Расчёт квантовых функций распределения ПО импульсу методом Монте-Карло

1,2Ларкин А.С.

1Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Московская область,
 Россия
2Объединенный институт высоких температур РАН, г. Москва, Россия,
 alexanderlarkin@rambler.ru

При изучении термодинамических и кинетических свойств веществ часто бывает необходимо знать функции распределения частиц по импульсам. Квантовые эффекты, связанные с тождественностью частиц и интерференцией между различными квантовомеханическими состояниями, влияют на равновесную функцию распределения, делая её немаксвелловской [1]. Это может оказаться существенным в процессах горения, детонации, колебательной релаксации, и даже термоядерного синтеза при высоких плотностях вещества. При этом система частиц зачастую бывает сильнонеидеальной, так что теоретические методы, основанные на теории возмущений, неприменимы. Это приводит к необходимости разработки первопринципных численных методов.

Функция Вигнера для канонического ансамбля N частиц определяется как преобразование Фурье матрицы плотности:



где Z — статистическая сумма, pa — импульс частицы, qa — координата. Поскольку функция Вигнера является квантовым аналогом функции распределения в фазовом пространстве, данный формализм удобен при вычислении функций распределения по импульсам, корреляционных функций и средних по ансамблю от квантовых операторов. Для расчетов в данной работе предлагается два численных метода Монте-Карло, основанных на развитом авторами представлении функции Вигнера в виде континуального интеграла [2].

Первый метод *гармонического приближения* основанна разложении потенциальной энергии взаимодействия частиц в степенной ряд по Фурье-переменной ξ. В результате преобразование Фурье может быть выполнено аналитически, а полученное выражение для функции Вигнера в виде континуального интеграла может быть рассчитано с помощью разработанной процедуры Монте-Карло. Этот метод является квазиклассическим и позволяет непосредственно вычислять функцию Вигнера для невырожденных сильнонеидеальных систем частиц при отсутствии связанных состояний, например, в случае полностью ионизованная плазмы.

Второй предлагаемый метод *одноимпульсной функции Вигнера* основан на использовании функции Вигнера, проинтегрированной по импульсам N-1 частиц:



При этом расчёт наиболее важных термодинамических величин и функций распределения может быть проведен методом Монте-Карло для матрицы плотности с последующим трёхмерным преобразованием Фурье. Этот метод не является квазиклассическим и позволяет работать с вырожденными сильнонеидеальными Ферми-системами (электрон-дырочная плазма, электронный газ).

Оба метода были проверены на ряде простых модельных систем, например таких, как частица во внешнем потенциальном поле, невырожденная водородная плазма и вырожденный идеальный Ферми-газ. Результаты обоих методов находятся в хорошем согласии с доступными аналитическими и независимыми численными результатами.

Литература

1. Eletskii AV, Starostin AN, Taran MD (2005) Quantum corrections to the equilibrium rate constants of inelastic processes. Physics–Uspekhi 48:3, 281–294.
2. Larkin AS, Filinov VS, Fortov VE (2015) Path integral representation of the Wigner function in canonical ensemble. Contributions to Plasma Physics, Vol 56, 3-4, 187–196.