

УДК 51-72, 539.182, 538.958

КВАНТОВЫЙ ГАЗ ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ. ТОЧНОЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ ПЛОТНОСТИ И ВОЗБУЖДЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ

Е. А. Поляков¹, П. Н. Воронцов-Вельяминов¹

Выписано общее выражение для плотности системы квантовых частиц при конечной температуре в форме вариационной производной от канонической статсуммы. Получены циклические разложения для плотности как при наличии взаимодействия частиц, так и при его отсутствии. В последнем случае в выражение для плотности входят характеристики одной частицы при кратных обратных температурах. Рассмотрен метод последовательного возведения в квадрат матрицы плотности для вычисления плотности; с его помощью при использовании полученных ранее выражений вычислены плотности систем от 1 до 10 невзаимодействующих ферми-частиц со спином $1/2$ и без спина в гармоническом поле и от 1 до 5 бесспиновых ферми-частиц в потенциале Морзе. Из данных при низкой температуре с высокой точностью воспроизведены 10 состояний в гармоническом поле и все пять связанных состояний в потенциале Морзе. Рассмотрен случай двух бесспиновых фермионов как с кулоновским отталкиванием, так и без взаимодействия в одномерном гармоническом поле, а также получены как одномерные, так и двумерные плотности этих систем и их энергии. Введен метод рекуррентного вычитания для расчета возбужденных состояний квантовой системы. С использованием метода последовательного возведения в квадрат матрицы плотности получены более 20 уровней поля одномерного осциллятора и все связанные состояния потенциала Морзе. Работа выполнена при поддержке РФФИ (код проекта 05-02-17428).

Ключевые слова: квантовая статистика, интегралы по траекториям, матрица плотности, сеточные методы, квантовый газ, гармоническое поле.

1. Введение. Правильное количественное описание сильно скореллированных квантовых систем при конечных температурах является одной из важнейших общих проблем статистической физики. В настоящее время интерес к этой проблематике не в последнюю очередь связан с развитием нанотехнологий. Для численного моделирования таких систем необходимо стремиться применять методы, основанные на первопринципах. Однако, как правило, в случае сколько-нибудь сложной системы на этом пути встречаются до сих пор не преодоленные трудности.

Так, в методе Монте-Карло (МК) с использованием интегралов по траекториям, применяемом для расчета температурных свойств квантовых систем, такой трудностью является проблема знаков при моделировании ферми-систем. Она возникает в связи с тем, что волновая функция ферми-системы должна менять знак при перестановке любой пары частиц. Это приводит к тому, что в ходе МК-процедуры веса траекторий могут менять знак, и в результате при низких температурах, обычно соответствующих нормальным условиям, вклады разного знака практически уничтожают друг друга, оставляя лишь статистический шум.

В [1] было показано, что решение (или, по крайней мере, достаточное ослабление) проблемы знаков одновременно решило бы проблему вычисления возбужденных состояний методами Монте-Карло.

Недавно в [3] был предложен метод ослабления проблемы знаков за счет использования циклического разложения для статсуммы и канонических средних [2] в МК-методе с использованием расширенного ансамбля. Ослабление проблемы достигается благодаря достаточно точному определению отношений статсумм циклов, соответствующих разным подансамблям.

Представляет интерес вычисление циклических разложений для плотности квантовых систем, которые можно использовать в дальнейшем для расчетов плотности МК-методом в рамках уже развитых процедур. При тестировании МК-процедур полезно также рассмотреть несколько малоразмерных задач, в которых возможны достаточно точные численные решения.

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет, ул. Ульяновская, д. 1, 198504, г. Санкт-Петербург; e-mail: E.A.Polyakov@gmail.com, voron.wgroup@pobox.spbu.ru

В настоящей статье фейнмановские разложения по циклам перестановок строятся для плотности системы тождественных частиц со спином в произвольном внешнем поле с использованием результатов статьи [4], в которой были получены циклические разложения для канонической и большой канонической статсумм.

Статья организована следующим образом. В разделе 2.1 выводятся циклические разложения для плотности и энергии для произвольной системы взаимодействующих тождественных частиц со спином. Далее рассматривается частный случай этих соотношений при отсутствии взаимодействия. Обсуждается возможность их применения в методе МК. В разделе 2.2 рассматривается процедура последовательного возведения в квадрат матрицы плотности, позволяющая рассчитать матрицы плотности и свободные энергии малоразмерных систем при конечных температурах. Приводятся результаты расчетов для двух модельных систем. В разделе 3.1 излагается идея статьи [1] о том, как с помощью МК-метода для ферми-систем можно вычислять возбужденные состояния. Приводятся формулы, позволяющие реализовать данную идею с помощью МК-метода в ансамбле, расширенном по перестановкам [3], и численные результаты для модельных систем. В разделе 4.1 предлагается численная схема для вычисления возбужденных состояний с помощью модификации пропагатора.

2. Плотность и энергия системы квантовых частиц во внешнем поле.

2.1. Выражения для плотности. Рассмотрим квантовую систему, состоящую из N тождественных частиц одного сорта со спином, гамильтониан которой имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \partial_{x_k}^2 + \sum_{k=1}^N \phi(\mathbf{x}), \tag{1}$$

где $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)$ — вектор из координат частиц, x_k — координата k -й частицы (число в случае одномерного пространства и вектор в случае d -мерного пространства). Здесь и далее используется система единиц, в которой $m = \hbar = 1$. Полный потенциал $\phi(\mathbf{x})$ включает внешнее поле $\psi(x_i)$ и парные взаимодействия $v(x_i - x_j)$:

$$\phi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^N \psi(x_k) + \sum_{i < j} v(x_i - x_j). \tag{2}$$

Как известно, каноническая статистическая сумма системы тождественных частиц при конечной температуре T имеет вид (см. [2])

$$Z^{(A,S)}(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_{\{P\}} \xi^{[P]} Z^{(D)}(\beta; P), \tag{3}$$

где (A, S) и $\xi = \pm 1$ соответствуют случаям симметрии (бозоны) и антисимметрии (фермионы) соответственно, (D) соответствует системе различных частиц (статистика Больцмана), P обозначает перестановку координат (пространственных и спиновых), $[P]$ — ее четность и $\beta \equiv T^{-1}$. Величина $Z^{(D)}(\beta)$ — статсумма системы различных частиц при температуре β^{-1} : $Z^{(D)}(\beta) = \int d\mathbf{x} \langle \mathbf{x} | \exp(-\beta \hat{H}) | \mathbf{x} \rangle$. Величина $Z^{(D)}(\beta; P)$ — та же статсумма системы различных частиц, координаты которых переставлены под действием P : $Z^{(D)}(\beta) = \int d\mathbf{x} \langle \mathbf{x} | \exp(-\beta \hat{H}) | P\mathbf{x} \rangle$.

Далее, как показано в [2] (см. также [4]), целесообразно перейти от суммы по перестановкам к сумме по классам циклических структур перестановок \mathbf{C} . Последние вводятся следующим образом. Если рассмотреть, как действует перестановка P на координаты частиц (x_1, \dots, x_N) , то обнаружится, что множество всех координат распадается на наборы, причем внутри каждого набора длиной ν перестановка переводит координаты друг в друга по циклу длиной ν . Таким образом, каждой перестановке можно сопоставить вектор \mathbf{C} , компоненты которого C_ν соответствуют числу циклов длиной ν , $\nu = 1, \dots, N$; перестановки с одинаковыми \mathbf{C} образуют классы эквивалентности группы перестановок [5]. В этом случае для частиц со спином s выражение (3) преобразуется к виду [2, 4]

$$Z^{(A,S)} = \frac{1}{N!} \sum_{\{C_\nu\}} M(\mathbf{C}) \xi^{\sum(\nu-1)C_\nu} (2s+1)^{\sum C_\nu} Z^{(D)}(\mathbf{C}), \tag{4}$$

где $Z^{(D)}(\mathbf{C}) = \int d\mathbf{x} \rho(\mathbf{x}, P(\mathbf{C})\mathbf{x}; \beta)$, $P(\mathbf{C})$ — любая перестановка, имеющая циклическую структуру \mathbf{C} , $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \beta)$ — матрица плотности в координатном представлении при обратной температуре β , $M(\mathbf{C})$ —

число элементов в классе \mathcal{C} [2, 4]:

$$M(\mathcal{C}) = \frac{N!}{\prod_{\nu=1}^N (C_\nu! \nu^{C_\nu})}. \quad (5)$$

При отсутствии взаимодействия в системе, как показано в [4], выражение (4) упрощается. Статсуммы $Z^{(D)}(\mathcal{C})$ распадаются на произведения одночастичных вкладов; в данном случае задачу можно свести к набору одночастичных задач при кратных температурах:

$$Z^{(A,S)} = \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{C}} M(\mathcal{C}) \prod_{\nu=1}^N [\xi^{\nu-1} (2s+1) Z_\nu]^{C_\nu}, \quad (6)$$

где величина $Z_\nu = Z_\nu(\beta)$ — статсумма цикла длиной ν . Как показано в работе [4], она равна статсумме одной частицы Z_1 при обратной температуре $\nu\beta$:

$$Z_\nu(\beta) = Z_1(\nu\beta). \quad (7)$$

Получим циклическое разложение для плотности квантовой системы. Для этого сначала получим общее соотношение между плотностью и статсуммой, справедливое для любой системы. Поместим нашу систему в некоторое дополнительное внешнее поле $\zeta(x_k)$. Тогда физически ясно, что плотность частиц $\rho(x)$ определяет реакцию системы на потенциал ζ в точке x и должно иметь место соотношение

$$\rho(x) = \frac{\delta}{\delta\zeta(x)} F \Big|_{\zeta=0} = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z^{(A,S)}} \frac{\delta}{\delta\zeta(x)} Z^{(A,S)} \Big|_{\zeta=0}, \quad (8)$$

где F — свободная энергия системы, $\frac{\delta}{\delta\zeta(x)}$ — вариационная производная по полю ζ . Далее условие $\zeta(x) = 0$ при вариационном дифференцировании не будет явно выписываться, но всегда будет подразумеваться. Иными словами, статсумма $Z^{(A,S)}[\zeta]$ является производящим функционалом для плотности и ее корреляций [7]. Для полноты изложения, однако, докажем (8) формальным путем.

Плотность распределения $\rho(x)$ частиц в точке x есть нормированная на N вероятность обнаружить одну из частиц в данной точке, т.е. в состоянии $|x\rangle$. Вероятность обнаружить k -ю частицу в точке x равна [2]

$$w_k(x) = \frac{1}{Z^{(A,S)}} \text{Sp} \hat{\rho}(|x_k\rangle\langle x_k|) = \frac{1}{Z^{(A,S)}} \text{Sp} \delta(x - x_k) \hat{\rho}, \quad (9)$$

где $\hat{\rho}$ — матрица плотности системы. Соотношение (9) можно также понять, рассмотрев частичную матрицу плотности k -й частицы, получающуюся из полной матрицы $\hat{\rho}$ сверткой по координатам остальных частиц [2].

Следовательно, вероятность обнаружить одну из частиц (нормированная на N), т.е. искомая плотность распределения, определяется по формуле

$$\rho(x) = \sum_{k=1}^N w_k(x) = \frac{1}{Z^{(A,S)}} \text{Sp} \left(\sum_{k=1}^N \delta(x - x_k) \right) \hat{\rho}. \quad (10)$$

С другой стороны, учитывая, что гамильтониан системы имеет вид $\hat{H}' = \hat{H} + \sum_{k=1}^N \zeta(x_k)$, считаем вариационную производную статсуммы Z по $\zeta(x)$:

$$\frac{\delta}{\delta\zeta(x)} Z = \frac{\delta}{\delta\zeta(x)} \text{Sp} \hat{\rho} = \text{Sp} \left[\frac{\delta}{\delta\zeta(x)} \hat{\rho} \right] = \text{Sp} \left[\frac{\delta}{\delta\zeta(x)} \exp(-\beta\hat{H}') \right] = -\beta \text{Sp} \left(\sum_{k=1}^N \delta(x - x_k) \right) \hat{\rho}. \quad (11)$$

Сравнивая (11) с (10), получим формулу (8), при этом плотность нормирована на число частиц N . Существенно, что это совершенно общая формула. Поскольку у нас имеется выражение для статсуммы системы в замкнутом виде (см. (4) или (6)), на ее основе мы можем получить выражение для плотности.

Применим (8) сначала к статсумме системы невзаимодействующих тождественных частиц (6):

$$\rho(x) = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z^{(A,S)}} \frac{\delta}{\delta\zeta(x)} Z^{(A,S)} = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z^{(A,S)}} \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{C}} M(\mathcal{C}) \prod_{\nu=1}^N \frac{\delta}{\delta\zeta(x)} [\xi^{\nu-1} (2s+1) Z_\nu]^{C_\nu}. \quad (12)$$

Далее формулу для плотности (8) необходимо применить к Z_ν , статсумме цикла длиной ν . Получим

$$-\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z_\nu} \frac{\delta}{\delta \zeta(x)} Z_\nu = \nu \rho_1(x; \nu\beta) \equiv \nu \rho_\nu(x),$$

где $\rho_1(x; \nu\beta)$ — плотность одной частицы при температуре $\nu\beta$. Здесь использована формула (7), выражающая $Z_\nu(\beta)$ через $Z_1(\nu\beta)$, и для краткости введено обозначение $\rho_1(x; \nu\beta) \equiv \rho_\nu$. Доведем до конца дифференцирование в (12):

$$\rho(x) = \frac{1}{N!} \frac{1}{Z(A,S)} \sum_C M(C) \prod_{i=1}^N [\xi^{i-1} (2s+1) Z_i]^{C_i} \times \sum_{\mu=1}^N \mu C_\mu \rho_\mu. \quad (13)$$

Таким образом, задача нахождения плотности для системы невзаимодействующих частиц так же, как и для статсуммы (6), полностью сводится к вычислению одночастичных величин. Совместно с вириальным эстиматором для энергии [8] имеем

$$U(\beta) = \int \rho(x) \left[\frac{x}{2} \frac{d\phi(x)}{dx} + \phi(x) \right] dx. \quad (14)$$

Это соотношение полностью определяет термодинамику системы невзаимодействующих квантовых частиц.

Обобщим наше рассмотрение на системы взаимодействующих частиц, гамильтониан которых задается выражениями (1) и (2).

В этом случае циклическое разложение для статсуммы уже не распадается на одночастичные члены [2] и дается соотношением (4). Из соотношения (4) видно, что для того чтобы сосчитать плотность, необходимо вычислить вариационную производную величины $Z^{(D)}(C)$.

Для этого заметим, что $\rho(x, x'; \beta)$ имеет структуру статсуммы для N нитей (гауссовых полимеров), причем между собой взаимодействуют только соответственные точки нитей (точки с одинаковым эвклидовым временем τ , где $0 \leq \tau \leq \beta$), а начала и концы нитей фиксированы в точках x и x' соответственно. Тогда $\rho(x, Px; \beta)$ соответствует нитям, у которых конечные точки каким-то образом замкнуты на их начальные и образуют кольца в соответствии с циклической структурой C , причем каждая точка $x(\tau)$ находится во внешнем потенциале $\psi(x(\tau))$ [10]. Нетрудно показать, что согласно (8) вариационная производная от статсуммы $Z^{(D)}(C)$ приведет к соотношению

$$-\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z^{(D)}(C)} \frac{\delta}{\delta \psi(x)} Z^{(D)}(C) = \sum_{\mu=1}^N \mu C_\mu \rho_C^{(\mu)}(x) \equiv \rho_C(x), \quad (15)$$

где учтено, что вклад в плотность дает каждая точка каждого из C_ν циклов длиной $\nu\beta$, а

$$\rho_C^{(\mu)}(x) = \frac{1}{Z^{(D)}(C)} \int dx' \delta(x'_1 - x) \rho(x', P(C)x'; \beta). \quad (16)$$

Поясним смысл величины $\rho_C^{(\mu)}(x)$. На набор координат частиц $x' = (x'_1, \dots, x'_N)$ действует некоторая перестановка $P(C)$ из класса C , причем не имеет значения, какая именно, так как все перестановки принадлежащие одному классу, дают одинаковый вклад в плотность. Далее предположим, что первые μ координат под действием перестановки переходят друг в друга по циклу $x'_1 \rightarrow x'_2 \rightarrow \dots \rightarrow x'_\mu \rightarrow x'_1$ и, таким образом, образуют один из C_μ циклов длиной $\mu\beta$ единиц эвклидового времени. Тогда (16) имеет смысл плотности, создаваемой одним из μ сегментов длины β данного цикла для данного класса C . Кроме того, все сегменты всех C_μ циклов длиной μ эквивалентны и вместо x'_1 в формуле (16) можно было бы в аргументе дельта-функции использовать любую из μC_μ координат, вовлеченных в один из таких циклов. Поскольку всего число таких сегментов для циклов длиной μ равно μC_μ , мы получаем формулу (15) для плотности, соответствующей классу перестановок C .

Учитывая (15) и (16), получим окончательное выражение для плотности системы взаимодействующих частиц в виде циклического разложения:

$$\begin{aligned} \rho^{(A,S)}(x) &= \frac{1}{Z(A,S)} \frac{1}{N!} \sum_C M(C) \xi^{\sum (\nu-1)C_\nu} (2s+1)^{\sum C_\nu} Z^{(D)}(C) \sum_{\eta=1}^N \eta C_\eta \rho_C^{(\eta)}(x) \equiv \\ &\equiv \frac{1}{Z(A,S)} \frac{1}{N!} \sum_C M(C) \xi^{\sum (\nu-1)C_\nu} (2s+1)^{\sum C_\nu} Z^{(D)}(C) \rho_C(x), \end{aligned} \quad (17)$$

Найдя плотность $\rho^{(A,S)}(x)$, энергию системы можно вычислить с помощью вириального эстиматора (14).

В табл. 1 и 2 в качестве иллюстрации вычислены статсуммы и плотности для систем из 2, 3 и 4 ферми-частиц со спином $s = 0$ при наличии и отсутствии взаимодействия.

Таблица 1

Статсуммы и плотности ферми-систем взаимодействующих частиц
без спина ($s = 0$)

N	$Z^{(A)}, \rho^{(A)}(x)$
2	$Z_{1^2} - Z_2$ $2Z_{1^2}\rho_{1^2}^{(1)}(x) - 2Z_2\rho_2^{(2)}(x)$
3	$Z_{1^3} - 3Z_{12} + 2Z_3$ $3Z_{1^3}\rho_{1^3}^{(1)}(x) - 3Z_{12}\rho_{12}^{(1)}(x) - 6Z_{12}\rho_{12}^{(2)}(x) + 6Z_3\rho_3^{(3)}(x)$
4	$Z_{1^4} - 6Z_{1^22} + 8Z_{13} + 3Z_{2^2} - 6Z_4$ $4Z_{1^4}\rho_{1^4}^{(1)} - 12Z_{1^22}\rho_{1^22}^{(1)} - 12Z_{1^22}\rho_{1^22}^{(2)} + 8Z_{13}\rho_{13}^{(1)} + 24Z_{13}\rho_{13}^{(3)} + 12Z_{2^2}\rho_{2^2}^{(2)} - 24Z_4\rho_4^{(4)}$

Таблица 2

Статсуммы и плотности ферми-систем не взаимодействующих частиц
без спина ($s = 0$)

N	$Z^{(A)}, \rho^{(A)}(x)$
2	$Z_1^2 - Z_2$ $2Z_1^2\rho_1(x) - 2Z_2\rho_2(x)$
3	$Z_1^3 - 3Z_1Z_2 + 2Z_3$ $3Z_1^3\rho_1(x) - 3Z_1Z_2\rho_1(x) - 6Z_1Z_2\rho_2(x) + 6Z_3\rho_3(x)$
4	$Z_1^4 - 6Z_1^2Z_2 + 8Z_1Z_3 + 3Z_2^2 - 6Z_4$ $4Z_1^4\rho_1 - 12Z_1^2Z_2\rho_1 - 12Z_1^2Z_2\rho_2 + 8Z_1Z_3\rho_1 + 24Z_1Z_3\rho_3 + 12Z_2^2\rho_2 - 24Z_4\rho_4$

В этих формулах везде для краткости опущен нормировочный множитель $\frac{1}{N!}$. Кроме того, в формулах для плотности (вторая строчка для каждого N) опущен множитель $\frac{1}{Z^{(A)}}$. Нижние индексы в табл. 1 являются известной краткой записью вектора \mathbf{C} [6]. Так, при $N = 4$ индекс $1^2 2$ означает $\mathbf{C} = (2, 1, 0, 0)$, а индекс $1 3$ означает $\mathbf{C} = (1, 0, 1, 0)$, и т.п. При наличии спина s перед каждым слагаемым как в выражении для $Z^{(A,S)}$, так и в выражении для $\rho^{(A,S)}(x)$ дополнительно появится множитель $(2s+1)$ в степени, равной числу циклов в данном слагаемом, т.е. $\sum_{\nu} C_{\nu}$. Так, например, при $N = 3$ для плотности имеем

$$\rho^{(A)}(x) = 3(2s+1)^3 Z_{1^3}\rho_{1^3}^{(1)} - 3(2s+1)^2 Z_{12}\rho_{12}^{(1)} - 6(2s+1)^2 Z_{12}\rho_{12}^{(2)} + 6(2s+1)Z_3\rho_3^{(3)}.$$

Заметим, что общее соотношение для плотности (17) переходит в (13) при отсутствии взаимодействия, поскольку в этом случае $Z^{(D)}(\mathbf{C}) = \prod Z_{\nu}^{C_{\nu}}$, и из (16) следует, что $\rho_{\mathbf{C}}^{(\eta)}(x) = \rho_{\eta}(x)$.

В методе МК с использованием ансамбля, расширенного по перестановкам, могут быть вычислены все величины, входящие в соотношения (13) и (17). Так, в случае не взаимодействующих частиц можно достаточно точно вычислить отношения статсумм Z_i и накопить гистограммы плотностей $\rho_{\mu}(x)$ для каждого перестановочного класса стандартными методами. Для системы взаимодействующих частиц имеет смысл сразу накапливать плотности $\rho_{\mathbf{C}}(x)$ для вершин всех траекторий, а не по отдельности каждое из слагаемых $\rho_{\mathbf{C}}^{(\eta)}$.

2.2. Вычисление статсумм и матриц плотности методом последовательного возведения в квадрат матрицы плотности. В случае если размерность конфигурационного пространства системы мала (а именно, $d \leq 2$, что имеет место, например, для двух взаимодействующих частиц в одном измерении либо для одной частицы в двумерном потенциале), то статсуммы и матрицы плотности можно

достаточно легко вычислить посредством последовательного возведения в квадрат матрицы плотности [9]. Этот подход оказывается возможным распространить и на системы многих частиц без взаимодействия, поскольку, как было показано выше, в этом случае задача сводится к набору одночастичных. Метод основан на конечномерном приближении функционального интеграла для матрицы плотности в координатном представлении [2].

Записывая оператор плотности в виде произведения n высокотемпературных сомножителей

$$\hat{\rho} = \exp\left(-\beta\hat{H}\right) = \exp\left(-\frac{\beta}{n}\hat{H}\right) \dots \exp\left(-\frac{\beta}{n}\hat{H}\right)$$

и используя координатное представление, получаем при достаточно больших n высокотемпературную аппроксимацию третьего порядка точности для каждого множителя:

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \epsilon) = \langle \mathbf{x} | \exp(-\epsilon\hat{H}) | \mathbf{x}' \rangle = \left(\frac{1}{2\pi\epsilon}\right)^{dN/2} \exp\left(-\frac{\epsilon}{2}\phi(\mathbf{x}) - \frac{1}{2\epsilon}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 - \frac{\epsilon}{2}\phi(\mathbf{x}')\right) + O(\epsilon^3),$$

где $\epsilon = \frac{\beta}{n}$. В результате получаем известное соотношение для матрицы плотности – фейнмановский интеграл по путям в n -вершинном приближении [2]:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \beta) &= \\ &= \int \dots \int \prod_{i=1}^n \left(\frac{n}{2\pi\beta}\right)^{dN/2} \exp\left(-\frac{\beta}{2n}\phi(x_{i-1}) - \frac{n}{2\beta}(x_{i-1} - x_i)^2 - \frac{\beta}{2n}\phi(x_i)\right) dx_1 \dots dx_{n-1} + O(\epsilon^2), \end{aligned} \quad (18)$$

где $x_0 = x$, $x_n = x'$. Напомним, что здесь $\phi(\mathbf{x})$ – полная потенциальная энергия системы, включающая парные взаимодействия и внешнее поле. Тогда для статсуммы $Z^{(D)}$ и плотности $\rho^{(D)}(\mathbf{x})$ распределения в конфигурационном пространстве системы имеем

$$Z^{(D)} = \int \rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta) d\mathbf{x}, \quad \rho^{(D)}(\mathbf{x}) = \frac{\rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta)}{Z^{(D)}}. \quad (19)$$

Сама процедура последовательного возведения в квадрат состоит в том, что интеграл (18) для $n = 2^p$ можно вычислить с помощью следующей последовательности интегрирований [9]:

$$\begin{aligned} g_1^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \left(\frac{n}{2\pi\beta}\right)^{dN/2} \exp\left(-\frac{\beta}{2n}\phi(\mathbf{x}) - \frac{n}{2\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 - \frac{\beta}{2n}\phi(\mathbf{x}')\right), \\ g_2^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \int d\mathbf{x}'' g_1^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'') g_1^{(0)}(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'), \\ &\dots\dots\dots \\ g_{2^p}^{(p)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \int d\mathbf{x}'' g_{2^{p-1}}^{(p-1)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'') g_{2^{p-1}}^{(p-1)}(\mathbf{x}'', \mathbf{x}'), \\ \rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \beta) &= g_n^{(p)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'). \end{aligned} \quad (20)$$

Эта процедура получается из (18) путем перестановки пределов интегрирования в многократном интеграле и последовательного взятия получившихся вложенных интегралов. Последовательность операций (20) представляет собой p последовательных возведений в квадрат высокотемпературной матрицы плотности $g_1^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ с получением на p -ом шаге матрицы плотности $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \beta)$.

Здесь необходимо отметить, что поскольку для системы N частиц в d -мерном пространстве размерность конфигурационного пространства равна dN и вдоль каждого измерения используется сетка из N_{grid} узлов, то тогда для хранения матрицы $g_{2^p}^{(p)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ потребуется массив размерностью $2Nd$ с числом элементов $(N_{\text{grid}})^{2Nd}$, что является существенным практическим ограничением данного метода. Так, если использовать фиксированную сетку с постоянным шагом, то при больших n функция $g_1^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ имеет дельтаобразный вид и плотность узлов сетки должна быть достаточно велика. С другой стороны, при достаточно низкой температуре T функция $g_n^{(p)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ обладает существенной протяженностью. Все это приводит к тому, что, например, при расчетах для системы в гармонической потенциальной яме для абсолютной точности порядка 10^{-5} (в приведенных единицах) необходимо использовать порядка $N_{\text{grid}} = 100$

узлов; следовательно, при $dN = 1$ потребуется одновременно хранить и обрабатывать массив из 10^4 чисел, а при $dN = 2$ — порядка 10^8 , что еще возможно, но при $dN = 3$ — порядка 10^{12} чисел, что на современных машинах, по-видимому, невозможно. В настоящее время разрабатывается много методов для эффективных и экономных представлений многомерных волновых функций на сетках, начиная от адаптивных сеток [11, 12] и кончая зависящими от времени представлениями дискретной переменной (discrete variable representation) [13]. Однако реализация и тестирование этих методов с применением процедуры (20) является отдельной задачей и выходит за рамки данной работы.

Итак, данный подход позволяет получить численные данные в малоразмерных задачах. Эти данные имеют как самостоятельный интерес, так и могут быть использованы для тестирования МК-методов.

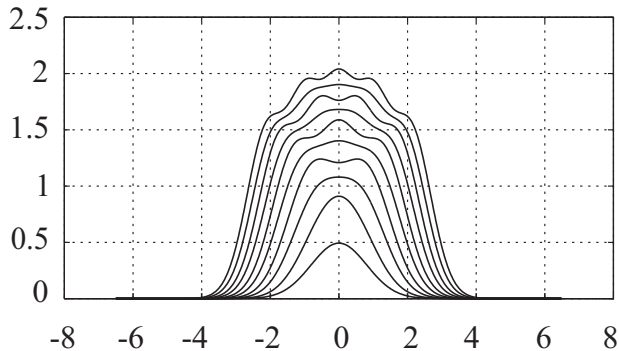


Рис. 1. Плотности для систем от 1 до 10 невзаимодействующих ферми-частиц со спином $1/2$ в гармоническом поле при $\beta = 2$, вычисленные при помощи последовательного возведения в квадрат матрицы плотности

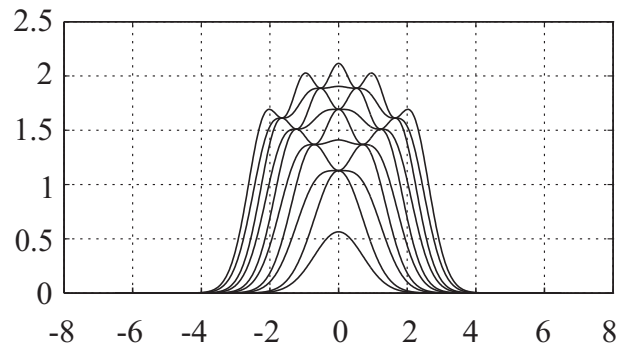


Рис. 2. Плотности для систем от 1 до 10 невзаимодействующих ферми-частиц со спином $1/2$ в гармоническом поле при $\beta = 8$, вычисленные при помощи последовательного возведения в квадрат матрицы плотности

2.3. Расчеты для гармонического потенциала и Морзе-осциллятора. В рассматриваемых далее задачах для системы невзаимодействующих частиц в гармоническом поле и потенциале Морзе в одномерном пространстве, для которых имеется точное решение, расчет плотностей при конечных температурах, согласно формуле (13), сводится к набору одномерных задач при кратных обратных температурах $\nu\beta$, которые решаются путем применения процедуры (20). Процедура же, в свою очередь, сводится к вычислению одномерных интегралов по x'' для каждой пары значений (x, x') по некоторому интервалу $[-x_{\text{cut}}, x_{\text{cut}}]$, за пределами которого вкладом подынтегрального выражения можно пренебречь. Величину x_{cut} и число узлов квадратурной формулы можно выбрать с учетом наглядного представления о функциональном интеграле (18) как корреляционной функции координат концов полимера, свернутого в клубок, во внешнем поле $\psi(x)$ и с расстоянием между соседними мономерами порядка тепловой длины волны де Бройля $\Lambda\left(\frac{\beta}{n}\right) = \sqrt{\frac{2\pi\beta}{n}}$. Отсюда x_{cut} выбирается так, чтобы за пределами интервала $[-x_{\text{cut}}, x_{\text{cut}}]$ величина $\exp(-\beta\psi(x))$ была пренебрежимо мала, а число узлов квадратурной формулы — так, чтобы расстояние между соседними узлами δx было достаточно мало по сравнению с $\Lambda\left(\frac{\beta}{n}\right)$ для корректного численного учета множителя $\exp\left(-\frac{n}{2\beta}(x-x')^2\right)$.

При численной реализации этого метода возникает проблема знаков: с одной стороны, каждое слагаемое в сумме в правой части (13) с уменьшением температуры T или с увеличением числа частиц N экспоненциально стремится к нулю; с другой стороны, все эти величины (с чередующимися знаками) все лучше и лучше компенсируют друг друга при сложении. Поскольку мантисса в машине имеет конечное число битов, то начиная с некоторых T и N все значащие биты в мантиссе для статсуммы и других величин обнуляются, остаются лишь шумы округления. Проблему удалось решить при помощи увеличения размера мантиссы с использованием библиотеки MPFR. В результате более точного представления величин в (13) не все биты обнуляются при вычитании, а шумы округления оказываются достаточно малыми по сравнению с величиной результата.

На рис. 1 и 2 представлены вычисленные с помощью процедуры (20) и формулы (13) плотности для системы $N = 1, \dots, 10$ невзаимодействующих ферми-частиц со спином $1/2$ в гармоническом поле $\psi(x) = \frac{x^2}{2}$ при обратных температурах $\beta = 2$ и $\beta = 8$ соответственно. Энергии, вычисленные с помощью

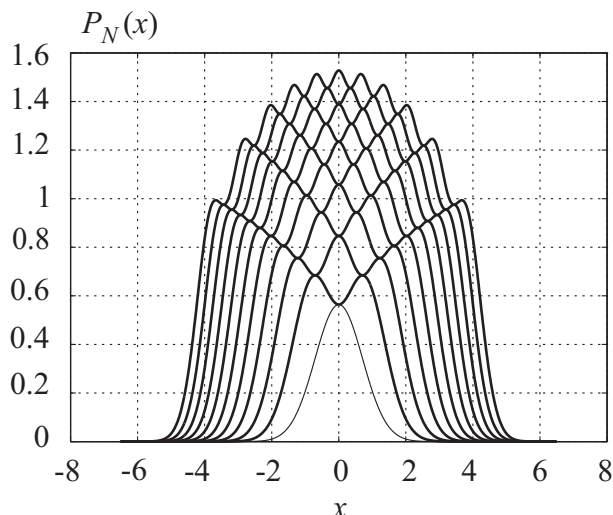


Рис. 3. Плотности для систем от 1 до 11 не взаимодействующих ферми-частиц без спина в гармоническом поле при $\beta = 8$, вычисленные при помощи последовательного возведения в квадрат матрицы плотности

данных плотностей, отличаются от точных не более чем на 10^{-5} в приведенных единицах энергии (0.002% от энергии основного состояния). При фиксированных параметрах наш метод дает абсолютную погрешность одного порядка для энергий и плотностей, так что относительная погрешность “хвостов” плотности распределения возрастает. При вычислениях использовались следующие параметры: размер мантиссы $N_{\text{bits}} = 256$, число вершин $n = 1024$ (10 итераций), число узлов сетки $N_{\text{grid}} = 700$, предел интегрирования $x_{\text{cut}} = 6.5$. На рис. 3 представлены вычисления для $N = 1, \dots, 11$ частиц без спина. Расчет проводился при размере мантиссы $N_{\text{bits}} = 768$, числе узлов сетки $N_{\text{grid}} = 701$, количестве вершин $n = 1024$ и пределе интегрирования $x_{\text{cut}} = 6.5$.

Надо отметить, что нормировочный коэффициент $A = \left(\frac{n}{2\pi\beta}\right)^{dN/2}$ в определении функции $g_1^{(0)}(x, x')$ существен. При его отсутствии быстро возникает численное переполнение, поскольку после p итераций (20) величины Z и $\rho(x)$ зависят от A как A^{2^p} . Кроме того, он обеспечивает правильное значение статсуммы Z . Так, на рис. 4 представлены результаты вычисления свободных энергий для систем $N = 2, 4, 6, 8, 10$ не взаимодействующих ферми-частиц со спином $1/2$ в гармоническом поле согласно соотношению $F = -\log Z/\beta$. Использовались следующие параметры расчета: размер мантиссы $N_{\text{bits}} = 270$, число вершин $n = 128$, число узлов сетки $N_{\text{grid}} = 250$, предел интегрирования $x_{\text{cut}} = 6.5$.

Значение $N = 10$ — это максимальное число бесспиновых фермионов в гармоническом поле, для которого можно произвести вычисления предложенным методом при размере мантиссы $N_{\text{bits}} = 256$ и температуре $\beta = 8$. Уже для систем на одну частицу больше все значащие биты в мантиссе обнуляются, а вместо плавного графика плотности распределения получается шум. Подчеркнем, что это полностью аналогично тому, что происходит в МК-методах при вычислениях для ферми-систем, только, к сожалению, там шумы имеют статистическое происхождение вследствие ограниченности и большой дисперсии выборки и рецепт с увеличением мантиссы не годится. Тем не менее, как указывалось выше, в МК-методе мы надеемся значительно ослабить данную проблему с помощью использования техники расширенных ансамблей [3].

На рис. 5 приведены плотности распределения для систем, содержащих от 1 до 5 фермионов без спина в потенциале Морзе $\phi(x) = A(\exp(-2\alpha x) - 2\exp(-\alpha x))$, где полагалось $\alpha = 1$ [15]. Согласно [15], уровни энергии частицы в потенциале Морзе имеют значения

$$E_n = -A \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2A}} \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2, \tag{21}$$

где количество уровней (связанных состояний) находится из ограничения

$$0 \leq n \leq \sqrt{2A} - \frac{1}{2}. \tag{22}$$

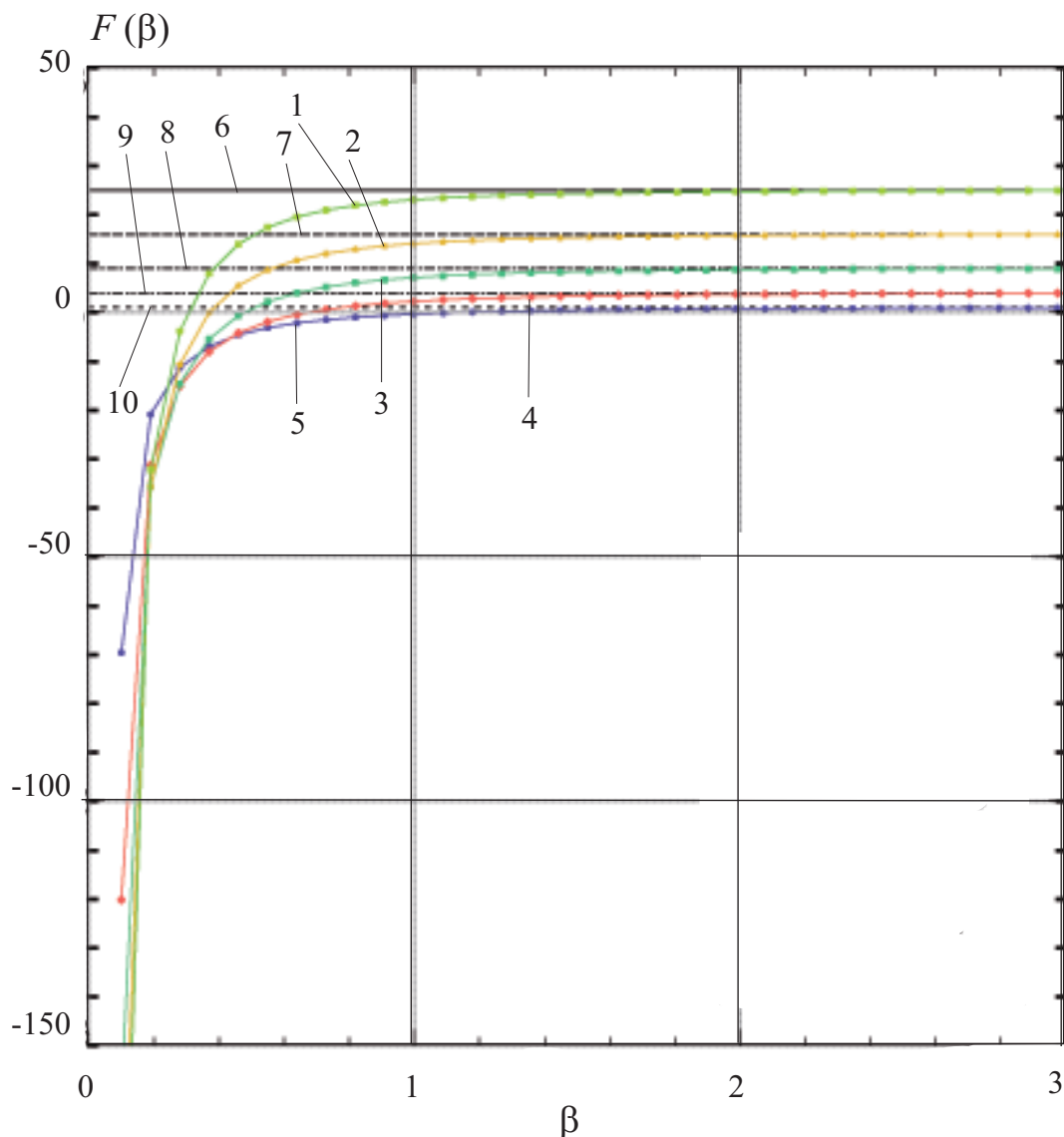


Рис. 4. Свободные энергии для систем 2, 4, 6, 8 и 10 не взаимодействующих ферми-частиц со спином $1/2$ в гармоническом поле, вычисленные при помощи последовательного возведения в квадрат матрицы плотности. Кривая 1 соответствует $N = 10$, 2 — $N = 8$, 3 — $N = 6$, 4 — $N = 4$, 5 — $N = 2$. Прямая 6 соответствует $E_{10} = 25.0$, 7 — $E_8 = 16.0$, 8 — $E_6 = 9.0$, 9 — $E_4 = 4.0$, 10 — $E_2 = 1.0$

Так, для $A = 13$, для которого проводился расчет, получаем пять связанных уровней $n = 0, 1, 2, 3, 4$. Расчет проводился при $\beta = 12$ при следующих параметрах: размер мантиссы $N_{\text{bits}} = 800$, число вершин $n = 1024$, число узлов сетки $N_{\text{grid}} = 801$, интегрирование производилось на интервале $[-1.5, 10.5]$. При столь низком значении β ферми-частицы, согласно принципу Паули, находятся на самых нижних уровнях и энергии систем с разным числом частиц (вернее, их разности) можно сравнивать с точно известными собственными значениями потенциала Морзе (см. следующий раздел).

Мы провели также расчет для системы двух бесспиновых ферми-частиц с кулоновским отталкиванием $v(x) = \frac{1}{|x|}$ в одномерном гармоническом поле. Антисимметрия матрицы плотности достигается путем использования в процедуре (20) антисимметризованного пропагатора

$$g_1^{(A),(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{2} [g_1^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - g_1^{(0)}(\mathbf{x}, P\mathbf{x}')],$$

где P — перестановка координат двух частиц.

Нас рис. 6 представлен график для двухчастичной плотности данной системы при обратной температуре $\beta = 8$. Значение энергии получилось равным $E = 2.667$. Представляется, что это и есть оценка

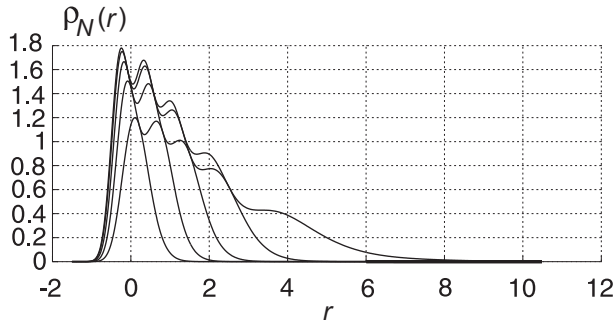


Рис. 5. Плотности для систем от 1 до 5 бесспиновых ферми-частиц в потенциале Морзе с глубиной ямы $A = 13$ при $\beta = 12$, вычисленные при помощи последовательного возведения в квадрат матрицы плотности

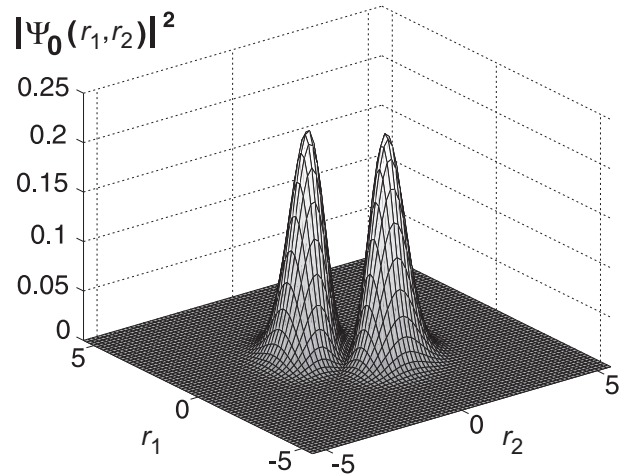


Рис. 6. Двухчастичная плотность для системы двух бесспиновых ферми-частиц с кулоновским отталкиванием в одномерном гармоническом поле при обратной температуре $\beta = 8$

энергии основного состояния данной системы, которая больше энергии $E_0 = 2.0$ основного состояния двух бесспиновых ферми-частиц в одномерном гармоническом поле без взаимодействия вследствие кулоновского отталкивания. Расчет проводился при следующих значениях параметров: размер мантисы стандартный (тип double), число вершин $n = 64$, число узлов сетки вдоль каждой стороны квадрата $N_{\text{grid}} = 64$, граница интегрирования $x_{\text{cut}} = 5.5$.

3. Ферми-системы и возбужденные состояния.

3.1. Системы невзаимодействующих частиц. Как упоминалось во введении, проблема МК-моделирования ферми-систем и проблема вычисления возбужденных состояний связаны между собой [1]: найдя алгоритм решения первой проблемы при низких температурах, мы можем использовать его для решения второй проблемы.

Действительно, предположим, что мы задались целью вычислить m -е возбужденное состояние бесспиновой ферми-системы невзаимодействующих частиц в некотором потенциале $\psi(x)$. Для этого рассмотрим два случая, когда наша система содержит $N = m + 1$ и $N = m$ частиц соответственно. Тогда при достаточно малой температуре T (или $\beta \rightarrow \infty$), согласно принципу Паули, фермионы займут N самых нижних уровней, и, используя упомянутый выше алгоритм, мы можем вычислить соответствующие плотности

$$\rho^{(m)}(x) \approx \sum_{i=0}^{m-1} |\Psi_i(x)|^2, \quad \rho^{(m+1)}(x) \approx \sum_{i=0}^m |\Psi_i(x)|^2,$$

где нумерация состояний системы начинается с нуля. Энергии вычисляются с помощью вириального эстиматора (14). Затем, взяв разность этих плотностей и энергий, можно получить плотность и энергию m -го возбужденного уровня:

$$|\Psi_m(x)|^2 = \rho^{(m+1)}(x) - \rho^{(m)}(x), \quad E_m = U^{(m+1)} - U^{(m)}. \tag{23}$$

Таким образом, для вычисления m -го уровня необходимо рассмотреть системы, содержащие m и $m + 1$ частиц.

Проиллюстрируем данную идею для возбужденного состояния с номером $m = 1$. В этом случае нужны статсуммы и плотности систем с $N = m = 1$ и $N = m + 1 = 2$. Для $N = 2$ имеем (см. табл. 2)

$$Z^{(2)} = \frac{Z_1^2 - Z_2}{2}, \quad \rho^{(2)}(x) = \frac{Z_1^2 \rho_1(x) - Z_2 \rho_2(x)}{Z^{(2)}}. \tag{24}$$

Для $N = 1$ все просто: $Z^{(1)} = Z_1$ и $\rho^{(1)}(x) = \rho_1(x)$ (здесь использованы обозначения раздела 2.1). Тогда, применяя формулу (23), имеем $|\Psi_1(x)|^2 = \frac{Z_1^2 \rho_1(x) - Z_2 \rho_2(x)}{Z^{(2)}} - \rho_1(x)$. Аналогичные формулы можно

выписать и для более высоких уровней на основе табл. 2. Численная реализация данного метода на основе процедуры (20) была проведена для системы невзаимодействующих частиц в потенциале Морзе. На рис. 7 приведены основное и четыре возбужденных связанных состояний осциллятора Морзе, полученные вычитанием плотностей, приведенных на рис. 5. Там же на графиках построены точные зависимости квадратов волновых функций [15]. Для основного и следующих трех состояний отклонений от теоретических не видно, и лишь для четвертого возбужденного состояния наблюдаются небольшие отклонения. Это связано с тем, что данное волновое состояние достаточно протяженно и уже чувствуется наличие предела интегрирования x_{cut} справа.

Таблица 3
Сравнение точных и вычисленных значений энергии потенциала Морзе

	E_{vr}	E_{th}
$n = 0$	-10.577	-10.575
$n = 1$	-6.4787	-6.4765
$n = 2$	-3.3798	-3.3775
$n = 3$	-1.2802	-1.2784
$n = 4$	-0.1779	-0.1794

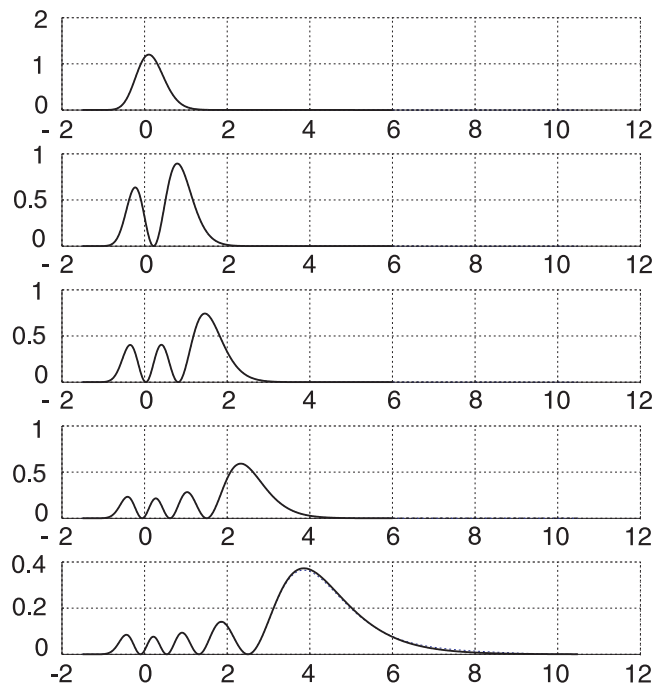


Рис. 7. Первые пять возбужденных состояний Морзе-осциллятора, вычисленные при помощи разности плотностей систем ферми-копий

Здесь опять проблема знаков была ослаблена за счет увеличения размера мантиссы. В табл. 3 приведены значения энергий E_{vr} , рассчитанные с помощью эстиматора (14), и точные E_{th} , вычисленные по формуле (21). Наибольшая ошибка — для четвертого состояния — составляет меньше 0.01 %.

3.2. Обобщение на случай систем частиц со взаимодействием. Обобщим предыдущие соображения на случай произвольной системы \hat{H} из N частиц со спином и взаимодействием в d -мерном пространстве. В этом случае опять введем в рассмотрение бесспиновую ферми-систему невзаимодействующих “частиц” \hat{H}^* , но в качестве “частиц” системы \hat{H}^* возьмем копии системы \hat{H} [1]. Иными словами, пусть система \hat{H}^* находится в Nd -мерном пространстве во внешнем поле $\phi(\mathbf{x})$. При этом на полную волновую функцию системы \hat{H}^* наложено условие антисимметрии, а на волновые функции каждой копии — условия симметрии системы \hat{H} . В этом случае физические соображения остаются теми же, как и прежде, и при достаточно большом β плотность и энергия m -го возбужденного уровня даются формулами (23).

Проиллюстрируем эту идею на примере системы \hat{H} двух ферми-частиц со спином s в d -мерном пространстве, взаимодействующих с парным потенциалом $v(x_i - x_j)$ и находящихся во внешнем поле $\psi(x_i)$. Предположим, нас интересует возбужденное состояние номер $m = 2$. В этом случае статсумма и плотность рассматриваемой системы \hat{H} (т.е. каждой копии) следующие (первая строка табл. 1):

$$Z^{(A)} = \frac{Z_1^2 - Z_2}{2}, \quad \rho^{(A)}(x) = \frac{Z_1^2 \rho_1^{(1)}(x) - Z_2 \rho_2^{(2)}(x)}{Z^{(A)}}. \quad (25)$$

Далее надо рассмотреть бесспиновые ферми-системы \hat{H}^* из $N_c = m = 2$ и $N_c = m - 1 = 1$ невзаимодействующих копий. Выражения для их статсумм и плотностей даются формулой (13) в разделе 2.1. Для

$N_c = 2$ имеем

$$Z^{*(2)} = \frac{Z_1^{*2} - Z_2^*}{2}, \quad \rho^{*(2)}(x) = \frac{Z_1^{*2} \rho_1^*(x) - Z_2^* \rho_2^*(x)}{Z^{*(2)}}, \quad (26)$$

а для $N_c = 1$ выполнено $Z^{*(1)} = Z_1^*$ и $\rho^{*(1)}(x) = \rho_1^*(x)$. Здесь использованы обозначения раздела 2.1. Звездочки введены для того, чтобы различать величины системы \hat{H} и системы \hat{H}^* . Теперь существенный момент: поскольку в нашем случае не взаимодействующими “частицами” являются копии системы \hat{H} , то в качестве Z_1^* и $\rho_1^*(x)$ выступают $Z^{(A)}$ и $\rho^{(A)}(x)$ при обратной температуре β соответственно. С помощью соотношения (7) получим $Z_2^* = Z_1^*(2\beta) = Z^{(A)}(2\beta)$ и $\rho_2^*(x) = \rho_1^*(x; 2\beta) = \rho^{(A)}(x; 2\beta)$. Подставляя эти равенства в формулу (26), для системы из двух копий приходим к соотношениям

$$\begin{aligned} Z^{*(1)} &= Z^{(A)}(\beta), & \rho^{*(1)} &= \rho^{(A)}(x; \beta), \\ Z^{*(2)} &= \frac{[Z^{(A)}(\beta)]^2 - Z^{(A)}(2\beta)}{2}, & \rho^{*(2)}(x) &= \frac{[Z^{(A)}(\beta)]^2 \rho^{(A)}(x; \beta) - Z^{(A)}(2\beta) \rho^{(A)}(x; 2\beta)}{Z^{*(2)}}. \end{aligned} \quad (27)$$

В итоге для плотности $|\Psi_2(x)|^2$ имеем

$$|\Psi_2(x)|^2 = \rho^{*(2)}(x) - \rho^{*(1)}(x). \quad (28)$$

Мы предполагаем в дальнейшем реализовать и протестировать данный подход с помощью квантового МК-метода в расширенном ансамбле [3], вычисляя циклические статсуммы и их отношения и затем находя плотности (13) и энергии $U^{(m)}$ и $U^{(m-1)}$ согласно (14).

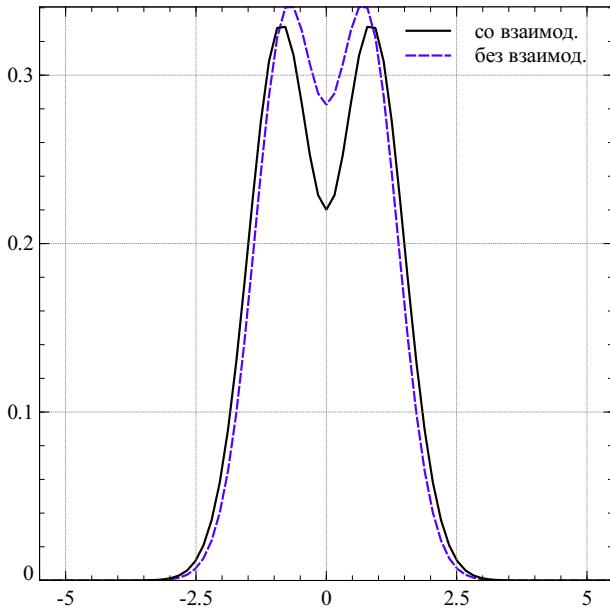


Рис. 8. Плотности основного состояния для системы двух бесспиновых ферми-частиц в одномерном гармоническом поле при отсутствии и наличии кулоновского взаимодействия, $\beta = 8$

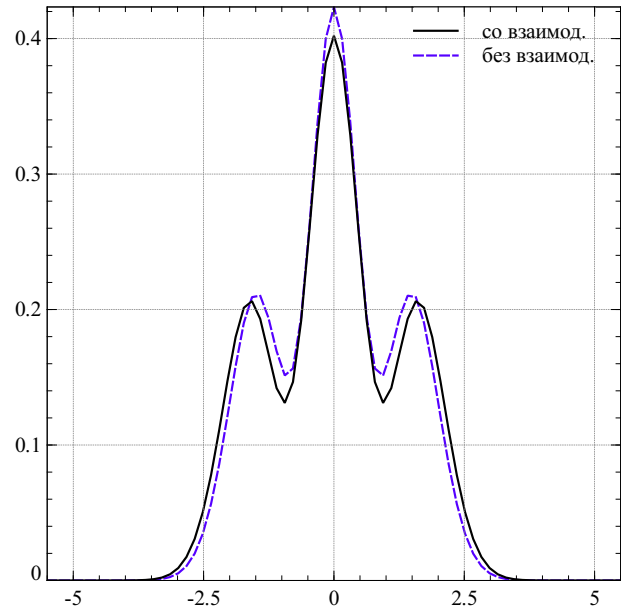


Рис. 9. Плотности первого возбужденного состояния для двух частиц в одномерном гармоническом поле при отсутствии и наличии кулоновского взаимодействия, $\beta = 8$

3.2.1. Расчеты для системы двух частиц на основе метода последовательного возведения в квадрат матрицы плотности. Описанная выше идея вычисления возбужденных состояний была реализована на основе процедуры (20) для системы \hat{H} двух бесспиновых ферми-частиц в одномерном гармоническом поле с кулоновским отталкиванием $v(x) = \frac{1}{|x|}$ и с целью контроля для той же системы, но без взаимодействия. Вычисления проводились следующим образом. При $\beta = 8$ находилась матрица плотности $\rho_{12}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \beta) \equiv \rho^{(D)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \beta) = g_n^{(p)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ системы \hat{H} после $p = 6$ итераций; перемножением матрицы $g_n^{(p)}$ на себя находилась $\rho_{12}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; 2\beta) \equiv \rho^{(D)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; 2\beta)$. Далее вычислялись обменные матрицы плотности $\rho_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \beta) \equiv \rho^{(D)}(\mathbf{x}, P\mathbf{x}'; \beta) = g_n^{(p)}(\mathbf{x}, P\mathbf{x}')$ и $\rho_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; 2\beta)$, где P — перестановка координат двух частиц. Для плотностей $\rho_{12}(x)$ и $\rho_2(x)$ имеем $\rho_{12}(x) = \rho_{12}(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta)$ и $\rho_2(x) = \rho^{(D)}(\mathbf{x}, P\mathbf{x}; \beta)$. Аналогично находятся плотности и для обратной температуры 2β .

Таблица 4
Вычисленные уровни энергий для двух ферми-частиц в одномерном гармоническом поле с кулоновским отталкиванием E_i и без взаимодействия E_n

	E_n	E_i
$n = 0$	1.996442	2.722402
$n = 1$	2.994496	3.720779
$n = 2$	—	4.649217

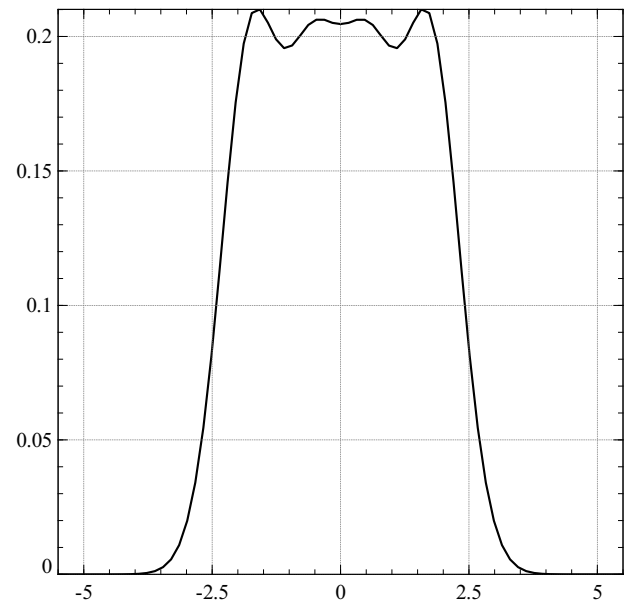


Рис. 10. Плотность второго возбужденного состояния для двух частиц в одномерном гармоническом поле при наличии кулоновского взаимодействия, $\beta = 8$

После вычисления всех необходимых плотностей и статсумм, согласно формулам (25)–(27), находились плотности систем из одной и двух копий $\rho^{*(1)}(x)$ и $\rho^{*(2)}(x)$ соответственно. На основе их разности находилась плотность первого возбужденного состояния. Далее вычислялась плотность системы из трех копий $\rho^{*(3)}(x)$ при помощи формулы из второй строчки табл. 2, после чего была получена плотность второго возбужденного состояния. Результаты вычисления плотности основного и первых двух возбужденных состояний представлены на рис. 8–10. Для случая без взаимодействия удалось получить лишь первое возбужденное состояние. Включение взаимодействия несколько ослабило проблему знаков и позволило получить второе возбужденное состояние. В табл. 4 приведены вычисленные значения энергии состояний при наличии кулоновского отталкивания E_i и при отсутствии взаимодействия E_0 .

Кроме того, были вычислены двухчастичные плотности распределения для первых двух возбужденных состояний, представленные на рис. 11 и 12. Двухчастичные плотности вычислялись по той же схеме, что и одночастичные, а именно, двухчастичная плотность системы \hat{H} имеет вид

$$\rho^{(A)}(x, y; \beta) = \rho^{(D)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \beta) - \rho^{(D)}(\mathbf{x}, P\mathbf{x}'; \beta) = g_n^{(p)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - g_n^{(p)}(\mathbf{x}, P\mathbf{x}'). \quad (29)$$

Поскольку копии в системе \hat{H}^* при низких температурах занимают самые нижние уровни, то, как и выше для одночастичных плотностей, двухчастичная плотность m -го состояния $\rho(x, y)$ выражается разностью соответствующих плотностей для систем из $m + 1$ и m копий:

$$\rho(x, y) = \rho^{(m+1)}(x, y) - \rho^{(m)}(x, y). \quad (30)$$

Поскольку рассматриваемая система \hat{H} состоит всего из двух частиц, для построения плотности $\rho^{(m+1)}(x, y)$ использовались формулы из табл. 2, в которых вместо $\rho_\nu(x)$ надо подставить $\rho(x, y; \nu\beta)$.

Отметим, что двухчастичные и одночастичные плотности связаны очевидным соотношением

$$\rho(x) = \int dx' dy' [\delta(x - x') + \delta(x - y')] \rho(x', y'),$$

которое, разумеется, выполняется для вычисленных выше плотностей.

4. Метод рекуррентного вычитания состояний (РВС).

4.1. Общая идея. Как известно, при помощи релаксационных методов, в частности псевдо-спектрального метода, применяемого для вычисления основного состояния, можно вычислять также и возбужденные состояния путем ортогонализации пропагатора на каждом шаге по отношению к нижележащим

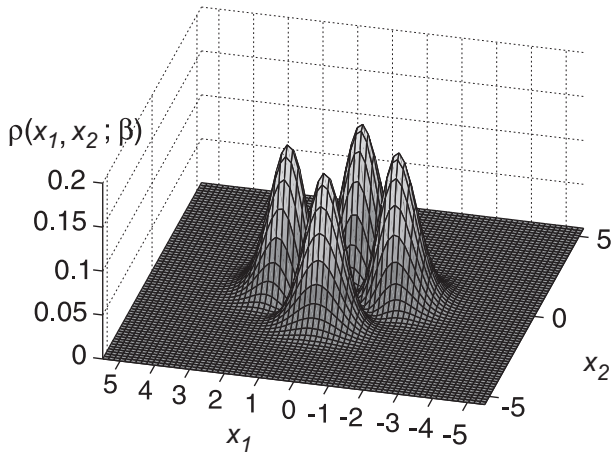


Рис. 11. Двухчастичная плотность первого возбужденного состояния системы двух бесспиновых ферми-частиц с кулоновским отталкиванием в одномерном гармоническом поле при $\beta = 8$, $v(x) = \frac{1}{|x|}$, $E_1 = 3.7208$

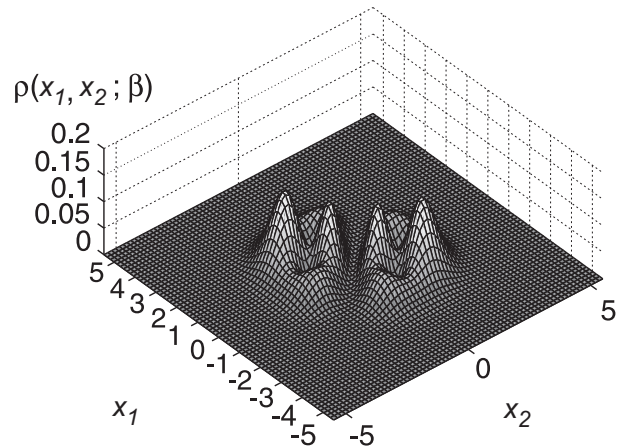


Рис. 12. Двухчастичная плотность второго возбужденного состояния системы двух бесспиновых ферми-частиц с кулоновским отталкиванием в одномерном гармоническом поле при $\beta = 8$, $v(x) = \frac{1}{|x|}$, $E_2 = 4.6492$

уровням [14]. Представляется весьма интересным применить подобный подход в рамках нашей процедуры (20).

Идея предлагаемого метода основана на следующем разложении матрицы плотности по собственным функциям гамильтониана рассматриваемой системы:

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \beta) = \sum_i e^{-\beta E_i} \Psi_i(\mathbf{x}) \Psi_i^*(\mathbf{x}'); \tag{31}$$

предполагается, что уровни энергии невырождены и $E_0 < E_1 < \dots < E_i < E_{i+1} < \dots$.

Определение основного состояния с помощью метода процедуры (20) основано на том факте, что энергия основного состояния E_0 минимальна, и поэтому при $\beta \rightarrow \infty$ в сумме (31) будет экспоненциально преобладать первый член с $i = 0$. Тогда диагональная часть матрицы плотности $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}; \beta)$ даст с высокой точностью плотность основного состояния (см. раздел 2). Теперь допустим, что мы вычли из матрицы плотности первый член суммы в (31):

$$\rho^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \beta) = \rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \beta) - e^{-\beta E_0} \Psi_0(\mathbf{x}) \Psi_0^*(\mathbf{x}'). \tag{32}$$

Новая матрица плотности $\rho^{(1)}$ соответствует гамильтониану $\hat{H}^{(1)}$, который получается из исходного гамильтониана \hat{H} отбрасыванием первого (основного) состояния и соответствующего ему уровня энергии. Теперь, если мы используем $\rho^{(1)}$ в качестве пропагатора в (20), то при $\beta \gg 1$ мы получим первое возбужденное состояние.

Необходимо вначале понять, как такую процедуру осуществить на основе метода (20).

Заметим, что $g_1^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ в (20) представляет собой правильный высокотемпературный пропагатор, который является аппроксимацией матрицы плотности $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \epsilon)$:

$$g_1^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \epsilon) + O(\epsilon^3). \tag{33}$$

Здесь введено обозначение $\epsilon = \frac{\beta}{n} \ll 1$. Теперь применим соотношение (32) к пропагатору:

$$g_1^{(1),(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = g_1^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - e^{-\epsilon E_0} \Psi_0(\mathbf{x}) \Psi_0^*(\mathbf{x}'). \tag{34}$$

Найдем второй член в правой части данного соотношения. Следует учесть, что итерация номер p процедуры (20) соответствует системе при обратной температуре β , причем $g_n^{(p)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ — ее матрица плотности. Тогда при $\beta \gg 1$ имеем

$$g_n^{(p)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \beta) \approx e^{-\beta E_0} \Psi_0(\mathbf{x}) \Psi_0^*(\mathbf{x}'). \tag{35}$$

Отсюда $\Psi_0(\mathbf{x})\Psi_0^*(\mathbf{x}') = e^{\beta E_0} g_n^{(p)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ и $e^{-\epsilon E_0} \Psi_0(\mathbf{x})\Psi_0^*(\mathbf{x}') = e^{(\beta-\epsilon)E_0} g_n^{(p)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$. Пропагатор (34) для системы $\widehat{H}^{(1)}$ принимает вид

$$g_1^{(1),(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = g_1^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - e^{(\beta-\epsilon)E_0} g_n^{(p)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'). \tag{36}$$

Значение уровня E_0 можно определить через вириальный эстиматор (см. (14)) либо способом, который будет описан ниже. Если теперь подставим $g_1^{(1),(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ вместо $g_1^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ в процедуру (20), то получим матрицу плотности $g_n^{(1),(p)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ и плотность $\rho^{(1)}(\mathbf{x}; \beta)$ основного состояния системы $\widehat{H}^{(1)}$, т.е. исходной системы \widehat{H} с отброшенным первым уровнем. Очевидно, что $\rho^{(1)}(\mathbf{x}; \beta)$ является плотностью первого возбужденного состояния для исходной системы \widehat{H} .

Ясно, что эта схема по своей сути рекурсивна, т.е. с помощью описанного выше способа у системы $\widehat{H}^{(1)}$ в свою очередь тоже можно отбросить основное состояние, получив систему $\widehat{H}^{(2)}$, а затем, применив для нее метод (20), получить плотность второго возбужденного состояния $\rho^{(2)}(\mathbf{x}; \beta)$ исходной системы \widehat{H} , и т.д. Для пропагатора $g_1^{(k),(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, соответствующего системе $\widehat{H}^{(k)}$, имеем следующее рекуррентное соотношение:

$$g_1^{(k),(0)} = g_1^{(k-1),(0)} - \exp [(\beta - \epsilon)E_{k-1}] g_n^{(k-1),(p)}. \tag{37}$$

Здесь в качестве начального значения $g_1^{(0),(0)}$ берется $g_1^{(0)}$ из (20).

На практике при реализации данной схемы был использован следующий прием. Дело в том, что при больших обратных температурах $\beta \gg 1$ след матрицы плотности $Z^{(k)} = \text{Sp } \rho^{(k)}$ системы $\widehat{H}^{(k)}$ либо экспоненциально возрастает, либо экспоненциально убывает. Действительно, из соотношения (31) следует, что при $\beta \gg 1$ выполнено

$$Z^{(k)} \approx e^{-\beta E_k}; \tag{38}$$

например, для гармонического осциллятора, для которого $E_0 = 1/2$, величина $Z^{(0)}$ будет экспоненциально убывать с увеличением β . Следовательно, таким же образом будут вести себя и матрицы $g^{(k),(q)}$ при выполнении итераций. Поэтому, чтобы предотвратить возможную потерю точности, в процедуру (20) была добавлена адаптивная перенормировка матриц $g_{2^q}^{(a)}$ на 1:

$$\begin{aligned} \widetilde{g}_1^{(k),(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &\equiv g_1^{(0),(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') - \sum_{0 \leq j \leq k-1} \exp [(\beta - \epsilon)E_j] g_n^{(j),(p)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \\ Q^{(k),(0)} &= \int \widetilde{g}_1^{(k),(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) d\mathbf{x}, \\ g_1^{(k),(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{\widetilde{g}_1^{(k),(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}{Q^{(k),(0)}}, \\ \dots\dots\dots \\ \widetilde{g}_{2^q}^{(k),(q)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \int g_{2^{q-1}}^{(k),(q-1)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'') g_{2^{q-1}}^{(k),(q-1)}(\mathbf{x}'', \mathbf{x}') d\mathbf{x}'' \quad \text{для } 1 \leq q \leq p, \\ Q^{(k),(q)} &= \int \widetilde{g}_{2^q}^{(k),(q)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) d\mathbf{x}, \\ g_{2^q}^{(k),(q)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \frac{\widetilde{g}_{2^q}^{(k),(q)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}{Q^{(k),(q)}}, \\ \dots\dots\dots \\ \rho(\mathbf{x}, \beta) &= g_n^{(k),(p)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}). \end{aligned} \tag{39}$$

Здесь за каждую итерацию матрица $g_{2^q}^{(k),(q)}$ перенормируется на 1 делением на величину $Q^{(k),(q)}$, поэтому получающаяся плотность $\rho^{(k)}(\mathbf{x}; \beta)$ также автоматически нормирована на 1. Множители $Q^{(k),(q)}$ запоминаются в массиве.

Отметим, что если нормировку не терять, а запоминать множители $Q^{(k),(q)}$ в массиве, то можно получить способ вычисления уровней энергии E_k . Действительно, из соотношения (38) видно, что при больших β имеем $E_k \approx -\frac{1}{\beta} \ln(Z^{(k)})$; поэтому, если вычислить статсумму $Z^{(k)}$, можно получить и энергию.

Принимая во внимание, что $\rho^{(k)}$ и $g_{2^q}^{(k),(q)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ связаны соотношением

$$\rho^{(k)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; 2^q \epsilon) = Z^{(k)} (2^q \epsilon) g_{2^q}^{(k),(q)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'),$$

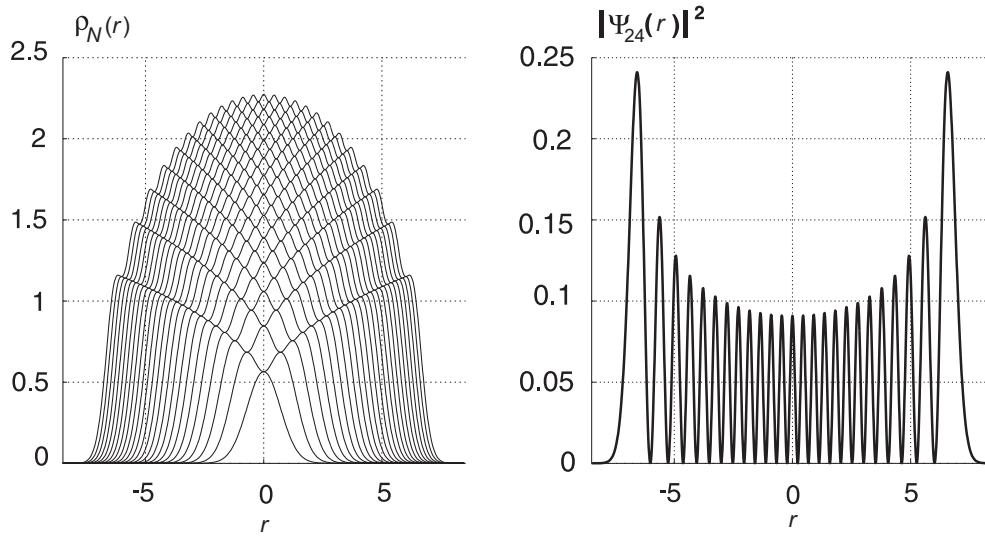


Рис. 13. Плотности систем 1–25 ферми-частиц без спина в гармоническом поле и 24-е возбужденное состояние

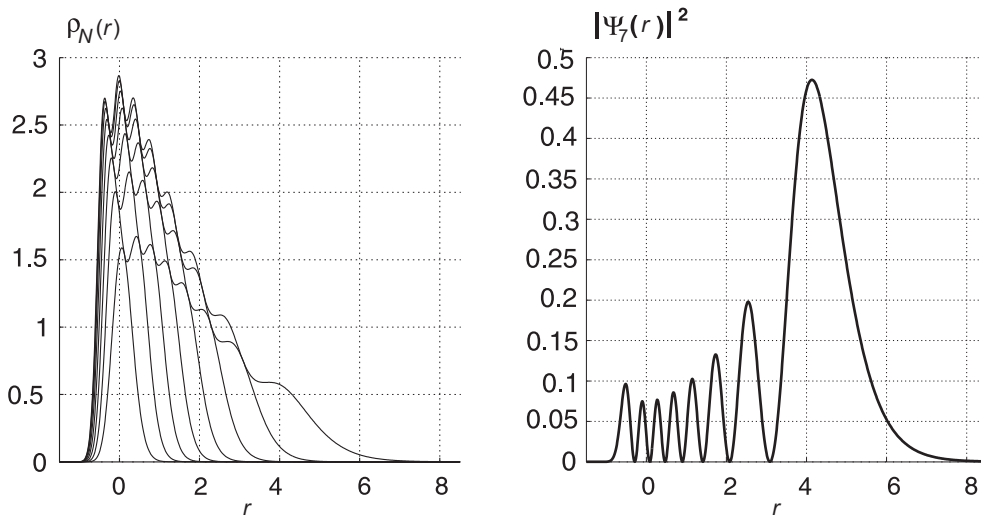


Рис. 14. Плотности систем 1–8 ферми-частиц без спина в потенциале Морзе и 7-е возбужденное (последнее связанное) состояние

нетрудно видеть, что статсумма $Z^{(k)}(\beta)$ есть произведение всех множителей, на которые мы поделили $\tilde{g}_{2^q}^{(k),(q)}$ в ходе процедуры (39), чтобы нормировать ее на 1. Отсюда следует рецепт вычисления $Z^{(k)}$ и E_k :

$$\begin{aligned} Z^{(k),(0)} &= Q^{(k),(0)}, \quad \dots, \\ Z^{(k),(q)} &= [Z^{(k),(q-1)}]^2 Q^{(k),(q)} \quad \text{для } 1 \leq q \leq p, \quad \dots, \\ Z^{(k)}(\beta) &\equiv Z^{(k),(p)}, \quad E_k \approx -\frac{1}{\beta} \ln(Z^{(k)}), \end{aligned} \tag{40}$$

где $Z^{(k),(q)} = Z^{(k)}(2^q \epsilon)$. Данный способ вычисления энергии универсальнее, чем вириальный эстиматор, поскольку он применим и в тех случаях, когда последний не работает (например, для прямоугольной потенциальной ямы или потенциала Пешля–Теллера).

4.2. Численные результаты. Как и в разделе 2.3, метод РВС был применен к модельным системам невзаимодействующих частиц в гармоническом поле и потенциале Морзе. На рис. 13 приведены плотности для ферми-систем из 1–25 частиц в гармоническом поле. Уровни энергии, вычисленные с помощью (39), (40), совпадают с теоретическими значениями $E_n = n + \frac{1}{2}$ с очень высокой точностью (абсолютная погрешность 10^{-5} в приведенных единицах). На это вычисление потребовалось около 2 часов

на компьютере Intel Pentium M 780, 2.26 GHz, 1Gb.

На рис. 14 приведены плотности для ферми-систем из 1–8 частиц в потенциале Морзе при глубине ямы $A = 36$. В табл. 5 приведены значения уровней энергии E_{eval} , вычисленные при помощи (40), и точные значения E_{th} , вычисленные согласно (21). Это вычисление заняло примерно 20 минут.

Следует отметить, что вычисления проводились при обычном размере мантиссы (тип double языка Си). При больших β метод работает устойчиво, при этом проблема знаков при вычислении возбужденных состояний практически устранена. В принципе, с помощью данного метода можно вычислить и большее число состояний, в отличие от метода, описанного в разделе 3.

5. Заключение. В настоящей статье были получены выражения для плотности квантовых систем тождественных частиц при конечной температуре при наличии и отсутствии взаимодействия в форме фейнмановского разложения по циклам. В случае отсутствия взаимодействия исходная многочастичная задача сводится к набору одночастичных, для которых в малоразмерном случае был применен метод последовательного возведения в квадрат матрицы плотности [9]. Работоспособность данного подхода была продемонстрирована на примере вычисления плотностей и энергий для систем от одной до десяти частиц со спинами 0 и 1/2.

Была рассмотрена идея вычисления возбужденных состояний при помощи спуска в основное состояние системы бесспиновых ферми-копий рассматриваемой системы. Было вычислено порядка десяти уровней для модельных одномерных потенциалов. Существенным ограничением данного метода является проблема знаков (необходимость расширения мантиссы) и малоразмерность системы.

Для систем со взаимодействием в рамках циклического разложения плотности и последовательного возведения в квадрат статоператора были получены первые три состояния системы двух бесспиновых ферми-частиц с кулоновским отталкиванием в одномерном гармоническом поле.

Далее, в рамках процедуры (20) была реализована идея нахождения возбужденных состояний методом релаксации с ортогонализацией пропагатора по отношению к нижележащим уровням [14]. Таким образом, было получено несколько десятков уровней для одномерных модельных потенциалов. При этом данный подход свободен от проблемы знаков. Единственным ограничением является размер сетки.

Отметим, что разложения для плотности имеют общий характер и для применения к задачам, имеющим большую размерность, могут быть использованы в рамках метода МК (см., например, [3]). С этой же целью в рамках процедуры последовательного возведения в квадрат статоператора можно попытаться использовать адаптивные сетки [11, 12] и более экономные представления волновых функций [13]. В то время как расчеты на ПК для одномерных систем занимали десятки минут, для двумерных систем требовалось несколько часов. Поэтому представляется возможным на более мощных компьютерах рассмотреть квантовые системы невзаимодействующих частиц при конечной температуре в трехмерном пространстве. При этом взаимодействие можно учесть в приближении самосогласованного поля.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Lyubartsev A.P.* Simulation of excited states and the sign problem in path integral Monte Carlo method // J. Phys. A.: Math. Gen. 2005. **38**. 6659–6674.
2. *Feynman R.P.* Statistical Mechanics. New York: McGraw-Hill, 1972.
3. *Vorontsov-Velyaminov P.N., Voznesenski M.A., Malakhov D.V., Lyubartsev A.P., Broukhno A.V.* Path integral method in quantum statistics problems: generalized ensemble Monte Carlo and density functional approach // J. Phys. A: Math. Gen. 2006. **39**. 4711–4716.
4. *Vorontsov-Velyaminov P.N., Ivanov S.D., Gorbunov R.I.* Quantum gas in an external field: exact grand canonical expressions and numerical treatment // Phys. Rev. E. 1999. **59**. 168–176.
5. *Эллиот Дж., Добер П.* Симметрия в физике. М.: Мир, 1983.
6. *Хаммермеш М.* Теория групп и ее применение в физике. М.: Мир, 1966.

Таблица 5

Сравнение точных E_{th} и вычисленных E_{eval} с помощью метода РВС уровней энергии связанных состояний в потенциале Морзе с глубиной ямы $A = 36$

	E_{eval}	E_{th}
$n = 0$	-31.882439	-31.882359
$n = 1$	-24.397257	-24.397077
$n = 2$	-17.912032	-17.911796
$n = 3$	-12.426769	-12.426515
$n = 4$	-7.9414746	-7.9412338
$n = 5$	-4.4561547	-4.4559524
$n = 6$	-1.9708160	-1.9706710
$n = 7$	-0.4854657	-0.4853896

7. *Цвеллик А.М.* Квантовая теория поля в физике конденсированного состояния. М.: Физматлит, 2002.
8. *Heerman M.F., Bruskin E.J., Verne B.J.* On path integral Monte Carlo simulations // J. Chem. Phys. 1982. **76**, N 10. 5150–5155.
9. *Broukhno A., Vorontsov-Velyaminov P.N., Bohr H.* Polymer density functional approach to efficient evaluation of path integrals // Phys. Rev. E. 2005. **72**, N 4. Art. № 046703.
10. *Lyubartsev A.P., Vorontsov-Velyaminov P.N.* Path-integral Monte Carlo method in quantum statistics for a system of N identical fermions // Phys. Rev. A. 1993. **48**. 4075–4083.
11. *Mitchell W.F.* Adaptive refinement for arbitrary finite-element spaces with hierarchical bases // J. Comp. Appl. 1991. **36**. 65–78.
12. *Mitchell W.F.* The full domain partition approach to parallel adaptive refinement // Grid Generation and Adaptive Algorithms. IMA Volumes in Mathematics and its Applications. Vol. 113. Berlin: Springer-Verlag, 1998. 151–162.
13. *Sim E., Makri N.* Time-dependent discrete variable representations for quantum wave packet propagation // J. Chem. Phys. 1995. **102**. 5616–5625.
14. *Kosloff R., Tal-Ezer H.* A direct relaxation method for calculating eigenfunctions and eigenvalues of the Schrödinger equation on a grid // Chem. Phys. Lett. 1986. **127**. 223–230.
15. *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* Теоретическая физика. Том III. М.: Физматлит, 2002.

Поступила в редакцию
23.10.2007
