования межэлектронных взаимодействий, значения которого можно оценить из формы кривых на рис. 5, однако, благодаря обменным эффектам, при увеличении расстояния r кривые на рис. 5 выходят на горизонтальное плато при $r > r_r$ гораздо резче, чем предписывает потенциал Юкавы.

В то время как в приближении Томаса–Ферми радиус экранирования меняется с плотностью системы по закону $\sigma_0 \propto \sqrt{r_s}$, характерный радиус r_r (по результатам компьютерного моделирования) в представленной области меняется почти линейно с радиусом Вигнера–Зейтца: $r_r \propto r_s$. Различие объясняется, главным образом игнорированием обменных корреляций в теории Томаса–Ферми. Обменные эффекты обеспечивают быстрый рост потенциала средней силы на расстояниях, меньших характерного радиуса r_e «обменных взаимодействий», а наличие спиновой переменной — его сложную зависимость от температуры, в то время как в приближении Томаса–Ферми потенциал средней силы от температуры не зависит. Резкий подъем кривой $W(r; \rho, T)$ на малых расстояниях приводит к ее отклонению от функциональной зависимости потенциала Юкавы (24) при $r < r_e$.

В соответствии с принципом Паули в состояниях с симметричными по перестановкам спиновой и антисимметричной координатными частями волновой функции обменные эффекты приводят к «отталкиванию» электронов и росту $W(r; \rho, T)$ на малых расстояниях, причем потенциал средней силы на контакте ($r = 0$) имеет конечное значение, которое растет с понижением температуры. Из сравнения кривых на рис. 5*a* и 5*b* видно, что на расстояниях, где обменные эффекты преобладают, зависимость $W(r; \rho, T)$ от температуры усиливается.

В идеальной системе невзаимодействующих фермионов радиус r_e определяется тепловой длиной волны де Бройля и от плотности системы вообще не зависит. Зависимость r_e от плотности возможна только за счет достаточно сильного взаимодействия между частицами. Эта тенденция сохраняется и в электронном газе в состояниях с умеренным вырождением, где величина r_e определяется в основном температурой. Поэтому с увеличением плотности область малых расстояний $0 < r < \rho^{-1/3}$ сокращается и оказывается включенной в область $0 < r < r_e$ обменных эффектов. Вследствие этого вклады обменных эффектов в формирование потенциала $W(r; \rho, T)$ на расстояниях $r < \rho^{-1/3}$ увеличиваются. Вместе с ними усиливается и зависимость $W(r; \rho, T)$ от температуры на этих расстояниях.

7.4. Потенциал средней силы на контакте

В работе [58] путем приближенного решения уравнения Шредингера с эффективным межчастичным потенциалом оценены зависимости от плотности электронного газа радиальной функции

$$g(r) = \frac{\rho_2(r)}{\rho} = \exp\left(-\frac{W(r; \rho, T)}{k_B T}\right)$$

на контакте ($r = 0$) при нулевой температуре. Полученные [58] при $T = 0$ конечные значения $g(0)$ означают, что при $T \rightarrow 0$ потенциал $W(r; \rho, T)$ стремится к нулю линейно в ведущем члене по T . На рис. 5в наблюдается обратный ход зависимости — рост $W(0; \rho, T)$ с понижением температуры. В области низких температур (рис. 5а) эта зависимость от температуры становится более слабой, а при еще более низких температурах должна изменить знак. Немонотонная зависимость $W(0; \rho, T)$ от температуры обусловлена вариациями в спиновом состоянии взаимодействующей пары электронов. При понижении температуры вероятность триплетного спинового состояния электронных пар ($S = 1$) уменьшается, а синглетного ($S = 0$) растет. В синглетном состоянии обмен не препятствует наложению волновых функций. Расчет в работе [58] выполнен для основного квантового состояния с $S = 0$, в то время как зависимости на рис. 5 отвечают смешанным квантовым состояниям с ненулевым спином. Зависимость на рис. 5а отвечает наиболее низким температурам и ближе к переходному режиму от триплетного к синглетному состоянию. Расчеты при более низких температурах в представленном исследовании не выполнялись.

Оценки, проведенные в работе [58] в области малых плотностей ($r_s > 10$), предсказывают почти экспоненциальное, по закону $g(0) \propto r_s \exp(-3\sqrt{r_s})$, убывание величины $g(0)$ с уменьшением плотности. В области больших плотностей рассчитанная [58] величина $g(0)$ растет при увеличении плотности вплоть до $r_s \approx 2$, проходит через максимум и далее уменьшается до нуля при $r_s \rightarrow 0$. Очевидно, это уменьшение связано с сильной пространственной локализацией заряда электронов и их отталкиванием. Наши расчеты выполнены для $r_s > 5$ и поэтому не охватывают область экстремально высоких плотностей за максимумом величины $g(0)$, рассмотренную в работе [58]. В то же время в области средних плотностей зависимости наших результатов от плотности для конечных температур качественно согласуются с ходом аналогичных зависимостей, полученных [58] для $T = 0$.

7.5. Энергия

Отклонение кинетической энергии от классического предела $3k_B T/2$ к большим значениям происходит из-за сужения области пространственной локализации волновой функции электрона по сравнению с предельно разреженным идеальным газом, где эта область имеет порядок тепловой длины волны де Бройля. Область локализации электрона сужается по двум причинам: под действием кулоновских сил сжатия, действующих со стороны соседних частиц, и из-за обменных эффектов. В идеальном газе, где присутствуют только обменные эффекты, максимальное отклонение достигается при $T = 0$ и имеет порядок энергии Ферми: $\epsilon_0 = 3\epsilon_F/5$. В системе взаимодействующих электронов с уменьшением плотности роль кулоновских сил по сравнению с обменными эффектами нарастает. Поэтому следует ожидать, что с уменьшением плотности отклонение кинетической энергии от классического предела при $T \rightarrow 0$ должно увеличиваться.

Относительные вклады обменных и кулоновских корреляций в пространственной локализации волновых функций электронов видны из данных, представленных на рис. 6: резкое отклонение кинетической энергии от классического предела происходит при температуре около 800 К, причем величина отклонения превосходит ϵ_0 на порядок. Главным фактором, определяющим размер области пространственной локализации электронов при этих плотностях, являются кулоновские силы, а не обменное взаимодействие. Обменные эффекты зависят не только от размеров области перекрытия волновых функ-

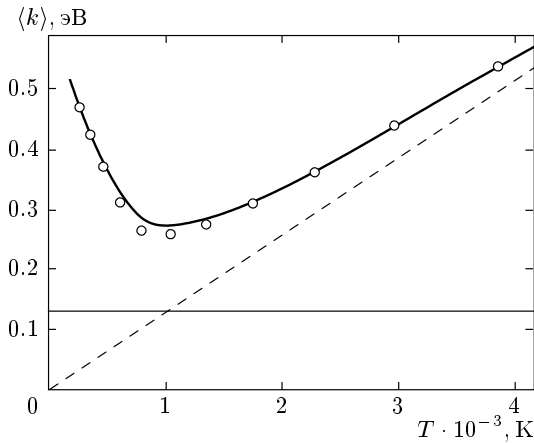


Рис. 6. Равновесная средняя кинетическая энергия электрона в системе с плотностью $4.63 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ на нейтрализующем фоне. Штриховая линия — классический предел ($3k_B T/2$), сплошная прямая линия — кинетическая энергия при $T = 0$ в системе невзаимодействующих фермионов той же плотности ($3\varepsilon_F/5 = 0.1309 \text{ эВ}$)

ций, но и от степени скоррелированности движения электронов в этой области. Нарастающие кулоновские корреляции понижают вероятность одновременного нахождения электронов в области перекрытия и ослабляют обменные эффекты. Анализируя ход вычислений на границе области осциллирующей бинарной корреляционной функции, можно отметить устойчивую тенденцию уменьшения количества конфигураций со сцепленными траекториями при уменьшении плотности системы, что является независимым свидетельством ослабления обменных корреляций (по сравнению с кулоновскими) в состояниях с низкой плотностью. Таким образом, эффективный «разогрев» электронов за счет квантового характера движения в области на границе с кристаллом Вигнера происходит в основном не за счет обменных эффектов, а за счет кулоновских сил отталкивания, которые приводят к «сжатию» волновых пакетов и повышению кинетической энергии частиц. В соответствии с этим механизмом оценка (34) эффективной температуры T^* электронов из величины энергии Ферми для невзаимодействующих частиц приводит в этой области состояний к сильно заниженным значениям. Кулоновское взаимодействие способно повысить уровень Ферми ε_F в системе взаимодействующих частиц по сравнению с ε_F на порядок и более, увеличивая таким образом степень вырождения электронов $\tilde{\varepsilon}_F/k_B T$ причем эффект усиливается с понижением плотности.

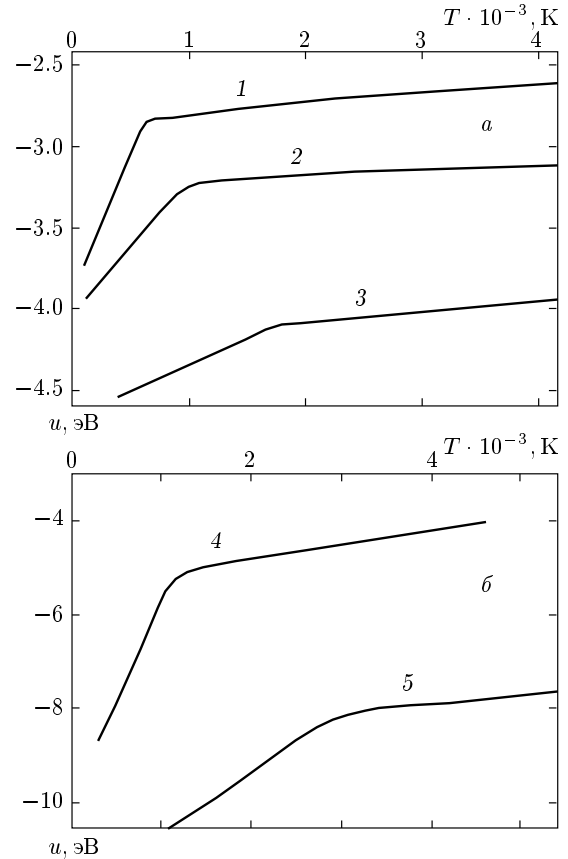


Рис. 7. Равновесная средняя электростатическая энергия электрона на нейтрализующем фоне в системах различной плотности: 1 — $4.63 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 2 — $8.00 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$; 3 — $1.56 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$; 4 — $3.70 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$; 5 — $1.25 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$

Резкое отклонение кинетической энергии электронов от классического предела происходит примерно в той же области температур, что и переход от монотонной к осциллирующей бинарной корреляционной функции электронов на рис. 1. По аналогии с формой корреляционных функций в системах классических частиц эти состояния следует классифицировать как газоподобное и флюидное. Таким образом, электронный флюид представляет собой вырожденное состояние. Флюидному и газоподобному состояниям отвечают две ветви зависимости средней энергии электростатических взаимодействий в системе, разделенные узкой переходной областью (рис. 7), причем теплоемкость флюидных состояний существенно выше, чем газоподобных. Полученные данные не дают оснований утверждать, что переход между флюидным и газоподобным состояниями сопровождается сингулярностями в термодинамичес-

ких потенциалах и является фазовым переходом в точном смысле, однако нельзя и полностью исключить эту возможность. Если фазовый переход здесь имеет место, то наиболее вероятным является переход второго рода, сопровождающийся непрерывным изменением энтропии и конечным скачком теплоемкости. В пользу такого предположения свидетельствует непрерывный характер структурных изменений при пересечении границы фаз. Качественная трансформация корреляционных функций не сопровождается здесь ее скачкообразными количественными изменениями, которые могли бы привести к разрывному поведению энтропии. Выяснение наличия здесь фазового перехода требует выполнения в переходной области дополнительных прецизионных расчетов, которые выходят за рамки представленного исследования.

7.6. Граница между частично упорядоченным (флюид) и неупорядоченным (газоподобным) состояниями

В системах классических частиц образование жидкого состояния из газообразного сопровождается усилением пространственных корреляций на расстояниях, сравнимых с расстояниями между соседними частицами, и отсутствием дальнего порядка. В то время как в газообразной фазе в отсутствие устойчивых кластеров бинарные корреляционные функции монотонны, в жидкой фазе они становятся осциллирующими. Радиус корреляций растет при приближении к критической точке.

Появление осцилляций корреляционной функции означает резкий рост радиуса корреляций и переход к качественно иной пространственной организации системы. Эти трансформации в структуре электронного газа аналогичны непрерывному образованию жидкой фазы из газообразной в системах классических частиц в закритической области. Существование фазового перехода, критической точки и сосуществующих жидкого и газообразного состояний возможно только при наличии между частицами сил притяжения, которые обеспечивают устойчивость конденсата и положительное поверхностное натяжение на границе фаз. Сосуществующая с паром жидкая фаза обладает более низкой, чем газообразная фаза, энтропией, которая должна быть сбалансирована более низкой энергией. При этих условиях величины свободной энергии в расчете на частицу в сосуществующих фазах выравниваются, что и обеспечивает равновесие.

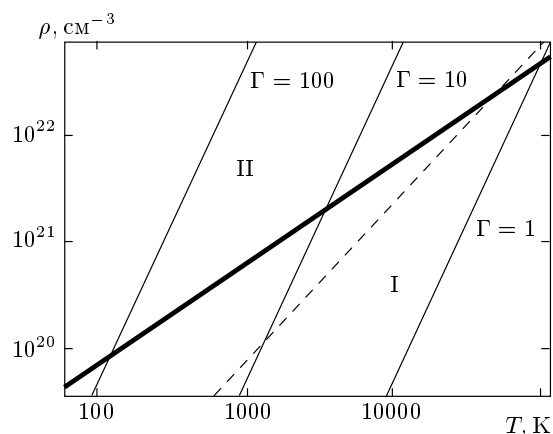


Рис. 8. Жирная линия — граница между газоподобным (I) и флюидным (II) состояниями системы взаимодействующих электронов; штриховая — граница вырождения $\lambda\rho^{1/3} = 1$ в идеальном газе фермионов той же массы; сплошные наклонные прямые — линии постоянства величины плазменного параметра Γ

В системе электронов на однородном нейтрализующем фоне сжатие не сопровождается понижением энергии устойчивой поверхности раздела, и фазового перехода между жидкой и газообразной фазами здесь нет, а любые температуры являются для этой системы формально «надкритическими». Однако достаточно резкое изменение характера пространственных корреляций позволяет провести границу между газоподобным и флюидным состояниями электронного газа. Положение границы на фазовой диаграмме может быть идентифицировано по изменению формы кривой $\rho_2(r)$ от монотонной к осциллирующей. В исследованной области эта граница в двойном логарифмическом масштабе близка к прямой. Ее положение на ρ - T -диаграмме (рис. 8) задается аппроксимационной формулой $\rho = aT^\alpha$ с $a = 1.1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3} \cdot \text{К}^{-\alpha}$ и $\alpha = 0.92$. Выше и левее этой линии находится область флюидных состояний, а ниже и правее — газоподобных. Штриховая прямая отвечает равенству тепловой длины волны де Бройля электронов λ среднему расстоянию $\rho^{-1/3}$ между ближайшими частицами. Правее и ниже линии $\lambda\rho^{1/3} = 1$ находится область квазиклассического поведения идеального ферми-газа, а левее и выше — область вырожденных состояний. Из рис. 8 видно, что флюидное состояние отвечает существенно квантовому поведению электронов. Поскольку кулоновское взаимодействие электронов повышает степень вырождения системы, граница вырождения с учетом взаимодействия располагается несколько

ниже штриховой линии на рис. 8, т. е. флюидное состояние электронов следует считать в этой области плотностей существенно вырожденным состоянием. Сплошные линии, отвечающие значениям параметра неидеальности $\Gamma = 1, 10, 100$, дают представление о нарастании кулоновского взаимодействия по сравнению с тепловой энергией при перемещении влево и вверх по диаграмме. В отличие от случая классической однокомпонентной плазмы, граница между флюидным и газоподобным состояниями в системе электронов ($\rho \propto T^{0.92}$) не совпадает с линией постоянства величины Γ ($\rho \propto T^3$). Различие весьма существенно и обусловлено квантовыми эффектами. В области высоких плотностей квантовые эффекты стимулируют формирование флюидных состояний. Очевидно, это связано с обменом, который усиливает корреляции частиц на малых расстояниях. Наоборот, в области низких плотностей превалирует пространственная делокализация электронов, которая приводит к ослаблению многочастичных корреляций и препятствует образованию флюида.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Специфика термодинамического поведения электронного газа определяется отсутствием в электростатическом взаимодействии электронов сил притяжения. Условие локальной электронейтральности делает невозможным сосуществование в электронном газе фаз с различной плотностью, как это имеет место в системах электронейтральных частиц. Невозможность равновесия фаз с различной плотностью означает отсутствие на фазовой диаграмме этой системы области сосуществования и критической точки. С формальных позиций все термодинамические состояния электронного газа следует классифицировать как «надкритические». В то же время сжатие электронного газа и его охлаждение сопровождается, как и в системах, где конденсация возможна, усилением пространственных корреляций. Переход электронного газа во флюидное состояние подобен непрерывному переходу из газообразного состояния в жидкое при температурах выше критической. Общим отличительным признаком флюидного состояния являются развитые многочастичные корреляции. Переход во флюидное состояние может быть идентифицирован по изменению бинарной корреляционной функции электронов от монотонной к осциллирующей. Флюидное состояние электронного газа располагается в области средних плотностей,

между кристаллом Вигнера и газоподобным состоянием.

Квантовые эффекты в разреженных состояниях флюида приводят к ослаблению межчастичных корреляций, а в плотных, наоборот, к их усилению. Роль твердого кора во взаимодействии электронов играет запрещенная область перекрывания волновых функций, обусловленная принципом Паули. Характерный радиус «обменных взаимодействий» определяется размером области пространственной локализации волновых пакетов электронов, который, в свою очередь, существенно зависит от температуры. Роль обменных эффектов по сравнению с кулоновским отталкиванием растет в области более плотных и высокотемпературных состояний флюида. Перестановочная симметрия координатной части волновой функции электронов зависит от спинового состояния системы. Поэтому необходимо учитывать зависимость обменных эффектов от температуры также и через спиновое состояние. В области низких температур и плотностей флюида эта зависимость нивелируется на фоне кулоновского взаимодействия, которое нарастает с понижением температуры быстрее, чем обменные эффекты. В области высоких температур зависимость спинового состояния от температуры также ослаблена из-за низкой степени вырождения системы. Таким образом, наиболее сильная зависимость от спинового состояния реализуется в средней части области флюидных состояний. Спаривание электронов приводит здесь к ослаблению обменного «отталкивания» и связанных с ним пространственных корреляций. В области кристалла Вигнера (низкие температуры) следует ожидать нивелирования обменных эффектов по сравнению с кулоновским взаимодействием. Напротив, в области флюидных состояний электронного газа обменные эффекты и зависимость пространственных корреляций, обусловленная вариациями спинового состояния системы, достигают своего максимума.

Кулоновское взаимодействие существенно повышает энергию Ферми, тем самым увеличивая степень вырождения электронов. В исследованной области плотностей флюид представляет собой вырожденные состояния электронной системы, однако с уменьшением плотности степень вырождения на границе газ–флюид уменьшается. Граница между газоподобным и флюидным состояниями формируется как результат совместного действия двух основных факторов — упорядочивающего действия кулоновского взаимодействия и квантовых эффектов. Оба фактора действуют в одном направлении в области высоких плотностей и в противоположных

направлениях в области низких плотностей, приводя к существенному отклонению этой границы как от линий постоянства плазменного параметра, так и от границы вырождения в идеальном газе ферми-частиц в пользу флюидных состояний в области более высоких плотностей и температур. В области высоких плотностей межэлектронные корреляции определяются в основном обменными эффектами, в то время как при понижении плотности вплоть до значений, отвечающих кристаллизации Вигнера, превалируют кулоновские силы.

Квантовая пространственная делокализация электронов приводит к существенному ослаблению анизотропии многочастичных корреляций и усилению сферически-симметричных коллективных движений в электронном флюиде. Сферические моды усиливаются с понижением температуры вплоть до точки кристаллизации Вигнера, при которой происходит резкое усиление анизотропии многочастичных корреляций. Усиление сферических мод во флюидном состоянии должно учитываться при построении динамических моделей плотного электронного газа.

ЛИТЕРАТУРА

1. F. Bloch, Z. Phys. **57**, 545 (1929).
2. X. Waintal, Phys. Rev. Lett. **94**, 046801 (2005).
3. V. J. Goldman, M. Santos, M. Shayegan, and J. E. Cunningham, Phys. Rev. Lett. **65**, 2189 (1990).
4. B. J. LeRoy, M. A. Topinka, R. M. Westervelt, K. D. Maranowski, and A. C. Gossard, Appl. Phys. Lett. **80**, 4431 (2002).
5. G. Finkelstein, P. I. Glicofridis, R. C. Ashoori, and M. Shayegan, Science **289**, 90 (2000).
6. Eva Y. Andrei, *Two-Dimensional Electron Systems on Helium and Other Cryogenic Substrates*, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht (1997).
7. E. Wigner, Phys. Rev. **46**, 1002 (1934); Trans. Faraday Soc. **34**, 678 (1938).
8. J. E. Mayer, J. Chem. Phys. **5**, 67, 74 (1937).
9. J. E. Mayer, J. Chem. Phys. **18**, 1426 (1950).
10. R. Abe, Progr. Theor. Phys. **22**, 213 (1959).
11. W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. A **140**, 1133 (1965).
12. S. Fahy, X. W. Wang, and S. G. Louie, Phys. Rev. Lett. **61**, 1631 (1988).
13. X.-G. Zhang and D. M. C. Nicholson, Phys. Rev. B **60**, 4551 (1999).
14. Sh. Liu, P. W. Ayers, and R. G. Parr, J. Chem. Phys. **111**, 6197 (1999).
15. R. D. Muino and A. Salin, Phys. Rev. B **60**, 2074 (1999).
16. M. Ernzerhof and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. **111**, 911 (1999).
17. D. M. Ceperley and B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. **45**, 566 (1980).
18. N. Trivedi and D. M. Ceperley, Phys. Rev. B **41**, 4552 (1990).
19. S. Sorella, Phys. Rev. Lett. **80**, 4558 (1998).
20. P. J. Reynolds, D. M. Ceperley, B. J. Alder, and J. W. A. Lester, J. Chem. Phys. **77**, 5593 (1982).
21. D. Ceperley and G. V. Chester, Phys. Rev. B **16**, 3081 (1997).
22. D. F. V. van Haaf, H. J. M. van Bommel, J. M. J. van Leeuwen, W. van Saarloos, and D. M. Ceperley, Phys. Rev. B **51**, 13039 (1995).
23. Р. П. Фейнман, А. Р. Хибс, *Квантовая механика и интегралы по траекториям*, Мир, Москва (1968).
24. Ф. А. Березин, *Метод вторичного квантования*, Наука, Москва (1986).
25. С. В. Шевкунов, ЖЭТФ **118**, 36 (2000).
26. С. В. Шевкунов, Рукопись, деп. в ВИНТИ, № 6370-B87 (1987).
27. L. D. Fosdick and H. F. Jordan, Phys. Rev. **143**, 58 (1966).
28. H. F. Jordan and L. D. Fosdick, Phys. Rev. **171**, 128 (1968).
29. В. М. Замалин, Г. Э. Норман, Ж. вычислит. матем. и матем. физ. **13**, 408 (1973).
30. В. С. Филинов, ТВТ **11**, 871 (1973).
31. В. С. Филинов, ТВТ **13**, 251 (1975).
32. В. С. Филинов, ТВТ **13**, 1146 (1975).
33. В. С. Филинов, ТВТ **14**, 245 (1976).
34. V. S. Filinov, Phys. Lett. **54A**, 259 (1975).
35. V. S. Filinov, Phys. Lett. **55A**, 219 (1975).
36. В. М. Замалин, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, *Метод Монте-Карло в статистической термодинамике*, Наука, Москва (1977).

37. B. Militzer and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. E* **63**, 066404 (2001).
38. С. В. Шевкунов, *ЖЭТФ* **121**, 1098 (2002).
39. С. В. Шевкунов, *ЖЭТФ* **127**, 696 (2005).
40. B. Tanatar and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. B* **39**, 5005 (1989).
41. S. De Palo, S. Conti, and S. Moroni, *Phys. Rev. B* **69**, 035109 (2004).
42. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1974).
43. Г. Вейль, *Теория групп и квантовая механика*, Мир, Москва (1983).
44. С. В. Шевкунов, в сб. *Современные проблемы статистической физики*, т. 1, под ред. И. Р. Юхновского, Наукова думка, Киев (1989), с. 379.
45. С. В. Шевкунов, *ДАН* **369**, 43 (1999).
46. С. В. Шевкунов, *ТВТ* **29**, 45 (1991).
47. С. В. Шевкунов, *Математическое моделирование* **2**, 3 (1990).
48. S. V. Shevkunov and P. N. Vorontsov-Velyaminov, *Mol. Simulation* **7**, 249 (1991).
49. С. В. Шевкунов, *ТВТ* **28**, 1 (1990).
50. S. V. Shevkunov and P. N. Vorontsov-Velyaminov, *Mol. Simulation* **7**, 205 (1991).
51. С. В. Шевкунов, *ДАН* **382**, 615 (2002).
52. С. В. Шевкунов, *Ж. вычислит. матем. и матем. физ.* **43**, 1825 (2003).
53. J. M. Caillol, *J. Chem. Phys.* **111**, 6538 (1999).
54. Szu-Cheng Cheng, *Chinese J. Phys.* **35**, 718 (1997).
55. M. D. Jones and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4572 (1996).
56. F. Capurro, R. Asgaria, B. Davoudia, M. Polini, and M. P. Tosi, *Z. Naturforsch. A* **57**, 237 (2002).
57. A. V. Filinov, M. Bonitz, and Yu. E. Lozovik, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3851 (2001).
58. I. Nagy, J. I. Juaristi, R. Diez Muino, and P. M. Echenique, *Phys. Rev. B* **67**, 073102 (2003).