

Федеральное агентство по образованию
Московский инженерно-физический институт
(государственный университет)

В.А. Кашурников А.В. Красавин

Вычислительные методы в квантовой физике

Рекомендовано УМО «Ядерная физика и технологии»
в качестве учебного пособия
для студентов высших учебных заведений

Москва 2005

УДК 530.145.01(075)
ББК 22.311я7
К31

К31 Кашурников В.А., Красавин А.В. **Вычислительные методы в квантовой физике: Учебное пособие.** М.: МИФИ, 2005. – 412 с.

Учебное пособие написано на основе курса лекций, читаемого на третьем курсе факультета «Высший физический колледж» Московского инженерно-физического института (государственного университета) студентам, обучающимся по специальностям «Физика конденсированного состояния», «Лазерная физика», «Физика плазмы», а также на основе практических занятий по компьютерному моделированию в среде MATLAB.

В пособии рассмотрены основные численные методы квантового моделирования: метод точной диагонализации и метод Монте-Карло. Объяснены способы выбора адекватного дискретного базиса волновых функций, нахождения спектра и различных корреляционных функций систем, описываемых основными типами квантовых статистик – статистиками Ферми, Бозе и спиновой. Исследованы проблемы численного анализа температурных и термодинамических характеристик различных систем; проведено знакомство с современными моделями физики коррелированных состояний: моделями Хаббарда, Бозе – Хаббарда, спиновыми моделями.

Предназначено для студентов, специализирующихся в физике конденсированного состояния. Пособие также может быть полезно студентам и аспирантам других физических специальностей, а также преподавателям и специалистам, занимающимся физикой конденсированного состояния.

Издание осуществлено при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований.

Рецензент д-р физ.-мат. наук, проф. С.Р. Кельнер

ISBN 5-7262-0627-4

© В.А. Кашурников, А.В. Красавин, 2005

© Московский инженерно-физический институт
(государственный университет), 2005

Редактор М.В. Макарова

Подписано в печать 15.11.2005 Формат 60x84 1/16
Уч.-изд. л. 25,75 П.л. 25,75 Тираж 120 экз.
Изд. № 053-1 Заказ №

Московский инженерно-физический институт (государственный университет)
Москва, 115409, Каширское шоссе, 31
Типография издательства «Троянт», г. Троицк

Оглавление

Предисловие	7
Введение	9

Часть 1. Квантовые одночастичные задачи

1. Матричная формулировка квантовой механики. Операции с матрицами	11
1.1. Уравнение Шредингера	11
1.2. Собственно энергетическое представление и собственные функции оператора H	13
1.3. Определение спектра. Инварианты матриц	18
2. Поиск и сортировка. Математические проблемы при построении базисных функций	21
3. Квантовые одночастичные задачи	30
3.1. Бесконечная потенциальная яма	31
3.2. Конечная потенциальная яма	36
3.3. Импульсное представление	42
3.3.1. Дискретное преобразование Фурье	42
3.3.2. Решение одночастичной задачи в импульсном представлении	48

Часть 2. Квантовые многочастичные задачи

4. Формализм вторичного квантования. Представление чисел заполнения	55
4.1. Одномерный гармонический осциллятор	56
4.2. Поле смещений в струне	60
4.3. Формализм вторичного квантования	65
4.3.1. Одночастичный базис	66
4.3.2. Двухчастичный и многочастичный базис. Коммутационные соотношения	67

4.3.3. Базис в представлении чисел заполнения. Действие операторов на волновые функции из этого базиса в случае статистики Ферми	74
4.3.4. Операторы физических величин	79
4.4. Полевые операторы и вторичное квантование	84
5. Модели сильнокоррелированных систем.	
Статистика Ферми	87
5.1. Модель сильной связи	87
5.2. Гамильтонова матрица и базис для модели сильной связи	90
5.3. Аналитическое решение модели сильной связи без взаимодействия	96
5.4. Модель Хаббарда	102
5.4.1. Гамильтонова матрица модели Хаббарда и ее расширенных аналогов	106
5.4.2. Спектр модели Хаббарда и приближение среднего поля	110
5.4.3. Инварианты в модели Хаббарда	114
5.5. Расчет квантово-механических средних	117
6. Бозе-статистика. Модель Бозе – Хаббарда	123
6.1. Вторичное квантование в случае статистики Бозе	123
6.2. Модель Бозе – Хаббарда	127
6.3. Построение гамильтоновой матрицы	132
6.4. Аналитическое решение модели Бозе – Хаббарда без взаимодействия	133
6.5. Инварианты в модели Бозе – Хаббарда	137
6.6. Градиентно-инвариантная фаза. Токовые состояния	139
7. Спиновые степени свободы	156
7.1. Спиновые операторы и узельный базис	156
7.2. Квантовые спиновые модели	165
7.3. Формирование гамильтоновой матрицы для спиновых моделей	172
7.4. Инварианты в спиновых моделях	176
7.5. Некоторые результаты для модели Гейзенберга. Спектр возбуждений	180

7.6. Соотношения и предельные случаи для фермионных, бозонных и спиновых моделей сильно коррелированных систем	191
7.6.1. Связь между бозонной и спиновыми моделями	191
7.6.2. Соответствие между моделью Хаббарда и спиновыми моделями	193

8. Некоторые физические и математические особенности метода точной диагонализации 197

8.1. Конечные кластеры и трансляционная инвариантность	197
8.2. Точная диагонализация больших матриц	219
8.2.1. Пространства и инвариантные подпространства. Процедура Рэлея – Ритца	220
8.2.2. Алгоритм Ланцоша	223
8.3. Расчет функций линейного отклика и плотности состояний	228

Часть 3. Термодинамика. Метод Монте-Карло

9. Статистическое описание систем многих частиц 237

9.1. Микроканонический ансамбль	241
9.2. Канонический ансамбль	243
9.3. Большой канонический ансамбль	247
9.4. Примеры	252
9.4.1. Совокупность магнитных моментов	252
9.4.2. Модели сильной связи	256
9.4.3. Одномерная модель Изинга	260

10. Статистика Больцмана, Ферми и Бозе. Плотность состояний 267

10.1. Функции распределения	267
10.2. Плотность состояний	274
10.3. Термодинамика идеального ферми-газа	277
10.4. Термодинамика идеального бозе-газа	282

11. Методы Монте-Карло для физических систем 287

11.1. Случайные распределения. Вероятность	287
11.1.1. Метод обратной функции и метод фон Неймана	289

11.1.2. Нормальное распределение	297
11.1.3. Почти линейная плотность распределения	301
11.1.4. Двумерные распределения	305
11.2. Случайные величины и центральная предельная теорема. Общая схема метода Монте-Карло	308
11.3. Расчет интегралов методом Монте-Карло	319
11.4. Марковская цепь и принцип детального равновесия	326
11.4.1. Марковская цепь. Понятие эргодичности	326
11.4.2. Принцип детального равновесия	329
11.5. Практическая реализация методов Монте-Карло	333
11.5.1. Модель Изинга	333
11.5.1.1. Формулировка модели и некоторые аналитические результаты	333
11.5.1.2. Метод Монте-Карло для модели Изинга	342
11.5.2. Решеточный газ	348
11.5.2.1. Формулировка модели и некоторые аналитические результаты	348
11.5.2.2. Реализация алгоритма Монте-Карло	352
11.5.3. Моделирование вихревой структуры в высокотемпературных сверхпроводниках	361
11.5.3.1. Формулировка модели и некоторые аналитические и экспериментальные данные	362
11.5.3.2. Метод Монте-Карло для сверхпроводящей ВТСП-пластины	371
11.5.3.3. Результаты моделирования для ВТСП-пластины	377
11.6. Расчет термодинамических средних и оценка погрешности. Автокорреляционный анализ в стохастическом моделировании	382
11.7. Диаграммные методы и высокотемпературное разложение. Преобразование операторов физических величин	395
Список литературы	410

Предисловие

Учебное пособие написано на основе курса лекций, читаемого на третьем курсе факультета «Высший Физический Колледж» Московского инженерно-физического института (государственного университета), а также на основе практических занятий по компьютерному моделированию в среде MATLAB.

Материал пособия основан на дисциплинах, читаемых студентам физико-математических специальностей: численных методах, уравнениях математической физики, квантовой механике, теории вероятностей, статистической физике и термодинамике. Некоторые разделы требуют элементарных представлений о физике твердого тела и физике сверхпроводимости. Материал этих дисциплин подробно изложен в источниках, отмеченных как основная литература в списке литературы в конце книги.

Пособие организовано следующим образом. Сначала формулируется матричный вариант основной задачи – уравнение Шредингера для квантовой системы, рассматриваются математические аспекты задачи на собственные значения, приводятся необходимые сведения из курсов теории вероятностей, вычислительной математики; подчеркнем, что все математические аспекты численных расчетов затрагиваются только по мере необходимости, так как главная цель курса – дать **физические основы** численного моделирования реальных систем. Затем исследуется одночастичная задача, вводится понятие базиса, приводятся примеры различных представлений. Далее описываются основные типы квантовых статистик – статистика Ферми, Бозе и спиновая, формулируется представление о вторичном квантовании как эффективном аппарате для решения многочастичных квантовых задач, рассматривается метод точной диагонализации гамильтоновой матрицы, исследуются конкретные примеры одномерных узельных цепочек с различной статистикой. Затем вводится понятие о температуре, рассматривается термодинамика кластерных систем, разбираются методы численного решения таких систем. Далее описываются основные принципы моделирования методом Монте-Карло, обсуждаются проблемы оценки погрешности и автокорреляционного времени. На

примере модели Изинга исследуется фазовый переход второго рода "парамагнетик – ферромагнетик"; в модели решеточного газа методом Монте-Карло исследуется фазовый переход первого рода "жидкость – газ"; показаны особенности моделирования вихревой решетки в высокотемпературных сверхпроводниках; в заключительной части дано представление о диаграммных методах Монте-Карло. При изучении книги читатель знакомится с наиболее известными моделями сильнокоррелированных систем: моделью Хаббарда, моделью Бозе – Хаббарда, спиновыми моделями и т.д., а также с известными аналитическими результатами для этих моделей.

Авторы полагают, что представленное пособие будет полезно студентам старших курсов физико-математических специальностей университетов, аспирантам и молодым исследователям, изучающим физику сильнокоррелированных мезоскопических систем и интересующихся новой динамично развивающейся областью современной физики конденсированного состояния – численным моделированием реальных физических систем.

Введение

Интересы современной физики конденсированного состояния в настоящее время сконцентрированы на сложных мезоскопических системах и сильнокоррелированных структурах, таких как наноструктуры (квантовые ямы, квантовые точки), высокотемпературные сверхпроводники, сверхтекучий гелий, двумерная электронная жидкость в условиях квантового эффекта Холла в сильном магнитном поле, бозе-газ атомарных щелочных металлов в магнито-оптических ловушках, различные спиновые системы (наномагниты, спиновые лестницы, цепочки) и т.д. Все эти системы отличаются сильным взаимодействием и практически полным отсутствием аналитического описания. Постановка экспериментов для исследования этих систем также, как правило, чрезвычайно сложна и дорогостояща, поэтому на первый план выходит численное моделирование таких объектов. Необходимость численных расчетов, обусловленная невозможностью в большинстве случаев получения аналитических ответов, в свою очередь, стимулировала прогресс современных квантовых вычислительных методов, таких как метод точной диагонализации гамильтоновой матрицы, классические и квантовые методы Монте-Карло. Эти методы позволяют получать качественные и количественные характеристики сложных физических систем, предсказывать новые эффекты, что часто недостижимо в рамках аналитических подходов из-за отсутствия параметров разложения.

Целью настоящего пособия является ознакомление студентов с современными методами компьютерного моделирования реальных квантовых систем, интенсивно изучаемых в физике конденсированного состояния: высокотемпературных сверхпроводников, сверхтекучего гелия и бозе-газа в оптико-магнитных ловушках, различных наноструктур (квантовых ям и точек), спиновых кластеров как элементов квантовых компьютеров, двумерных электронов в условиях квантового эффекта Холла и т.д.

В пособии рассматриваются основные численные методы квантового моделирования: метод точной диагонализации и метод Монте-Карло. Объясняются способы выбора адекватного дискретного базиса волновых функций, нахождения спектра и

различных корреляционных функций систем, описываемых основными типами квантовых статистик – статистиками Ферми, Бозе и спиновой. Исследуются проблемы численного анализа температурных и термодинамических характеристик различных систем; проводится знакомство с современными моделями физики коррелированных состояний: моделями Хаббарда, Бозе – Хаббарда, спиновыми моделями.

ЧАСТЬ 1

КВАНТОВЫЕ ОДНОЧАСТИЧНЫЕ ЗАДАЧИ

1. Матричная формулировка квантовой механики. Операции с матрицами

1.1. Уравнение Шредингера

Согласно постулату квантовой механики, состояние системы может быть описано определенной функцией координат $\Psi(q)$, причем квадрат модуля этой функции определяет распределение вероятностей значений координат: $|\Psi|^2 dq$ есть вероятность того, что произведенное над системой измерение обнаружит значения координат в элементе dq конфигурационного пространства. Функция Ψ называется **волновой функцией** системы [1]. Согласно **принципу суперпозиции состояний** квантовой механики, все уравнения, которым удовлетворяют волновые функции, должны быть линейными по Ψ . Каждой вещественной физической величине может быть поставлен в соответствие эрмитов оператор, вид которого может быть определен из физических соображений.

Волновая функция Ψ полностью определяет состояние физической системы. Это означает, что задание волновой функции в некоторый момент времени не только описывает все свойства системы в этот момент, но определяет ее поведение также и во все будущие моменты времени. Математически это выражается тем, что производная по времени от волновой функции зависит от самой волновой функции, причем эта зависимость, согласно принципу

суперпозиции, должна быть линейной, что приводит к **уравнению Шредингера**:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \quad (1.1)$$

где \hat{H} – линейный оператор, называемый **гамильтоновым оператором** или **гамильтонианом**.

Для стационарных состояний, не зависящих от времени, основная задача квантовой механики – решение **стационарного уравнения Шредингера**

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (1.2)$$

т.е. нахождение всех собственных функций Φ_n и собственных

значений E_n оператора \hat{H} , что является частным случаем спектральной задачи Штурма – Лиувилля (в дальнейшем будем иметь дело именно со стационарными состояниями). Если решение этого уравнения известно, то связь нестационарного и стационарных решений следующая:

$$\Psi(q, t) = \sum_n a_n \Phi_n(q) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}, \quad (1.3)$$

где a_n – коэффициенты разложения, квадраты модулей которых определяют вероятности различных значений энергии системы.

Рассмотрим систему, обладающую конечным количеством дискретных степеней свободы (все результаты, полученные далее, будут справедливы и для систем с непрерывными степенями свободы). Степени свободы системы образуют **гильбертово пространство**, в котором можно выбрать полную ортонормированную систему функций Φ_n , так что $\int \Phi_n \Phi_m dx = \delta_{nm}$, а интеграл понимается в смысле скалярного произведения по степеням свободы. Разложим искомую волновую функцию Ψ уравнения Шредингера по этой полной системе:

$$\Psi = \sum_n C_n \Phi_n. \quad (1.4)$$

Подставим это разложение в уравнение Шредингера, получим

$$\sum_n C_n \hat{H} \Phi_n = E \sum_n C_n \Phi_n. \quad (1.5)$$

Далее, умножим это уравнение с обеих сторон на Φ_m^* и проинтегрируем по степеням свободы. В итоге, используя ортонормированность базисных функций Φ_n , имеем систему алгебраических уравнений:

$$\sum_m (H_{nm} - E\delta_{nm})C_m = 0, \quad (1.6)$$

где

$$H_{nm} = \int \Phi_n^* H \Phi_m dx - \quad (1.7)$$

матричные элементы оператора энергии – элементы гамильтоновой матрицы. Фактически имеем задачу на собственные значения для этой матрицы:

$$H - EI = 0, \quad (1.8)$$

где I – единичная матрица. Это уравнение также называют **секулярным**. Для каждого квантового оператора в выбранном базисе можно выписать соответствующую матрицу, действующую на волновые функции, которые имеют вид столбцов чисел (векторов), соответствующих коэффициентам разложения волновых функций в том же базисе:

$$\Psi = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \dots \\ C_n \\ \dots \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

1.2. Собственно энергетическое представление и собственные функции оператора H

Итак, задача квантовой механики может быть переформулирована как задача нахождения собственных значений и собственных векторов гамильтоновой матрицы. Как правило, гамильтонова матрица эрмитова, т.е. ее элементы обладают свойством $H_{nm} = H_{mn}^*$. Можно доказать, что спектр эрмитовой матрицы действителен. Получившиеся собственные векторы составлены из коэффициентов

разложения по исходному базису: $\Psi_m = \sum_n C_{mn} \Phi_n$, и квадраты модулей этих коэффициентов имеют смысл вероятностей нахождения системы в этих исходных состояниях, т.е. $|C_{mn}|^2$ есть вероятность того, что, произведя измерение системы, находящейся в собственном состоянии Ψ_m , обнаружим ее в состоянии Φ_n из исходного базиса. Так как функции Ψ_m – собственные, то они обладают свойством $H\Psi_m = E_m\Psi_m$, т.е. в базисе функций Ψ матрица оператора H имеет диагональный вид:

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & E_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & E_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (1.10)$$

Представление, в котором гамильтонова матрица диагональна, называется **собственно энергетическим** или **собственным**.

Отметим некоторые свойства собственных функций.

1. Если Ψ – собственная функция, отвечающая собственному значению E , то и $C\Psi$ (C – константа) есть собственная функция, отвечающая тому же собственному значению.

2. Если Ψ_1 и Ψ_2 – собственные функции, отвечающие собственному значению E , то и любая линейная комбинация $C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2$ есть собственная функция, отвечающая тому же значению E .

Утверждения 1 и 2 практически очевидны.

3. Собственные функции Ψ_1 и Ψ_2 , отвечающие различным собственным значениям E_1 и E_2 , ортогональны.

Доказательство. По определению, $H\Psi_1 = E_1\Psi_1$; $H\Psi_2 = E_2\Psi_2$. Умножим первое уравнение на Ψ_2 , а второе – на Ψ_1 , и вычтем одно из другого:

$$\Psi_2 H\Psi_1 - \Psi_1 H\Psi_2 = (E_1 - E_2)\Psi_1\Psi_2. \quad (1.11)$$

Проинтегрируем это тождество по области определения функций:

$$\int dx \Psi_2 H \Psi_1 - \int dx \Psi_1 H \Psi_2 = (E_1 - E_2) \int dx \Psi_1 \Psi_2. \quad (1.12)$$

В силу эрмитовости оператора H левая часть уравнения равна нулю, что и требовалось доказать.

4. Очень важное свойство операторов, часто облегчающее решение задач: если два оператора физических величин \hat{L} и \hat{M} имеют общую систему собственных функций, то они коммутируют друг с другом: $[\hat{L}\hat{M}] = \hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = 0$. И наоборот, если операторы коммутируют, то они имеют общую систему собственных функций.

Докажем первое утверждение. Очевидно, что для любой собственной функции, общей для этих операторов, справедливо следующее:

$$\hat{L}\hat{M}\Psi_n = \hat{L}(\mu_n \Psi_n) = \lambda_n \mu_n \Psi_n = \hat{M}\hat{L}\Psi_n \quad (1.13)$$

(μ_n, λ_n – соответствующие собственные числа операторов), что и доказывает утверждение.

Докажем обратное утверждение. Общая система собственных функций означает, что матрицы L_{mn} и M_{mn} обе имеют диагональный вид в базе этих собственных функций. Рассмотрим, для определенности, систему собственных функций оператора L . Тогда имеем следующее:

$$L_{mn} = \lambda_n \delta_{mn}, \quad (LM)_{mn} = (ML)_{mn} \Rightarrow \sum_k L_{mk} M_{kn} = \sum_k M_{mk} L_{kn}. \quad (1.14)$$

Из последнего соотношения получаем:

$$\begin{aligned} \sum_k L_{mk} M_{kn} &= \sum_k L_{kn} M_{mk} \Rightarrow \sum_k \lambda_m \delta_{mk} M_{kn} = \sum_k \lambda_n \delta_{kn} M_{mk} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \lambda_m M_{mn} = \lambda_n M_{mn} \Rightarrow M_{mn} (\lambda_m - \lambda_n) = 0. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Если собственные значения L не вырождены, то из последнего равенства следует, что

$$M_{mn} = \mu_n \delta_{mn}, \quad (1.16)$$

т.е. матрица M диагональна, что и требовалось доказать. Если же среди значений λ_n есть одинаковые, т.е. такие собственные значения, которым соответствует несколько собственных функций,

то всегда можно выбрать такие линейные комбинации этих собственных функций, чтобы обратить в нуль соответствующие недиагональные матричные элементы M_{mn} .

Это свойство можно проиллюстрировать применительно к конкретным физическим задачам следующим образом: если какой-нибудь оператор (например, оператор числа частиц, оператор суммарного спина системы и т.д.) коммутирует с гамильтонианом, то в собственном энергетическом представлении, после нахождения спектра и волновых функций, соответствующие физические величины (число частиц, спин и т.д.) также являются вполне определенными, и сохраняют свое (собственное) конкретное значение. Иначе говоря, весь спектр энергий можно разделить на совершенно независимые группы, относящиеся к определенному значению данной физической величины (числа частиц, спина и т.д.). Таким образом, квантовую задачу можно упростить, независимо решая ее для конкретного значения данной физической величины, а потом объединяя результаты. Математически гамильтонова матрица в этом случае представима в блочно-диагональном виде, каждый блок при этом соответствует определенному значению рассматриваемой физической величины (определенному числу частиц, определенному спину системы и т.д.), а перекрестных матричных элементов между блоками нет (**см. пример 1**).

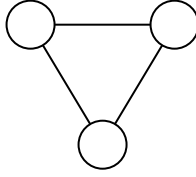
Пример 1.

Рассмотрим систему из трех спинов (подробно системы со спиновыми степенями свободы будут рассмотрены в гл. 9), описываемую гамильтонианом

$$H = \sum_{i,j=1}^3 \bar{S}_i \bar{S}_j,$$

где \bar{S}_i – оператор спина на узле i , причем максимальная проекция спина на каждом узле равна $S_{\max}^z = 1/2$ (рис. 1.1).

$$S_3^z = \pm \frac{1}{2}$$



$$S_3^z = \pm \frac{1}{2}$$

$$S_2^z = \pm \frac{1}{2}$$

Рис. 1.1. Система из трех спинов $S_i^z = \pm 1/2$

Каждый из спинов, таким образом, может находиться в одном из двух состояний: либо в состоянии $S_i = +\frac{1}{2}$, либо в состоянии $S_i = -\frac{1}{2}$, всего в системе будет $2^3 = 8$ состояний, которые можно разбить на группы в соответствии с полным спином системы:

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, S^z = \sum_i S_i^z = -\frac{3}{2}; & \Phi_2 &= \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle, S^z = \sum_i S_i^z = -\frac{1}{2}; \\ \Phi_3 &= \left| -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, S^z = \sum_i S_i^z = -\frac{1}{2}; & \Phi_4 &= \left| +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, S^z = \sum_i S_i^z = -\frac{1}{2}; \\ \Phi_5 &= \left| -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle, S^z = \sum_i S_i^z = +\frac{1}{2}; & \Phi_6 &= \left| +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle, S^z = \sum_i S_i^z = +\frac{1}{2}; \\ \Phi_7 &= \left| +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, S^z = \sum_i S_i^z = +\frac{1}{2}; & \Phi_8 &= \left| +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle, S^z = \sum_i S_i^z = +\frac{3}{2}. \end{aligned}$$

Гамильтонова матрица в этом базисе будет иметь следующий вид (расчет матричных элементов гамильтоновой матрицы будет описан ниже при рассмотрении спиновой статистики):

$$H_\Phi = \begin{pmatrix} 0.75 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.25 & 0.5 & 0.5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & -0.25 & 0.5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0.5 & -0.25 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0.25 & 0.5 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 & -0.25 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 & 0.5 & -0.25 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.75 \end{pmatrix}.$$

Так как гамильтониан и оператор полного спина системы коммутируют, т.е. $HS^z - S^zH = 0$, то гамильтонова матрица имеет блочно-диагональный вид и состоит

из четырех блоков, каждый из которых отвечает одному из возможных четырех значений полного спина системы: блок размером 1×1 , отвечающий $S^z = +\frac{3}{2}$; блок размером 3×3 , отвечающий $S^z = +\frac{1}{2}$; блок размером 3×3 , отвечающий $S^z = -\frac{1}{2}$; и блок размером 1×1 , отвечающий $S^z = -\frac{3}{2}$.

1.3. Определение спектра. Инварианты матриц

Фактически процедура нахождения спектра сводится к преобразованию гамильтоновой матрицы к диагональному виду с помощью некоторого унитарного преобразования вида $H' = S^{-1}HS$, где S – унитарная матрица, обладающая свойством $S^+ = S^{-1}$. Собственно, нахождение этого унитарного преобразования и есть решение проблемы. Методы численного решения этой задачи достаточно разнообразны. Наиболее употребительным является метод преобразования матрицы к верхней (нижней) форме Хаусхолдера (треугольная матрица с нулевыми матричными элементами ниже (выше) главной диагонали). Тогда на главной диагонали выстраиваются собственные значения матрицы – спектр системы. Существуют стандартные процедуры диагонализации для трехдиагональной вещественной, симметричной вещественной, комплексной эрмитовой и, наконец, для произвольной комплексной матрицы. Время расчета **полной** спектральной задачи пропорционально N^3 , где N – линейный размер матрицы (пока не обсуждаем методы расчета редких матриц и процедуры Ланцоша, метод сопряженных градиентов и т.д.).

Инвариантами матриц называются такие характеристики матриц, которые не изменяются при унитарных преобразованиях.

В общем случае важнейшие инварианты даются неинвариантным **характеристическим уравнением** матрицы:

$$\det(H - \lambda I) = \begin{vmatrix} H_{11} - \lambda & H_{12} & \dots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} - \lambda & \dots & H_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{n1} & H_{n2} & \dots & H_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = \quad (1.17)$$

$$= (-1)^n \lambda^n + (-1)^{n-1} \sum H_{ii} \lambda^{n-1} + \dots + \det(H).$$

Коэффициенты этого полинома являются инвариантами, в частности: след матрицы (сумма диагональных элементов матрицы) $\text{Tr}(H) = \sum_i H_{ii}$; определитель матрицы $\det(H)$.

Важными инвариантами являются N корней характеристического уравнения матрицы H – собственные значения $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$. Их совокупность (каждый корень считается столько раз, какова его кратность) образует спектр матрицы H , нахождение которого вместе с соответствующими собственными волновыми функциями и является главной задачей в квантовой механике.

При унитарных преобразованиях также сохраняется нормировка волновых функций, т.е. если унитарное преобразование F переводит координаты q в координаты q' : $q \xrightarrow{F} q'$, то

$$\int |\Psi(q)|^2 dq = \int |\Psi(q')|^2 dq' = \text{const}.$$

При решении спектральных задач часто бывает необходима точная оценка минимального или максимального собственного значения матрицы еще до полного решения спектральной задачи. Пусть собственные значения упорядочены следующим образом $|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| > \dots > |\lambda_N|$. Зададим произвольный вектор X_0 и будем последовательно вычислять вектора $X_{n+1} = HX_n$. Разложим нулевой вектор по собственным функциям, как будто спектральная задача решена: $X_0 = \sum_n C_n \Psi_n$. Тогда можно показать, что

$$\begin{aligned}
X_n &= C_1 \lambda_1^n \Psi_1 + O(|\lambda_2|^n); \\
(X_n, X_n) &= |C_1|^2 |\lambda_1|^{2n} + O(|\lambda_1|^n |\lambda_2|^n); \\
(X_{n+1}, X_n) &= |C_1|^2 |\lambda_1|^{2n} \lambda_1 + \dots
\end{aligned}
\tag{1.18}$$

Отсюда получаем оценку для максимального собственного значения:

$$\lambda_1 = \frac{(X_{n+1}, X_n)}{(X_n, X_n)} \Big|_{n \rightarrow \infty}, \tag{1.19}$$

при $n \rightarrow \infty$ ответ будет стремиться к точному значению.

Для определения максимального (минимального) собственного значения по формуле (1.19) следует перед расчетом сдвинуть весь спектр матрицы H на большую величину Λ вверх (вниз) путем добавления к гамильтоновой матрице диагональной матрицы:

$$H \rightarrow H \pm \Lambda I, \tag{1.20}$$

где I – единичная матрица. После такого сдвига собственное значение $\lambda_{\max} + \Lambda$ ($\lambda_{\min} - \Lambda$) будет самым большим по модулю, и решение (1.19) будет сходиться именно к нему. После расчета следует вычесть (добавить) число Λ из получившегося решения.

2. Поиск и сортировка. Математические проблемы при построении базисных функций

Вопросы поиска и сортировки возникают при численном моделировании квантовых задач при формировании базисных функций системы, а также при построении матриц операторов в выбранном базисе. Проще всего эту проблему понять на простом математическом примере.

Рассмотрим систему из трех ящиков и двух одинаковых шаров, помещенных в эти ящики. Очевидно, что всего в системе будет 6 возможных состояний (рис. 2.1). Назовем эти состояния **базисом** системы.

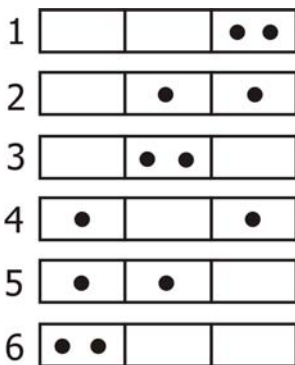


Рис. 2.1. Базис для системы из трех ящиков и двух шаров

Если бы шары были разными, например один черный, а другой – белый, то ситуации, при которой во втором и третьем ящике находится по одному шару, отвечают два возможных варианта размещения (рис. 2.2, слева). Если же шары – одинаковые, т.е. **неразличимые**, то вариант всего один (рис. 2.2, справа).

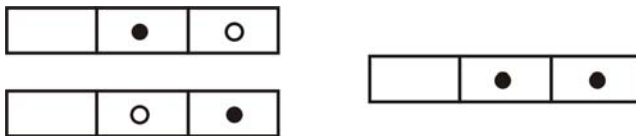


Рис. 2.2. Различные (слева) и неразличимые (справа) шары

Пусть теперь есть некоторое устройство A , которое работает следующим образом: оно перекладывает один шар из третьего ящика во второй. Посмотрим, как будет выглядеть **матрица**, отражающая работу этого устройства, в базисе, изображенном на рис. 2.1.

Матрица A будет состоять из матричных элементов A_{ij} , при этом индекс столбца j соответствует номеру исходного состояния, а индекс строки i – состоянию, которое получится из состояния j после того, как на него подействует A . Например, если взять в качестве исходного состояния состояние 1 (т.е. индекс j будет равен 1), в котором оба шара находятся в третьем ящике, то после перекладывания одного из шаров во второй ящик получится такое состояние (рис. 2.3):

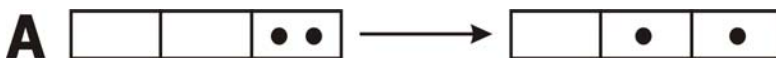


Рис. 2.3. Под действием устройства A первое состояние переходит во второе

Видно, что получилось какое-то другое состояние, отличное от состояния 1. Для того, чтобы определить значение индекса i , необходимо найти, на каком месте в базисе находится это состояние. **В этот момент и возникает проблема поиска полученного состояния в исходном базисе.** Посмотрев на рис. 2.1 видим, что состояние, которое получилось из состояния 1 – это состояние 2. Значит,

$$A_{ii} = \begin{cases} 1, & \text{если } i = 2; \\ 0, & \text{если } i \neq 2, \end{cases}$$

так как под воздействием A состояние 1 переходит в состояние 2 и ни в какое другое, и первый столбец матрицы A будет таким:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

Столбцы 3, 5 и 6 в матрице A будут нулевыми, так как в этих состояниях третий ящик пуст, и перекладывать нечего.

Аналогично, состояние 2 под действием A переходит в состояние 3, а состояние 4 – в состояние 5, и окончательный вид матрицы A следующий:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

После того, как получена матрица, отражающая действие устройства A, с ней можно обращаться, как с обычной матрицей. Например, для того, чтобы узнать, что произойдет с состояниями базиса, если на них дважды подействовать устройством A, достаточно возвести матрицу A в квадрат:

$$A^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

это означает, что двукратное действие A приводит к переходу состояния 1 в состояние 3, а все остальные матричные элементы

равны нулю, так как только в состоянии 1 имеются 2 шара в третьем ящике.

Заметим, что далее, при изучении моделей сильной связи, будет понятна физическая интерпретация действия A как оператора квантового перехода частицы с третьего узла пространственной решетки на второй.

Таким образом, введен некоторый **оператор** в базисе, показанном на рис. 2.1, и построили в этом базисе матрицу, соответствующую этому оператору, действуя оператором на базисные функции.

При моделировании квантовых систем часто приходится формировать матрицы линейных операторов в базисах, состоящих из очень большого количества состояний, поэтому, если процедура поиска нужного состояния в базисе не организована эффективным образом, процесс формирования матриц может занять длительное время.

Процедура поиска нужного состояния будет эффективной и быстрой лишь в том случае, если состояния, входящие в базис, пронумерованы не беспорядочно, а в соответствии с определенной схемой. Например, состояниям, показанным на рис. 2.1, можно поставить в соответствие числа, каждый разряд которых будет отвечать количеству шаров в соответствующем ящике (рис. 2.4).

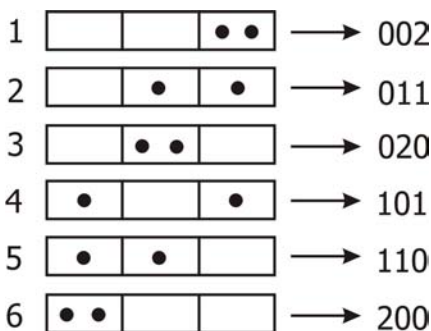


Рис. 2.4. Соответствие базисных состояний и чисел, упорядоченных по возрастанию

Видно, что числа, соответствующие состояниям базиса, упорядочены по возрастанию, поэтому организовать эффективную процедуру поиска нужного состояния в таком базисе не составит труда. Для этой цели подойдет, например, быстрый и простой в реализации **метод деления отрезка пополам**, хорошо известный из численных методов.

Далее при формировании базисов для конкретных моделей сильнокоррелированных систем будут рассмотрены методы построения уже сортированных массивов базисных функций.

В зависимости от конкретной задачи сортировку состояний можно осуществлять в соответствии с различными критериями. Как правило, при численном моделировании доступны эффективные встроенные процедуры поиска, однако иногда возникают ситуации, когда приходится осуществлять сортировку "вручную", без использования встроенных функций. Далее в этой главе будут рассмотрены несколько основных типов сортировки.

1. Сортировка вставками.

При этом способе сортировки элементы неупорядоченного массива просматриваются по одному, и каждый следующий элемент вставляется в подходящее место среди ранее упорядоченных (рис. 2.5).

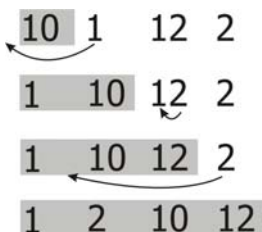


Рис. 2.5. Сортировка вставками.
Серым фоном показаны упорядоченные элементы

Временные затраты при сортировке вставками составляют порядка N^2 операций, где N – число элементов в неупорядоченном массиве. Этот способ сортировки является неэкономным.

2. Сортировка выбором.

При этом способе сортировки сначала из неупорядоченного массива выбирается наименьший (или наибольший) элемент и каким-либо образом отделяется от

остальных, затем выбирается наименьший (наибольший) элемент из оставшихся и т.д. (рис. 2.6).

Этот способ сортировки, как и метод вставок, требует порядка N^2 операций.

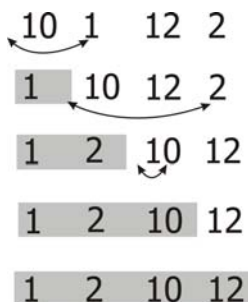


Рис. 2.6. Сортировка выбором. Серым фоном показаны упорядоченные элементы

3. Сортировка обменами.

При сортировке обменами два элемента меняются местами, если они расположены не по порядку (рис. 2.7), этот процесс повторяется до тех пор, пока не будут перебраны все возможные пары элементов.

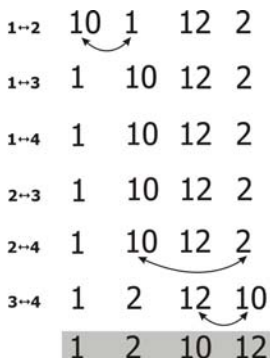


Рис. 2.7. Сортировка обменами. Серым фоном показаны упорядоченные элементы. В левом столбце показаны номера элементов, которые сравниваются на текущем шаге

Временные затраты при этом способе сортировки составляют порядка $N^2/2$ операций, этот метод является более экономным по сравнению с предыдущими и часто используется в стандартных математических пакетах. Блок-схема алгоритма показана на рис. 2.8; в этом алгоритме, помимо сортировки элементов исходного массива *key*, создается также массив указателей *ind* на упорядоченные элементы массива *key*.

Представленные выше методы сортировки будут выполнять сортировку за разумное время при числе элементов порядка сотни. При большем количестве элементов время сортировки будет замедляться, и необходимы более эффективные методы.

Одним из вариантов ускорения алгоритмов сортировки является идея производить перемещения не между отдельными элементами, а сразу между блоками из нескольких десятков или сотен элементов.

Приведем один из вариантов такой оптимальной сортировки. Разделим весь неупорядоченный массив из N элементов на кластеры – блоки из $k \approx 3\sqrt{N} < N$ элементов (при таком размере кластера скорость описанного ниже способа сортировки будет максимальной). Количество кластеров в полном массиве также будет порядка k , причем в последнем кластере будет $K' < k$ элементов, где K' – остаток от целочисленного деления N на k (рис. 2.9). Внутри каждого из кластеров проводится обычная сортировка (например, методом обменов), что займет порядка $k \left(\frac{k^2}{2} \right)$ операций.

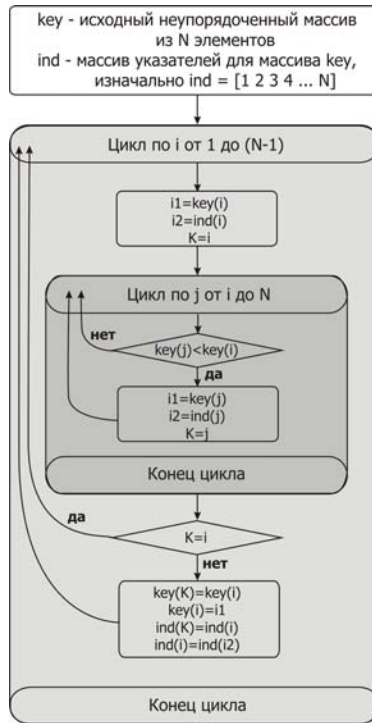


Рис. 2.8. Блок-схема алгоритма сортировки обменами

1) 5 7 0 2 9 4 1 3 8 6

2) 5 2 1 6
7 9 3
0 4 8

3) 0 2 1 6
5 4 3
7 9 8

Рис. 2.9. Подготовка неупорядоченного массива для оптимальной сортировки:

- 1) исходный массив из 10 элементов;
- 2) массив разделен на блоки по 3 элемента, при этом в последнем блоке оказался 1 элемент;
- 3) внутри каждого блока проведена сортировка элементов

Далее просматриваем минимальные элементы в каждом кластере (так как все кластеры к этому моменту уже упорядочены, то минимальным элементом в каждом кластере будет первый элемент) и выбираем наименьший из них. Этот процесс займет порядка k операций. Выбранный элемент заносим в новый массив, в котором будут накапливаться упорядоченные элементы, и удаляем его из кластера, где он находился (рис. 2.10). При этом следует следить за числом элементов в каждом кластере и не рассматривать кластеры, из которых все элементы перешли в упорядоченный массив. Заполнение всего упорядоченного массива займет порядка k^2 операций, т.е. будет даже быстрее первоначальной сортировки, и в итоге весь алгоритм потребует порядка $k^3 \sim N^{3/2}$ операций.

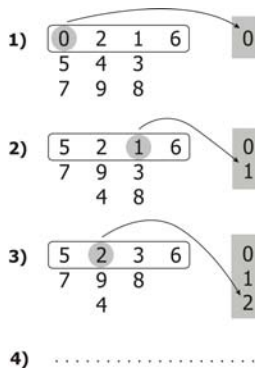


Рис. 2.10. Оптимальная сортировка. На каждом шаге алгоритма выбирается минимальный элемент среди минимальных элементов каждого из блоков, этот элемент заносится в новый массив и убирается из исходного блока

Представленный метод не является самым оптимальным. Существуют подходы, доводящие время сортировки до $\sim N \log_2 N$ операций.

Задачи

2.1. Реализовать алгоритмы сортировки одномерных массивов произвольных чисел:

- 1) методом выбора;
- 2) методом вставки;
- 3) методом обмена;
- 4) оптимизированным методом.

Провести сортировку 500, 1000, 2000, 4000, 8000, ... чисел каждым из методов и построить на одном графике зависимость времени сортировки от количества элементов в массиве для каждого метода. С какого количества элементов оптимизированный метод становится более эффективным?

2.2. Имеется массив из N различных упорядоченных по возрастанию чисел. Реализовать программу поиска номера заданного элемента в массиве:

- 1) прямым перебором;
- 2) методом деления отрезка пополам.

Построить графики зависимости времени поиска от длины массива N для каждого из методов. Сравнить эффективность двух алгоритмов.

2.3. Имеется массив из N различных упорядоченных по возрастанию целых чисел. Построить и реализовать алгоритм поиска номера заданного элемента в массиве методом деления отрезка пополам, **проводя поиск по разрядам**.

3. Квантовые одночастичные задачи

Рассмотрим квантово-механическую задачу о движении частицы в потенциальном поле. Как уже отмечалось в разд. 1.1, квадрат модуля волновой функции $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ для такой системы определяет плотность вероятности обнаружить частицу в момент времени t в точке пространства с радиусом-вектором \vec{r} . Временная эволюция функции $\psi(\vec{r}, t)$ описывается **нестационарным уравнением Шредингера**

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + U(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t), \quad (3.1)$$

где m – масса частицы, $U(\vec{r}, t)$ – внешнее потенциальное поле.

Для независящего от времени потенциала решения уравнения (3.1) можно искать в виде

$$\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}. \quad (3.2)$$

Частица, находящаяся в состоянии, описываемом волновой функцией (3.2), имеет конкретное значение энергии E . Подставив (3.2) в (3.1), получаем **стационарное уравнение Шредингера**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(\vec{r}) + U(\vec{r}) \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r}) \quad (3.3)$$

или

$$H \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r}), \quad (3.4)$$

где

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) - \quad (3.5)$$

оператор энергии (гамильтониан) системы.

Пусть оператор H имеет n собственных функций ϕ_n и n соответствующих им собственных значений энергии E_n . Число n может быть конечным или бесконечным; значения E_n могут быть дискретными (**дискретный спектр**) или непрерывными (**непрерывный спектр**), некоторые значения E_n могут совпадать

(вырожденные состояния), рис. 3.1. Состояние с наименьшей энергией называется **основным состоянием** системы.

Общее решение (3.4) можно представить в виде суперпозиции собственных функций гамильтониана:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n C_n \phi_n(\vec{r}), \quad (3.6)$$

здесь символ \sum_n означает суммирование по всем дискретным состояниям и интегрирование по состояниям непрерывного спектра.

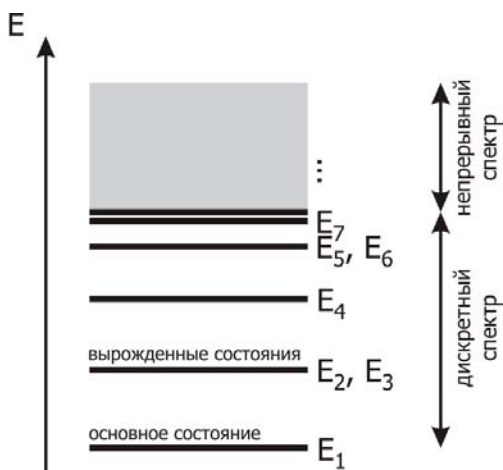


Рис. 3.1. Классификация собственных значений оператора энергии

3.1. Бесконечная потенциальная яма

Рассмотрим задачу о частице в одномерной потенциальной яме ширины a с бесконечно высокими стенками (рис. 3.2).

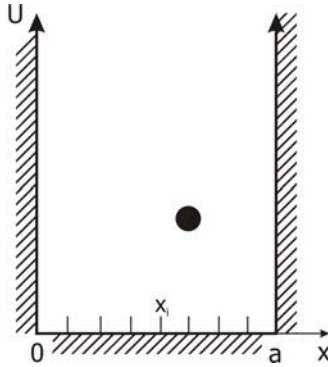


Рис. 3.2. Бесконечная одномерная потенциальная яма

Гамильтониан этой системы имеет вид:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x), \quad (3.7)$$

где m – масса частицы, $U(x)$ – потенциал ямы,

$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } 0 < x < a; \\ \infty, & \text{если } x < 0, x > a. \end{cases} \quad (3.8)$$

Перейдем для удобства к безразмерной системе единиц, положив $m \rightarrow 1$; $\hbar \rightarrow 1$, тогда гамильтониан запишется следующим образом:

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + U(x). \quad (3.9)$$

Так как потенциал ямы бесконечен при $x < 0$ и $x > a$, то решение уравнения Шредингера (3.4) существует только в области $0 < x < a$. Подставляя (3.9) в (3.4), получаем:

$$-\frac{1}{2} \Psi''(x) - E\Psi(x) = 0; \quad (3.10)$$

$$0 < x < a.$$

Разобьем область $0 < x < a$ на n отрезков $[x_i, x_{i+1}]$, $i=1, \dots, n$ длины $h = \frac{a}{n}$, при этом $x_1 = 0$; $x_2 = h$; ...; $x_{n+1} = nh = a$, и аппроксимируем $\Psi''(x_i)$ трехточечной разностной формулой:

$$\Psi''(x_i) = \frac{1}{h^2}(\Psi(x_{i-1}) - 2\Psi(x_i) + \Psi(x_{i+1})), \quad (3.11)$$

тогда из (3.10) получаем:

$$-\frac{1}{h^2}(\Psi_{i-1} - 2\Psi_i + \Psi_{i+1}) - E\Psi_i = 0; i = 1, \dots, n, \quad (3.12)$$

здесь $\Psi_i \equiv \Psi(x_i)$.

Выберем в качестве ортонормированного базиса систему функций (сравнить с базисом на рис. 2.4)

$$\Phi_1 = |100\dots 0\rangle; \Phi_2 = |010\dots 0\rangle; \dots; \Phi_n = |000\dots 1\rangle, \quad (3.13)$$

где единица означает, что частица находится на соответствующем отрезке, например, базисная функция Φ_2 отвечает ситуации, когда частица находится на отрезке $[x_2, x_3]$. Размерность этого базиса будет равна числу отрезков разбиения n . Любая волновая функция $\Psi(x)$ может быть разложена по базисным функциям Φ :

$$\Psi(x) = \sum_{i=1}^n C_i \Phi_i, \quad (3.14)$$

где коэффициенты разложения C_i будут получены далее в расчете, а оператор энергии действует на базисные функции следующим образом:

$$H\Phi_i = -\frac{1}{2h^2}(\Phi_{i-1} - 2\Phi_i + \Phi_{i+1}). \quad (3.15)$$

Таким образом, задача сводится к системе линейных уравнений

$$H\Psi = E\Psi, \quad (3.16)$$

где матрица H имеет размеры $n \times n$ и является трехдиагональной:

$$H = \begin{pmatrix} \frac{1}{h^2} & -\frac{1}{2h^2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{1}{2h^2} & \frac{1}{h^2} & -\frac{1}{2h^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2h^2} & \frac{1}{h^2} & -\frac{1}{2h^2} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2h^2} & \frac{1}{h^2} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{1}{h^2} \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

Для решения системы (3.16) и нахождения собственных функций и собственных значений матрицы H следует найти такое преобразование F , которое переводит базис Φ в **собственный базис** Φ' , в котором матрица H диагональна:

$$\begin{aligned} \Phi &\xrightarrow{F} \Phi', \\ H\Phi'_i &= E_i\Phi'_i. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Процесс перехода к собственному базису называется **диагонализацией** матрицы H , во многих современных математических пакетах имеются встроенные достаточно мощные процедуры диагонализации матриц, позволяющие находить собственные векторы и собственные числа произвольных матриц довольно больших размеров. Результатом процедуры диагонализации будет вектор-столбец собственных значений гамильтониана, или **спектр системы**,

$$E = \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ \dots \\ E_n \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

а также матрица C , состоящая из вектор-столбцов, отвечающих разложению собственных функций Φ' по исходному базису Φ :

$$C = \left(\begin{pmatrix} C_{11} \\ C_{21} \\ C_{31} \\ \dots \\ C_{n1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{12} \\ C_{22} \\ C_{32} \\ \dots \\ C_{n2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{1n} \\ C_{2n} \\ C_{3n} \\ \dots \\ C_{nn} \end{pmatrix} \right); \quad (3.20)$$

$$\Phi'_i = \sum_j C_{ji} \Phi_j. \quad (3.21)$$

На рис. 3.3 показаны собственные функции гамильтониана (3.9) при $a = 1$, отвечающие четырем наименьшим собственным значениям.

Сплошными линиями показано точное аналитическое решение задачи, которое, как известно, для $a = 1$ имеет вид

$$\begin{aligned} \Phi_i(x) &= \sqrt{2} \sin(\pi x i); \\ E_i &= \frac{\pi^2 i^2}{2}; \\ i &= 1, 2, \dots, \infty, \end{aligned} \tag{3.22}$$

точками отмечено численное решение, полученное диагонализацией матрицы гамильтониана при помощи встроенной процедуры диагонализации в системе Matlab для $n=100$. В табл. 3.1 приведены четыре наименьших значения энергии частицы в бесконечной яме, а также показана относительная разница между аналитическим и численным ответами.

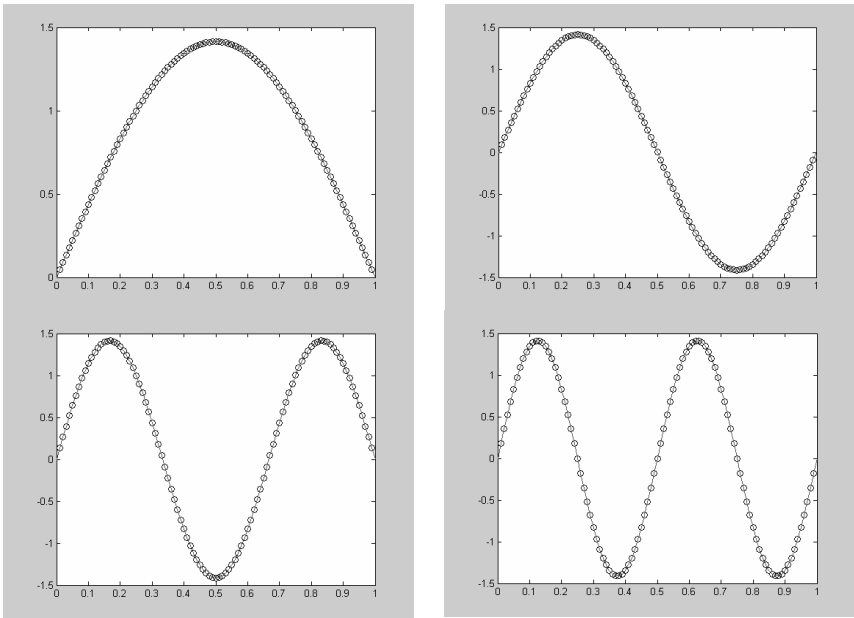


Рис. 3.3. Первые четыре собственные функции частицы в бесконечной потенциальной яме. По горизонтальной оси отложена координата частицы, по вертикальной – амплитуда волновой функции. Точками отмечено численное решение задачи, сплошной линией – точное аналитическое решение

Таблица 3.1. Сравнение результатов численного расчета с аналитическим решением (3.15) задачи о частице в яме с бесконечными стенками

Точное значение энергии, см. (3.22)	Значение энергии, полученное численным расчетом	Относительная разница, $\frac{E_i^a - E_i}{E_i^a}$
$E_1^a = \frac{\pi^2}{2} = 4.9348$	$E_1 = 4.9344$	$0.8 \cdot 10^{-6}$
$E_2^a = 2\pi^2 = 19.7392$	$E_2 = 19.7327$	$0.3 \cdot 10^{-5}$
$E_3^a = \frac{9\pi^2}{2} = 44.4132$	$E_3 = 44.3804$	$0.7 \cdot 10^{-5}$
$E_4^a = 8\pi^2 = 78.9568$	$E_4 = 78.8530$	$1.3 \cdot 10^{-3}$

Хотя точность численного решения довольно высока, особенно для основного состояния с энергией E_1 , видно, что с увеличением номера энергетического уровня погрешность расчета возрастает.

Заметим также, что при решении одночастичных задач всегда справедлива **осцилляционная теорема**, утверждающая, что **число нулей собственной волновой функции на единицу меньше, чем номер энергетического уровня, которому она отвечает** (при этом не учитываются вырожденные состояния).

3.2. Конечная потенциальная яма

Рассмотрим теперь задачу о частице в **конечной** потенциальной яме (рис. 3.4), где

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & \text{если } x \leq 0; \\ -U_0, & \text{если } 0 < x < a; \\ 0, & \text{если } x \geq a. \end{cases} \quad (3.23)$$

В яме конечной глубины состояния частицы делятся на **связанные состояния** E_d и **состояния непрерывного спектра** E_c , энергия которых удовлетворяет соотношению

$$E_c > \min U(\pm\infty). \quad (3.24)$$

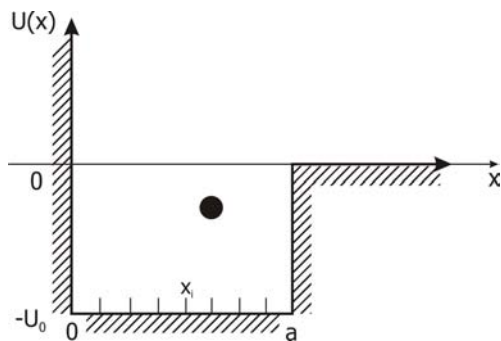


Рис. 3.4. Конечная потенциальная яма

Собственные волновые функции, отвечающие значениям энергии E_c из непрерывного спектра, за пределами ямы ведут себя как плоские волны:

$$\Psi_k \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \text{const} \cdot e^{ikx}, \quad (3.25)$$

а собственные волновые функции, отвечающие связанным состояниям, за пределами ямы затухают экспоненциально (рис. 3.5):

$$\Psi_n \sim e^{-\kappa x}, \quad \kappa > 0. \quad (3.26)$$

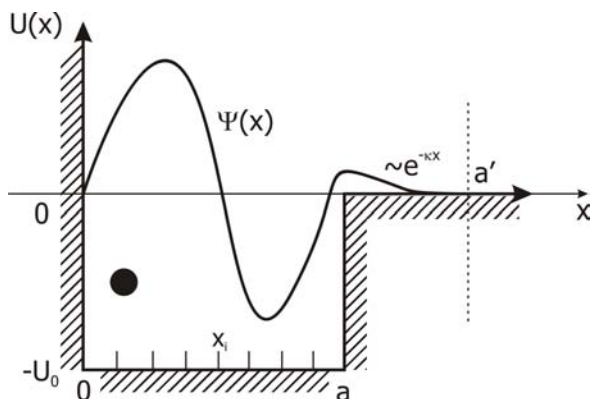


Рис. 3.5. За пределами ямы волновые функции, отвечающие связанным состояниям, экспоненциально затухают

Следовательно, при численном расчете волновых функций связанных состояний недостаточно ограничиваться лишь размерами ямы, так как волновые функции существуют и при $x > a$. Граница области a' , на которой ищется решение, должна быть определена из условия затухания полученного решения на расстояниях $x \sim a'$ (см. рис. 3.5). Если после решения задачи и нахождения собственных функций выяснится, что они имеют конечное значение в точке $x = a'$, то следует увеличить размер области, на которой ищется решение, и решить задачу заново.

По сравнению с задачей о яме с бесконечными стенками, теперь спектральная задача формулируется следующим образом:

$$-\frac{1}{2}\Psi''(x) + (U(x) - E)\Psi(x) = 0; \quad (3.27)$$

$$0 < x < a'.$$

Разбивая область $0 < x < a'$ на n отрезков длины h и аппроксимируя функции аналогично (3.5), получаем:

$$-\frac{1}{h^2}(\Psi_{i-1} - 2\Psi_i + \Psi_{i+1}) + (U_i - E)\Psi_i = 0; \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.28)$$

где

$$U_i \equiv U(x_i) = \begin{cases} -U_0, & \text{если } 0 \leq x_i \leq a; \\ 0, & \text{если } a < x_i \leq a'. \end{cases} \quad (3.29)$$

Матрица H будет теперь такой:

$$H = \begin{pmatrix} \frac{1}{h^2} + U_1 & -\frac{1}{2h^2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{1}{2h^2} & \frac{1}{h^2} + U_2 & -\frac{1}{2h^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2h^2} & \frac{1}{h^2} + U_3 & -\frac{1}{2h^2} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2h^2} & \frac{1}{h^2} + U_4 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{1}{h^2} + U_n \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

Заметим, что если бы в задаче рассматривалась двумерная потенциальная яма (квадратная яма ширины a и глубины U_0), в матрице (3.30) было бы не три, а пять ненулевых диагоналей.

Из-за того, что в яме конечной глубины имеется лишь конечное число k связанных состояний, среди всех n решений (3.30) будет $n - k$ решений, отвечающих состояниям непрерывного спектра. При численной диагонализации матрицы (3.30) это может привести к проблеме, связанной с тем, что матрица H может быть **плохо обусловленной**, т.е. некоторые ее столбцы являются почти линейно зависимыми. Степень обусловленности матрицы характеризуется **числом обусловленности**, которое для симметричной вещественной матрицы равно отношению модулей максимального и минимального собственных значений. Большие числа обусловленности (порядка 1000 и больше) отвечают плохо обусловленным матрицам, при численной диагонализации которых возникают очень большие погрешности, приводящие к неверным результатам. Из-за того, что значения энергии частицы, отвечающие состояниям непрерывного спектра, могут принимать любые положительные значения $E_c > 0$, число обусловленности матрицы H может принимать любые, сколь угодно большие, значения, определяемые лишь числом разбиения n . В современных математических пакетах имеются встроенные процедуры оценки числа обусловленности матриц до их диагонализации.

Для уменьшения числа обусловленности матрицы (3.30) можно использовать следующий прием. Сдвинем всю потенциальную картину на рис. 3.5 на достаточно большую величину $U' > 0$, так что

$$|U'| \gg |U_0|, \quad (3.31)$$

и, соответственно, к каждому элементу, стоящему на главной диагонали матрицы H , добавится слагаемое, равное U' :

$$H' = H + \begin{pmatrix} U' & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & U' & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & U' & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U' & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & U' \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

После такого преобразования все величины в задаче будут одного порядка, и число обусловленности матрицы H станет меньше.

Соответственно, все собственные значения матрицы H' будут отличаться от собственных значений матрицы H на величину U' :

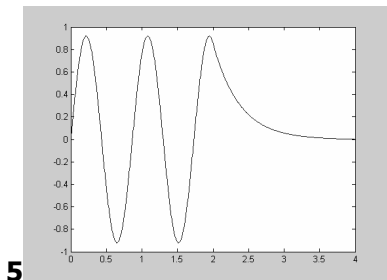
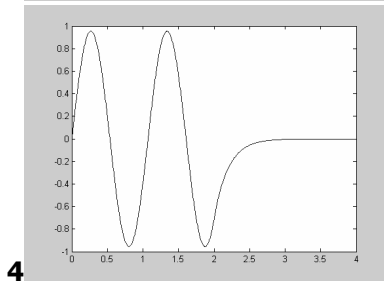
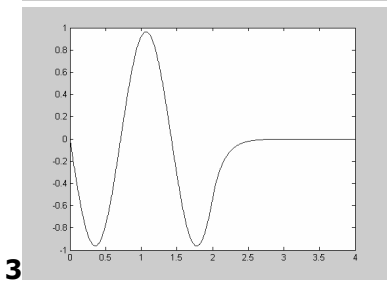
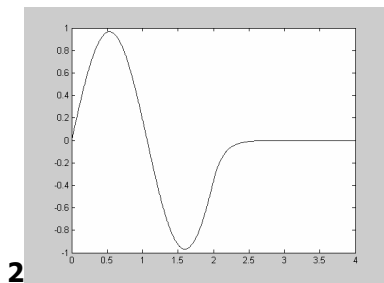
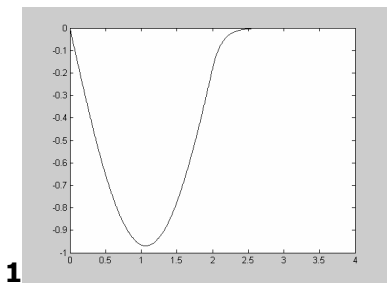
$$E' = E + U', \quad (3.33)$$

а на собственные функции сдвиг потенциальной картины не окажет влияния:

$$\Psi' = \Psi. \quad (3.34)$$

На рис. 3.6 показаны волновые функции связанных состояний в конечной яме с параметрами $U_0 = 30$, $a = 2$ и соответствующие им значения энергии; при данных параметрах в яме существует 5 связанных состояний. Пространственное разбиение при решении системы (3.28) было выбрано с шагом $h = 0.005$, граница области решения $a' = 2a = 4$; для уменьшения числа обусловленности матрицы H был осуществлен сдвиг всей потенциальной картины на величину $U' = 400$, что дало возможность провести диагонализацию матрицы H' с числом обусловленности $S = 468.75$.

Матрица H в (3.30) является матрицей общего вида для задачи о частице в одномерной конечной потенциальной яме. Задавая различные значения U_1 , можно решить уравнение Шредингера (3.27) для потенциальной ямы произвольной формы.



$$E_1 = -28.910$$

$$E_2 = -25.649$$

$$E_3 = -20.256$$

$$E_4 = -12.823$$

$$E_5 = -3.675$$

Рис. 3.6. Волновые функции частицы в конечной потенциальной яме

3.3. Импульсное представление

Спектр квантовой задачи является инвариантом, не зависящим от выбора базиса. В предыдущем разделе для решения задач выбирался узельный базис, напрямую связанный с пространственным распределением волновой функции частицы. Рассмотрим теперь, как можно одночастичную задачу решить в **импульсном представлении**, которое является фурье-преобразованием координатного пространства. Для более детального изучения импульсного представления познакомимся сначала с необходимыми математическими вопросами.

3.3.1. Дискретное преобразование Фурье

Фурье-преобразование играет важное значение в квантовой физике конденсированного состояния. **Обратное пространство** (его называют также **фурье-пространством** или **импульсным пространством**) – реальность, с которой сталкиваются исследователи при изучении рентгеновских и нейтронных спектров кристаллов, при наблюдении и расчете зонной структуры, фононных спектров и т.д. Все физические величины, определенные в периодическом пространстве кристалла, такие как энергия электронов и дырок, дисперсия фононных и фотонных возбуждений, волновые функции квазичастиц и др., периодичны в импульсном пространстве с периодом обратной решетки. Кроме того, для конечной дискретной системы обратное (импульсное) пространство также дискретно.

Проиллюстрируем сказанное на следующем примере. Пусть имеется одномерная область пространства, ограниченная интервалом $0 < x \leq aL$, где a – период пространственной решетки, L – целое число. Для того, чтобы все "узлы" (подразумеваются реальные атомы физической системы) прямого пространства не отличались друг от друга, введем периодические условия на границах интервала, тогда первый и последний узлы станут соседними (рис. 3.7).

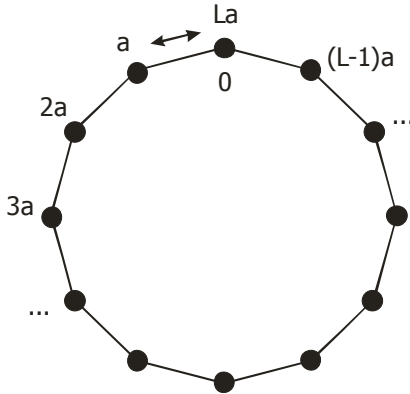


Рис. 3.7. Одномерная цепочка из L узлов с периодическими граничными условиями

Можно предполагать, что при $L \gg 1$ влияние граничных условий будет минимально. Если мы решаем, например, уравнение Шредингера для одной свободной частицы на такой решетке, то

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}. \quad (3.35)$$

Легко видеть, что решение уравнения Шредингера $\hat{H}\Psi = E\Psi$ есть плоская волна вида

$$\Psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (3.36)$$

Потребуем, чтобы на это решение были наложены условия периодичности. Математически это означает, что $\Psi_k(x + aL) = \Psi_k(x)$, т.е. $e^{ikLa} = 1$. Эти граничные условия называются

граничными условиями Борна – Кармана. Из условия $e^{ikLa} = 1$ следует, что импульс частицы должен удовлетворять условию

$$k = \frac{2\pi}{aL} n, \quad n = 0, 1, \dots, L-1. \quad (3.37)$$

Таким образом, разрешенные импульсы в дискретной периодической системе также дискретны, количество неповторяющихся импульсов равно числу узлов; при увеличении размеров системы соседние значения импульсов все больше приближаются друг к другу. Все неповторяющиеся импульсы размещены в области $0 < k \leq \frac{2\pi}{a}$. Эта область называется **первой**

зоной Бриллюэна. Обычно точку отсчета удобно помещать в центр зоны, тогда первая зона Бриллюэна заключена в интервале $-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}$. Пространство разрешенных импульсов **однозначно** связано с прямым (обычным) дискретным пространством и называется **обратным**. Все сказанное справедливо и в трехмерной ситуации. Так, если имеем в прямом пространстве простую кубическую (ПК) решетку, то в обратном пространстве ей соответствует также простая кубическая решетка, объемно-центрированная кубическая (ОЦК) решетка в прямом пространстве соответствует гранецентрированной кубической (ГЦК) решетке в обратном пространстве, и наоборот (рис. 3.8). Заметим, что при изучении структуры твердых тел методами рентгеновской и нейтронной дифракции сначала определяют обратное пространство, а уже потом по нему восстанавливают вид кристаллической решетки в прямом пространстве.

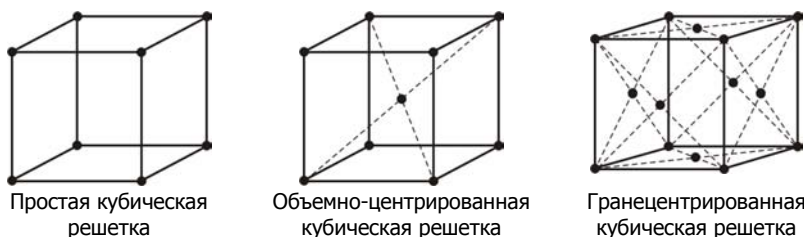


Рис. 3.8. Кубические решетки

Проанализируем проблему фурье-преобразования с математической точки зрения. Рассмотрим периодическую функцию $f(x)$ с периодом 1, определенную на всей действительной оси, и разложим ее в ряд Фурье:

$$f(x) = \sum_{q=-\infty}^{\infty} a_q e^{2\pi i q x}, \quad (3.38)$$

где q – целое, при этом для сходимости потребуем

$$\sum_{q=-\infty}^{\infty} |a_q| < \infty. \quad (3.39)$$

Выберем на оси x дискретную пространственную сетку $x_i = \frac{i}{N}$, где N фиксировано, i – целое. Положим $f_i \equiv f(x_i)$ – значения функции в узлах сетки. Тогда в фурье-разложении функции $f(x)$ будет много слагаемых с одинаковыми экспоненциальными

множителями. Действительно, пусть есть два импульса q_1 и q_2 , такие, что $q_2 - q_1 = kN$, k – целое. Тогда $q_2 x_i - q_1 x_i = \frac{i}{N} kN = ki$ – также целое. Таким образом, $e^{2\pi i q_2 x_i} = e^{2\pi i q_1 x_i}$. Ряд Фурье можно переписать следующим образом:

$$f(x) = \sum_{q=0}^{N-1} A_q e^{2\pi i q x}, \quad A_q = \sum_{s=-\infty}^{\infty} a_{q+sN}, \quad (3.40)$$

где s – целое. Это преобразование справедливо только для переменной x , принадлежащей дискретной сетке x_i .

Таким образом, теперь задача рассматривается только на одном периоде, разделенном на отрезки ("узлы") длиной $\frac{2\pi}{N}$. Для решения задачи нужно определить коэффициенты Фурье A_q .

Введем скалярное произведение двух функций на дискретной сетке:

$$(f, g) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} f_i g_i^*. \quad (3.41)$$

Множитель $1/N$ введен для корректного перехода в непрерывный предел:

$$(f, g) \xrightarrow{|x_{i+1} - x_i| \rightarrow 0} \int_0^1 f(x) g^*(x) dx. \quad (3.42)$$

Покажем, что функции $g_q(x) = e^{2\pi i q x_i}$ при $0 \leq q < N$ образуют ортонормированную систему. Вычислим скалярное произведение

$$(g_q, g_j) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} e^{2\pi i (q-j) \frac{k}{N}}. \quad (3.43)$$

Если $q \neq j$, то $(g_q, g_j) = \frac{1}{N} \left[\frac{1 - e^{2\pi i (q-j)}}{1 - e^{2\pi i (q-j)/N}} \right] = 0$;

если $q = j$, то вычислить скалярное произведение можно двумя способами:

а) $(g_q, g_j) = \frac{1}{N} \left[\frac{1 - e^{2\pi i \alpha}}{1 - e^{2\pi i \alpha / N}} \right]_{\alpha \rightarrow 0} = \frac{1}{N} \left[\frac{-2\pi i \alpha}{-2\pi i \alpha / N} \right]_{\alpha \rightarrow 0} \rightarrow 1$;

б) $(g_q, g_j) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} 1 = 1$.

Таким образом, доказано, что $(g_q, g_j) = \delta_{qj}$, $0 \leq q, j < N$, т.е. функции $g_q(x) = e^{2\pi i q x_i}$ ортонормированны.

Далее получим искомые коэффициенты Фурье A_q . Для этого найдем скалярное произведение функций f и g_j и получим коэффициенты через обратное преобразование Фурье:

$$\begin{aligned}
 (f, g_j) &= \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{q=0}^{N-1} A_q g_j^* e^{2\pi i q x_k} = \sum_{q=0}^{N-1} A_q \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} e^{2\pi i q x_k - 2\pi i j x_k} = \\
 &= \sum_{q=0}^{N-1} A_q (g_q, g_j) = \sum_{q=0}^{N-1} A_q \delta_{qj} = A_j.
 \end{aligned}
 \tag{3.44}$$

Итак,

$$A_j = (f, g_j) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f_k e^{-2\pi i j x_k}. \tag{3.45}$$

Если коэффициенты a_q быстро спадают с ростом номера q , то

$$A_q = \sum_{s=-\infty}^{\infty} a_{q+sN} \rightarrow a_q. \tag{3.46}$$

В непрерывном пределе имеем:

$$A_j \xrightarrow{|x_{i+1} - x_i| \rightarrow 0} a_j = \int_0^1 f(x) e^{-2\pi i j x} dx. \tag{3.47}$$

Иногда удобнее проводить суммирование по периоду в симметричных пределах. Проверим следующее свойство: $A_{q_1} = A_{q_2}$, если $q_2 - q_1 = kN$, k – целое. Имеем:

$$A_{j+kN} = \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} f_l e^{-2\pi i \frac{1}{N}(j+kN)l} = \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} f_l e^{-2\pi i j l} e^{-2\pi i k l} = A_j \tag{3.48}$$

Используя это свойство, можно следующим образом сдвинуть пределы суммирования:

$$\sum_{q=0}^{N-1} A_q e^{2\pi i q x} = \sum_{q=0}^{N/2} A_q e^{2\pi i q x} + \sum_{q=N/2+1}^{N-1} A_q e^{2\pi i q x}. \tag{3.49}$$

В последней сумме сделаем замену $q' = q - N$, получим:

$$\sum_{q=0}^{N-1} A_q e^{2\pi i q x} = \sum_{q=0}^{N/2} A_q e^{2\pi i q x} + \sum_{q'=-N/2+1}^{-1} A_{q'+N} e^{2\pi i \frac{1}{N}(q'+N)x} = \sum_{q=-N/2+1}^{N/2} A_q e^{2\pi i q x}. \tag{3.50}$$

В итоге суммирование проводится в пределах интервала $-\frac{N}{2} < q \leq \frac{N}{2}$.

Для численного расчета всех коэффициентов Фурье в общем случае необходимо $\sim N^2$ операций, и при достаточно большом N процедура расчета коэффициентов может занимать значительное время. Существует алгоритм, который позволяет проводить разложение в ряд Фурье гораздо быстрее – за $\sim N \log_2 N$ операций – так называемое **быстрое преобразование Фурье**.

Пусть имеются коэффициенты Фурье некоторой периодической функции f :

$$A_q = (f, g_q) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f_j e^{-2\pi i q x_j}. \tag{3.51}$$

Разобьем число N на два множителя: $N = p_1 p_2$, $p_1, p_2 \neq 1$ (например, $N = 100$, $p_1 = 20$, $p_2 = 5$). Тогда числа q и j можно представить в виде $q = q_1 + p_1 q_2$, $j = j_2 + p_2 j_1$, причем $0 \leq q_1, j_1 < p_1$; $0 \leq q_2, j_2 < p_2$.

Формально подставим в выражение для коэффициентов Фурье эти разложения:

$$A_q = A(q_1, q_2) = \frac{1}{p_1 p_2} \sum_{j_1=0}^{p_1-1} \sum_{j_2=0}^{p_2-1} f_{j_2+p_2 j_1} e^{-\frac{2\pi i}{p_1 p_2} (j_2+p_2 j_1)(q_1+p_1 q_2)}. \quad (3.52)$$

Преобразуем выражение в степени экспоненты:

$$\begin{aligned} \frac{1}{p_1 p_2} (j_2 + p_2 j_1)(q_1 + p_1 q_2) &= \frac{j_2 q_1}{p_1 p_2} + \frac{j_2 p_1 q_2}{p_1 p_2} + \frac{p_2 j_1 q_1}{p_1 p_2} + \frac{p_2 j_2 p_1 q_1}{p_1 p_2} = \\ &= \frac{(q_1 + p_1 j_2) j_2}{p_1 p_2} + \frac{j_1 q_1}{p_1} + q_2 j_1 = \frac{q j_2}{N} + \frac{j_1 q_1}{p_1} + q_2 j_1. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Заметим, что произведение $q_2 j_1$ – целое, т.е. $e^{-2\pi i q_2 j_1} = 1$. Тогда имеем:

$$\begin{aligned} A_q &= \frac{1}{p_1 p_2} \sum_{j_1=0}^{p_1-1} \sum_{j_2=0}^{p_2-1} f_{j_2+p_2 j_1} e^{-2\pi i \left(\frac{q j_2}{N} + \frac{j_1 q_1}{p_1} \right)} = \\ &= \frac{1}{p_2} \sum_{j_2=0}^{p_2-1} e^{-2\pi i \frac{q j_2}{N}} \frac{1}{p_1} \sum_{j_1=0}^{p_1-1} f_{j_2+p_2 j_1} e^{-2\pi i \frac{j_1 q_1}{p_1}}. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Введем

$$A^{(1)}(j_2, q_1) = \frac{1}{p_1} \sum_{j_1=0}^{p_1-1} f_{j_2+p_2 j_1} e^{-2\pi i \frac{j_1 q_1}{p_1}}. \quad (3.55)$$

Тогда фурье-компоненту можно переписать так:

$$A_q = \frac{1}{p_2} \sum_{j_2=0}^{p_2-1} A^{(1)}(j_2, q_1) e^{-2\pi i \frac{q j_2}{N}}. \quad (3.56)$$

Задача разбилась на 2 части: сначала определяют коэффициенты $A^{(1)}$, а затем подставляют их в выражение для коэффициентов Фурье A_q .

Определим количество операций, необходимое на расчет фурье-компонент. Легко оценить, что для расчета всех коэффициентов $A^{(1)}$ необходимо перебрать переменную j_1 для внутренней суммы (т.е. p_1 операций), а внешние переменные – это j_2 (p_2 операций) и q_1 (p_1 операций). Таким образом, для расчета всех коэффициентов $A^{(1)}$ необходимо $\sim p_1 p_2 p_1 = N p_1$ операций. Аналогично определяем, что при известных коэффициентах $A^{(1)}$ количество операций, необходимое для расчета коэффициентов A_q , равно $\sim p_2 p_1 p_2 = N p_2$ операций.

В общем случае, при разбиении числа N на произвольные множители цена фурье-операций будет $\sim N \sum_{i=1}^r p_i$, где r – число множителей. Следует только последовательно вычислять величины $A^{(1)}, A^{(2)}, \dots, A^{(r)}$, начиная от внутреннего

разбиения и передвигаясь к внешнему. Наиболее эффективное разбиение достигается при $p_1 = p_2 = \dots = p_r = 2$, т.е. по основанию 2, как в двоичном коде. В этом случае имеем $2^r = N$, т.е. $r = \log_2 N$. Отсюда полное число операций $\sim N \log_2 N \ll N^2$.

Запишем алгоритм специально для двоичного разбиения, часто используемого на практике. Представим числа q и j в виде

$$q = \sum_{k=1}^r q_k 2^{k-1}, \quad j = \sum_{m=1}^r j_{r+1-m} 2^{m-1}; \quad q_k, j_m = 0, 1. \quad (3.57)$$

Тогда для расчета коэффициентов $A^{(i)}$ существует последовательность рекуррентных соотношений:

$$A^{(m)}(q_1, \dots, q_m, j_{m+1}, \dots, j_r) = \frac{1}{2} \sum_{j_m=0}^1 e^{-2\pi i j_m 2^{-m} \sum_{k=0}^m q_k 2^{k-1}} A^{(m-1)}(q_1, \dots, q_{m-1}, j_m, \dots, j_r);$$

$$A^{(0)}(j_1, \dots, j_r) = f_{j_r + j_{r-1} 2 + \dots + j_1 2^{r-1}}; \quad m = 1, \dots, r. \quad (3.58)$$

Заметим, что следует сразу брать число разбиений N кратное степеням 2: $N = 2^n$.

3.3.2. Решение одночастичной задачи в импульсном представлении

Для решения задачи о частице в потенциальной яме выберем теперь базис в импульсном представлении, базисные функции которого имеют вид (3.36)

$$\Phi_k = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}, \quad (3.59)$$

где L – ширина ямы или ширина области, в которой локализован потенциал или волновые функции частицы.

Формально вид нового базиса при построении гамильтоновой матрицы можно представить по аналогии с (3.13),

$$\Phi_{k=1} = |100\dots 0\rangle; \quad \Phi_{k=2} = |010\dots 0\rangle; \quad \dots; \quad \Phi_{k=n} = |000\dots 1\rangle, \quad (3.60)$$

однако теперь единица означает, что соответствующая базисная функция описывает состояние частицы Φ_k с импульсом k .

Рассмотрим задачу о частице в потенциальной яме

$$U(x) = -\frac{U}{\operatorname{ch}^2 x}, \quad (3.61)$$

где введена безразмерная система единиц $m \rightarrow 1$; $\hbar \rightarrow 1$.

Известно аналитическое решение этой задачи [1], спектр связанных состояний системы имеет вид

$$E_n = -\frac{1}{8}(1 - 2n + \sqrt{1 + 8U})^2, \quad (3.62)$$

где n – номер энергетического уровня. При $U = 16$ в системе 6 связанных состояний с энергиями:

$$\begin{aligned} E_1 &= -13.4105; \\ E_2 &= -8.7316; \\ E_3 &= -5.0527; \\ E_4 &= -2.3738; \\ E_5 &= -0.6949; \\ E_6 &= -0.0160. \end{aligned} \quad (3.63)$$

График зависимости $U(x)$ вместе с разрешенными уровнями энергии приведен на рис. 3.9.

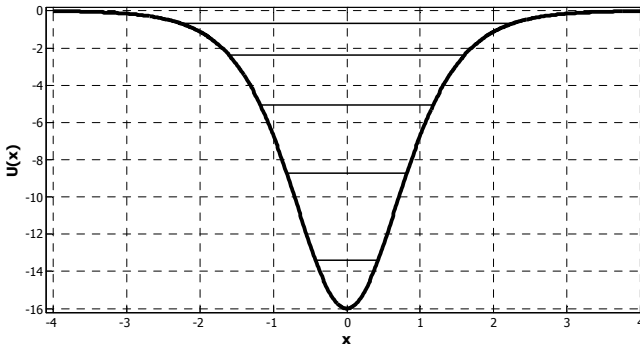


Рис. 3.9. Вид потенциальной ямы и дискретного спектра для (3.61)

Решение задачи в **координатном представлении**, так, как это было сделано для прямоугольной ямы в предыдущем разделе, при ширине области определения $L = 2a = 8$ и сетке разбиения из 800 отрезков дает для первых пяти связанных состояний значения

$$\begin{aligned}
 E_1 &= -13.4110; \\
 E_2 &= -8.7319; \\
 E_3 &= -5.0532; \\
 E_4 &= -2.3743; \\
 E_5 &= -0.6845,
 \end{aligned}
 \tag{3.64}$$

а зависимость соответствующих амплитуд вероятности от координаты показана на рис. 3.10.

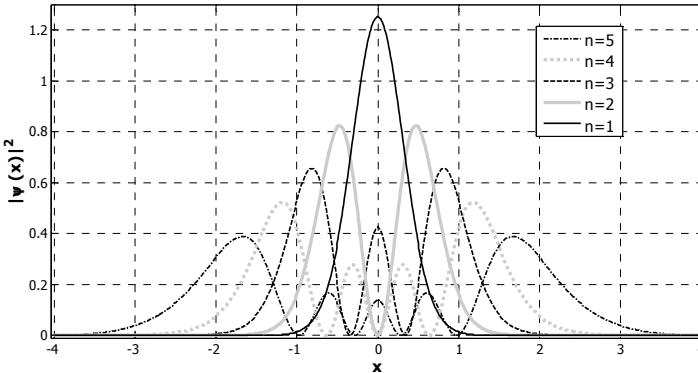


Рис. 3.10. Распределение частицы по координате для первых пяти связанных состояний. Решение в координатном представлении

Для решения задачи в **импульсном представлении** следует сначала записать гамильтониан в терминах импульсного базиса (3.60). Первое слагаемое в (3.9), отвечающее кинетической энергии частицы, запишется в виде

$$\langle \Phi_p | H_{\text{кин}} | \Phi_{p'} \rangle = \frac{p^2}{2} \delta_{pp'}, \tag{3.65}$$

т.е. это слагаемое **диагонально** в импульсном представлении.

Слагаемое, отвечающее потенциальной энергии частицы, теперь будет недиагональным:

$$\langle \Phi_p | U(x) | \Phi_{p'} \rangle \equiv U(p, p') = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a U(x) e^{i(p'-p)x} dx. \tag{3.66}$$

Подставляя (3.61) в (3.66) и вводя сетку разбиения из m отрезков вдоль оси x с шагом $h = 2a/m$, получаем:

$$U(p, p') = \frac{1}{2a} \sum_{i=1}^m U(x_i) e^{i(p'-p)x_i} h = -\frac{U}{n} \sum_{i=1}^m \frac{\cos[(p-p')x_i]}{\text{ch}^2 x_i}. \quad (3.67)$$

Результат расчета практически не изменится, если выражение (3.66) рассчитать аналитически:
$$U(p, p') = -\frac{U\pi}{2a} \frac{(p-p')}{\text{sh}\left((p-p')\frac{\pi}{2}\right)},$$

учитывая быстрое затухание подынтегральной функции при $|x| \geq 4$.

После того, как определен вид гамильтониана в импульсном представлении, можно построить гамильтонову матрицу

$$H = \begin{pmatrix} \frac{p_1^2}{2} & U(p_1, p_2) & U(p_1, p_3) & \dots \\ U(p_2, p_1) & \frac{p_2^2}{2} & U(p_2, p_3) & \dots \\ U(p_3, p_1) & U(p_3, p_2) & \frac{p_3^2}{2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (3.68)$$

и диагонализировать ее. Значения импульса, в соответствии с (3.37) (расстояние между узлами сетки a в (3.37) соответствует в данном случае шагу разбиения h), будут меняться от $-\pi/h$ до π/h с шагом π/a . Результатом диагонализации будут собственные значения, являющиеся спектром системы (напомним, что спектр матрицы не зависит от представления, в котором она построена), и собственные функции $\Phi'(p)$, отвечающие этим собственным значениям, которые теперь будут зависеть не от координаты, а от импульса частицы. На рис. 3.11 показано распределение импульса частицы для первых четырех связанных состояний; этот результат получен сплайн-интерполяцией значений, полученных при диагонализации гамильтоновой матрицы, отвечающей сетке разбиения по импульсу из $m = 800$ отрезков.

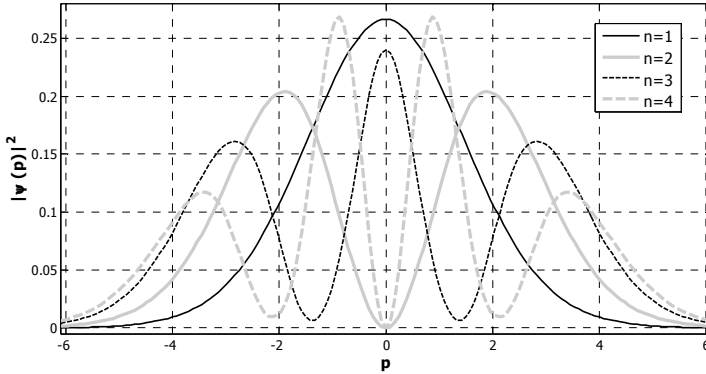


Рис. 3.11. Распределение частицы по импульсу для первых четырех связанных состояний. Решение в импульсном представлении, $\hbar = 2a / 800 = 0.01$

Спектр системы, рассчитанный в импульсном представлении для $m = 800$, оказывается равным

$$\begin{aligned}
 E_1 &= -13.4110; \\
 E_2 &= -8.7316; \\
 E_3 &= -5.0527; \\
 E_4 &= -2.3737; \\
 E_5 &= -0.7056,
 \end{aligned}
 \tag{3.69}$$

и близким по значению к точному решению (3.63) и результатам расчета в узельном базисе (3.64).

Чтобы получить из собственных функций в импульсном представлении собственные функции в координатном представлении, необходимо выполнить обратное фурье-преобразование вида (3.44):

$$\Phi'_\alpha(p) = \sum_{k=1}^m C_{k\alpha} \Phi_k = \frac{1}{\sqrt{2a}} \sum_{k=1}^m C_{k\alpha} e^{ix \frac{2\pi}{h} k}. \tag{3.70}$$

Для нашей дискретной сетки формулы перехода из импульсного представления в координатное имеют следующий вид:

$$\Phi'_\alpha(x_j) = \frac{1}{\sqrt{2a}} \sum_{k=1}^m C_{k\alpha} \cos\left(x_\beta \frac{2\pi}{h} k\right) \tag{3.71}$$

для четных собственных функций (нечетные номера уровней), и

$$\Phi'_\alpha(x_j) = \frac{1}{\sqrt{2a}} \sum_{k=1}^m C_{k\alpha} \sin\left(x_\beta \frac{2\pi}{h} k\right) \quad (3.72)$$

для нечетных собственных функций (нечетные номера уровней).

Распределение частицы по координате для первых пяти связанных состояний, полученное из (3.71) – (3.72), показано на рис. 3.12. Этот график практически идентичен рис. 3.11, который получен решением задачи в координатном представлении.

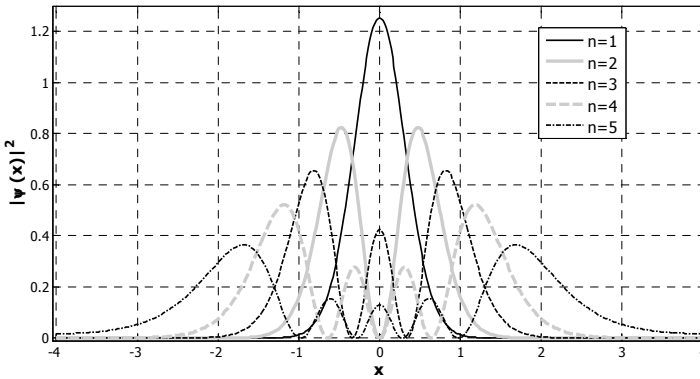


Рис. 3.12. Распределение частицы по координате для первых пяти связанных состояний. Решение в импульсном представлении

В заключение раздела заметим, что выбор базиса для задачи диагонализации конкретной квантовой системы диктуется исключительно вопросами удобства расчета и наглядностью представления.

Задачи

3.1. Исследовать поведение частицы в потенциале

$$U = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ -U_0, & 0 < x < a; \\ 0, & x > a. \end{cases}$$

При $a=1$ подобрать такое значение U_0 , чтобы в яме было пять связанных состояний. Рассчитать энергии этих состояний, построить зависимость плотности вероятности распределения частицы от координаты для этих состояний.

При найденном значении U_0 исследовать поведение связанных состояний в зависимости от ширины ямы a . Уменьшая a , найти критические значения a_n , при которых из ямы выходят очередные уровни.

При $a = 1$ исследовать поведение связанных состояний в зависимости от глубины ямы U_0 . Уменьшая глубину ямы, найти критические значения $(U_0)_c$, при которых из ямы выходят очередные уровни. Увеличивая U_0 , сравнить значения энергетических уровней со спектром частицы в бесконечной потенциальной яме.

Сравнить полученные результаты с точным решением.

3.2. Для линейного осциллятора

$$U = \frac{kx^2}{2}$$

найти энергетические уровни и волновые функции пяти нижних состояний. Построить зависимость плотности вероятности распределения частицы от координаты для этих состояний. Сравнить полученные результаты с точным решением.

Проанализировать влияние ангармонизма на энергетические уровни и волновые функции, рассмотрев потенциал

$$U = \frac{kx^2}{2} + gx^3, \quad g \ll k.$$

Построить график зависимости величины $E_0(g) - E_0(g=0)$ от g , где E_0 – энергия основного состояния, и определить характер зависимости.

3.3. Исследовать поведение частицы в потенциале двух близких ям

$$U(x) = \begin{cases} -U_1, & 0 < x < a; \\ -U_2, & a+h < x < a+h+b; \\ 0, & x < 0, a < x < a+h, x > a+h+b. \end{cases}$$

Проанализировать зависимость энергетических уровней и волновых функций от глубины ям U_1 и U_2 , ширины ям a и b , расстояния между ямами h , несимметрии ям.

Рассмотреть предельные случаи $U_1 \rightarrow 0$; $U_1 \rightarrow \infty$; $a \rightarrow 0$; $h \rightarrow 0$; $h \rightarrow \infty$, сравнить с соответствующими точными решениями.

ЧАСТЬ 2

КВАНТОВЫЕ МНОГОЧАСТИЧНЫЕ ЗАДАЧИ

Квантовые многочастичные задачи, даже в случае сильно взаимодействующих частиц (электронов, бозонов, спинов), также поддаются точному численному решению в случае небольших размеров системы. Удобным базисом в этом случае являются узельные функции в представлении чисел заполнения во вторичном квантовании, а все операторы представляются через так называемые операторы рождения и уничтожения, которые автоматически будут учитывать симметрию и статистику частиц.

Перед обзором узельных квантовых моделей познакомимся с представлением чисел заполнения [1]. Вначале на конкретных примерах будут обоснованы правила, необходимые в дальнейшем для решения квантовых задач численными методами. Затем, специально для узельного базиса, будет подробно обсуждена техника использования вторичного квантования для конкретных видов статистик.

4. Формализм вторичного квантования. Представление чисел заполнения

Вторичное квантование – это математический формализм, который позволяет описывать тождественные (неразличимые) частицы естественным образом, так что принцип неразличимости частиц учитывается с самого начала, с построения базисных волновых функций. Этот метод называют также **представлением чисел заполнения**, он удобен и для описания квантовых систем с переменным числом частиц.

Описание квантовой многочастичной задачи во вторичном квантовании формализуется, что позволяет в дальнейшем с успехом применять численный анализ.

Рассмотрим этот математический подход подробнее на конкретных примерах, и начнем с задачи об **одномерном гармоническом осцилляторе**, в которой будут введены понятия **операторов рождения и уничтожения** частиц.

4.1. Одномерный гармонический осциллятор

Уравнение Шредингера для одномерного гармонического осциллятора имеет следующий вид:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi,$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (4.1)$$

Здесь m – масса осциллятора, ω – частота его колебаний.

Решение этой задачи известно (см., например, [1]): спектр имеет вид

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (4.2)$$

где n – неотрицательные целые числа, а волновые функции этой системы

$$\Psi_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi})^{-1/2} H_n(z) e^{-\frac{z^2}{2}}; \quad z = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad (4.3)$$

$H_n(z)$ – полиномы Эрмита, определяемые формулой

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n e^{-z^2}}{dz^n}. \quad (4.4)$$

Волновые функции осциллятора удовлетворяют уравнению

$$\Psi_n'' + (\lambda_n - z^2)\Psi_n = 0, \quad \lambda_n = \frac{2E_n}{\hbar\omega} = 2n + 1. \quad (4.5)$$

Далее задача решается путем выделения экспоненциальных асимптотик и требованием ограниченности волновой функции на бесконечности [1].

Рассмотрим другой метод решения этой задачи. Введем безразмерные операторы

$$\begin{aligned}\hat{Q} &= \hat{x}\sqrt{m\omega/\hbar}, \\ \hat{P} &= \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\omega\hbar}}, \\ P &= \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial Q}.\end{aligned}\tag{4.6}$$

Они удовлетворяют следующему коммутационному соотношению:

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = \frac{1}{\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] = -i.\tag{4.7}$$

Задача 4.1. Получить коммутационное соотношение (4.7).

Гамильтониан в новых операторах запишется следующим образом:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{P}^2 + \hat{Q}^2).\tag{4.8}$$

Введем новые операторы

$$\begin{aligned}\hat{a}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - i\hat{P}), \\ \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} + i\hat{P}) -\end{aligned}\tag{4.9}$$

так называемые **операторы рождения** и **уничтожения**. Они удовлетворяют следующему коммутационному соотношению:

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \frac{1}{2} [\hat{Q}, -i\hat{P}] + \frac{1}{2} [i\hat{P}, \hat{Q}] = 1.\tag{4.10}$$

Тогда

$$\hat{a}^+\hat{a} = \frac{1}{2} (\hat{Q}^2 + \hat{P}^2 - i[\hat{P}, \hat{Q}]) = \frac{1}{2} (\hat{Q}^2 + \hat{P}^2) - \frac{1}{2},\tag{4.11}$$

и гамильтониан, выраженный через операторы \hat{a}, \hat{a}^+ , принимает вид:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (4.12)$$

Если теперь ввести безразмерный параметр $\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$, то уравнение Шредингера можно переписать следующим образом:

$$\left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \Psi = \varepsilon \Psi. \quad (4.13)$$

Теперь необходимо определить, как новые операторы \hat{a} и \hat{a}^+ действуют на волновые функции. Рассмотрим действие оператора a^+ на произвольную собственную волновую функцию Ψ_ε . Имеем (здесь и далее «шляпки» для обозначения операторов будем опускать):

$$\begin{aligned} H\Psi_\varepsilon = \varepsilon\Psi_\varepsilon &\Rightarrow a^+H\Psi_\varepsilon = \varepsilon a^+\Psi_\varepsilon \Rightarrow \\ &\Rightarrow a^+(a^+a + \frac{1}{2})\Psi_\varepsilon = a^+(aa^+ - \frac{1}{2})\Psi_\varepsilon = (H-1)a^+\Psi_\varepsilon. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Итак,

$$(H-1)a^+\Psi_\varepsilon = \varepsilon a^+\Psi_\varepsilon, \quad (4.15)$$

или

$$Ha^+\Psi_\varepsilon = (\varepsilon + 1)a^+\Psi_\varepsilon. \quad (4.16)$$

Таким образом, если Ψ_ε – собственная функция гамильтониана, соответствующая собственному значению ε , то $\Psi_{\varepsilon+1} = a^+\Psi_\varepsilon$ – также собственная функция, соответствующая собственному значению $\varepsilon+1$. Полагая исходную функцию Ψ_ε нормированной на единицу, найдем нормировку $\Psi_{\varepsilon+1}$, для чего рассчитаем скалярное произведение

$$\begin{aligned} (\Psi_{\varepsilon+1}, \Psi_{\varepsilon+1}) &= ((a^+\Psi_\varepsilon)^*, a^+\Psi_\varepsilon) = (\Psi_\varepsilon a, a^+\Psi_\varepsilon) = \\ &= (\Psi_\varepsilon (H + \frac{1}{2})\Psi_\varepsilon) = \varepsilon + \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Следовательно, результатом действия оператора рождения является увеличение на единицу номера состояния по следующему правилу:

$$a^+ \Psi_\varepsilon = \sqrt{\varepsilon + \frac{1}{2}} \Psi_{\varepsilon+1}. \quad (4.18)$$

Аналогично можно вывести правило для оператора уничтожения:

$$a \Psi_\varepsilon = \sqrt{\varepsilon - \frac{1}{2}} \Psi_{\varepsilon-1}. \quad (4.19)$$

Из этих правил следует, что спектр одномерного гармонического осциллятора эквидистантен, т.е. расстояние между уровнями постоянно и равно единице (в единицах $\hbar\omega$), неизвестен только отсчет энергии – наинизший энергетический уровень. Ясно, что оператор уничтожения при действии на волновую функцию основного состояния даст нуль, так как нельзя создать уровень ниже наинизшего. Воспользуемся этим условием:

$$\begin{aligned} a \Psi_0 = 0 &\Rightarrow a^+ a \Psi_0 = 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow (a^+ a + \frac{1}{2}) \Psi_0 = H \Psi_0 = \varepsilon_0 \Psi_0 = \frac{1}{2} \Psi_0. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Таким образом, минимальная энергия осциллятора равна $1/2$, и спектр можно пронумеровать следующим образом:

$$E_n = \hbar\omega \varepsilon_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (4.21)$$

что совпадает с (4.2). Одновременно находим правила действия операторов рождения и уничтожения на собственные волновые функции:

$$a^+ \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}, \quad a \Psi_n = \sqrt{n} \Psi_{n-1}. \quad (4.22)$$

Заметим, что этот подход позволяет полностью решить задачу, т.е. найти также и сами волновые функции. Вспомним, что

$$\begin{aligned} a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (Q - iP) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(Q - \frac{\partial}{\partial Q} \right), \\ a &= \frac{1}{\sqrt{2}} (Q + iP) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(Q + \frac{\partial}{\partial Q} \right). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Тогда имеем:

$$a\Psi_0 = 0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP)\Psi_0 \Rightarrow Q\Psi_0 = -\frac{\partial\Psi_0}{\partial Q} \Rightarrow \Psi_0 = Ae^{-Q^2/2}. \quad (4.24)$$

Нормировка на единицу приводит к множителю $A = \pi^{-1/4}$.

Задача 4.2. Получить нормировочный множитель A .

Теперь, зная функцию нулевого уровня и пользуясь правилом действия оператора рождения, можно получить волновую функцию любого n -го уровня:

$$a^+\Psi_n = \sqrt{n+1}\Psi_{n+1} \Rightarrow \Psi_n = (n!)^{-1/2}(a^+)^n\Psi_0; \quad (4.25)$$

$$\Psi_n = (2^n n! \sqrt{\pi})^{-1/2} \left(Q - \frac{\partial}{\partial Q} \right)^n e^{-Q^2/2} = (2^n n! \sqrt{\pi})^{-1/2} H_n(Q) e^{-Q^2/2}.$$

Здесь $H_n(Q)$ – полиномы Эрмита, определяемые формулой (4.4).
Полученный результат совпадает с (4.3).

Представленный вариант решения показывает, как можно в новом представлении решить задачу об осцилляторе, перейдя к **операторам рождения и уничтожения**, а также к базису волновых функций в представлении чисел заполнения; в этом случае хорошим квантовым числом является номер уровня. Полученные правила действия операторов, а также коммутационные соотношения между ними, как будет показано далее, в точности совпадают с правилами действия и коммутаторами для операторов рождения и уничтожения в случае статистики Бозе.

4.2. Поле смещений в струне

Рассмотрим, как можно описать **поле смещений в струне** с помощью операторов рождения и уничтожения. Для вывода уравнений движения и гамильтониана удобно сначала использовать дискретную модель и представить колебания в струне как колебания в периодической цепочке атомов, связанных упругими

силами, т.е. в **поле упругих волн** – звуковых колебаний, а затем перейти в непрерывный предел.

Рассмотрим одномерную периодическую систему с периодом a из одинаковых атомов массы M , соединенных пружинами с одинаковой жесткостью k (рис. 4.1).

Напишем уравнение движения для такой системы. Для этого пронумеруем все атомы и рассмотрим уравнение Ньютона для n -го атома. На него действуют упругие силы со стороны $(n-1)$ -го атома, направленные влево, и со стороны $(n+1)$ -го атома, направленные вправо.

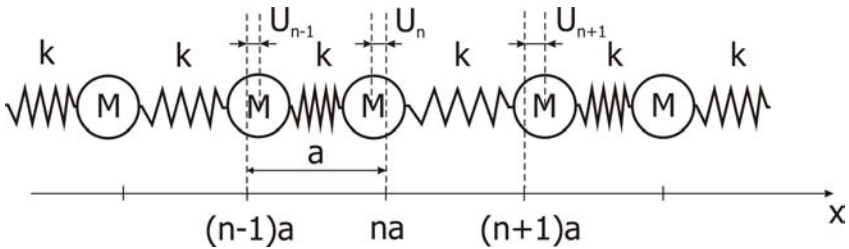


Рис. 4.1. Периодическая система атомов массы M , соединенных одинаковыми пружинами с жесткостью k

Если обозначить смещение атома из положения равновесия как U_n , то

$$M\ddot{U}_n = -k(U_n - U_{n-1}) + k(U_{n+1} - U_n) = k(U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n). \quad (4.26)$$

Перейдем теперь к непрерывному пределу, устремляя период a к нулю, и разложим смещение в ряд до второго порядка по a :

$$\begin{aligned} U_{n+1} &= U(x_n + a) = U(x_n) + U'(x_n)a + \frac{1}{2}U''(x_n)a^2; \\ U_{n-1} &= U(x_n - a) = U(x_n) - U'(x_n)a + \frac{1}{2}U''(x_n)a^2. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Тогда уравнение движения приобретает привычный вид волнового уравнения:

$$M\ddot{U}(x) = ka^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}. \quad (4.28)$$

Введем линейную плотность $\rho = Ma$ и модуль упругости $G = ka$, тогда

$$\rho\ddot{U}(x) = G \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}. \quad (4.29)$$

Квадрат скорости звука при этом определяется как $c^2 = \frac{G}{\rho}$. Имеем, таким образом, одномерное волновое уравнение, описывающее собственные колебания струны с линейной плотностью ρ и модулем упругости G .

Напишем гамильтониан системы – сумму кинетической и потенциальной энергий атомов:

$$\begin{aligned} H &= \sum_n \left[\frac{M\dot{U}_n^2}{2} + k \frac{(U_n - U_{n-1})^2}{2} \right] = a \sum_n \left[\rho \frac{\dot{U}_n^2}{2} + G \frac{(\partial U_n / \partial x)^2}{2} \right] = \\ &= \int dx \left[\rho \frac{(\dot{U}(x))^2}{2} + G \frac{(\partial U / \partial x)^2}{2} \right]. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Введем фурье-компоненты смещений по координате:

$$U(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k U(k, t) e^{ikx}, \quad (4.31)$$

тогда гамильтониан можно переписать следующим образом:

$$H = a \sum_k \left[\rho \frac{\dot{U}(k, t) \dot{U}^*(k, t)}{2} + Gk^2 \frac{U(k, t) U^*(k, t)}{2} \right]. \quad (4.32)$$

В последнем выражении учтено, что для того, чтобы смещение было действительной величиной, необходимо потребовать, чтобы $U^*(-k, t) = U(k, t)$.

Пользуясь уравнением на собственные колебания, можно получить зависимость от времени фурье-компонент смещений. Действительно,

$$\begin{aligned} \ddot{U}(k, t) = -c^2 U(k, t) \Rightarrow U(k, t) = U_1(k)e^{i\omega_k t} + U_2(k)e^{-i\omega_k t}; \\ \omega_k = c|k|. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Далее воспользуемся условием $U^*(k, t) = U(-k, t)$. Имеем:

$$\begin{aligned} U^*(k, t) = U_1^*(k)e^{-i\omega_k t} + U_2^*(k)e^{i\omega_k t}; \\ U^*(-k, t) = U_1^*(-k)e^{-i\omega_k t} + U_2^*(-k)e^{i\omega_k t} \Rightarrow U_1^*(-k) = U_2(k). \end{aligned} \quad (4.34)$$

Окончательно находим:

$$\begin{aligned} U(k, t) = U(k)e^{-i\omega_k t} + U^*(-k)e^{i\omega_k t}; \\ U(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k \left(U(k)e^{ikx-i\omega_k t} + U^*(k)e^{-ikx+i\omega_k t} \right). \end{aligned} \quad (4.35)$$

Введем обобщенные координаты и импульсы:

$$\begin{aligned} Q(k, t) = U(k, t); \\ P(k, t) = \rho \dot{Q}(k, t). \end{aligned} \quad (4.36)$$

Перепишем оператор энергии в обобщенных координатах:

$$H = \sum_k \left[\frac{P_k P_{-k}}{2\rho} + \left(\frac{\rho\omega_k^2}{2} \right) Q_k Q_{-k} \right], \quad (4.37)$$

здесь P_k, Q_{-k} – сопряженные обобщенные координаты и импульсы.

Дифференцируя оператор энергии по импульсу, координате, а также используя уравнения движения, можно получить уравнения Гамильтона

$$\begin{cases} \dot{Q}_{-k} = \frac{\partial H}{\partial P_k}; \\ \dot{P}_k = -\frac{\partial H}{\partial Q_{-k}}. \end{cases} \quad (4.38)$$

Для выражения гамильтониана через операторы в представлении чисел заполнения введем операторы $a_k(t)$, $a_k^\dagger(t)$ следующим образом:

$$\begin{aligned} a_k(t) &= \sqrt{\frac{\rho\omega_k}{2\hbar}} Q_k(t) + i \frac{P_k(t)}{\sqrt{2\rho\omega_k\hbar}}; \\ a_k^\dagger(t) &= \sqrt{\frac{\rho\omega_k}{2\hbar}} Q_{-k}(t) - i \frac{P_{-k}(t)}{\sqrt{2\rho\omega_k\hbar}}. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Введенные таким образом операторы рождения и уничтожения обладают всеми атрибутами операторов, фигурирующих ранее в задаче для одного осциллятора. В этом несложно убедиться, вводя правила коммутации для обобщенных координат и импульсов: $[P_k, Q_{-k}] = -i\hbar$.

Задача 4.3. Проверить коммутационные соотношения для операторов $a_k(t)$, $a_k^\dagger(t)$.

Окончательно гамильтониан системы представляется как сумма энергий гармонических операторов:

$$H = \sum_k \hbar\omega_k \left[a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right], \quad (4.40)$$

при этом через эти операторы можно выразить и смещение:

$$\begin{aligned} U(k, t) = Q(k, t) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_k}} (a_k(t) + a_{-k}^\dagger(t)); \\ U(x, t) &= \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho L\omega_k}} (a_k(t)e^{ikx} + a_k^\dagger(t)e^{-ikx}). \end{aligned} \quad (4.41)$$

Зная решение задачи для осциллятора, далее можно рассчитать и термодинамические свойства данной системы.

Теперь рассмотрим **формализм вторичного квантования (или представление чисел заполнения)** в общем случае.

4.3. Формализм вторичного квантования

Волновые функции в шредингеровском представлении неудобны для описания ансамбля тождественных частиц. Действительно, если рассмотреть функцию двух **тождественных** частиц $\Psi(a,b)$, то функция $\Psi(b,a)$ описывает ту же амплитуду вероятности того, что одна частица находится в точке a , а вторая – в точке b . Следовательно, значения этих функций не могут задаваться произвольно, и должны различаться только фазовым множителем, так как модули квадратов этих волновых функций описывают одну и ту же физическую величину и должны быть равны:

$$|\Psi(a,b)|^2 = |\Psi(b,a)|^2.$$

Эту проблему устраняют, потребовав, чтобы волновая функция двух тождественных частиц была либо симметрична, либо антисимметрична относительно перестановки аргументов. Для системы, состоящей из многих частиц, такая проблема еще более усугубляется, так как следует потребовать симметрию или антисимметрию **любой пары** частиц. В случае антисимметрии результат представим в виде так называемого **детерминанта Слэтера** [3], работать с которым чрезвычайно неудобно. Иногда предлагается также альтернативный метод – **схема Юнга** [1] – для учета тождественности, но он также неудобен для практического применения.

Предлагаемый ниже **аппарат вторичного квантования** (или **формализм чисел заполнения**) позволяет избежать вышеуказанных трудностей, удобен для работы (в том числе, для формализации задач на компьютере), и специально направлен на описание систем тождественных (неразличимых) частиц. Будет показано, как естественным образом все операторы физических величин можно представить через операторы рождения и уничтожения **фермиевского** или **бозевского** вида и как практически работать с ними.

4.3.1. Одночастичный базис

Введем **вакуумную волновую функцию** $|0\rangle$, обозначающую состояние рассматриваемой системы, не содержащее **ни одной** частицы. Затем добавим в систему одну частицу, и рассмотрим полный набор таких **одночастичных состояний**. В качестве одночастичных состояний можно выбрать, например, плоские волны, образующие полный набор: $|k\rangle = e^{ikx}$. В формализме чисел заполнения такие состояния будут представлены следующим образом:

$$|k\rangle \equiv a_k^+ |0\rangle. \quad (4.42)$$

Это тождество означает, что введенный оператор рождения a_k^+ **по определению** рождает частицу в одночастичном состоянии, описываемом плоской волной с волновым вектором k .

Итак, одночастичное состояние определяется как результат действия оператора рождения на вакуумное состояние. Волновая функция, сопряженная с одночастичной, представляется в виде $\langle 0|a_k$, где a_k – сопряженный с a_k^+ оператор (принято говорить, что **кет-вектору** $|k\rangle$ соответствует **бра-вектор** $\langle k|$). Из-за ортонормированности одночастичного базиса справедливо следующее очевидное соотношение:

$$\langle 0|a_k a_k^+ |0\rangle = \delta_{kk}. \quad (4.43)$$

Для случая одной частицы пока не получено никаких новых результатов, кроме переобозначений волновых функций. Формализм вторичного квантования становится полезным при рассмотрении систем двух и более частиц.

Подчеркнем, что полный набор – необязательно плоские волны, а квантовое число k – необязательно волновой вектор. Более того, функции любого другого базиса всегда можно записать в виде линейных комбинаций плоских волн. Значит, и операторы

рождения, соответствующие новому базису, также можно выразить через линейную комбинацию операторов a_k^+ .

Пусть имеется новый набор базисных функций $|n\rangle$. Тогда

$$|n\rangle = \sum_k |k\rangle \langle k|n\rangle. \quad (4.44)$$

Это соотношение следует из полноты базиса и тождественного соотношения $1 \equiv \sum_k |k\rangle \langle k|$. Соответствующий набор операторов рождения дается следующими линейными комбинациями операторов a_k^+ :

$$a_n^+ = \sum_k a_k^+ \langle k|n\rangle. \quad (4.45)$$

Оператор a_n^+ рождает частицу в состоянии $|n\rangle$.

В частном случае, если ввести координатные волновые функции, являющиеся фурье-образом от плоских волн

$$|x\rangle = \sum_k e^{-ikx} |k\rangle, \quad (4.46)$$

то соответствующие операторы рождения

$$a^+(x) \equiv \Psi^+(x) = \sum_k e^{-ikx} a_k^+ \quad (4.47)$$

рождают частицу в пространственной точке x (их называют **полевыми операторами** – операторами поля частиц).

4.3.2. Двухчастичный и многочастичный базис. Коммутационные соотношения

Рассмотрим теперь полный набор состояний двух частиц. В обычном (шредингеровском) представлении можно взять, например, произведение плоских волн

$$|k', k''\rangle = e^{ik'x} e^{ik''x}, \quad (4.48)$$

но такой выбор неоднозначен – заданным значениям векторов k', k'' соответствуют два **разных** состояния: в одном первая

частица имеет импульс k' , а вторая – k'' , в другом – наоборот. Положим, что частицы **неразличимы**, т.е. осуществляется только **одно** физическое состояние, а именно состояние, в котором одна частица обладает волновым вектором k' , а другая – волновым вектором k'' . Получается, что в шредингеровском представлении такое вырождение по симметрии мы должны учесть, хотя никакой дополнительной физической информации этот факт не вносит в задачу.

Посмотрим, как записать это состояние в формализме вторичного квантования:

$$|k', k''\rangle \rightarrow a_k^+ a_{k''}^+ |0\rangle. \quad (4.49)$$

В результате действия двух операторов рождения на вакуумное состояние рождаются две частицы, одна частица с волновым вектором k' , а другая – с волновым вектором k'' . Очень важно, что номера частиц при этом не вводятся, однако следует помнить, что одно и то же вторично квантованное двухчастичное состояние можно записать двумя способами. Так, для заданных векторов k' , k'' можно записать еще одно состояние

$$|k'', k'\rangle \rightarrow a_{k''}^+ a_k^+ |0\rangle. \quad (4.50)$$

Это **то же самое** физическое состояние, поэтому отличаться эти функции могут только множителем, т.е.

$$a_{k''}^+ a_k^+ = F a_k^+ a_{k''}^+, \quad (4.51)$$

$$a_k^+ a_{k''}^+ = \frac{1}{F} a_{k''}^+ a_k^+.$$

Последние соотношения (коммутационные) должны выполняться в любом базисе и должны быть инвариантными относительно переходов от одного базиса к другому. Ясно, что множитель F не должен зависеть от k' , k'' и их взаимного расположения в коммутационном соотношении. Единственные числа, которые удовлетворяют этим условиям, это $F = \pm 1$. Таким образом, возможны только два вида коммутационных соотношений:

$$a_k^+ a_{k''}^+ = + a_{k''}^+ a_k^+, \quad (4.52)$$

или

$$a_k^+ a_{k'}^+ = -a_{k'}^+ a_k^+. \quad (4.53)$$

Итак, возможна либо коммутация, либо антикоммутация операторов рождения. Частицы, операторы которых коммутируют, называются **бозонами**, частицы с антикоммутационными соотношениями – **фермионами**. Фермионами являются электроны, протоны и нейтроны, слагающие атомы, а бозонами являются, например, фотоны – кванты света, фононы – кванты звуковых колебаний, нейтральные атомы гелия и др. **Все элементарные частицы разделены на эти два основных класса.**

Проанализируем важнейшие свойства квантовых систем, обладающих бозе- или ферми-симметрией. Пока речь не идет о термодинамике, обсуждаются лишь квантовые состояния систем.

Посмотрим, что произойдет, если волновые вектора совпадают: $k' = k''$. Для случая бозонов получаем тривиальное тождество, а для фермионов находим

$$a_k^+ a_k^+ = -a_k^+ a_k^+ \equiv 0. \quad (4.54)$$

Получаем важнейшее свойство фермионов – в одном и том же квантовом состоянии два фермиона находиться не могут – знаменитый **принцип** (или запрет) **Паули**.

Еще одно свойство – связь между коммутацией (перестановкой) операторов рождения и перестановкой частиц. Рассмотрим движение двух частиц в системе их центра масс. Тогда соотношения коммутации примут следующий вид

$$a_{k+q}^+ a_{k-q}^+ = \pm a_{k-q}^+ a_{k+q}^+, \quad (4.55)$$

причем $2K$ – импульс центра масс, $2q$ – импульс относительного движения.

Пусть центр масс движется равномерно и описывается плоской волной, а нас интересует функция относительного движения. Тогда волновая функция двух частиц представима в виде $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi(\vec{r}, \vec{K}) = \Phi(\vec{K})\varphi(\vec{r}) = e^{2i\vec{K}\vec{r}} \sum_q g(q)\varphi_{\vec{K}}(q)$, где \vec{r}, \vec{K} – радиусы-векторы относительного движения и движения центра масс;

функция $\Phi(\vec{K})$ отвечает за движение системы как целого, а $\varphi(\vec{r})$ – за внутренние степени свободы. Последнюю функцию разложим в ряд Фурье, компоненты которого представимы в числах заполнения: $\varphi_{\vec{K}}(\vec{q}) = a_{\vec{K}+\vec{q}}^+ a_{\vec{K}-\vec{q}}^+ |0\rangle$. Учтем уравнения коммутации:

$$\sum_q g(q) a_{\vec{K}+\vec{q}}^+ a_{\vec{K}-\vec{q}}^+ |0\rangle = \pm \sum_q g(q) a_{\vec{K}-\vec{q}}^+ a_{\vec{K}+\vec{q}}^+ |0\rangle = \pm \sum_q g(-q) a_{\vec{K}+\vec{q}}^+ a_{\vec{K}-\vec{q}}^+ |0\rangle. \quad (4.56)$$

Здесь $g(q)$ – коэффициенты Фурье. Последнее соотношение получается заменой $q \rightarrow -q$ под знаком суммы. Видно, что функции $g(q)$ должны быть **четными** для бозонов и **нечетными** для фермионов (для простоты мы пренебрегли здесь учетом других степеней свободы, например спинов частиц, что, однако, не изменит общности результатов).

Четность функций $g(q)$ напрямую связана со значением орбитального момента количества движения, так что орбитальный момент количества движения должен быть четным для бозонов и нечетным для фермионов. Но процедура изменения знака импульса относительного движения эквивалентна процедуре перестановки между собой частиц. Более того, функции $g(q)$ – это шредингеровские волновые функции относительного движения, только в импульсном представлении. Поэтому отсюда следует, что бозонная волновая функция должна быть **симметричной** относительно перестановки частиц, а фермионная – **антисимметричной**.

Эрмитово сопряженная двухчастичная волновая функция (бравектор) вводится следующим очевидным образом:

$$\langle k', k'' | \rightarrow \langle 0 | a_{k''} a_{k'}. \quad (4.57)$$

Нормировка этой волновой функции

$$\langle 0 | a_{k''} a_{k'} a_{k'}^+ a_{k''}^+ | 0 \rangle = N_{k'k''} \quad (4.58)$$

должна быть выбрана из соображений удобства. Более общее соотношение ортонормированности имеет следующий вид:

$$\langle 0 | a_{k''} a_{k'} a_{k'}^+ a_{k''}^+ | 0 \rangle = N_{k'k''} \delta_{k''k'}. \quad (4.59)$$

Последнее соотношение можно представить как скалярное произведение сопряженного одночастичного состояния $\langle 0|a_{k''}$ и состояния, полученного действием двух операторов рождения и одного оператора уничтожения на вакуумную функцию (в результате чего также получается одночастичное состояние). Тогда последнее соотношение – это просто условие ортонормированности этих двух одночастичных состояний. Следовательно, состояние, полученное действием двух операторов рождения и одного оператора уничтожения, может быть записано в следующем виде:

$$a_k a_k^+ a_{k''}^+ |0\rangle = N_{kk''} a_{k''}^+ |0\rangle, \quad (4.60)$$

так как только в этом случае справедливо предыдущее соотношение ортогональности.

Таким образом, оператор уничтожения a_k можно рассматривать либо как оператор рождения, действующий на левый вакуумный вектор, либо как оператор уничтожения, действующий на правый вакуумный вектор. При действии на левый вакуумный вектор этот оператор увеличивает полное число частиц в системе на единицу, при действии на правый вакуумный вектор он уменьшает это число на единицу. Отсюда следует, что действие этого оператора на правое вакуумное состояние должно давать нуль, так как нельзя уменьшить число частиц в состоянии, где их нет:

$$a_k |0\rangle = 0. \quad (4.61)$$

Добавим для дальнейшего рассмотрения условие ортонормированности одночастичных состояний

$$a_k a_{k''}^+ |0\rangle = \delta_{kk''} |0\rangle. \quad (4.62)$$

Рассмотрим теперь коммутационные соотношения. Для операторов рождения мы уже их имеем. Применяя к (4.54) операцию комплексного сопряжения, находим коммутационные соотношения для операторов уничтожения:

$$\begin{aligned} a_{k''} a_k &= +a_k a_{k''} \quad (\text{бозоны}); \\ a_{k''} a_k &= -a_k a_{k''} \quad (\text{фермионы}). \end{aligned} \quad (4.63)$$

Наиболее интересны коммутационные соотношения между одним оператором уничтожения и одним оператором рождения. Из предыдущих соотношений получаем:

$$\begin{aligned} (a_k a_{k'}^+ - a_{k'}^+ a_k) |0\rangle &= \delta_{kk'} \text{ (бозоны);} \\ (a_k a_{k'}^+ + a_{k'}^+ a_k) |0\rangle &= \delta_{kk'} \text{ (фермионы).} \end{aligned} \quad (4.64)$$

Из этих формул пока нельзя написать общие коммутационные соотношения, так как они должны быть одинаковы при действии не только на вакуумную функцию, но и на произвольное состояние. Рассмотрим действие коммутационных соотношений на одночастичное состояние:

$$\begin{aligned} (a_k a_{k'}^+ \mp a_{k'}^+ a_k) a_k^+ |0\rangle &= (\pm a_k a_k^+ a_{k'}^+ \mp a_{k'}^+) |0\rangle = \\ &= \pm (N_{kk'} - 1) a_k^+ |0\rangle, \end{aligned} \quad (4.65)$$

верхний знак соответствует бозонам, нижний – фермионам. Для того, чтобы коммутационные соотношения и для этого одночастичного состояния, и для предыдущего вакуумного были одинаковы и не зависели от квантовых чисел, следует положить $N_{kk'} = 1 \pm \delta_{kk'}$. Тогда при разных импульсах $N_{kk'} = 1$, а при одинаковых квантовых числах получаем $N_{kk'} = 2$ для бозонов и $N_{kk'} = 0$ для фермионов. Физически для фермионов это и означает запрет Паули – они не могут занимать одно и то же квантовое состояние. Для бозонов, наоборот, увеличение константы приводит к тому, что они будут стремиться занять одно квантовое состояние.

Окончательно правила коммутации и антикоммутации для бозонных и фермионных операторов принимают вид:

$$\begin{aligned} a_k^+ a_{k'}^+ \mp a_{k'}^+ a_k^+ &= 0; \\ a_k a_{k'} \mp a_{k'} a_k &= 0; \\ a_k a_{k'}^+ \mp a_{k'}^+ a_k &= \delta_{kk'}. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Верхний знак соответствует бозонам, нижний – фермионам.

Состояния системы с тремя и более тождественными частицами получаются в результате действия соответствующего числа операторов рождения на вакуумное состояние. **Все свойства** этих состояний вытекают из коммутационных соотношений (4.66), которые остаются для них справедливыми.

В завершение раздела отметим еще одно полезное свойство, справедливое для бозонов и необходимое в дальнейшем:

$$\begin{aligned}
 \langle 0 | a_k a_k a_k^+ a_k^+ | 0 \rangle &= 2 \langle 0 | a_k a_k^+ | 0 \rangle = 2; \\
 \langle 0 | a_k a_k a_k a_k^+ a_k^+ a_k^+ | 0 \rangle &= \langle 0 | a_k a_k (1 + a_k^+ a_k) a_k^+ a_k^+ | 0 \rangle = \\
 &= \langle 0 | a_k a_k a_k^+ a_k^+ | 0 \rangle + \langle 0 | a_k a_k a_k^+ a_k a_k^+ a_k^+ | 0 \rangle = \\
 &= 2 + 2 \langle 0 | a_k a_k a_k^+ a_k^+ | 0 \rangle = 6; \\
 &\dots \\
 \langle 0 | (a_k)^n (a_k^+)^n | 0 \rangle &= n!
 \end{aligned} \tag{4.67}$$

Отсюда следует, что нормированная волновая функция состояния с n бозонами будет выглядеть так:

$$(n!)^{-1/2} (a_k^+)^n | 0 \rangle. \tag{4.68}$$

Эти формулы полностью совпадают с аналогичными выражениями для гармонического осциллятора, рассмотренными ранее. Эти соотношения позволят в дальнейшем правильно описать действие бозевских операторов рождения и уничтожения на волновые функции.

Для случая фермионов таких факториальных множителей не возникает, так как в любом квантовом состоянии находится не более одной частицы.

Для дальнейшего рассмотрения представления чисел заполнения не хватает правил записи операторов физических величин через операторы рождения и уничтожения, этот вопрос будет обсуждаться перед рассмотрением конкретных физических моделей. Сейчас более подробно коснемся вопросов о базисе в представлении чисел заполнения и о действиях операторов на волновые функции этого базиса в случае статистики Ферми.

4.3.3. Базис в представлении чисел заполнения. Действие операторов на волновые функции из этого базиса в случае статистики Ферми

Рассмотрим систему частиц с ферми-статистикой, т.е. будем полагать, что на одном узле пространственной решетки может быть не более одной частицы (принцип Паули). Пока не будем обсуждать проблему частиц со спином, так как это несколько усложняет рассмотрение, не меняя его принципиально.

Для сильнокоррелированных систем, какими являются вещества с узкими зонами (в этих веществах велика степень локализации электрона около ионного остова), можно ввести хорошее квантовое число – заполнение на узлах кристаллической решетки. В дальнейшем будут рассмотрены модели именно таких систем.

Пусть, для определенности, имеется 3 частицы на 6 узлах, тогда узельный базис в числах заполнения следует выбрать таким:

$$\begin{aligned} \Phi_1 = |000111\rangle; \Phi_2 = |001011\rangle; \Phi_3 = |001101\rangle; \Phi_4 = |001110\rangle; \\ \Phi_5 = |010011\rangle; \Phi_6 = |010101\rangle; \Phi_7 = |010110\rangle; \Phi_8 = |011001\rangle; \\ \Phi_9 = |011010\rangle; \Phi_{10} = |011100\rangle; \Phi_{11} = |100011\rangle; \Phi_{12} = |100101\rangle; \\ \Phi_{13} = |100110\rangle; \Phi_{14} = |101001\rangle; \Phi_{15} = |101010\rangle; \Phi_{16} = |101100\rangle; \\ \Phi_{17} = |110001\rangle; \Phi_{18} = |110010\rangle; \Phi_{19} = |110100\rangle; \Phi_{20} = |111000\rangle. \end{aligned} \quad (4.69)$$

Заметим, что размерность базиса (его называют **фоковским**) равна числу сочетаний $C_6^3 = \frac{6!}{3!(6-3)!} = 20$, т.е. в базисе перебраны

все возможные конфигурации распределения частиц по узлам с **учетом тождественности частиц**. Процедура построения **упорядоченного** базиса вида (4.69) будет обсуждаться далее; см. также гл. 2.

Проблема тождественности частиц уже обсуждалась выше, однако здесь уместно вернуться к ней в контексте конкретной задачи. Пусть в системе имеются всего две частицы, тогда состояния системы, получающиеся друг из друга перестановкой обеих частиц,

должны быть физически полностью эквивалентны, из чего следует, что $|\Psi(1,2)|^2 = |\Psi(2,1)|^2$. Это значит, что в результате такой перестановки волновая функция системы может измениться только на фазовый множитель: $\Psi(1,2) = e^{i\alpha}\Psi(2,1)$, где α – некоторая вещественная постоянная. Повторная перестановка с необходимостью приводит к условию $e^{2i\alpha} = 1$, т.е. $\Psi(1,2) = \pm\Psi(2,1)$. Существует, таким образом, всего две возможности: волновая функция либо симметрична (это статистика Бозе – Эйнштейна), либо антисимметрична (это статистика Ферми – Дирака) при перестановке любой пары частиц. Этот же результат был получен ранее напрямую при изучении двухчастичного состояния в формализме вторичного квантования.

Таким образом, в нашей конкретной задаче из всех функций, отличающихся друг от друга только перестановкой частиц, т.е. фазовым множителем (например, $\Phi(4,6,5)$, $\Phi(5,4,6)$, $\Phi(5,6,4)$, $\Phi(6,4,5)$, $\Phi(6,5,4)$, $\Phi(4,5,6)$), в фоковском базисе нужно оставить только одну функцию, например функцию $\Phi(4,5,6) = |000111\rangle$, а все остальные не рассматривать. Разумеется, если частица всего одна (как в одночастичной задаче во внешнем поле), то проблем с тождественностью и симметрией нет, но тогда и нет смысла вводить формализм вторичного квантования.

Получившиеся узельные многочастичные функции являются ортонормированными, при этом понимается, **что скалярное произведение двух функций равно нулю, если состояние хотя бы одного узла в одной функции отличается от аналогичного состояния другой функции.**

После формирования фоковского базиса необходимо определить правила действия операторов физических величин на базисные волновые функции с учетом принципа тождественности. Для этой цели и служат рассмотренные ранее операторы рождения и уничтожения числа частиц a_i и a_i^+ (только теперь состояния определяются не числом частиц с импульсом k , а числом частиц на узле i) по следующим правилам:

$$\begin{aligned}
 a_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle &= \begin{cases} |n_1 n_2 \dots 0 \dots\rangle, & \text{если } n_i = 1, \\ 0, & \text{если } n_i = 0; \end{cases} \\
 a_i^+ |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle &= \begin{cases} |n_1 n_2 \dots 1 \dots\rangle, & \text{если } n_i = 0, \\ 0, & \text{если } n_i = 1. \end{cases}
 \end{aligned}
 \tag{4.70}$$

Таким образом, оператор уничтожения a_i переводит состояние «1» узла i в состояние «0», а оператор рождения a_i^+ – наоборот. При этом если на узле i уже было состояние «0», т.е. частиц на этом узле не было и уничтожить нечего, то при действии оператора a_i на это состояние получаем нуль, т.е. такой волновой функции не существует. Аналогично, если на узле i было максимальное заполнение, т.е. $n_i = 1$, то действие оператора рождения a_i^+ также даст нуль.

Кроме указанных правил действия на волновые функции операторов рождения и уничтожения, необходимо также учесть антисимметрию волновых функций системы из ферми-частиц.

Пронумеруем узлы системы по порядку. Как уже говорилось, любую базисную функцию можно получить при помощи последовательного действия операторов рождения на вакуумную функцию $|000\dots 00\rangle$, например:

$$\begin{aligned}
 |001000\rangle &= a_3^+ |000000\rangle; \\
 |010001\rangle &= a_2^+ a_6^+ |000000\rangle; \\
 |101010\rangle &= a_1^+ a_3^+ a_5^+ |000000\rangle.
 \end{aligned}
 \tag{4.71}$$

При этом необходимо выписывать операторы рождения **строго по порядку номеров** и действовать ими последовательно на функцию, начиная справа.

Теперь, действуя на антисимметричные волновые функции операторами рождения и уничтожения, учтем упорядочение операторов, например:

$$\begin{aligned}
a_4^+|001000\rangle &= a_4^+a_3^+|000000\rangle = -a_3^+a_4^+|000000\rangle = -|001100\rangle; \\
a_3^+|101010\rangle &= a_3^+a_1^+a_3^+a_5^+|000000\rangle = -a_1^+a_3^+a_3^+a_5^+|000000\rangle \quad (4.72) \\
a_3|101010\rangle &= a_3a_1^+a_3^+a_5^+|000000\rangle = -a_1^+a_3a_3^+a_5^+|000000\rangle = -|100010\rangle.
\end{aligned}$$

Согласно показанным выше примерам, необходимо оператор, действующий на функцию, перемещать, попарно обменивая его с другими операторами с изменением знака при каждом обмене, пока он не займет нужное место в соответствии с упорядочением по номерам узлов. Обращаем внимание на последний из трех примеров – когда оператор уничтожения "добрался" до своего места (узла 3), там уже был оператор рождения. Тогда, согласно правилам действия операторов, сначала оператор рождения увеличит на единицу заполнение узла, а затем оператор уничтожения вернет узел к исходному состоянию. Таким образом, после упорядочения операторов следует последовательно действовать операторами на волновую функцию, начиная от самого правого оператора.

Формально все перечисленные примеры можно суммировать с помощью антикоммутиционных соотношений:

$$\begin{aligned}
a_i a_j^+ + a_j^+ a_i &= \delta_{ij}; \\
a_i^+ a_j^+ + a_j^+ a_i^+ &= 0; \\
a_i a_j + a_j a_i &= 0.
\end{aligned} \quad (4.73)$$

Эти соотношения надо понимать именно в смысле действия их на волновые функции, например:

$$a_i^+ a_j^+ |0101\dots\rangle + a_j^+ a_i^+ |0101\dots\rangle = 0. \quad (4.74)$$

Приведенные антикоммутиционные соотношения полностью совпадают с выведенными ранее соотношениями для ферми-операторов в импульсном базисе, так как относительно канонических преобразований при переходе от одного базиса к другому они инвариантны.

Особо следует отметить оператор $n_i = a_i^+ a_i$, который действует на волновые функции следующим образом (рассмотрим, например, волновую функцию $\Phi = |0101\dots\rangle$):

$$\begin{aligned} a_2^+ a_2 \Phi &= a_2^+ a_2 |0101\dots\rangle = 1 \cdot a_2^+ |0001\dots\rangle = 1 \cdot |0101\dots\rangle = \\ &= |0101\dots\rangle = 1 \cdot \Phi = \Phi; \\ a_3^+ a_3 \Phi &= a_3^+ a_3 |0101\dots\rangle = (1 - a_3 a_3^+) |0101\dots\rangle = (1 - 1) |0101\dots\rangle = \\ &= 0 |0101\dots\rangle = 0 \cdot \Phi \equiv 0. \end{aligned} \quad (4.75)$$

Таким образом, собственные числа оператора $n_i = a_i^+ a_i$ совпадают с числом частиц на узле i . Оператор n_i называется **оператором числа частиц**.

Если мы имеем в системе электроны со спином, то для каждой проекции спина справедливы перечисленные выше правила, и волновые функции базиса будут иметь следующий составной вид:

$$\begin{aligned} |001000, 000100\rangle &= a_{3\uparrow}^+ a_{4\downarrow}^+ |000000, 000000\rangle; \\ |101010, 100100\rangle &= a_{1\uparrow}^+ a_{3\uparrow}^+ a_{5\uparrow}^+ a_{1\downarrow}^+ a_{4\downarrow}^+ |000000, 000000\rangle. \end{aligned} \quad (4.76)$$

Обычно группируют сначала все числа заполнения с одним спином, затем с другим, и потом в процессе расчета придерживаются этого упорядочения. Теперь для каждого оператора рождения и уничтожения имеется пара квантовых чисел – номер узла и проекция спина σ . Соотношения антикоммутиации имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} a_{i\sigma} a_{j\sigma'}^+ + a_{j\sigma'}^+ a_{i\sigma} &= \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}, \\ a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma'}^+ + a_{j\sigma'}^+ a_{i\sigma}^+ &= 0, \\ a_{i\sigma} a_{j\sigma'} + a_{j\sigma'} a_{i\sigma} &= 0. \end{aligned} \quad (4.77)$$

Легко видеть, что если в системе N_a узлов, $N\uparrow$ электронов со спином вверх и $N\downarrow$ электронов со спином вниз, то размерность базиса будет $R = C_{N_a}^{N\uparrow} C_{N_a}^{N\downarrow}$.

Всего сказанного выше достаточно для численной формализации квантовых задач, особенности бозе-статистики и спиновых операторов будут обсуждаться ниже при рассмотрении соответствующих моделей.

Прежде чем рассмотреть конкретные модели физики конденсированных сред, обсудим, как можно переписать операторы физических величин в представлении чисел заполнения.

4.3.4. Операторы физических величин

Рассмотрим сначала операторы, действующие на **одночастичные** состояния (например, оператор импульса, оператор числа частиц и т.п.). Пусть известно, как действует некоторый линейный оператор A на одночастичные волновые функции $|k\rangle$ в шредингеровском представлении. Такой оператор полностью определяется своей матрицей или совокупностью матричных элементов в полном базисе одночастичных состояний. Тогда на произвольный вектор $|\xi\rangle$ оператор A действует следующим образом:

$$\begin{aligned} A|\xi\rangle &= \sum_{k'} A|k'\rangle\langle k'|\xi\rangle = \sum_{k',k''} |k''\rangle\langle k''|A|k'\rangle\langle k'|\xi\rangle = \\ &= \sum_{k',k''} |k''\rangle A_{k''k'}\langle k'|\xi\rangle. \end{aligned} \quad (4.78)$$

В (4.78) результат действия оператора A на вектор $|\xi\rangle$ выражен через известные матричные элементы $A_{k''k'}$.

Представим состояние $|\xi\rangle$ через операторы вторичного квантования:

$$|\xi\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k|\xi\rangle = \sum_k \langle k|\xi\rangle a_k^+ |0\rangle, \quad (4.79)$$

тогда

$$A|\xi\rangle = \sum_{k,k''} \langle k''|A|k'\rangle\langle k'|\xi\rangle a_{k''}^+ |0\rangle. \quad (4.80)$$

Воспользовавшись соотношением $a_k \cdot a_{k''}^+ |0\rangle = \delta_{k'k''} |0\rangle$, получаем:

$$A|\xi\rangle = \sum_{k''} \langle k'' | A | k' \rangle (a_k^+ \cdot a_{k''}) \sum_k \langle k' | \xi \rangle a_k^+ |0\rangle. \quad (4.81)$$

Заметим, что вторая сумма в (4.81) – исходная функция $|\xi\rangle$. Следовательно, оператор A в формализме вторичного квантования имеет вид

$$A = \sum_{k''} \langle k'' | A | k' \rangle a_k^+ \cdot a_{k''}. \quad (4.82)$$

Это соотношение показывает, что оператор A является суммой операторов, каждый из которых уничтожает частицу в состоянии k' и рождает в состоянии k'' с амплитудой, пропорциональной соответствующему матричному элементу оператора между одночастичными состояниями $\langle k'' | A | k' \rangle$.

Сумму (4.82) часто представляют в виде **диаграмм Фейнмана** (рис. 4.2).

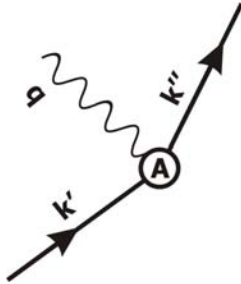


Рис. 4.2. Фейнмановская диаграмма для (4.82). Под действием оператора A частица из состояния k' переходит в состояние k'' . $q = k'' - k'$

Если рассматриваются **многочастичные состояния** (две и более частицы), то справедливость последнего соотношения также можно показать, только теперь матричный элемент вычисляется между соответствующими одночастичными состояниями **многочастичных функций**.

Рассмотрим далее конкретные примеры одночастичных операторов.

Например, оператор импульса $p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ имеет в представлении вторичного квантования следующий вид:

$$\begin{aligned}
 p &= \sum_{kk''} \langle k' | \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} | k'' \rangle a_{k''}^+ a_{k'} = \sum_{kk''} \left[\frac{\hbar}{i} \int dx e^{-ik'x} (ik'') e^{ik''x} \right] a_{k''}^+ a_{k'} = \\
 &= \sum_{kk''} (\hbar k' \delta_{kk''}) a_{k''}^+ a_{k'} = \hbar \sum_k k a_k^+ a_k.
 \end{aligned} \tag{4.83}$$

Получаем одинарную сумму, так как оператор импульса в базисе плоских волн диагонален. Аналогично, оператор кинетической энергии имеет вид

$$K = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k k^2 a_k^+ a_k; \tag{4.84}$$

оператор числа частиц –

$$N = \sum_k a_k^+ a_k. \tag{4.85}$$

В случае наличия внешнего поля, например в ситуации, когда заряженная частица находится во внешнем статическом кулоновском поле $V = \frac{e^2}{r}$, имеем

$$\begin{aligned}
 \frac{e^2}{r} &= \sum_{kk''} \langle k' | \frac{e^2}{r} | k'' \rangle a_{k''}^+ a_{k'} = \\
 &= e^2 \sum_{kk''} \left(\int d^3r_1 e^{-ik'r_1} \frac{1}{|r-r_1|} e^{ik''r_1} \right) a_{k''}^+ a_{k'}.
 \end{aligned} \tag{4.86}$$

Здесь уже будут присутствовать недиагональные слагаемые, описывающие изменение состояния частицы при взаимодействии с внешним полем.

Для расчета матричного элемента можно представить кулоновский потенциал в виде

$$\frac{e^2}{r} = \frac{1}{\Omega} \int \frac{4\pi e^2}{q^2} e^{iqr} d^3q. \tag{4.87}$$

Тогда находим:

$$\begin{aligned}
 \langle k' | \frac{e^2}{r} | k'' \rangle &= 4\pi e^2 \int d^3 r_1 d^3 q e^{iq(r-r_1)} \frac{1}{q^2} \frac{1}{\Omega} e^{i(k'-k'')r_1} = \\
 &= 4\pi e^2 \int d^3 q e^{iqr} \frac{1}{q^2} \frac{1}{\Omega} \int d^3 r_1 e^{i(k'-k''-q)r_1} = \\
 &= 4\pi e^2 \int d^3 q e^{iqr} \frac{1}{q^2} \delta_{k'-k'',q} \equiv \left(\int d^3 q \equiv \sum_q \right) \equiv \sum_q V(q) e^{iqr} \delta_{k'-k'',q}.
 \end{aligned} \tag{4.88}$$

Здесь $V(q)$ – фурье-компонента кулоновского потенциала

$V_c = \frac{4\pi e^2}{q^2}$. Если кулоновский центр находится в начале координат,

имеем:

$$\frac{e^2}{r} = \sum_{kq} V(q) a_k^+ a_{k+q}. \tag{4.89}$$

Рассмотрим теперь операторы, которые действуют на состояния двухчастичной системы и могут изменять состояния сразу двух частиц. В шредингеровском представлении такие операторы задаются набором матричных элементов следующего вида:

$$\langle k_4 k_3 | B | k_2 k_1 \rangle. \tag{4.90}$$

Совершенно аналогично случаю с одной частицей, получаем вид двухчастичного оператора в формализме вторичного квантования:

$$B = \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \langle k_4 k_3 | B | k_2 k_1 \rangle a_{k_4}^+ a_{k_3}^+ a_{k_2} a_{k_1}. \tag{4.91}$$

Соотношение (4.91) строго доказывается, доказательство см., например, в [1].

Каждый член в сумме описывает уничтожение двух частиц в состояниях k_1 и k_2 и рождение двух частиц в состояниях k_3 и k_4 , т.е. фактически каждое слагаемое описывает изменение состояния пары частиц. Фейнмановская диаграмма, описывающая этот процесс, показана на рис. 4.3.

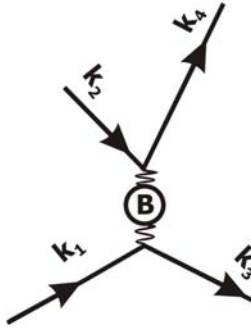


Рис. 4.3. Фейнмановская диаграмма для (4.91).

Под действием оператора B частица в состоянии k_1 переходит в состояние k_3 , а частица в состоянии k_2 – в состояние k_4

Рассмотрим в качестве примера межчастичное кулоновское взаимодействие $V = \frac{e^2}{r_{12}}$. Матричный элемент в базисе плоских волн имеет следующий вид:

$$\langle k_4 k_3 | V | k_2 k_1 \rangle = \int e^{-ik_4 r_1 - ik_3 r_2} \frac{e^2}{r} e^{ik_2 r_2 + ik_1 r_1} d^3 r_1 d^3 r_2. \quad (4.92)$$

Раскладывая взаимодействие в ряд Фурье аналогично одночастичному случаю, имеем (рис. 4.4):

$$\begin{aligned} \langle k_4 k_3 | V | k_2 k_1 \rangle &= \int d^3 q V(q) \int e^{i(k_1 - k_4 + q)r_1} d^3 r_1 e^{i(k_2 - k_3 - q)r_2} d^3 r_2 = \\ &= \sum_q V(q) \delta_{k_4 - k_1, q} \delta_{k_2 - k_3, -q}. \end{aligned} \quad (4.93)$$

Окончательно находим:

$$\frac{e^2}{r_{12}} = \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 q} V(q) a_{k_1 + q}^+ a_{k_2 - q}^+ a_{k_2} a_{k_1}. \quad (4.94)$$

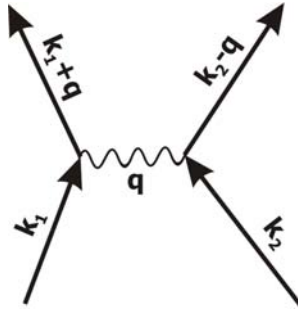


Рис. 4.4. Фейнмановская диаграмма для (4.94).

Выполняется закон сохранения импульса: одна частица отдает импульс q через виртуальный фотон, а другая – получает

4.4. Полевые операторы и вторичное квантование

Есть несколько другой способ получения представления операторов физических величин через операторы рождения и уничтожения. Пусть в некотором объеме находятся частицы, число которых невелико; пока не будем учитывать взаимодействие между частицами, так что каждую из них можно описывать одной и той же одночастичной волновой функцией $\Psi(r)$. Эта функция подчиняется уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi. \quad (4.95)$$

Плотность вероятности распределения частицы по координатам равна $|\Psi(r)|^2$. Оператор Лагранжа системы определяется как

$$L = \int d^3r \Psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \Psi, \quad (4.96)$$

при этом минимизация действия $\int dt L(t)$ приводит к уравнению Шредингера.

Введем обобщенные координаты Ψ и импульсы $P = \frac{\partial L}{\partial \Psi} = i\hbar\Psi^*$, и соотношения коммутации:

$$\begin{aligned} [\Psi(x), P(x')] &= \frac{\hbar}{i} \delta(x - x') \Rightarrow \\ \Rightarrow [\Psi(x), \Psi^+(x')] &= \delta(x - x'). \end{aligned} \quad (4.97)$$

Соотношение (4.97) определяет необходимую коммутацию (для случая ферми-частиц коммутатор превращается в антикоммутатор) величин Ψ, Ψ^+ . Это и есть **полевые операторы**, определяющие квантовое поле рассматриваемой системы. Можно разложить величины Ψ, Ψ^+ по полному набору функций одночастичного состояния в стандартном шредингеровском представлении $\phi_k(x)$, например, по плоским волнам:

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \sum_k a_k \phi_k(x); \\ \Psi^+(x) &= \sum_k a_k^+ \phi_k^*(x). \end{aligned} \quad (4.98)$$

Здесь a_k, a_k^+ – коэффициенты разложения, играющие роль операторов рождения и уничтожения соответствующих состояний k . Несложно показать, что они удовлетворяют стандартным соотношениям коммутации (или антикоммутации), введенным ранее для операторов в представлении чисел заполнения.

Получается, что с вводом квантовых чисел k вводится также дополнительное квантование исходной волновой функции. Отсюда и происходит название всего метода вторичного квантования.

Учтем теперь взаимодействие частиц. Любая физическая величина, соответствующая одночастичному оператору A , записывается в виде

$$A \rightarrow \int d^3r \Psi^+(r) \hat{A} \Psi(r), \quad (4.99)$$

с учетом (4.98) имеем:

$$A \rightarrow \sum_{kk'} \langle \phi_k | \hat{A} | \phi_{k'} \rangle a_k^+ a_{k'}, \quad (4.100)$$

что совпадает с ранее полученным результатом в представлении чисел заполнения.

Для двухчастичного оператора следует написать произведение плотностей вероятности под знаком суммирования по степеням свободы:

$$B \rightarrow \frac{1}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 B(r_1 - r_2) \Psi^+(r_1) \Psi(r_1) \Psi^+(r_2) \Psi(r_2). \quad (4.101)$$

Это соотношение также после подстановки разложения (4.98) приводит к правильному ответу:

$$B \rightarrow \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \langle \phi_{k_4} \phi_{k_3} | \hat{B} | \phi_{k_2} \phi_{k_1} \rangle a_{k_4}^+ a_{k_3}^+ a_{k_2} a_{k_1}. \quad (4.102)$$

5. Модели сильнокоррелированных систем. Статистика Ферми

5.1. Модель сильной связи

В твердом теле электрон ведет себя как квазичастица: в отсутствие примесей он не рассеивается на кристаллической решетке, имеет определенный квазиимпульс (не являющийся собственным числом оператора импульса), закон дисперсии, отличный от закона дисперсии свободной частицы ($\varepsilon_q \neq \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$) и, соответственно, не имеет определенной координаты («размазан» по кристаллу).

Волновая функция электрона в кристалле все же имеет максимумы вблизи ионного остова и близка к атомной волновой функции локализованного на соответствующей орбитали электрона. Вдали от иона волновая функция электрона асимптотически переходит в плоскую волну, соответствующую свободному движению. Такие функции $\phi(r)$ называются **функциями Ванье** [4].

Рассмотрим идеальный, без дефектов и примесей, кристалл в приближении сильной связи. Пусть сначала атомы решетки находятся на большом расстоянии друг от друга, и электроны полностью локализованы каждый на своем узле. Будем учитывать только валентные электроны на верхних орбиталях, и рассмотрим простой уровень с двумя электронами, один электрон со спином вверх и другой – со спином вниз. Затем попытаемся "построить" из уединенных ионов кристалл, приближая их друг к другу. При достаточно близком расстоянии (обычно это расстояние порядка боровского радиуса $a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$ – радиуса орбиты электрона вокруг ядра атома водорода), атомы начинают взаимодействовать и образуют кристаллическую решетку, как правило, за счет перекрытия электронных орбиталей и образования связей различного вида: ионной, ковалентной, молекулярной,

металлической и т.д. Нас будет интересовать, в первую очередь, то, что происходит при этом с электронными состояниями, прежде локализованными у своих атомов, так как на расстоянии порядка боровского радиуса электроны начинают чувствовать соседние атомы и слабо туннелировать от одного атома к другому (обычно это ближайший сосед) с вероятностью $t(|r_i - r_j|) = t_{ij}$ (r_i, r_j – координаты атомов). Волновая функция таких слабо делокализованных электронов имеет все еще хорошо выраженный максимум в местах положения узлов решетки (рис. 5.1), поэтому хорошим квантовым числом в приближении сильной связи электрона с узлом является номер узла i .

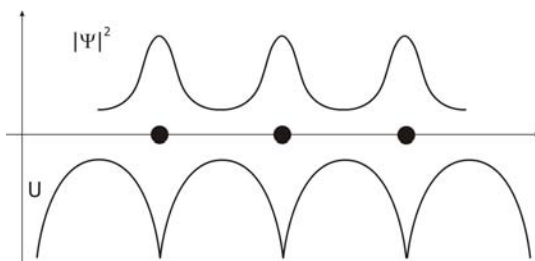


Рис. 5.1. Атомы кристаллической решетки создают периодический потенциал U ; волновая функция имеет хорошо выраженные максимумы вблизи узлов решетки

Если ввести операторы рождения $a_{i\sigma}^+$ и уничтожения $a_{i\sigma}$ электрона со спином σ на узле i (удовлетворяющие фермиевским коммутационным соотношениям $a_{i\sigma} a_{i\sigma}^+ + a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} = \delta_{i\sigma\sigma'}$) как коэффициенты разложения в шредингеровской волновой функции,

$$\Psi_{\sigma}(r) = \sum_{i\sigma} a_{i\sigma} \phi_i(r),$$

$$\Psi_{\sigma}^+(r) = \sum_{i\sigma} a_{i\sigma}^+ \phi_i^*(r),$$
(5.1)

то они означают именно "рождение" или "уничтожение" электронов в состояниях ϕ_i – полном наборе узельных одночастичных функций электрона – функциях Ванье, совпадающих, как уже отмечалось, с локализованными функциями электрона на орбитали атома вблизи атома, и с плоскими волнами вдали от него. Функции ϕ_i образуют полный ортонормированный базис, на основе которого можно

провести процедуру вторичного квантования, аналогично тому, как ранее для этой цели был использован базис плоских волн.

Гамильтониан системы, выраженный через операторы рождения и уничтожения, запишется следующим образом:

$$H = \sum_{i\sigma} \varepsilon_0 a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} + \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} . \quad (5.2)$$

Первое слагаемое (потенциальная энергия) описывает "затравочную" энергию электронов, локализованных на узлах с узельной энергией ε_0 , и представляет собой сумму операторов числа частиц $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$ с учетом проекции спина σ , умноженных на энергию электронного уровня ε_0 в атоме. Второй член гамильтониана (кинетическая энергия) описывает туннелирование (или перескоки) электронов на соседние узлы с амплитудой t_{ij} и сохранением проекции спина (рис. 5.2). Эта амплитуда, согласно формализму вторичного квантования, является матричным элементом оператора кинетической энергии:

$$t_{ij} = \langle \phi_i | \frac{p^2}{2m} | \phi_j \rangle . \quad (5.3)$$

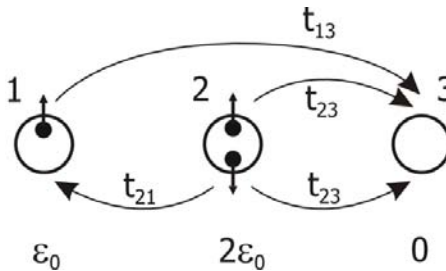


Рис. 5.2. Матричные элементы потенциальной и кинетической энергий для гамильтониана (5.2) в случае системы из 3 узлов и 3 электронов

Следует отметить, что функции ϕ_i экспоненциально затухают на больших расстояниях. Это означает, что амплитуда перескока фактически пропорциональна перекрытию волновых функций на соседних узлах решетки и зависит от координат следующим образом:

$$t_{ij} \sim e^{-\frac{|r_i - r_j|}{a_B}}, \quad (5.4)$$

a_B – характерный (боровский) радиус волновой функции электрона. Таким образом, в дальнейшем в большинстве случаев можно использовать приближение ближайших соседей и полагать, что электроны передвигаются только на соседние атомы.

5.2. Гамильтонова матрица и базис для модели сильной связи

Обсудим теперь вопрос, как для электронов в небольшом кластере, состоящем из 5-20 узлов кристаллической решетки, описываемых моделью сильной связи, построить **гамильтонову матрицу**. Для этого надо воспользоваться правилами действия операторов рождения и уничтожения на узельный базис.

Сначала определим процедуру формирования узельного базиса – фоковского пространства состояний. Вопрос перебора состояний – нетривиальный. Дело в том, что количество состояний в базисе очень быстро растет с размером системы¹, поэтому очень важным становится вопрос о поиске номера необходимого состояния при формировании гамильтоновой матрицы. Для этого требуется сразу формировать базис, **упорядоченный** по числам заполнения, в котором можно организовать эффективную процедуру поиска нужного состояния, например, методом деления отрезка пополам. Один из возможных алгоритмов формирования узельного базиса приведен в примере 5.1.

¹ Например, размерность базиса системы из $m = 20$ узлов, содержащей $N = 10$ частиц с бозе-статистикой, равна $R = C_{N+m-1}^N = \frac{(N+m-1)!}{N!(m-1)!} = \frac{29!}{10! 19!} = 20030010$, для ферми-частиц без учета спина размерность базиса будет $R = C_m^N = \frac{m!}{N!(m-N)!} = \frac{20!}{10! 10!} = 184756$.

Пример 5.1. Алгоритм формирования узельного базиса.

Пусть требуется сформировать два узельных базиса – один для системы из 6 узлов и 4 частиц с бозе-статистикой, а другой – для той же системы и частиц с ферми-статистикой без спина.

Первое состояние формируется размещением всех частиц на последнем узле: $\Phi_1 = |000004\rangle$. Далее каждое следующее состояние Φ_i получается из предыдущего Φ_{i-1} по следующему правилу (рис. 5.3).

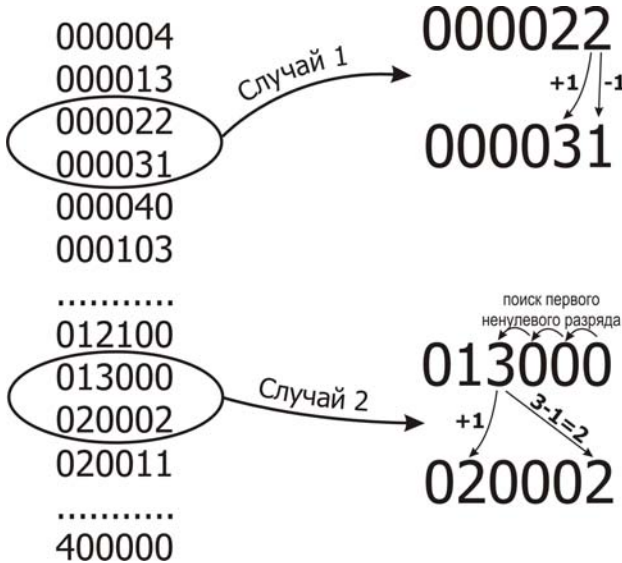


Рис. 5.3. Формирование узельного базиса для системы из 6 узлов и 4 бозе-частиц

Случай 1: на последнем узле находятся одна или более частиц. В этом случае на предпоследний узел добавляется одна частица, а с последнего узла убирается одна частица.

Случай 2: на последнем узле нет частиц. В этом случае производится поиск узла, ближайшего к последнему, на котором есть частицы. После этого на узел, расположенный слева от найденного, добавляется одна частица, а на последний узел помещаются все оставшиеся на найденном узле частицы. Таким образом, заполнение на найденном узле становится равным нулю.

Процедура реализуется до тех пор, пока на первом узле не окажутся все частицы. Полученный базис и будет узельным базисом для 4 бозе-частиц на 6 узлах, в нем

будет $C_{6+4-1}^4 = \frac{9!}{4! 5!} = 126$ состояний.

Узельный базис для ферми-частиц без спина получается из базиса для бозе-частиц исключением всех состояний, в которых на каком-либо узле есть заполнение больше единицы. В этом базисе будет $C_6^4 = \frac{6!}{4! 2!} = 15$ состояний:

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= |001111\rangle; \Phi_2 = |010111\rangle; \Phi_3 = |011011\rangle; \Phi_4 = |011101\rangle; \\ \Phi_5 &= |011110\rangle; \Phi_6 = |100111\rangle; \Phi_7 = |101011\rangle; \Phi_8 = |101101\rangle; \\ \Phi_9 &= |101110\rangle; \Phi_{10} = |110011\rangle; \Phi_{11} = |110101\rangle; \Phi_{12} = |110110\rangle; \\ \Phi_{13} &= |111001\rangle; \Phi_{14} = |111010\rangle; \Phi_{15} = |111100\rangle. \end{aligned}$$

Если представить базисные функции на рис. 5.3 как **числа**, то видно, что эти числа упорядочены в порядке возрастания: первым стоит наименьшее число (000004), далее идет (000013) и т.д. до последнего, наибольшего числа (400000). Это обстоятельство позволяет организовать простую и эффективную процедуру поиска нужной волновой функции в базисе (например, при помощи метода деления отрезка пополам). Если число узлов в системе велико, то процедура поиска может быть применена к каждому из разрядов в отдельности.

Важно отметить, что узлы в системе могут быть пронумерованы независимо от их пространственного расположения, система может иметь произвольную пространственную структуру. **Результаты расчета не зависят от того, в каком порядке пронумерованы узлы,** важно лишь не менять эту нумерацию в процессе расчета.

Следует отметить, что перед каждой базисной функцией можно поставить любой фазовый множитель, действительный или мнимый, это не изменит результатов расчета квантово-механических средних. В дальнейшем эти множители будут выбираться действительными для удобства расчета.

Рассмотрим отдельно формирование матричных элементов от каждого из слагаемых гамильтониана (5.2).

Слагаемое, описывающее потенциальную энергию электронов, локализованных на узлах,

$$H_0 = \sum_{i\sigma} \varepsilon_0 a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} = \varepsilon_0 \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}, \quad (5.5)$$

представляет сумму операторов числа частиц. Действие каждого из них не приводит к изменению волновой функции, а сводится лишь

к появлению перед волновой функцией множителя, совпадающего с числом частиц со спином σ на узле i :

$$\hat{n}_{i\sigma} | \dots n_{(i-1)\sigma} n_{i\sigma} n_{(i+1)\sigma} \dots \rangle = n_{i\sigma} | \dots n_{(i-1)\sigma} n_{i\sigma} n_{(i+1)\sigma} \dots \rangle. \quad (5.6)$$

Матричные элементы оператора H_0 , таким образом, имеют следующий вид:

$$\langle \Phi_m | H_0 | \Phi_p \rangle = \varepsilon_0 \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^{(p)} \delta_{mp}, \quad (5.7)$$

верхний индекс у числа заполнения подчеркивает, что оно относится к базисной функции с номером p : Φ_p .

Кинетическое слагаемое гамильтониана

$$H_k = \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \quad (5.8)$$

приводит к появлению в гамильтоновой матрице недиагональных слагаемых. Рассмотрим действие оператора $a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}$ на произвольную базисную функцию $\Phi = | \dots n_{i\sigma} \dots n_{j\sigma} \dots \rangle$ (пусть, для определенности, $i < j$).

Согласно (4.72), имеем:

$$a_{j\sigma} | \dots n_{i\sigma} \dots n_{j\sigma} \dots \rangle = \begin{cases} 0, \text{ если } n_{j\sigma} = 0; \\ (-1)^{\sum_{k < j, \sigma} n_{k\sigma}} | \dots n_{i\sigma} \dots (n_{j\sigma} - 1) \dots \rangle, \text{ если } n_{j\sigma} \neq 0. \end{cases} \quad (5.9)$$

Далее,

$$a_{i\sigma}^+ | \dots n_{i\sigma} \dots (n_{j\sigma} - 1) \dots \rangle = \begin{cases} 0, \text{ если } n_{i\sigma} = 1; \\ (-1)^{\sum_{k < i, \sigma} n_{k\sigma}} | \dots (n_{i\sigma} + 1) \dots (n_{j\sigma} - 1) \dots \rangle, \text{ если } n_{i\sigma} \neq 1. \end{cases} \quad (5.10)$$

В итоге находим:

$$a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} | \dots n_{i\sigma} \dots n_{j\sigma} \dots \rangle = \begin{cases} 0, \text{ если } n_{j\sigma} = 0 \text{ или } n_{i\sigma} = 1; \\ (-1)^{\sum_{i < k < j, \sigma} n_{k\sigma}} | \dots (n_{i\sigma} + 1) \dots (n_{j\sigma} - 1) \dots \rangle, \\ \text{если } n_{j\sigma} \neq 0 \text{ и } n_{i\sigma} \neq 1. \end{cases} \quad (5.11)$$

Показатель степени в множителе перед волновой функцией равен сумме частиц, находящихся на узлах, лежащих между узлами i и j .

Полученная волновая функция $|\dots(n_{i\sigma} + 1)\dots(n_{j\sigma} - 1)\dots\rangle$ не совпадает с функцией $|\dots n_{i\sigma} \dots n_{j\sigma} \dots\rangle$, что и приводит к появлению в гамильтоновой матрице недиагональных элементов.

Формула (5.11) удобна для практического применения, так как уже не нужно представлять базисную функцию как произведение операторов рождения на вакуумную функцию, как это делалось в (4.72), достаточно **подсчитать число единиц** между узлами i и j .

Пример. 5.2. Рассмотрим систему из периодически замкнутой цепочки из четырех узлов с двумя бесспиновыми ферми-частицами (рис. 5.4), гамильтониан которой имеет вид (5.2) с параметрами $\varepsilon_0 = 0.3$, $t_{ij} = -1$:

$$H = \sum_{i=1}^4 (0.3n_i - a_i^\dagger a_{i+1} - a_i^\dagger a_{i-1}).$$

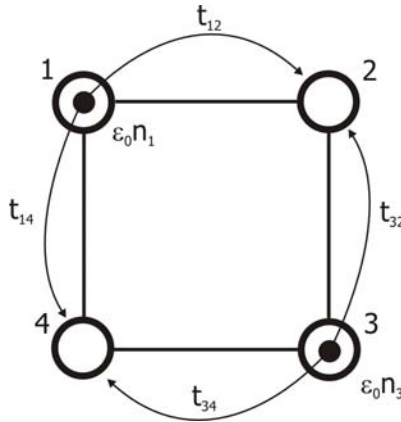


Рис. 5.4. Периодически замкнутая система из четырех узлов с двумя бесспиновыми ферми-частицами в состоянии $\Phi_5 = |1010\rangle$

Ввиду периодических граничных условий узлы 1 и 4 являются соседними, и в сумме подразумевается, что $i-1 \equiv 4$ при $i=1$; $i+1 \equiv 1$ при $i=4$.

Базис этой системы имеет вид:

$$\begin{aligned}\Phi_1 &= |0011\rangle, \quad \Phi_2 = |0101\rangle, \quad \Phi_3 = |0110\rangle, \\ \Phi_4 &= |1001\rangle, \quad \Phi_5 = |1010\rangle, \quad \Phi_6 = |1100\rangle.\end{aligned}$$

Пользуясь выражениями для матричных элементов (5.6) и (5.11), получаем гамильтонову матрицу:

$$H = \begin{pmatrix} 0.6 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0.6 & -1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0.6 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0.6 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & -1 & 0.6 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0.6 \end{pmatrix}.$$

На главной диагонали находится потенциальная энергия двух частиц

$\varepsilon_0 \sum_{i=1}^4 n_i = 2\varepsilon_0 = 0.6$, одинаковая для всех базисных состояний. Кинетическая часть

гамильтониана дает либо (-1) при перескоке частицы на соседний узел, если начальный индекс отличается от конечного индекса на единицу (перескоки $1 \leftrightarrow 2$, $2 \leftrightarrow 3$, $3 \leftrightarrow 4$), либо $(+1)$, если перескок происходит с последнего узла на первый, или наоборот ($4 \leftrightarrow 1$). Разница в знаке возникает из-за того, что в последнем случае необходимо переставить операторы в соответствии с (4.72), что приводит к появлению множителя (-1) . После приведения гамильтоновой матрицы к диагональному виду получаем спектр системы:

$$\begin{aligned}E_1 &= -1.4; \quad E_2 = -1.4; \quad E_3 = 0.6; \\ E_4 &= 0.6; \quad E_5 = 2.6; \quad E_6 = 2.6.\end{aligned}$$

Следует отметить, что если в одномерной цепочке **нечетное** количество частиц, то знак матричного элемента перескока будет всегда одинаков (как если бы не было антисимметрии), так как все время либо операторы не нужно переставлять вовсе, либо перестановок – четное количество.

Из-за того, что матрица гамильтониана в данном примере симметрична (а в общем случае – эрмитова), можно почти вдвое сэкономить время расчета, вычисляя только нижнюю (под главной диагональю) или верхнюю части матрицы и главную диагональ.

Обратим внимание на граничные условия. Если сделать граничные условия нулевыми, т.е. разорвать связь $4 \leftrightarrow 1$, что эквивалентно запрету перескока частиц между первым и последним узлами, то гамильтонова матрица из примера 5.2 примет вид:

$$H = \begin{pmatrix} 0.6 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0.6 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0.6 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0.6 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & 0.6 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0.6 \end{pmatrix}, \quad (5.12)$$

и спектр этой системы такой:

$$\begin{aligned} E_1 &= -1.6361; E_2 = -0.4; E_3 = 0.6; \\ E_4 &= 0.6; E_5 = 1.6; E_6 = 2.8361. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Видно, что в гамильтоновой матрице исчезли матричные элементы с (+1), отвечающие перескокам между последним и первым узлами. Получается, что изменение граничных условий приводит к изменению матрицы, это, в свою очередь, приводит к изменению спектра и волновых функций (для небольшого кластера из четырех узлов такое изменение довольно существенно). Поэтому правильный выбор граничных условий необходим при решении конкретной физической задачи.

5.3. Аналитическое решение модели сильной связи без взаимодействия

Для модели сильной связи без взаимодействия между частицами можно **аналитически** найти спектр и получить распределение частиц по уровням энергии. Разумеется, тот же ответ получится при помощи точной диагонализации построенной гамильтоновой матрицы.

Перейдем к фурье-представлению, разложив узельные операторы $a_{j\sigma}, a_{j\sigma}^+$ по базису плоских волн:

$$a_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_k a_{k\sigma} e^{ik\bar{R}_j}, \quad (5.14)$$

$$a_{j\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_k a_{k\sigma}^+ e^{-ik\bar{R}_j}. \quad (5.15)$$

Подставляя (5.14) и (5.15) в гамильтониан (5.2), после некоторых преобразований и учета полноты базиса плоских волн получаем гамильтониан в диагональном виде:

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}, \quad (5.16)$$

$$\varepsilon_k = \varepsilon_0 + \sum_{R_j} t(R_j) e^{-ik\bar{R}_j}.$$

Таким образом, после перехода из узельного базиса в импульсный гамильтонова матрица принимает диагональный вид, т.е. импульсное представление является в данной задаче собственнoэнергетическим. Коэффициент при операторе числа частиц в новом представлении в (5.16) и есть энергия частиц как функция импульса. Подчеркнем, что ε_k – **одночастичный спектр**, полная энергия системы есть

$$E = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \langle n_{k\sigma} \rangle. \quad (5.17)$$

Заметим, что при каноническом преобразовании (5.14) – (5.15) новые операторы рождения и уничтожения также являются фермиевскими, и для них справедливы те же соотношения коммутации. Это легко доказывается прямой подстановкой фурье-преобразования в антикоммутаторы. Действительно, докажем (опуская, для простоты, спиновые степени свободы), что

$$a_k a_{k'}^+ + a_{k'}^+ a_k = \delta_{kk'}. \quad (5.18)$$

Имеем:

$$\begin{aligned} a_k a_{k'}^+ + a_{k'}^+ a_k &= \frac{1}{N_a} \sum_{ij} (a_i a_j^+ + a_i^+ a_j) e^{i(k'r_j - kr_i)} = \\ &= \frac{1}{N_a} \sum_{ij} \delta_{ij} e^{i(k'r_j - kr_i)} = \frac{1}{N_a} \sum_i e^{i(k'-k)r_i} = \delta_{kk'}. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Соотношение (5.19) справедливо **для любого полного базиса** $\varphi_k(r)$, по которому можно разложить операторы, а не только для плоских волн. Также будет справедлив и принцип Паули.

Исследуем закон дисперсии электрона ϵ_k , оставив в гамильтониане (5.2) перескоки только между соседними узлами с одинаковой амплитудой $t_{ij} = -t$.

Отрицательный знак матричных элементов t_{ij} выбран из удобства дальнейшего описания спектра системы в импульсном пространстве; такая возможность выбора знака обусловлена справедливостью следующего свойства модели сильной связи: можно показать, **что спектр системы (5.2) не меняется при изменении знака перед амплитудой перескока t в случае приближения ближайших соседей**. Докажем это свойство.

Разобьем систему на две подрешетки A и B, вложенные одна в другую, так, что ближайшим соседом узла A обязательно является узел B, и наоборот. Ко всем узлам A применим унитарное преобразование

$$U = \exp\left(i\pi \sum_{\sigma} \sum_{i_A} a_{i\sigma}^{+A} a_{i\sigma}^A\right), \quad (5.20)$$

которое меняет знак операторов типа A: $a_{i\sigma}^{+A} \rightarrow -a_{i\sigma}^{+A}$, $a_{i\sigma}^A \rightarrow -a_{i\sigma}^A$. Это следует из операторного тождества

$$e^{-i\varphi a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}} a_{i\sigma} e^{i\varphi a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}} = a_{i\sigma} e^{i\varphi}, \quad (5.21)$$

которое доказывается непосредственным дифференцированием по параметру φ .

Задача 5.1. Доказать (5.21).

Рассмотрим действие преобразования U на гамильтониан (5.2):

$$U^{-1} H U = U^{-1} (H_0 + H_{kin}) U = U^{-1} H_0 U + U^{-1} H_{kin} U, \quad (5.22)$$

где $H_{kin} = t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}$.

Для второго слагаемого в (5.22) получаем, что в сумме возникают комбинации операторов вида $a^{+A} a^B$ или $a^{+B} a^A$, и, так как знак перед операторами типа A изменился в результате преобразования U, то и общий знак перед вторым слагаемым в (5.22) меняется на противоположный.

Первое слагаемое в (5.22) будет содержать комбинации операторов вида $a^{+A}a^A$ или $a^{+B}a^B$. Так как число изменений знаков в этом случае всегда будет четным,

$$U^{-1}a^{+A}a^AU = U^{-1}a^{+A}UU^{-1}a^AU = a^{+A}a^A, \quad (5.23)$$

то получаем, что первое слагаемое инвариантно относительно преобразования U .

Далее для любой собственной функции ψ имеем:

$$\begin{aligned} H\psi = E\psi &\Rightarrow U^{-1}H\psi U = U^{-1}E\psi U \Rightarrow \\ &\Rightarrow U^{-1}HUU^{-1}\psi U = U^{-1}EUU^{-1}\psi U \Rightarrow \\ &\Rightarrow U^{-1}HUU^{-1}\psi U = EU^{-1}\psi U \Rightarrow \\ &\Rightarrow U^{-1}HU\psi = E\psi; \quad \Psi = U^{-1}\psi U. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Из (5.24) следует, что спектр системы остается неизменным при унитарном преобразовании U , и утверждение доказано.

Таким образом, знак перед амплитудой перескока можно выбрать из соображений удобства. При выборе знака "минус" низ зоны проводимости будет находиться в центре зоны Бриллюэна, и дисперсионное соотношение (5.16) для простой кубической решетки в приближении ближайших соседей будет иметь вид

$$\varepsilon_k = \varepsilon_0 - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \quad (5.25)$$

Рассмотрим для простоты одномерный случай:

$$\varepsilon_k = \varepsilon_0 - 2t \cos ka. \quad (5.26)$$

Этот закон дисперсии описывает полосу энергии шириной $2Zt$ (Z – число ближайших соседей, $Z=2$ – для одномерного случая), так называемую **зону проводимости** (рис. 5.5). Ширина зоны пропорциональна вероятности перескока. При увеличении концентрации электронов зона будет последовательно заполняться в соответствии с принципом Паули, так что заняты будут все состояния ниже некоторого максимального энергетического уровня, называемого **уровнем Ферми** E_F . Очевидно, что эта величина будет зависеть от концентрации электронов (см. рис. 5.5).

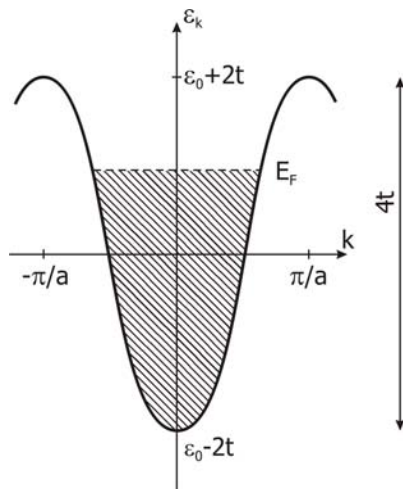


Рис. 5.5. Спектр свободной частицы

Если система конечна и имеет L_x узлов, то и разрешенных импульсов в системе также конечное число:

$$k_n^{(x)} = \frac{2\pi}{aL_x} n; \quad -\frac{L_x}{2} + 1 \leq n \leq \frac{L_x}{2}. \quad (5.27)$$

При этом закон дисперсии (5.26) останется справедливым, только разрешенных состояний – импульсов, заполняемых частицами, станет конечное число.

Рассмотрим в качестве примера одномерную периодическую цепочку из 6 узлов с 3 частицами. В соответствии с (5.27), в системе имеется 6 разрешенных **одночастичных** уровней энергии:

$$\begin{aligned} E_1 &= \epsilon_0 - 2t \cos(0) = \epsilon_0 - 2t, \\ E_{2,3} &= \epsilon_0 - 2t \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) = \epsilon_0 - t, \\ E_{4,5} &= \epsilon_0 - 2t \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) = \epsilon_0 + t, \\ E_6 &= \epsilon_0 - 2t \cos(\pi) = \epsilon_0 + 2t. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Видно, что средние уровни дважды вырождены по импульсу (рис. 5.6).

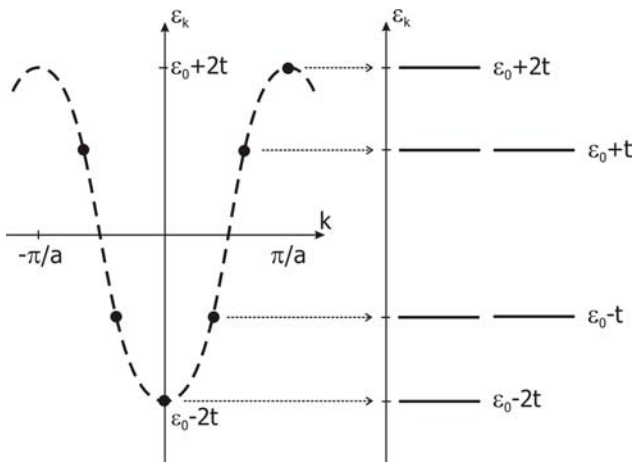


Рис. 5.6. Одночастичные энергетические уровни для системы из шести узлов. Средние уровни дважды вырождены по импульсу

В соответствии с принципом Паули, в каждом состоянии не может быть больше одной частицы, при этом для основного состояния энергия должна быть минимальна. Значит, одна частица разместится на нижнем уровне, а две другие – на втором и третьем. Полная энергия основного состояния системы равна

$$E_{(0)} = E_{\min} = E_1 + E_2 + E_3 = 3\varepsilon_0 - 4t, \quad (5.29)$$

причем основное состояние является невырожденным. Следующее, первое возбужденное состояние, имеет энергию $E_{(1)} = 3\varepsilon_0 - 2t$, и является вырожденным (рис. 5.7).

Далее, располагая соответствующим образом частицы, получаем все 20 уровней полной энергии этой трехчастичной задачи (см. задачу 5.1). Они должны **в точности совпадать** со спектром, полученным в результате **точной диагонализации** гамильтоновой матрицы.

Эту задачу удалось так просто решить потому, что рассматривались **свободные частицы**. Как только в рассмотрение будет включено взаимодействие между частицами, в большинстве случаев **точного** аналитического ответа получить не удастся. Иногда удастся получить ответ при помощи различных разложений или теории

возмущений, для некоторых одномерных систем в случае короткодействующего потенциала известны точные ответы, однако общей схемы решения таких задач нет. В этой ситуации на первый план выступают **точные численные** методы, которые позволяют получить точный ответ для конечной кластерной системы.

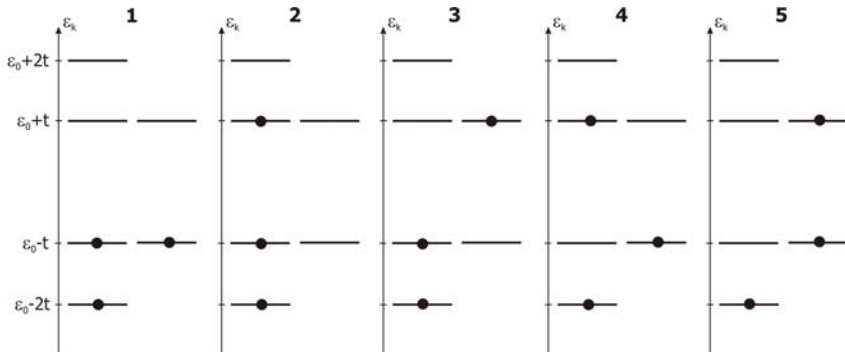


Рис. 5.7. Основное (1) и первое возбужденное (2-5) состояния для системы из трех частиц на шести узлах. Первое возбужденное состояние четырехкратно вырождено

Рассмотрим далее одну из основных моделей, которая учитывает межчастичное взаимодействие – модель Хаббарда.

5.4. Модель Хаббарда

Для объяснения фазовых переходов "металл – изолятор" в переходных металлах с узкими зонами Хаббард в 1964 г. [5] предложил модель, которая в режиме сильной связи, учитывая перескоки электронов на соседние атомы и кулоновское отталкивание на узле, позволила описать переход из проводящего состояния в диэлектрическое. Эта модель (и ее расширенные аналоги) в настоящее время стала популярной в связи с исследованием высокотемпературных сверхпроводников, наноструктур, квантовых точек и ям.

Для вывода модели Хаббард исходил из стандартного гамильтониана для ферми-газа с кулоновским взаимодействием:

$$H = \sum_{p\sigma} \varepsilon_p a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{p_1 p_2 \\ p_1' p_2'}} V_{p_1 p_2 p_1' p_2'} a_{p_1 \sigma}^+ a_{p_2 \sigma}^+ a_{p_2' \sigma'} a_{p_1' \sigma} . \quad (5.30)$$

Вклад в спектр от кинетической части гамильтониана (5.30) аналогичен рассмотренному в предыдущем разделе: для простой кубической решетки $\varepsilon_p \sim \cos(pa)$.

Второе слагаемое, описывающее кулоновское взаимодействие электронов, записано в общем виде. Если рассматриваются системы с узкими зонами (ширина зон $\sim 0.1 \div 1$ эВ), то электроны имеют большую эффективную массу и сильно локализованы. Поэтому, как и в приближении сильной связи, хорошим квантовым числом является номер узла. Вернемся поэтому обратно от импульсного представления к узельным операторам:

$$a_{p\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j a_{j\sigma} e^{i\vec{p}\vec{r}_j} . \quad (5.31)$$

Здесь индекс j подразумевает базис волновых функций Ванье в кристалле, совпадающих с узельными волновыми функциями точно на узле и имеющих асимптотами плоские волны вдали от атома.

Применяя обратное фурье-преобразование к кинетической части гамильтониана (5.30), получаем:

$$H_{\text{kin}} = \sum_{\substack{k \neq j \\ \sigma}} t_{kj} a_{k\sigma}^+ a_{j\sigma} , \quad (5.32)$$

$$t_{kj} = \sum_{p\sigma} \varepsilon_p e^{i\vec{p}(\vec{r}_k - \vec{r}_j)} \sim e^{-\frac{|\vec{r}_k - \vec{r}_j|}{a_B}} .$$

(Здесь и далее все энергии отсчитываются от уровня ε_0 .)

Подставив (5.31) в потенциальную часть гамильтониана (5.30), получим:

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{ijkl \\ \sigma\sigma'}} V_{ijkl} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma'}^+ a_{l\sigma} a_{k\sigma'};$$

$$V_{ijkl} = \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{p_1 p_2 \\ p'_1 p'_2}} V_{p_1 p_2 p'_1 p'_2} e^{-i(\bar{p}_1 \bar{r}_i + \bar{p}_2 \bar{r}_j - \bar{p}'_1 \bar{r}_l - \bar{p}'_2 \bar{r}_k)}. \quad (5.33)$$

Как правило, в металлах и полуметаллах при конечной концентрации электронов велико экранирование кулоновского потенциала, поэтому существенный вклад в энергию электронов дает их взаимодействие между собой либо на одном узле кристаллической решетки, либо на соседних узлах. При учете взаимодействия между электронами только на одном узле (так называемое "on-site взаимодействие"), т.е. полагая

$$V_{ijkl} \equiv V_{iiii} = V(|r| = 0) = U, \quad (5.34)$$

получаем **гамильтониан Хаббарда**:

$$H = \sum_{i \neq j} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} U a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} a_{i,-\sigma}^+ a_{i,-\sigma}. \quad (5.35)$$

Здесь первый член гамильтониана (кинетическая энергия) описывает перескоки электронов на соседние узлы с амплитудой t_{ij} , второй член описывает кулоновское отталкивание электронов на узле с потенциалом U и учитывает, что одновременно на узле могут находиться частицы только с противоположным спином.

В приближении ближайших соседей гамильтониан (5.35) запишется в следующем виде:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (5.36)$$

Во взаимодействующей части коэффициент $1/2$ скомпенсировался за счет суммирования по спинам. Таким образом, в модели всего два параметра: матричный элемент перескока на соседний узел t и кулоновское отталкивание на узле U (рис. 5.8). Более того, если отсчитывать все энергии в единицах t , то остается единственный параметр t/U .

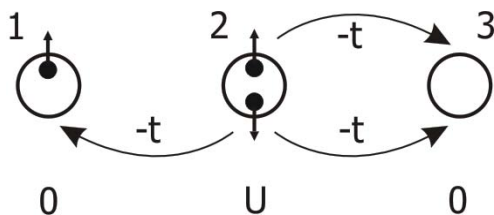


Рис. 5.8. Матричные элементы потенциальной и кинетической энергий для гамильтониана (5.36) в случае системы из трех узлов и трех электронов

Знак перескока (минус) выбирается из удобства отсчета получающихся зон симметрично от центра зоны Брюллиэна. Можно показать, как и для случая модели без взаимодействия, **что спектр системы не меняется от смены знака перескока в случае приближения ближайших соседей.**

Экспериментальные оценки параметров модели Хаббарда из спектральных и других экспериментов для различных твердотельных структур дают следующие результаты: $t \sim 1 \div 1.5$ эВ, $U \sim 6 \div 10$ эВ [6]. Таким образом, кулоновское взаимодействие не является малым параметром, что затрудняет использование каких-либо аналитических подходов или приближений для нахождения спектра.

Модель Хаббарда была решена точно только в **одномерном случае** методом **Анзац Бете** и с использованием метода **обратной задачи рассеяния** [7-9]. В общем случае известны различные приближения и разложения по теории возмущений по параметру t/U . Сам Хаббард использовал близкий к приближению среднего поля подход (так называемые приближения "Хаббард-I" и "Хаббард-III" [5, 9]), чтобы показать наличие расщепления энергетических зон электрона за счет кулоновского взаимодействия. Различные модификации и близкие к модели Хаббарда описания (t - J -модель, модель Эмери, s - d -модель и др.) используются для описания транспортных, сверхпроводящих, магнитных свойств сильнокоррелированных систем, в частности высокотемпературных сверхпроводников, фуллеренов, спиновых систем, наноструктур (таких как квантовые ямы, точки,

наномагниты). Эти модели используются для анализа таких сложных явлений, как эффект Кондо, кулоновская блокада и др.

Модель Хаббарда оказалась удачной для описания системы сильно взаимодействующих электронов, позволяющей адекватно описывать не только энергетические зоны, но и влияние концентрации частиц на структуру уровней, фазовые переходы между проводящим и диэлектрическим состояниями, магнитное упорядочение.

Например, если в системе число электронов совпадает с числом узлов (так называемое **половинное заполнение**), то при большом кулоновском взаимодействии ($U/t \gg 1$) все электроны практически "заперты" на своих узлах, образуя антиферромагнитное упорядочение:

$$\dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots$$

В этом случае можно показать, что гамильтониан Хаббарда эквивалентен **гейзенберговскому антиферромагнитному гамильтониану**, который будет рассмотрен далее при изучении спиновой статистики.

Из-за сложности аналитического описания в последнее время применяются численные расчеты этих моделей, в частности, методы Монте-Карло и методы точной диагонализации.

5.4.1. Гамильтонова матрица модели Хаббарда и ее расширенных аналогов

Целью этого раздела является формулировка **численной задачи** для нахождения спектра модели Хаббарда.

Рассмотрим действие оператора под знаком суммы в кулоновской части (5.35) на базисную функцию в узельном представлении:

$$a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} a_{i,-\sigma}^+ a_{i,-\sigma} \dots n_{i\sigma} \dots n_{i,-\sigma} \dots \rangle = n_{i\sigma} n_{i,-\sigma} \dots n_{i\sigma} \dots n_{i,-\sigma} \dots \rangle. \quad (5.37)$$

Таким образом, получаем следующий диагональный матричный элемент:

$$\langle m | H_{\text{int}} | p \rangle = U \sum_i n_{i\uparrow}^{(p)} n_{i\downarrow}^{(p)} \delta_{mp}. \quad (5.38)$$

Итак, слагаемое в (5.35), отвечающее взаимодействию между частицами, изменяет только диагональ в гамильтоновой матрице.

Рассмотрим для примера периодически замкнутую систему из трех узлов и двух частиц с противоположными спинами (рис. 5.9), гамильтониан которой имеет вид (5.35) с параметрами $t = -1$, $U = 4.3$:

$$H = - \sum_{\substack{i=1 \\ \sigma}}^3 (a_{i\sigma}^+ a_{i+1,\sigma} + a_{i\sigma}^+ a_{i-1,\sigma}) + 4.3 \sum_{i=1}^3 (a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow}). \quad (5.39)$$

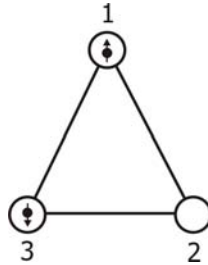


Рис. 5.9. Система из трех узлов и двух частиц с противоположными спинами в состоянии $\Phi_3 = |100, 001\rangle$

Из-за периодических граничных условий $i-1 \equiv 3$ при $i=1$ и $i+1 \equiv 1$ при $i=3$.

Узельный базис системы будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= |001, 001\rangle; \Phi_2 = |010, 001\rangle; \Phi_3 = |100, 001\rangle; \\ \Phi_4 &= |001, 010\rangle; \Phi_5 = |010, 010\rangle; \Phi_6 = |100, 010\rangle; \\ \Phi_7 &= |001, 100\rangle; \Phi_8 = |010, 100\rangle; \Phi_9 = |100, 100\rangle. \end{aligned} \quad (5.40)$$

Первые три числа базисной функции отвечают за состояния частицы со спином вверх, следующие три – за состояния частицы со спином вниз; всего в системе $C_3^1 C_3^1 = 9$ состояний. Построим гамильтонову матрицу:

$$H = \begin{pmatrix} 4.3 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 4.3 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 4.3 \end{pmatrix}. \quad (5.41)$$

Так как число электронов с каждой из проекций спина – нечетное, то положительного знака в кинетическом слагаемом не появляется (в том случае, если базисные функции записаны в виде (5.40)). На главной диагонали матрицы – вклад от взаимодействия, но только в 1, 5 и 9-й строках, так как только эти базисные функции имеют узлы с двойным заполнением.

Для более наглядного изучения влияния взаимодействия на спектр системы рассмотрим расширенный аналог модели Хаббарда. Введем кулоновское взаимодействие между электронами на соседних узлах, полагая его более слабым, но по порядку величины сопоставимым с амплитудой перескока. Эксперимент говорит о необходимости учета таких слагаемых. В этом случае взаимодействовать могут электроны не только с противоположными спинами, но и электроны с одной проекцией спина. Гамильтониан принимает вид

$$H = -t \sum_{i \neq j} \sum_{\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma\sigma'} n_{i\sigma} n_{j\sigma'}. \quad (5.42)$$

Последнее слагаемое учитывает кулоновское взаимодействие между электронами на соседних узлах, оно равно произведению чисел заполнения на кулоновскую энергию V . Параметр V – это экранированный кулоновский потенциал, $V = V(|r_i - r_j|)$, который можно взять одинаковым для эквивалентных узлов.

Матричные элементы от такого вклада в гамильтониан также будут диагональными:

$$\langle m | H_V | p \rangle = V \sum_{\substack{\langle ij \rangle \\ \sigma\sigma'}} n_{i\sigma}^{(p)} n_{j\sigma'}^{(p)} \delta_{mp}. \quad (5.43)$$

Если рассмотреть частицы с ферми-статистикой, но без учета спина, то второе слагаемое в (5.42) исчезнет, и модель примет следующий вид:

$$H = -t \sum_{i \neq j} a_i^+ a_j + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j. \quad (5.44)$$

Рассмотрим периодически замкнутую систему из четырех узлов и двух частиц, описываемую гамильтонианом (5.44) с параметрами $t = -1$, $V = 2.1$. В системе будет $C_4^2 = 6$ состояний, узельный базис будет следующим:

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= |0011\rangle; \Phi_2 = |0101\rangle; \Phi_3 = |0110\rangle; \\ \Phi_4 &= |1001\rangle; \Phi_5 = |1010\rangle; \Phi_6 = |1100\rangle. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Построим гамильтонову матрицу этой системы:

$$H = \begin{pmatrix} 2.1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 2.1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 2.1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 2.1 \end{pmatrix}. \quad (5.46)$$

Теперь на главной диагонали ненулевые вклады расположены на 1, 3, 4 и 6-й строках, так как соответствующие базисные функции имеют частицы на соседних узлах; кроме того, так как в системе теперь четное число одинаковых частиц, вклад от периодических граничных условий дает изменение знака (элементы H_{15} , H_{26} , H_{51} , H_{62}).

5.4.2. Спектр модели Хаббарда и приближение среднего поля

Для модели Хаббарда и ее модификаций уже **нельзя строго провести аналитический расчет**, как это было сделано в случае свободных частиц. Однако можно решить задачу приближенно и обсудить качественные изменения спектра при учете взаимодействия.

Рассмотрим обычную модель Хаббарда для электронов со спинами:

$$H = -t \sum_{\substack{i \neq j \\ \sigma}} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (5.47)$$

Второе слагаемое можно упростить, если предположить, что с электроном со спином σ взаимодействуют не конкретные электроны со спином $-\sigma$, а среднее количество электронов $\langle n_{-\sigma} \rangle$ со спином $-\sigma$ – некоторое среднее поле. Это приближение называется **приближением среднего поля**. В общем случае оно не применимо в рамках модели Хаббарда, только в пределе $U \rightarrow 0$ его можно с некоторой осторожностью использовать для качественного анализа влияния взаимодействия на спектр системы.

В рамках приближения среднего поля имеем:

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \approx \langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow} \langle n_{i\downarrow} \rangle \equiv \langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow} \langle n_{i\downarrow} \rangle. \quad (5.48)$$

В последнем соотношении учтено, что все узлы эквивалентны, и средние числа заполнения на них одинаковы, так что можно убрать индекс узла под знаком среднего.

Гамильтониан (5.47) принимает тогда следующий вид:

$$H = -t \sum_{\substack{i \neq j \\ \sigma}} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} \langle n_{-\sigma} \rangle, \quad (5.49)$$

т.е. задача из многочастичной превратилась в эффективную одночастичную.

Переходя в импульсное представление, получаем гамильтониан в диагональном виде:

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma};$$

$$\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_k + U \langle n_{-\sigma} \rangle. \quad (5.50)$$

Здесь ε_k – известный закон дисперсии для модели сильной связи без взаимодействия (5.26). Видно, что кулоновское взаимодействие расщепляет энергию электрона, снимая вырождение по проекции спина.

Дальнейший ход аналитического исследования задачи для расчета величин $\langle n_{\pm\sigma} \rangle$ приводит к самосогласованной системе уравнений (так называемой **модели Стонера** [10, 11], описывающей появление в системе ферромагнитного состояния), не имеющей аналитического решения, рассмотрение которой выходит за рамки данной книги.

Рассмотрим спектр системы, изображенной на рис. 5.9, с базисом (5.40), и качественно сопоставим его с результатом в приближении среднего поля. Гамильтониан системы имеет вид ($t = -1$):

$$H = - \sum_{\substack{i=1 \\ \sigma}}^3 (a_{i\sigma}^+ a_{i+1,\sigma} + a_{i\sigma}^+ a_{i-1,\sigma}) + U \sum_{i=1}^3 n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (5.51)$$

В базисе (5.40) получаем гамильтонову матрицу:

$$H = \begin{pmatrix} U & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & U & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & U \end{pmatrix}. \quad (5.52)$$

В отсутствие взаимодействия решение имеет вид

$$\varepsilon_k = -2 \cos ka, \quad (5.53)$$

и разрешенные одночастичные уровни для одной проекции спина

$$\begin{aligned}\varepsilon_1 &= -2 \cos(0) = -2; \\ \varepsilon_{2,3} &= -2 \cos\left(\pm \frac{2\pi}{3}\right) = +1.\end{aligned}\tag{5.54}$$

Сформируем спектр полных энергий системы. Так как спины у частиц в системе разные, то в основном состоянии обе частицы займут нижний уровень ε_1 , и энергия основного состояния

$$E_{(0)} = 2\varepsilon_1 = -4,\tag{5.55}$$

причем оно является невырожденным (рис. 5.10).

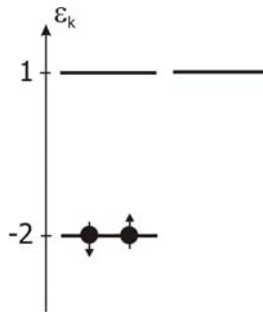


Рис. 5.10. Основное состояние для системы из трех узлов и двух частиц с противоположными спинами

Следующее (первое возбужденное) состояние получается из основного переходом одной частицы на следующий энергетический уровень:

$$E_{(1)} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = -1.\tag{5.56}$$

Это состояние 4-кратно вырождено: дважды по импульсу и дважды по проекции спина (рис. 5.11).

Несложно получить, что следующее возбужденное состояние будет также четырехкратно вырождено, и окончательно находим следующий спектр:

$$\begin{aligned}E_1 &= -4; \\ E_{2,3,4,5} &= -1; \\ E_{6,7,8,9} &= 2.\end{aligned}\tag{5.57}$$

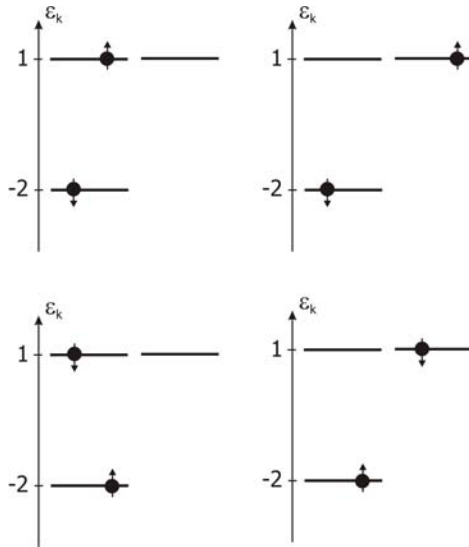


Рис. 5.11. Первое возбужденное состояние для системы из трех узлов и двух частиц с противоположными спинами четырехкратно вырождено: дважды по импульсу и дважды по спину

Как же меняется ситуация при ненулевом кулоновском взаимодействии? Положим $U = 0.3$, тогда точная диагонализация матрицы (5.52) дает следующий ответ:

$$\begin{aligned}
 E_1 = -3.903; \quad E_{2,3} = -1; \quad E_{4,5} = -0.8069; \\
 E_6 = 2; \quad E_{7,8} = 2.1069; \quad E_9 = 2.2033.
 \end{aligned}
 \tag{5.58}$$

Приближение среднего поля изменило бы спектр на величину порядка

$$\Delta E = U(\langle n_{\downarrow} \rangle + \langle n_{\uparrow} \rangle) = U\left(\frac{1}{3} + \frac{1}{3}\right) = 0.2
 \tag{5.59}$$

(для точного расчета величины ΔE в приближении среднего поля необходимо решать самосогласованную модель Стонера, но для качественной оценки достаточно результата (5.59)).

Для энергии основного состояния разница результатов (5.58) и (5.59) находится в пределах 2.5 %, однако для возбужденных уровней приближение среднего поля работает хуже. Тем не менее,

основная тенденция верна: весь спектр сместился вверх, и многие уровни сдвинуты на величину, близкую к ΔE .

Если при слабом взаимодействии еще удастся качественно проследить за изменением спектра, то при $U \sim t$ это становится невозможным. Именно отсутствие аналитического решения и приводит к необходимости использовать численную диагонализацию при исследовании модели Хаббарда.

5.4.3. Инварианты в модели Хаббарда

Все примеры конкретных систем, рассмотренные ранее для модели сильной связи и модели Хаббарда, обладали одной общностью, а именно: в системе рассматривалось определенное число частиц (либо две бесспиновые в 4-узельном случае, либо две с противоположным спином для трех узлов и т.п.). Узельный базис также сразу подбирался с учетом сохранения числа частиц. Это возможно лишь тогда, когда **число частиц сохраняется**, т.е. является **инвариантом** модели. Полному числу частиц, как любой физической величине, соответствует оператор числа частиц

$$N = \sum_{i\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}. \quad (5.60)$$

Если число частиц в системе сохраняется, то это справедливо в любом представлении, в том числе и в собственнo-энергетическом, и

$$[H, N] = HN - NH = 0, \quad (5.61)$$

т.е. оператор числа частиц должен коммутировать с гамильтонианом (5.35). Оператор числа частиц тогда имеет общую с оператором энергии систему собственных функций, что позволяет решать задачу для заданного числа частиц в системе. Докажем свойство (5.61).

Коммутация оператора числа частиц со вторым членом из (5.35) очевидна, так как он сам состоит из произведения операторов числа частиц на узле. Докажем коммутативность с кинетической частью гамильтониана. Имеем:

$$\begin{aligned}
\sum_{\substack{ijk \\ \sigma\sigma'}} [t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma'}] &= \sum_{\substack{ijk \\ \sigma\sigma'}} t_{ij} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma'} - a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma'} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}) = \\
&= \sum_{\substack{ijk \\ \sigma\sigma'}} t_{ij} (a_{i\sigma}^+ (\delta_{jk} - a_{k\sigma'}^+ a_{j\sigma}) a_{k\sigma'} - a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma'} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}) = \\
&= \sum_{\substack{ijk \\ \sigma\sigma'}} t_{ij} (\delta_{jk} a_{i\sigma}^+ a_{k\sigma'} - a_{i\sigma}^+ a_{k\sigma'}^+ a_{j\sigma} a_{k\sigma'} - a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma'} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}) = \\
&= \sum_{\substack{ijk \\ \sigma\sigma'}} t_{ij} (\delta_{jk} a_{i\sigma}^+ a_{k\sigma'} - a_{k\sigma'}^+ a_{i\sigma}^+ a_{k\sigma'} a_{j\sigma} - a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma'} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}) = \quad (5.62) \\
&= \sum_{\substack{ijk \\ \sigma\sigma'}} t_{ij} (\delta_{jk} a_{i\sigma}^+ a_{k\sigma'} - a_{k\sigma'}^+ (\delta_{ik} - a_{k\sigma'} a_{i\sigma}^+) a_{j\sigma} - a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma'} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}) = \\
&= \sum_{\substack{ijk \\ \sigma\sigma'}} t_{ij} (\delta_{jk} a_{i\sigma}^+ a_{k\sigma'} - \delta_{ik} a_{k\sigma'}^+ a_{j\sigma}) \equiv 0.
\end{aligned}$$

Таким образом, если рассмотреть узельный базис модели Хаббарда с произвольным числом частиц и расположить сначала волновые функции с одной частицей в системе, затем с двумя, и т.д., то получим гамильтонову матрицу в следующем блочно-диагональном виде:

$$H = \left(\begin{array}{c|c|c} (N=1) & 0 & 0 \\ \hline 0 & (N=2) & 0 \\ \hline 0 & 0 & \dots \end{array} \right). \quad (5.63)$$

Блоки будут расположены на главной диагонали, причем верхний будет соответствовать задаче с одной частицей, следующий – задаче с двумя частицами и т.д. Между блоками перекрытий не будет, и остальные матричные элементы равны нулю. Это утверждение следует из того, что гамильтониан сохраняет число частиц, и при действии его на волновую функцию число частиц остается прежним, так что матричный элемент также останется внутри соответствующего блока.

Для частиц со спином можно доказать также, что гамильтониан (5.35) коммутирует с оператором S^z полной проекции спина на ось Z ,

$$S^z = \frac{1}{2} \sum_i (a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\uparrow} - a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\downarrow}) = \frac{1}{2} \sum_i (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}), \quad (5.64)$$

так как оператор проекции спина является комбинацией чисел заполнения, а для оператора числа частиц коммутация справедлива.

Таким образом, гамильтонова матрица дробится внутри блока по числу частиц еще на подблоки с заданной проекцией спина:

$$H = \begin{pmatrix} \left(\begin{array}{c} N=1 \\ S^z = -\frac{1}{2} \end{array} \right) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \left(\begin{array}{c} N=1 \\ S^z = +\frac{1}{2} \end{array} \right) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \left(\begin{array}{c} N=2 \\ S^z = -1 \end{array} \right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \left(\begin{array}{c} N=2 \\ S^z = 0 \end{array} \right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \left(\begin{array}{c} N=2 \\ S^z = +1 \end{array} \right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix}, \quad (5.65)$$

т.е. в модели Хаббарда каждую задачу с конкретным заполнением и проекцией спина можно решать независимо. Полная проекция спина также является **инвариантом** в модели Хаббарда.

Заметим, что учет инвариантов модели может **сильно уменьшить размер Гильбертова пространства** модели, что часто необходимо при расчете на компьютере.

В модели Хаббарда существуют и другие инварианты, например периодические граничные условия и эквивалентность узлов в рассматриваемых кластерах позволяют ввести **оператор трансляции**, что также может уменьшить размер гильбертова пространства. Этот вопрос будет рассмотрен далее.

В заключение раздела приведем ситуацию, когда невозможно воспользоваться рассмотренными инвариантами и приходится решать задачу для произвольного числа частиц. Если электроны в

модели (5.35) взаимодействуют еще и с поперечными полями, то в гамильтониане появляется дополнительный член вида

$$\Delta H \sim \sum_{i\sigma} (a_{i\sigma} + a_{i\sigma}^+), \quad (5.66)$$

который не сохраняет число частиц, поэтому в гамильтоновой матрице появятся матричные элементы между блоками с различным числом частиц. В этом случае задачу следует решать в большом каноническом ансамбле, с переменным числом частиц и учетом химического потенциала.

5.5. Расчет квантово-механических средних

После того, как проведена численная диагонализация гамильтоновой матрицы и получен спектр, становится возможным расчет различных квантово-механических средних, таких как, например, среднее число частиц на конкретном узле; парные корреляционные функции $\langle n_i n_j \rangle$, означающие условную вероятность нахождения частицы на узле i при наличии другой частицы на узле j ; отдельно потенциальная или кинетическая энергии; недиагональная матрица плотности $\langle a_i^+ a_j \rangle$ и т.д.

Диагонализация гамильтоновой матрицы дает кроме спектра E_n также и собственные волновые функции Ψ_n в виде коэффициентов разложения C_{nm} по исходным базисным функциям Φ_m . Матричные элементы операторов в базисе Φ также известны, с их помощью возможен расчет различных средних. Например, среднее число частиц на узле в основном состоянии:

$$\begin{aligned} \langle n_i \rangle &= \langle \Psi_0 | n_i | \Psi_0 \rangle = \sum_{nm} C_{n0}^* C_{m0} \langle \Phi_n | n_i | \Phi_m \rangle = \\ &= \sum_{nm} C_{n0}^* C_{m0} n_i^{(n)} \delta_{nm} = \sum_n |C_{n0}|^2 n_i^{(n)}. \end{aligned} \quad (5.67)$$

Так как оператор числа частиц диагонален в узельном представлении, то получается одинарная сумма, каждое слагаемое которой – вклад узельной базисной функции в функцию основного

состояния, умноженный на соответствующее число заполнения. Аналогично рассчитываются более сложные диагональные корреляторы, например:

$$\langle n_i n_j \rangle = \sum_n |C_n^0|^2 n_i^0 n_j^0. \quad (5.68)$$

Недиагональные корреляторы представимы в виде

$$\langle a_i^+ a_j \rangle = \sum_{nm} C_{n0}^* C_{m0} \langle \Phi_n | a_i^+ a_j | \Phi_m \rangle, \quad (5.69)$$

здесь необходимо рассчитывать матричный элемент под знаком суммы с учетом всех правил вторичного квантования.

Следует особо отметить **проблему вырожденных состояний**. Допустим, необходимо рассчитать среднее число заполнения $\langle n_i \rangle$ в каком-либо вырожденном состоянии. Рассмотрим систему из двух невзаимодействующих бесспиновых ферми-частиц на периодически замкнутой цепочке из шести узлов с параметром перескока $t = -1$. Основное состояние такой системы дважды вырождено по импульсу: $E_{(0)} = E_{1,2} = -3$ (рис. 5.12).

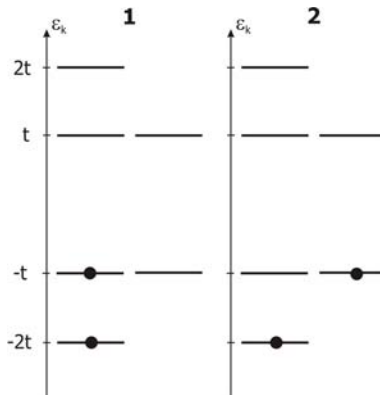


Рис. 5.12. Основное состояние системы из шести узлов с двумя невзаимодействующими бесспиновыми ферми-частицами двукратно вырождено

Расчет методом точной диагонализации среднего числа заполнения каждого узла в этих вырожденных состояниях дает следующий результат, представленный в табл. 5.1.

Таблица 5.1. Расчет среднего числа заполнения методом точной диагонализации

i	1	2	3	4	5	6
$\langle n_i^{(1)} \rangle$	0.417	0.417	0.167	0.417	0.417	0.167
$\langle n_i^{(2)} \rangle$	0.250	0.250	0.500	0.250	0.250	0.500

Из топологии задачи следует, что все узлы эквивалентны, и во всех ячейках табл. 5.1 должны стоять одинаковые значения, равные $\frac{1}{3}$.

Однако расчет дает другой результат – числа заполнения на разных узлах получились различные, что ставит под сомнение корректность численного расчета.

Причина заключается в том, что вырожденные состояния нельзя рассматривать независимо друг от друга. Квантовые состояния, отвечающие одному значению энергии, имеют одинаковую вероятность реализации. Волновые функции, отвечающие этим состояниям, являются линейно независимыми. Однако в пространстве $m \times m$, где m – кратность вырождения, вектора этих состояний могут быть ориентированы как угодно (рис. 5.13). Более того, их ориентация зависит от алгоритма, при помощи которого происходит диагонализация гамильтоновой матрицы.

Правильный расчет квантово-механических средних должен учитывать тот факт, что волновая функция m -кратно вырожденного состояния с энергией E есть суперпозиция m линейно независимых волновых функций, соответствующих собственному значению E гамильтоновой матрицы.

Таким образом, для двукратно вырожденного основного состояния системы из шести узлов и двух бесспиновых ферми-частиц (см. рис. 5.12) волновая функция будет иметь вид

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 + e^{i\varphi} \Psi_2), \quad (5.70)$$

где функция Ψ_1 отвечает состоянию **1** на рис. 5.12, а функция Ψ_2 – состоянию **2**, причем эти функции линейно независимы: $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = 0$.

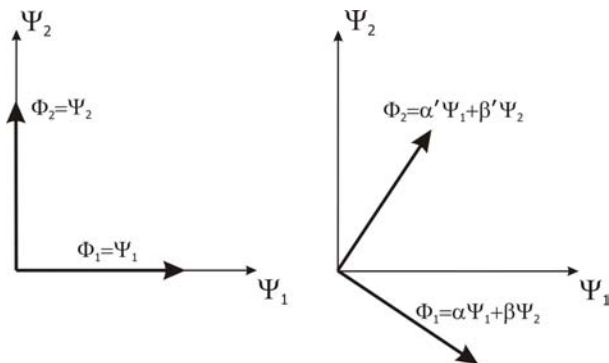


Рис. 5.13. Наглядное представление в виде векторов пары линейно независимых собственных функций Ψ_1, Ψ_2 и Φ_1, Φ_2 , отвечающих двукратно вырожденному состоянию

Среднее заполнение на узле в этом случае

$$\begin{aligned} \langle n_i \rangle &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 + e^{-i\varphi} \Psi_2) \middle| n_i \middle| \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 + e^{i\varphi} \Psi_2) \right\rangle = \\ &= \frac{1}{2} \langle \Psi_1 | n_i | \Psi_1 \rangle + \frac{1}{2} \langle \Psi_2 | n_i | \Psi_2 \rangle = \frac{1}{2} (\langle n_i^{(1)} \rangle + \langle n_i^{(2)} \rangle) \end{aligned} \quad (5.71)$$

и не зависит от выбора фазового множителя $e^{i\varphi}$.

Подставляя значения чисел заполнения из табл. 5.1, убеждаемся, что теперь получается правильный результат $\langle n_i \rangle = \frac{1}{3}$.

Задачи

5.2. Написать программный код для создания узельного базиса для системы произвольного числа частиц со статистикой Ферми. Входным параметром процедуры должно быть число узлов m в системе, выходным параметром – упорядоченный массив базисных состояний, каждая строка которого отвечает базисной функции.

5.3. Написать программный код для создания узельного базиса для системы фиксированного числа частиц со статистикой Ферми. Входными параметрами процедуры должны быть число узлов m и число частиц N в системе, выходным параметром – упорядоченный массив базисных состояний, каждая строка которого отвечает базисной функции.

5.4. Обобщить процедуры из задач 5.1 и 5.2 на случай учета спина частиц.

5.5. Построить гамильтонову матрицу для системы из 10 узлов и 6 ферми-частиц, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t \sum_{i=1}^{10} (a_i^+ a_{i+1} + a_i^+ a_{i-1}) + U \sum_{i=1}^{10} n_i,$$

$t = 1$; $U = 2$; границы системы периодически замкнуты. Нарисовать портрет гамильтоновой матрицы (портрет матрицы – графическое представление матрицы, на котором отображаются только места ненулевых элементов; в MatLab портрет матрицы рисует функция "spy"). Получить спектр системы.

При тех же условиях решить задачу для нулевых граничных условий. Сравнить портреты и спектры матриц.

5.6. Для системы из 6 узлов и 3 свободных ферми-частиц с гамильтонианом

$$H = - \sum_{i=1}^6 (a_i^+ a_{i+1} + a_i^+ a_{i-1})$$

построить гамильтонову матрицу и найти спектр системы. Сравнить спектр с точным аналитическим решением (5.28). Определить кратность вырождения уровней.

5.7. Найти энергии основного состояния и первых 4 возбужденных состояний в модели Хаббарда

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

в зависимости от параметра U/t . Число узлов в системе $m = 8$, периодические граничные условия. Рассмотреть следующие случаи:

- 1) в системе 2 электрона с противоположными спинами;
- 2) в системе 2 электрона с одинаковыми спинами;
- 3) в системе 2 электрона со спином вверх и 1 электрон со спином вниз;
- 4) в системе 2 электрона со спином вверх и 2 электрона со спином вниз.

При тех же условиях сделать замену $t \rightarrow -t$. Сравнить спектры.

5.8. Построить гамильтонову матрицу для системы из 8 узлов с периодическими граничными условиями, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{\langle ij \rangle} n_{i\sigma} n_{j\sigma'}$$

Рассмотреть ситуацию, когда в системе 4 электрона со спином вверх и 4 электрона со спином вниз. Рассчитать зависимость энергии основного состояния, а также корреляторов

$$\langle a_{i\sigma}^+ a_{i+1,\sigma} \rangle_0 \equiv \langle \varphi_0 | a_{i\sigma}^+ a_{i+1,\sigma} | \varphi_0 \rangle, \quad \langle n_{i\sigma} n_{i+1,\sigma} \rangle_0 \equiv \langle \varphi_0 | n_{i\sigma} n_{i+1,\sigma} | \varphi_0 \rangle,$$

$$\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle_0 \equiv \langle \varphi_0 | n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} | \varphi_0 \rangle, \text{ где } \varphi_0 \text{ – собственная функция гамильтониана, отвечающая}$$

основному состоянию, в зависимости от параметров U/t и V/t . Построить трехмерные графики этих зависимостей (по осям x и y отложить параметры U/t и V/t , по оси z – рассчитанные значения энергии и корреляторов).

5.9. Построить узельный базис для системы из 8 узлов и произвольным числом частиц с ферми-статистикой без учета спина. Сгруппировать базисные состояния в блоки, каждый из которых отвечает определенному числу частиц. В этом базисе построить гамильтонову матрицу для системы с периодическими граничными условиями, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t \sum_i (a_i^\dagger a_{i+1} + a_i^\dagger a_{i-1}) + U \sum_i n_i,$$

$t = 1$; $U = 2$. Нарисовать портрет матрицы. Убедиться, что матрица имеет блочно-диагональный вид.

6. Бозе-статистика. Модель Бозе – Хаббарда

6.1. Вторичное квантование в случае статистики Бозе

Рассмотрим теперь проблемы, возникающие при исследовании систем с симметричной волновой функцией и отсутствием принципа Паули, т.е. случай **статистики Бозе – Эйнштейна**, применительно к вторичному квантованию. Заметим, что бозе-частицы обладают **целочисленным** спином (в частности, нулевым), и при низких температурах поведение бозе-системы принципиально отличается от поведения ферми-системы.

Достаточно хорошо исследован случай делокализованных бозе-частиц, когда хорошим квантовым числом является импульс p . Этот подход справедлив при исследовании таких бозе-систем, как газ **фотонов** – квантов электромагнитного поля, или **фононов** – квантов колебаний кристаллической решетки. Однако существует большое число систем с бозонными степенями свободы, где такой подход некорректен. Одной из таких систем является сверхтекучий гелий в пористых материалах, в этой системе реализуются фазовые переходы "сверхтекучесть – бозе-стекло – изолятор" даже при нулевой температуре при изменении параметра взаимодействия. В этом случае состояния бозонов сильно локализованы, привязаны к подложке (молекулам пористой среды), и хорошим описанием системы становится узельное представление. Другой пример – экситонные возбуждения (комбинация электрона и дырки) в твердом теле в условиях сильного электрон-фононного взаимодействия, когда характерный размер этого возбуждения мал, и можно использовать номер узла как хорошее квантовое число. Именно такие модели и будут рассмотрены в этой главе.

Бозоны отличаются от ферми-частиц отсутствием запретов на числа заполнения узлов. Например, фоковский базис для трех частиц на четырех узлах будет таким:

$$\begin{aligned}
\Phi_1 &= |0003\rangle; \Phi_2 = |0012\rangle; \Phi_3 = |0021\rangle; \Phi_4 = |0030\rangle; \\
\Phi_5 &= |0102\rangle; \Phi_6 = |0111\rangle; \Phi_7 = |0120\rangle; \Phi_8 = |0201\rangle; \\
\Phi_9 &= |0210\rangle; \Phi_{10} = |0300\rangle; \Phi_{11} = |1002\rangle; \Phi_{12} = |1011\rangle; \\
\Phi_{13} &= |1020\rangle; \Phi_{14} = |1101\rangle; \Phi_{15} = |1110\rangle; \Phi_{16} = |1200\rangle; \\
\Phi_{17} &= |2001\rangle; \Phi_{18} = |2010\rangle; \Phi_{19} = |2100\rangle; \Phi_{20} = |3000\rangle.
\end{aligned} \tag{6.1}$$

Алгоритм формирования упорядоченного базиса для бозе системы был описан ранее (см. пример 5.1).

Размерность базиса бозе-системы существенно больше размерности системы с ферми-частицами при том же количестве частиц. Для бозе-системы размерность базиса равна

$$R = C_{N+m-1}^N = \frac{(N+m-1)!}{N!(m-1)!}, \tag{6.2}$$

где m – число узлов в системе, N – число частиц.

Доказательство. Для доказательства соотношения (6.2) рассмотрим N одинаковых шаров черного цвета, распределенных между m лунками, без ограничений заполнения каждой лунки. Число всевозможных способов размещения шаров по лункам и даст искомую размерность базиса.

Разбросаем шары случайным образом по лункам и условно разместим их на одной линии, сначала шары из первой лунки, затем из второй и т.д. Границы между разными лунками будем обозначать шарами белого цвета (рис. 6.1).



Рис. 6.1. Черные шары случайным образом распределены по лункам. Границы лунок обозначены белыми шарами

Таким образом, имеем расположенные в одну линию N черных и $m-1$ белых шаров, перемешанных случайным образом. Может оказаться, что между двумя белыми шарами нет черных, это означает отсутствие в соответствующей лунке черных шаров. Всего шаров $N+m-1$, число способов, которыми можно выбрать $m-1$ белых шаров (т.е. границ между лунками) из $N+m-1$ мест, и есть искомая величина, т.е. $R = C_{N+m-1}^{m-1} = C_{N+m-1}^N = \frac{(N+m-1)!}{N!(m-1)!}$.

Соответственно для системы из четырех частиц на трех узлах число состояний для частиц с бозе-статистикой и, для сравнения, с ферми-статистикой, будет равно

$$R_B = C_6^3 = \frac{6!}{3!3!} = 20;$$

$$R_F = C_4^3 = \frac{4!}{3!1!} = 4. \quad (6.3)$$

Волновая функция бозонов симметрична, так что при перестановке операторов знак не меняется. Коммутационные соотношения для операторов рождения и уничтожения бозе-частиц уже были выведены ранее (см. (4.66)):

$$a_i a_j^+ - a_j^+ a_i = \delta_{ij};$$

$$a_i^+ a_j^+ - a_j^+ a_i^+ = 0;$$

$$a_i a_j - a_j a_i = 0. \quad (6.4)$$

Правила действия операторов на узельные волновые функции следуют из соотношения

$$\langle 0 | (a_k)^n (a_k^+)^n | 0 \rangle = n!, \quad (6.5)$$

выведенного ранее (см. (4.67)), и из соответствующей нормировки волновой функции с n бозонами

$$\Psi_n = (n!)^{-1/2} (a_k^+)^n | 0 \rangle. \quad (6.6)$$

В отличие от ферми-статистики в данном случае порядок нумерации узлов не существен, так как операторы разных узлов коммутируют, и перестановка двух операторов, относящихся к разным узлам, не меняет знака выражения. В связи с этим далее в этом разделе, где это не оговорено особо, все операторы и числа заполнения подразумеваются для конкретного узла.

Рассмотрим действие оператора рождения на бозонную функцию:

$$a^+ \Psi_n = (n!)^{-1/2} a^+ (a^+)^n | 0 \rangle. \quad (6.7)$$

Получаем, таким образом, функцию с увеличенным на единицу количеством частиц, но с неправильной нормировкой. Восстановим ее:

$$\begin{aligned} (n!)^{-1/2} a^+ (a^+)^n |0\rangle &= \sqrt{n+1} ((n+1)!)^{-1/2} (a^+)^{n+1} |0\rangle = \\ &= \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Из (6.7) и (6.8) получаем следующее правило:

$$a^+ \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}. \quad (6.9)$$

Рассмотрим теперь действие оператора уничтожения на бозонную функцию и учтем коммутационные соотношения:

$$\begin{aligned} a \Psi_n &= (n!)^{-1/2} a (a^+)^n |0\rangle = (n!)^{-1/2} (a^+ a + 1) (a^+)^{n-1} |0\rangle = \\ &= (n!)^{-1/2} (a^+ a (a^+)^{n-1} + (a^+)^{n-1}) |0\rangle = \\ &= (n!)^{-1/2} (a^+ (a^+ a + 1) (a^+)^{n-2} + (a^+)^{n-1}) |0\rangle = \\ &= (n!)^{-1/2} ((a^+)^2 a (a^+)^{n-2} + 2(a^+)^{n-1}) |0\rangle = \dots = \\ &= (n!)^{-1/2} ((a^+)^m a (a^+)^{n-m} + m(a^+)^{n-1}) |0\rangle = \dots = \\ &= (n!)^{-1/2} n (a^+)^{n-1} |0\rangle. \end{aligned} \quad (6.10)$$

В последнем выражении в (6.10) выделяем функцию с уменьшенным на единицу числом частиц, правильно нормируем ее, и находим

$$a \Psi_n = \sqrt{n} \Psi_{n-1}. \quad (6.11)$$

Таким образом, оператор рождения увеличивает число частиц на единицу, а оператор уничтожения – уменьшает число частиц на единицу, при этом появляются множители, зависящие от чисел заполнения (их называют **бозевскими факторами**).

Заметим, что для операторов рождения и уничтожения получились в точности те же правила, как и для операторов в задаче о гармоническом осцилляторе (4.18) – (4.19).

Несколько примеров применения правил (6.9) и (6.11):

$$\begin{aligned} a_4^+ |002000\rangle &= \sqrt{0+1} |002100\rangle = \sqrt{1} |002100\rangle; \\ a_3^+ |104010\rangle &= \sqrt{4+1} |105010\rangle = \sqrt{5} |105010\rangle; \\ a_2 |160010\rangle &= \sqrt{6} |150010\rangle; \quad a_3 |100000\rangle \equiv 0, \end{aligned} \quad (6.12)$$

т.е. при действии оператора уничтожения на функцию с нулевым заполнением получается тождественный нуль, а верхнего предела по заполнению нет; в силу коммутационных соотношений (6.4) операторы рождения и уничтожения меняются местами без изменения знака матричного элемента.

Так же, как и для фермионов, оператор числа частиц бозонов определяет их количество на узле:

$$a_i^+ a_i | \dots n_i \dots \rangle = n_i | \dots n_i \dots \rangle, \quad (6.13)$$

что сразу следует из (6.9) и (6.11).

6.2. Модель Бозе – Хаббарда

Для исследования систем с бозонными степенями свободы в приближении сильной связи была разработана бозонная модель Хаббарда, представляющая собой бозонный аналог фермионной модели Хаббарда [12]. Фактически в модели рассматриваются бозоны, находящиеся на некоторой пространственной решетке и сильно связанные с ней, которые туннелируют с узла на узел решетки и взаимодействуют между собой. Бозонная модель Хаббарда позволяет описывать протекание жидкого гелия по пористым каналам, системы джозефсоновских контактов в сверхпроводниках, экситонные возбуждения в полупроводниках и др. В последнее время интенсивно развиваются исследования атомарных газов щелочных металлов в магнитооптических ловушках. Удалось получить бозонный газ при чрезвычайно низких температурах ($\sim 10^{-9} \div 10^{-7}$ К) и высоких плотностях и наблюдать **бозе-конденсацию** таких систем. Более того, при внесении в эту систему стоячих поперечных электромагнитных волн получается пространственная оптическая решетка, т.е. для бозонов строится периодический потенциал с центрами в пучностях волн, так что экспериментально формируется решеточный бозонный газ с контролируемым видом решетки и взаимодействия [13].

Гамильтониан бозонной модели Хаббарда имеет следующий вид:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j + \text{h.c.}) + \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j, \quad (6.14)$$

где a_i^\dagger (a_i) – операторы рождения (уничтожения) бозона на узле i ; t – матричный элемент перескока бозонов на соседние узлы, имеющий абсолютно тот же физический смысл, как и в модели сильной связи для фермионов; U – энергия отталкивания бозонов на узле, $U > 0$; V – энергия взаимодействия бозонов на соседних узлах; $n_i = a_i^\dagger a_i$, $0 \leq n_i \leq N$, N – число бозонов в системе.

Второе слагаемое в (6.14), описывающее взаимодействие бозонов на одном узле, выбрано в таком виде, чтобы правильно отражать физическую картину on-site-взаимодействия: в отсутствие частиц на узле или при однократном заполнении узла вклад в энергию от этого взаимодействия отсутствует. При двукратном заполнении узла получаем добавку U к полной энергии, при заполнении $n = 3$ добавка будет $3U$, при $n = 4$, соответственно, $6U$, и т.д., т.е. перебираются всевозможные пары частиц, и вклад от каждой пары равен U (рис. 6.2). Если рассматриваются заряженные бозоны, то природа взаимодействия – кулоновская, если бозоны нейтральны (как, например, атомы гелия), то причиной взаимодействия может быть потенциал Леннарда – Джонса и т.д. Для дальнейшего изложения природа межчастичного взаимодействия будет несущественна.

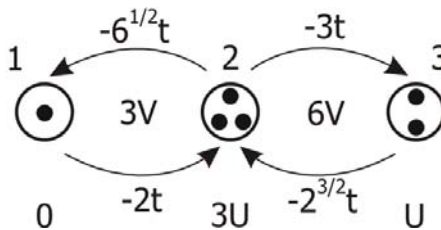


Рис. 6.2. Матричные элементы для гамильтониана (6.14) в случае системы из трех узлов и шести частиц

Так же, как и в случае фермионной модели Хаббарда, можно показать, что замена знака перескока на противоположный не меняет спектра, если перескоки бозонов осуществляются только на соседние узлы решетки. Можно использовать такой же ход рассуждения, но следует перед этим доказать для бозе-статистики справедливость операторного тождества

$$e^{-i\varphi a_i^\dagger a_i} a_i e^{i\varphi a_i^\dagger a_i} = a_i e^{i\varphi}. \quad (6.15)$$

Задача 6.1. Доказать (6.15).

В дальнейшем для удобства отсчета спектра от дна зоны Бриллюэна амплитуду перескока будем полагать равной $-t$.

Даже в отсутствие взаимодействия на соседних узлах ($V = 0$) система, описываемая гамильтонианом (6.14), имеет богатую фазовую диаграмму и претерпевает фазовые переходы из сверхтекучего состояния в бозе-стекло или моттовский изолятор при изменении параметра t/U . Следует отметить важную особенность модели – существование фазовых переходов «сверхтекучесть – изолятор» даже в одномерном случае, в то время как в одномерной фермионной модели Хаббарда фазовые переходы отсутствуют.

В предельных случаях модель (6.14) переходит в спиновые модели. Например, при $U \rightarrow \infty$ она эквивалентна квантовой модели Гейзенберга со спином $1/2$.

При численном моделировании бозонных систем неизбежно приходится налагать ограничения на исходные модели, обусловленные особенностями численного расчета. Одним из наиболее употребительных ограничений является ограничение чисел заполнения на узлах, т.е.

$$n_i \leq N_{\max}, \quad (6.16)$$

где N_{\max} – максимальное заполнение на узле. Если узлы в системе неэквивалентны, то для каждого узла вводится свое максимальное заполнение. Величина N_{\max} выбирается из разумных физических соображений, например при сильном межчастичном отталкивании и малой концентрации частиц вероятность нахождения трех и более

бозонов на одном узле мала, и можно ограничиться $N_{\max} \sim 3 \div 4$ – такое ограничение практически не внесет погрешности в расчет; если взаимодействие не является слишком сильным, следует увеличить N_{\max} . Ограничение чисел заполнения существенно сокращает гильбертово пространство системы, что позволяет сформировать и диагонализировать гамильтонову матрицу на компьютере. В ряде случаев это приближение позволяет получить аналитические ответы, хотя **точного решения для бозонной модели Хаббарда (6.14) не существует**. В одномерной ситуации известны лишь уравнения ренормализационной группы (**ренорм-уравнения**), которые классифицируют критические точки фазовых переходов «сверхтекучесть – моттовский изолятор» [12, 14, 15], поэтому для этой модели (точнее, для этого класса моделей) важное значение приобретает **численный анализ**.

Ознакомимся далее с наиболее употребительными узельными бозонными моделями, используемыми при изучении реальных физических систем.

Рассмотрим предельный случай сильного взаимодействия на одном узле $U \rightarrow \infty$, что эквивалентно ограничению чисел заполнения $n_i \leq 1$. Тогда в гамильтониане (6.14) второе слагаемое пропадает. Такая модель называется **hard-core-моделью** или **бозонами с "жесткими сердцевинами"** (см., например, [16]):

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j + \text{h.c.}) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j; \quad n_i \leq 1. \quad (6.17)$$

Фактически в модели (6.17) введен запрет Паули – на одном узле не может быть больше одной частицы. Однако волновые функции в этой системе симметричны, и получается смешанная статистика – фермионы на одном узле, и бозоны – на разных узлах решетки. Иногда пишут следующие смешанные коммутационные соотношения для иллюстрации этого факта:

$$\begin{aligned} a_i a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i &= 0; \quad i \neq j; \\ a_i a_i^\dagger + a_i^\dagger a_i &= 1. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Заметим, что узельный базис для этого случая полностью совпадает с базисом для случая бесспиновых фермионов (алгоритм формирования этого базиса был приведен в примере 5.1), а действие операторов рождения и уничтожения на волновые функции также аналогично, за исключением отсутствия изменения знака при перестановке операторов из-за симметрии волновых функций. Таким образом, при формировании гамильтоновой матрицы для модели (6.17) можно пользоваться всеми рассмотренными правилами для бесспиновых фермионов, не учитывая антисимметрию.

Если ослабить запрет на числа заполнения и допустить двойное заполнение узлов, $n_i \leq 2$, то получаем первую из моделей **soft-core**-бозонов – так называемую **редуцированную бозонную модель Хаббарда** [17]. При формировании базиса необходимо учесть это ограничение. Например, фоковский базис для трех бозонов на четырех узлах будет следующим:

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= |0012\rangle; \Phi_2 = |0021\rangle; \Phi_3 = |0102\rangle; \Phi_4 = |0111\rangle; \\ \Phi_5 &= |0120\rangle; \Phi_6 = |0201\rangle; \Phi_7 = |0210\rangle; \Phi_8 = |1002\rangle; \\ \Phi_9 &= |1011\rangle; \Phi_{10} = |1020\rangle; \Phi_{11} = |1101\rangle; \Phi_{12} = |1110\rangle; \\ \Phi_{13} &= |1200\rangle; \Phi_{14} = |2001\rangle; \Phi_{15} = |2010\rangle; \Phi_{16} = |2100\rangle. \end{aligned} \quad (6.19)$$

При действии операторов на волновые функции следует учитывать это ограничение заполнения узлов, т.е.

$$a_i^\dagger |\dots n_{i-1} n_i n_{i+1} \dots\rangle \equiv 0 \text{ при } n_i = N_{\max}. \quad (6.20)$$

Дальнейшее ослабление ограничения чисел заполнения приведет в конце концов к **полной бозонной модели**, в которой отсутствует верхняя граница чисел заполнения.

6.3. Построение гамильтоновой матрицы

Рассчитаем матричные элементы от кинетической (первое слагаемое) и потенциальной (второе и третье слагаемые) энергии в бозонной модели (6.14). Рассмотрим сначала действие оператора из кинетической части:

$$a_i^+ a_j | \dots n_i \dots n_j \dots \rangle = \begin{cases} \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_j} | \dots (n_i + 1) \dots (n_j - 1) \dots \rangle, \\ \text{если } n_i < N_{\max}, n_j > 0; \\ 0, \text{ если } n_i = N_{\max}; \\ 0, \text{ если } n_j = 0. \end{cases} \quad (6.21)$$

Таким образом, при действии оператора кинетической энергии получаем недиагональные матричные элементы

$$\langle \dots (n_i + 1) \dots (n_j - 1) \dots | a_i^+ a_j | \dots n_i \dots n_j \dots \rangle = \sqrt{n_i + 1} \sqrt{n_j}. \quad (6.22)$$

Вклад в гамильтонову матрицу от потенциальной части (6.14) будет диагонален:

$$\begin{aligned} & \langle \Phi_m | \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j | \Phi_p \rangle = \\ & = \left(\frac{U}{2} \sum_i (n_i^{(p)} - 1) n_i^{(p)} + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i^{(p)} n_j^{(p)} \right) \delta_{mp}. \end{aligned} \quad (6.23)$$

Пример. 6.1. Рассмотрим формирование гамильтоновой матрицы модели (6.14) на конкретном примере.

Пусть есть система из трех периодически замкнутых узлов и двух частиц, описываемая гамильтонианом (6.14) с параметрами $t = -1$, $U = 2.4$, $V = 1.3$:

$$H = \sum_{i=1}^3 (-a_i^+ a_{i+1} - a_i^+ a_{i-1} + 1.3 n_i n_{i+1} + 1.3 n_i n_{i-1} + 1.2 (n_i - 1) n_i).$$

Узельный базис этой системы будет состоять из 6 функций:

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= |002\rangle; \Phi_2 = |011\rangle; \Phi_3 = |020\rangle; \\ \Phi_4 &= |101\rangle; \Phi_5 = |110\rangle; \Phi_6 = |200\rangle. \end{aligned}$$

Пользуясь (6.9) и (6.11), находим диагональные и недиагональные элементы матрицы и получаем:

$$H = \begin{pmatrix} 2.4 & -\sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 \\ -\sqrt{2} & 1.3 & -\sqrt{2} & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2} & 2.4 & 0 & -\sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & -1 & 0 & 1.3 & -1 & -\sqrt{2} \\ 0 & -1 & -\sqrt{2} & -1 & 1.3 & -\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{2} & -\sqrt{2} & 2.4 \end{pmatrix}.$$

Вне главной диагонали матричные элементы равны либо -1 , либо $-\sqrt{2}$, они получаются в результате действия первых двух слагаемых гамильтониана – его кинетической части. Множитель $\sqrt{2}$ получается всякий раз, когда бозон перемещается на уже занятый узел, что дает двойное заполнение и приводит к появлению этого бозевского фактора. На главной диагонали стоит вклад от взаимодействия – либо 1.3 при нахождении частиц на соседних узлах, либо 2.4, если на узле двойное заполнение.

Если теперь перейти к hard-core-бозонам при той же топологии кластера и том же числе частиц, то базис будет состоять всего из трех функций:

$$\Phi_1 = |011\rangle; \Phi_2 = |101\rangle; \Phi_3 = |110\rangle,$$

а гамильтонова матрица будет иметь следующий вид:

$$H = \begin{pmatrix} 1.3 & -1 & -1 \\ -1 & 1.3 & -1 \\ -1 & -1 & 1.3 \end{pmatrix}.$$

Здесь исчезли бозевские факторы в недиагональных элементах, а на главной диагонали исчез вклад от on-site-слагаемого, так как на одном узле уже не может находиться более одного бозона.

6.4. Аналитическое решение модели Бозе – Хаббарда без взаимодействия

В случае свободных бозе-частиц на решетке гамильтониан будет иметь вид

$$H = -t \sum_{\langle ik \rangle} (a_i^+ a_k + \text{h.c.}), \quad (6.24)$$

и можно, так же как в модели сильной связи (5.14), получить аналитический ответ и рассчитать спектр бозонов. Для этого следует перейти из узельного в импульсное представление:

$$\begin{aligned}
 a_j &= \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_k a_k e^{i\vec{k}\vec{R}_j}; \\
 a_j^+ &= \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_k a_k^+ e^{-i\vec{k}\vec{R}_j},
 \end{aligned}
 \tag{6.25}$$

здесь N_a – число узлов решетки.

Такое преобразование не меняет бозе-статистики, так как

$$\begin{aligned}
 a_k a_k^+ - a_k^+ a_k &= \frac{1}{N_a} \sum_{ij} (a_i a_j^+ - a_i^+ a_j) e^{i(\vec{k}'_j - \vec{k}'_i)} = \\
 &= \frac{1}{N_a} \sum_{ij} \delta_{ij} e^{i(\vec{k}'_j - \vec{k}'_i)} = \frac{1}{N_a} \sum_i e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{r}_i} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}.
 \end{aligned}
 \tag{6.26}$$

Следует отметить, что любое ограничение чисел заполнения сразу же нарушает это условие, т.е. **дальнейшие аналитические результаты справедливы только для полной бозонной модели.**

После подстановки (6.26) в (6.24) получаем гамильтониан в диагональном виде:

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k; \\
 \varepsilon_k &= \sum_j t_j e^{-i\vec{k}\vec{R}_j}; \quad t_j \equiv -t.
 \end{aligned}
 \tag{6.27}$$

Выражение для спектра системы получилось в точности совпадающим с выражением для спектра свободных ферми-частиц на решетке (5.16). Но тогда справедливо соотношение

$$\varepsilon_k = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)
 \tag{6.28}$$

для трехмерной простой кубической решетки. Опять получаем, что разрешенные значения энергии образуют зону шириной $2Zt$, при этом если все бозе-частицы собраны внизу зоны ($|k| \rightarrow 0$), например при низких температурах, то закон дисперсии будет близок к квадратичному:

$$\varepsilon_k \approx -2t \left(1 - \frac{k^2 a^2}{2} \right),
 \tag{6.29}$$

и эффективная масса частиц

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2ta^2}. \quad (6.30)$$

В бозе-системе не работает принцип Паули, и если температура равна нулю, ничто не мешает свободным частицам собраться на нижнем энергетическом уровне, для которого $k=0$. Таким образом, при нулевой температуре энергия основного состояния

$$E_{(0)} = -2tN, \quad (6.31)$$

где N – полное число частиц.

Еще раз отметим, что результат (6.28) **не будет справедлив** для бозонов с ограничением чисел заполнения, так как новые операторы в импульсном представлении a_k^+, a_k уже не будут обладать бозевскими коммутационными соотношениями, и нельзя будет рассчитать многочастичные уровни в соответствии с правилами (6.9) и (6.11).

Рассмотрим в качестве примера периодически замкнутую систему из трех узлов и трех частиц, описываемую гамильтонианом (6.24). Одночастичный спектр системы

$$\varepsilon_k = -2t \cos(ka) \quad (6.32)$$

в этом случае имеет вид:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= -2t \cos(0) = -2t; \\ \varepsilon_{2,3} &= -2t \cos \frac{2\pi}{3} = t. \end{aligned} \quad (6.33)$$

В основном состоянии все частицы занимают нижний уровень (рис. 6.3), состояние является невырожденным, и его энергия

$$E_{(0)} = 3\varepsilon_1 = -6t = -2Nt. \quad (6.34)$$

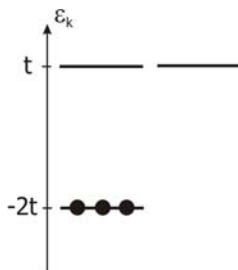


Рис. 6.3. Основное состояние системы из трех свободных бозе-частиц на решетке из трех узлов

Следующее, первое возбужденное состояние, будет двукратно вырождено по импульсу (рис. 6.4), и его энергия

$$E_{(1)} = 2\varepsilon_1 + \varepsilon_{2,3} = -3t. \quad (6.35)$$

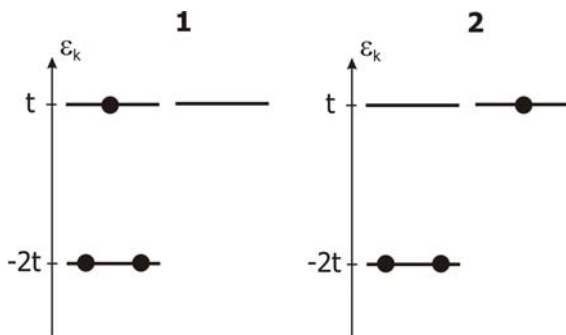


Рис. 6.4. Первое возбужденное состояние системы из трех свободных бозе-частиц на решетке из трех узлов двукратно вырождено

Далее несложно рассчитать весь спектр с учетом вырождения.

Для моделей с ограничением чисел заполнения, как уже отмечалось, аналитически строго рассчитать спектр невозможно. Тем не менее, при достаточно больших N_{\max} результаты будут приближаться к аналитическим ответам. Например, что для одномерной периодической системы из шести узлов и четырех свободных частиц энергия основного состояния в зависимости от ограничения чисел заполнения меняется следующим образом:

$$\begin{aligned}
N_{\max} = 4 &\Rightarrow E_0 = -8t; \\
N_{\max} = 3 &\Rightarrow E_0 = -7.969t; \\
N_{\max} = 2 &\Rightarrow E_0 = -7.551t; \\
N_{\max} = 1 &\Rightarrow E_0 = -3.464t.
\end{aligned}
\tag{6.36}$$

Видно, что только случай "hard-core" резко отличается по энергии от остальных значений, которые достаточно близки к результату для полной модели $E_0 = -8t$. Введение ограничения чисел заполнения эквивалентно появлению некоторого эффективного on-site-отталкивания на узле, которое сдвигает вверх уровни энергии.

Расчет квантовых средних, таких, как среднее число частиц на узле $\langle n_i \rangle$, корреляционная функция плотность-плотность $\langle n_i n_j \rangle$ и др. в бозонной модели Хаббарда проводится точно так же, как и для фермионных моделей, отличие лишь в правилах действия операторов рождения и уничтожения (6.9), (6.11).

6.5. Инварианты в модели Бозе – Хаббарда

Все обсуждаемые выше примеры систем с бозе-статистикой рассматривались при фиксированном количестве частиц. Это возможно лишь в том случае, если полное число частиц является **инвариантом** модели.

Как и в случае фермионной модели Хаббарда, гамильтониан модели Бозе – Хаббарда (6.14) коммутирует с оператором полного числа частиц,

$$\begin{aligned}
N &= \sum_i a_i^+ a_i; \\
[N, N] &= 0.
\end{aligned}
\tag{6.37}$$

Докажем соотношение (6.37). Рассмотрим коммутацию оператора числа частиц со слагаемым в кинетической части гамильтониана. Имеем:

$$\begin{aligned}
[H_k, N] &= [\sum_{ij} t_{ij} a_i^+ a_j, N] = \\
&= \sum_{ijk} [t_{ij} a_i^+ a_j, a_k^+ a_k] = \sum_{ijk} t_{ij} (a_i^+ a_j a_k^+ a_k - a_k^+ a_k a_i^+ a_j) = \\
&= \sum_{ijk} t_{ij} (a_i^+ (\delta_{jk} + a_k^+ a_j) a_k - a_k^+ a_k a_i^+ a_j) = \\
&= \sum_{ijk} t_{ij} (\delta_{jk} a_i^+ a_k + a_i^+ a_k^+ a_j a_k - a_k^+ a_k a_i^+ a_j) = \\
&= \sum_{ijk} t_{ij} (\delta_{jk} a_i^+ a_k + a_k^+ a_i^+ a_k a_j - a_k^+ a_k a_i^+ a_j) = \\
&= \sum_{ijk} t_{ij} (\delta_{jk} a_i^+ a_k + a_k^+ (-\delta_{ik} + a_k a_i^+) a_j - a_k^+ a_k a_i^+ a_j) = \\
&= \sum_{ijk} t_{ij} (\delta_{jk} a_i^+ a_k - \delta_{ik} a_i^+ a_j) \equiv 0.
\end{aligned} \tag{6.38}$$

Коммутативность оператора числа частиц с потенциальной частью гамильтониана (6.14) очевидна, так как эта часть состоит из суммы операторов числа частиц, и каждый член суммы коммутирует с оператором полного числа частиц N . Коммутируют с оператором N и слагаемые, пропорциональные n_i^2 , так как без труда доказывается коммутация любой степени операторов числа частиц:

$$\sum_i [n_i, (n_j)^k] = 0. \tag{6.39}$$

Таким образом, аналогично (5.63), если рассмотреть для модели (6.14) узельный базис с произвольным числом частиц, то гамильтонова матрица может быть представлена в блочном виде:

$$H = \left(\begin{array}{c|c|c} (N=1) & 0 & 0 \\ \hline 0 & (N=2) & 0 \\ \hline 0 & 0 & \dots \end{array} \right). \tag{6.40}$$

Каждый блок относится к состояниям с заданным числом частиц, и перекрытий между блоками нет.

Коммутативность гамильтониана с оператором числа частиц нарушается, если, например, рассматривать систему помещенной

во внешнее поперечное поле. В этом случае в гамильтониане появится дополнительное слагаемое, пропорциональное

$$\sum_i (a_i + a_i^+), \quad (6.41)$$

и число частиц в системе перестанет быть инвариантом модели. Действительно, введение в оператор энергии члена вида (6.41) приведет к некоммутативности гамильтониана с оператором полного числа частиц и к несохранению количества частиц в системе. Это также понятно и из вида оператора, так как нечетное число операторов рождения (уничтожения) при действии на волновую функцию переводит функцию с N частицами в блок функций с $N \pm 1$ частицами.

6.6. Градиентно-инвариантная фаза. Токовые состояния

Квантовые системы, исследуемые в реальных экспериментах, очень часто находятся во внешних магнитных и электрических полях, поэтому проблемы, связанные с изучением токовых состояний, учетом наведенного магнитного потока и т.п., очень актуальны. В этом разделе рассмотрены способы учета внешнего тока и поля в квантовых задачах, решаемых численными методами. Этот вопрос удобно изучать на примере решеточных бозонов, хотя результаты этого раздела будут справедливы и для фермионных, и для спиновых систем (спиновые системы рассматриваются в гл. 9).

Пусть есть периодическая система атомов, по которым двигаются частицы. Будем полагать для определенности, что рассматриваемый кластер – это либо одномерная цепочка длиной L_x , либо двумерная плоскость размерами L_x, L_y , либо трехмерная система размерами L_x, L_y, L_z .

Предположим, что в систему введен внешний магнитный поток, описываемый векторным потенциалом $\vec{A}(x, y, z)$, и по системе циркулирует ток. Пусть ток и векторный потенциал направлены

вдоль оси x , т.е. $\vec{A}(x, y, z) = -By\vec{e}_x$, $\vec{B} = B\vec{e}_z$ – магнитное поле, параллельное оси z . В такой геометрии автоматически справедлива калибровка Лоренца $\text{div}\vec{A} = 0$.

Рассмотрим многочастичную задачу Шредингера, учитывая векторный потенциал. В общем случае в координатном представлении имеем:

$$\frac{1}{2m} \sum_j \left[\left(\frac{\hbar}{i} \nabla_j - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_j) \right)^2 + V(\vec{r}_j) \right] \Psi + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \Psi = E\Psi. \quad (6.42)$$

Здесь V – внешнее поле, U – межчастичное взаимодействие, которые далее полагаем зависящими только от модулей расстояний, Ψ – многочастичная волновая функция. Граничные условия выбираем периодическими по каждой из координат:

$$\begin{aligned} \Psi(\dots, x_j + L_x, \dots) &\equiv \Psi(\dots, x_j, \dots); \\ \Psi(\dots, y_j + L_y, \dots) &\equiv \Psi(\dots, y_j, \dots). \end{aligned} \quad (6.43)$$

Векторный потенциал можно представить как градиент скалярной величины χ – фазы и связать его с магнитным потоком Φ , пронизывающим систему:

$$\begin{aligned} \vec{A} &= \frac{\hbar c}{e} \nabla \chi; \\ \oint \vec{A} d\vec{l} &= \iint \vec{B} d\vec{S} = \frac{\hbar c}{e} \Delta \chi = \Phi. \end{aligned} \quad (6.44)$$

Полный магнитный поток пропорционален разности фаз $\Delta\chi$ при обходе системы по контуру вдоль оси x .

Сделаем следующую замену:

$$\Psi = \Psi' e^{i\chi}, \quad (6.45)$$

и перепишем уравнение Шредингера и граничные условия:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \sum_j \left[\left(\frac{\hbar}{i} \nabla_j \right)^2 + V(\vec{r}_j) \right] \Psi' + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \Psi' &= E\Psi'; \\ \Psi'(\dots, x_j + L_x, \dots) &= \Psi'(\dots, x_j + L_x, \dots) e^{-i\Delta\chi}; \\ \Psi'(\dots, y_j + L_y, \dots) &= \Psi'(\dots, y_j + L_y, \dots). \end{aligned} \quad (6.46)$$

Следовательно, таким градиентным преобразованием волновой функции удается убрать векторный потенциал из уравнения Шредингера, но при этом появляется фазовый множитель в граничных условиях [18].

Из (6.42) и (6.45) – (6.46) следует, что для ввода в систему поля и тока достаточно на границе системы ввести фазовый множитель

$$e^{i\Delta\chi} = e^{i\frac{e}{\hbar c}\Phi} = e^{i\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0}}; \quad \Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{e}; \quad (6.47)$$

здесь Φ_0 – квант потока. Удобно магнитный поток отсчитывать в единицах этой величины. Таким образом, при вводе магнитного потока методом изменения граничных условий (6.47) вся система в тороидальной геометрии пронизывается магнитным полем. Более того, так как узлы системы эквивалентны, поток может быть введен **в любом месте** и даже распределен равномерно или неравномерно вдоль замкнутого контура по оси x . При этом результаты расчета не изменятся, если равны циркуляция векторного потенциала и введенный в систему суммарный поток.

В частном случае системы, описываемой единой волновой функцией Ψ , квантово-механическое выражение для плотности тока, переносимого частицами системы массы m и заряда e , имеет следующий вид:

$$\bar{j} = \frac{e}{2m} (\Psi^* P \Psi + \text{h.c.}) = \frac{e\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{e^2}{mc} |\Psi|^2 \bar{A}, \quad (6.48)$$

здесь $P = \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \bar{A}$ – оператор обобщенного импульса. Первая часть выражения (6.48) для тока – парамагнитный вклад, приводящий к усилению магнитного поля в среде, вторая – диамагнитный, приводящий к экранировке внешнего поля. Ток, циркулирующий в системе, зависит от волновой функции и векторного потенциала, при этом если градиенты волновой функции малы (мал парамагнитный вклад), то ток и векторный потенциал просто пропорциональны друг другу:

$$\bar{j} \cong -\frac{e^2}{mc} |\Psi|^2 \bar{A} = -\frac{e\hbar}{m} \nabla \chi |\Psi|^2. \quad (6.49)$$

Последнее соотношение справедливо, например, в сверхпроводниках, и приводит к объяснению эффекта выталкивания индукции магнитного поля из объема массивного сверхпроводника – **эффект Мейсснера – Оксенфельда** [19, 20].

Таким образом, для описания системы во внешнем магнитном поле и в присутствии тока следует внести магнитный поток Φ либо на границе, либо распределить его вдоль заданного контура.

Рассмотрим теперь модель Бозе – Хаббарда (6.14) во внешнем магнитном поле. Введем распределенный поток так, чтобы при движении частицы вдоль оси x при каждом перемещении с узла на узел добавлялась определенная часть циркуляции векторного потенциала. Кинетическая часть гамильтониана при градиентном преобразовании волновой функции преобразуется следующим образом:

$$t_{ij}(A) = \int \Psi_i^* \frac{\left(p - \frac{e}{c} \bar{A} \right)^2}{2m} \Psi_j d^3r \Rightarrow \quad (6.50)$$

$$\Rightarrow \int (\Psi_i')^* \frac{p^2}{2m} \Psi_j' d^3r = \int d^3r \Psi_i^* \frac{p}{2m} \Psi_j e^{-iz(\tau_i) + iz(\tau_j)} = t_{ij} e^{i(\chi_j - \chi_i)}.$$

Появляется фазовый множитель с разностью фаз конечного и начального состояния в показателе экспоненты [21]. В общем случае, при перескоке частицы с узла i на узел j следует записать следующее слагаемое:

$$a_i^+ a_j \Rightarrow a_i^+ a_j \exp\left(\frac{2\pi i}{\Phi_0} \int_i^j \bar{A} d\bar{l} \right). \quad (6.51)$$

Очевидно, этот фазовый множитель появляется из-за градиентной перенормировки волновой функции. Если движение частицы перпендикулярно контуру обхода (т.е. перпендикулярно оси x), то интеграл в экспоненте равен нулю, т.е. при любых движениях частицы по системе в (6.51) учитывается только проекция этого движения на ось x . Прыжки частицы туда и обратно вдоль оси x будут давать вклады с противоположными по знаку фазами, так что гамильтониан будет эрмитовым, и его кинетическая часть примет следующий вид:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^+ a_j \exp \left(\frac{2\pi i}{\Phi_0} \int_i^j \vec{A} d\vec{l} \right). \quad (6.52)$$

Если положить, что фаза монотонно наращивается при движении частицы вдоль оси x , т.е. векторный потенциал $\vec{A} = \Phi \frac{\vec{e}_x}{L_x}$ постоянен и, следовательно, интеграл в фазовом множителе в (6.52) одинаков для ближайших соседей, то для случая кубической симметрии или тороидальной геометрии имеем:

$$H = -t \sum_i \left(a_i^+ a_{i+\vec{e}_x} e^{\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x}} + a_{i+\vec{e}_x}^+ a_i e^{-\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x}} \right) - t \sum_i (a_i^+ a_{i+\vec{e}_y} + a_{i+\vec{e}_y}^+ a_i) - \\ - t \sum_i (a_i^+ a_{i+\vec{e}_z} + a_{i+\vec{e}_z}^+ a_i) + \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j. \quad (6.53)$$

После формирования гамильтоновой матрицы получаем задачу на собственные значения эрмитовой матрицы. Недиagonальные матричные элементы, возникшие из-за движения вдоль направления x , будут иметь фазовый множитель, зависящий от введенной в систему градиентной фазы. Получившиеся в результате диагонализации собственные значения также будут зависеть от Φ .

Можно задать другое распределение векторного потенциала, положив его нулю везде, кроме границы $(L_x, y, z) \leftrightarrow (1, y, z)$. При прохождении границы полагаем, что

$$a_{L_x, y, z}^+ a_{1, y, z} \Rightarrow a_{L_x, y, z}^+ a_{1, y, z} e^{\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0}}; \quad (6.54) \\ a_{1, y, z}^+ a_{L_x, y, z} \Rightarrow a_{1, y, z}^+ a_{L_x, y, z} e^{-\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0}}.$$

Таким образом, всю фазу можно учитывать только на границе, перпендикулярной оси x , и результаты расчета от этого не изменятся. В частном случае, если $\Phi = \frac{\Phi_0}{2}$, т.е. в систему введена половина кванта потока, что эквивалентно разности фаз $\Delta\chi = \pi$,

задача может быть решена **в действительных числах**, так как в этой ситуации

$$\begin{aligned} a_{L_x, Y, Z}^+ a_{1, Y, Z} &\Rightarrow -a_{L_x, Y, Z}^+ a_{1, Y, Z}^* \\ a_{1, Y, Z}^+ a_{L_x, Y, Z} &\Rightarrow -a_{1, Y, Z}^+ a_{L_x, Y, Z}^* \end{aligned} \quad (6.55)$$

Оператор тока в узельном представлении имеет вид [21]:

$$j_x = -\frac{\partial H}{\partial A_x} = \left(\frac{ite}{\hbar c} \right) \sum_i \left(a_i^+ a_{i+\bar{e}_x} e^{\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x}} - a_{i+\bar{e}_x}^+ a_i e^{-\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x}} \right), \quad (6.56)$$

для малых Φ получаем:

$$j_x|_{\Phi \rightarrow 0} = \frac{ite}{\hbar c} \left(\sum_i (a_i^+ a_{i+\bar{e}_x} - a_{i+\bar{e}_x}^+ a_i) + \frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x} \sum_i (a_i^+ a_{i+\bar{e}_x} + a_{i+\bar{e}_x}^+ a_i) \right). \quad (6.57)$$

В отсутствие фазы ток равен нулю (первое слагаемое в (6.57) при усреднении дает нуль, так как направления вдоль и против оси x эквивалентны), а при наличии магнитного поля напрямую зависит от введенного магнитного потока.

Рассмотрим теперь зависимость энергии системы свободных частиц на решетке от введенного магнитного потока. Возьмем для расчета вариант с равномерно распределенным векторным потенциалом:

$$\begin{aligned} H = & -t \sum_i \left(a_i^+ a_{i+\bar{e}_x} e^{\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x}} + a_{i+\bar{e}_x}^+ a_i e^{-\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x}} \right) - \\ & - t \sum_i (a_i^+ a_{i+\bar{e}_y} + a_{i+\bar{e}_y}^+ a_i) - t \sum_i (a_i^+ a_{i+\bar{e}_z} + a_{i+\bar{e}_z}^+ a_i); \quad \sum_i \equiv \sum_{x, y, z} \end{aligned} \quad (6.58)$$

Применим фурье-преобразование в следующем виде:

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y L_z}} \sum_{k_x, k_y, k_z} a_k e^{i(k_x x_j + k_y y_j + k_z z_j)}. \quad (6.59)$$

Подставив (6.59) в выражение для гамильтониана (6.58), получим:

$$\begin{aligned}
 H = -t \frac{1}{L_x L_y L_z} \sum_{\substack{k_x, k_y, k_z \\ k'_x, k'_y, k'_z \\ x_1, y_1, z_1}} a_k^+ a_k (T_x^+ + T_x^- + T_y^+ + T_y^- + T_z^+ + T_z^-); \\
 T_x^+ = e^{i \left(k_x (x_1 + e_x) - k'_x x_1 + (k_y - k'_y) y_1 + (k_z - k'_z) z_1 - \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0 L_x} \right)}; \\
 T_x^- = e^{i \left((k_x x_1 - k'_x (x_1 + e_x)) + (k_y - k'_y) y_1 + (k_z - k'_z) z_1 - \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0 L_x} \right)}; \\
 T_y^+ = e^{i \left((k_x - k'_x) x_1 + k_y (y_1 + e_y) - k'_y y_1 + (k_z - k'_z) z_1 \right)}; \\
 T_y^- = e^{i \left((k_x - k'_x) x_1 + k_y y_1 - k'_y (y_1 + e_y) + (k_z - k'_z) z_1 \right)}; \\
 T_z^+ = e^{i \left((k_x - k'_x) x_1 + (k_y - k'_y) y_1 + k_z (z_1 + e_z) - k'_z z_1 \right)}; \\
 T_z^- = e^{i \left((k_x - k'_x) x_1 + (k_y - k'_y) y_1 + k_z z_1 - k'_z (z_1 + e_z) \right)}.
 \end{aligned} \tag{6.60}$$

Учитывая, что

$$\delta_{k_x k'_x} = \frac{1}{L_x} \sum_x e^{i(k_x - k'_x)x}, \tag{6.61}$$

получаем:

$$\begin{aligned}
 H = -t \sum_{k_x k_y k_z} a_{k_x k_y k_z}^+ a_{k_x k_y k_z} \left(e^{i(k_x e_x + \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0 L_x})} + e^{-i(k_x e_x + \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0 L_x})} \right) - \\
 - t \sum_{k_x k_y k_z} a_{k_x k_y k_z}^+ a_{k_x k_y k_z} \left(e^{i k_y e_y} + e^{-i k_y e_y} \right) - \\
 - t \sum_{k_x k_y k_z} a_{k_x k_y k_z}^+ a_{k_x k_y k_z} \left(e^{i k_z e_z} + e^{-i k_z e_z} \right).
 \end{aligned} \tag{6.62}$$

Отсюда спектр системы

$$\varepsilon(k, \Phi) = -2t \left(\cos(k_x e_x + \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0 L_x}) + \cos(k_y e_y) + \cos(k_z e_z) \right). \tag{6.63}$$

Здесь e_x, e_y, e_z – модули векторов трансляции по соответствующим осям, равные периоду решетки в этих направлениях. Таким образом, получаем обычный одночастичный спектр в приближении сильной связи, только по направлению k_x появляется вклад от фазы [21]. Фактически все импульсы частиц

системы получили фазовый сдвиг в направлении приложенной фазы или внешнего тока (рис. 6.5).

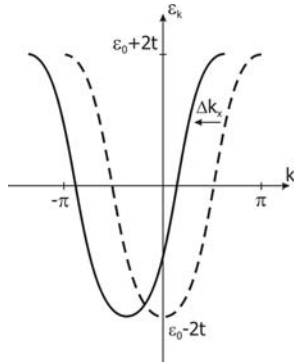


Рис. 6.5. Сдвиг спектра системы при учете градиентной фазы вдоль оси x ,
 $\Delta k = 2\pi\Phi / \Phi_0 L_x$

Перебирая одночастичные состояния, находим спектр всей системы.

Заметим, что все фазовые зависимости спектра, рассмотренные выше, **справедливы и для ферми-систем** [21].

Полная энергия системы, рассчитанная с учетом фазы, удовлетворяет условию периодичности по фазе

$$E_0(\Phi + \Phi_0) = E_0(\Phi). \quad (6.64)$$

Это свойство можно получить непосредственно из спектральной зависимости одночастичных состояний. Рассмотрим конкретный пример – одномерную систему из $N_a = L_x = 6$ узлов и $N = 3$ частиц. В отсутствие фазы разрешенные импульсы в этой системе будут (рис. 6.6)

$$k_0 = 0; k_{\pm 1} = \pm \frac{\pi}{3}; k_{\pm 2} = \pm \frac{2\pi}{3}; k_3 = \pi. \quad (6.65)$$

В случае конечного значения Φ все импульсы получают сдвиг, равный $\pi\Phi / 3\Phi_0$. Так как в основном состоянии все частицы имеют нулевой импульс, то

$$E_0 = -6t \cos\left(\frac{\pi}{3} \frac{\Phi}{\Phi_0}\right). \quad (6.66)$$

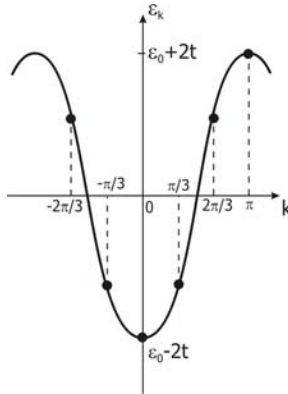


Рис. 6.6. Одночастичные состояния для свободных частиц на цепочке из шести узлов

Выражение (6.66) справедливо в интервале $0 \leq \frac{\Phi}{\Phi_0} \leq \frac{1}{2}$ до тех пор,

пока сдвиг импульсов не будет равен $\Delta k = 0.5 |k_{-1} - k_0| = \frac{\pi}{6}$. В

случае дальнейшего возрастания фазы минимальная разрешенная одночастичная энергия будет отвечать не импульсу k_0 , а импульсу k_{-1} (рис. 6.7), все частицы перейдут на этот уровень, и энергия основного состояния станет равной

$$E_0 = -6t \cos\left(\frac{\pi}{3}\left(1 - \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\right). \quad (6.67)$$

Далее при достижении значения $\Phi = \Phi_0$ ситуация повторится. Получаем, таким образом, периодическую зависимость $E_0(\Phi)$ с периодом Φ_0 (рис. 6.8).

Ток в системе также будет периодичен:

$$J = -\frac{\partial E}{\partial \Phi} = \begin{cases} -\frac{2\pi t}{\Phi_0} \sin\left(\frac{\pi\Phi}{3\Phi_0}\right); & 0 \leq \Phi \leq \frac{\Phi_0}{2}; \\ \frac{2\pi t}{\Phi_0} \sin\left(\frac{\pi}{3}\left(\frac{\Phi}{\Phi_0} - 1\right)\right); & \frac{\Phi_0}{2} \leq \Phi \leq \Phi_0. \end{cases} \quad (6.68)$$

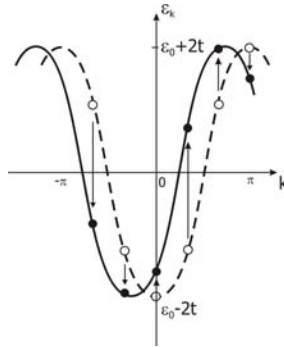


Рис. 6.7. Сдвиг энергетических уровней при градиентном преобразовании

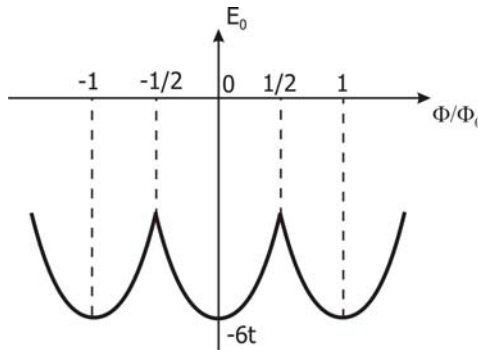


Рис. 6.8. Зависимость энергии основного состояния от фазы (6.66) – (6.67)

Подобные зависимости имеют место и для других физических величин в различных невзаимодействующих системах, в том числе и с ферми-статистикой.

В термодинамическом пределе, при $N_a \rightarrow \infty, L_x \rightarrow \infty$, для невзаимодействующего бозе-газа можно получить следующую зависимость энергии основного состояния от фазы:

при $0 \leq \frac{\Phi}{\Phi_0} \leq \frac{1}{2}$ заполнены только состояния с нулевым импульсом, поэтому

$$\begin{aligned}
 E_0(\Phi) &= \sum_k \varepsilon_k \langle n_k \rangle \Big|_{k=k_0} = -2tN \cos\left(\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0 L_x}\right) \Big|_{L_x \rightarrow \infty} = \\
 &= -2tN \left(1 - 2\left(\frac{\pi\Phi}{\Phi_0 L}\right)^2\right) = E_0(0) + 4t\pi^2 N \frac{(\Phi/\Phi_0)^2}{L_x^2};
 \end{aligned}
 \tag{6.69}$$

при $\frac{1}{2} \leq \frac{\Phi}{\Phi_0} \leq 1$ заполнены только состояния с импульсом $k = k_{-1}$,

поэтому

$$\begin{aligned}
 E_0(\Phi) &= \sum_k \varepsilon_k \langle n_k \rangle \Big|_{k=k_{-1}} = -2tN \cos\left(\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0 L_x} - \frac{2\pi}{L_x}\right) \Big|_{L_x \rightarrow \infty} = \\
 &= -2tN \left(1 - 2\frac{\pi}{L} \left(1 - \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2\right) = E_0(0) + 4t\pi^2 N \frac{(1 - \Phi/\Phi_0)^2}{L_x^2}.
 \end{aligned}
 \tag{6.70}$$

Последнее слагаемое в (6.69) и (6.70) – вклад фазы или токовое слагаемое, оно зависит от размерности системы. В трехмерной ситуации оно расходится пропорционально линейному размеру системы L с ростом L , так как при $N/N_a \rightarrow \text{const}$ имеем, что $N_a = L_x L_y L_z \sim L_x^3$; в двумерной ситуации $N_a = L_x L_y \sim L_x^2$ оно выходит на постоянное значение, а в одномерном случае спадает пропорционально $1/L$, так как $N_a = L_x$.

Периодичность энергии и любых других характеристик системы **существует даже при наличии взаимодействия между частицами**. Покажем это.

Из (6.46) и (6.47) следует, что при сдвиге разности фаз $\Delta\chi$ на 2π волновая функция не меняется, т.е. любые решения уравнения Шредингера и любые квантово-механические средние должны быть периодическими функциями Φ с периодом Φ_0 .

Далее энергия и термодинамические функции системы являются четными функциями Φ . Это следует из (6.46), так как замена $\Phi \rightarrow -\Phi$ эквивалентна изменению направления оси x . Таким

образом, вид любой термодинамической функции, в частности логарифма статистической суммы

$$Z = \sum_n e^{-E_n/T} \quad (6.71)$$

как функции Φ , качественно будет такой, как показано на рис. 6.9 (заметим, что зависимость, показанная на рис. 6.9, согласуется с точным решением (6.67) в пределе $T \rightarrow 0$, когда $F = -T \ln Z \rightarrow E$).

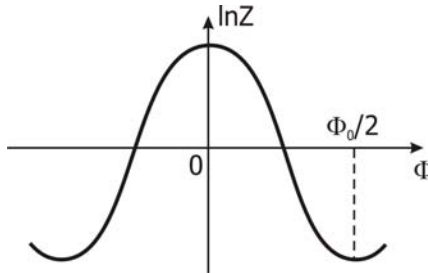


Рис. 6.9. Качественная зависимость логарифма статистической суммы от фазы

Более того, можно показать, что в идеальной, без диссипации энергии, макроскопической системе реализуются только те значения магнитного потока, которые кратны кванту Φ_0 , т.е. имеет место **квантование магнитного потока** [18]:

$$\Phi = n\Phi_0, \quad n - \text{целое.} \quad (6.72)$$

Действительно, в идеальной системе в равновесии и в отсутствие внешних токов парамагнитная часть (6.48) полностью компенсирует диамагнитную, т.е. суммарный объемный ток будет равен нулю. С другой стороны, известно, что суммарный ток есть термодинамическая производная от свободной энергии по фазе, т.е.

$$J = -\frac{\partial F}{\partial \Phi} = \frac{T \partial \ln Z}{\partial \Phi}. \quad (6.73)$$

Отсюда следует, что в термодинамическом пределе в равновесии реализуются только экстремальные значения Φ , которые соответствуют условию

$$\frac{\partial F}{\partial \Phi} = 0. \quad (6.74)$$

Из рис. 6.9 видно, что эти значения равны либо $\Phi = n\Phi_0$ – максимумы, либо $\Phi = (n + 1/2)\Phi_0$ – минимумы.

Для окончательного определения значения магнитного потока заметим, что идеальная система, в которой парамагнитный ток в объеме компенсируется диамагнитным откликом, все же является неустойчивой относительно преобладания диамагнитного вклада (как, например, в сверхпроводниках), обусловленного тенденцией к экранированию внешнего поля, которое (хотя бы слабое поле Земли) всегда имеет место в реальной ситуации, что в итоге приводит к отрицательной полной магнитной восприимчивости системы χ_M :

$$\chi_M = \frac{\partial M}{\partial \Phi} = -\frac{\partial^2 F}{\partial \Phi^2} = \frac{T}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \Phi^2} < 0, \quad (6.75)$$

в (6.75) учтено, что $\partial Z / \partial \Phi = 0$.

Полученное условие (6.75) означает, что среди всех экстремальных значений Φ только максимумы реализуются в зависимостях термодинамических величин, т.е. справедливо условие (6.71) квантования магнитного потока.

Отметим, что такое же квантование наблюдается при **эффekte Аронова – Бома** [22], характеризующем влияние внешнего электромагнитного поля, сосредоточенного в области, недоступной для заряженной частицы, на ее квантовое состояние. Также квантование магнитного потока наблюдается в **сверхпроводниках**, только в случае сверхпроводимости квант магнитного потока Φ_0 в два раза меньше, так как заряд пары электронов, переносящей сверхпроводящий ток, **куперовской пары**, в два раза больше: $2e$ [20].

На рис. 6.10 показаны результаты численного моделирования методом точной диагонализации редуцированной модели Бозе-Хаббарда (6.14) [30] с $n_{\max} = 2$. Приведена зависимость энергии основного состояния как функции фазы при различных значениях параметра взаимодействия U . Видно, что в области притяжения $U \sim -10$ квантование энергии соответствует кванту потока, в два

раза меньшему, чем при значениях $U > -5.5$, что соответствует переходу системы в состояние со спаренными частицами.

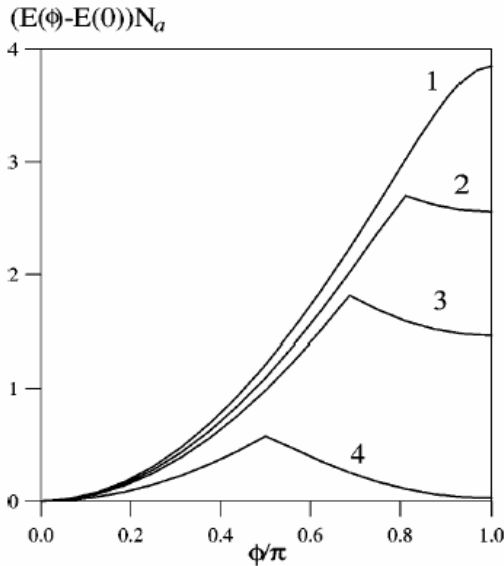


Рис. 6.10. Зависимость энергии основного состояния как функции фазы.
Точная диагонализация, число узлов $N_a = 12$:

1 – $U/t = -5.5$; **2** – $U/t = -6.0$; **3** – $U/t = -6.5$; **4** – $U/t = -10.0$

В заключение раздела отметим связь между приложенной фазой и симметрией волновой функции в одномерной ситуации.

Рассмотрим бесспиновые фермионы в одномерном случае при учете перескока только между ближайшими соседями и четным числом частиц. Покажем, что введение в этой системе антипериодических граничных условий эквивалентно "выключению" антисимметрии, т.е. переходу к статистике hard-core-бозонов.

Действительно, в случае ферми-статистики единственной ситуацией, которая приводит к изменению знака матричного элемента в гамильтоновой матрице при суммарном четном числе частиц, является "перескок" частицы из последнего узла на первый (или наоборот), соответствующий процессу $a_1^+ a_{N_a}$. Число

оставшихся заполненных узлов будет нечетным, так что множитель $(-1)^{\sum_{1 < k < N_a} n_k}$ всегда будет равен -1 .

Такое же действие оказывает введение в систему калибровочной фазы π (при этом $\Phi = \Phi_0/2$), если учесть фазу через границу явным множителем вида

$$a_{N_a}^+ a_1 \Rightarrow a_{N_a}^+ a_1 e^{\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0}}, \quad (6.76)$$

то при прохождении границы каждый раз будет меняться знак матричного элемента. Замена (6.76) в отсутствие взаимодействия приводит к сдвигу всех импульсов системы на величину $\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0 N_a}$.

Фактически это означает, что, меняя фазу от нуля до π , можно получить результаты как для ферми-системы, так и для бозе-системы. Отсюда в случае hard-core-бозонов можно аналитически получить расчет спектра, сводя его к ферми-ситуации с фазовым сдвигом π .

Строго говоря, **об определенном типе квантовой статистики в одномерной ситуации говорить нельзя**. Невозможность приведения одной квантовой статистики к другой появляется только при рассмотрении систем размерности $d \geq 2$. Даже в случае $d=2$ существует описание тождественных частиц, которые не являются ни фермионами, ни бозонами, имеют так называемую **энионную статистику** (anyon) и сцеплены с дробным квантом магнитного потока, значение которого и определяет симметрию волновой функции (впервые такое описание предложил Вилксек [23]).

Задачи

6.2. Написать программный код для создания узельного базиса для системы произвольного числа частиц со статистикой Бозе. Входными параметрами процедуры должны быть число узлов m в системе и максимальное заполнение на каждом узле n_{\max} , выходным параметром – упорядоченный массив базисных состояний, каждая строка которого отвечает базисной функции.

6.3. Написать программный код для создания узельного базиса для системы фиксированного числа частиц со статистикой Бозе. Входными параметрами процедуры должны быть число узлов m и число частиц N в системе, максимальное заполнение на каждом узле n_{\max} , выходным параметром – упорядоченный массив базисных состояний, каждая строка которого отвечает базисной функции.

6.4. Построить гамильтонову матрицу для системы из 6 узлов и 3 бозе-частиц, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t \sum_{i=1}^6 (a_i^+ a_{i+1} + a_i^+ a_{i-1}) + U \sum_{i=1}^6 n_i,$$

$t=1$; $U=2$; границы системы периодически замкнуты. Нарисовать портрет гамильтоновой матрицы (портрет матрицы – графическое представление матрицы, на котором отображаются только места ненулевых элементов; в MatLab портрет матрицы рисует функция "**spy**"). Получить спектр системы.

При тех же условиях решить задачу для нулевых граничных условий. Сравнить портреты и спектры матриц.

Ввести ограничение на заполнение узлов $n_{\max} = 2$. Построить и диагонализировать матрицу гамильтониана для периодических и нулевых граничных условий, сравнить спектры и портреты матриц.

6.5. Для системы из 6 узлов и 3 свободных бозе-частиц с гамильтонианом

$$H = - \sum_{i=1}^6 (a_i^+ a_{i+1} + a_i^+ a_{i-1})$$

построить гамильтонову матрицу и найти спектр системы. Сравнить спектр с точным аналитическим решением. Определить кратность вырождения уровней.

При тех же условиях ввести ограничение на заполнение узлов $n_{\max} = 2$ и получить спектр системы. Объяснить отличие этого спектра от спектра системы без ограничения на заполнение узлов.

6.6. Построить узельный базис для системы из 8 узлов и с произвольным числом частиц с бозе-статистикой, максимальное заполнения на каждом узле $n_{\max} = 2$. Сгруппировать базисные состояния в блоки, каждый из которых отвечает определенному числу частиц. В этом базисе построить гамильтонову матрицу для системы с периодическими граничными условиями, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t \sum_i (a_i^+ a_{i+1} + a_i^+ a_{i-1}) + U \sum_i n_i,$$

$t=1$; $U=2$. Нарисовать портрет матрицы. Убедиться, что матрица имеет блочно-диагональный вид.

6.7. Построить гамильтонову матрицу для системы из 6 узлов и 4 частиц, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t \sum_{i=1}^6 (a_i^+ a_{i+1} + a_i^+ a_{i-1}) + U \sum_{i=1}^6 n_i,$$

$t=1$; $U=2$; границы системы периодически замкнуты. Рассмотреть следующие случаи:

- 1) частицы с ферми-статистикой без учета спина;
- 2) частицы с бозе-статистикой с ограничением на заполнение узлов $n_{i\max} = 1$.

Рассчитать и сравнить спектры двух систем.

При тех же условиях рассмотреть ситуацию, когда в системах 3 частицы. Сравнить спектры.

6.8. Построить гамильтонову матрицу для системы из 6 узлов, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t \sum_{i=1}^6 (a_i^+ a_{i+1} + a_i^+ a_{i-1}) + U \sum_{i=1}^6 n_i (n_i - 1),$$

и рассчитать спектр системы для случаев, когда в системе 2; 3; 4 или 5 бозонов, в зависимости от параметра U/t . Построить графики зависимостей. Сравнить результаты с аналитическим решением в случае свободных частиц ($U=0$).

6.9. Построить гамильтонову матрицу для системы из 8 узлов с периодическими граничными условиями, гамильтониан которой имеет вид

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^+ a_j + U \sum_i n_i (n_i - 1) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j.$$

Рассмотреть ситуацию, когда в системе 4 бозе-частицы. Рассчитать зависимость энергии основного состояния, а также корреляторов $\langle a_i^+ a_{i+1} \rangle_0 \equiv \langle \varphi_0 | a_i^+ a_{i+1} | \varphi_0 \rangle$, $\langle n_i n_{i+1} \rangle_0 \equiv \langle \varphi_0 | n_i n_{i+1} | \varphi_0 \rangle$, $\langle n_i^2 \rangle_0 \equiv \langle \varphi_0 | n_i^2 | \varphi_0 \rangle$, где φ_0 – собственная функция гамильтониана, отвечающая основному состоянию, в зависимости от параметров U/t и V/t . Построить трехмерные графики этих зависимостей (по осям x и y отложить параметры U/t и V/t , по оси z – рассчитанные значения энергии и корреляторов).

7. Спиновые степени свободы

Рассмотрим теперь проблемы, возникающие при численном расчете систем со спиновыми степенями свободы. Актуальность этой задачи обусловлена современным состоянием эксперимента, так как в последнее время в связи с развитием нанотехнологий стало возможным получать разнообразные квантовые точки и кластеры из них, физические свойства таких систем с хорошей точностью описываются спиновыми состояниями электронов и ядерных спинов, находящихся в этих квантовых точках. Удаётся формировать магнитные макромолекулы – наномангниты из нескольких десятков спинов, локализованных в пространстве. Известны структуры в виде спиновых цепочек, плоскостей и сверхрешеток, обладающих гигантской спонтанной намагниченностью, квантованием суммарного магнитного момента и малыми временами релаксации и переключения из одной спиновой проекции в другую [24]. Перспективы разработки твердотельных элементов квантовых компьютеров связывают именно с такими системами [25]. Эти узельные системы также являются сильно взаимодействующими структурами, и получить точные аналитические результаты для них, как правило, не удастся. Также огромное число разнообразных макроскопических магнитных систем различной размерности, обладающих ферро-, антиферро- и ферримагнетизмом, исследуются экспериментально и теоретически. Численное исследование небольших магнитных кластеров, моделирующих эти системы, позволяет прогнозировать их свойства и объяснять экспериментальные данные, что часто недоступно для аналитических подходов.

7.1. Спиновые операторы и узельный базис

Причиной наличия магнитных степеней свободы у различных веществ являются некомпенсированные спины либо электронов на верхних орбиталях, либо ядер атомов. В первом случае

характерный масштаб магнитного момента электрона – магнетон Бора

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc}. \quad (7.1)$$

В единицах СГСМ $\mu_0 \sim 10^{-20}$. Во втором случае магнитный момент равен ядерному магнетрону, который примерно в 2000 раз меньше:

$$\mu_{\text{я}} = \frac{e\hbar}{2M_p c}, \quad (7.2)$$

здесь M_p – масса протона.

С точностью до гиромагнитного отношения квантовый оператор спина \vec{S} связан с соответствующим собственным магнитным моментом элементарной частицы:

$$\vec{\mu} = \mu_0 \vec{S} \quad \text{или} \quad \vec{\mu} = \mu_{\text{я}} \vec{S}. \quad (7.3)$$

При описании орбитального или другого движения оператор спина связан следующим образом с механическим моментом (моментом импульса):

$$\begin{aligned} \vec{M} &= \hbar \vec{S}; \\ \vec{M} &= [\vec{r}, \vec{p}]. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Далее под "оператором спина" будет пониматься необязательно спин, а также операторы механического или орбитального момента.

Обсудим далее некоторые свойства оператора спина.

Оператор спина $\vec{S} = \{S^X, S^Y, S^Z\}$ состоит из трех компонент-проекции. Рассмотрим пространственную решетку таких спинов, каждый из которых пронумерован согласно месту в этой решетке.

Получим коммутационные соотношения для оператора спина. Вывод этих соотношений непосредственно следует, например, из представления спина через момент импульса:

$$\vec{M} = [\vec{r}, \vec{p}] = \vec{i}(y p_z - z p_y) + \vec{j}(z p_x - x p_z) + \vec{k}(x p_y - y p_x). \quad (7.5)$$

Из (7.5) и коммутационных соотношений для компонент операторов импульса и координаты

$$[p_\alpha, \beta] = -i\hbar\delta_{\alpha\beta}; \quad \alpha, \beta = x, y, z \quad (7.6)$$

непосредственно следуют коммутационные соотношения для операторов спина. Для компонент оператора спина, относящихся к определенным узлам решетки j, j' , они выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} S_j^X S_{j'}^Y - S_{j'}^Y S_j^X &= i\delta_{jj'} S_j^Z; \\ S_j^Z S_{j'}^X - S_{j'}^X S_j^Z &= i\delta_{jj'} S_j^Y; \\ S_j^Y S_{j'}^Z - S_{j'}^Z S_j^Y &= i\delta_{jj'} S_j^X. \end{aligned} \quad (7.7)$$

Задача 7.1. Получить коммутационные соотношения (7.7).

Заметим, что два последних соотношения коммутации можно получить из первого циклической перестановкой компонент спина. Для совпадающих индексов $j = j'$ (7.7) можно записать в краткой форме:

$$[S^\alpha, S^\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S^\gamma; \quad \alpha, \beta, \gamma = x, y, z, \quad (7.8)$$

где $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ – единичный антисимметричный тензор третьего ранга.

Вспользуемся следствиями из коммутационных соотношений для вывода собственных значений оператора спина, формирования узельного базиса системы и конкретных правил действия операторов на базисные волновые функции.

Из (7.8) можно получить следующее соотношение коммутации для оператора квадрата спина для совпадающих индексов узлов (в дальнейшем, если индексы узлов у операторов не обозначены, они считаются совпадающими):

$$[S^\alpha, S^2] = [S^\alpha, S^X S^X + S^Y S^Y + S^Z S^Z] = 0. \quad (7.9)$$

Задача 7.2. Доказать коммутационные соотношения (7.9).

Видно, что оператор квадрата спина коммутирует с каждой из его компонент. Следовательно, для **какой-либо одной из проекций** оператора спина и оператора квадрата спина всегда имеется общая система собственных функций:

$$\begin{aligned} S^2 \Psi_{\gamma\mu} &= \gamma \Psi_{\gamma\mu}; \\ S^\alpha \Psi_{\gamma\mu} &= \mu \Psi_{\gamma\mu}. \end{aligned} \quad (7.10)$$

Здесь γ, μ – пока не известные собственные числа операторов S^2 и S^α соответственно.

Выделим одно из направлений, например направление z , и решим задачу (7.10) на собственные значения для пары операторов S^2 и S^Z .

Введем следующие вспомогательные операторы:

$$\begin{aligned} S^+ &= S^X + iS^Y; \\ S^- &= S^X - iS^Y. \end{aligned} \quad (7.11)$$

Пользуясь (7.7), несложно получить коммутационные соотношения для этих операторов:

$$\begin{aligned} [S_i^+, S_j^-] &= 2S_i^Z \delta_{ij}; \\ [S_i^Z, S_j^+] &= S_i^+ \delta_{ij}; \\ [S_i^Z, S_j^-] &= -S_i^- \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (7.11a)$$

Как будет видно из дальнейшего, тройка операторов S^Z, S^+, S^- с соответствующими коммутационными соотношениями (7.11a) более удобна для описания спиновых моделей, чем набор операторов S^X, S^Y, S^Z с коммутационными соотношениями (7.7).

Подействуем этими операторами на собственную волновую функцию $\Psi_{\gamma\mu}$:

$$\tilde{\Psi}_{\gamma\mu} = S^\pm \Psi_{\gamma\mu}. \quad (7.12)$$

Узнаем, каковы свойства у получившейся новой функции $\tilde{\Psi}_{\gamma\mu}$. Для этого подействуем на нее оператором S^Z :

$$\begin{aligned} S^Z S^\pm \Psi_{\gamma\mu} &= S^Z (S^X \pm iS^Y) \Psi_{\gamma\mu} = (S^X S^Z + iS^Y \pm i(S^Y S^Z - iS^X)) \Psi_{\gamma\mu} = \\ &= (S^X \pm iS^Y) (S^Z \pm 1) \Psi_{\gamma\mu} \equiv S^\pm (\mu \pm 1) \Psi_{\gamma\mu}. \end{aligned} \quad (7.13)$$

Таким образом, функции $\tilde{\Psi}_{\gamma\mu}$ являются собственными функциями оператора S^Z с собственными значениями $\mu \pm 1$. Нормировка этих функций пока неизвестна, можно только написать, что они пропорциональны соответствующим собственным функциям оператора S^Z :

$$\begin{aligned} S^+ \Psi_{\gamma\mu-1} &= A_{\mu} \Psi_{\gamma\mu}; \\ S^- \Psi_{\gamma\mu} &= B_{\mu} \Psi_{\gamma\mu-1}, \end{aligned} \quad (7.14)$$

здесь A, B – нормировочные множители. Из (7.14) видно, что оператор S^+ повышает, а оператор S^- понижает на единицу собственное число μ оператора S^Z , поэтому их можно рассматривать как **спиновые аналоги операторов рождения и уничтожения**, используемых в ферми- и бозе-статистиках.

Для определения нормировочных множителей и собственных чисел операторов S^+ и S^- заметим, что

$$A_{\mu}^* = (S^+ \Psi_{\gamma\mu-1}, \Psi_{\gamma\mu}) = (\Psi_{\gamma\mu-1}, S^- \Psi_{\gamma\mu}) = B_{\mu}. \quad (7.15)$$

Таким образом, нормировочные множители A и B могут отличаться друг от друга только фазовым множителем вида $e^{i\theta}$, где θ – действительное, и подбором θ можно добиться, чтобы нормировочные множители в (7.14) для обоих операторов совпадали и были действительными:

$$\begin{aligned} S^+ \Psi_{\gamma\mu-1} &= A_{\mu} \Psi_{\gamma\mu}; \\ S^- \Psi_{\gamma\mu} &= A_{\mu} \Psi_{\gamma\mu-1}. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Для собственных чисел оператора квадрата спина имеем:

$$\begin{aligned} \gamma &= (\Psi_{\gamma\mu}, (S_X^2 + S_Y^2 + S_Z^2) \Psi_{\gamma\mu}) = \\ &= \mu^2 + (\Psi_{\gamma\mu}, S_X^2 \Psi_{\gamma\mu}) + (\Psi_{\gamma\mu}, S_Y^2 \Psi_{\gamma\mu}). \end{aligned} \quad (7.17)$$

Два последних слагаемых в (7.17) выпишем отдельно и убедимся, что они неотрицательны:

$$\begin{aligned} (\Psi_{\gamma\mu}, S_X^2 \Psi_{\gamma\mu}) &= (S^X \Psi_{\gamma\mu}, S^X \Psi_{\gamma\mu}) \geq 0; \\ (\Psi_{\gamma\mu}, S_Y^2 \Psi_{\gamma\mu}) &= (S^Y \Psi_{\gamma\mu}, S^Y \Psi_{\gamma\mu}) \geq 0, \end{aligned} \quad (7.18)$$

так как норма любой функции неотрицательна. Отсюда следует, что

$$\gamma \geq \mu^2, \quad (7.19)$$

т.е. при каком-то определенном значении квадрата спина γ значения проекции спина на ось z ограничены как сверху, так и снизу. Положим μ_{\min} и μ_{\max} – наименьшее и наибольшее собственные значения. Тогда очевидны соотношения:

$$\begin{aligned} S^- \Psi_{\gamma^{\mu_{\min}}} &= 0; \\ S^+ \Psi_{\gamma^{\mu_{\max}}} &= 0. \end{aligned} \quad (7.20)$$

Из (7.7) и (7.11) имеем:

$$\begin{aligned} 0 = S^+ S^- \Psi_{\gamma^{\mu_{\min}}} &= (S^2 - S_Z^2 + S^Z) \Psi_{\gamma^{\mu_{\min}}} = (\gamma - \mu_{\min}^2 + \mu_{\min}) \Psi_{\gamma^{\mu_{\min}}}; \\ 0 = S^- S^+ \Psi_{\gamma^{\mu_{\max}}} &= (S^2 - S_Z^2 - S^Z) \Psi_{\gamma^{\mu_{\max}}} = (\gamma - \mu_{\max}^2 - \mu_{\max}) \Psi_{\gamma^{\mu_{\max}}}. \end{aligned} \quad (7.21)$$

Отсюда

$$\begin{cases} \gamma - \mu_{\min}^2 + \mu_{\min} = 0 \\ \gamma - \mu_{\max}^2 - \mu_{\max} = 0 \end{cases} \Rightarrow (\mu_{\max} - \mu_{\min} + 1)(\mu_{\max} + \mu_{\min}) = 0. \quad (7.22)$$

Учитывая, что $\mu_{\max} \geq \mu_{\min}$, находим:

$$\mu_{\max} = -\mu_{\min} = S. \quad (7.23)$$

Величиной S в дальнейшем будет обозначаться максимальная проекция спина на ось z .

Итак, согласно соотношениям (7.22) – (7.23), собственные числа оператора квадрата спина и оператора проекции спина на ось z могут принимать следующие значения:

$$\begin{aligned} \gamma &= S(S+1); \\ -S &\leq \mu \leq S. \end{aligned} \quad (7.24)$$

Таким образом, проекция спина на ось z принимает $2S+1$ значений, отличающихся на единицу (7.13), при этом разность $\mu_{\max} - \mu_{\min} = 2S$ должна быть **целым числом**. Отсюда значения возможных проекций спина на ось z [1, 26]:

$$S^Z = -S, -S+1, \dots, S-1, S, \quad (7.25)$$

где S – **целое** или **полуцелое** число.

В табл. 7.1 приведены возможные значения собственных чисел оператора квадрата спина и оператора проекции спина на ось z для некоторых значений максимальной проекции S.

Таблица 7.1. Собственные числа операторов квадрата спина и проекции спина на ось z

S	Собственное число оператора квадрата спина	Число собственных чисел оператора проекции спина на ось z	Собственные числа оператора проекции спина на ось z
1/2	3/4	2	-1/2, 1/2
1	2	3	-1, 0, 1
3/2	15/4	4	-3/2, -1/2, 1/2, 3/2
2	6	5	-2, -1, 0, 1, 2
5/2	35/4	6	-5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2

Число $2S + 1$ возможных проекций спина на ось z и есть число спиновых степеней свободы на узле, этот параметр системы обычно известен из эксперимента.

Самый удобный базис для описания спиновой статистики – рассмотренные выше собственные волновые функции оператора квадрата спина и оператора проекции спина на ось z в представлении чисел заполнения, отражающих состояния узлов:

$$\Psi = |S_1 S_2 \dots S_j \dots S_{N_a}\rangle, \quad (7.26)$$

здесь N_a – число узлов в системе, а состояние каждого узла S_j – это z-проекции спина на этом узле. Размерность базиса (7.26) равна

$$R = (2S + 1)^{N_a}. \quad (7.27)$$

Теперь необходимо описать действие спиновых операторов на выбранные базисные волновые функции. В базисе (7.26) оператор проекции спина на ось z будет диагонален, так как этот базис – собственный для этого оператора. Оператор проекции спина на ось z аналогичен оператору числа частиц для фермионов и бозонов. Действие оператора S_j^z на функцию из базиса (7.26) сводится к появлению множителя перед волновой функцией, равного z-проекции спина на узле j:

$$\hat{S}_j^z | \dots S_j \dots \rangle = S_j | \dots S_j \dots \rangle. \quad (7.28)$$

Аналогично действует и оператор квадрата спина:

$$\hat{S}_j^2 |\dots S_j \dots\rangle = S_j(S_j + 1) |\dots S_j \dots\rangle. \quad (7.29)$$

Для определения нормировочных множителей в (7.16) рассмотрим один из узлов решетки, на котором проекция спина на ось z равна S^z , при максимальной проекции S , и обозначим через Ψ_{S,S^z} соответствующую волновую функцию.

Из (7.16), (7.24) и (7.25) имеем:

$$S^- S^+ \Psi_{S,S^z-1} = A_{S^z} S^- \Psi_{S,S^z} = A_{S^z}^2 \Psi_{S,S^z-1}. \quad (7.30)$$

С другой стороны, используя (7.21), получаем:

$$\begin{aligned} S^- S^+ \Psi_{S,S^z-1} &= (S(S+1) - (S^z-1)^2 - (S^z-1)) \Psi_{S,S^z-1} = \\ &= A_{S^z}^2 \Psi_{S,S^z-1}. \end{aligned} \quad (7.31)$$

Из (7.30) и (7.31) находим значение нормировочной константы:

$$\begin{aligned} A_{S^z} &= \sqrt{S(S+1) - (S^z-1)^2 - (S^z-1)} = \\ &= \sqrt{(S+S^z)(S-S^z+1)}. \end{aligned} \quad (7.32)$$

Окончательно,

$$\begin{aligned} S_j^+ |\dots (S_j^z-1) \dots\rangle &= \sqrt{(S+S_j^z)(S-S_j^z+1)} |\dots S_j^z \dots\rangle; \\ S_j^- |\dots S_j^z \dots\rangle &= \sqrt{(S+S_j^z)(S-S_j^z+1)} |\dots (S_j^z-1) \dots\rangle. \end{aligned} \quad (7.33)$$

Из (7.11) и (7.33) получаем также:

$$\begin{aligned} S_j^x |\dots (S_j^z-1) \dots\rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{(S+S_j^z)(S-S_j^z+1)} |\dots S_j^z \dots\rangle; \\ S_j^y |\dots (S_j^z-1) \dots\rangle &= -\frac{i}{2} \sqrt{(S+S_j^z)(S-S_j^z+1)} |\dots S_j^z \dots\rangle. \end{aligned} \quad (7.34)$$

Сразу следует отметить, что на практике работать с формулами (7.34) неудобно, так как, например, при действии оператора S^y

возникают комплексные коэффициенты, поэтому для построения гамильтоновой матрицы используется тройка операторов S^+, S^-, S^Z .

В важном частном случае для спина с максимальной проекцией $S=1/2$ его компоненты часто более удобно выразить через матрицы Паули σ^α :

$$S^\alpha = \frac{1}{2} \sigma^\alpha;$$

$$\sigma^X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma^Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \sigma^Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7.35)$$

Матрицы Паули действуют на двухкомпонентные волновые функции-столбцы

$$\psi^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \psi^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (7.36)$$

функция ψ^1 отвечает состоянию со спином вверх ($S^Z = +1/2$), а функция ψ^2 – состоянию со спином вниз ($S^Z = -1/2$). Для операторов S^+ и S^- вводят, соответственно, матрицы

$$\sigma^+ = \sigma^X + i\sigma^Y = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.37)$$

и

$$\sigma^- = \sigma^X - i\sigma^Y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.38)$$

которые переворачивают спины в состояниях ψ^1 и ψ^2 :

$$\sigma^+ \psi^2 = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 2\psi^1; \quad \sigma^+ \psi^1 = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv 0;$$

$$\sigma^- \psi^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 2\psi^2; \quad \sigma^- \psi^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv 0, \quad (7.39)$$

их действие в этом случае полностью аналогично операторам рождения и уничтожения в ферми-статистике или в статистике hard-core. Это также непосредственно следует из коммутационных соотношений для операторов S^Z, S^+, S^- (7.11a).

7.2. Квантовые спиновые модели

Для описания спиновых систем при помощи различных спиновых моделей необходимо учесть взаимодействие узельных спинов с внешним полем и между собой в формализме вторичного квантования.

Взаимодействие спинов с внешним магнитным полем описывается аналогично взаимодействию с полем классического вектора магнитного момента:

$$H_{\vec{H}} = -\vec{H}\hat{S} = -(H_x\hat{S}^x + H_y\hat{S}^y + H_z\hat{S}^z). \quad (7.40)$$

Таким образом, приложенное магнитное поле стремится направить спины (магнитные моменты) узлов вдоль линий магнитной индукции. Здесь и в дальнейшем размерный множитель $\mu_0(\mu_B)$ будет опускаться.

Взаимодействие спинов между собой также описывается скалярным произведением:

$$H_{\text{int}} = -J_{jj'}\hat{S}_j\hat{S}_{j'}, \quad (7.41)$$

величина $J_{jj'}$ называется **обменным взаимодействием**. Если гамильтониан (7.41) описывает взаимодействие валентных электронов, локализованных на узлах решетки, некомпенсированные магнитные моменты которых определяют магнитные свойства вещества, то с учетом антисимметрии волновой функции обменное взаимодействие $J_{jj'}$ будет иметь кулоновскую природу.

Действительно, рассмотрим два электрона, локализованных на соседних узлах решетки m и n . Суммарная волновая функция электронов есть произведение спиновой функции $\chi(1,2)$ и координатной функции $\varphi(r_1, r_2)$, где r_1, r_2 – радиусы-векторы первого и второго электронов. С учетом тождественности электронов координатная функция $\varphi(r_1, r_2)$ может быть представлена через одноэлектронные состояния $\phi(r)$ следующим образом:

$$\varphi_{mn}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_m(r_1)\phi_n(r_2) \pm \phi_m(r_2)\phi_n(r_1)). \quad (7.42)$$

Знак в (7.42) выбирается из условий симметрии, для этого следует учесть спиновую функцию, которая симметрична при антипараллельном расположении спинов электронов $\uparrow\downarrow$ (суммарный спин $S=0$) и антисимметрична для параллельных спинов $\uparrow\uparrow$ (суммарный спин $S=1$) [1]. Так как для ферми-частиц полная волновая функция должна быть антисимметричной, то

$$\begin{aligned} \varphi_{\uparrow\downarrow}(r_1, r_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_m(r_1)\phi_n(r_2) - \phi_m(r_2)\phi_n(r_1)); \\ \varphi_{\uparrow\uparrow}(r_1, r_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_m(r_1)\phi_n(r_2) + \phi_m(r_2)\phi_n(r_1)). \end{aligned} \quad (7.43)$$

Рассмотрим выражение для кулоновской энергии взаимодействия двух электронов на узлах m и n :

$$\begin{aligned} E_{mn} &= \langle \varphi_{mn} | V_{\text{kul}} | \varphi_{mn} \rangle = \\ &= \int d^3r_1 d^3r_2 \varphi_{mn}^*(r_1, r_2) \left(\frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \right) \varphi_{mn}(r_1, r_2). \end{aligned} \quad (7.44)$$

С учетом (7.43) находим:

$$\begin{aligned} E_{\uparrow\uparrow} &= E_0 - J_{mn}; \\ E_{\uparrow\downarrow} &= E_0 + J_{mn}; \\ J_{mn} &= \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \phi_m^*(r_1)\phi_n^*(r_2)\phi_m(r_2)\phi_n(r_1); \\ E_0 &= \int d^3r_1 d^3r_2 \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} |\phi_n(r_1)|^2 |\phi_m(r_2)|^2, \end{aligned} \quad (7.45)$$

где E_0 – прямое кулоновское взаимодействие, не зависящее от взаимной ориентации спинов, J_{mn} – обменный интеграл, отвечающий за спиновое взаимодействие. С учетом перенормировки обменного интеграла (7.45) можно переписать в более компактной форме:

$$\begin{aligned} E &= E_0 + E_{\text{обм}}; \\ E_{\text{обм}} &= -J_{mn} \bar{S}_m \bar{S}_n. \end{aligned} \quad (7.46)$$

Таким образом, если $J_{mn} > 0$, то выгодна параллельная ориентация спинов:

$$\dots \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \dots, \quad (7.47)$$

если же $J_{mn} < 0$, то в основном состоянии соседние спины будут антипараллельны:

$$\dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots \quad (7.48)$$

Случай (7.47) называется **ферромагнитным упорядочением**, случай (7.48) – **антиферромагнитным упорядочением**.

Величина обменного интеграла определяется кулоновским взаимодействием на соседних атомах, расположенных на расстоянии периода решетки a , уменьшенным в меру перекрытия волновых функций (рис. 7.1):

$$J \sim \frac{e^2}{a} e^{-\frac{a}{a_0}} \sim 0.1 - 1 \text{ эВ}, \quad (7.49)$$

где a_0 – характерный масштаб волновой функции, имеющий величину порядка боровского радиуса.

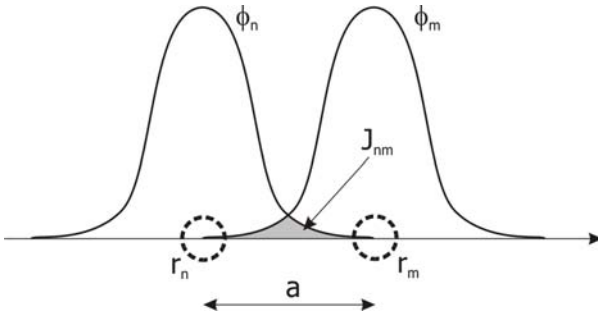


Рис. 7.1. Величина обменного интеграла J_{nm} (закрашенная область) определяется площадью области перекрытия волновых функций электронов, находящихся в узлах решетки n и m ; $a = |\vec{r}_n - \vec{r}_m|$

Обменный интеграл J_{mn} является аналогом амплитуды перескока t_{mn} , рассматриваемой ранее в узельных моделях сильной связи для ферми- и бозе-систем.

Модель, учитывающая взаимодействие системы узельных спинов между собой (7.41) и с внешним полем (7.40), называется **моделью Гейзенберга**, гамильтониан этой модели имеет вид

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i, \quad (7.50)$$

здесь \vec{S}_i – оператор спина на узле i : $\vec{S}_i = \{S_i^X, S_i^Y, S_i^Z\}$. При $J_{ij} > 0$ гамильтониан (7.50) описывает ферромагнитную модель Гейзенберга, при $J_{ij} < 0$ – антиферромагнитную.

Очень многие магнетики являются анизотропными веществами, что проявляется в зависимости их обменного интеграла J_{ij} от направления взаимодействия относительно кристаллографических осей в веществе:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (J_{ij}^X S_i^X S_j^X + J_{ij}^Y S_i^Y S_j^Y + J_{ij}^Z S_i^Z S_j^Z) - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i. \quad (7.51)$$

Вообще говоря, обменный интеграл является тензором $J^{\alpha\beta}$, поэтому в (7.51) могут войти также вклады в энергию взаимодействия вида $J_{ij}^{XY} S_i^X S_j^Y, J_{ij}^{YZ} S_i^Y S_j^Z$ и т.п. Будем, однако, полагать, что задача приведена к главным кристаллографическим осям, так что тензор $J^{\alpha\beta}$ имеет диагональный вид, и введем обозначения $J^X \equiv J^{XX}, J^Y \equiv J^{YY}, J^Z \equiv J^{ZZ}$.

В системе может существовать **ось легкого намагничивания**, вдоль которой взаимодействие максимально, например $J^Z \gg J^X, J^Y$, или **плоскость легкого намагничивания**, так что $J^Z \ll J^X, J^Y$. В общем случае взаимодействие неодинаково по разным направлениям.

Наиболее употребительными моделями являются следующие:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (J^X S_i^X S_j^X + J^Y S_i^Y S_j^Y + J^Z S_i^Z S_j^Z) - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i. \quad (7.52)$$

Модель (7.52) называется **XYZ-моделью**, в ней все обменные интегралы не зависят от номера узла, но различаются по

направлениям: $J^x \neq J^y \neq J^z$, взаимодействие учитывается только между ближайшими соседями.

Модель

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (J_{\perp} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + J_{\parallel} S_i^z S_j^z) - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i \quad (7.53)$$

называется **XXZ-моделью**, в ней взаимодействие J_{\parallel} вдоль оси z отличается от взаимодействия J_{\perp} в плоскости xy.

Одним из предельных случаев XXZ-модели является **XY-модель**, в которой $J_{\perp} \gg J_{\parallel}$, и рассматривается плоская задача. Без внешнего поля XY-модель имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y). \quad (7.54)$$

В данном случае плоскость xy можно назвать плоскостью легкого намагничивания для трехмерной модели Гейзенберга. Вообще говоря, для двумерного случая XY-модель является классической, а не квантовой, так как квантование по оси z отсутствует, и рассматриваются просто вектора в плоскости xy.

Другим предельным случаем XXZ-модели является ситуация $J_{\perp} \ll J_{\parallel}$, когда в модели остаются только проекции спина на ось z:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z - H^z \sum_i S_i^z, \quad (7.55)$$

модель (7.55) называется **моделью Изинга**, ось z в этой ситуации – ось легкого намагничивания для исходной XXZ-модели.

Наконец, возможна полностью изотропная модель Гейзенберга:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i, \quad (7.56)$$

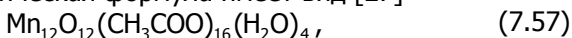
эта модель называется **XXX-моделью**.

Для более наглядного представления о сложных спиновых системах, которые интенсивно исследуются численно и экспериментально в настоящее время, приведем следующий пример.

В последние годы ведется интенсивное исследование **нанокластеров** – частиц, состоящих из небольшого, порядка $10 \div 10^4$, числа атомов. Нанокластеры рассматривают как "крупные блоки" для конструирования новых материалов и приборов. Особенно интересны магнитные нанокластеры, так как наличие внутренней, дополнительной степени свободы – магнитного момента – придает большое разнообразие их свойствам и позволяет управлять их состоянием при помощи внешнего магнитного поля.

Магнитные нанокластеры представляют собой высокоспиновые металлоорганические молекулы, которые построены с участием ионов переходных элементов (Fe, Mn и др.) [24].

Кластер Mn_{12} – один из наиболее интересных для физики и приложений. Его химическая формула имеет вид [27]



а устроен он следующим образом. Каждая молекула содержит группировку из 12 ионов марганца: четырех Mn^{4+} со спином $S_1 = 3/2$ каждый, объединенных во внутренний тетраэдр, и восьми Mn^{3+} со спином $S_2 = 2$, расположенных снаружи. Обменное взаимодействие между ионами марганца осуществляется через ионы кислорода. Конкурирующие антиферромагнитные взаимодействия приводят к образованию ферримагнитной структуры с полным спином молекулы $S = 10$. В молекулярном кристалле, состоящем из рассматриваемых молекул, ацетатные группы и молекулы воды отделяют один кластер Mn_{12} от другого, причем настолько, что между разными кластерами остается только прямое магнитодипольное взаимодействие, величина которого чрезвычайно мала. Схематичное изображение кластера Mn_{12} показано на рис. 7.2 [24].

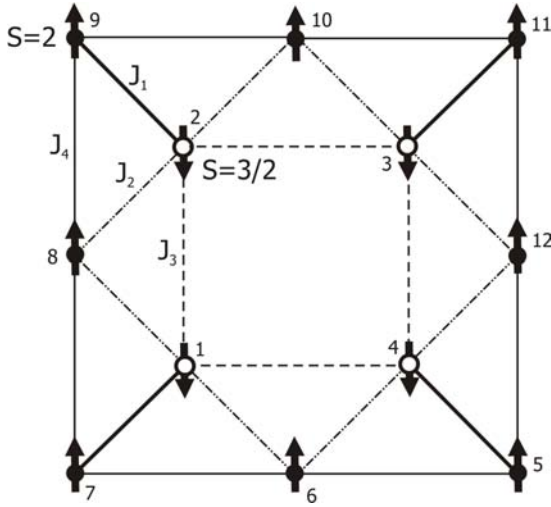


Рис. 7.2. Схематичное изображение нанокластера (7.57). Кругами показаны атомы марганца, внутренние атомы имеют максимальную проекцию спина $S=3/2$, внешние – $S=2$

Простейшая модель, описывающая магнитные свойства кластера (7.57), имеет вид

$$\begin{aligned}
 H = & J_1(\bar{S}_1\bar{S}_7 + \bar{S}_2\bar{S}_9 + \bar{S}_3\bar{S}_{11} + \bar{S}_4\bar{S}_5) + \\
 & + J_2(\bar{S}_1\bar{S}_6 + \bar{S}_1\bar{S}_8 + \bar{S}_2\bar{S}_8 + \bar{S}_2\bar{S}_{10} + \bar{S}_3\bar{S}_{10} + \bar{S}_3\bar{S}_{12} + \bar{S}_4\bar{S}_6 + \bar{S}_4\bar{S}_{12}) + \\
 & + J_3(\bar{S}_1\bar{S}_2 + \bar{S}_2\bar{S}_3 + \bar{S}_3\bar{S}_4 + \bar{S}_1\bar{S}_4) + \\
 & + J_4(\bar{S}_5\bar{S}_6 + \bar{S}_6\bar{S}_7 + \bar{S}_7\bar{S}_8 + \bar{S}_8\bar{S}_9 + \bar{S}_9\bar{S}_{10} + \bar{S}_{10}\bar{S}_{11} + \bar{S}_{11}\bar{S}_{12} + \bar{S}_5\bar{S}_{12}),
 \end{aligned} \quad (7.58)$$

причем максимальные проекции спина внутренних и внешних атомов разные: $S_{1-4} = 3/2$, $S_{5-12} = 2$. Значения обменных интегралов определяются из эксперимента и равны [24]

$$J_1 \approx 215 \text{ K}; J_2 \approx 85 \text{ K}; J_3 \approx -85 \text{ K}; J_4 \approx -45 \text{ K}. \quad (7.59)$$

7.3. Формирование гамильтоновой матрицы для спиновых моделей

Для построения гамильтоновой матрицы перепишем сначала слагаемое, отвечающее взаимодействию спинов в модели (7.50), в терминах операторов S^+ и S^- :

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \left(S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right). \quad (7.60)$$

Задача 7.3. Получить (7.60).

Аналогично, для слагаемого, отвечающего взаимодействию с внешним полем, имеем:

$$\begin{aligned} H_{\text{H}} &= -\sum_i (H^x S_i^x + H^y S_i^y + H^z S_i^z) = \\ &= -H^z \sum_i S_i^z - \frac{H^x}{2} \sum_i (S_i^+ + S_i^-) - \frac{H^y}{2i} \sum_i (S_i^+ - S_i^-). \end{aligned} \quad (7.61)$$

Таким образом, модель Гейзенберга выражается через три оператора: оператор z-проекции спина S^z и операторы S^\pm . Именно в таком виде и используется оператор энергии для построения матричных элементов.

Из-за того, что в последнем слагаемом появляются комплексные множители, систему координат выбирают таким образом, чтобы направление внешнего поля было перпендикулярно оси y , и тогда в (7.61) остаются лишь два первых слагаемых.

Далее полагаем, что внешнее поле направлено вдоль оси z , и гамильтониан модели имеет вид:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \left(S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right) - H^z \sum_i S_i^z. \quad (7.62)$$

Для формирования базиса модели и расчета матричных элементов спиновых операторов удобно перейти к неотрицательным числам заполнения n_i – к так называемым **фиктивным бозонам** или **псевдобозонам** по правилу

$$n_i = S + S_i^z. \quad (7.63)$$

Тогда минимальной проекции спина на ось z $S_{\min}^z = -S$ ставится в соответствие заполнение $n = 0$, а максимальной проекции $S_{\max}^z = +S$ – заполнение $n = 2S$. Например, для случая $S = 1$ имеем:

$$\begin{aligned} |S^z = -1\rangle &\Rightarrow |n = 0\rangle; \\ |S^z = 0\rangle &\Rightarrow |n = 1\rangle; \\ |S^z = +1\rangle &\Rightarrow |n = 2\rangle. \end{aligned} \quad (7.64)$$

Таким образом, число спиновых степеней свободы на узле для $S = 1/2$ совпадает с числом бозонных степеней свободы в hard-core-модели, а для $S = 1$ – с числом бозонных степеней свободы в редуцированной бозонной модели.

Базис волновых функций будет полностью совпадать с соответствующим базисом для бозонной системы с ограничением чисел заполнения $N_{\max} = 2S$. Например, для $S = \frac{3}{2}$ функция

$\left| -\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots \right\rangle$ в спиновом базисе в соответствии с (7.63) будет эквивалентна функции $|0, 2, 3, \dots\rangle$ в базисе фиктивных бозонов и т.п.

После формирования базиса при вычислении матричных элементов операторов также следует учесть замену переменных (7.63):

$$\begin{aligned} S_i^z | \dots n_i \dots \rangle &= (n_i - S) | \dots n_i \dots \rangle; \\ S_i^+ | \dots (n_i - 1) \dots \rangle &= \sqrt{n_i(2S - n_i + 1)} | \dots n_i \dots \rangle; \\ S_i^- | \dots n_i \dots \rangle &= \sqrt{n_i(2S - n_i + 1)} | \dots (n_i - 1) \dots \rangle. \end{aligned} \quad (7.65)$$

В частности, для $S = 1/2$ имеем:

$$\begin{aligned} S_i^z | \dots n_i \dots \rangle &= (n_i - \frac{1}{2}) | \dots n_i \dots \rangle; \\ S_i^+ | \dots 0_i \dots \rangle &= | \dots 1_i \dots \rangle; \\ S_i^- | \dots 1_i \dots \rangle &= | \dots 0_i \dots \rangle. \end{aligned} \quad (7.66)$$

В этом случае операторы S^\pm полностью аналогичны операторам рождения и уничтожения a^+ и a в бозонной hard-core-модели.

Так как операторы проекции спина на ось z и операторы S^+ и S^- , относящиеся к разным узлам, коммутируют между собой, то при расчете матричных элементов модели (7.62) операторы можно переставлять друг с другом, знаки матричных элементов при этом не изменятся. Рассмотрим сначала слагаемые гамильтониана, дающие диагональный вклад в гамильтонову матрицу:

$$\begin{aligned} & \langle \dots S_i \dots S_j \dots \left| \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i^z S_j^z + H^z \sum_i S_i^z \right| \dots S_i \dots S_j \dots \rangle = \\ & = \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \langle \dots S_i \dots S_j \dots \left| S_i^z S_j^z \right| \dots S_i \dots S_j \dots \rangle + \\ & + \sum_i H^z \langle \dots S_i \dots S_j \dots \left| S_i^z \right| \dots S_i \dots S_j \dots \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j + H^z \sum_i S_i. \end{aligned} \quad (7.67)$$

Оставшиеся слагаемые гамильтониана (7.62) дают недиагональный вклад в гамильтонову матрицу. Например,

$$\begin{aligned} & \langle \dots (S_i - 1) \dots S_j \dots \left| S_i^+ S_j^- \right| \dots S_i \dots (S_j - 1) \dots \rangle = \\ & = \sqrt{(S + S_i)(S - S_i + 1)(S + S_j)(S - S_j + 1)} \equiv \\ & \equiv \sqrt{n_i(2S - n_i + 1)n_j(2S - n_j + 1)}; \quad n_m = S + S_m. \end{aligned} \quad (7.68)$$

Рассмотрим далее конкретный пример построения гамильтоновой матрицы для спиновой системы.

Пример 7.1. Пусть есть периодически замкнутая система из трех узлов ($N_a = 3$), описываемая XXX-моделью с гамильтонианом

$$H = - \sum_{i=1}^3 (S_i^x S_{i+1}^x + S_{i+1}^x S_i^x + S_i^y S_{i+1}^y + S_{i+1}^y S_i^y + S_i^z S_{i+1}^z + S_{i+1}^z S_i^z),$$

причем максимальная проекция спина на узле $S = 1$, а суммарная проекция спина на ось z равна нулю: $\sum_i S_i^z = 0$.

Перепишем гамильтониан в терминах операторов S^z, S^+, S^- :

$$H = - \sum_{i=1}^3 \left(S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_{i+1}^+ S_i^-) \right).$$

Тогда, переходя к фиктивным бозонам,

$$N = \sum_i n_i = \sum_i (S + S_i^z) = 3.$$

Базис для такой системы состоит из семи функций:

$$\Phi_1 = |012\rangle; \Phi_2 = |021\rangle; \Phi_3 = |102\rangle; \Phi_4 = |111\rangle;$$

$$\Phi_5 = |120\rangle; \Phi_6 = |201\rangle; \Phi_7 = |210\rangle,$$

которые соответствуют следующим спиновым конфигурациям:

$$\Phi_1 \Leftrightarrow |-1; 0; 1\rangle; \Phi_2 \Leftrightarrow |-1; 1; 0\rangle; \Phi_3 \Leftrightarrow |0; -1; 1\rangle; \Phi_4 \Leftrightarrow |0; 0; 0\rangle;$$

$$\Phi_5 \Leftrightarrow |0; 1; -1\rangle; \Phi_6 \Leftrightarrow |1; -1; 0\rangle; \Phi_7 \Leftrightarrow |1; 0; -1\rangle.$$

С учетом (7.67) и (7.68) находим гамильтонову матрицу:

$$H = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

На главной диагонали гамильтоновой матрицы находится вклад от диагональных операторов S^z , а вне главной диагонали располагаются вклады от операторов S^\pm .

После процедуры диагонализации гамильтоновой матрицы обычно требуется рассчитать различные корреляционные средние, такие как, например, $\langle S_i^z S_j^z \rangle_0 \equiv \langle \Psi_0 | S_i^z S_j^z | \Psi_0 \rangle$, где Ψ_0 – собственная функция основного состояния системы. Каждая полученная после диагонализации собственная волновая функция гамильтониана представляет собой линейную комбинацию исходных узельных функций:

$$\Psi_m = \sum_n C_{nm} \Phi_n, \quad (7.69)$$

где C_{nm} – коэффициенты разложения собственных функций Ψ по базису Φ . Поскольку матричные элементы оператора $S_i^z S_j^z$ в базисе Φ известны, то

$$\langle S_i S_j \rangle_0 = \sum_{n n'} C_{n0} C_{n'0} \langle \Phi_n | S_i S_j | \Phi_{n'} \rangle. \quad (7.70)$$

Аналогично рассчитываются и другие физические величины. Все правила расчета, справедливые для фермионов и бозонов, также применимы и для спиновых систем.

7.4. Инварианты в спиновых моделях

Рассмотрим модель Гейзенберга с внешним полем, направленным вдоль оси z:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \bar{S}_i \bar{S}_j - H^Z \sum_i S_i^Z. \quad (7.71)$$

Оказывается, в этом случае в системе сохраняется проекция полного спина системы на ось z:

$$S^Z = \sum_i S_i^Z = \text{const.} \quad (7.72)$$

Докажем утверждение (7.72), для чего рассмотрим коммутатор $[H, S^Z]$. Имеем:

$$\begin{aligned} [H, S^Z] &= [H, \sum_k S_k^Z] = \left[-\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \bar{S}_i \bar{S}_j - H^Z \sum_i S_i^Z, \sum_k S_k^Z \right] = \\ &= \left[-\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \bar{S}_i \bar{S}_j, \sum_k S_k^Z \right] = \left[-\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y + S_i^Z S_j^Z), \sum_k S_k^Z \right] = \\ &= \left[-\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y), \sum_k S_k^Z \right] = \\ &= \left[-\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i^X S_j^X, \sum_k S_k^Z \right] + \left[-\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i^Y S_j^Y, \sum_k S_k^Z \right] = \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} (-i \delta_{kj} S_i^X S_k^Y - i \delta_{ik} S_k^Y S_j^X + i \delta_{kj} S_i^Y S_k^X + i \delta_{ik} S_k^X S_j^Y) = \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} (-i S_i^X S_j^Y - i S_i^Y S_j^X + i S_i^Y S_j^X + i S_i^X S_j^Y) \equiv 0, \end{aligned} \quad (7.73)$$

что и доказывает утверждение (7.72).

Гамильтонова матрица, таким образом, разбивается на блоки, стоящие на главной диагонали и отвечающие различным суммарным проекциям спина, все элементы вне этих блоков равны нулю:

$$H = \begin{pmatrix} (S^z = -\frac{1}{2}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (S^z = +\frac{1}{2}) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (S^z = -1) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (S^z = 0) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (S^z = +1) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix}, \quad (7.74)$$

и задача распадается на группу отдельных задач для каждого значения суммарной проекции спина.

Пример 7.2. Рассмотрим ту же модель, что и в примере 7.1, но без ограничения на суммарную проекцию спина:

$$H = -\sum_{i=1}^3 \left(S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_{i+1}^+ S_i^-) \right).$$

Базисных функций в этом случае будет $R = 3^3 = 27$:

$$\Phi_1 = |-1; -1; -1\rangle;$$

$$\Phi_2 = |-1; -1; 0\rangle;$$

$$\Phi_3 = |-1; -1; 1\rangle;$$

$$\Phi_4 = |-1; 0; -1\rangle;$$

...

$$\Phi_{27} = |1; 1; 1\rangle.$$

Переходя к представлению фиктивных бозонов и сортируя функции в соответствии с суммарной проекцией спина, получаем узельный базис, состоящий из семи групп (табл. П7.1):

Таблица П7.1. Базисные функции
в представлении фиктивных бозонов, упорядоченные
в соответствии с полной проекцией спина

Суммарная проекция спина	-3	-2	-1	0	+1	+2	+3
Базисные функции	$\Phi_1 = 000\rangle$	$\Phi_2 = 001\rangle$ $\Phi_3 = 010\rangle$ $\Phi_4 = 100\rangle$	$\Phi_5 = 002\rangle$ $\Phi_6 = 011\rangle$ $\Phi_7 = 020\rangle$ $\Phi_8 = 101\rangle$ $\Phi_9 = 110\rangle$ $\Phi_{10} = 200\rangle$	$\Phi_{11} = 012\rangle$ $\Phi_{12} = 021\rangle$ $\Phi_{13} = 102\rangle$ $\Phi_{14} = 111\rangle$ $\Phi_{15} = 120\rangle$ $\Phi_{16} = 201\rangle$ $\Phi_{17} = 210\rangle$	$\Phi_{18} = 022\rangle$ $\Phi_{19} = 112\rangle$ $\Phi_{20} = 121\rangle$ $\Phi_{21} = 202\rangle$ $\Phi_{22} = 211\rangle$ $\Phi_{23} = 220\rangle$	$\Phi_{24} = 122\rangle$ $\Phi_{25} = 212\rangle$ $\Phi_{26} = 221\rangle$	$\Phi_{27} = 222\rangle$

Используя (7.67) и (7.68), получаем гамильтонову матрицу, портрет которой (места ненулевых элементов) изображен на рис. П7.1.

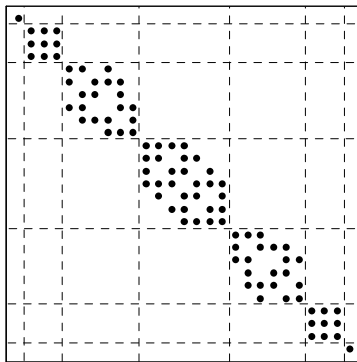


Рис. П7.1. Портрет гамильтоновой матрицы

Матрица гамильтониана имеет блочно-диагональный вид и состоит из семи блоков, в соответствии с семью возможными значениями полной проекции спина системы. Ниже выписаны матрицы, соответствующие каждому из блоков:

$$S^Z = -3: H_{-3} = (-3);$$

$$S^Z = -2: H_{-2} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix};$$

$$\begin{aligned}
S^Z = -1: H_{-1} &= \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}; \\
S^Z = 0: H_0 &= \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}; \\
S^Z = +1: H_{+1} &= \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}; \\
S^Z = +2: H_{+2} &= \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}; \\
S^Z = +3: H_{+3} &= (-3).
\end{aligned}$$

Заметим, что матрица, соответствующая нулевой суммарной проекции спина, получилась в точности совпадающей с матрицей из примера 7.1, где рассматривалась задача с фиксированной полной проекцией спина.

Утверждение (7.72) также становится понятным, если записать гамильтониан в терминах операторов S^+ и S^- (см. (7.62)). Видно, что действие каждого из слагаемых, входящих в гамильтониан, не меняет суммарной проекции спина на ось z – операторы вида $S_i^+ S_j^-$ лишь меняют проекции на узлах i и j , оставляя сумму этих проекций неизменной.

Если же поле направлено под углом к оси z , т.е. имеются ненулевые компоненты внешнего поля и по другим направлениям, то в гамильтониане (7.71) появится дополнительное слагаемое вида

$$\Delta H = H^x \sum_i S_i^x = \frac{1}{2} H^x \sum_i (S_i^+ + S_i^-), \quad (7.75)$$

и суммарная проекция спина на ось z уже не будет сохраняться. Соответственно из-за того, что операторы, входящие в (7.75), меняют суммарную проекцию спина в системе, в гамильтоновой матрице (7.74) возникнут ненулевые межблочные элементы, и в этом случае задачу надо решать с нефиксированной проекцией спина, т.е. рассматривать всю матрицу H целиком.

Тем не менее, если гамильтониан системы изотропен, то даже в этом случае можно использовать рассмотренный выше инвариант. Действительно, если все направления в системе эквивалентны, то выбор определенной оси, вдоль которой квантуется проекция спина, произволен, а значит, выбором оси квантования z вдоль направления внешнего поля, $z \uparrow \uparrow \vec{H}$, задачу можно свести к (7.71). Тогда следующие две квантовые задачи будут эквивалентны:

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) - H_z \sum_i S_i^z; \\ H &= -\frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) - H_x \sum_i S_i^x. \end{aligned} \quad (7.56a)$$

7.5. Некоторые результаты для модели Гейзенберга. Спектр возбуждений

Рассмотрим анизотропную XXZ-модель во внешнем продольном поле:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (J_{\perp} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + J_{\parallel} S_i^z S_j^z) - H_z \sum_i S_i^z. \quad (7.76)$$

Докажем, что **замена J_{\perp} на $-J_{\perp}$ не меняет спектра системы**, если взаимодействие в системе осуществляется только между ближайшими соседями. Для этого сначала покажем, что справедливо следующее операторное тождество:

$$e^{-i\varphi S^z} S^{\pm} e^{i\varphi S^z} = S^{\pm} e^{\mp i\varphi}. \quad (7.77)$$

В этом несложно убедиться дифференцированием по параметру φ и использованием коммутационных соотношений.

Задача 7.4. Доказать (7.77).

Далее разобьем всю пространственную решетку на две подрешетки A и B , вложенные друг в друга, так что для узла A всегда ближайшими соседями будут узлы B , и наоборот. Применим ко всем узлам A унитарное преобразование вида

$$U = \exp\left(i\pi \sum_{i_A} S_{i_A}^Z\right), \quad (7.78)$$

которое, согласно (7.77), меняет знак у операторов S^\pm подрешетки A :

$$U^{-1} S_{i_A}^\pm U = -S_{i_A}^\pm. \quad (7.79)$$

Тогда, применяя это унитарное преобразование к гамильтониану, находим:

$$U^{-1} H U = \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (J_\perp (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y) - J_\parallel S_i^Z S_j^Z) - H_z \sum_i S_i^Z. \quad (7.80)$$

Задача 7.5. Получить (7.80).

В результате преобразования U поперечной составляющей обменного взаимодействия поменялся знак, а спектр оператора H при этом преобразовании не меняется (см. (5.24)). Отсюда следует, что при расчете перед коэффициентом J_\perp можно выбрать любой удобный знак, а физические свойства системы – ферромагнетизм или антиферромагнетизм – будут определяться только знаком продольной составляющей J_\parallel .

Далее кратко перечислены некоторые известные аналитические результаты для модели Гейзенберга.

Существует точное решение одномерной XXZ-модели для $S = 1/2$ [8], полученное методом **анзатца Бете**. В частности, если внешнее поле отсутствует и $J_\parallel \geq J_\perp$, основное состояние является

ферромагнитным, все спины имеют только максимальные проекции $+S$, и энергия системы равна

$$E_0 = -N_a Z J_{||} S^2 / 2, \quad (7.81)$$

где Z – число ближайших соседей.

Были получены ответы и для ситуации антиферромагнитной цепочки, $J_{||} < J_{\perp}$, и рассчитан спектр возбуждений. Известны также аналитические результаты для одномерной XYZ-модели (7.52) [8].

Для целого спина (например, $S=1$) в антиферромагнитных моделях известно, что в спектре возбуждений имеется щель (**щель Холдейна**) [8], в то время как для полуцелого спина возбуждения, как правило, – **спиновые волны** с линейным законом дисперсии. В ферромагнитных моделях возбуждения над основным состоянием (**магноны**) являются квазичастицами с большой эффективной массой и статистикой Бозе [10].

Особый случай – модель Изинга (7.55), для нее известны аналитические результаты для одномерного и двумерного случаев. Модель Изинга будет подробно рассмотрена далее при изучении методов Монте-Карло.

Детально не будем касаться огромной области исследований спиновых моделей [8, 11, 28]. Существенный прогресс при исследовании спиновых моделей в двумерной и трехмерной ситуациях получен при помощи различных приближенных методов, например в приближении среднего поля.

Рассмотрим для иллюстрации аналитический результат, полученный в приближении среднего поля для случая $S=1/2$ и следующего гамильтониана:

$$H = -N^z \sum_k \sigma_k^z - \frac{1}{2} \sum_{kk'} J_{kk'} \vec{\sigma}_k^{\perp} \vec{\sigma}_{k'}^{\perp}, \quad (7.82)$$

где $\sigma_k^{\perp} = \{\sigma_k^x, \sigma_k^y, 0\}$, $\sigma_k^x, \sigma_k^y, \sigma_k^z$ – матрицы Паули.

Анизотропный гамильтониан (7.82) учитывает, таким образом, только взаимодействие между спинами в плоскости xy и взаимодействие спинов с внешним полем по оси z .

Представим взаимодействие в плоскости в приближении среднего поля следующим образом:

$$\sigma_k \sigma_{k'} \approx \langle \sigma_k \rangle \sigma_{k'} + \sigma_k \langle \sigma_{k'} \rangle - \langle \sigma_k \rangle \langle \sigma_{k'} \rangle, \quad (7.83)$$

где $\langle \sigma_k \rangle$ – среднее значение спина на узле k .

Это означает, что каждый спин взаимодействует с усредненным полем остальных спинов. Разложение (7.83) справедливо с точностью до квадратичных поправок по отклонению спина от среднего, так как его можно переписать в виде

$$(\sigma_k - \langle \sigma_k \rangle)(\sigma_{k'} - \langle \sigma_{k'} \rangle) \approx 0. \quad (7.84)$$

Введем среднее поле спинов, действующих на выделенный спин σ_k , в следующем виде:

$$\Delta_k = \sum_{k'} J_{kk'} \langle \sigma_{k'}^\perp \rangle, \quad (7.85)$$

тогда гамильтониан (7.82) запишется следующим образом:

$$H = - \sum_k (\sigma_k^z H^z + \sigma_k^\perp \Delta_k) + \frac{1}{2} \sum_k \Delta_k \langle \sigma_k^\perp \rangle. \quad (7.86)$$

С учетом определения матриц Паули каждое из слагаемых в первой сумме в (7.86) может быть записано в виде

$$\Delta_k = \sigma_k^z H^z + \sigma_k^\perp \Delta_k = \begin{pmatrix} H^z & \Delta_k^x - i \Delta_k^y \\ \Delta_k^x + i \Delta_k^y & -H^z \end{pmatrix}. \quad (7.87)$$

Эту матрицу несложно диагонализировать, т.е. решить секулярное уравнение $\Delta - \lambda I = 0$. Собственные числа будут

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{(H^z)^2 + |\Delta|^2}; \quad |\Delta|^2 = (\Delta^x)^2 + (\Delta^y)^2, \quad (7.88)$$

и матрицы Δ_k принимают диагональный вид:

$$\Delta_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} H_k = \sigma_k^z H_k; \quad H_k = \sqrt{(H^z)^2 + |\Delta_k|^2}. \quad (7.89)$$

Таким, образом, процедура аналитической диагонализации гамильтониана эквивалентна в геометрическом смысле повороту оси квантования z на некоторый угол относительно старого положения, так что под новым углом взаимодействие спинов с эффективным полем H_k будет диагональным, а проекции спина σ_k^z

будут квантоваться вдоль новой оси. С учетом (7.86) гамильтониан принимает вид

$$H = -\sum_k \sigma_k^z H_k + \frac{1}{2} \sum_k \Delta_k \langle \sigma_k^\perp \rangle. \quad (7.90)$$

Энергия основного состояния, следовательно, равна

$$E_0 = -\sum_k H_k + \frac{1}{2} \sum_k \Delta_k \langle \sigma_k^\perp \rangle. \quad (7.91)$$

В выражении (7.91) пока не известен параметр $\langle \sigma_k^\perp \rangle$. Для его определения следует проварьировать (7.91) по $\langle \sigma_k^\perp \rangle$ для фиксированного узла k :

$$\frac{\partial E_0}{\partial \langle \sigma_k^\perp \rangle} = 0 \Rightarrow \Delta_k = \sum_{k'} J_{kk'} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{(H^z)^2 + \Delta_{k'}^2}}. \quad (7.92)$$

Решение этого трансцендентного уравнения и приводит к ответу. Если рассмотреть ферромагнитный случай и ограничиться взаимодействием лишь с ближайшими соседями, положив $J_{kk'} \equiv J > 0$, то находим:

$$\Delta_k \equiv \Delta = \sqrt{(ZJ)^2 - (H^z)^2};$$

$$\langle \sigma_k^\perp \rangle = \frac{\Delta}{ZJ}, \quad (7.93)$$

где Z – число ближайших соседей. Окончательно для энергии основного состояния имеем:

$$E_0 = \sum_k \left(-H_k + \frac{\Delta_k \sigma_k^\perp}{2} \right) = -\frac{N_a}{2ZJ} ((ZJ)^2 + (H^z)^2). \quad (7.94)$$

Полученное выражение отвечает основному состоянию системы спинов, в котором все они повернуты по направлению новой оси квантования вдоль поля H_k (рис. 7.3).

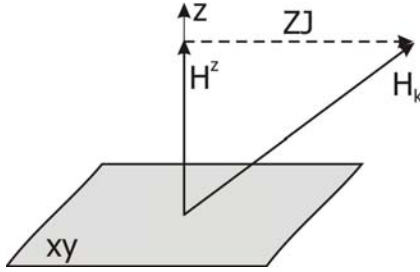


Рис. 7.3. Новая ось квантования направлена вдоль поля H_k

Рассмотрим далее основное и возбужденные состояния в ферро- и антиферромагнитной моделях Гейзенберга и сравним их друг с другом (для более подробного изучения вопроса см. [8, 10]). Для простоты выберем ХХХ-модель (7.56) без внешнего поля и запишем гамильтониан в терминах операторов S^z, S^\pm :

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \left(S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right). \quad (7.95)$$

Обобщим сначала результат (7.81) для энергии основного состояния ферромагнитной модели ($J > 0$) для **произвольной максимальной проекции** S и на случай **произвольной геометрии** системы. Действительно, вклад в энергию основного состояния (7.47) дают только операторы S^z в (7.95), а поперечные составляющие вида $S^+ S^-$ не дают вклада, так как в основном состоянии все проекции максимальны, и действие оператора S^+ приводит к физическому нулю: $S^+ |S\rangle \equiv 0$, а значит, результат (7.81) для энергии основного состояния остается справедливым.

Для антиферромагнитного случая ($J < 0$) все обстоит не так просто. Для описания антиферромагнитного состояния (см. (7.48)) следует ввести две подрешетки, вложенные друг в друга, в одной из которых все спины направлены, в основном, вверх (подрешетка «+»), а в другой – вниз (подрешетка «-»). Суммарный спин системы будет равен нулю в основном состоянии, но в каждой из подрешеток он принимает макроскопическое значение, близкое, но не равное точно $SN_a/2$, где N_a – число узлов в пространственной

решетке, так что упорядоченное состояние (это состояние называется **нелеевским**) также имеет место. Вклад в энергию основного состояния от поперечных компонент взаимодействия в антиферромагнитном случае будет мал, **но не равен нулю**, так что можно записать лишь приближенно, что

$$E_0 \approx -\frac{N_a Z |J_{||}| S^2}{2}. \quad (7.96)$$

Отличие точного значения энергии основного состояния от (7.96) особенно существенно при понижении размерности. Сравним энергии основного состояния для ферро- и антиферромагнитной моделей при расчете конкретных одномерных и двумерных спиновых кластеров с периодическими граничными условиями методом точной диагонализации гамильтоновой матрицы (табл. 7.2).

Таблица 7.2. Энергия основного состояния для различных спиновых кластеров

Параметры модели	Ферромагнетик, $J > 0$	Антиферромагнетик, $J < 0$
1D: $N_a=10, J =1, S=1/2$	$E_0=-2.5$	$E_0=-4.515446$
2D: $N_a=4 \times 4, J =1, S=1/2$	$E_0=-8.0$	$E_0=-9.189207$
1D: $N_a=10, J =1, S=1$	$E_0=-10.0$	$E_0=-14.09413$
2D: $N_a=3 \times 3, J =1, S=1$	$E_0=-18.0$	$E_0=-17.32228$

Видно, что чем больше максимальная проекция спина и чем выше размерность, тем ближе энергия основного состояния антиферромагнетика к значению выражения (7.96).

Причина различий – в нулевых колебаниях элементарных возбуждений в антиферромагнетике и все большем их вкладе в основное состояние при понижении размерности. Также при увеличении величины S спин становится все более "классическим", и вклад нулевых колебаний ослабевает. В то же время в спектре ферромагнетика таких нулевых колебаний нет.

Для того, чтобы понять природу возбуждений в ферро- и антиферромагнетике, рассмотрим спектр возбужденных состояний в каждом из случаев [8, 10].

В случае ферромагнитной модели Гейзенберга z-проекция спина на узле для низших возбужденных состояний будет отличаться от максимальной проекции S , и операторы S^\pm в (7.95) начинают давать ненулевой вклад, что приводит к перемещению возбуждения с узла на узел (рис. 7.4). Такие возбуждения называются **магнонами**. При этом предполагается, что концентрация магнонов мала, и z-проекция все еще близка в среднем к максимальной проекции S , лишь в линейном приближении появляются ненулевые поперечные вклады от операторов S^\pm .

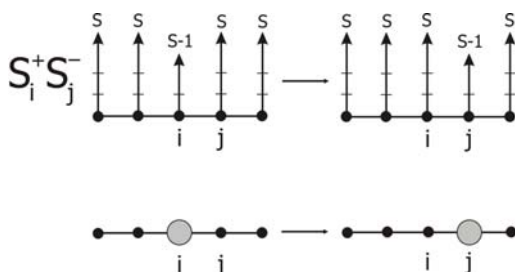


Рис. 7.4. Изменение проекций спина на узлах i и j эквивалентно перемещению магнона по решетке

Для дальнейшей аналитической диагонализации вводят новые операторы:

$$a_i^+ = \frac{S_i^-}{\sqrt{2S}};$$

$$a_i = \frac{S_i^+}{\sqrt{2S}}; \tag{7.97}$$

$$a_i^+ a_i = n_i = S - S_i^z.$$

Можно заметить, что с учетом перенормировки на $\sqrt{2S}$ эти операторы описывают рассмотренные ранее фиктивные бозоны (см. (7.63) – (7.65)), вводимые для формирования гамильтоновой матрицы. В случае $S^z \approx S = \text{const}$ из (7.97) немедленно получаем стандартные бозевские соотношения коммутации:

$$a_i a_i^+ - a_{i+1}^+ a_i = \delta_{i+1, i}. \quad (7.98)$$

Таким образом, новые квазичастицы-возбуждения, магноны, являются бозонами, а после аналитической диагонализации гамильтониана (подробности см. в [10]) можно найти спектр магнонов. После замены операторов в модели (7.95) согласно (7.97) и учитывая малость числа возбуждений, находим:

$$H = E_0 + SJ \sum_{\langle ij \rangle} (\delta_{ij} - 1) a_i^+ a_j. \quad (7.99)$$

Переходя к фурье-компонентам, получаем спектр магнонов $\omega(q)$:

$$H = E_0 + \sum_q \hbar \omega(q) a_q^+ a_q; \quad (7.100)$$

$$\omega(q) = SJ \sum_j (1 - \exp^{iqj}) \approx SJ a^2 q^2 \Big|_{q \rightarrow 0},$$

где a – период пространственной решетки спинов. Спектр магнонов при малых импульсах квадратичен, поэтому магноны являются возбуждениями бозонного типа с эффективной массой $m^* = \hbar^2 / 2SJ a^2$. Заметим, что при нулевой температуре магнонов нет, и энергия основного состояния равна значению (7.81).

Для антиферромагнетика спектр возбуждений находится подобным же образом [10], только вводятся две подрешетки, и фиктивные бозоны определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \text{для подрешетки "+" : } a_i^+ &= \frac{S_i^-}{\sqrt{2S}}; \quad a_i = \frac{S_i^+}{\sqrt{2S}}; \\ \text{для подрешетки "-" : } a_i^+ &= \frac{S_i^+}{\sqrt{2S}}; \quad a_i = \frac{S_i^-}{\sqrt{2S}}. \end{aligned} \quad (7.101)$$

Нетрудно доказать, что эти новые операторы также являются бозевскими операторами при $|S^Z| \approx S = \text{const}$.

Полагая далее, что для подрешетки "+" $S^Z \approx S$, а для подрешетки "-" $S^Z \approx -S$, с учетом малости числа возбуждений находим [10]:

$$\begin{aligned}
H &= E_0 + \sum_q \left[\hbar\omega(q) \left(a_q^+ a_q + \frac{1}{2} \right) - \hbar A_q \right]; \\
\omega(q) &= \sqrt{A_q^2 - B_q^2} \approx \frac{S J Z a q}{\sqrt{3}} \Big|_{q \rightarrow 0}; \\
A_q &= S J Z; \quad B_q = S J \sum_j \exp i q \vec{r}_j.
\end{aligned}
\tag{7.102}$$

Таким образом, бозевские возбуждения для антиферромагнетика имеют при малых значениях импульса линейный спектр $\omega \equiv vq$, их называют **спиновыми волнами**, а величина $v = S J Z a / \sqrt{3}$ является скоростью спиновых волн. Заметим, что в выражении для энергии антиферромагнетика (7.102) при нулевой температуре отсутствуют возбуждения (вклад $\langle a_q^+ a_q \rangle = 0$), но энергия отличается от выражения (7.96) для E_0 на аддитивную поправку $-\sum_q \hbar A_q$, а также на вклад нулевых колебаний (член с $1/2$). Это различие и объясняет результаты численного анализа, представленные выше в таблице.

Таким образом, у ферромагнетика в основном состоянии суммарная проекция спина $\langle S^z \rangle_0 = \pm N_a$, а у антиферромагнетика $\langle S^z \rangle_0 = 0$. Первое возбужденное состояние в антиферромагнетике также характеризуется нулевой проекцией полного спина: $\langle S^z \rangle_1 = 0$, так как спиновые возбуждения при своем распространении по кристаллу не меняют суммарную проекцию спина.

Зная свойства основного состояния и низших возбуждений, можно при численном расчете спиновой системы сделать вывод о фазовых состояниях, в которые переходит система при изменении параметров взаимодействия. Продемонстрируем это на конкретном численном примере.

Пример 7.3. Рассмотрим спиновую цепочку с $S = 1$, описываемую следующей моделью:

$$H = -\frac{J_{\perp}}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + J_{\parallel} \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z + U \sum_i (S_i^z)^2,$$

где U – параметр взаимодействия с осью легкого намагничивания, если $U < 0$, или с плоскостью легкого намагничивания, если $U > 0$ (при достаточно больших значениях U спины стремятся расположиться в плоскости xy).

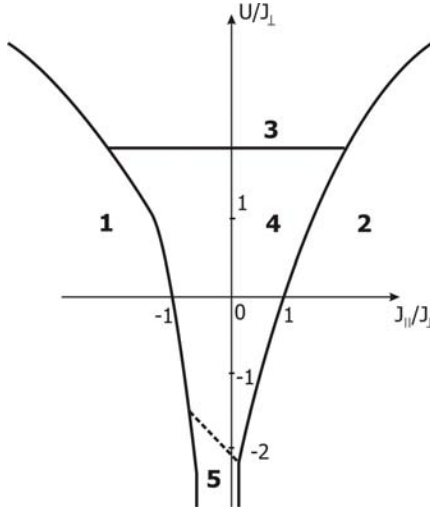


Рис. 7.5. Фазовая диаграмма модели из примера 7.3

Фазовая диаграмма основного состояния этой модели изучалась в [17, 29, 30] точной диагонализацией цепочек с $N_a \leq 12$ (рис. 7.5). Различные фазовые состояния определяются по следующим критериям: **1** – ферромагнетик ($\langle S_z \rangle = \pm N_a$); **2** – антиферромагнетик ($\langle S_z \rangle = 0$ как в основном состоянии, так и в первом возбужденном); **3** – щель Холдейна (состояние со щелью в спектре и $\langle S_z \rangle = \pm 1$ в первом возбужденном состоянии); **4** – спиновая XY-жидкость (бесщелевое состояние с $\langle S_z \rangle = \pm 1$ в первом возбужденном состоянии). Кроме того, в [29] наблюдалась еще одна фаза, так называемая "spin-1/2-like" XY-фаза (область **5** на рис. 7.5), которая характеризуется $\langle S_z \rangle = 0$ в основном состоянии и $\langle S_z \rangle = \pm 2$ в первом возбужденном.

7.6. Соотношения и предельные случаи для фермионных, бозонных и спиновых моделей сильно коррелированных систем

Модели, рассмотренные в гл. 7, 8 и 9 для различных видов квантовых статистик, глубоко взаимосвязаны, и в предельных случаях могут переходить друг в друга. Именно поэтому в ферми-системе при определенных условиях обнаруживаются магнитные свойства, а спиновое упорядочение может обладать всеми свойствами бозонной сверхтекучей системы.

7.6.1. Связь между бозонной и спиновыми моделями

Одним из предельных случаев бозонной модели Хаббарда (6.14) является ХХZ-модель (7.53). Как отмечалось, статистика hard-core-бозонов характеризуется ограничением чисел заполнения узлов более чем одним бозоном, т.е. фактически реализуется принцип Паули, как для фермионов. Отличие же этой статистики от случая от бесспиновых фермионов заключается в симметрии волновой функции, т.е. операторы hard-core-статистики будут фермионными на одном узле и бозонными на разных узлах решетки – они подчиняются так называемой смешанной статистике:

$$\begin{aligned} a_i a_j^+ - a_j^+ a_i &= 0, \quad i \neq j; \\ a_i a_i^+ + a_i^+ a_i &= 1. \end{aligned} \tag{7.103}$$

Для бозонной модели Хаббарда (6.14) эта ситуация эквивалентна случаю бесконечного отталкивания на узлах:

$$\frac{U}{t} \gg 1. \tag{7.104}$$

При условии (7.104) главную роль в гамильтониане (6.14) играет межузельное взаимодействие V . Запишем гамильтониан hard-core-модели, включив в него явно химический потенциал μ , допуская взаимодействие необязательно с ближайшими соседями:

$$H = -\sum_{i \neq j} t_{ij} a_i^+ a_j + \sum_{i \neq j} V_{ij} n_i n_j - \mu \sum_k n_k. \quad (7.105)$$

Введем спиновые операторы S^X, S^Y, S^Z по следующим правилам:

$$\begin{aligned} S_i^Z &= \frac{1}{2} - a_i^+ a_i; \\ a_i^+ &= S_i^X - i S_i^Y; \\ a_i &= S_i^X + i S_i^Y. \end{aligned} \quad (7.106)$$

Преобразование (7.106) называется **преобразованием Холстейна – Примакова**.

Можно убедиться, что операторы S^X, S^Y, S^Z , введенные таким образом, являются операторами для спина 1/2, подчиняются всем коммутационным соотношениям для спиновых операторов и выражаются через матрицы Паули:

$$S^X = \frac{1}{2} \sigma^X; \quad S^Y = \frac{1}{2} \sigma^Y; \quad S^Z = \frac{1}{2} \sigma^Z, \quad (7.107)$$

а рождение или уничтожение бозона на узле i эквивалентно, соответственно, уменьшению или увеличению Z -проекции спина на узле i , т.е.

$$S_i^- = a_i^+; \quad S_i^+ = a_i. \quad (7.108)$$

Подставляя соотношения (7.107) в гамильтониан (7.105), получаем:

$$\begin{aligned} H &= -\sum_{i \neq j} t_{ij} (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y) + \sum_{i \neq j} V_{ij} S_i^Z S_j^Z + \\ &+ \sum_{i \neq j} V_{ij} \left(\frac{1}{4} - S_i^Z \right) - \mu \sum_i \left(\frac{1}{2} - S_i^Z \right), \end{aligned} \quad (7.109)$$

или, убирая несущественные постоянные в химический потенциал, и предполагая, что $t_{ij} \equiv t$, $V_{ij} \equiv V$, имеем:

$$H = -t \sum_{i \neq j} (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y) + V \sum_{i \neq j} S_i^Z S_j^Z - \mu' \sum_i \left(\frac{1}{2} - S_i^Z \right). \quad (7.110)$$

Гамильтониан (7.110) является ХХZ-моделью для спина 1/2 с амплитудой взаимодействия t в плоскости XY, и V – по оси Z. При $t = -V$ модель описывает изотропный гейзенберговский ферромагнетик; если $t > 0, V > 0$, то модель описывает ферромагнитное упорядочение в XY-плоскости и антиферромагнитное – по оси Z. Соотношение между числом бозонов в hard-core-модели и полной проекцией спина на ось Z в спиновой модели имеет вид

$$N = \frac{N_a}{2} - \sum_i \langle S_i^z \rangle, \quad (7.111)$$

так что полная проекция спина на ось Z равна нулю при $N = \frac{N_a}{2}$.

7.6.2. Соответствие между моделью Хаббарда и спиновыми моделями

Соответствие между моделью Хаббарда и спиновыми моделями справедливо только в пределе сильного отталкивания на узле. Вывод, приводимый ниже, в подробностях приведен в [10], здесь же лишь кратко обсудим методику вывода и результаты.

Рассмотрим модель Хаббарда

$$H = -t \sum_{i \neq j} \sum_{\sigma} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (7.112)$$

в пределе

$$\frac{t}{U} \ll 1. \quad (7.113)$$

Разделим гамильтониан (7.112) на несколько слагаемых:

$$H = T_d + T_h + T_{\text{mix}} + V, \quad (7.114)$$

где

$$\begin{aligned}
V &= \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}; \\
T_d &= -t \sum_{\substack{i \neq j \\ \sigma}} (n_{i,-\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} n_{j,-\sigma} + \text{h.c.}); \\
T_h &= -t \sum_{\substack{i \neq j \\ \sigma}} ((1 - n_{i,-\sigma}) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + \text{h.c.}); \\
T_{\text{mix}} &= -t \sum_{\substack{i \neq j \\ \sigma}} ((1 - n_{i,-\sigma}) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} n_{j,-\sigma} + n_{i,-\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + \text{h.c.}).
\end{aligned} \tag{7.115}$$

Вклад T_d в (7.115) описывает перескоки электрона с узла на узел, когда оба узла заняты электронами с противоположным спином; слагаемое T_h отвечает перескокам электронов на узлы, незаполненные электронами с противоположным спином; слагаемое T_{mix} описывает такие процессы перескока электрона, когда либо один, либо другой, но не два одновременно, узла, участвующих в перескоке, заняты электроном с противоположным спином. Заметим, что в рассматриваемом пределе $U/t \gg 1$ самый малый вклад дает слагаемое T_d , так как описываемый им процесс связан с большой добавкой к энергии электрона, $\Delta E \sim U$; в дальнейшем этим слагаемым можно пренебречь. Также можно пренебречь слагаемым V , так как вероятность нахождения на одном узле двух электронов мала при больших значениях U .

Далее к гамильтониану применяется унитарное преобразование Q , вид которого определяется из дальнейшего анализа, и строится эффективный гамильтониан

$$H_{\text{eff}} = e^{-iQ} H e^{iQ}. \tag{7.116}$$

Раскладывая далее (7.116) по параметру t/U , имеем:

$$H_{\text{eff}} \approx H - i[Q, H]. \tag{7.117}$$

При этом удобно часть гамильтониана переписать в спиновых операторах для спина $S = 1/2$, вводимых следующим образом:

$$\begin{aligned}
S_i^+ &= a_{i\uparrow}^+ a_{i\downarrow}; \\
S_i^- &= a_{i\downarrow}^+ a_{i\uparrow}; \\
S_i^z &= \frac{1}{2} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}).
\end{aligned}
\tag{7.118}$$

С учетом (7.118) эффективный гамильтониан принимает следующий окончательный вид [10, 11]:

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}} &= -t \sum_{i \neq j, \sigma} ((1 - n_{i,-\sigma}) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + \text{h.c.}) + \\
&+ \frac{2t^2}{U} \sum_{ij} \left(\vec{S}_i \vec{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right).
\end{aligned}
\tag{7.119}$$

Гамильтониан (7.119) – предельный случай гамильтониана Хаббарда при больших U . Его называют также **t-J-моделью**, характеризующейся тем, что в узельном базисе этой модели отсутствуют конфигурации с двойным заполнением узла.

При половинном заполнении, когда на каждый узел приходится один электрон, первое слагаемое в (7.119) становится равным нулю, и модель становится точной изотропной антиферромагнитной моделью Гейзенберга для спина $S = 1/2$ (за вычетом несущественной постоянной):

$$H_{\text{eff}} = \frac{2t^2}{U} \sum_{ij} \left(\vec{S}_i \vec{S}_j - \frac{1}{4} \right).
\tag{7.120}$$

Задачи

7.6. Для изотропной антиферромагнитной модели Гейзенберга с гамильтонианом

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - \bar{H} \sum_i \vec{S}_i,$$

$J = -1$; число узлов $N_a = 6$; максимальная проекция спина на узле $S^z = 3/2$; периодические граничные условия, рассчитать зависимость средней намагниченности основного и двух нижних возбужденных состояний от величины приложенного вдоль оси z внешнего магнитного поля H . Построить графики зависимостей.

7.7. Для изотропной модели Гейзенберга с гамильтонианом

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{\langle ij \rangle} \bar{S}_i \bar{S}_j - \bar{H} \sum_i \bar{S}_i,$$

число узлов $N_a = 6$; максимальная проекция спина на узле $S^z = 3/2$; периодические граничные условия, рассчитать зависимость энергии основного состояния и проекции магнитного момента на ось z от величины внешнего магнитного поля $H = \{H_x, 0, 0\}$, приложенного вдоль оси x , в интервале $H_x = 0 \div 5|J|$. Рассмотреть случаи $J=1$ и $J=-1$. Построить графики зависимостей. Сравнить спектр системы со спектром из задачи 7.6.

7.8. Для изотропной антиферромагнитной модели Гейзенберга с гамильтонианом

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{\langle ij \rangle} \bar{S}_i \bar{S}_j - \bar{H} \sum_i \bar{S}_i,$$

$J = -1$; $\bar{H} = \{0, 0, H_z\}$, $H_z = 0.1$; число узлов $N_a = 8$; максимальная проекция спина на узле $S^z = 1/2$; периодические граничные условия, рассчитать коррелятор $\langle S_i^z S_j^z \rangle_0 \equiv \langle \varphi_0 | S_i^z S_j^z | \varphi_0 \rangle$, где φ_0 – собственная функция гамильтониана, отвечающая основному состоянию, в зависимости от $|i-j|$. Построить график зависимости.

При тех же условиях совершить переход от антиферромагнитной модели к ферромагнитной, т.е. провести расчеты для значений J от -1 до $+1$ с шагом 0.25 и построить все зависимости коррелятора $\langle S_i^z S_j^z \rangle_0$ на одном графике.

Проанализировать результат.

7.9. Для изотропной ферромагнитной модели Гейзенберга с гамильтонианом

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{\langle ij \rangle} \bar{S}_i \bar{S}_j - \bar{H} \sum_i \bar{S}_i,$$

$J = 1$; $\bar{H} = \{0, 0, H_z\}$, $H_z = 0.1$; число узлов $N_a = 8$; максимальная проекция спина на узле $S^z = 1/2$; периодические граничные условия, рассчитать коррелятор $\langle S_i^+ S_j^- \rangle_0 \equiv \langle \varphi_0 | S_i^+ S_j^- | \varphi_0 \rangle$, где φ_0 – собственная функция гамильтониана, отвечающая основному состоянию, в зависимости от $|i-j|$. Построить график зависимости.

При тех же условиях провести расчеты для различных значений H_z , и построить все зависимости коррелятора $\langle S_i^+ S_j^- \rangle_0$ на одном графике. Проанализировать результат.

8. Некоторые физические и математические особенности метода точной диагонализации

В этой главе будут рассмотрены некоторые особенности метода точной диагонализации конечных кластеров, которые позволяют сократить объем вычислений и получить дополнительную физическую информацию о системе из результатов численного анализа.

8.1. Конечные кластеры и трансляционная инвариантность

В большинстве случаев рассматриваемые конечные системы, кластеры, выбираются с периодическими граничными условиями (рис. 8.1) для того, чтобы все узлы системы были эквивалентными. Будем далее полагать, что рассматриваемые кластеры – одномерные цепочки длиной L_x , или двумерные системы размером $L_x \times L_y$, или трехмерные системы размером $L_x \times L_y \times L_z$.

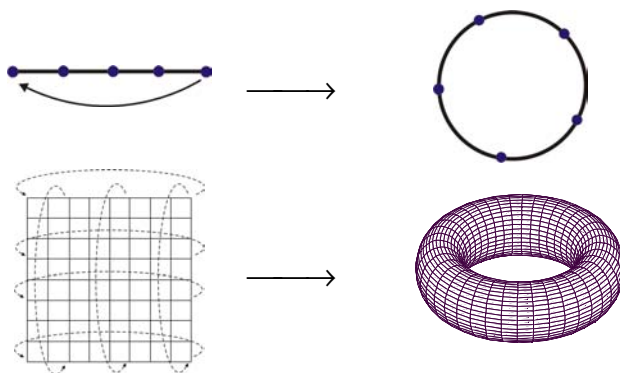


Рис. 8.1. Периодические граничные условия для одномерной и двумерной систем

Для конкретных случаев может быть выбрана и другая, необязательно периодическая, геометрия кластера (периодическая геометрия кластера называется также **геометрией тора**). Используют также антипериодические граничные условия, свободные, или нулевые, граничные условия и другие варианты геометрии кластеров.

Далее будут рассматриваться только кластеры с периодическими граничными условиями. В этом случае все узлы системы эквивалентны, что позволяет сократить объем расчетов за счет уменьшения размерности гильбертова пространства системы.

Понизить размерность фоковского базиса системы можно, если учесть симметрию кластера. Например, для периодической цепочки с N_a узлами возможно учесть трансляционную инвариантность и перейти в систему функций, являющихся одновременно собственными функциями оператора трансляции и оператора импульса. В этом новом базисе гамильтонова матрица будет иметь блочно-диагональный вид, и можно отдельно решить задачу Шредингера для каждой из трансляций или для каждого сектора импульса.

Для дальнейшего изложения необходимы некоторые понятия из теории периодического потенциала, обычно рассматриваемые в физике твердого тела [4, 31]. Следует выяснить вид волновых функций, для которых справедливы инварианты, связанные с периодичностью пространства.

Если имеется пространственная периодическая структура (кристаллическая решетка), то вектор трансляции \vec{R} на этой структуре определяется как

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, \quad (8.1)$$

где n_1, n_2, n_3 – целые числа, $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ – базисные векторы решетки. Периодическая структура с определенным на ней вектором трансляции называется **решеткой Бравэ** (рис. 8.2).

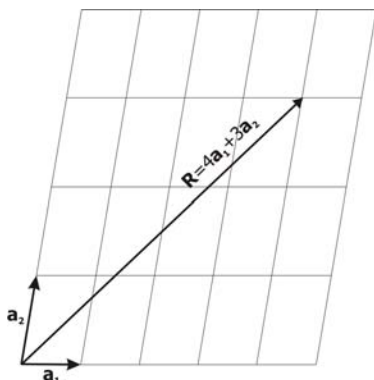


Рис. 8.2. Двумерная решетка Бравэ

Выбрав один из узлов решетки и задавая различные n_1, n_2, n_3 , можно получить координаты любого из узлов решетки, т.е. векторы трансляции (8.1) полностью определяют пространственную решетку Бравэ.

Для каждого вектора трансляции введем **оператор трансляции** T_R , под действием которого аргумент любой функции $f(\vec{r})$, определенной в пространстве решетки, сдвигается на \vec{R} :

$$T_R f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R}). \quad (8.2)$$

Результат двух последовательных трансляций не зависит от порядка их применения, так как

$$T_R T_{R'} f(\vec{r}) = T_{R'} T_R f(\vec{r}) = \Psi(\vec{r} + \vec{R} + \vec{R}'). \quad (8.3)$$

Таким образом, оператор трансляции обладает свойством

$$T_R T_{R'} = T_{R'} T_R = T_{R+R'}. \quad (8.4)$$

Рассмотрим задачу Шредингера на периодической решетке

$$H\Psi = E\Psi, \quad (8.5)$$

где гамильтониан H также является периодическим с периодом решетки. Тогда справедливо следующее:

$$T_R H\Psi = H(r + R)\Psi(r + R) = H(r)\Psi(r + R) = H T_R \Psi. \quad (8.6)$$

Таким образом,

$$[T_R, H] = 0, \quad (8.7)$$

т.е. оператор трансляции коммутирует с гамильтонианом. Это означает, что для операторов H и T существует общая система собственных функций, для которых справедливо:

$$\begin{aligned} H\Psi &= E\Psi; \\ T_R\Psi &= c(R)\Psi, \end{aligned} \quad (8.8)$$

здесь $c(R)$ – собственные значения оператора трансляции. Из (8.4) получаем, что

$$\begin{aligned} T_{R'}T_R\Psi &= c(R)T_{R'}\Psi = c(R)c(R')\Psi; \\ T_{R'}T_R\Psi &= T_{R+R'}\Psi = c(R+R')\Psi, \end{aligned} \quad (8.9)$$

а значит,

$$c(R+R') = c(R)c(R'). \quad (8.10)$$

В общем случае, для каждого базисного вектора решетки можно записать:

$$c(\mathbf{a}_j) = e^{2\pi i x_j}, \quad (8.11)$$

где x_j – комплексное число. Пользуясь свойствами собственного значения оператора трансляции (8.10), находим для вектора трансляции \vec{R} :

$$c(\vec{R}) = c(\mathbf{a}_1)^{n_1} c(\mathbf{a}_2)^{n_2} c(\mathbf{a}_3)^{n_3} = e^{2\pi i(x_1 n_1 + x_2 n_2 + x_3 n_3)} = e^{i\vec{k}\vec{R}}, \quad (8.12)$$

где \vec{k} – вектор, имеющий размерность вектора обратной решетки.

Вектор \vec{k} в (8.12) определен с точностью до произвольного вектора \mathbf{g} вида

$$\vec{g}\vec{a} = 2\pi n, \quad (8.13)$$

n – целое число. Множество таких векторов можно представить в виде разложения

$$\vec{g} = \sum_{\alpha=1}^3 \vec{b}_\alpha m_\alpha, \quad (8.14)$$

где m_α – целые числа, а векторы \vec{b} обычно выбираются в виде:

$$\vec{b}_i = \frac{2\pi[\vec{a}_j \vec{a}_k]}{(\vec{a}_1[\vec{a}_2 \vec{a}_3])}, \quad i \neq j \neq k. \quad (8.15)$$

Для простой кубической решетки с периодом a имеем:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \vec{e}_1; \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \vec{e}_2; \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \vec{e}_3. \quad (8.16)$$

Векторы \vec{b}_i называются **базисными векторами обратной решетки**. Они выбраны так, что ортогональны базисным векторам прямой решетки:

$$\vec{b}_i \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}. \quad (8.17)$$

Любой вектор \vec{k} обратной решетки может быть разложен по базису векторов \vec{b}_i :

$$\vec{k} = x_1 \vec{b}_1 + x_2 \vec{b}_2 + x_3 \vec{b}_3. \quad (8.18)$$

Заметим, что векторы обратной решетки естественным образом появляются при рассмотрении квантовой задачи с периодическим потенциалом. Понятие обратного пространства уже вводилось при изучении дискретного преобразования Фурье в гл. 2.

Таким образом, собственные функции гамильтониана (8.5) могут быть выбраны так, чтобы они удовлетворяли условию:

$$T_R \Psi = \Psi(r + R) = c(R) \Psi = e^{i\vec{k}\vec{R}} \Psi(r), \quad (8.19)$$

при этом, как будет показано далее, вектор \vec{k} связан с оператором импульса.

Оператор трансляций может быть записан в виде

$$T_R = e^{i\vec{k}\vec{R}}, \quad (8.20)$$

где \hat{k} – некоторый оператор, собственное число которого равно \vec{k} .

Оператор трансляции унитарен:

$$T T^+ \equiv T T^{-1} = 1 \Rightarrow T^+ = T^{-1}, \quad (8.21)$$

и, следовательно, его действие на гамильтониан можно представить как унитарное преобразование

$$T_R H(r) T_R^+ = H(\vec{r} + \vec{R}), \quad (8.22)$$

так как

$$\begin{aligned} H\Psi = E\Psi &\Rightarrow T_R H T_R^+ T_R \Psi = E T_R \Psi \Rightarrow \\ &\Rightarrow T_R H T_R^+ \Psi' = E \Psi'; \Psi' = T_R \Psi, \end{aligned} \quad (8.23)$$

где Ψ' – блоховская волновая функция:

$$\Psi' = \Psi(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \Psi(\vec{r}). \quad (8.24)$$

Для выяснения физического смысла собственного числа \bar{k} рассмотрим малую трансляцию $\delta\vec{a}$, например, на минимальный шаг трансляции:

$$T_{\delta\vec{a}} H T_{\delta\vec{a}}^+ = H(\vec{r} + \delta\vec{a}) \approx H(\vec{r}) + \nabla H \delta\vec{a}. \quad (8.25)$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned} H(\vec{r} + \delta\vec{a}) &= R T_{\delta\vec{a}} H T_{\delta\vec{a}}^+ \approx (1 + i\bar{k}\delta\vec{a}) H (1 - \bar{k}\delta\vec{a}) = \\ &= H(\vec{r}) + i(\bar{k}H - H\bar{k})\delta\vec{a} = H(\vec{r}) + i[\bar{k}, H]\delta\vec{a}. \end{aligned} \quad (8.26)$$

Отсюда

$$\nabla H(\vec{r}) = i[\bar{k}, H]. \quad (8.27)$$

Равенство (8.27) позволяет определить физический смысл оператора \bar{k} . Действительно, оператор импульса по отношению к любой функции координаты f , определенной на дискретной решетке, удовлетворяет следующему соотношению [1, 26]:

$$[p, f] = pf - fp = \frac{\hbar}{i} \nabla f. \quad (8.28)$$

Из (8.27) получаем, что

$$\bar{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}, \quad (8.29)$$

и является интегралом движения, так как из (8.7) и (8.20) следует, что

$$[\bar{k}, H] = 0, \quad (8.30)$$

так что одновременно со спектром при решении задачи Шредингера в периодическом потенциале можно определить и разрешенные волновые векторы.

Задача 8.1. Доказать, что если $[e^{i\vec{k}\vec{R}}, H] = 0$ для произвольного вектора трансляции \vec{R} , то и $[\vec{k}, H] = 0$, и наоборот.

Итак, собственную волновую функцию гамильтониана в условиях периодического потенциала можно представить как произведение экспоненциального множителя на периодическую функцию:

$$\Psi(r) = \exp^{i\vec{k}\vec{r}} \varphi(r); \quad \varphi(r + R) = \varphi(r). \quad (8.31)$$

Полученное соотношение (8.31) называется **теоремой Блоха** [4, 31], а вектор \vec{k} – **блоховским волновым вектором**. Докажем, что он действителен.

Наложим на волновую функцию периодические граничные условия:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r} + L_x \vec{a}_x) &\equiv \Psi(\vec{r}); \\ \Psi(\vec{r} + L_y \vec{a}_y) &\equiv \Psi(\vec{r}); \\ \Psi(\vec{r} + L_z \vec{a}_z) &\equiv \Psi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (8.32)$$

Эти граничные условия называются **условиями Борна – Кармана** [4, 32]. Согласно теореме Блоха, получаем:

$$\Psi(\vec{r} + L_\alpha \vec{a}_\alpha) = e^{iL_\alpha \vec{k} \vec{a}_\alpha} \Psi(\vec{r}); \quad \alpha = x, y, z. \quad (8.33)$$

Из условия ортогональности базисных векторов получаем:

$$e^{2\pi i L_\alpha x_\alpha} = 1 \Rightarrow x_\alpha = \frac{m_\alpha}{L_\alpha}, \quad (8.34)$$

где m – целое. Следовательно, разрешенные значения блоховского волнового вектора действительны и равны

$$\vec{k} = \frac{m_x}{L_x} \vec{b}_x + \frac{m_y}{L_y} \vec{b}_y + \frac{m_z}{L_z} \vec{b}_z. \quad (8.35)$$

Для простой кубической решетки находим:

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{m_x}{L_x} \vec{e}_x + \frac{m_y}{L_y} \vec{e}_y + \frac{m_z}{L_z} \vec{e}_z \right). \quad (8.36)$$

Таким образом, доказано, что решение задачи Шредингера (8.5), которое удовлетворяет трансляционной инвариантности, следует искать в виде блоховской волновой функции (8.31), при этом

вектор \vec{k} действителен и является одним из разрешенных векторов обратной решетки. Это же относится и к исходному базису для построения гамильтоновой матрицы.

Рассмотрим подробнее вопрос разбиения исходной гамильтоновой матрицы на блоки, соответствующие трансляциям, на конкретном примере одномерной цепочки, описываемой моделью Бозе – Хаббарда, с числом узлов $N_a = 4$ и числом частиц $N = 3$. Узельный базис этой системы состоит из 20 функций:

$$\begin{aligned} \Phi_1 = |0003\rangle; \Phi_2 = |0012\rangle; \Phi_3 = |0021\rangle; \Phi_4 = |0030\rangle; \\ \Phi_5 = |0102\rangle; \Phi_6 = |0111\rangle; \Phi_7 = |0120\rangle; \Phi_8 = |0201\rangle; \\ \Phi_9 = |0210\rangle; \Phi_{10} = |0300\rangle; \Phi_{11} = |1002\rangle; \Phi_{12} = |1011\rangle; \\ \Phi_{13} = |1020\rangle; \Phi_{14} = |1101\rangle; \Phi_{15} = |1110\rangle; \Phi_{16} = |1200\rangle; \\ \Phi_{17} = |2001\rangle; \Phi_{18} = |2010\rangle; \Phi_{19} = |2100\rangle; \Phi_{20} = |3000\rangle. \end{aligned} \quad (8.37)$$

Рассортируем все функции базиса (8.37) на классы с индексом ξ так, что узельные функции $\varphi_\xi(n)$ в каждом классе будут порождаться производящей функцией $\varphi_\xi(0)$ посредством последовательных трансляций:

$$\begin{aligned} T\varphi_\xi(n) = \varphi_\xi(n+1); \quad 0 \leq n \leq N_\xi; \\ T\varphi_\xi(N_\xi) = \varphi_\xi(0). \end{aligned} \quad (8.38)$$

При этом число $N_\xi + 1$ – максимальное число функций класса ξ . Например, функции

$$\Phi_1 = |0003\rangle, \Phi_4 = |0030\rangle, \Phi_{10} = |0300\rangle, \Phi_{20} = |3000\rangle \quad (8.39)$$

получаются друг из друга последовательными трансляциями вдоль цепочки.

Выберем в качестве производящей функции класса $\xi = 1$ функцию

$$\varphi_1(0) = |3000\rangle, \quad (8.40)$$

тогда

$$\begin{aligned}
T\varphi_1(0) &= \varphi_1(1) = |0300\rangle; \\
T^2\varphi_1(0) &= T\varphi_1(1) = \varphi_1(2) = |0030\rangle; \\
T^3\varphi_1(0) &= T^2\varphi_1(1) = T\varphi_1(2) = \varphi_1(3) = |0003\rangle; \\
N_1 &= 3.
\end{aligned} \tag{8.41}$$

Для остальных классов имеем:

$$\begin{aligned}
\varphi_2(0) &= |1200\rangle; \varphi_2(1) = |0120\rangle; \varphi_2(2) = |0012\rangle; \varphi_2(3) = |2001\rangle; \\
\varphi_3(0) &= |2100\rangle; \varphi_3(1) = |0210\rangle; \varphi_3(2) = |0021\rangle; \varphi_3(3) = |1002\rangle; \\
\varphi_4(0) &= |2010\rangle; \varphi_4(1) = |0201\rangle; \varphi_4(2) = |1020\rangle; \varphi_4(3) = |0102\rangle; \\
\varphi_5(0) &= |1011\rangle; \varphi_5(1) = |1101\rangle; \varphi_5(2) = |1110\rangle; \varphi_5(3) = |0111\rangle; \\
N_2 &= 3; N_3 = 3; N_4 = 3; N_5 = 3.
\end{aligned} \tag{8.42}$$

Получилось пять классов по четыре функции.

Пример 8.1. В каждом из классов необязательно находится одинаковое число функций. Для случая $N_a = 4$ и $N = 2$ имеем:

$$\begin{aligned}
\Phi_1 &= |0002\rangle; \Phi_2 = |0011\rangle; \Phi_3 = |0020\rangle; \Phi_4 = |0101\rangle; \Phi_5 = |0110\rangle; \\
\Phi_6 &= |0200\rangle; \Phi_7 = |1001\rangle; \Phi_8 = |1010\rangle; \Phi_9 = |1100\rangle; \Phi_{10} = |2000\rangle,
\end{aligned}$$

соответственно,

$$\begin{aligned}
\varphi_1(0) &= |2000\rangle; \varphi_1(1) = |0200\rangle; \varphi_1(2) = |0020\rangle; \varphi_1(3) = |0002\rangle; \\
\varphi_2(0) &= |1100\rangle; \varphi_2(1) = |0110\rangle; \varphi_2(2) = |0011\rangle; \varphi_2(3) = |1001\rangle; \\
\varphi_3(0) &= |1010\rangle; \varphi_3(1) = |0101\rangle; \\
N_1 &= 3; N_2 = 3; N_3 = 1.
\end{aligned}$$

Здесь имеем два класса с $N_\xi + 1 = N_a$ и один усеченный класс с $N_\xi + 1 = N_a / 2$. Таких усеченных классов, как правило, получается небольшое число, так что в среднем в классе содержится столько функций, каков линейный размер системы (N_a). Максимальное число функций в классе не может быть больше линейного размера системы, т.е. $N_\xi \leq N_a - 1$ в случае одномерной системы.

Составим теперь из перегруппированных функций новый базис, который будет собственным базисом для оператора трансляции. Согласно рассмотренным ранее свойствам оператора трансляции, собственные функции этого оператора могут быть записаны в виде

комбинаций периодической функции и экспоненциального множителя:

$$\Psi_{m\xi} = \sum_{n=0}^{N_\xi} e^{i\vec{k}_m \vec{R}_n} A_\xi \varphi_\xi(n) = \sum_{n=0}^{N_\xi} e^{i2\pi mn/N_a} A_\xi \varphi_\xi(n), \quad (8.43)$$

где $k_m = \frac{2\pi m}{aN_a}$, $0 \leq m < N_a - 1$ – разрешенный вектор импульсного (обратного) пространства, а $R_n = na$ – вектор трансляции n -го порядка.

Коэффициенты A_ξ определяются из условия ортонормированности новых базисных функций для конкретного импульса k_m :

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{m\xi} | \Psi_{m\eta} \rangle &= A_\xi^* A_\eta \sum_{n=0}^{N_\xi} \sum_{k=0}^{N_\eta} e^{i2\pi(mk-mn)/N_a} \langle \varphi_\xi(n) | \varphi_\eta(k) \rangle = \\ &= A_\xi^* A_\eta \sum_{n=0}^{N_\xi} \sum_{k=0}^{N_\eta} e^{i2\pi(k-n)m/N_a} \delta_{\xi\eta} \delta_{nk} = |A_\xi|^2 \delta_{\xi\eta} \sum_{n=0}^{N_\xi} 1 = |A_\xi|^2 (N_\xi + 1) \delta_{\xi\eta}, \end{aligned} \quad (8.44)$$

откуда

$$A_\xi = \frac{1}{\sqrt{N_\xi + 1}}. \quad (8.45)$$

Новый базис представляет собой блочную структуру, пронумерованную по разрешенным векторам обратной решетки k_m или секторам импульсов m . Гамильтонова матрица в новом базисе будет блочно-диагональной из-за того, что собственные функции оператора импульса являются одновременно собственными функциями оператора трансляции, коммутирующего с гамильтонианом. Каждый из блоков по импульсам m имеет линейный размер, **приблизительно** равный количеству классов ξ (числу производящих функций). Точный размер каждого блока определяется числом всех классов ξ , участвующих в разложении по импульсу m . Связь между m и размерностью соответствующего блока предстоит выяснить.

Для определения этой связи поступим следующим образом. Допустим, мы выбрали базисные функции φ_ξ и сформировали гамильтонову матрицу в этом базисе, а затем провели процедуру

нахождения собственных чисел и собственных векторов. Наложим на собственную функцию, полученную диагонализацией гамильтоновой матрицы, условие: пусть она одновременно является собственной функцией оператора трансляции (и, соответственно, оператора импульса). После диагонализации она представима в виде разложения по этому новому базису:

$$\Psi_m = \sum_{\xi} C_{\xi} \Psi_{m\xi} = \sum_{\xi} C_{\xi} \sum_{n=0}^{N_{\xi}} e^{i2\pi mn/N_a} \varphi_{\xi}(n), \quad (8.46)$$

здесь C_{ξ} – коэффициенты разложения, а суммирование по ξ проводится по всем классам, участвующим в данном секторе m . Далее,

$$\begin{aligned} T\Psi_m &= \sum_{\xi} C_{\xi} \sum_{n=0}^{N_{\xi}-1} e^{i2\pi mn/N_a} \varphi_{\xi}(n+1) + \sum_{\xi} C_{\xi} e^{i2\pi m N_{\xi}/N_a} \varphi_{\xi}(0) = \\ &= e^{-i2\pi m/N_a} \sum_{\xi} C_{\xi} \sum_{n=0}^{N_{\xi}} e^{i2\pi mn/N_a} \varphi_{\xi}(n) + \sum_{\xi} C_{\xi} \varphi_{\xi}(0) (e^{i2\pi m N_{\xi}/N_a} - e^{-i2\pi m/N_a}) = \\ &= e^{-i2\pi m/N_a} \Psi_m + \sum_{\xi} C_{\xi} \varphi_{\xi}(0) (e^{i2\pi m N_{\xi}/N_a} - e^{-i2\pi m/N_a}). \end{aligned} \quad (8.47)$$

Из (8.47) следует, что для того, чтобы функция Ψ_m являлась одновременно собственной функцией оператора трансляции и оператора импульса, т.е.

$$T\Psi_m = e^{-i2\pi m/N_a} \Psi_m, \quad (8.48)$$

необходимо, чтобы второе слагаемое в (8.47) было равно нулю, а значит,

$$\frac{2\pi m N_{\xi}}{N_a} = -\frac{2\pi m}{N_a} + 2\pi M, \quad (8.49)$$

где M – целое. Выражение (8.49) означает фактически условие на выбор классов ξ , участвующих в разложении (8.46):

$$m(N_{\xi} + 1) = MN_a. \quad (8.50)$$

Пользоваться условием (8.50) следует так: сначала выбираем конкретный сектор по импульсу m и перебираем все классы ξ так, чтобы для каждого класса (8.50) удовлетворялось для какого-нибудь значения M .

Например, если положить $m = 0$, то находим, что условию (8.50) удовлетворяют все пять классов из (8.41) – (8.42), так как при $M = 0$ (8.50) обращается в тождество, верное для любых N_ξ . Следовательно, размер блока в гамильтоновой матрице, отвечающего сектору импульсов $m = 0$, будет равен 5×5 .

Далее при $m = 1$ находим:

$$N_\xi = N_a - 1 \text{ при } M = 1. \quad (8.51)$$

Так как в (8.41) – (8.42) $N_\xi = 3 = N_a - 1$ для всех ξ , то и в этом случае условию (8.50) удовлетворяют все пять классов из (8.41) – (8.42), и размер блока в гамильтоновой матрице, отвечающего сектору импульсов $m = 1$, также будет равен 5×5 .

При $m = 2$ имеем:

$$N_\xi + 1 = \frac{MN_a}{2} = \begin{cases} \frac{N_a}{2}, & \text{при } M = 1; \\ N_a, & \text{при } M = 2. \end{cases} \quad (8.52)$$

В случае (8.41) – (8.42) нет классов, у которых $N_\xi + 1 = N_a / 2$, но все классы удовлетворяют условию $N_\xi = N_a - 1$, т.е. и в этом случае размер блока в гамильтоновой матрице будет равен 5×5 .

Аналогично находим, что и для последнего сектора по импульсу $m = 3$ размер блока будет 5×5 .

Таким образом, гамильтонова матрица разбивается на четыре блока размером 5×5 :

$$H = \begin{pmatrix} (m=0) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (m=1) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (m=2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (m=3) \end{pmatrix}. \quad (8.53)$$

Размер новой матрицы 20×20 совпадает с размером гамильтоновой матрицы в базисе (8.37), так как общее число степеней свободы (размерность гильбертова пространства) системы не зависит от выбора базиса.

Пример 8.2. Для случая $N_a = 4, N = 2$ (см. пример 8.1) имеем:

- 1) сектор нулевого импульса $m = 0$. Здесь все классы удовлетворяют условию (8.49), поэтому размер блока в гамильтоновой матрице, соответствующего $m = 0$, будет 3×3 ;
- 2) $m = 1$. В этом случае условию (8.50) удовлетворяют два класса $\xi = 1$ и $\xi = 2$, т.е. размер соответствующего блока – 2×2 ;
- 3) $m = 2$. Согласно (8.51), в разложении участвуют все классы, и размер блока – 3×3 ;
- 4) $m = 3$. В последнем секторе по импульсу

$$N_\xi + 1 = \frac{MN_a}{3} \Rightarrow N_\xi + 1 = \begin{cases} N_a / 3; \\ N_a. \end{cases}$$

Так как число узлов в системе четно, то выполняется лишь условие $N_\xi + 1 = N_a$, и, аналогично случаю $m = 1$, участвуют только два класса $\xi = 1; 2$, и размер блока – 2×2 .

В итоге гамильтонова матрица разбивается на четыре блока: два блока размером 3×3 и два блока размером 2×2 .

Пример 8.3. Рассмотрим более сложный пример. Пусть есть система из $N = 8$ бозонов на цепочке из $N_a = 8$ узлов, размерность базиса такой системы будет $R = 6435$. Применяя метод трансляционной инвариантности задачу можно разбить на блоки, соответствующие секторам импульсов m , со следующими размерами R_m :

m	0	1	2	3	4	5	6	7
R_m	810x810	800x800	808x808	800x800	809x809	800x800	808x808	800x800

В этом случае классы ξ по трансляциям разбиваются на четыре неравные группы:

- 1) самая многочисленная группа, в которой $N_\xi + 1 = 8$, количество классов и производящих функций $\varphi_\xi(0)$ в этой группе равно 800, это такие функции, как, например, $|00131012\rangle, |00132101\rangle, |00140021\rangle$ и т.д.;
- 2) вторая группа, в которой $N_\xi + 1 = 4$, содержит восемь производящих функций: $|02110211\rangle, |01210121\rangle, |01120112\rangle, |01030103\rangle, |00310031\rangle, |00220022\rangle, |00130013\rangle$ и $|00040004\rangle$, каждая из которых порождает еще по три функции после трех последовательных трансляций;
- 3) третья группа, в которой $N_\xi + 1 = 2$, содержит всего одну производящую функцию $|02020202\rangle$, порождающую еще одну функцию после одной трансляции: $|20202020\rangle$;
- 4) последняя группа, в которой $N_\xi + 1 = 1$, содержит единственную производящую функцию $|11111111\rangle$, которая не порождает никаких новых функций, так как любая трансляция опять приводит к ней же.

Построим базис для первого блока с нулевым импульсом $m=0$. Согласно выражению (8.49), в этот блок должны войти все классы ξ , их количество равно 810, это число и будет линейным размером этого блока.

Далее в сектор с импульсом $m=1$, согласно соотношению (8.50), войдут все классы с $N_\xi = N_a - 1$, т.е. первые 800 классов; для следующего сектора $m=2$, согласно (8.51), находим все классы с $N_\xi + 1 = 4$ и $N_\xi + 1 = 8$, что дает 808 базисных функций; и т.д.

В итоге задача диагонализации разбивается на подзадачи по секторам импульсов, гамильтонова матрица каждой из которых в $\sim N_a$ раз меньше по линейному размеру исходной матрицы, и диагонализация каждой из этих матриц занимает приблизительно в N_a^3 раз меньше времени, чем диагонализация полной матрицы.

Рассчитаем матричные элементы внутри блока, отвечающего сектору m :

$$H_{\xi\eta} \equiv \langle \Psi_{m\xi} | H | \Psi_{m\eta} \rangle = \sum_{n=0}^{N_\xi} \sum_{k=0}^{N_\eta} \frac{e^{2\pi i(k-n)m/N_a} \langle \varphi_\xi(n) | H | \varphi_\eta(k) \rangle}{\sqrt{(N_\xi + 1)(N_\eta + 1)}}. \quad (8.54)$$

Если учесть трансляционную симметрию гамильтониана и узельных функций,

$$\begin{aligned} \langle \varphi_\xi(n) | H | \varphi_\eta(k) \rangle &= H_{\xi\eta}^{\xi\eta} \equiv H_{\xi\eta}^{\xi\eta}{}_{n-1, k-1} \equiv H_{\xi\eta}^{\xi\eta}{}_{0, k-n} = \\ &= \langle \varphi_\xi(0) | H | \varphi_\eta(k-n) \rangle, \end{aligned} \quad (8.55)$$

то число слагаемых в (8.54) можно сократить в N_ξ раз:

$$H_{\xi\eta} = \frac{\sqrt{N_\xi + 1}}{\sqrt{N_\eta + 1}} \sum_{k=0}^{N_\eta} e^{2\pi i m k / N_a} \langle \varphi_\xi(0) | H | \varphi_\eta(k) \rangle. \quad (8.56)$$

Расчет матричных элементов (8.56) от диагональной части гамильтоновой матрицы в базисе φ приводит к следующему:

$$\begin{aligned}
H_{\xi\eta}^{\text{diag}} &= \frac{\sqrt{N_{\xi} + 1}}{\sqrt{N_{\eta} + 1}} \sum_{k=0}^{N_{\eta}} e^{2\pi i m k / N_a} \langle \varphi_{\xi}(0) | H^{\text{diag}} | \varphi_{\eta}(k) \rangle = \\
&= \frac{\sqrt{N_{\xi} + 1}}{\sqrt{N_{\eta} + 1}} \sum_{k=0}^{N_{\eta}} e^{2\pi i m k / N_a} H_{\xi 0}^{\text{diag}} \delta_{\xi\eta} \delta_{k0} = H_{\xi 0}^{\text{diag}} \delta_{\xi\eta}.
\end{aligned} \tag{8.57}$$

Матричные элементы $H_{\xi 0}^{\text{diag}} = \langle \varphi_{\xi}(0) | H^{\text{diag}} | \varphi_{\xi}(0) \rangle$ в (8.57) – это обычные матричные элементы в узельном базисе, метод расчета которых уже известен. Важно, что в этом случае исчезают комплексные множители и нормировочные коэффициенты.

Следует отметить, что расчет матричных элементов от недиагональной части гамильтониана в базисе φ дает в общем случае ненулевые матричные элементы внутри всего блока, **в том числе и на главной диагонали**:

$$H_{\xi\xi}^{\text{nondiag}} = \sum_{k=0}^{N_{\xi}} e^{2\pi i m k / N_a} \langle \varphi_{\xi}(0) | H^{\text{nondiag}} | \varphi_{\xi}(k) \rangle \neq 0. \tag{8.58}$$

Докажем, что гамильтонова матрица в новом базисе также будет эрмитовой. Проще всего это получить из исходного выражения (8.54), применив операцию комплексного сопряжения:

$$H_{\eta\xi}^* = \sum_{k=0}^{N_{\eta}} \sum_{n=0}^{N_{\xi}} \frac{e^{-2\pi i (n-k)m / N_a} (\langle \varphi_{\eta}(k) | H | \varphi_{\xi}(n) \rangle)^*}{\sqrt{(N_{\xi} + 1)(N_{\eta} + 1)}}, \tag{8.59}$$

а с учетом того, что исходная матрица была эрмитова, т.е.

$$(\langle \varphi_{\eta}(k) | H | \varphi_{\xi}(n) \rangle)^* = \langle \varphi_{\xi}(n) | H | \varphi_{\eta}(k) \rangle, \tag{8.60}$$

получаем

$$H_{\eta\xi}^* = H_{\xi\eta}. \tag{8.61}$$

Итак, теперь гамильтонова матрица имеет блочно-диагональную структуру в соответствии с секторами импульса, каждый из блоков, отвечающий конкретному значению импульса m , имеет линейный размер приблизительно в N_a раз меньше размера исходной матрицы, и, в общем случае, состоит из комплексных элементов.

Пример 8.4. Рассмотрим модель Бозе – Хаббарда с параметрами $t=1, U=2$ для системы из примера 1 ($N_a = 4, N = 2$):

$$H = -t \sum_{i=1}^4 (a_i^+ a_{i+1} + a_{i+1}^+ a_i) + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^4 n_i (n_i - 1) = H^{\text{kin}} + H^U.$$

Гамильтонова матрица этой системы в узельном базисе (см. пример 1) имеет вид

$$H = \begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2} & 2 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2} & -1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{2} & 2 & 0 & 0 & -\sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & -1 & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} & 2 \end{pmatrix}.$$

Разобьем теперь матрицу на блоки, соответствующие различным импульсам, для этого поставим в соответствие нумерацию исходного узельного базиса и нового:

Узельная функция	Класс ξ	Трансляция p	$N_\xi + 1$
$\Phi_{10} = 2000\rangle$	1	0	4
$\Phi_6 = 0200\rangle$	1	1	
$\Phi_3 = 0020\rangle$	1	2	
$\Phi_1 = 0002\rangle$	1	3	
$\Phi_9 = 1100\rangle$	2	0	4
$\Phi_5 = 0110\rangle$	2	1	
$\Phi_2 = 0011\rangle$	2	2	
$\Phi_7 = 1001\rangle$	2	3	
$\Phi_8 = 1010\rangle$	3	0	2
$\Phi_4 = 0101\rangle$	3	1	

Сектор нулевого импульса $m = 0$ (см. пример 8.2) отвечает блоку размером 3×3 . Вклад от диагональных матричных элементов гамильтониана будет следующим:

$$H_{11}^{\text{diag}} = \langle \varphi_1(0) | H^U | \varphi_1(0) \rangle = \langle \Phi_{10} | H^U | \Phi_{10} \rangle = 2;$$

$$H_{22}^{\text{diag}} = \langle \varphi_2(0) | H^U | \varphi_2(0) \rangle = \langle \Phi_9 | H^U | \Phi_9 \rangle = 0;$$

$$H_{33}^{\text{diag}} = \langle \varphi_3(0) | H^U | \varphi_3(0) \rangle = \langle \Phi_8 | H^U | \Phi_8 \rangle = 0.$$

Теперь рассчитаем вклад от недиагональных матричных элементов:

$$\begin{aligned} H_{11}^{\text{kin}} &= \sum_{k=0}^{N_1} \langle \varphi_1(0) | H^{\text{kin}} | \varphi_1(k) \rangle = \\ &= \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_{10} \rangle + \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_6 \rangle + \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_3 \rangle + \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_1 \rangle = 0; \\ H_{12}^{\text{kin}} &= \frac{\sqrt{N_1+1}}{\sqrt{N_2+1}} \sum_{k=0}^{N_2} \langle \varphi_1(0) | H^{\text{kin}} | \varphi_2(k) \rangle = \\ &= \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_9 \rangle + \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_5 \rangle + \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_2 \rangle + \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_7 \rangle = -2\sqrt{2}; \\ H_{13}^{\text{kin}} &= \frac{\sqrt{N_1+1}}{\sqrt{N_3+1}} \sum_{k=0}^{N_3} \langle \varphi_1(0) | H^{\text{kin}} | \varphi_3(k) \rangle = \sqrt{2} (\langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_8 \rangle + \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_4 \rangle) = 0; \\ H_{23}^{\text{kin}} &= \frac{\sqrt{N_2+1}}{\sqrt{N_3+1}} \sum_{k=0}^{N_3} \langle \varphi_2(0) | H^{\text{kin}} | \varphi_3(k) \rangle = \sqrt{2} (\langle \Phi_9 | H^{\text{kin}} | \Phi_8 \rangle + \langle \Phi_9 | H^{\text{kin}} | \Phi_4 \rangle) = -2\sqrt{2}. \end{aligned}$$

Итоговая матрица действительна и имеет следующий вид:

$$m = 0 : \begin{pmatrix} 2 & -2\sqrt{2} & 0 \\ -2\sqrt{2} & 0 & -2\sqrt{2} \\ 0 & -2\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Проводим аналогичную процедуру для сектора $m=1$, ему будет отвечать блок размера 2×2 :

$$H_{11}^U = 2;$$

$$H_{22}^U = 0;$$

$$\begin{aligned} H_{11}^{\text{kin}} &= \sum_{k=0}^{N_1} e^{2\pi i k / N_a} \langle \varphi_1(0) | H^{\text{kin}} | \varphi_1(k) \rangle = \\ &= \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_{10} \rangle + e^{i\pi/2} \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_6 \rangle + e^{i\pi} \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_3 \rangle + e^{3\pi/2} \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_1 \rangle = 0; \\ H_{12}^{\text{kin}} &= \frac{\sqrt{N_1+1}}{\sqrt{N_2+1}} \sum_{k=0}^{N_2} e^{i\pi k / 2} \langle \varphi_1(0) | H^{\text{kin}} | \varphi_2(k) \rangle = \\ &= \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_9 \rangle + e^{i\pi/2} \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_5 \rangle + e^{i\pi} \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_2 \rangle + e^{3\pi/2} \langle \Phi_{10} | H^{\text{kin}} | \Phi_7 \rangle = \\ &= -\sqrt{2}(1 + e^{3\pi/2}) = \sqrt{2}(i-1). \end{aligned}$$

Оставшиеся элементы получаются эрмитовым сопряжением полученных, итоговая матрица имеет вид

$$m = 1 : \begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{2}(i-1) \\ -\sqrt{2}(1+i) & 0 \end{pmatrix}.$$

Аналогично получаем матрицы для остальных импульсов:

$$m = 2 : \begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{2}(1-i) & 0 \\ -\sqrt{2}(1+i) & 0 & -\sqrt{2}(1+i) \\ 0 & -\sqrt{2}(1-i) & 0 \end{pmatrix};$$

$$m = 3 : \begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{2}(1+i) \\ -\sqrt{2}(1-i) & 0 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, задача настолько упростилась, что в данном случае возможна даже аналитическая диагонализация матрицы.

Разбиение гамильтоновой матрицы по трансляциям позволяет получить дополнительную информацию о системе. Действительно, каждый блок в такой матрице отвечает определенному значению суммарного импульса системы, и после диагонализации матрицы полученные значения энергии в каждом блоке также будут отвечать определенному значению суммарного импульса, и, анализируя спектр, можно получить дисперсию системы $E(k)$. Этот метод называется **численным спектральным анализом**. При расчете же обычным способом все энергетические уровни оказываются перепутанными по импульсам, и выяснить зависимость $E(k)$ нет возможности.

Рассмотрим конкретный пример: модель Бозе – Хаббарда для системы из $N_a = 4$ узлов и $N = 3$ частиц с параметрами $t = 1$, $U = 2$:

$$H = -t \sum_{i=1}^4 (a_i^+ a_{i+1} + a_{i+1}^+ a_i) + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^4 n_i (n_i - 1). \quad (8.62)$$

После диагонализации матрицы в узельном базисе находим спектр системы:

$$\begin{aligned} E_1 &= -4.84135; \\ E_{2,3} &= -2.10379; \\ E_4 &= -0.88573; \\ E_5 &= 0.00000; \\ E_6 &= 0.40943; \\ E_{7,8} &= 0.80397; \\ &\dots \end{aligned} \quad (8.63)$$

Энергетические уровни отсортированы по возрастанию, но не по импульсам.

Применим процедуру разделения гамильтоновой матрицы на блоки, соответствующие определенным значениям импульса системы. С учетом (8.50) и (8.56) получаем четыре блока размером 5×5 , соответствующие импульсам

$$k_m = \frac{2\pi}{N_a} m = \frac{1}{2} \pi m; \quad m = 0; 1; 2; 3. \quad (8.64)$$

После диагонализации каждого из блоков находим зависимость $E(k)$ (табл. 8.1).

Таблица 8.1. Зависимость энергии системы от импульса

$m = 0; k = 0$	$m = 1; k = \pi/2$	$m = 2; k = \pi$	$m = 3; k = 3\pi/2$
- 4.84135	- 2.10379	- 0.88573	- 2.10379
0.40943	0.80397	0.00000	0.80397
...

Если сопоставить спектр в табл. 8.1 с (8.63), то видно, что все уровни энергии отсортированы по импульсам. Полный нулевой импульс системы соответствует основному состоянию E_1 и состоянию E_6 (см. (8.63)). Первое возбужденное состояние отвечает минимальному полному импульсу ($m = 1$). Физически это состояние соответствует **квазичастице** – элементарному возбуждению бозе-системы, эту квазичастицу называют **фононом**, так как все свойства этой квазичастицы соответствуют звуковым колебаниям плотности. Дальнейший анализ спектра приведет к адекватной картине одночастичных и многочастичных возбуждений над основным состоянием [33].

Эволюция спектра с увеличением параметра взаимодействия U в модели Бозе – Хаббарда с параметрами $N_a = 11, N = 7$ из [33] показана на рис. 8.3. Здесь уровни 1a и 1b – суперпозиция однофононных состояний с импульсом $\pm k_0, k_0 = 2\pi/N_a$; уровни 2a и 2b – суперпозиция двухфононных состояний $\{k_0, k_0\}$ и $\{-k_0, -k_0\}$. Уровень 3 – двухфононное состояние $\{k_0, -k_0\}$; уровни 4a и 4b – суперпозиция так называемых

сверхтоковых состояний, когда система из семи частиц движется как единое целое. Все энергии отсчитаны от основного состояния.

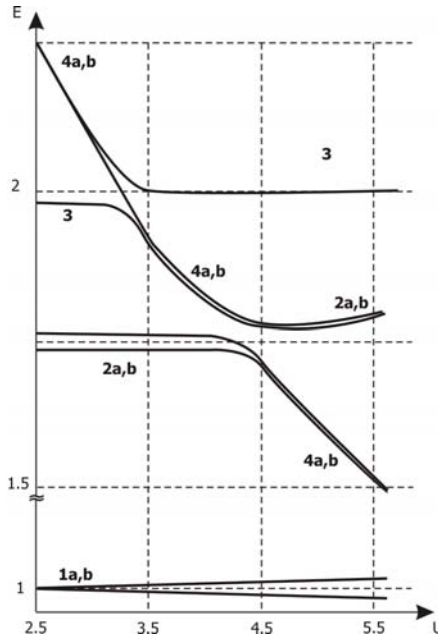


Рис. 8.3. Эволюция спектра с увеличением параметра взаимодействия U в модели Бозе – Хаббарда из [33]. Число узлов и частиц $N_a = 11$, $N = 7$ соответственно

Метод трансляционной инвариантности допускает ввод в расчет калибровочно-инвариантной фазы, т.е. позволяет учитывать внешние поля или токовые состояния в системе.

Для учета фазы следует в показателе экспоненты матричных элементов (8.56) сделать замену (см. разд. 6.6):

$$2\pi i \frac{mn}{N_a} \longrightarrow 2\pi i \frac{(mn \pm \Phi / \Phi_0)}{N_a}, \quad (8.65)$$

при этом знак в (8.65) определяется направлением перемещения частицы: положительный при перемещении частицы вдоль оси (для одномерного случая это операторы вида $a_{i+1}^+ a_i$ в гамильтониане) и отрицательный при перемещении против оси (соответственно, операторы вида $a_i^+ a_{i+1}$).

Эрмитовость гамильтоновой матрицы при преобразовании (8.65) не нарушается.

Задача 8.2. Получить матрицу гамильтониана (8.62) в представлении чисел заполнения, найти ее спектр и сравнить нижние уровни с (8.63). Представить матрицу H в блочно-диагональном виде в базе, собственном для оператора трансляции, диагонализировать по отдельности полученные блоки. Сравнить спектр $E(k)$ с (8.63).

Вся рассмотренная процедура разбиения гамильтоновой матрицы по трансляциям непосредственно обобщается на двумерную и трехмерную ситуации. Для этого следует провести разделение на классы по трансляциям отдельно для каждой проекции x, y, z , а затем объединить классы в единую систему. Тогда при размере системы $L_x \times L_y \times L_z$ можно добиться разделения матрицы на блоки, отвечающие импульсам k_{m_x, m_y, m_z} , каждый из блоков будет иметь линейный размер порядка $R' \sim R/L_x L_y L_z$, где R – размерность базиса системы. Матричные элементы внутри любого блока, соответствующего сектору импульсов (m_x, m_y, m_z) , будут иметь вид

$$H_{(\xi_x \xi_y \xi_z), (\eta_x \eta_y \eta_z)} = \sum_{k_x=0}^{N_{\eta_x}} \sum_{k_y=0}^{N_{\eta_y}} \sum_{k_z=0}^{N_{\eta_z}} \frac{\sqrt{N_{\xi_x} + 1} \sqrt{N_{\xi_y} + 1} \sqrt{N_{\xi_z} + 1}}{\sqrt{N_{\eta_x} + 1} \sqrt{N_{\eta_y} + 1} \sqrt{N_{\eta_z} + 1}} \times \\ \times e^{2\pi i(m_x k_x / L_x + m_y k_y / L_y + m_z k_z / L_z)} \langle \varphi_{\xi_x \xi_y \xi_z}(0) | H | \varphi_{\eta_x \eta_y \eta_z}(k_x, k_y, k_z) \rangle. \quad (8.66)$$

В завершение раздела отметим, что в результате разложения гамильтоновой матрицы по трансляциям получаются, в общем случае, комплексные эрмитовы матрицы.

При помощи простого способа можно **свести спектральную задачу для эрмитовой комплексной матрицы к задаче для действительной симметричной матрицы.**

Действительно, пусть есть гамильтонова матрица размера $R \times R$, и спектральная задача в матричном виде выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned}
H_{nm} &= \operatorname{Re}(H_{nm}) + i \operatorname{Im}(H_{nm}); \\
\operatorname{Re}(H_{nm}) &= \operatorname{Re}(H_{mn}), \operatorname{Im}(H_{nm}) = -\operatorname{Im}(H_{mn}); \\
H_{nm} \Psi_m &= E \Psi_m, \Psi = \operatorname{Re}(\Psi) + i \operatorname{Im}(\Psi).
\end{aligned} \tag{8.67}$$

Можно показать, что задача (8.67) эквивалентна следующей задаче:

$$\begin{aligned}
A_{nm} \Phi_m &= E \Phi_m; \\
A_{nm} &= \left(\begin{array}{c|c} \operatorname{Re}(H) & -\operatorname{Im}(H) \\ \hline \operatorname{Im}(H) & \operatorname{Re}(H) \end{array} \right); \Phi = \left(\begin{array}{c} \operatorname{Re}(\Psi) \\ \hline \operatorname{Im}(\Psi) \end{array} \right).
\end{aligned} \tag{8.68}$$

Здесь матрица A составлена из блоков, состоящих из действительной и мнимой частей гамильтоновой матрицы, а векторы Φ составлены из действительной и мнимой частей исходных волновых функций Ψ .

В справедливости (8.68) можно убедиться непосредственным перемножением матриц.

Задача свелась, таким образом, к спектральной задаче для действительной симметричной матрицы, линейный размер которой вдвое больше размера исходной матрицы. Следует иметь в виду, что после диагонализации этой матрицы будет получено **два одинаковых** набора значений E_1, E_2, \dots, E_R , каждый из которых будет являться спектром для задачи (8.68):

$$E = \left(\begin{array}{cccc|cccc} E_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & E_2 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & E_R & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & 0 & \dots & 0 & E_1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & E_R \end{array} \right). \tag{8.69}$$

8.2. Точная диагонализация больших матриц

При моделировании конкретных физических систем возникает проблема, заключающаяся в том, что приходится работать с матрицами, имеющими линейные размеры порядка 10^6 и более. Действительно, если рассмотреть, например, систему из 12 узлов и 12 частиц с бозе-статистикой, то размерность узельного базиса такой системы будет $R = \frac{23!}{12! 11!} = 1352078$ (см. (6.2)). Даже учет пространственной симметрии не позволит существенно уменьшить размерность базиса.

Как правило, при решении квантовых многочастичных задач редко приходится вычислять все **собственные пары** (т.е. пары вида (λ, x) , где λ – собственное значение матрицы, а x – соответствующий ему собственный вектор) гамильтоновой матрицы. Обычные постановки задач формулируются следующим образом:

- 1) вычислить некоторые собственные значения, принадлежащие некоторому интервалу, или крайние собственные значения (например, **низ спектра**);
- 2) найти некоторые собственные пары;
- 3) определить все собственные значения или большое их количество, не вычисляя собственные векторы.

Для матриц больших размеров существует несколько наиболее употребительных итерационных методов расчета собственных функций и собственных чисел. Одним из самых мощных методов диагонализации симметричных матриц является **алгоритм Ланцоша**, именно он, как правило, используется в современных математических пакетах. Алгоритм Ланцоша применяется для диагонализации **разреженных матриц**, у которых число ненулевых элементов много меньше общего числа элементов. Гамильтоновы матрицы, получаемые в моделях сильной связи, являются именно разреженными, так как число ненулевых элементов в каждой строке такой матрицы порядка числа возможных перескоков в системе, т.е. $\sim 2NZ$, где N – число частиц, Z – число ближайших соседей.

В процессе работы алгоритма Ланцоша гамильтонова матрица, записанная в памяти компьютера в компактной форме (хранятся только ненулевые элементы матрицы), **не преобразуется**, а вычисляются только произведения гамильтоновой матрицы на различные векторы. Это обстоятельство является весьма существенным, так как в общем случае унитарное преобразование разреженной матрицы превращает ее в **плотную матрицу**, для хранения которой ресурсов компьютера недостаточно.

Изложение основных моментов алгоритма Ланцоша, приводимое ниже, следует монографии [34]. Обсуждение технических вопросов, связанных с конкретной реализацией алгоритма Ланцоша, а также с методами компактного хранения и работы с разреженными матрицами, выходит за рамки данной книги.

8.2.1. Пространства и инвариантные подпространства. Процедура Рэлея – Ритца

Перед описанием алгоритма Ланцоша необходимо привести некоторые сведения из линейной алгебры.

Множество всех векторов-столбцов размера n называется n -мерным пространством, пространство таких векторов с вещественными компонентами обозначается R^n . Если в пространстве R^n введено понятие **скалярного произведения**, то оно называется **евклидовым пространством** E^n . Скалярное произведение двух вещественных векторов определяется следующим образом:

$$(x, y) = y^T x = \sum_{i=1}^n y_i x_i. \quad (8.70)$$

Множество $S = \{s_1, s_2, \dots\}$ векторов размера n определяет **подпространство** Σ пространства E^n , являющееся множеством всех векторов, представимых в виде линейной комбинации s_1, s_2, \dots . Подпространство Σ называется **линейной оболочкой**,

натянутой на векторы s_1, s_2, \dots . Указанному определению соответствует сокращенная запись

$$\Sigma = \text{span}(s_1, s_2, \dots) = \text{span}(S). \quad (8.71)$$

Множество S называется **образующим множеством** подпространства Σ . Всякое подпространство имеет бесконечно много образующих множеств, содержащих различное число векторов. Образующее множество, содержащее наименьшее количество векторов, называется **базисом** подпространства, а количество m векторов базиса называется **размерностью** подпространства. Если, кроме того, эти векторы ортонормированны, то базис называется **ортонормированным**. Подпространство Σ имеет бесконечно много ортонормированных базисов, однако вектор любого базиса можно выразить в виде линейной комбинации векторов всякого другого базиса. Примером подпространства может служить плоскость в R^3 . Размерность этого подпространства равна 2, и любые два вектора, лежащие в этой плоскости и не являющиеся параллельными, образуют его базис.

Пусть теперь $A = A^T$ – симметричная матрица. Подпространство Σ **инвариантно относительно** A , если для любого вектора x из Σ следует, что вектор Ax также принадлежит Σ . Собственный вектор матрицы A определяет инвариантное подпространство размерности единица, а множество m ортонормированных собственных векторов матрицы A образует базис инвариантного подпространства размерности m , натянутого на эти векторы.

Если $Q = (q_1, q_2, \dots, q_m)$ – векторы некоторого базиса инвариантного подпространства Σ , упорядоченные в виде $n \times m$ -матрицы Q , то действием матрицы A на Q мы получаем новую $n \times m$ -матрицу AQ , столбцы которой есть линейные комбинации столбцов матрицы Q , что следует из инвариантности Σ : действительно, каждый вектор $Aq_i \in \Sigma$. Эти m линейных комбинаций удобно записать в виде произведения QC , где $m \times m$ -матрица C называется **сужением** A на Σ . Таким образом,

$$AC = QC \quad (8.72)$$

(рис. 8.4).

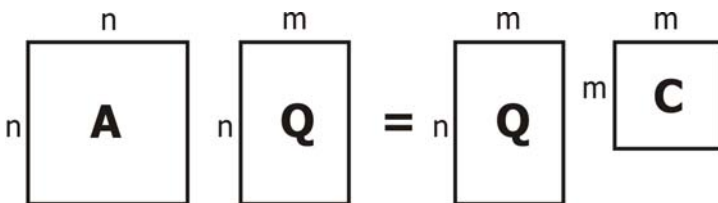


Рис. 8.4. Матрица Рэлея

Если столбцы матрицы Q образуют ортонормированный базис Σ , то

$$Q^T Q = I_m, \quad (8.73)$$

где I_m – единичная матрица порядка m , и

$$C = Q^T A Q - \quad (8.74)$$

симметричная матрица, которая называется **матрицей Рэлея**.

Пусть (λ, y) – собственная пара матрицы C , т.е.

$$C y = \lambda y. \quad (8.75)$$

Тогда, умножая слева на Q , получаем $Q C y = \lambda Q y$, или

$$A(Qy) = \lambda(Qy), \quad (8.76)$$

т.е. λ является также и собственным значением матрицы A , а Qy – соответствующим собственным вектором. Этот результат позволяет определять собственные пары матрицы A , решая задачу на собственные значения для матрицы C меньшего размера.

Полученный выше результат можно использовать только в том случае, если Σ инвариантно относительно A . Однако такое подпространство нельзя выбрать заранее, так как это было бы равносильно нахождению собственных значений матрицы A . Обычно подпространство Σ оказывается лишь «почти» инвариантным относительно A , и вопрос заключается в том, как определить хорошие приближения к собственным парам матрицы A .

Процедура Рэлея – Ритца, обеспечивающая получение наилучших приближений, заключается в следующем:

1) выполняется ортонормализация матрицы Q и вычисляется $m \times m$ -матрица Рэлея

$$H = Q^T A Q. \quad (8.77)$$

Здесь матрица Рэлея обозначена через H , чтобы подчеркнуть, что соотношение (8.72) уже не будет являться точным равенством, так как матрица H лишь «почти» инвариантна относительно A ;

2) определяется требуемое количество $k \leq m$ собственных пар матрицы H , (μ_i, h_i) , $i = 1, \dots, k$. Таким образом,

$$Hh_i = \mu_i h_i; \quad (8.78)$$

3) полученные значения Ритца μ_i будут наилучшими приближениями к собственным значениям матрицы A , а векторы Ритца $x_i = Qh_i$ – соответствующими приближениями к собственным векторам этой матрицы.

8.2.2. Алгоритм Ланцоша

Алгоритм Ланцоша реализуется в том случае, когда «почти» инвариантное подпространство Σ , в котором строятся аппроксимации Рэлея – Ритца, выбирается в виде **подпространства Крылова**.

Для произвольного ненулевого вектора b подпространство Крылова определяется следующим образом:

$$K^m = \text{span}(b, Ab, A^2b, \dots, A^{m-1}b). \quad (8.79)$$

В этом случае подпространство K^m будет почти инвариантно относительно A при достаточно большом значении m . Действительно, рассмотрим произвольный вектор u из K^m . Его можно представить в виде линейной комбинации

$$u = \sum_{k=1}^m u_k (A)^{k-1} b. \quad (8.80)$$

Соответственно,

$$Au = \sum_{k=1}^m u_k (A)^k b, \quad (8.81)$$

причем все слагаемые в (8.81), кроме последнего, пропорционального $A^m b$, принадлежат K^m . Можно показать [34], что при достаточно больших значениях m вектор $A^{m-1}b$ будет

близок к собственному вектору матрицы A , так что вектор $A(A^{m-1}b)$ будет приблизительно пропорционален вектору $A^{m-1}b$, и, таким образом, будет «почти» принадлежать K^m . Следовательно, для любого вектора u из K^m вектор Au «в основном» принадлежит K^m , а это и означает, что K^m почти инвариантно относительно A , причем близость K^m к инвариантному подпространству улучшается с увеличением m .

Выбор подпространства в виде (8.79) позволяет использовать следующие свойства.

1. Матрица Рэлея

$$T = Q^T A Q \quad (8.82)$$

является трехдиагональной; вычисление пар Ритца для трехдиагональных матриц – существенно более простая задача по сравнению с задачей на собственные пары для произвольных симметричных матриц.

2. Столбцы матрицы Q могут быть связаны друг с другом с помощью трехчленных рекуррентных соотношений, позволяющих вычислять новые векторы базиса Q .

3. Алгоритм Ланцоша обычно использует последовательность подпространств Крылова K^1, K^2, \dots, K^m и вычисляет пары Ритца матрицы A , отвечающие каждому из этих подпространств. Сходимость значений собственных пар обычно оказывается достаточно быстрой, как правило, достаточно брать $m \approx 2\sqrt{n}$.

4. Матрица A используется только для умножения на векторы, поэтому удобно реализовать подпрограмму, вычисляющую произведение Ax для заданного вектора x .

Далее ортонормированный базис подпространства K^m будем обозначать Q_m вместо Q , явно указывая размерность подпространства K^m ; таким образом, будет рассматриваться случай, когда векторы $b, Ab, \dots, (A^{m-1})b$ в (8.79) линейно

независимы. Необходимо помнить, что Q_m – прямоугольная матрица размера $n \times m$ с ортонормальными **столбцами**, т.е.

$$Q_m^T Q_m = I_m. \quad (8.83)$$

Из (8.82) и (8.83) вовсе не следует, что $AQ_m = Q_m T_m$, так как в общем случае $Q_m Q_m^T \neq I_n$. Правильное соотношение можно записать следующим образом:

$$AQ_m = Q_m T_m + R_m, \quad (8.84)$$

где R_m – **матрица невязки**, структура этой матрицы для случая $m = 4$ показана на рис. 8.5.

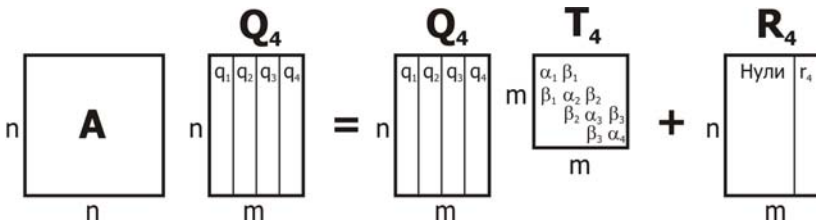


Рис. 8.5. Графическое представление алгоритма Ланцоша в случае $m=4$

Ортонормированный базис Q строится одновременно с увеличением размерности подпространства K^m следующим образом: $q_1 = \frac{b}{\|b\|}$, а все последующие векторы $q_i, i > 1$ образуются ортогонализацией вектора Aq_{i-1} со всеми векторами $q_j, j < i$, определенными ранее. После ортогонализации проводится нормировка базиса. Сформированный таким образом базис, очевидно, принадлежит подпространству K^m .

Каждый вектор q_i ортогонален ко всем остальным векторам $q_j, j \neq i$, поэтому

$$q_i^T A q_j = 0; j < i - 1. \quad (8.85)$$

Кроме того, матрица T_m является симметричной, а следовательно, учитывая (8.85), и **трехдиагональной**.

Из рис. 8.5 для частного случая $m = 4$ непосредственно видно, что

$$\begin{cases} Aq_1 = \alpha_1 q_1 + \beta_1 q_2; \\ Aq_2 = \beta_1 q_1 + \alpha_2 q_2 + \beta_2 q_3; \\ Aq_3 = \beta_2 q_2 + \alpha_3 q_3 + \beta_3 q_4; \\ Aq_4 = \beta_3 q_3 + \alpha_4 q_4 + r_4. \end{cases} \quad (8.86)$$

Из определения матрицы T_m получаем, что

$$\begin{aligned} \alpha_4 &= q_4^T Aq_4; \\ \beta_3 &= q_3^T Aq_4. \end{aligned} \quad (8.87)$$

Последнее из уравнений (8.86), таким образом, можно записать в виде

$$r_4 = Aq_4 - (q_3^T Aq_4)q_3 - (q_4^T Aq_4)q_4, \quad (8.88)$$

что в точности совпадает с выражением, которое получается в результате ортогонализации вектора Aq_4 к векторам q_3 и q_4 при вычислении вектора q_5 . Следовательно,

$$\begin{aligned} q_5 &= \frac{r_4}{\beta_4}; \\ \beta_4 &= \|r_4\|. \end{aligned} \quad (8.89)$$

Полагая для удобства $q_0 = 0$, получаем рекуррентное соотношение

$$\begin{aligned} Aq_i &= \beta_{i-1} q_{i-1} + \alpha_i q_i + \beta_i q_{i+1}; \\ i &\leq m. \end{aligned} \quad (8.90)$$

В случае $i = m$ (8.90) определяет вектор невязки $r_m = \beta_m q_{m+1}$.

Сформулируем теперь алгоритм Ланцоша в явном виде. Стартовый вектор b выбирается либо в произвольном виде, либо с использованием априорной информации о собственных векторах матрицы A . Полагаем

$$\begin{aligned} q_0 &= 0; \\ r_0 &= b; \\ \beta_0 &= \|b\|. \end{aligned} \quad (8.91)$$

Затем для $m = 1, 2, \dots$ выполняется следующая последовательность шагов.

1. Пополнение ортонормированного базиса:

$$\frac{r_{m-1}}{\beta_{m-1}} \longrightarrow q_m.$$

2. Вычисление промежуточной невязки:

$$Aq_m - \beta_{m-1}q_{m-1} \longrightarrow r_m.$$

3. Вычисление очередного диагонального элемента матрицы T_m :

$$q_m^T r_m \longrightarrow \alpha_m.$$

4. Завершение вычисления невязки:

$$r_m - \alpha_m q_m \longrightarrow r_m.$$

5. Вычисление нормы невязки:

$$\|r_m\| \longrightarrow \beta_m.$$

Эта последовательность вычислений повторяется необходимое число раз. Пары Ритца (μ_i, x_i) , аппроксимирующие собственные пары матрицы A , получаются посредством решения задачи на собственные значения для матрицы T_m :

$$T_m h_i = \mu_i h_i; \quad i = 1, 2, \dots, k; \quad k \leq m, \quad (8.92)$$

с последующим вычислением

$$x_i = Q_m h_i. \quad (8.93)$$

Для контроля сходимости хорошим критерием служит норма вектора невязки $Ax_i - \mu_i x_i$, равная

$$\begin{aligned} \|Ax_i - \mu_i x_i\| &= \|(AQ_m - Q_m T_m)h_i\| = \|R_m h_i\| = \\ &= \|r_m h_{im}\| = \beta_m |h_{im}|. \end{aligned} \quad (8.94)$$

Существуют версии алгоритма Ланцоша, предназначенные для отыскания крайних собственных значений, некоторых внутренних собственных значений и даже всех собственных значений

симметричных или эрмитовых матриц очень больших размеров, некоторые версии алгоритма позволяют вычислять и соответствующие собственные векторы.

При практической реализации алгоритма Ланцоша возникают погрешности, связанные с машинной точностью обработки чисел двойной точности. Эти погрешности могут нарушить ортогональность столбцов матрицы Q до такой степени, что они станут линейно зависимыми. Для решения этой проблемы были разработаны специальные модификации алгоритма, производящие переортогонализацию векторов q в зависимости от величины погрешности. Их описание выходит за рамки книги.

8.3. Расчет функций линейного отклика и плотности состояний

При численном анализе квантовых систем конечной целью расчета часто являются такие физические величины, как плотность состояний, проводимость, восприимчивость и т. д. Это достаточно сложные корреляторы, для расчета которых, как правило, требуется комбинировать результаты расчетов с различным числом частиц в системе.

Рассмотрим отклик узельной системы (кластера) на внешнее поле. Пусть имеется система решеточных фермионов или бозонов во внешнем магнитном поле, и по системе циркулирует ток вдоль направления x , так что вдоль этого направления система характеризуется градиентно-инвариантной фазой Φ . Оператор тока в представлении чисел заполнения уже рассматривался в разд. 6.6, представим его, разложив до первого порядка по фазе:

$$\begin{aligned}
 j_x &= -\frac{\partial H}{\partial A_x} = \frac{ite}{\hbar c} \sum_i \left(a_i^+ a_{i+\vec{e}_x} e^{\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L}} - a_{i+\vec{e}_x}^+ a_i e^{-\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L}} \right) = (\Phi \rightarrow 0) \equiv \\
 &\equiv \frac{ite}{\hbar c} \left(\sum_i (a_i^+ a_{i+\vec{e}_x} - a_{i+\vec{e}_x}^+ a_i) + \frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L} \sum_i (a_i^+ a_{i+\vec{e}_x} + a_{i+\vec{e}_x}^+ a_i) \right). \quad (8.95)
 \end{aligned}$$

Введем следующие обозначения:

$$j_x^p(i) = \frac{it}{\hbar c} (a_i^+ a_{i+\bar{e}_x} - a_{i+\bar{e}_x}^+ a_i); \quad (8.96)$$

$$k_x(i) = -t(a_i^+ a_{i+\bar{e}_x} + a_{i+\bar{e}_x}^+ a_i).$$

Здесь $j_x^p(i)$ – парамагнитная часть x -компоненты плотности тока в точке i ; $k_x(i)$ – соответственно, плотность кинетической энергии движения тока вдоль оси x .

Компонента x векторного потенциала имеет вид

$$\bar{A}_x(i) = \frac{\Phi \bar{e}_x}{L}, \quad (8.97)$$

поэтому плотность полного тока, согласно (8.95), можно переписать следующим образом:

$$j_x(i) = -\frac{\partial H}{\partial A_x(i)} = e j_x^p(i) + e^2 k_x(i) A_x(i). \quad (8.98)$$

Используем далее известную формулу линейного отклика – **соотношение Кубо** (см., например, [35, 36]). Согласно этому соотношению, если на систему действует внешнее возмущение

$$V(t) = -x f(t), \quad (8.99)$$

где x – шредингеровский (не зависящий от времени) оператор некоторой физической величины, характеризующей систему (например, оператор тока), а возмущающая сила $f(t)$ – заданная функция времени (например, векторный потенциал), то имеет место линейное соотношение между фурье-компонентами среднего значения $\bar{x}(t)$ и силы $f(\omega)$:

$$\bar{x}(\omega) = \alpha(\omega) f(\omega). \quad (8.100)$$

Величина $\alpha(\omega)$ называется **обобщенной восприимчивостью** и равна

$$\alpha(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty e^{i\omega t} \langle x_0(t) x_0(0) - x_0(0) x_0(t) \rangle dt; \quad (8.101)$$

$$x_0(t) = e^{itH_0/\hbar} x e^{-itH_0/\hbar}.$$

Здесь $x_0(t)$ – гейзенберговский оператор, определяемый по невозмущенному гамильтониану H_0 (т.е. без учета силы f). В

частности, величина $\alpha(\omega)$ будет является динамической проводимостью, если $f(t)$ – напряженность электрического поля, а X – оператор тока.

Получим выражение для проводимости в терминах узельных операторов для нашей задачи. Потенциал возмущения за счет внешнего поля с учетом (8.96) может быть записан в таком виде:

$$V = -\sum_i \left(e j_x^p(i) A_x(i) + \frac{e^2 k_x(i) A_x^2(i)}{2} \right). \quad (8.102)$$

Несложно убедиться в справедливости соотношения (8.98). Роль оператора x играет парамагнитный ток, а второй член последнего выражения с кинетической энергией – аддитивная добавка, которая переносится при расчете соотношений в ответ с учетом дифференцирования по векторному потенциалу. Для дальнейшего вывода выпишем фурье-компоненты векторного потенциала и тока:

$$\begin{aligned} A_x(l, t) &= \text{Re}(A_x(q, \omega) e^{i\bar{q}l - i\omega t}); \\ j_x(l, t) &= \text{Re}(j_x(q, \omega) e^{i\bar{q}l - i\omega t}). \end{aligned} \quad (8.103)$$

Тогда, согласно соотношению Кубо, имеем:

$$\begin{aligned} \langle j_x(q, \omega) \rangle &= -e^2 \langle (-k_x) - \Lambda_{xx}(q, \omega) \rangle A_x(q, \omega); \\ \Lambda_{xx}(q, \omega) &= \frac{i}{\hbar N_a} \int_0^\infty dt e^{(i\omega - \delta)t} \langle j_x^p(q, t) j_x^p(-q, 0) \rangle \Big|_{\delta \rightarrow 0}; \\ j_x^p(q, t) j_x^p(-q, 0) &= j_x^p(q, t) j_x^p(-q, 0) - j_x^p(-q, 0) j_x^p(q, t); \\ j_x^p(q) &= \sum_l e^{-i\bar{q}l} j_x^p(l); \quad \langle k_x \rangle = \frac{1}{N_a} \left\langle \sum_l k_x(l) \right\rangle. \end{aligned} \quad (8.104)$$

Средние значения в (8.104) понимаются в термодинамическом смысле:

$$\langle \dots \rangle \equiv \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | \dots | n \rangle e^{-E_n \beta}, \quad (8.105)$$

где $\beta = 1/T$ – обратная температура.

Далее, учитывая связь векторного потенциала и напряженности электрического поля в длинноволновом пределе

$$A_x(q=0, \omega) = \frac{E_x(q=0, \omega)}{i(\omega + i\delta)} \Big|_{\delta \rightarrow 0}, \quad (8.106)$$

находим окончательно выражение для проводимости:

$$\sigma(\omega) = -e^2 \frac{\langle -k_x \rangle - \Lambda_{xx}(q=0, \omega)}{i(\omega + i\delta)} \Big|_{\delta \rightarrow 0}. \quad (8.107)$$

Таким образом, для расчета проводимости следует получить коррелятор "ток-ток" Λ_{xx} , зависящий от времени. Для вычисления выражения (8.104) следует учесть, что временная зависимость операторов понимается в гейзенберговском смысле:

$$B(t) = e^{iHt/\hbar} B(0) e^{-iHt/\hbar}, \quad (8.108)$$

так что временные средние в (8.104) имеют вид:

$$\begin{aligned} \langle j(q, t) j(-q, 0) \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{nm} \langle n | j(q, 0) | m \rangle \langle m | j(-q, 0) | n \rangle e^{i(E_n - E_m)t/\hbar - E_n/T} = \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{nm} \langle n | j(q, 0) | m \rangle^2 e^{i(E_n - E_m)t/\hbar - E_n\beta}. \end{aligned} \quad (8.109)$$

Окончательно, для нахождения проводимости следует решить сначала спектральную задачу в отсутствие фазы, найти собственные энергии и волновые функции системы, а затем рассчитать временные корреляторы (8.109) и подставить их в соотношение (8.104).

При низких температурах ($\beta \rightarrow \infty$) главный вклад в (8.104) будет давать основное состояние, а также матричные элементы между основным состоянием и ближайшими возбужденными. Величина Λ_{xx} преобразуется в сумму дельта-функций, и наиболее сложная задача состоит в корректном расчете следующего спектрального коррелятора:

$$\sum_m \langle m | j(q, 0) | 0 \rangle^2 \delta(E_m - E_0 - \omega). \quad (8.110)$$

Выражение (8.110) можно вычислять непосредственно в процессе применения алгоритма Ланцоша, который с высокой точностью определяет несколько возбужденных состояний над основным.

Выражение (8.110) представляет собой разложение вектора основного состояния по **всем** возбужденным состояниям с некоторым весовым множителем. Метод вычисления такого выражения будет рассмотрен в конце раздела.

Рассмотрим теперь другой сложный коррелятор. Пусть необходимо рассчитать плотность состояний для системы фермионов со спинами. Плотность состояний – важная физическая величина, необходимая при расчете различных квантово-механических средних, ей удобно пользоваться, когда подынтегральное выражение зависит только от энергии частиц, например:

$$\sum_k f(\varepsilon_k), \quad (8.111)$$

где ε_k – закон дисперсии для системы (например, $\varepsilon_k = \cos ka$ для модели сильной связи или $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ для свободного газа). Нет необходимости суммировать в (8.111) по каждой проекции импульса, удобнее ввести плотность состояний $N(\varepsilon)$:

$$\begin{aligned} \sum_k f(\varepsilon_k) &= \int d\varepsilon N(\varepsilon) f(\varepsilon); \\ N(\varepsilon) &= \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k). \end{aligned} \quad (8.112)$$

По физическому смыслу плотность состояний – это количество возможных квантовых состояний, приходящихся на единичный интервал энергии $\varepsilon \div \varepsilon + d\varepsilon$. Подробнее эта величина будет обсуждаться позже при рассмотрении ферми- и бозе-газа, а также при исследовании термодинамических свойств квантовых систем, сейчас рассмотрим в основном математическую и расчетную стороны проблемы.

Сумма дельта-функций в (8.112) может быть записана в общем случае для взаимодействующей системы, однако суммирование проводится по возможным собственным квантовым состояниям E_n многочастичной системы. Мы интересуемся именно одночастичной плотностью состояний, которая представима следующим образом:

$$N(\omega) = \sum_k A(k, \omega), \quad (8.113)$$

где **спектральная плотность** $A(k, \omega)$ системы при нулевой температуре имеет вид (см., например, [37, 38])

$$A(k, \omega) = \sum_{n, \sigma} \left| \langle \Psi_n(N+1) | a_{k\sigma}^+ | \Psi_0(N) \rangle \right|^2 \delta(\omega - E_n(N+1) + E_0(N)) + \sum_{n, \sigma} \left| \langle \Psi_n(N-1) | a_{k\sigma} | \Psi_0(N) \rangle \right|^2 \delta(\omega + E_n(N-1) - E_0(N)), \quad (8.114)$$

где $a_{k\sigma}$ – оператор уничтожения частицы со спином σ и импульсом k ; $E_n(N)$ – энергия n -го возбужденного состояния системы из N частиц; $\Psi_n(N)$ – соответствующая волновая функция; $E_0(N)$ – энергия основного состояния системы из N частиц; $\Psi_0(N)$ – волновая функция основного состояния.

Выражение (8.114) можно переписать в более удобном виде, перейдя от импульсного представления к узельным операторам:

$$N(\omega) = \sum_{i\sigma} (g_{i\sigma}^+(\omega) + g_{i\sigma}^-(-\omega)), \quad (8.115)$$

где $g_{i\sigma}^\pm(\omega)$ – парциальные вклады от узла i :

$$g_{i\sigma}^+(\omega) = \sum_{n, \sigma} \left| \langle \Psi_n(N+1) | a_{i\sigma}^+ | \Psi_0(N) \rangle \right|^2 \delta(\omega - E_n(N+1) + E_0(N)), \quad (8.116)$$

$$g_{i\sigma}^-(-\omega) = \sum_{n, \sigma} \left| \langle \Psi_n(N-1) | a_{i\sigma} | \Psi_0(N) \rangle \right|^2 \delta(\omega - E_n(N-1) + E_0(N)). \quad (8.117)$$

Величина $g_{i\sigma}^+(\omega)$ описывает состояния, которые могут заполняться фермионами со спином σ , а $g_{i\sigma}^-(-\omega)$ – состояния, заполняемые дырками (вакантными местами). Интегралы от $g_{i\sigma}^+(\omega)$ и $g_{i\sigma}^-(-\omega)$ по энергии ω дают средние числа заполнения фермионов и дырок со спином σ соответственно.

Рассмотрим величину

$$\Delta = \mu^+ - \mu^-, \quad (8.118)$$

где

$$\begin{aligned}\mu^+ &= E_0(N+1) - E_0(N), \\ \mu^- &= E_0(N) - E_0(N-1).\end{aligned}\tag{8.119}$$

По физическому смыслу величина μ^+ – химический потенциал, равный приращению энергии к энергии основного состояния системы за счет добавления одной частицы, а μ^- – химический потенциал, равный приращению энергии к энергии основного состояния системы при удалении одной частицы. Как следует из (8.116) – (8.117), заполняемые фермионами состояния находятся в интервале энергий $\omega > \mu^+$, а состояния, заполняемые дырками, – в интервале $\omega < \mu^-$, что позволяет рассматривать величину Δ из (8.118) как щель в спектре возбуждений. Если эта величина меньше нуля, то щели в спектре нет, и плотность состояний непрерывна как функция энергии.

Из (8.116) – (8.117) видно, что, как и при расчете проводимости, необходимо вычислить сложный спектральный коррелятор вида

$$\sum_{n,\sigma} \left| \langle \Psi_n(N \pm 1) | a_{i,\sigma}^+ | \Psi_0(N) \rangle \right|^2 \delta(\omega - E_n(N \pm 1) + E_0(N)) \tag{8.120}$$

и, в отличие от выражения (8.110), здесь матричные элементы рассчитываются между состояниями с различным числом частиц. Тем не менее, выражение (8.120) также является разложением вектора основного состояния с N частицами по всем возбужденным состояниям системы, но теперь с добавленной (удаленной) одной частицей, поэтому и к нему можно применить рассмотренную далее процедуру расчета в рамках алгоритма Ланцоша.

Действительно, в обоих случаях (выражения (8.110) и (8.120)) следует рассчитывать сумму дельта-функций, умноженных на скалярное произведение некоего вектора на собственные функции гамильтоновой матрицы (или на квадрат этого скалярного произведения). Сформулируем методику такого расчета в общем случае.

Следует отметить, что при расчете выражений (8.110) и (8.120) ошибки округления, возникающие при реализации алгоритма Ланцоша, не мешают расчету. Накопление ошибок округления в

алгоритме Ланцоша проявляется следующим образом: при увеличении числа итераций возникают паразитические псевдособственные векторы, которые либо дублируют уже существующие собственные векторы, либо имеют очень плохую невязку, т.е. вообще не являются собственными векторами. Применение алгоритма Ланцоша для решения задачи на собственные значения возможно только при устранении этих векторов. Однако именно для расчета указанных выше корреляторов существует возможность применения простого алгоритма Ланцоша без всяких модификаций, в котором можно игнорировать проблему возникновения паразитических векторов.

Если для известного вектора u требуется вычислить вектор $v = F(A)u$, где явный вид оператора F известен только в базисе собственных векторов матрицы A , то решить эту задачу можно с помощью простого алгоритма Ланцоша. В работе [39] доказана допустимость такого подхода для широкого класса операторов F и дана оценка ошибок простого алгоритма Ланцоша. В нашем случае вектор u – многочастичная волновая функция основного состояния системы, матрица A – гамильтониан системы. Необходимый для расчета коррелятор (плотность состояний (8.120) или проводимость (8.110)) в таком подходе можно представить следующей функцией энергии ω :

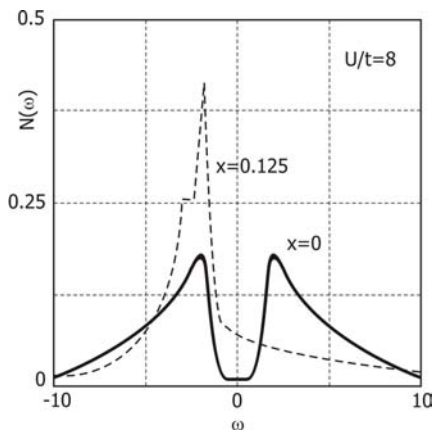
$$\rho(\omega) = C \sum_k f[(u, x_k)] \delta(\lambda_k - \omega); \quad (8.121)$$

$$\delta(E) \approx \frac{1}{\pi} \left(\frac{\sigma}{(E)^2 + \sigma^2} \right) \Big|_{\sigma \rightarrow 0},$$

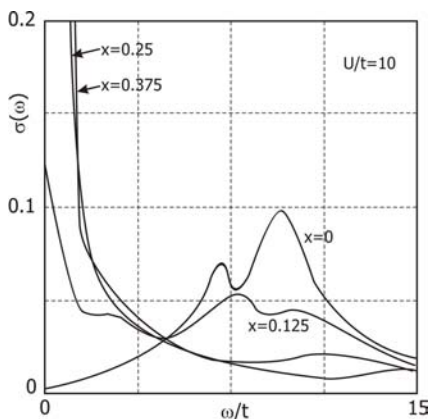
где C – нормирующий множитель; (u, x_k) – скалярное произведение вектора u с собственными векторами гамильтониана; $f(x)$ – некоторая простая функция (например, x^2), σ – параметр задачи, величина которого сопоставима с расстоянием между собственными числами λ_k гамильтониана. При определении выражения (8.121) в качестве первого вектора, по которому образуется подпространство Крылова, берется вектор u , и по завершении итерационной процедуры алгоритм Ланцоша дает все необходимые скалярные произведения (u, x_k) . Возможность игнорировать ошибки округления, связанные с паразитическими собственными векторами, состоит в том, что вес этих векторов в

исходном векторе ψ , как правило, мал (их амплитуда определяется вычислительными ошибками), и следовательно, паразитические векторы не влияют на результат расчета коррелятора.

На рис. 8.6 представлены результаты расчета проводимости $\sigma(\omega)$ и плотности состояний $N(\omega)$ для двумерной модели Хаббарда из [54], рассчитанные описанным выше методом, в зависимости от концентрации дырочных носителей x , отсчитанной от заполнения $\langle n \rangle = 1$.



а



б

Рис. 8.6. Расчет проводимости $\sigma(\omega)$ (**а**) и плотности состояний $N(\omega)$ (**б**) для двумерной модели Хаббарда 4×4 из [54]

ЧАСТЬ 3

ТЕРМОДИНАМИКА. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

9. Статистическое описание систем многих частиц

В первых двух частях книги не обсуждалась зависимость свойств различных систем от температуры. Однако реальные физические системы всегда находятся при конечной температуре, и экспериментальные исследования позволяют получать информацию о характеристиках наблюдаемых систем как функциях температуры.

Каким же образом в квантовую физическую систему (и в процедуру численного анализа такой системы) ввести температуру? Как получить термодинамические свойства системы в численном эксперименте? Для замкнутости изложения остановимся на некоторых понятиях статистической физики и основных термодинамических соотношениях, которые будут необходимы в дальнейшем как для описания конечных кластеров, так и для изучения макроскопических систем (более подробно см., например, [36, 40]).

Согласно основным положениям статистической физики, физическую (квантовую или классическую) систему в термодинамическом равновесии можно рассматривать как некоторую подсистему, находящуюся в контакте с окружающей средой или с еще большей системой – **термостатом**. В зависимости от вида этого контакта описание системы может быть различным. Самой важной статистической характеристикой системы, которая, разумеется, зависит от внешних условий, в которых находится система, является **функция распределения** (или функция статистического распределения) ρ , которая является

плотностью распределения вероятности состояний системы в **фазовом пространстве**. Под фазовым пространством в статистической физике понимается многомерное пространство состояний системы, каждая точка которого имеет уникальный набор всех квантовых чисел системы (это может быть, например, набор координат и импульсов). Полная размерность фазового пространства совпадает с размерностью базиса системы. Система эволюционирует во времени и переходит из одного состояния в другое – от одной точки фазового пространства к другой. При этом в фазовом пространстве прописывается путь системы, называемый **фазовой траекторией** системы. Главная задача статистической физики – нахождение функции распределения, так как через нее можно рассчитать значения и распределения любых физических величин, а также термодинамические средние таких величин. Если обозначить через Ω совокупность параметров фазового пространства – степеней свободы (например, совокупность координат и импульсов частиц, составляющих систему), то можно рассчитать термодинамическое среднее значение физической величины $f(\Omega)$ следующим образом:

$$\langle f \rangle = \frac{\int d\Omega f(\Omega) \rho(\Omega)}{\int d\Omega \rho(\Omega)}. \quad (9.1)$$

Интегрирование в (9.1) производится по всему фазовому пространству. Такое соотношение справедливо как для классического, так и для квантового описания. Нормировочный множитель

$$Z = \int d\Omega \rho(\Omega) \quad (9.2)$$

называется **статистической суммой** или, кратко, **статсуммой**.

Заметим, что в случае квантовой системы усреднение с помощью функции распределения позволяет получать среднее значение физической величины, не зная точной временной эволюции этой величины – это так называемое **неполное описание**, функция распределения в этом случае представляема через диагональные элементы некоторой матрицы [36, 40].

Поясним последнее утверждение. Для этого введем понятие **матрицы плотности** в энергетическом представлении, удобном для задач статистической физики.

Пусть система (или подсистема) имеет некоторый полный набор стационарных состояний n , описываемых нормированными волновыми функциями $\varphi_n(\Omega)$, составляющими полный ортонормированный базис для этой системы. Любое состояние системы Ψ можно разложить по этим базисным функциям:

$$\Psi = \sum_n a_n \varphi_n. \quad (9.3)$$

Среднее значение любой физической величины f может быть вычислено следующим образом:

$$\langle f \rangle = \int d\Omega \Psi^*(\Omega) \hat{f} \Psi(\Omega) = \sum_{nm} a_n^* a_m f_{nm};$$

$$f_{nm} = \int d\Omega \varphi_n^* \hat{f} \varphi_m,$$
(9.4)

где \hat{f} – оператор, соответствующий физической величине f .

Таким образом, для расчета $\langle f \rangle$ необходимы матричные элементы f_{nm} и парные произведения коэффициентов разложения $a_n^* a_m$. Характеристики исходного базиса теперь не нужны, они представлены в виде интегралов в матричных элементах в (9.4), основную информацию несет теперь матрица коэффициентов разложения

$$c_{mn} = a_n^* a_m, \quad (9.5)$$

которая и представляет собой **матрицу плотности** в энергетическом представлении, или **статистическую матрицу**. Можно также представить c_{nm} как матричные элементы некоторого **статистического оператора** \hat{c} . Такое представление является неполным, так как проведено усреднение по исходному базису, детали которого теперь учтены в матричных элементах (9.4), но оно может оказаться достаточным для задач статистической физики. Заметим, что теперь любое среднее

$$\langle f \rangle = \sum_{nm} c_{mn} f_{nm} \quad (9.6)$$

можно записать в виде суммы диагональных элементов (следа матрицы) произведения операторов \hat{c} и \hat{f} :

$$\langle f \rangle = \sum_n \sum_m c_{mn} f_{nm} = \sum_n (\hat{c}f)_{nn} = \text{Tr}(\hat{c}f). \quad (9.7)$$

Из (9.7) следует, что результат не зависит от исходного базиса, и может быть получен в различных представлениях, необязательно в собственно-энергетическом.

Диагональные элементы матрицы плотности имеют смысл вероятности нахождения системы в соответствующем состоянии:

$$\rho_n = c_{nn} = |a_n|^2 \quad (9.8)$$

при условии нормировки

$$\sum_n |a_n|^2 = \sum_n c_{nn} = \text{Tr}(\rho) = 1. \quad (9.9)$$

Последнее выражение представляет собой статистическую сумму (9.2). Соответственно, диагональные элементы (9.8) являются квантовыми аналогами классической плотности распределения.

Выведем уравнение временной эволюции матрицы плотности. При учете временной эволюции системы разложение полной волновой функции системы по базису (9.3) сохраняется в любой момент времени, но каждый коэффициент разложения a_n будет зависеть от времени:

$$\Psi(t) = \sum_n a_n(t) \varphi_n. \quad (9.10)$$

Подставляя это выражение во временное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = H\Psi, \quad (9.11)$$

и используя ортонормированность волновых функций φ , получаем:

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = \sum_m a_m(t) H_{nm};$$

$$H_{nm} = \int d\Omega \varphi_n^*(\Omega) H \varphi_m(\Omega). \quad (9.12)$$

Комбинируя соотношение (9.12) с комплексно-сопряженным

$$-i\hbar \frac{da_m^*}{dt} = \sum_k a_k^*(t) H_{km} \quad (9.13)$$

(при выводе (9.13) использовано свойство эрмитовости гамильтониана), находим следующее уравнение для матрицы плотности:

$$i\hbar \frac{dc_{nm}}{dt} = \sum_k (H_{nk} c_{km} - c_{nk} H_{km}) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d\hat{c}}{dt} = (\hat{H}\hat{c} - \hat{c}\hat{H}) = [\hat{H}, \hat{c}]. \quad (9.14)$$

Этот результат – не что иное, как **квантовый аналог теоремы Лиувилля**. Действительно, в классической механике требование стационарности функции распределения приводит к тому, что плотность распределения ρ является интегралом движения. В квантовом случае из выражения (9.14) следует, что для обращения в нуль производной статистического оператора необходима его коммутативность с гамильтонианом, это и означает, что матрица плотности сохраняется во времени и может быть измерена одновременно с собственными значениями оператора энергии. Это означает также, что статистическая матрица в собственном-энергетическом представлении **должна быть диагональна**.

Рассмотрим теперь кратко три основных статистических описания квантовых систем.

9.1. Микроканонический ансамбль

Рассмотрим какую-либо **замкнутую систему** и выберем в качестве базисных функций собственные функции этой системы $\varphi_n(\Omega)$. Временная эволюция коэффициентов разложения (9.12) тогда будет выглядеть следующим образом:

$$a_n(t) = a_n(0)e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (9.15)$$

где E_n – значения энергии системы, соответствующие собственным функциям φ_n .

Соответственно, из (9.14) находим временную зависимость статистической матрицы:

$$c_{nm}(t) = c_{nm}(0)e^{-i\omega_{nm}t};$$

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}.$$
(9.16)

Таким образом, в замкнутой системе диагональные элементы статистической матрицы не зависят от времени, и, следовательно, сохраняются:

$$\frac{dc_{nn}}{dt} = 0 \Rightarrow \rho_n = c_{nn} = \text{const}.$$
(9.17)

Среднее любой физической величины, сохраняющее свое значение в достаточно длительный промежуток времени, может быть, таким образом, рассчитано только из диагональной части статистической матрицы:

$$\langle f \rangle = \sum_n \rho_n f_{nn}.$$
(9.18)

В замкнутой системе сохраняются полная энергия E , которая может быть равна одному из разрешенных значений E_n , импульс и момент импульса. Энергия системы является интегралом движения, но также интегралом движения является и матрица плотности ρ_n . Как известно [36], энергия и логарифм матрицы плотности являются аддитивными величинами и связаны линейным соотношением

$$\ln \rho_n = \alpha + \beta E_n,$$
(9.19)

где α, β – постоянные коэффициенты. Из этого выражения следует, что матрица плотности является функцией только энергии.

Предположим, что уровни энергии макроскопической системы почти непрерывны и распределены так, что на бесконечно малый интервал энергии $E \div E + dE$ приходится определенное число состояний $d\Omega$ из всего объема фазового пространства. Так как энергия замкнутой системы сохраняется, то плотность распределения, т.е. микроканоническое распределение по энергии, имеет явно выраженные максимумы при разрешенных значениях, что математически можно описать в виде дельта-функции; вероятность попасть в элемент фазового пространства $d\Omega$, что

эквивалентно попаданию в интервал по энергии $E \div E + dE$, имеет вид

$$\rho_n = \text{const} \cdot \delta(E - E_n) d\Omega. \quad (9.20)$$

9.2. Канонический ансамбль

Рассмотрим теперь систему, которая является частью какой-либо большей замкнутой системы – **термостата**, и находится с ней в термодинамическом равновесии.

Для дальнейшего рассмотрения введем представление об энтропии системы S .

Введем величину $d\Omega$, равную числу квантовых состояний, приходящихся на интервал энергии системы $E \div E + dE$. Тогда вероятность $W(E)$ того, что система имеет энергию в этом интервале, равна

$$W(E) dE = \rho d\Omega \quad (9.21)$$

с условием нормировки

$$\int dE W(E) = 1. \quad (9.22)$$

Для макроскопического тела в равновесном состоянии вероятность распределения по энергии имеет резкий максимум вблизи среднего значения $\langle E \rangle$ с малым разбросом ΔE масштаба среднеквадратичной флуктуации (рис. 9.1). Тогда с высокой точностью с учетом (9.22) можно написать

$$W(\langle E \rangle) \Delta E = 1. \quad (9.23)$$

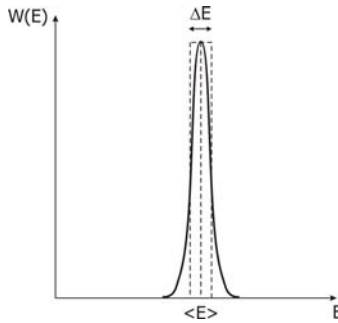


Рис. 9.1. Для макроскопического тела в равновесном состоянии вероятность распределения по энергии имеет резкий максимум вблизи среднего значения

Используя (9.21), перепишем (9.23) следующим образом:

$$\rho(\langle E \rangle) \Delta \Omega = 1;$$

$$\Delta \Omega = \frac{d\Omega(\langle E \rangle)}{dE} \Delta E. \quad (9.24)$$

Таким образом, интервалу ΔE соответствует некоторый интервал $\Delta \Omega$ – характерное количество квантовых состояний системы, вероятность реализации которых достаточно высока. Величину $\Delta \Omega$ называют также **статистическим весом** макроскопического состояния системы. Логарифм статистического веса

$$S = \ln \Delta \Omega \quad (9.25)$$

называется **энтропией** системы [36].

Энтропия является неотрицательной величиной, так как статистический вес – число квантовых состояний – целое число, не меньшее единицы. Энтропию можно также рассчитать другим способом. Ввиду линейности (9.19), имеем:

$$\ln \rho(\langle E \rangle) = \alpha + \beta \langle E \rangle = \langle \ln \rho(E) \rangle. \quad (9.26)$$

Далее,

$$S = \ln \Delta \Omega = -\ln \rho(\langle E \rangle) = -\langle \ln \rho(E) \rangle = -\sum_n \rho(E_n) \ln \rho(E_n). \quad (9.27)$$

Таким образом, согласно (9.27) и (9.24), находим

$$\frac{d\Omega(\langle E \rangle)}{dE} = \frac{e^{S(\langle E \rangle)}}{\Delta E}. \quad (9.28)$$

Отметим, что энтропия так же, как и энергия, является аддитивной величиной.

Рассчитаем теперь распределение по энергии в условиях внешнего термостата. Для этого положим, что выделенная система с разрешенной энергией E_n и квантовыми степенями свободы Ω , и термостат с энергией E_0 и степенями свободы Ω_0 вместе являются замкнутой системой с полной энергией E . Тогда имеет место микрочаноническое распределение

$$\rho(E) = \text{const} \cdot \delta(E - E_0 - E_n) d\Omega d\Omega_0. \quad (9.29)$$

Для того, чтобы из этого распределения выделить только степени свободы системы, следует проинтегрировать (9.29) по степеням свободы термостата:

$$\begin{aligned} \rho(E_n) &\sim \int \delta(E - E_0 - E_n) d\Omega_0 = \int \delta(E - E_0 - E_n) \frac{d\Omega_0}{dE_0} dE_0 = \\ &= \int \delta(E - E_0 - E_n) \frac{e^{S(E_0)}}{\Delta E_0} dE_0 = \frac{e^{S(E - E_n)}}{\Delta E_0}. \end{aligned} \quad (9.30)$$

Заметим, что, согласно (9.30), вероятность реализации состояний пропорциональна множителю e^S . Следовательно, если система стремится к равновесию, она будет занимать состояния E_n , имеющие все бóльшую вероятность, и, соответственно, все бóльшую энтропию. В конце концов, в состоянии термодинамического равновесия, энтропия примет максимально возможное значение. Это – так называемый **закон неубывания энтропии**, или **второй закон термодинамики** [36, 40, 41].

Учитывая, что термостат имеет размеры, много большие размеров рассматриваемой системы, и энергия $E_0 \approx E$ слабо меняется при изменении малой величины E_n , разложим энтропию в (9.30) по малому параметру $\frac{E_n}{E} \ll 1$:

$$S(E - E_n) \cong S(E) - \frac{dS(E)}{dE} E_n. \quad (9.31)$$

Таким образом, распределение системы по энергиям E_n имеет вид

$$\rho(E_n) \sim e^{-\frac{dS(E)}{dE} E_n}. \quad (9.32)$$

Введем теперь понятие **температуры** как обратной производной энтропии по энергии:

$$T = \left(\frac{dS}{dE} \right)^{-1}, \quad (9.33)$$

здесь и далее постоянная Больцмана k_B полагается равной единице.

Если рассмотреть два тела с энергиями и энтропиями, соответственно, $E_{1,2}$ и $S_{1,2}$, находящиеся в термодинамическом равновесии и образующие замкнутую систему, то суммарная энергия $E = E_1 + E_2$ должна быть постоянна, а суммарная энтропия $S(E) = S_1(E_1) + S_2(E_2)$ будет иметь максимально возможное значение согласно упомянутому выше закону необувания энтропии. Более того, из-за постоянства полной энергии энтропия является функцией только одной величины (например, E_1), поэтому

$$\begin{aligned} S &= S_1(E_1) + S_2(E - E_1) \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{dS}{dE_1} &= \frac{dS_1}{dE_1} + \frac{dS_2}{dE_2} \frac{dE_2}{dE_1} = \frac{dS_1}{dE_1} - \frac{dS_2}{dE_2} = 0. \end{aligned} \quad (9.34)$$

Отсюда следует, что в термодинамическом равновесии производные энтропии всех частей замкнутой системы постоянны. Постоянны и обратные производные, которые имеют смысл абсолютных температур тел, т.е.

$$\begin{aligned} T_1 &= T_2; \\ T_\alpha &= \left(\frac{dS_\alpha}{dE_\alpha} \right)^{-1}, \quad \alpha = 1; 2. \end{aligned} \quad (9.35)$$

Таким образом, состояние термодинамического равновесия характеризуется постоянной температурой всех частей замкнутой системы.

Окончательно, с учетом (9.33), каноническое распределение по энергии имеет вид знаменитого **распределения Гиббса**

$$\rho_n = \text{const} \cdot e^{\frac{-E_n}{T}}, \quad (9.36)$$

где E_n – уровни энергии системы, дискретные или непрерывные. Температура рассматриваемой системы и термостата предполагается одинаковой и постоянной, и именно термостат, являясь системой, большей по сравнению с рассматриваемой, обеспечивает это постоянство.

9.3. Большой канонический ансамбль

Рассмотрим теперь ситуацию, когда между выделенной системой и термостатом, кроме выравнивания температур, происходит также обмен частицами, так что полное число частиц N флуктуирует около своего среднего значения $\langle N \rangle$. Термостат является тогда резервуаром, который поддерживает в выделенной системе среднее число частиц $\langle N \rangle$ постоянным для данной температуры.

Будем различать состояния системы, относящиеся к различному числу частиц, так что уровни энергии будут иметь теперь двойную нумерацию: E_{nN} . Двойной индекс nN означает, что величина относится к n -му энергетическому состоянию с N частицами. Соответственно, ρ_{nN} есть вероятность нахождения системы с N частицами в n -м состоянии.

Энтропия системы теперь также является функцией энергии и числа частиц, так что соотношение (9.30) обобщается следующим образом:

$$\rho_{nN} \equiv \rho(E_{nN}, N) \sim \frac{e^{S(E_{nN}, N_0 - N)}}{\Delta E_0}. \quad (9.37)$$

Полагая, что не только энергия термостата $E_0 \approx E \gg E_{nN}$, но и число частиц в термостате N_0 много больше числа частиц N в

рассматриваемой системе, разложим энтропию в (9.37) по малым параметрам $\frac{E_{nN}}{E}$ и $\frac{N}{N_0}$ с точностью до линейного приближения:

$$S(E - E_{nN}, N_0 - N) \cong S(E, N_0) - \delta S(E_{nN}, N). \quad (9.38)$$

Перед тем, как вычислить вариацию энтропии в (9.38), уточним понятие температуры, введенное ранее в (9.33). Температура в случае большого канонического ансамбля вводится как обратная термодинамическая производная от энтропии при постоянном числе частиц:

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_N. \quad (9.39)$$

Введем также понятие **химического потенциала системы** μ , который определяется как

$$\mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N} \right)_S. \quad (9.40)$$

Фактически химический потенциал есть изменение энергии системы при изменении числа частиц на единицу:

$$\mu = E_{N+1} - E_N. \quad (9.41)$$

Его можно также сопоставить с внешним полем или давлением, "накачивающим" или "выкачивающим" частицы из резервуара.

Далее, используя известное термодинамическое равенство [36]

$$dE = TdS + \mu dN \quad (9.42)$$

и заменяя вариацию энтропии в (9.31) согласно (9.39), (9.40) и (9.42), получаем

$$S(E - E_{nN}, N_0 - N) \cong S(E, N_0) - \frac{E_{nN}}{T} + \frac{\mu N}{T}. \quad (9.43)$$

Подчеркнем, что условие равновесия означает теперь не только равенство температур, но и равенство химических потенциалов системы и термостата.

Распределение Гиббса, согласно (9.43), будет иметь следующий вид:

$$\rho_{nN} = \text{const} \cdot e^{-\frac{(E_{nN} - \mu N)}{T}}. \quad (9.44)$$

Далее будем иметь дело преимущественно с каноническим и, в меньшей степени, с большим каноническим распределениями.

Рассмотрим подробнее канонический ансамбль. Нормировочную константу в распределении Гиббса определяют из условия $\sum_n \rho_n = 1$, поэтому статистическая сумма Z в (9.2) в собственно-энергетическом представлении имеет следующий вид:

$$Z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{T}}. \quad (9.45)$$

Если гамильтониан системы диагонализирован, т.е. найден полный набор собственных волновых функций φ_n и спектр системы E_n , то любую термодинамическую величину A (термодинамическое среднее) можно определить следующим образом

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n A_n e^{-\frac{E_n}{T}}}{\sum_n e^{-\frac{E_n}{T}}} = \frac{1}{Z} \sum_n A_n e^{-\frac{E_n}{T}}, \quad (9.46)$$

при этом A_n – матричные элементы оператора, соответствующего физической величине A :

$$A_n = \langle \varphi_n | \hat{A} | \varphi_n \rangle. \quad (9.47)$$

Многие физические величины напрямую выражаются через статистическую сумму Z и ее производные. Для удобства введем далее понятие **обратной температуры**

$$\beta = \frac{1}{T}. \quad (9.48)$$

Несложно убедиться, что средняя энергия системы может быть представлена как

$$E = \frac{1}{Z} \sum_n E_n e^{-E_n \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z. \quad (9.49)$$

Можно также получить следующую формулу для **теплоемкости** системы как флуктуации энергии

$$C = \frac{dE}{dT} = \frac{1}{T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2). \quad (9.50)$$

В случае большого канонического ансамбля вводят также **обобщенную восприимчивость** системы χ :

$$\chi = \frac{dN}{d\mu} = \frac{1}{T} (\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2);$$

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial F}{\partial \mu}; \quad F = -T \ln Z, \quad (9.51)$$

где F – свободная энергия системы.

Приведем также некоторые важные термодинамические соотношения, связывающие свободную энергию системы, ее теплоемкость и энтропию:

$$F = E - TS = -T \ln Z;$$

$$C = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2};$$

$$S = -\frac{1}{Z} \sum_n \rho_n \ln \frac{\rho_n}{Z};$$

$$\rho_n = e^{-E_n \beta}. \quad (9.52)$$

Заметим, что в случае классической системы, как правило, можно разделить кинетическую и потенциальную энергии системы, т.е. такие степени свободы, как импульсы и координаты, и из распределения Гиббса получить распределение Максвелла [36].

В большом каноническом ансамбле все соотношения запишутся аналогично, только суммирование осуществляется не только по энергетическим состояниям, но и по числу частиц. Например, выражение для свободной энергии будет таким:

$$F = -T \ln \left(\sum_N e^{\mu N \beta} \sum_n e^{-E_{nN} \beta} \right). \quad (9.53)$$

В общем случае для физической величины A имеем

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_N e^{\mu N \beta} \sum_n A_{nN} e^{-E_{nN} \beta}; \\ Z &= \sum_N e^{\mu N \beta} \sum_n e^{-E_{nN} \beta}. \end{aligned} \quad (9.54)$$

В заключение раздела напомним некоторые важные факты из статистической физики.

Теорема Нернста говорит об обращении в нуль энтропии системы при $T = 0$ (**третье начало термодинамики**). Это утверждение легко понять, если вспомнить об определении энтропии через логарифм статистического веса системы (9.25). Действительно, при нулевой температуре система находится в основном квантовом состоянии, и, в предположении его невырожденности, статистический вес $\Delta\Omega = 1$.

Положительность теплоемкости непременно приводит к возрастанию энергии системы с температурой. При этом при нулевой температуре энергия системы стремится к минимуму и равна свободной энергии, а теплоемкость равна нулю.

Если система состоит из невзаимодействующих частей, то статистическая сумма может быть вычислена как произведение статсумм частей системы:

$$Z = Z_1 \cdot Z_2 \cdot Z_3 \cdot \dots \quad (9.55)$$

При этом термодинамические средние, такие как энергия, теплоемкость, энтропия, свободная энергия и другие, будут аддитивными величинами, т.е. будут являться суммами этих величин от составных частей системы:

$$E = E_1 + E_2 + E_3 + \dots \quad (9.56)$$

9.4. Примеры

Для иллюстрации рассмотренных выше термодинамических и статистических соотношений рассмотрим примеры некоторых физических систем, для которых возможно аналитически рассчитать термодинамические средние.

9.4.1. Совокупность магнитных моментов

Рассмотрим систему из N магнитных моментов (рис. 9.2), расположенных в узлах произвольной кристаллической структуры и имеющих только две степени свободы – вдоль приложенного внешнего магнитного поля H и против него:

$$\hat{H} = -\sum_i \mu_i H; \quad \mu_i = \pm 1. \quad (9.57)$$

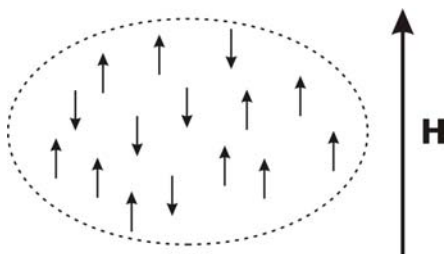


Рис. 9.2. Система невзаимодействующих магнитных моментов во внешнем поле H

Имеем, соответственно, совокупность невзаимодействующих между собой подсистем, каждая из которых (отдельный магнитный момент) взаимодействует с внешним полем согласно (9.57) и находится при конечной температуре. Согласно (9.55) – (9.56), задача сводится к расчету статистической суммы одного магнитного момента. Ее несложно получить:

$$Z_i = \sum_{\mu_i = \pm 1} e^{\beta \mu_i H} = 2 \operatorname{ch}(\beta H). \quad (9.58)$$

Тогда полная статистическая сумма

$$Z = (Z_i)^N = (2 \operatorname{ch}(\beta H))^N. \quad (9.59)$$

Энергия системы

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -N \text{th}(\beta H). \quad (9.60)$$

Несложно видеть из (9.60), что при низких температурах ($\beta \rightarrow \infty$) энергия минимальна, и все магнитные моменты "заморожены" и направлены по полю. В противоположном случае высоких температур энергия стремится к нулю, что соответствует полной разупорядоченности системы. Эти же закономерности видны после расчета суммарного магнитного момента (намагниченности системы):

$$M = N \langle \mu_i \rangle = N \sum_{\mu_i = \pm 1} \frac{\mu_i e^{\beta \mu_i H}}{Z} = N \text{th}(\beta H). \quad (9.61)$$

Выражение (9.61) можно также получить из термодинамического соотношения

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H}. \quad (9.62)$$

Задача 9.1. Получить (9.61) из (9.62).

Энтропия системы равна

$$S = -\frac{1}{Z} \sum_n \rho_n \ln \frac{\rho_n}{Z} = -\frac{1}{Z} \sum_n e^{-E_n \beta} \ln \left(\frac{e^{-E_n \beta}}{Z} \right) = \ln Z + E \beta, \quad (9.63)$$

Отсюда сразу следует первое из термодинамических соотношений (9.52).

В пределе больших температур

$$S_{|\beta \rightarrow 0} = \ln Z_{|\beta \rightarrow 0} = \ln(2^N). \quad (9.64)$$

Этот результат показывает, что энтропия является логарифмом статистического веса системы (см. (9.25)), который в случае высоких температур и, соответственно, равенства вероятностей реализации различных состояний равен полному числу степеней свободы 2^N .

Рассчитаем также теплоемкость системы:

$$C = \frac{dE}{dT} = N \left(\frac{H}{T} \right)^2 \operatorname{ch}^{-2} \left(\frac{H}{T} \right). \quad (9.65)$$

Графики энергии, магнитного момента и теплоемкости системы (в расчете на один магнитный момент) представлены на рис. 9.3.

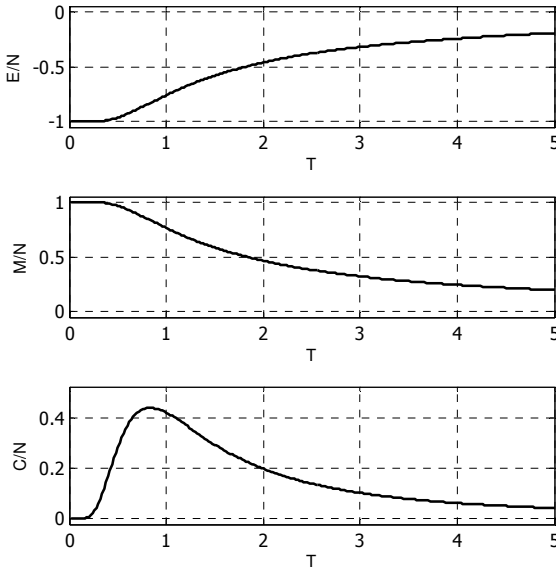


Рис. 9.3. Зависимость от температуры энергии (вверху), магнитного момента (посередине) и теплоемкости (внизу) системы невзаимодействующих магнитных моментов. Внешнее поле $H = 1$

Теплоемкость достигает своего максимума при температурах $T \sim H$, когда сравниваются энергии переворота спина за счет магнитного поля и масштаб температурных флуктуаций. Выражение (9.65) можно получить также из второго соотношения (9.52) и из флуктуационного соотношения (9.50).

Задача 9.2. Получить (9.65) из (9.50) и (9.52).

Рассчитаем также еще одну важную физическую величину – **магнитную восприимчивость**

$$\chi = \left(\frac{dM}{dH} \right)_{H \rightarrow 0} = \frac{N}{T}. \quad (9.66)$$

Зависимость (9.66) называется **законом Кюри**. Она показывает отсутствие фазового перехода в упорядоченное (ферромагнитное или антиферромагнитное) состояние системы **невзаимодействующих** магнитных моментов.

Магнитная восприимчивость может быть рассчитана и из флуктуации магнитного момента

$$\chi = \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (9.67)$$

Задача 9.3. Получить (9.67).

Рассмотренная модель описывает также и большой канонический ансамбль. Действительно, перепишем (9.57) в так называемый решеточный газ, сопоставив каждому направленному вверх магнитному моменту узел, занятый некоторой частицей, а направленному вниз магнитному моменту – пустой узел, т.е. введем знакомые по предыдущим главам числа заполнения

$$n_i = \frac{(\mu_i + 1)}{2}; \quad n_i = 0; 1. \quad (9.68)$$

Магнитное поле теперь играет роль химического потенциала ($\mu = 2H$) для частиц, и, с точностью до несущественной аддитивной постоянной, имеем большой канонический ансамбль свободных частиц:

$$\hat{H} = -\mu \sum_i n_i = -\mu N. \quad (9.69)$$

Весь предыдущий анализ будет справедлив и в этом случае с точностью до переобозначений $H \rightarrow \mu$, $M \rightarrow N$. В частности, нетрудно убедиться, что соотношения (9.51) для обобщенной восприимчивости и среднего числа частиц совпадают, соответственно, с флуктуационным выражением для магнитной восприимчивости (9.67) и термодинамическим соотношением для магнитного момента (9.62).

Возвратимся теперь к физическим системам, рассмотренным во второй части, а именно, к бозонным и фермионным и спиновым системам в узельном базисе.

9.4.2. Модели сильной связи

В исходном виде модели сильной связи не могут быть напрямую исследованы с помощью статистического анализа, представленного выше, так как узельное представление не является собственно-энергетическим, и узельной функции не может быть сопоставлена определенная энергия. Поэтому сначала следует решить задачу Шредингера, т.е. диагонализировать гамильтонову матрицу и найти уровни энергии E_n и собственные функции $|\Phi_n\rangle$, а затем уже вычислять любые термодинамические средние:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n A_n e^{-E_n \beta}; \quad (9.70)$$

$$A_n = \langle \Phi_n | \hat{A} | \Phi_n \rangle.$$

Для невзаимодействующей ферми- или бозе-системы решение в случае модели сильной связи известно: гамильтониан становится диагональным в импульсном представлении, и, соответственно, спектр системы имеет вид аддитивной суммы:

$$E_m = \sum_k \varepsilon_k n_{mk}; \quad n_{mk} = 0; 1; 2; \dots;$$

$$\varepsilon_k = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a), \quad (9.71)$$

здесь n_{mk} – числа заполнения k -го импульса m -го энергетического состояния; a – расстояние между узлами трехмерной простой кубической решетки. Поэтому при расчете термодинамических средних вида (9.70) следует подставлять спектр (9.71), суммируя по соответствующим числам заполнения и импульсам.

Термодинамические свойства невзаимодействующих ферми- и бозе-систем будут подробно рассмотрены в следующей главе.

В случае наличия взаимодействия между частицами следует либо поступить так же, как указано выше, т.е. использовать спектр,

рассчитанный методом точной диагонализации, либо напрямую использовать свойства статистической суммы.

В общем случае для статистической суммы можно написать:

$$Z = \sum_n e^{-E_n \beta} = \sum_n \langle \Phi_n | e^{-H\beta} | \Phi_n \rangle = \text{Tr}(e^{-H\beta}). \quad (9.72)$$

Последнее соотношение означает, что статистическая сумма равна сумме диагональных элементов оператора $e^{-H\beta}$. Но сумма диагональных элементов, или след оператора, не зависит от базиса, в котором вычислены матричные элементы оператора, поэтому статистическая сумма может быть вычислена в любом другом, необязательно собственнo-энергетическом, представлении. Любые термодинамические средние, согласно (9.7), также могут быть вычислены напрямую, без предварительной диагонализации, если только возможно рассчитать матричные элементы вида $\langle \Psi_i | A e^{-H\beta} | \Psi_i \rangle$:

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}(A e^{-\beta H})}{Z} = \frac{1}{Z} \sum_i \langle \Psi_i | A e^{-H\beta} | \Psi_i \rangle. \quad (9.73)$$

Например, для энергии и среднего числа частиц имеем:

$$\begin{aligned} E(T) &= \frac{\text{Tr}(H e^{-\beta H})}{Z}; \\ N(T) &= \frac{\text{Tr}(N e^{-\beta H})}{Z}. \end{aligned} \quad (9.74)$$

Заметим, что для энергии остается справедливым выражение через производную от логарифма статистической суммы (9.49).

Практически использовать выражение (9.73) следует так: сначала рассчитываются матрицы H и A в исходном (узельном) базисе, затем производится вычисление оператора $e^{-H\beta}$:

$$e^{-\beta H} = \sum_{n=0}^{k \rightarrow \infty} \frac{(-\beta H)^n}{n!} = 1 - \beta H \left(1 - \frac{\beta H}{2} \left(1 - \frac{\beta H}{3} \left(1 - \dots \left(1 - \frac{\beta H}{k} \right) \right) \right) \right), \quad (9.75)$$

суммирование обрывается при достижении необходимой точности. Затем вычисляется матрица $Ae^{-\beta H}$ и рассчитываются $\text{Tr}(Ae^{-\beta H})$ и $\text{Tr}(e^{-\beta H}) = Z$.

В очень редких случаях удается аналитически рассчитать соотношения (9.74), например, рассмотрим модель сильной связи всего лишь для двух узлов. Для простоты ограничимся случаем бесспиновых фермионов (или hard-core-бозонов, так как в этом конкретном случае они будут эквивалентны). Гамильтониан модели выберем в виде

$$H = -t(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1) + V \left(n_1 - \frac{1}{2} \right) \left(n_2 - \frac{1}{2} \right). \quad (9.76)$$

Базис этой системы состоит из четырех функций в представлении чисел заполнения:

$$\Phi_1 = |00\rangle, \Phi_2 = |01\rangle, \Phi_3 = |10\rangle, \Phi_4 = |11\rangle. \quad (9.77)$$

Действие экспоненциального оператора рассчитывается аналитически:

$$\begin{aligned} e^{-\beta H} |00\rangle &= e^{-\beta V/4} |00\rangle; \\ e^{-\beta H} |11\rangle &= e^{-\beta V/4} |11\rangle; \\ e^{-\beta H} |10\rangle &= e^{-\beta V/4} (\text{ch}(\beta t) |10\rangle + \text{sh}(\beta t) |01\rangle); \\ e^{-\beta H} |01\rangle &= e^{-\beta V/4} (\text{ch}(\beta t) |01\rangle + \text{sh}(\beta t) |10\rangle). \end{aligned} \quad (9.78)$$

Задача 9.4. Получить (9.78).

Матрица статистического оператора имеет следующий вид:

$$e^{-\beta H} = \begin{pmatrix} e^{-\beta V/4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{\beta V/4} \text{ch}(\beta t) & e^{\beta V/4} \text{sh}(\beta t) & 0 \\ 0 & e^{\beta V/4} \text{sh}(\beta t) & e^{\beta V/4} \text{ch}(\beta t) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\beta V/4} \end{pmatrix}. \quad (9.79)$$

Из-за того, что гамильтониан сохраняет число частиц, матрица оператора $e^{-\beta H}$ имеет блочно-диагональный вид: первым стоит блок размера 1×1 , соответствующий числу частиц $N = 0$, затем

расположен блок размера 2×2 с $N=1$, и далее – блок размера 1×1 с $N=2$. Задача в этом случае разбивается на три независимые задачи, каждая из которых может быть решена отдельно.

Энергия и среднее число частиц для этой системы равны:

$$E(T) = \frac{\text{Tr}(\text{He}^{-\beta H})}{Z} = \frac{Ve^{-\beta V/2} - V\text{ch}(\beta t) - 4t \text{sh}(\beta t)}{4(e^{-\beta V/2} + \text{ch}(\beta t))}, \quad (9.80)$$

$$N(T) = \frac{\text{Tr}(\text{Ne}^{-\beta H})}{Z} = 1.$$

Рассмотрим теперь эту задачу в условиях большого канонического ансамбля, для этого в модель следует ввести химический потенциал, и тогда

$$E(T, \mu) = \frac{\text{Tr}(\text{He}^{-\beta(H-\mu N)})}{Z}; \quad (9.81)$$

$$N(T, \mu) = \frac{\text{Tr}(\text{Ne}^{-\beta(H-\mu N)})}{Z},$$

т.е. выражения (9.80) справедливы только при $\mu = 0$. Для числа частиц тогда имеем:

$$N(T, \mu) = \frac{\text{ch}(\beta t) + e^{-\beta(\frac{V}{2}-\mu)}}{\text{ch}(\beta t) + e^{-\beta V/2}\text{ch}(\beta \mu)}; \quad (9.82)$$

$$N(\mu \rightarrow -\infty) = 0;$$

$$N(\mu \rightarrow +\infty) = 2.$$

Зависимость $N(\mu)$ при разных значениях температуры показана на рис. 9.4. При увеличении химического потенциала число частиц в системе возрастает от 0 до 2. Ступеньки на графике связаны с дискретностью системы; они размываются при возрастании температуры.

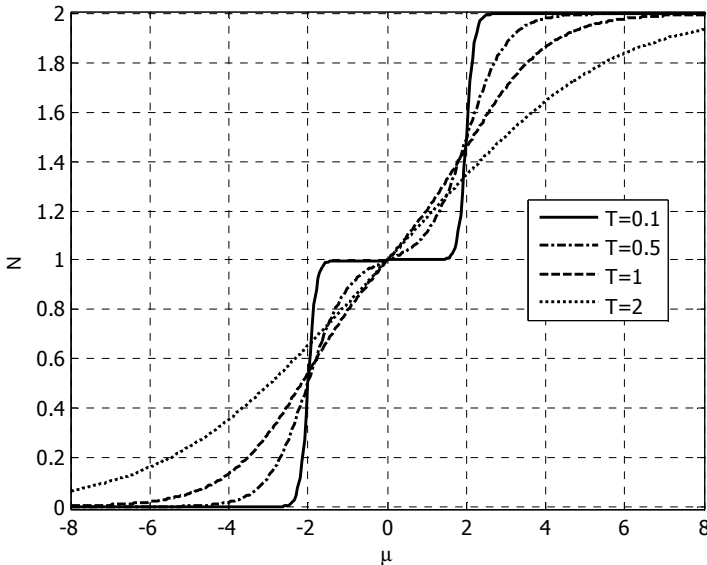


Рис. 9.4. Зависимость числа частиц в системе от химического потенциала при различной температуре. $t = 1$; $V = 2$

9.4.3. Одномерная модель Изинга

Учтем в рамках модели магнитных моментов (9.57) во внешнем поле еще обменное взаимодействие между ними:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j - H \sum_i \mu_i. \quad (9.83)$$

Первое слагаемое в (9.83) описывает взаимодействие соседних магнитных моментов. Модель (9.83) называется **моделью Изинга**. В одномерном случае удастся получить точное аналитическое решение модели Изинга.

Пусть есть одномерная цепочка с периодическими граничными условиями из N магнитных моментов, описываемая гамильтонианом (9.83). Рассчитаем для этого случая статистическую сумму.

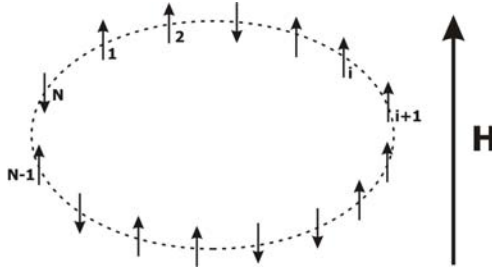


Рис. 9.5. Одномерная модель Изинга (9.83)

Несложно убедиться, что число слагаемых во взаимодействующей части (9.83) равно N (рис. 9.5). Перепишем (9.83) в виде одинарной суммы:

$$H = - \sum_{i=1}^N (J\mu_i\mu_{i+1} + H\mu_i);$$

$$\mu_i = \pm 1; \quad \mu_{N+1} \equiv \mu_1. \quad (9.84)$$

Рассмотрим пару соседних узлов i и $i+1$. Возможные энергии этой пары узлов такие:

$$\begin{aligned} E_{\uparrow\uparrow}^{i,i+1} &= -J - H; \\ E_{\downarrow\uparrow}^{i,i+1} &= J - H; \\ E_{\uparrow\downarrow}^{i,i+1} &= J + H; \\ E_{\downarrow\downarrow}^{i,i+1} &= -J + H. \end{aligned} \quad (9.85)$$

Введем матрицу размера 2×2 , которая содержит в себе члены статистической суммы этой пары узлов:

$$A_{i,i+1} = \begin{pmatrix} e^{-\beta E_{\uparrow\uparrow}^{i,i+1}} & e^{-\beta E_{\downarrow\uparrow}^{i,i+1}} \\ e^{-\beta E_{\uparrow\downarrow}^{i,i+1}} & e^{-\beta E_{\downarrow\downarrow}^{i,i+1}} \end{pmatrix}. \quad (9.86)$$

Рассмотрим произведение таких соседних матриц:

$$A_{i,i+1} A_{i+1,i+2} = \begin{pmatrix} e^{-\beta(E_{\uparrow\uparrow}^{i,i+1} + E_{\uparrow\uparrow}^{i+1,i+2})} & e^{-\beta(E_{\uparrow\uparrow}^{i,i+1} + E_{\downarrow\uparrow}^{i+1,i+2})} & \dots \\ \dots & e^{-\beta(E_{\downarrow\uparrow}^{i,i+1} + E_{\downarrow\uparrow}^{i+1,i+2})} & \dots \\ \dots & \dots & e^{-\beta(E_{\uparrow\downarrow}^{i,i+1} + E_{\uparrow\downarrow}^{i+1,i+2})} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & e^{-\beta(E_{\downarrow\downarrow}^{i,i+1} + E_{\downarrow\downarrow}^{i+1,i+2})} \end{pmatrix}. \quad (9.87)$$

Видно, что на главной диагонали в показателях экспонент перебраны все возможные состояния пары узлов i и $i+1$. Можно

проверить, что если умножить $A_{i,i+1}A_{i+1,i+2}$ на следующую соседнюю матрицу $A_{i+2,i+3}$, то на главной диагонали полученной матрицы в показателях экспонент будут присутствовать все возможные состояния уже трех узлов: i , $i+1$ и $i+2$, и т.д. Таким образом, при перемножении всех матриц A получим полную статистическую сумму всей системы:

$$Z = \text{Tr}(A_{1,2}A_{2,3}A_{3,4}\dots A_{N,1}). \quad (9.88)$$

Но так как все узлы в системе эквивалентны, то и все матрицы A абсолютно одинаковы, так что

$$\begin{aligned} A_{i,i+1}A_{i+1,i+2} &= A_{i,i+2}^2 \Rightarrow \\ \Rightarrow Z &= \text{Tr}((A_{1,2})^N). \end{aligned} \quad (9.89)$$

Последнее соотношение позволяет рассчитать статистическую сумму аналитически при любом количестве узлов. След матрицы $A_{1,2}$ в (9.89) не меняется при переходе к другому базису, в частности, к собственному базису, в котором матрица $A_{1,2}$ диагональна. Пусть числа λ_1, λ_2 – собственные числа матрицы $A_{i,i+1}$. Тогда статистическая сумма представима в виде

$$Z = \text{Tr}\left(\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}^N\right) = \lambda_1^N + \lambda_2^N. \quad (9.90)$$

Найдем собственные числа λ_1, λ_2 , решив секулярное уравнение

$$\det\begin{pmatrix} e^{-\beta E_{\uparrow\uparrow}^{i,i+1}} - \lambda & e^{-\beta E_{\downarrow\uparrow}^{i,i+1}} \\ e^{-\beta E_{\uparrow\downarrow}^{i,i+1}} & e^{-\beta E_{\downarrow\downarrow}^{i,i+1}} - \lambda \end{pmatrix} = 0. \quad (9.91)$$

В результате имеем:

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \text{ch}(\beta H) \pm \sqrt{e^{2\beta J} \text{sh}^2(\beta H) + e^{-2\beta J}}. \quad (9.92)$$

Далее, используя (9.92) и выражение для статистической суммы (9.90), можно рассчитать различные термодинамические средние.

Пользуясь общим выражением для термодинамического среднего (9.46), можно в предельных случаях, зная особенности спектра,

сделать некоторые выводы о характере температурных зависимостей, не решая термодинамическую задачу.

Например, можно показать, что если в спектре системы E_n основной уровень E_0 отделен от остальных конечной энергетической щелью $\Delta = E_1 - E_0$, что в действительности имеет место в полупроводниках, сверхпроводниках и многих других физических системах, то при низких температурах $T \ll \Delta$ все термодинамические величины будут иметь экспоненциальную температурную зависимость следующего вида:

$$A(T) \sim e^{-\Delta/T}. \quad (9.93)$$

Этот асимптотический результат справедлив для любой квантовой или классической модели, он следует прямо из определения термодинамического среднего:

$$\begin{aligned} A(T) &= \frac{1}{Z} \sum_n A_n e^{-E_n \beta} = \left(\frac{A_0 e^{-\beta E_0} + A_1 e^{-\beta E_1} + \dots}{e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_1} + \dots} \right)_{|T \rightarrow 0} = \\ &= \left(\frac{A_0 + A_1 e^{-\beta \Delta} + \dots}{1 + e^{-\beta \Delta} + \dots} \right)_{|T \rightarrow 0} \approx A_0 + \text{const} \cdot e^{-\beta \Delta} + \dots \end{aligned} \quad (9.94)$$

Можно показать, что этот результат справедлив и в том случае, если при $E \geq E_1$ энергетические уровни в системе образуют непрерывный спектр.

Задачи

9.5. Для одномерной бозонной модели Хаббарда

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j + \text{h.c.}) + \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1)$$

с периодическими граничными условиями; $t = 1$; $U = 2$; максимальное заполнение на узле $n_{\max} = 3$; число узлов $m = 5$, рассчитать статистическую сумму, энергию и теплоемкость в зависимости от температуры двумя способами: 1) предварительно диагонализировав гамильтонову матрицу; 2) через след гамильтоновой матрицы в узельном базисе. Сравнить результаты.

9.6. Для одномерной ферромагнитной модели Изинга

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + H \sum_i S_i$$

с периодическими граничными условиями; $J=1$; $S_i = \pm 1$; внешнее поле $H=0.1$; число узлов $m=10$, рассчитать статистическую сумму, энергию, теплоемкость, магнитный момент и восприимчивость в зависимости от температуры двумя способами: 1) предварительно диагонализировав гамильтонову матрицу; 2) через след гамильтоновой матрицы в узельном базисе. Сравнить результаты.

9.7. Для одномерной бозонной модели Хаббарда

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j + \text{h.c.}) + \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) - \mu \sum_i n_i$$

с периодическими граничными условиями; $t=1$; $U=2$; максимальное заполнение на узле $n_{\max}=2$; число узлов $m=5$, рассчитать зависимость числа частиц в системе от химического потенциала μ . Расчет провести для температур $T=0; 0.05; 0.1; 0.2$.

Решение

Узельный базис для этой задачи будет состоять из $R=243$ базисных функций:

$$\Phi_1 = |00000\rangle;$$

$$\Phi_2 = |00001\rangle;$$

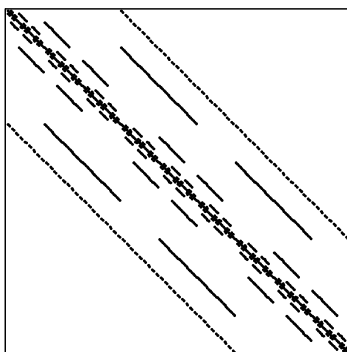
$$\Phi_3 = |00002\rangle;$$

$$\Phi_4 = |00010\rangle;$$

...

$$\Phi_{243} = |22222\rangle.$$

Для каждого значения химического потенциала находим вид гамильтоновой матрицы в узельном представлении, вычисляя матричные элементы $\langle \Phi_i | H | \Phi_j \rangle = H_{ij}$. Портрет гамильтоновой матрицы показан на следующем рисунке.



Получив гамильтонову матрицу, находим ее собственные функции φ_α и соответствующие собственные значения E_α , $\alpha = 1, \dots, R$. При нулевой температуре система находится в основном состоянии, т.е. в состоянии с минимальной энергией $E_{\alpha'} = \min(E_\alpha)$. Число частиц в основном состоянии будет равно

$$\langle n \rangle_0 \equiv \langle \varphi_{\alpha'} | n | \varphi_{\alpha'} \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^R C_{i\alpha'} \Phi_i \left| n \right| \sum_{j=1}^R C_{j\alpha'} \Phi_j \right\rangle = \sum_{i=1}^R (C_{i\alpha'})^2 n_i,$$

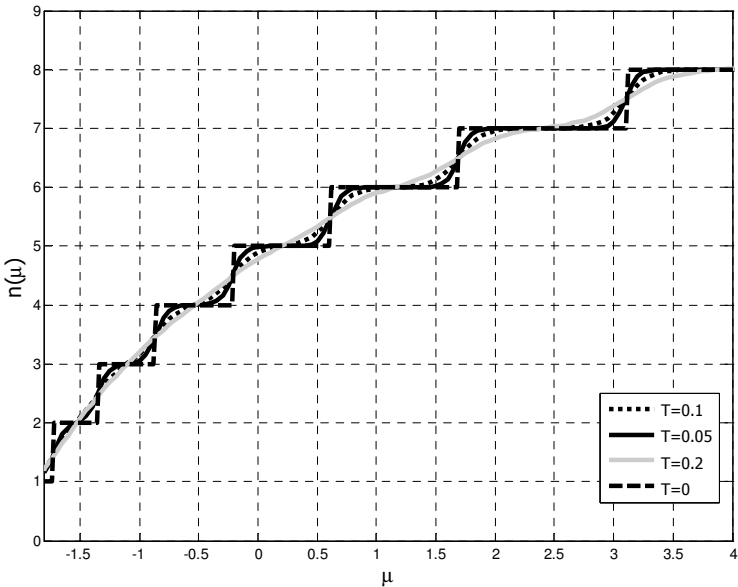
где C_{ij} – коэффициенты разложения собственных функций φ по узельному базису Φ ; n_i – суммарное число частиц в базисном состоянии Φ_i .

Если температура отлично от нуля, то среднее число частиц в системе вычисляется по формуле

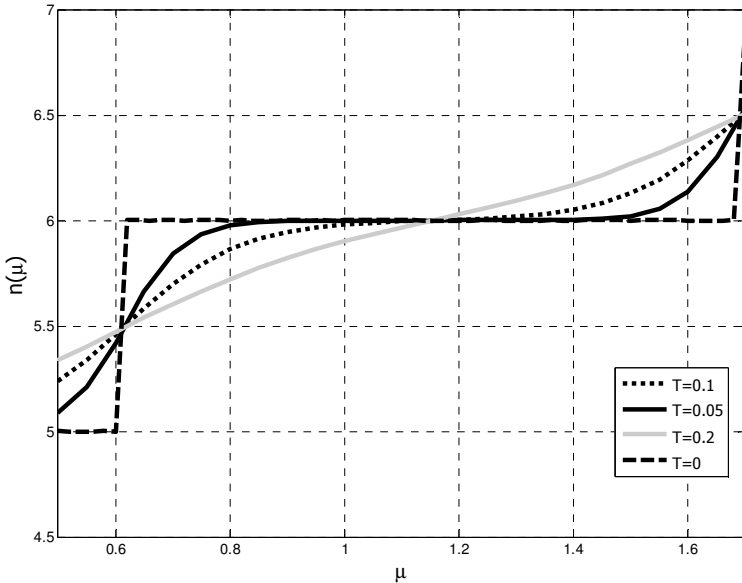
$$\langle n \rangle = \frac{\sum_{\alpha=1}^R n_\alpha \exp(-E_\alpha / T)}{\sum_{\alpha=1}^R \exp(-E_\alpha / T)},$$

здесь n_α – число частиц в собственном состоянии φ_α .

На следующем рисунке показана зависимость среднего числа частиц в системе от химического потенциала в диапазоне от -1.8 до 4 для различных значений температур.



При нулевой температуре число частиц в системе скачками меняется на единицу при росте химического потенциала; при повышении температуры ступеньки все больше размываются. На следующем рисунке показана одна из ступенек в увеличенном масштабе; отклонение кривой, соответствующей нулевой температуре, от вертикали обусловлено дискретностью шага по химическому потенциалу при расчете, в данном случае он равен 0.02.



9.8. Для одномерной антиферромагнитной модели Гейзенберга

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + H \sum_i S_i$$

с периодическими граничными условиями; $J = -1$; $S_i = \pm \frac{1}{2}$; число узлов $m = 10$, рассчитать зависимость энергии и магнитного момента от внешнего поля H . Расчет провести для температур $T = 0.1; 0.5; 1; 2$. Построить графики зависимостей.

10. Статистика Больцмана, Ферми и Бозе. Плотность состояний

10.1. Функции распределения

Рассмотрим важные частные случаи функций распределения, которые описывают системы, представляющие собой идеальный газ со статистикой Бозе или Ферми). В этом случае взаимодействие между частицами отсутствует, и задачу об определении многочастичных уровней энергии всей системы E_n можно свести к задаче об определении уровней энергии одной частицы ϵ_k – так называемому одночастичному спектру. Здесь индекс k нумерует квантовые состояния одной частицы. Для численного исследования существенно, что в таком случае можно сформулировать задачу не только для конечного кластера, но и для макроскопической системы.

Мы уже знакомы с представлением чисел заполнения n_k , характеризующих число частиц в k -м квантовом состоянии (для узельного кластера число k – это номер узла пространственной решетки). Перейдем в импульсное представление, так что будем полагать числа k импульсами (дискретными или непрерывными), характеризующими одночастичный спектр. В частности, для приближения сильной связи спектр имеет известный вид (см., например, (5.25)):

$$\epsilon(k) = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a), \quad (10.1)$$

а для свободного ферми- или бозе-газа справедлива квадратичная по импульсу дисперсионная зависимость

$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (10.2)$$

здесь m – эффективная масса частицы. Импульсное представление удобно, так как гамильтониан невзаимодействующей системы в этом представлении диагонален, а значит, диагональна и матрица плотности.

Соответственно, для условий канонического или большого канонического ансамблей средние числа заполнения импульсных состояний n_k становятся функциями температуры и энергии и равны матричным элементам одночастичной матрицы плотности – функции распределения частиц по одночастичным уровням энергии.

Рассмотрим сначала идеальный **разреженный** газ. Будем полагать, что квантово-механические обменные эффекты слабы, т.е. можно пренебречь либо принципом Паули (для фермионов), либо возможностью занять несколькими тождественными частицам одно и то же состояние (для бозонов). Это предположение означает малость искомого средних чисел заполнения $\langle n_k \rangle$. К таким системам относятся, например, обычные молекулярные или атомарные газы при комнатных температурах и низком давлении. Условие

$$\langle n_k \rangle \ll 1 \quad (10.3)$$

позволяет полагать, что в одном квантовом состоянии не может быть более одной частицы. Это условие – не аналог принципа Паули, так как не предполагаются тождественность частиц и антисимметрия волновой функции, просто таким образом можно задачу о всей системе свести к задаче об одной частице.

Полную энергию системы невзаимодействующих частиц можно выразить через числа заполнения и одночастичные энергии в виде аддитивной суммы:

$$E = \sum_k \epsilon_k n_k . \quad (10.4)$$

Запишем распределение Гиббса системы в условиях большого канонического ансамбля с переменным числом частиц $N = \sum_k n_k$,

учитывая химический потенциал μ :

$$\rho_{E,N} = e^{-(E-\mu N)\beta} = e^{-\beta \sum_k (\epsilon_k - \mu) n_k} = \prod_k \left(e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)} \right)^{n_k} . \quad (10.5)$$

Матрица плотности системы, согласно (10.5), представляет собой произведение матриц плотности для каждого квантового состояния

к. Соответственно, все физические величины будут аддитивными функциями от каждого из состояний к. Рассчитаем статистическую сумму и свободную энергию этих состояний. Суммирование состояний в статистической сумме будет происходить только по числам заполнения n_k :

$$Z_k = \sum_{n_k} (e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)})^{n_k} ; \quad (10.6)$$

$$F_k = -T \ln \left(\sum_{n_k} (e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)})^{n_k} \right). \quad (10.7)$$

Так как для разреженного идеального газа $\langle n_k \rangle \ll 1$, свободную энергию в (10.7) можно разложить по степеням чисел заполнения (предполагая, что и экспоненты малы):

$$F_k \approx -T \ln(1 + e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} + \dots) \approx -T e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} + \dots \quad (10.8)$$

Числа заполнения n_k равны либо нулю, либо единице, вероятность реализации других значений $n_k \geq 2$ ввиду разреженности газа мала, поэтому

$$F_k \approx -T e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}. \quad (10.9)$$

Используя последнее из термодинамических соотношений (9.51), получаем окончательно так называемое **распределение Больцмана**:

$$\langle n_k \rangle = -\frac{\partial F_k}{\partial \mu} = e^{(\mu - \varepsilon_k)\beta}. \quad (10.10)$$

Распределение (10.10) фактически является распределением Гиббса для одной частицы, при этом роль энергии системы здесь играет одночастичная энергия ε_k (10.1), (10.2). В (10.10) следует еще учесть нормировку (одночастичную статистическую сумму), так что окончательно

$$\begin{aligned} \langle n_k \rangle &= \frac{1}{Z} e^{(\mu - \varepsilon_k)\beta}; \\ Z &= \sum_k e^{(\mu - \varepsilon_k)\beta}. \end{aligned} \quad (10.11)$$

Рассмотрим теперь газ, состоящий из частиц с ферми-статистикой, когда справедлив принцип Паули, и числа заполнения могут принимать только два значения: $n_k = 0; 1$. Исходим из выражения для свободной энергии (10.7):

$$F_k = -T \ln \left(\sum_{n_k=0;1} (e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)})^{n_k} \right) = -T \ln(1 + e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}). \quad (10.12)$$

Соответствующий расчет среднего числа заполнения для квантового состояния k приводит к известному **распределению Ферми – Дирака**

$$\langle n_k \rangle = -\frac{\partial F_k}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \mu)\beta} + 1}. \quad (10.13)$$

Для случая идеального газа с бозе-статистикой, когда нет запрета на количество частиц в одном состоянии, и числа заполнения могут принимать любые неотрицательные значения, имеем:

$$F_k = -T \ln \left(\sum_{n_k=0}^{\infty} (e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)})^{n_k} \right) = -T \ln \left(\sum_{n_k=0}^{\infty} e^{-\beta n_k (\epsilon_k - \mu)} \right). \quad (10.14)$$

Заметим, что в (10.14) под знаком логарифма – бесконечная геометрическая прогрессия. Ее можно просуммировать, если $\epsilon_k > \mu$. Однако минимальная одночастичная энергия, согласно (10.1) – (10.2), равна $(\epsilon_k)_{\min} = 0$. Поэтому для бозе-газа область физических решений (10.13) соответствует $\mu < 0$. В этом случае можем точно просуммировать (10.14) и получить следующее:

$$F_k = -T \ln \left(\frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}} \right). \quad (10.15)$$

Окончательно, дифференцируя (10.15) по химическому потенциалу, находим **распределение Бозе – Эйнштейна**:

$$\langle n_k \rangle = -\frac{\partial F_k}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \mu)\beta} - 1}. \quad (10.16)$$

Распределения Ферми и Бозе также могут быть получены и из выражения для энтропии. Пусть все квантовые числа k будут сгруппированы по близким значениям энергии $\epsilon(k)$. Положим, что

количество состояний в каждой группе G_ε , количество частиц в группе N_ε , и статистический вес группы обозначим $\Delta\Omega_\varepsilon$, при этом предполагается, что $N_\varepsilon \gg 1$ и $\Omega_\varepsilon \gg 1$. С учетом того, что каждая группа G_ε является независимой подсистемой, суммарный статистический вес всей системы будет равен

$$\Delta\Omega = \prod_\varepsilon \Delta\Omega_\varepsilon. \quad (10.17)$$

Рассчитаем статистический вес в группе в случае ферми-частиц. Для этого следует рассчитать количество способов, которыми можно разместить N_ε частиц по G_ε состояний при выполнении принципа Паули:

$$\Delta\Omega_\varepsilon = \frac{G_\varepsilon!}{N_\varepsilon! (G_\varepsilon - N_\varepsilon)!}. \quad (10.18)$$

Для бозе-газа соответствующее число способов при отсутствии ограничения на числа заполнения гораздо больше (см. (6.2)):

$$\Delta\Omega_\varepsilon = \frac{(G_\varepsilon + N_\varepsilon - 1)!}{N_\varepsilon! (G_\varepsilon - 1)!}. \quad (10.19)$$

Соответственно, энтропия системы

$$S = \ln \Delta\Omega = \sum_\varepsilon (\pm \ln((G_\varepsilon \pm N_\varepsilon)!) - \ln(N_\varepsilon!) \mp \ln(G_\varepsilon!)), \quad (10.20)$$

верхний индекс относится к бозе-статистике, нижний – к ферми-статистике. Так как для макроскопической системы $G_\varepsilon \gg 1$, $N_\varepsilon \gg 1$, то единицами в (10.19) можно пренебречь.

Используя формулу Стирлинга

$$\ln N! \approx N \ln N - N; \quad N \gg 1, \quad (10.21)$$

находим:

$$S = \sum_\varepsilon (\pm (G_\varepsilon \pm N_\varepsilon) \ln G_\varepsilon - N_\varepsilon \ln N_\varepsilon \mp G_\varepsilon \ln G_\varepsilon). \quad (10.22)$$

Введем средние вероятности заполнения состояний

$$\langle n_\varepsilon \rangle = \frac{N_\varepsilon}{G_\varepsilon} \equiv \langle n_{\varepsilon(k)} \rangle, \quad (10.23)$$

которые совпадают в термодинамическом пределе со средними числами заполнения $\langle n_k \rangle$. Тогда выражение для энтропии можно записать в следующем виде:

$$S = \sum_{\varepsilon} G_{\varepsilon} (\pm [1 \pm \langle n_{\varepsilon} \rangle] \ln(1 \pm \langle n_{\varepsilon} \rangle) - \langle n_{\varepsilon} \rangle \ln \langle n_{\varepsilon} \rangle). \quad (10.24)$$

Соотношение (10.24) – известное выражение для энтропии ферми- и бозе-газа [36], при этом суммирование по ε с весовыми множителями G_{ε} эквивалентно суммированию по всем квантовым числам:

$$\sum_{\varepsilon} G_{\varepsilon} \equiv \sum_k , \quad (10.25)$$

поэтому выпишем еще раз в привычных обозначениях **энтропию ферми- и бозе-газа**:

$$S = \sum_k (\pm [1 \pm \langle n_k \rangle] \ln(1 \pm \langle n_k \rangle) - \langle n_k \rangle \ln \langle n_k \rangle). \quad (10.26)$$

Чтобы рассчитать средние числа заполнения, согласно второму началу термодинамики, следует найти условия максимума энтропии при заданном числе частиц N и энергии E системы:

$$\begin{aligned} N &= \sum_k \langle n_k \rangle; \\ E &= \sum_k \varepsilon_k \langle n_k \rangle. \end{aligned} \quad (10.27)$$

Самый удобный способ нахождения максимума (10.26) при ограничениях (10.27) – приравнять нулю производную по искомым числам заполнения с вводом неопределенных множителей Лагранжа α, β [36]:

$$\frac{\partial(S + \alpha N + \beta E)}{\partial \langle n_k \rangle} = 0. \quad (10.28)$$

Дифференцирование приводит к выражению

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_k)} \mp 1}. \quad (10.29)$$

Постоянные Лагранжа напрямую связаны с температурой и химическим потенциалом, достаточно сравнить вариацию (10.28) и термодинамическую вариацию энергии $dE = TdS + \mu dN$:

$$\alpha = \frac{\mu}{T};$$

$$\beta = -\frac{1}{T}.$$
(10.30)

Таким образом, распределения (10.29) совместно с (10.30) совпадают с распределениями Ферми – Дирака и Бозе – Эйнштейна.

Сформулируем теперь задачу нахождения термодинамических средних для идеального газа с ферми- или бозе-статистикой при конечной температуре и заданном значении химического потенциала.

Будем полагать, что среднее число частиц в системе $\langle N \rangle$ фиксировано конкретным значением химического потенциала μ . Тогда справедливо условие нормировки

$$\langle N \rangle = \sum_k \langle n_k \rangle.$$
(10.31)

Фактически – это трансцендентное уравнение, определяющее число частиц как функцию химического потенциала и температуры. Или наоборот: при фиксированном числе частиц это уравнение определяет химический потенциал $\mu(\langle N \rangle, T)$. Далее, зная химический потенциал, можно рассчитать энергию, теплоемкость системы и другие величины, система уравнений имеет вид:

$$\langle N(\mu, T) \rangle = \sum_k f(\varepsilon_k, \mu);$$

$$E(\mu, T) = \sum_k \varepsilon_k f(\varepsilon_k, \mu);$$

$$C(T) = \sum_k \varepsilon_k \frac{df(\varepsilon_k, \mu)}{dT};$$

$$\dots$$

$$f(\varepsilon_k, \mu) = \langle n_k \rangle.$$
(10.32)

Система (10.32) справедлива для любой из вышеперечисленных типов статистик, при этом величиной $f(\varepsilon_k, \mu)$ обозначается среднее число заполнения – одночастичная функция распределения по энергии.

Суммирование по k может происходить как по непрерывному спектру для макроскопической системы, так и по дискретному набору импульсов для конечного кластера. В частности, для узельных задач, рассмотренных ранее при численной диагонализации, для конечной системы размером $aL_x \times aL_y \times aL_z$ имеем:

$$k_x = \frac{2\pi}{aL_x} n; \quad k_y = \frac{2\pi}{aL_y} m; \quad k_z = \frac{2\pi}{aL_z} l;$$

$$n = 0 \div L_x - 1; \quad m = 0 \div L_y - 1; \quad l = 0 \div L_z - 1; \quad (10.33)$$

$$\sum_k = \frac{a^3 L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} \int d^3 k \Rightarrow \sum_{nml} .$$

10.2. Плотность состояний

Рассмотрим теперь макроскопическую систему, в которой число одночастичных квантовых состояний настолько велико, что множество разрешенных импульсов можно считать непрерывным набором квантовых состояний.

Заметим, что числа заполнения зависят только от одночастичной энергии ε_k , и для расчета термодинамических величин нет необходимости хранить полную информацию о спектральной зависимости энергии частиц, детали одночастичного спектра можно заранее учесть переходом от суммирования по k к интегрированию по ε .

Введем понятие **плотности одночастичных состояний** $N(\varepsilon)$. По определению,

$$N(\varepsilon) = \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k). \quad (10.34)$$

Физически $N(\varepsilon)$ отвечает количеству возможных квантовых состояний, размещенных в интервале от ε до $\varepsilon + d\varepsilon$. Ранее эта

величина вводилась при описании взаимодействующей системы (см. (8.112)).

Математически плотность одночастичных состояний позволяет перейти во всех суммах (10.32) к интегрированию по энергии:

$$\sum_k \Rightarrow \int N(\epsilon) d\epsilon. \quad (10.35)$$

Таким образом, все особенности конкретного одночастичного спектра отражаются на плотности состояний, но, один раз вычисленная, она может быть использована для расчета других термодинамических величин.

Система уравнений (10.32) с учетом (10.35) может быть представлена в следующем виде:

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \int d\epsilon N(\epsilon) f(\epsilon, \mu); \\ E(T) &= \int d\epsilon \epsilon N(\epsilon) f(\epsilon, \mu); \\ C(T) &= \int d\epsilon \epsilon N(\epsilon) \frac{df(\epsilon, \mu)}{dT}; \end{aligned} \quad (10.36)$$

....

При этом следует напомнить, что необходимо предварительно рассчитать химический потенциал из первого уравнения (уравнения нормировки). Далее будем обозначать $\langle N \rangle$ через N .

Плотность состояний для конкретной системы может быть вычислена, если известен ее одночастичный спектр. Если мы имеем свободный газ с квадратичным законом дисперсии $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$, то для трехмерного случая находим:

$$N(\epsilon) = \sum_k \delta\left(\epsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) = V \int \frac{d^3k}{(2\pi\hbar)^3} \delta\left(\epsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) = V \frac{m\sqrt{m\epsilon}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3}. \quad (10.37)$$

Таким образом, $N(\epsilon) \sim \sqrt{\epsilon}$. Можно показать, что в двумерном случае $N(\epsilon) = \text{const}$, а в одномерной ситуации $N(\epsilon) \sim 1/\sqrt{\epsilon}$.

Задача 10.1. Получить (10.37) и рассчитать $N(\epsilon)$ в двумерном и одномерном случаях.

Для рассматриваемых ранее узельных моделей в невзаимодействующем случае мы находили $\epsilon_k = -2t \cos ka$ (см. (6.28)) для одномерной системы. Расчет плотности состояний в одномерной ситуации в пределе бесконечно большой цепочки с таким спектром приводит к выражению

$$N(\epsilon) = L \int \frac{dk}{2\pi} \delta(\epsilon + 2t \cos ka) = V \frac{\theta(2t - |\epsilon|)}{2\pi a \sqrt{4t^2 - \epsilon^2}}. \quad (10.38)$$

Таким образом, получаем полосу разрешенных энергий шириной $4t$ с характерными для одномерной ситуации корневыми особенностями плотности состояний на границах (рис. 10.1).

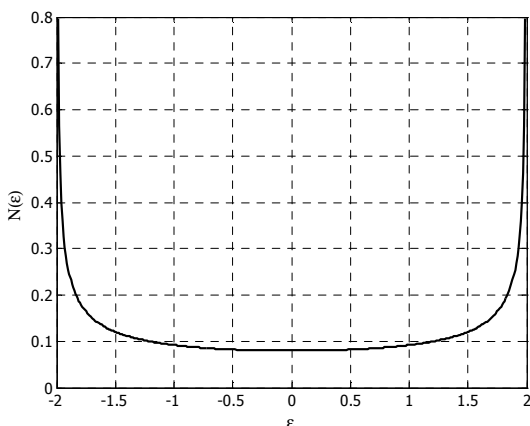


Рис. 10.1. Плотность состояний для одномерного идеального газа.
 $V = 1; t = 1; a = 1$

Задача 10.2. Получить выражение для плотности состояний для двумерной невзаимодействующей системы.

Если в задаче рассматривается дискретная система небольшого размера, то переход (10.35) от суммирования к интегрированию будет некорректен, так как в этом случае множество разрешенных импульсов нельзя считать непрерывным. Для малых дискретных систем следует аккуратно суммировать по всем разрешенным импульсам, не переходя к интегралам.

Вернемся теперь к трехмерным ферми- и бозе-газам в термодинамическом пределе и кратко рассмотрим постановку

численной схемы, проблемы обезразмеривания и основные аналитические результаты в предельных случаях.

10.3. Термодинамика идеального ферми-газа

При нулевой температуре распределение Ферми превращается в ступеньку, ограниченную значением $\mu(0)$ (рис. 10.2), называемым в этом случае **энергией Ферми** E_F :

$$f_k \equiv f(\varepsilon_k) = \left(\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 1} \right) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \theta(\mu(0) - \varepsilon_k); \quad (10.39)$$

$$\mu(0) = E_F.$$

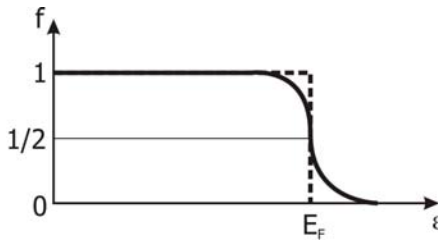


Рис. 10.2. Функция распределения для свободного ферми-газа. Штриховая линия отвечает температуре $T = 0$, сплошная линия – температуре $0 < T \ll E_F$

В этом случае все частицы, в соответствии с принципом Паули, занимают в импульсном пространстве сферу Ферми с радиусом k_F , т.е. наименьшие по энергии состояния (рис. 10.3). Соответственно,

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}.$$

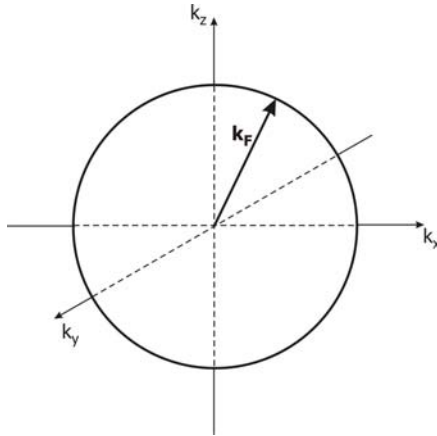


Рис. 10.3. Сфера Ферми в импульсном пространстве

Электронный газ при $T = 0$ называется **вырожденным**. При нулевой температуре можно получить соотношение между импульсом Ферми и концентрацией частиц. Действительно, переходя от суммирования к интегрированию в макроскопическом пределе, находим

$$N = \sum_{k\sigma} f_k = 2V \int_0^{k_F} \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} d\Omega \Rightarrow k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}; \quad (10.40)$$

$$n = \frac{N}{V},$$

здесь учтено суммирование по двум проекциям спина.

Свободный ферми-газ является неплохим приближением для простых металлов: полагая $n \sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$ и массу m равной массе свободного электрона, находим $E_F \sim 10 \text{ эВ}$.

Можно получить следующие полезные соотношения:

$$N(E_F) = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F}; \quad (10.41)$$

$$\frac{\langle E \rangle}{N} = \frac{3}{5} E_F. \quad (10.42)$$

Задача 10.3. Получить (10.41) и (10.42).

Воспользовавшись термодинамическими соотношениями, получим уравнение состояния ферми-газа при нулевой температуре:

$$P = \frac{\partial E}{\partial V} = \frac{2E}{3V} \Rightarrow PV^{5/3} = \frac{\hbar^2}{5m} (3\pi^2)^{2/3} N^{5/3}. \quad (10.43)$$

Таким образом, даже при нулевой температуре существует конечное давление идеального ферми-газа, связанное с его квантовым вырождением и конечной плотностью. Уравнение (10.43) отличается от уравнения состояния идеального классического газа $PV = NT$.

При конечной температуре особенности ферми-газа проявляются до тех пор, пока температура не станет сопоставима по величине с энергией Ферми ($T_0 \sim E_F$) и при $T > T_0$ свойства газа переходят в свойства классического (больцмановского) газа. Температура T_0 называется **температурой вырождения**, и для реальных металлов она высока, $T_0 \sim 10^5$ К.

Сформулируем систему уравнений для численного анализа трехмерного ферми-газа, используя удобное обезразмеривание физических величин. Для этого, принимая во внимание (10.41) и зависимость (10.38), запишем плотность состояний в следующем виде:

$$N(\epsilon) = \frac{3N\sqrt{\epsilon}}{2E_F^{3/2}}. \quad (10.44)$$

Введем безразмерные энергию, температуру и химический потенциал:

$$E' = \frac{E}{E_F}; \quad \mu' = \frac{\mu}{E_F}; \quad T' = \frac{T}{E_F}. \quad (10.45)$$

Тогда система уравнений (10.36) имеет вид:

$$\begin{aligned}
 1 &= \frac{3}{2} \int_0^{\infty} \sqrt{E'} dE' \left(\frac{1}{e^{(E'-\mu')/T'} + 1} \right); \\
 \frac{E'(T')}{N} &= \frac{3}{2} \int_0^{\infty} (E')^{3/2} dE' \left(\frac{1}{e^{(E'-\mu')/T'} + 1} \right); \\
 \frac{C(T')}{N} &= \frac{3}{8(T')^2} \int_0^{\infty} (E')^{3/2} (E' - \mu) dE' \frac{1}{\text{ch}^2\left(\frac{E' - \mu'}{2T'}\right)}.
 \end{aligned}
 \tag{10.46}$$

Систему (10.46) строго можно решить только численно. Сначала из первого уравнения, рассматривая его как трансцендентное для химического потенциала, находим μ' при заданной температуре. Затем последовательно вычисляем среднюю энергию, теплоемкость и другие необходимые величины. Зависимость химического потенциала от концентрации учитывается при его обезразмеривании на энергию Ферми.

В предельных случаях низких $T \ll T_0$ и высоких $T \gg T_0$ температур можно получить аналитические ответы, которые полезно сравнить с численными.

При низких температурах $T \ll T_0 = E_F$ можно получить поправки к химическому потенциалу, энергии и теплоемкости электронного газа. Пользуясь соотношением

$$\begin{aligned}
 I &= \int_0^{\infty} f(\varepsilon) d\varepsilon \left(\frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/T} + 1} \right) = \int_0^{\mu} f(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} T^2 f'(\mu) + \dots; \\
 \frac{\mu}{T} &\ll 1,
 \end{aligned}
 \tag{10.47}$$

можно получить:

$$\begin{aligned}
 \mu &= E_F \left(1 - \frac{T^2 \pi^2}{12 E_F^2} \right); \\
 E &= \frac{3}{5} N E_F \left(1 + \frac{5 \pi^2}{12} \left(\frac{T}{E_F} \right)^2 \right); \\
 C &= \gamma T; \quad \gamma = \frac{\pi^2}{3} N(E_F).
 \end{aligned}
 \tag{10.48}$$

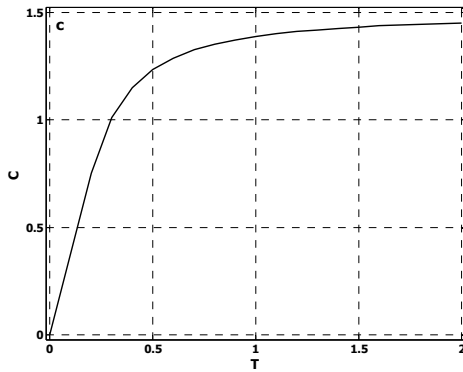
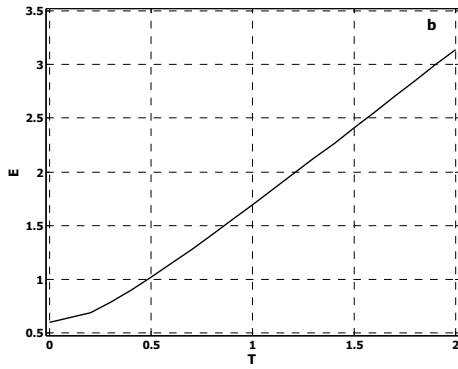
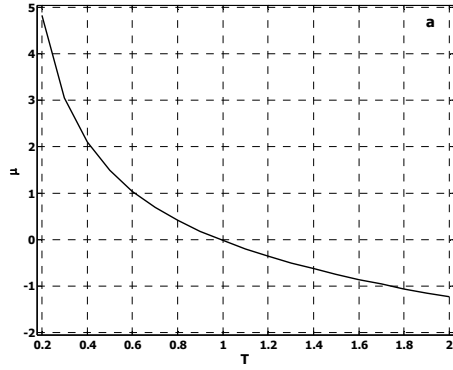


Рис. 10.4. Зависимость химического потенциала (а), энергии (б) и теплоемкости (с) идеального ферми-газа от температуры

Задача 10.4. Получить разложение (10.47).

Задача 10.5. Получить (10.48) из (10.46) при низких температурах.

Заметим, что теплоемкость вырожденного ферми-газа пропорциональна температуре и плотности состояний на уровне Ферми (число γ называется **постоянной Зоммерфельда**).

При высоких температурах $T \gg T_0$ статистика газа становится бoльцмановской, и зависимости энергии и теплоемкости электронного газа выходят на классический предел, так что

$$E \rightarrow \frac{3}{2}NT; \quad C \rightarrow \frac{3}{2}N. \quad (10.49)$$

Задача 10.6. Получить (10.49) из (10.46) в пределе больших температур.

Таким образом, теплоемкость ферми-газа выходит на насыщение и просто отражает число степеней свободы газа (по $\frac{1}{2}k_B$ на каждую степень).

На рис. 10.4 показаны зависимости химического потенциала, энергии и теплоемкости идеального ферми-газа от температуры, полученные численным решением системы (10.46).

10.4. Термодинамика идеального бозе-газа

Рассмотрим теперь идеальный бозе-газ. При нулевой температуре его свойства резко отличаются от свойств ферми-газа. Согласно статистике Бозе – Эйнштейна, все частицы при нулевой температуре должны находиться в наинизшем состоянии с энергией $\epsilon = 0$. Рассмотрим уравнение нормировки при конечной температуре

$$N = \int_0^{\infty} N(\epsilon) d\epsilon \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/T} - 1}. \quad (10.50)$$

При заданной плотности N/V при понижении температуры химический потенциал будет возрастать, оставаясь отрицательным.

Он достигнет значения $\mu = 0$ при температуре, определяемой из уравнения

$$N = \int_0^{\infty} N(\varepsilon) d\varepsilon \frac{1}{e^{\varepsilon/T} - 1}. \quad (10.51)$$

Расчет этой температуры приводит к значению

$$T(\mu = 0) \equiv T_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{m\zeta^{2/3}(3/2)} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} = \frac{3.31\hbar^2}{m} n^{2/3}, \quad (10.52)$$

здесь ζ – функция Римана, $n = N/V$. Эта температура называется **температурой бозе-конденсации** и отмечает точку фазового перехода, ниже которой частицы начинают макроскопически конденсироваться в основном состоянии. Для жидкого гелия ${}^4\text{He}$ эта точка отождествляется с температурой наступления сверхтекучего состояния, и равна 2.17 К.

Количество частиц, находящихся в основном состоянии, равно [36]

$$N_{\varepsilon=0} = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \right]. \quad (10.53)$$

Заметим, что температурная зависимость (10.53) хорошо описывает поведение жидкого гелия ${}^4\text{He}$ при температурах $T < 2.17$ К.

Задача 10.7. Получить (10.53), используя (10.50) и (10.51).

Таким образом, задача делится на две температурные области, $T < T_0$ и $T > T_0$. Химический потенциал при $T > T_0$ остается отрицательным, и при понижении температуры уменьшается по абсолютной величине, обращаясь точно в нуль при $T = T_0$. При $T < T_0$ химический потенциал равен нулю, так как макроскопически большое число частиц (10.53) находится в основном состоянии.

Таким образом, численный расчет идеального бозе-газа интересен при температурах выше температуры бозе-конденсации, так как при $T < T_0$ все термодинамические величины поддаются аналитическому расчету: при низких температурах средняя энергия и другие величины определяются только вкладами от частиц с энергиями $\varepsilon > 0$. Полагая $\mu = 0$, находим, например:

$$E = \frac{V\sqrt{2m}^{3/2}T^{5/2}}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty t^{3/2} dt \frac{1}{e^t - 1} = \frac{15V\sqrt{2m}^{3/2}T^{5/2}\zeta(5/2)}{(8\pi^{3/2}\hbar^3)};$$

$$C(T) = \frac{5E}{2T} \sim T^{3/2}. \quad (10.54)$$

Таким образом, свойства бозе-газа ниже температуры конденсации резко отличаются от свойств бальцмановского и ферми-газа.

Для случая $T > T_0$ удобно обезразмерить все физические параметры на температуру конденсации:

$$E' = \frac{E}{T_0}; \quad \mu' = \frac{\mu}{T_0}; \quad T' = \frac{T}{T_0}. \quad (10.55)$$

Тогда система уравнений для численной схемы принимает вид:

$$1 = \xi \int_0^\infty \sqrt{E'} dE' \frac{1}{e^{(E'-\mu')/T'} - 1}; \quad \xi = \frac{2}{\sqrt{\pi}\zeta(3/2)} = 0.432;$$

$$\frac{E'(T')}{N} = \xi \int_0^\infty (E')^{3/2} dE' \frac{1}{e^{(E'-\mu')/T'} - 1};$$

$$\frac{C(T')}{N} = \frac{\xi}{4} \frac{1}{(T')^2} \int_0^\infty (E')^{3/2} (E' - \mu) dE' \frac{1}{\text{sh}^2\left(\frac{E' - \mu'}{2T'}\right)}. \quad (10.56)$$

Решение (10.56) следует искать только для $\mu < 0$, $T' > 1$.

Графики зависимости химического потенциала, энергии и теплоемкости идеального бозе-газа от температуры, полученные численным решением системы (10.56), показаны на рис. 10.5. В точке $T = T_0$ график теплоемкости от температуры имеет излом (так называемая λ -точка), при этом [36]

$$\frac{C(T_0)}{C(T \rightarrow \infty)} = 1.28. \quad (10.57)$$

Так же, как и для ферми-газа, в пределе высоких температур $T \gg T_0$ можно получить классический предел

$$E \rightarrow \frac{3}{2}NT; \quad C \rightarrow \frac{3}{2}N. \quad (10.58)$$

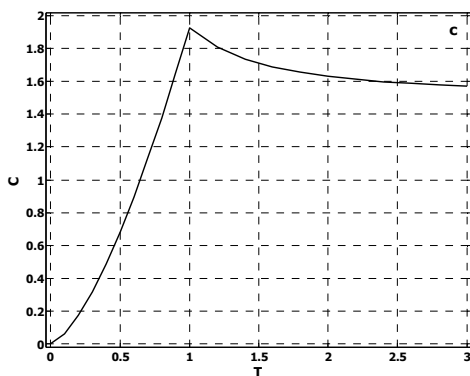
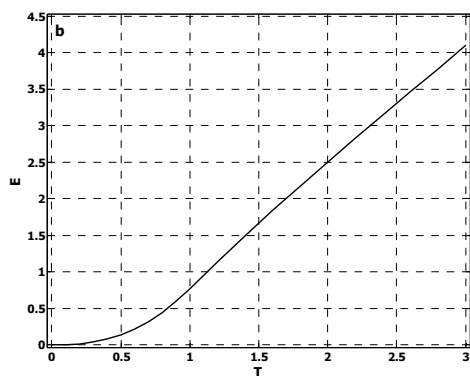
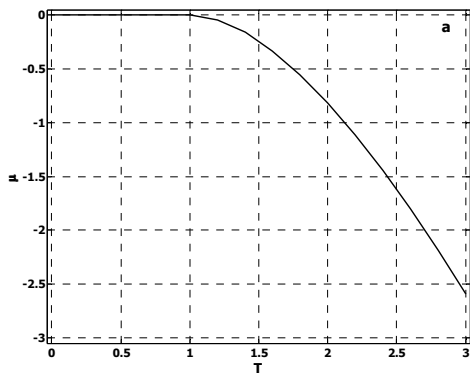


Рис. 10.5. Зависимость химического потенциала (а), энергии (б) и теплоемкости (с) идеального бозе-газа (в расчете на одну частицу) от температуры

Задача. 10.8. Получить (10.58) из (10.56) в пределе больших температур.

Задачи

10.9. Рассчитать зависимости химического потенциала, энергии и теплоемкости идеального ферми-газа от температуры, численно решив систему (10.46). Построить графики зависимостей. Сравнить предельные случаи с аналитическими ответами.

10.10. Рассчитать зависимости химического потенциала, энергии и теплоемкости идеального бозе-газа от температуры, численно решив систему (10.56). Построить графики зависимостей. Сравнить предельные случаи с аналитическими ответами, а также сравнить величину $C(T_0)/C(T \rightarrow \infty)$ с точным ответом.

10.11. Рассчитать зависимости химического потенциала, энергии и теплоемкости идеального одномерного ферми-газа от температуры, предварительно получив выражение для плотности состояний. Построить графики зависимостей.

10.12. Рассчитать зависимости химического потенциала, энергии и теплоемкости идеального одномерного бозе-газа от температуры, предварительно получив выражение для плотности состояний. Построить графики зависимостей.

10.13. Рассчитать зависимости химического потенциала, энергии и теплоемкости идеального двумерного ферми-газа от температуры, предварительно получив выражение для плотности состояний. Построить графики зависимостей.

10.14. Рассчитать зависимости химического потенциала, энергии и теплоемкости идеального двумерного бозе-газа от температуры, предварительно получив выражение для плотности состояний. Построить графики зависимостей.

11. Методы Монте-Карло для физических систем

11.1. Случайные распределения. Вероятность

Понятие вероятности является одним из ключевых в квантовой физике. Современное описание квантовых систем имеет исключительно вероятностный характер: волновая функция – основной объект изучения квантовой физики – имеет смысл плотности вероятности, рассмотрение систем многих тождественных частиц и термодинамических свойств этих систем также приводит к понятиям статистической суммы и плотности распределения частиц по разрешенным уровням энергии системы. Одними из наиболее часто встречающихся распределений являются следующие три фундаментальных распределения, отражающие вероятность заполнения частицами квантовых состояний системы с энергией E и химическим потенциалом μ при температуре T :

распределение Больцмана

$$\rho(E) = e^{\frac{E-\mu}{T}}, \quad (11.1)$$

распределение Ферми – Дирака

$$\rho(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{T}} + 1}, \quad (11.2)$$

распределение Бозе – Эйнштейна

$$\rho(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{T}} - 1}. \quad (11.3)$$

В практических задачах при численном моделировании квантовых систем также часто возникает необходимость получать случайные величины с заданным законом распределения, причем существенным моментом при этом является эффективность алгоритма с точки зрения временных затрат.

Как правило, в распоряжении пользователя имеется датчик случайных чисел, встроенный в пакеты программ, выдающий случайные числа, равномерно распределенные в интервале $(0;1)$. Требования к нему достаточно высоки: равномерность распределения должна обеспечиваться не только для первичного массива чисел, но и для производных от него – функций от полученного распределения. Если случайные числа, генерируемые датчиком, имеют двойную точность, т.е. имеют 16 значащих цифр после запятой, то количество различных неодинаковых случайных чисел, которые могут быть получены с помощью этого датчика, будет $\sim 2 \cdot 10^9$ (или, точнее, 2^{31}), что, как правило, является достаточным даже для длительных расчетов.

В действительности все датчики случайных чисел выдают так называемые **псевдослучайные числа**, т.е. их распределение не является строго равномерным. Первый алгоритм для получения псевдослучайных чисел был предложен Дж. фон Нейманом. Он называется **методом середины квадратов** и заключается в следующем. Пусть дано какое-либо число с четырьмя цифрами после запятой, например, $g_0 = 0.9876$. Его квадрат будет числом с восемью знаками после запятой $g_0^2 = 0.97535376$. Выберем четыре средние цифры этого числа и положим $g_1 = 0.5353$. Возведем его также в квадрат, $g_1^2 = 0.28654609$, и снова извлечем четыре средние цифры: $g_2 = 0.6546$, и т.д. Этот алгоритм, к сожалению, приводил к большому количеству малых значений и не давал истинного равномерного распределения.

В общем случае процесс генерации случайных чисел ξ можно описать формулой

$$\xi_{n+1} = F(\xi_n), \quad (11.4)$$

где F – некоторый алгоритм, заложенный в данном генераторе. Можно показать, что последовательность (11.4) обязательно периодическая, если компьютер обрабатывает числа с определенным **конечным** числом значащих цифр после запятой, но период так велик, что превосходит все практические потребности.

В данной главе будут рассмотрены некоторые важные распределения случайных величин, а также предложены эффективные алгоритмы и методы, позволяющие без лишних временных затрат получать требуемые распределения на основе равномерного распределения, генерируемого встроенным датчиком случайных чисел.

11.1.1. Метод обратной функции и метод фон Неймана

При решении различных задач возникает потребность получать случайные величины, распределенные по различным законам, при помощи генератора случайных чисел, равномерно распределенных на интервале $(0,1)$. В этом разделе будут рассмотрены два достаточно общих метода получения нужных распределений: метод обратной функции и метод фон Неймана.

Пусть необходимо, чтобы случайная величина ξ , определенная на интервале (a,b) , принимала значение, меньшее или равное x , с вероятностью $P(x)$. Тогда функция

$$F(x) = P\{\xi \leq x\} \quad (11.5)$$

называется **функцией распределения** случайной величины ξ и всегда монотонно увеличивается от 0 до 1:

$$\begin{aligned} F(x_1) \leq F(x_2), \text{ если } x_1 \leq x_2; \\ F(a) = 0; F(b) = 1. \end{aligned} \quad (11.6)$$

Плотность распределения $f(x)$ случайной величины ξ определяется следующим образом:

$$F(x) = \int_a^x f(t)dt, \quad (11.7)$$

где верхний предел интегрирования меняется в области определения (a,b) .

Пусть существует обратная функция $F^{-1}(y)$, такая, что если $0 < y < 1$, то $y = F(x)$ тогда и только тогда, когда $x = F^{-1}(y)$. Тогда для нахождения искомого распределения следует положить

$$\xi = F^{-1}(R), \quad (11.8)$$

где R – случайная величина, равномерно распределенная на $(0,1)$.

Действительно,

$$P\{\xi \leq x\} = P\{F^{-1}(R) \leq x\} = P\{R \leq F(x)\} = F(x). \quad (11.9)$$

На практике метод обратной функции применяется следующим образом. Пусть нужно получить значения случайной величины ξ , распределенной с плотностью $p(x)$ на интервале (a,b) . Докажем, что значения ξ можно находить из уравнения

$$\int_a^{\xi} p(x) dx = R, \quad (11.10)$$

где R – случайная величина, равномерно распределенная на $(0,1)$.

Рассмотрим функцию

$$y(x) = \int_a^x p(t) dt, \quad (11.11)$$

при этом из свойств плотности распределения имеем:

$$\begin{aligned} y(a) &= 0; \quad y(b) = 1; \\ y'(x) &= p(x) > 0. \end{aligned} \quad (11.12)$$

Таким образом, функция $y(x)$ монотонно возрастает от 0 до 1, и любая прямая $y=R$, где $0 < R < 1$, пересекает график функции $y=y(x)$ в одной единственной точке, абсцисса которой, как станет ясно из дальнейшего, и есть искомое число ξ (рис. 11.1). Таким образом, единственность решения доказана.

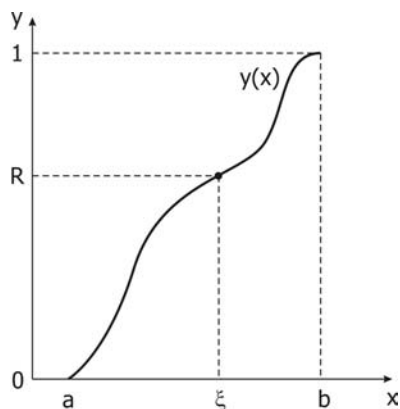


Рис. 11.1. Прямая $y=R$ пересекает график функции $y=y(x)$ в единственной точке

Далее выберем произвольный интервал (a', b') внутри интервала (a, b) . Точкам этого интервала $a' < x < b'$ отвечают ординаты кривой $y(a') < y < y(b')$. Если $\xi \in (a', b')$, то $R \in (y(a'), y(b'))$, и наоборот (рис. 11.2), а значит, вероятности этих событий равны:

$$P\{a' < \xi < b'\} = P\{y(a') < R < y(b')\}. \quad (11.13)$$

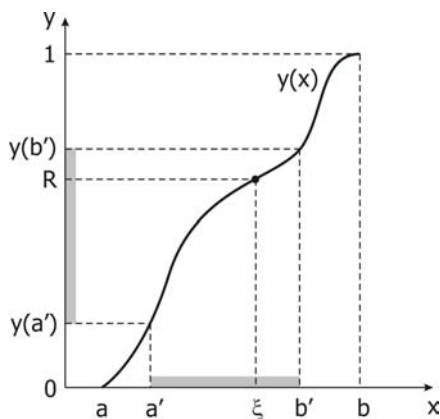


Рис. 11.2. Если $\xi \in (a', b')$, то $R \in (y(a'), y(b'))$, и наоборот, а значит, вероятности этих событий равны

Так как R равномерно распределено на $(0,1)$, то

$$P\{y(a') < R < y(b')\} = y(b') - y(a') = \int_{a'}^{b'} p(x) dx. \quad (11.14)$$

Следовательно,

$$P\{a' < \xi < b'\} = \int_{a'}^{b'} p(x) dx, \quad (11.15)$$

что и означает: величина ξ имеет плотность распределения $p(x)$.

Таким образом, согласно (11.8), для нахождения необходимого распределения следует искать обратную функцию $F^{-1}(x)$.

Рассмотрим далее простой пример.

Пусть необходимо получить величину ξ , равномерно распределенную на интервале (a,b) . Нормированная плотность распределения ξ имеет вид

$$p(x) = \frac{1}{(b-a)}. \quad (11.16)$$

Тогда, согласно методу обратной функции,

$$\int_a^{\xi} \frac{dx}{(b-a)} = R. \quad (11.17)$$

Отсюда находим

$$\xi = a + R(b-a), \quad (11.18)$$

т.е. в данном случае следует всего лишь сдвинуть отсчет и изменить масштаб исходной случайной величины R .

Рассмотрим теперь **экспоненциальное** распределение. Случайные величины, имеющие экспоненциальное распределение, встречаются, например, в задачах о радиоактивном распаде.

Пусть необходимо получить случайную величину, распределенную на $(0, \infty)$ с функцией распределения

$$F(x) = 1 - e^{-x} \quad (11.19)$$

и, соответственно, с плотностью распределения

$$f(x) = e^{-x}. \quad (11.20)$$

Применяя метод обратной функции, находим

$$y = F(x) = 1 - e^{-x}; \quad (11.21)$$

$$x = F^{-1}(y) = -\ln(1 - y).$$

Таким образом, случайная величина

$$\xi = -\ln(1 - R) \quad (11.22)$$

будет иметь экспоненциальное распределение (рис. 11.3).

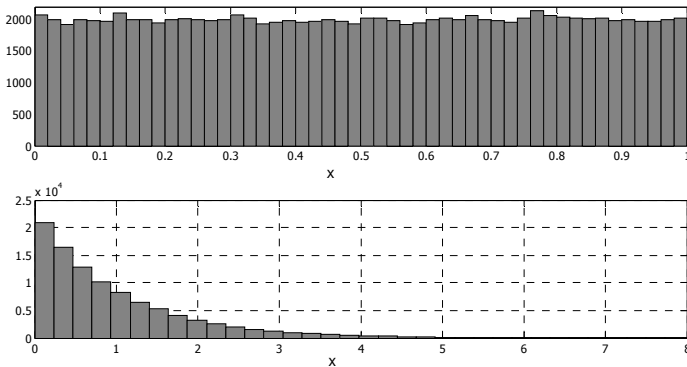


Рис. 11.3. Гистограмма экспоненциально распределенных случайных величин (внизу) получена из равномерного распределения (вверху) методом обратной функции (4.22). По вертикальной оси отложено число точек распределения, попадающих в соответствующий интервал гистограммы, общее число точек равно 100000

Одним из важных распределений случайных величин в физике является **распределение Пуассона**, характеризующее число реализаций в единицу времени событий, каждое из которых может произойти в любой момент. Например, процесс альфа-распада описывается распределением Пуассона.

Дискретная случайная величина ξ имеет закон распределения Пуассона с параметром μ , если она принимает значения $0, 1, 2, \dots, m, \dots$ с вероятностью

$$P\{\xi = m\} = \frac{\mu^m e^{-\mu}}{m!}, \quad (11.23)$$

при этом математическое ожидание (среднее значение) и дисперсия ξ совпадают и равны μ :

$$\begin{aligned} M(\xi) &= \langle \xi \rangle = \mu; \\ D(\xi) &= \mu. \end{aligned} \quad (11.24)$$

Следующий алгоритм позволяет получать случайные величины, распределенные по закону Пуассона, используя равномерно распределенные случайные величины:

- 1) рассчитывается число $p = e^{-\mu}$; задаются числа $N = 0$ и $q = 1$;
- 2) генерируется число R , равномерно распределенное на $(0,1)$;
- 3) производится перенормировка $q \rightarrow qR$;
- 4) если $q \geq p$, то значение N увеличивается на единицу: $N \rightarrow N + 1$, и возвращаемся к пункту 2;
- 5) если $q < p$, то число $\xi = N$ имеет закон распределения Пуассона.

Блок-схема алгоритма показана на рис. 11.4.

На рис. 11.5 показана гистограмма случайных величин, имеющих распределение Пуассона с параметром $\mu = 3.5$, полученных при помощи алгоритма на рис. 11.4.

Правильность алгоритма основывается на следующем факте, известном из теории вероятностей [2]: пусть имеется ряд случайных чисел $R_1, R_2, \dots, R_n, R_{n+1}, \dots$, равномерно распределенных на $(0,1)$. Тогда

$$\begin{aligned} P\{(R_1 > q) \cap (R_1 R_2 \geq q) \cap \dots \cap (R_1 R_2 \dots R_n \geq q) \cap (R_1 R_2 \dots R_n R_{n+1} < q)\} = \\ = \frac{q \left(\ln \frac{1}{q} \right)^n}{n!}, \quad 0 < q \leq 1. \end{aligned} \quad (11.25)$$

Производя замену

$$q = e^{-\mu}, \quad (11.26)$$

получаем требуемое распределение.



Рис. 11.4. Блок-схема алгоритма получения случайных чисел, распределенных по закону Пуассона

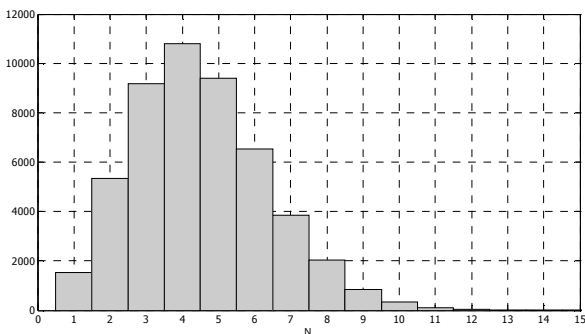


Рис. 11.5. Гистограмма случайных величин, имеющих распределение Пуассона с параметром $\mu = 3.5$, общее число точек равно 50000

Однако интеграл (11.10) не всегда можно взять аналитически. Дж. фон Нейман предложил следующий способ обойти эту проблему.

Предположим, что случайная величина ξ определена на интервале (a,b) , и ее плотность распределения ограничена:

$$p(x) \leq M_0. \quad (11.27)$$

Тогда генерируются два случайных числа R_1, R_2 , равномерно распределенные на $(0,1)$, и строится точка на плоскости с координатами (x_1, x_2) , где $x_1 = a + R_1(b - a)$, $x_2 = R_2 M_0$. Если эта точка лежит ниже кривой $y=p(x)$, т.е. $x_2 < p(x_1)$ (точка А на рис. 11.6), то искомое число $\xi = x_1$ найдено; если же точка лежит выше кривой (точка В на рис. 11.6), то пара R_1, R_2 отбрасывается и выбирается новая пара.

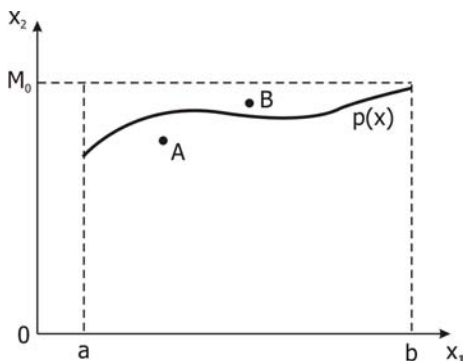


Рис. 11.6. Метод фон Неймана генерации случайных чисел с плотностью распределения $p(x)$

Метод фон Неймана является достаточно универсальным, однако для частных случаев существуют более эффективные алгоритмы. Рассмотрим далее некоторые из них.

Необходимо отметить еще один, достаточно универсальный метод получения случайных чисел ξ , определенных на интервале (a,b) ,

с заданной плотностью распределения $f(x)$. Для этого достаточно просто разрешить уравнение

$$\int_a^{\xi} f(x)dx = R \quad (11.28)$$

относительно ξ , где R – равномерно распределенная на единичном отрезке случайная величина. Даже если интеграл (11.10) нельзя взять аналитически, его всегда можно рассчитать численно на компьютере при помощи одного из методов численного решения трансцендентных уравнений (например, методом деления отрезка пополам, методом Ньютона или методом простых итераций). Дело в том, что интеграл в (11.10) как функция ξ – монотонная величина, так что всегда существует единственное решение (11.10).

Расчет интеграла, однако, может оказаться слишком дорогой процедурой по времени, так что этим методом генерации случайных величин следует пользоваться при отсутствии других, более быстрых, возможностей.

11.1.2. Нормальное распределение

Нормальный закон распределения случайных величин, часто также называемый **законом Гаусса**, играет исключительно важную роль в физике и занимает среди других законов распределения особое положение.

Главная особенность, выделяющая нормальный закон среди других законов распределения, состоит в том, что он является предельным законом, к которому приближаются другие законы распределения при достаточно часто встречающихся типичных условиях.

Можно доказать, что сумма достаточно большого числа независимых (или слабо зависимых) случайных величин, подчиненных каким угодно законам распределения (при соблюдении некоторых весьма нежестких ограничений), приближенно подчиняется нормальному закону [2].

Случайные величины, распределенные по нормальному закону

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-t^2/2} dt, \quad (11.29)$$

могут быть получены при помощи следующего алгоритма:

- 1) генерируются два независимых случайных числа R_1 и R_2 , равномерно распределенные на $(0,1)$;
- 2) рассчитываются числа $V_1 = 2R_1 - 1$ и $V_2 = 2R_2 - 1$, они будут равномерно распределены на интервале $(-1,1)$;
- 3) рассчитывается число $S = V_1^2 + V_2^2$;
- 4) если $S \geq 1$, то возвращаемся к пункту 1;
- 5) если $S < 1$, то рассчитываются числа $\xi_1 = V_1 \sqrt{\frac{-2 \ln S}{S}}$,

$\xi_2 = V_2 \sqrt{\frac{-2 \ln S}{S}}$, которые будут распределены по нормальному закону.

Блок-схема алгоритма показана на рис. 11.7.

Докажем, что представленный алгоритм действительно дает правильный ответ.

Пусть $S < 1$, тогда точка плоскости с декартовыми координатами (V_1, V_2) является случайной точкой, равномерно распределенной внутри единичного круга. Перейдем к полярным координатам

$$\begin{aligned} V_1 &= r \cos \theta; \\ V_2 &= r \sin \theta, \end{aligned} \quad (11.30)$$

тогда

$$\begin{aligned} S &= V_1^2 + V_2^2 = r^2; \\ \xi_1 &= V_1 \sqrt{\frac{-2 \ln S}{S}} = \sqrt{-2 \ln S} \cos \theta; \\ \xi_2 &= V_2 \sqrt{\frac{-2 \ln S}{S}} = \sqrt{-2 \ln S} \sin \theta. \end{aligned} \quad (11.31)$$

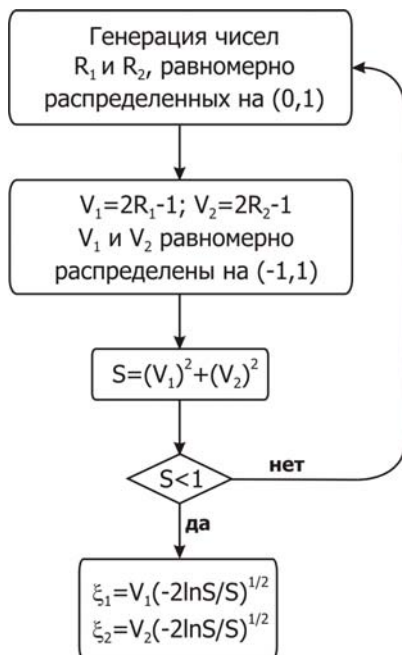


Рис. 11.7. Блок-схема алгоритма получения нормально распределенных случайных чисел

Введем новые полярные координаты

$$\theta' = \theta;$$

$$r' = \sqrt{-2 \ln S}, \quad (11.32)$$

тогда

$$\xi_1 = r' \cos \theta'; \quad (11.33)$$

$$\xi_2 = r' \sin \theta'.$$

Величина θ' равномерно распределена на интервале $(0, 2\pi)$, а вероятность того, что $r' \leq r$, равна

$$\begin{aligned} P\{r' \leq r\} &= P\{\sqrt{-2 \ln S} \leq r\} = P\{-2 \ln S \leq r^2\} = \\ &= P\{2 \ln S \geq -r^2\} = P\{S \geq e^{-r^2/2}\} = 1 - e^{-r^2/2}, \end{aligned} \quad (11.34)$$

так как $S = r^2$ равномерно распределено на $(0, 1)$. Тогда дифференциальная вероятность (или плотность распределения)

того, что r' лежит между r и $r+dr$, равна производной от вероятности, т.е.

$$P\{r' \in (r, r + dr)\} = \frac{d}{dr} (1 - e^{-r^2/2}) = re^{-r^2/2} dr. \quad (11.35)$$

Вероятность попадания θ' в интервал $(\theta, \theta + d\theta)$ равна

$$P\{\theta' \in (\theta, \theta + d\theta)\} = \frac{d\theta}{2\pi}. \quad (11.36)$$

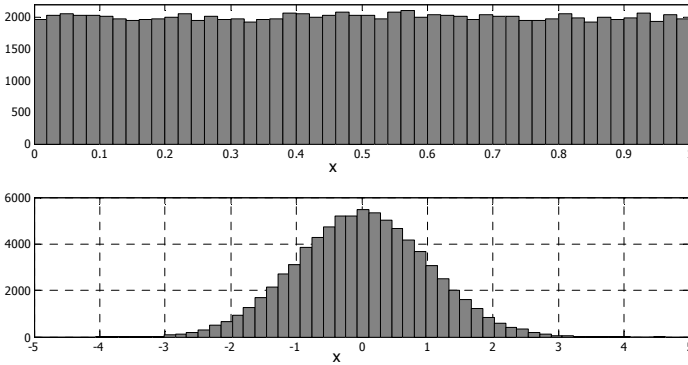


Рис. 11.8. Гистограмма нормально распределенных случайных величин (внизу) получена из равномерного распределения (вверху) при помощи алгоритма, изображенного на рис. 11.7. По вертикальной оси отложено число точек распределения, попадающих в соответствующий интервал гистограммы, общее число точек равно 100000

В итоге вероятность того, что $\xi_1 \leq x_1$ и $\xi_2 \leq x_2$, равна

$$P\{(\xi_1 \leq x_1) \cap (\xi_2 \leq x_2)\} = \frac{1}{2\pi} \int_{\substack{r \cos \theta \leq x_1 \\ r \sin \theta \leq x_2}} d\theta dr e^{-r^2/2} = \quad (11.37)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{\substack{x \leq x_1 \\ y \leq x_2}} dx dy e^{-(x^2+y^2)/2} = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x_1} dx e^{-x^2/2} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x_2} dy e^{-y^2/2} \right),$$

что и доказывает справедливость алгоритма.

На рис. 11.8 показана гистограмма нормально распределенных случайных величин, полученная из равномерного распределения при помощи алгоритма, изображенного на рис. 11.7.

11.1.3. Почти линейная плотность распределения

Пусть требуется получить случайную величину с плотностью распределения $f(x)$, удовлетворяющей следующему условию:

$$\begin{aligned} f(x) &= 0, \text{ если } x < s \text{ или } x > s+h; \\ a - \frac{b(x-s)}{h} &\leq f(x) \leq b - \frac{b(x-s)}{h}, \text{ если } s \leq x \leq s+h. \end{aligned} \quad (11.38)$$

Плотность распределения (11.38) называется **почти линейной**, условию (11.38) удовлетворяет целый класс монотонных функций,

заключенных в области между прямыми $y = a - b \frac{x-s}{h}$ и

$y = b - b \frac{x-s}{h}$ (рис. 11.9).

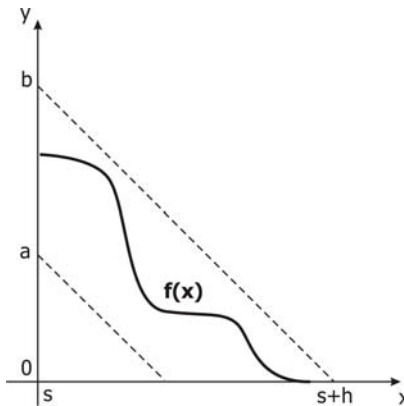


Рис. 11.9. Функция $f(x)$ описывает почти линейную плотность распределения случайной величины

Следующий алгоритм позволяет получить случайные величины с почти линейной плотностью распределения:

- 1) генерируются два случайных числа R_1 и R_2 , равномерно распределенные на $(0,1)$, при этом $R_1 \leq R_2$ (если это не так, то R_1 и R_2 меняются местами);

- 2) если $R_2 \leq \frac{a}{b}$, то переходим к пункту 4;
- 3) если $R_2 > R_1 + \frac{f(s + hR_1)}{b}$, то возвращаемся к пункту 1;
- 4) если $R_2 \leq R_1 + \frac{f(s + hR_1)}{b}$, то рассчитывается число $\xi = s + hR_1$, которое будет распределено с почти линейной плотностью.

Блок-схема алгоритма показана на рис. 11.10.

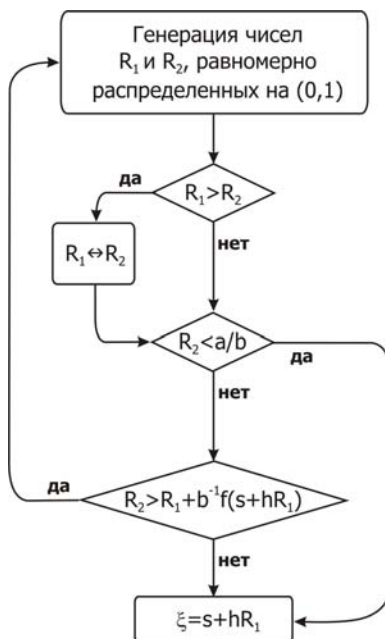


Рис. 11.10. Блок-схема алгоритма получения случайных чисел с почти линейной плотностью распределения

Прежде всего, заметим, что пункт 2 в алгоритме позволяет существенно увеличить скорость всего алгоритма, так как число a/b рассчитывается на компьютере намного быстрее, чем сложная функция $y(R_1) = R_1 + \frac{f(s + hR_1)}{b}$, а разница между этими значениями, как правило, невелика (рис. 11.11).

Докажем справедливость алгоритма.

При переходе к шагу 4 алгоритма имеем, что точка с координатами (R_1, R_2) – это случайная точка в закрашенной области на рис. 11.11, при этом

$$0 \leq R_1 \leq R_2 \leq R_1 + \frac{1}{b} f(s + hR_1), \quad (11.39)$$

а из условия (11.38) имеем

$$\frac{a}{b} \leq \frac{(x-s)}{h} + \frac{f(x)}{b} \leq 1, \quad (11.40)$$

или, учитывая, что

$$x = s + hR_1, \quad (11.41)$$

получаем

$$\frac{a}{b} \leq R_1 + f(s + hR_1) \leq 1. \quad (11.42)$$

Вероятность того, что $\xi \leq s + hR_1$ при $0 \leq R_1 \leq 1$, равна отношению площади слева от вертикальной линии ко всей закрашенной площади, т.е.

$$P\{\xi \leq s + hR_1\} = \frac{\int_0^x b^{-1} f(s + hR_1) dR_1}{\int_0^1 b^{-1} f(s + hR_1) dR_1} =$$

$$= \frac{\int_s^{s+hx} f(u) du}{\int_s^{s+h} f(u) du} = A \int_s^{s+hx} f(u) du,$$

где A – константа, соответствующей нормировкой можно добиться, чтобы $A = 1$.

Из (11.43) следует, что случайная величина ξ имеет почти линейную плотность распределения (11.38).

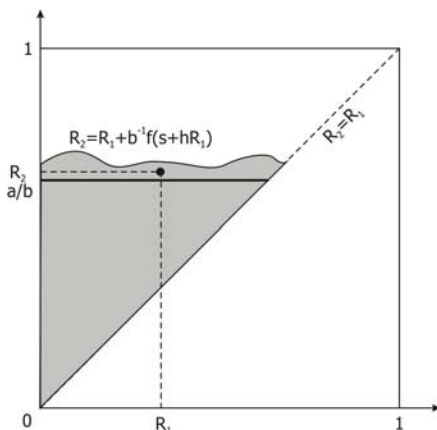


Рис. 11.11. Все точки (x, y) , попадающие в закрашенную область, имеют почти линейную плотность распределения

На рис. 11.12 показан пример генерации случайных величин с почти линейным законом распределения, определяемым функцией распределения

$$f(x) = \begin{cases} (e^{-x^2-x^4} - \pi^{-3})/0.488, & \text{если } 0.8 \leq x < 1.192; \\ 0, & \text{если } 1.192 \leq x \leq 1.25. \end{cases} \quad (11.44)$$

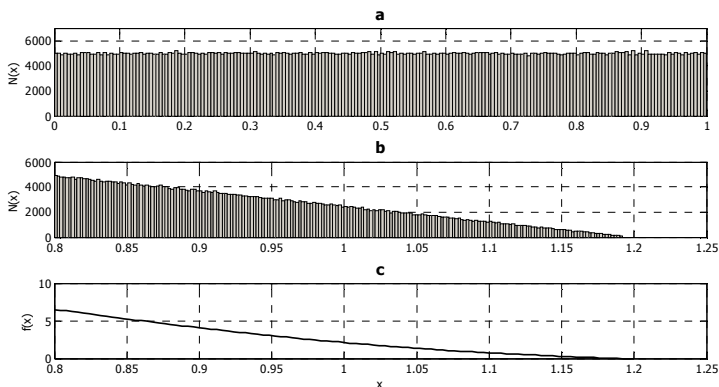


Рис. 11.12. Случайные величины, имеющие почти линейный закон распределения

Функция распределения $f(x)$ показана в окне **с**, в окне **а** дана исходная гистограмма равномерно распределенных случайных величин, в окне **б** – гистограмма случайных величин с почти

линейной плотностью распределения, полученных при помощи алгоритма на рис. 11.10.

11.1.4. Двумерные распределения

В этом разделе мы кратко коснемся вопросов, связанных с **двумерными распределениями**.

Совокупность двух случайных величин (X, Y) рассматриваемых совместно называется **системой случайных величин**. Система двух случайных величин (X, Y) геометрически интерпретируется как случайная точка с этими координатами на плоскости x, y .

Функцией распределения $F(x, y)$ системы двух случайных величин (X, Y) называется вероятность совместного выполнения двух неравенств $X < x, Y < y$:

$$F(x, y) = P\{(X < x) \cap (Y < y)\}. \quad (11.45)$$

Геометрически $F(x, y)$ интерпретируется как вероятность попадания случайной точки (X, Y) в закрашенную область на рис. 11.13, ограниченную снизу и слева только областью определения случайных величин X и Y .

Плотность распределения системы двух случайных величин находится как

$$f(x, y) = \frac{\partial^2 F(x, y)}{\partial x \partial y}. \quad (11.46)$$

Функция распределения системы случайных величин, связанных функциональной зависимостью $z = g(X, Y)$, определяется формулой

$$G(z) = \iint_{D(z)} f(x, y) dx dy, \quad (11.47)$$

где $D(z)$ – область на плоскости x, y , для которой $g(x, y) < z$.

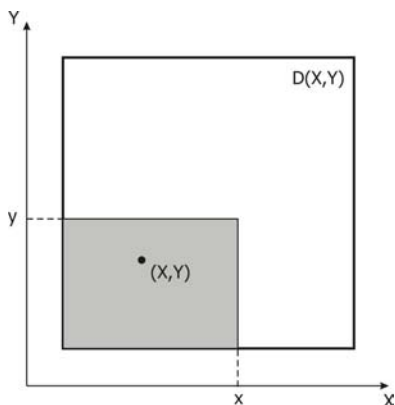


Рис. 11.13. Геометрическая интерпретация функции распределения системы двух случайных величин. $D(X,Y)$ – область определения случайных величин X и Y

Рассмотрим конкретный пример. Пусть необходимо получить систему случайных величин x и y с плотностью распределения

$$f(x, y) \sim e^{x-y}, \quad (11.48)$$

причем

$$0 \leq x < y \leq 1. \quad (11.49)$$

Поступим следующим образом. Сгенерируем сначала случайную величину $y - x$. Имеем функциональную зависимость

$$z = y - x, \quad (11.50)$$

и область $D(z)$ определяется условием

$$D(z): y - x < z. \quad (11.51)$$

На плоскости xu в единичном квадрате область $D(z)$ ограничена снизу прямой $y=x$, а сверху – прямой $y=x+z$ (рис. 11.14). Функция распределения случайной величины z имеет вид

$$G(z) \sim \int_0^{1-z} dx \int_x^{x+z} dy e^{x-y} + \int_{1-z}^1 dx \int_x^1 dy e^{x-y} = ze^{-z}, \quad (11.52)$$

после нормировки имеем

$$G(z) = ze^{-z}. \quad (11.53)$$

Таким образом, согласно методу обратной функции, для нахождения z следует решить трансцендентное уравнение

$$ze^{1-z} = R_1, \quad (11.54)$$

где R_1 – случайное число, равномерно распределенное на $(0,1)$.
Уравнение (11.54) имеет единственный корень и наиболее эффективно решается численно методом деления отрезка пополам.

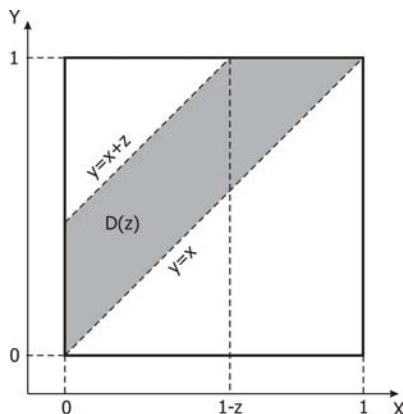


Рис. 11.14. Область интегрирования $D(z)$ ограничена прямыми $y=x$ и $y=x+z$

Теперь, имея случайную величину z с законом распределения (11.53), найдем закон распределения случайной величины x при заданном z . Имеем:

$$f(x)_{|z=y-x} = \int_0^x dx \int_0^1 dy e^{-z} \sim \int_0^x dx, \quad (11.55)$$

т.е. случайная величина x распределена равномерно на интервале $(0, 1-z)$, так как, по условию задачи, $x < y$.

Таким образом,

$$\begin{aligned} x &= R_2(1-z); \\ y &= z + x = z + R_2(1-z), \end{aligned} \quad (11.56)$$

R_2 – случайное число, равномерно распределенное на $(0,1)$.

На рис. 11.15 показана гистограмма этого распределения, полученная генерацией 50000 случайных чисел.

Следует отметить, что вдоль линий $y - x = \text{const}$ распределение, с точностью до статистического разброса, является равномерным, в соответствии с (11.55).

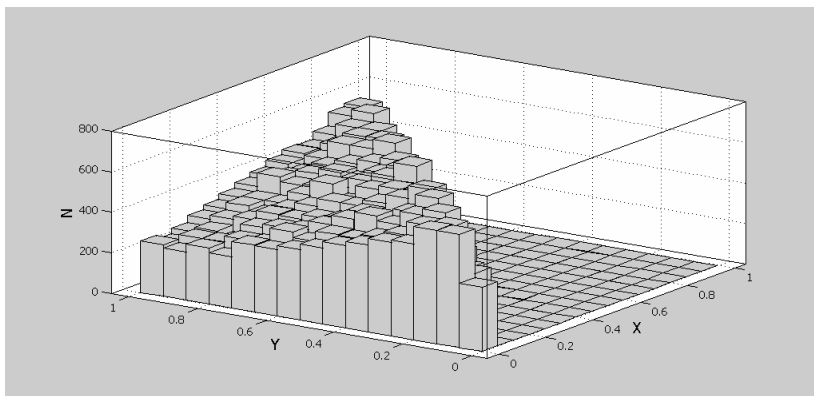


Рис. 11.15. Гистограмма системы двух случайных величин, имеющих плотность распределения (4.42) с условием (4.43). Общее число точек 50000

В заключение раздела отметим, что и для генерации двумерных распределений случайных величин справедлив метод фон Неймана.

11.2. Случайные величины и центральная предельная теорема. Общая схема метода Монте-Карло

При исследовании **взаимодействующих** систем расчет термодинамических средних вида (9.1) при достаточно большом размере системы не представляется возможным из-за огромного числа слагаемых в сумме. В этом случае метод точной диагонализации неприменим, и эффективным методом численного расчета является метод Монте-Карло. Он позволяет даже в случае макроскопически большого числа степеней свободы получить асимптотически точные результаты для термодинамических характеристик системы. Создателями этого метода считаются Дж. Нейман и С. Улам (1949 г.) (см. [42]).

Методы стохастического моделирования, такие как метод Монте-Карло, используются как для физических задач, так и для решения сложных математических проблем, где другие аналитические и приближенные подходы не работают.

Самый простейший пример использования стохастического моделирования – **вычисление площади сложной плоской фигуры** S . Поместим фигуру S внутрь единичного квадрата (рис. 11.16). Выберем внутри квадрата N случайных точек (координаты точек можно выбирать с помощью датчика равномерно распределенных случайных чисел). Обозначим через N' число точек, попавших при этом внутрь S . Тогда площадь S будет приближенно равна

$$S \approx \frac{N'}{N}, \quad (11.57)$$

причем равенство улучшается с увеличением N .

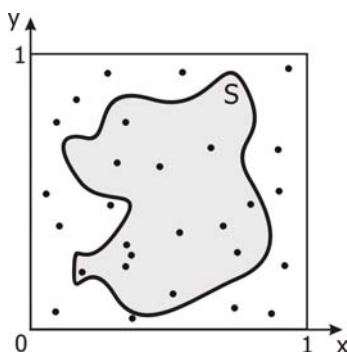


Рис. 11.16. Вычисление площади плоской фигуры методом Монте-Карло

Аналогично можно сформулировать задачу расчета объема сложной формы, применяя предыдущую процедуру, а также объема произвольной многомерной замкнутой структуры.

Несомненное преимущество такого непосредственного использования метода Монте-Карло – простая структура вычислительного алгоритма. Необходим лишь хороший датчик случайных чисел. Однако для достижения необходимой точности

следует провести достаточно много итераций, так как ошибка расчета уменьшается в среднем как $1/\sqrt{N}$. Для более эффективной сходимости задачу следует решать при помощи модифицированных алгоритмов Монте-Карло и использовать различные функции распределения случайных величин, учитывающие особенности каждой конкретной рассматриваемой задачи.

Еще один наглядный пример уже физической задачи – **моделирование броуновского движения** в замкнутом объеме. Разместим случайным образом N частиц в объеме V трехмерного пространства с декартовой системой координат. Будем полагать частицы идеальными, не взаимодействующими. Моделирование заключается в следующем: выбирается случайным образом частица, а затем, также случайным образом, выбираются ее новые координаты в некоторой окрестности ее исходного расположения, и частица перемещается в новое положение в пространстве. Взаимодействие частиц с границами объема будем полагать упругим, т.е. частицы будут отражаться от границ. Поведение частиц через некоторое время после начала моделирования становится хаотическим, и можно рассчитать, например, что давление частиц P (среднее число частиц, проходящее в единицу счетного времени через любую поверхность одинаковой площади внутри или на границе выделенного объема) одинаково по всем направлениям, обратно пропорционально величине объема V и прямо пропорционально количеству частиц N , что соответствует уравнению состояния идеального газа $PV \sim N$.

В расчет можно ввести также понятие температуры, величина которой пропорциональна линейному размеру, на который разрешается в алгоритме передвигать частицу за одно перемещение, это отражает тот факт, что кинетическая энергия частицы пропорциональна температуре. Тогда, соответственно, будет справедливо соотношение $PV \sim NT$.

Достаточно простому моделированию поддается и **задача перколяции** или протекания. Рассмотрим квадратную решетку размером $L \times L$. При помощи датчика случайных чисел будем располагать частицы в узлах решетки с заданной вероятностью $0 < p < 1$. Совокупность частиц, расположенных наиболее близко

друг к другу на соседних узлах и отделенных от других частиц по крайней мере первой координационной сферой (рис. 11.17), называется **кластером**. В системе может существовать кластер, который свяжет слева направо или снизу вверх всю систему – **стягивающий кластер** (рис. 11.18). Это означает, что в системе достигнут предел перколяции.

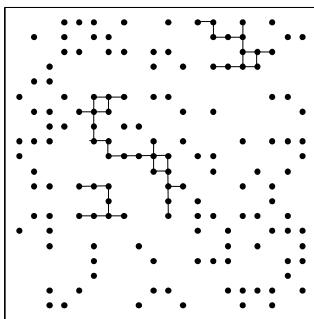


Рис. 11.17. Кластеры частиц в задаче перколяции

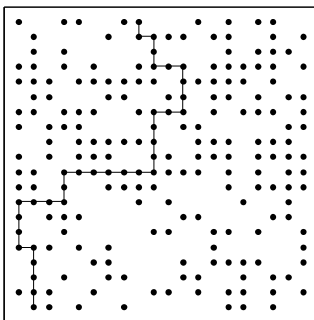


Рис. 11.18. Пример стягивающего кластера.
В системе возможно протекание снизу вверх

Вероятность появления стягивающего кластера связана с параметром задачи – вероятностью p : для данного линейного размера решетки L при $p < p_c(L)$ на решетке существуют только конечные кластеры, а при $p \geq p_c(L)$ появляется стягивающий

кластер. Задача заключается в определении порога перколяции для бесконечной решетки, т.е. в определении $p_c(L \rightarrow \infty)$.

Моделирование этой задачи происходит таким образом: сначала обнуляется заполнение всех узлов. Затем сканируется каждый узел квадратной решетки, и датчиком случайных чисел для каждого узла решетки создается случайное число $0 < R < 1$. Если $R < p$, узел заполняется частицей, если $R \geq p$, узел остается пустым.

Просканировав всю решетку, создаем конкретную **конфигурацию** расположения частиц и определяем, есть ли в системе стягивающий кластер. Если он существует, конфигурация считается успешной и ей присваивается индекс "1", если же нет, то конфигурации присваивается индекс "0". Далее обнуляем заполнение решетки и повторяем всю процедуру заново. После генерации достаточно большого числа конфигураций рассчитывается вероятность появления стягивающего кластера $p_\infty(L, p)$ как отношение числа успешных конфигураций к числу всех реализаций. Меняя параметр p , повторяем процедуру. Действуя таким образом, можно получить зависимость $p_\infty(L) = f(p)$. При определенном значении $p = p_c(L)$ вероятность появления стягивающего кластера будет равна 1: $p_\infty(L) \xrightarrow{p=p_c(L)} 1$. Далее увеличиваем размер системы L и повторяем расчет, находя $p_c(L)$; порог перколяции в бесконечной системе определяется исходя из асимптотической зависимости p_c от размера системы.

Заметим, что задача о перколяции тесно связана с моделированием протекания тока в реальных физических системах, с моделированием систем джозефсоновских контактов в сверхпроводниках и с другими физическими задачами.

Приведенные выше примеры достаточно просты, так что их напрямую можно использовать для стохастического моделирования. В реальных системах из-за межчастичного взаимодействия, внешних полей, неоднородности пространства для эффективности алгоритма моделирование должно проводиться с учетом всех этих факторов, и использование методов Монте-Карло становится специфичным для каждой конкретной задачи.

Прежде чем подробнее познакомиться с подходом Монте-Карло для физических систем, рассмотрим сначала математическое обоснование этого метода, а также его применение для решения обычных математических задач.

Рассмотрим математический аспект проблемы стохастического моделирования методом Монте-Карло. Случайные величины уже рассматривались в разд. 11.1, там же приводились примеры алгоритмов для генерации случайных величин с различными законами распределения. В этом разделе приведены важные положения теории вероятностей [2, 42], необходимые в дальнейшем для организации алгоритмов Монте-Карло.

Рассмотрим случайную величину ξ , распределенную с плотностью вероятности $p(x)$ на интервале (a, b) . Соответственно, вероятность того, что величина ξ попадет в интервал (a', b') , содержащийся в (a, b) , будет равна

$$P\{a' < \xi < b'\} = \int_a^{b'} p(x) dx. \quad (11.58)$$

Предполагается, что должны быть выполнены два условия: положительность функции $p(x)$, а также нормировка функции $p(x)$

на единицу: $\int_a^b p(x) dx = 1$.

Математическим ожиданием случайной величины называется число

$$M\xi = \int_a^b x p(x) dx, \quad (11.59)$$

т.е., фактически, среднее значение ξ .

Сразу отметим важное свойство математического ожидания. Выберем произвольную непрерывную функцию $f(x)$ и рассмотрим случайную величину $\eta = f(\xi)$. Можно доказать, что

$$M\eta = Mf(\xi) = \int_a^b f(x)p(x) dx . \quad (11.60)$$

Дисперсией случайной величины называется число

$$D\xi = M(\xi - M\xi)^2 = \int_a^b x^2 p(x) dx - (M\xi)^2 . \quad (11.61)$$

Из (11.61) видно, что дисперсия – это математическое ожидание квадрата отклонения случайной величины от ее среднего значения. Например, для случайной величины, равномерно распределенной на интервале (0,1), $M\xi = 1/2$, $D\xi = 1/12$.

Если имеются две статистически независимые случайные величины ξ и η , то математическое ожидание и дисперсия являются аддитивными функциями:

$$\begin{aligned} M(\xi + \eta) &= M\xi + M\eta; \\ D(\xi + \eta) &= D\xi + D\eta. \end{aligned} \quad (11.62)$$

Для нормального распределения (распределения Гаусса), которое рассматривалось в разд. 11.1.2, с функцией распределения

$$p(\xi) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\xi-a)^2}{2\sigma^2}} \quad (11.63)$$

(рис. 11.19) математическое ожидание и дисперсия равны

$$\begin{aligned} M\xi &= a; \\ D\xi &= \sigma^2. \end{aligned} \quad (11.64)$$

Любые вероятности нормально распределенной величины вычисляются с помощью **интеграла вероятностей** (или **интеграла ошибок**)

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^x e^{-t^2/2} dt . \quad (11.65)$$

С помощью преобразования интегралов несложно показать, что

$$P\{x' < \xi < x''\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{t_1}^{t_2} e^{-t^2/2} dt = \frac{1}{2}(\Phi(t_2) - \Phi(t_1)); \quad (11.66)$$

$$t_1 = \frac{x' - a}{\sigma}; \quad t_2 = \frac{x'' - a}{\sigma}.$$

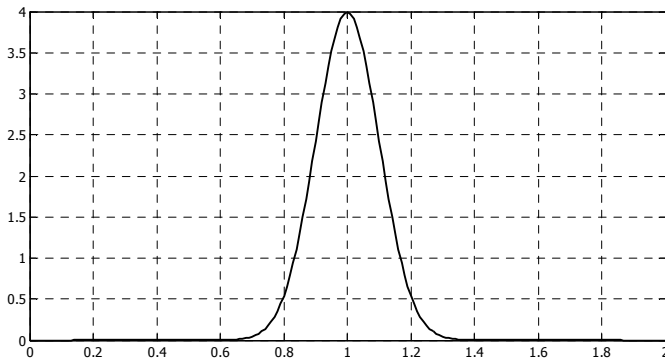


Рис. 11.19. Распределение Гаусса для параметров $a = 1$; $\sigma = 0.1$

Нормальное распределение играет чрезвычайно важное значение для стохастических численных методов. Нормальные случайные распределения очень часто встречаются при исследовании самых различных систем, как чисто математических, так и физических.

Приведем важное свойство нормального распределения – «**правило трех σ** ». Если выбрать $x' = a - 3\sigma$; $x'' = a + 3\sigma$, то, согласно (11.66), $t_1 = -3$, $t_2 = 3$. Отсюда находим

$$P\{a - 3\sigma < \xi < a + 3\sigma\} = \Phi(3) = 0.997 \cong 1. \quad (11.67)$$

Последняя формула интерпретируется так: при одном испытании практически невозможно получить значение ξ , отличающееся от $M\xi$ больше, чем на 3σ .

На практике в качестве погрешности часто выбирают не 3σ , а другую величину – так называемую **вероятную ошибку**. Если рассмотреть величину $r = 0.6745\sigma$, то

$$P\{a - r < \xi < a + r\} = \Phi(0.6745) = 0.5. \quad (11.68)$$

Переформулируем (11.68) по-другому:

$$P\{|\xi - a| < r\} = 0.5, \quad (11.69)$$

но тогда и

$$P\{|\xi - a| > r\} = 1 - P\{|\xi - a| < r\} = 0.5. \quad (11.70)$$

Значит, для случайной величины ξ вероятность отклониться от своего среднего значения больше чем на r , и меньше чем на r , одинакова.

Рассмотрим теперь очень важную для дальнейшего описания методов Монте-Карло **центральную предельную теорему теории вероятностей**. Эта замечательная теорема впервые была сформулирована П. Лапласом и обобщена позднее П.Л. Чебышевым, А.А. Марковым, А.М. Ляпуновым. Доказательство ее достаточно сложно и выходит за рамки данной книги, его можно найти, например, в [2, 43].

Прежде всего отметим, что нормальное распределение обладает особыми свойствами. Если есть две независимые величины ξ и η , нормально распределенные с дисперсиями, соответственно, σ_1 и σ_2 и математическими ожиданиями a_1 и a_2 , то, кроме того, что, согласно свойству (11.62), математическое ожидание и дисперсия суммы $\xi + \eta$ будут аддитивны, **распределение суммы $\xi + \eta$ будет также нормальным**:

$$p(\xi + \eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}} e^{-\frac{(\xi + \eta - (a_1 + a_2))^2}{2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}}. \quad (11.71)$$

Рассмотрим теперь более общую ситуацию. Пусть есть N одинаковых независимых случайных величин $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ с **одинаковым, но необязательно нормальным** распределением вероятностей. Очевидно, что математические ожидания и дисперсии этих величин совпадают. Обозначим

$$\begin{aligned} M\xi_1 &= M\xi_2 = \dots = M\xi_N = m; \\ D\xi_1 &= D\xi_2 = \dots = D\xi_N = b^2; \\ \rho_N &= \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N. \end{aligned} \quad (11.72)$$

Для распределения суммы независимых случайных величин справедливо

$$\begin{aligned} M\rho_N &= M(\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N) = Nm; \\ D\rho_N &= D(\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N) = Nb^2. \end{aligned} \quad (11.73)$$

Рассмотрим теперь случайную величину ζ_N , распределенную **нормально** с такими же параметрами: $a = Nm$; $\sigma = b\sqrt{N}$. Обозначим ее функцию распределения через $p_{\zeta_N}(x)$.

Центральная предельная теорема утверждает, что для любого интервала (a', b') при достаточно больших N имеем:

$$P\{a' < \rho_N < b'\} \approx \int_{a'}^{b'} p_{\zeta_N}(x) dx. \quad (11.74)$$

Смысл (11.74) очевиден: **сумма большого числа одинаковых случайных величин приближенно нормальна**. Более того, обобщение этой теоремы гласит, что необязательно все слагаемые должны быть независимы и одинаково распределены, важно, чтобы отдельные слагаемые не играли большой роли в сумме. Эта теорема и объясняет, почему нормальные случайные величины так часто встречаются в природе: при исследовании системы обычно имеют дело с суммарным воздействием большого числа случайных факторов, в результате формирующих общий «гауссиан».

Теперь можно сформулировать наиболее общую схему метода Монте-Карло. Пусть требуется вычислить среднее значение $\langle A \rangle$ какой-либо физической величины A :

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i e^{-E_i/T}}{\sum_i e^{-E_i/T}}, \quad (11.75)$$

или, в более общем виде (см. (9.1)),

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i w_i}{\sum_i w_i} = \frac{\sum_i A_i w_i}{Z}, \quad (11.76)$$

где w_i – статистический вес, соответствующий собственному состоянию i системы.

Будем рассматривать значения A_i как независимые случайные величины, тогда $MA_i = \langle A \rangle$. Пусть дисперсия этих случайных величин равна $DA_i = b^2$.

Рассмотрим N независимых случайных величин $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$, математические ожидания которых совпадают с распределением $\langle A \rangle$, а дисперсии одинаковы и равны $D\xi_i = b^2$. Если N достаточно велико, то, согласно центральной предельной теореме, распределение суммы этих величин $\rho_N = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N$ будет приблизительно нормально с параметрами $M\rho_N = N\langle A \rangle$, $\sigma_{\rho_N} = b\sqrt{N}$. Из «правила трех σ » следует, что

$$P\{N\langle A \rangle - 3b\sqrt{N} < \rho_N < N\langle A \rangle + 3b\sqrt{N}\} \approx 0.997, \quad (11.77)$$

следовательно,

$$P\left\{\langle A \rangle - \frac{3b}{\sqrt{N}} < \frac{\rho_N}{N} < \langle A \rangle + \frac{3b}{\sqrt{N}}\right\} \approx 0.997. \quad (11.78)$$

Перепишем (11.78) следующим образом:

$$P\left\{\left|\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i - \langle A \rangle\right| < \frac{3b}{\sqrt{N}}\right\} \approx 0.997. \quad (11.79)$$

Фактически, последнее соотношение дает и метод расчета, и оценку погрешности. Действительно, сгенерируем N значений случайной величины ξ . Из (11.79) видно, что среднее арифметическое этих значений будет приближенно равно искомому $\langle A \rangle$, и с большой вероятностью погрешность такого приближения не превосходит величины $3b / \sqrt{N}$, где

$$b^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\xi_i - \langle \xi \rangle)^2. \quad (11.80)$$

С увеличением N эта погрешность стремится к нулю. На практике часто предпочитают вместо этой погрешности выбирать вероятную ошибку $0.6745b / \sqrt{N}$.

11.3. Расчет интегралов методом Монте-Карло

Для конкретизации представленной в предыдущем разделе общей схемы рассмотрим теперь практическую задачу расчета определенного интеграла методом Монте-Карло. Эту задачу, конечно, можно свести к приведенной в начале параграфа задаче о расчете площади фигуры, но, как правило, такой способ не будет эффективным.

Рассмотрим функцию $g(x)$, заданную на интервале (a,b) . Пусть необходимо вычислить интеграл

$$I = \int_a^b g(x) dx. \quad (11.81)$$

Для расчета выберем произвольную плотность распределения $p(x)$, определенную на том же интервале, причем

$$\int_a^b p(x) dx = 1. \quad (11.82)$$

Определим случайную величину

$$\eta = \frac{g(\xi)}{p(\xi)}, \quad (11.83)$$

где ξ – случайная величина, распределенная с плотностью $p(x)$ на (a,b) . Тогда математическое ожидание η будет равно искомому интегралу:

$$M\eta = \int_a^b \frac{g(x)}{p(x)} p(x) dx = I. \quad (11.84)$$

Рассмотрим N независимых случайных величин $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N$ и применим к их сумме центральную предельную теорему, тогда

$$P\left\{\left|\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta_i - I\right| < 3\sqrt{\frac{D\eta}{N}}\right\} \approx 0.997. \quad (11.85)$$

Таким образом, если выбрано N случайных значений $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$, то при достаточно большом N

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{g(\xi_i)}{p(\xi_i)} \approx I, \quad (11.86)$$

и погрешность расчета не превосходит $3\sqrt{D\eta/N}$, где

$$D\eta = M\eta^2 - I^2 = \int_a^b \frac{g^2(x)}{p(x)} dx - I^2 \cong \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{g^2(\xi_i)}{p(\xi_i)} - I^2. \quad (11.87)$$

Соотношения (11.86) и (11.87) для расчета интеграла и оценки погрешности получены корректно с учетом центральной предельной теоремы. Следует отметить, что сходимость результата (11.86) к точному значению следует также из **закона больших чисел**, согласно которому для любого $\varepsilon > 0$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P \left\{ \left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta_i - I \right| < \varepsilon \right\} = 1. \quad (11.88)$$

Более того, справедлив **усиленный закон больших чисел**:

$$P \left\{ \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta_i = I \right\} = 1. \quad (11.89)$$

Для оптимального расчета интеграла с минимальной погрешностью следует выбирать распределение $p(x)$, пропорциональное $|g(x)|$ или, по возможности, близкое к этому. Докажем это утверждение.

Воспользуемся известным неравенством Коши – Буняковского в интегральном виде:

$$\left[\int_a^b |u(x)v(x)| dx \right]^2 \leq \int_a^b u^2(x) dx \int_a^b v^2(x) dx. \quad (11.90)$$

Положим

$$\begin{aligned} u(x) &= \frac{g(x)}{\sqrt{p(x)}}; \\ v(x) &= \sqrt{p(x)}, \end{aligned} \quad (11.91)$$

тогда из (11.90) находим:

$$\left[\int_a^b |g(x)| dx \right]^2 \leq \int_a^b \left(\frac{g^2(x)}{p(x)} \right) dx \int_a^b p(x) dx \cong \int_a^b \left(\frac{g^2(x)}{p(x)} \right) dx. \quad (11.92)$$

Комбинируя (11.92) и определение дисперсии (11.87), находим оценку снизу для дисперсии:

$$D\eta \geq \left[\int_a^b |g(x)| dx \right]^2 - I^2. \quad (11.93)$$

Выберем распределение

$$\begin{aligned} p_0(x) &= C |g(x)|; \\ C^{-1} &= \int_a^b |g(x)| dx. \end{aligned} \quad (11.94)$$

Отсюда следует, что

$$\int_a^b \frac{g^2(x)}{p_0(x)} dx = \frac{1}{C} \int_a^b |g(x)| dx = \left[\int_a^b |g(x)| dx \right]^2. \quad (11.95)$$

Подставив (11.95) в выражение для дисперсии, имеем

$$D\eta = \left[\int_a^b |g(x)| dx \right]^2 - I^2. \quad (11.96)$$

Таким образом, выбор функции (11.94) в качестве функции распределения приводит к наименьшей ошибке (11.96), т.е. нижней границе неравенства (11.93). Такой расчет интеграла с наиболее близкой к (11.94) плотностью распределения называется **существенной выборкой**.

Для иллюстрации эффективности такого выбора приведем тестовый пример. Допустим, требуется рассчитать интеграл

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x dx = 1 \quad (11.97)$$

методом Монте-Карло. Используем для расчета интеграла различные нормированные функции распределения, также определенные на интервале $(0, \pi/2)$:

$$\begin{aligned} p_1(x) &= \frac{2}{\pi}; \\ p_2(x) &= \frac{8x}{\pi^2}; \\ p_3(x) &= \frac{3\sqrt{2}}{\pi\sqrt{\pi}} \sqrt{x} \end{aligned} \quad (11.98)$$

(рис. 11.20).

В табл. 11.1 приведены расчетные формулы для генерации случайных чисел, распределенных на интервале $(0, \pi/2)$ с функциями распределения (11.98), а также для расчета интеграла (11.97), R – случайное число, равномерно распределенное на отрезке $(0,1)$.

Таблица 11.1. Расчет интеграла (11.97) на основе случайных распределений (11.98)

Функция распределения $p(x)$	Случайные числа, распределенные по закону $p(x)$	Расчетное значение интеграла в зависимости от числа итераций
$p_1(x) = \frac{2}{\pi}$	$\xi = \frac{\pi}{2}R$	$I(N) = \frac{\pi}{2N} \sum_{i=1}^N \sin \xi_i$
$p_2(x) = \frac{8x}{\pi^2}$	$\xi = \frac{\pi}{2}\sqrt{R}$	$I(N) = \frac{\pi^2}{8N} \sum_{i=1}^N \frac{\sin \xi_i}{\xi_i}$
$p_3(x) = \frac{3\sqrt{2}}{\pi\sqrt{\pi}} \sqrt{x}$	$\xi = \frac{\pi}{2}R^{2/3}$	$I(N) = \frac{\pi^{3/2}}{3\sqrt{2}N} \sum_{i=1}^N \frac{\sin \xi_i}{\sqrt{\xi_i}}$

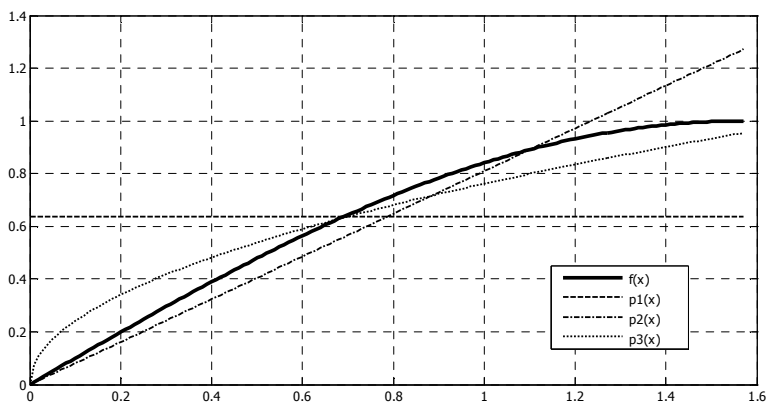


Рис. 11.20. Подынтегральная функция $f(x)$ и различные плотности распределения для расчета интеграла методом Монте-Карло

На рис. 11.21 показан процесс сходимости расчетного значения интеграла I (11.97) к точному значению в зависимости от числа N сгенерированных случайных точек.

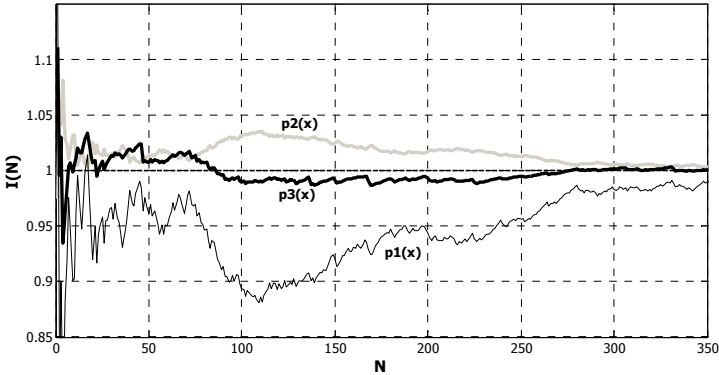


Рис. 11.21. Выбор функции распределения сильно влияет на скорость сходимости расчета интеграла методом Монте-Карло

Видно, что значения $I(N)$ быстрее всего сходятся к точному ответу при выборе функции распределения $p_3(x)$, хуже всего сходимость при выборе равномерного распределения $p_1(x)$. Это объясняется тем, что распределение $p_3(x)$ наиболее близко к подынтегральной функции $f(x)$ (см. рис. 11.20), поэтому дисперсия (11.93) значений $I(N)$ при выборе этого распределения будет меньше, чем при выборе распределений $p_1(x)$ и $p_2(x)$.

Заметим, что в качестве функции распределения $p(x)$ можно взять и саму подынтегральную функцию $\sin x$. Тогда $\xi = \arccos(1 - R)$, где R – случайное число, равномерно распределенное на отрезке $(0,1)$, и

$$I = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\sin \xi_i}{\sin \xi_i} \equiv 1, \quad (11.99)$$

т.е. для любого количества генераций случайной величины мы сразу получаем **точный** ответ. Но это возможно потому, что нахождение случайной величины ξ методом обратной функции **эквивалентно точному взятию интеграла I**, в этом случае подынтегральное распределение воспроизводится точно, что, как правило, невозможно при решении большинства физических задач.

Таким образом, эффективность алгоритма Монте-Карло напрямую зависит от удачного выбора функции распределения моделируемой случайной величины.

Эффективность метода Монте-Карло также связана с так называемой **конструктивной размерностью** рассчитываемых величин. Пусть необходимо рассчитать математическое ожидание случайной величины ξ . Если для расчета случайной величины ξ необходимо сгенерировать n случайных чисел R , т.е.

$$\xi = f(R_1, \dots, R_n), \quad (11.100)$$

то n есть конструктивная размерность ξ . Например, в задаче о броуновском движении определение нового положения частицы связано с получением трех новых случайных чисел x, y, z , т.е. конструктивная размерность алгоритма равна размерности задачи. Вообще любое моделирование методом Монте-Карло можно рассматривать как моделирование точки с декартовыми координатами (R_1, \dots, R_n) , равномерно распределенной в n -мерном единичном кубе

$$0 \leq R_1 \leq 1; \quad 0 \leq R_2 \leq 1; \quad \dots \quad 0 \leq R_n \leq 1, \quad (11.101)$$

в котором рассчитывается искомая величина

$$M\xi = \int_0^1 \dots \int_0^1 f(R_1 \dots R_n) dR_1 \dots dR_n \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f((R_1)_i \dots (R_n)_i). \quad (11.102)$$

Эффективность расчета зависит также от **трудоемкости** алгоритма. Рассмотрим опять задачу расчета математического ожидания величины ξ : $\langle \xi \rangle = M\xi$. После генерации N значений случайной величины имеем оценку

$$\langle \xi \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i. \quad (11.103)$$

Каждый расчет величины ξ_i проводится по определенному алгоритму, который может заключать в себе как генерацию нескольких случайных чисел, так и другие вспомогательные процедуры. Обозначим через t время расчета одного значения ξ_i (величина t может измеряться, например, в микросекундах, а может отражать число элементарных операций). Будем полагать, что t

определено для конкретного компьютера. Очевидно, полное время расчета равно

$$T = Nt. \quad (11.104)$$

Вероятная ошибка расчета

$$r_N = 0.6745 \sqrt{\frac{D\xi}{N}}, \quad (11.105)$$

где $D\xi$ – дисперсия. (11.105) с учетом (11.106) может быть записано следующим образом:

$$r_N = 0.6745 \sqrt{\frac{tD\xi}{T}}. \quad (11.106)$$

Если полное время расчета T фиксировано, то вероятная ошибка зависит от произведения $tD\xi$. Эта величина и называется трудоемкостью алгоритма Монте-Карло. Чем больше время, затрачиваемое на реализацию одного случайного значения в (11.103), тем больше погрешность при одном и том же времени счета.

Эффективность метода Монте-Карло растет с размерностью рассчитываемого интеграла. Расчет двумерных и трехмерных интегралов методом Монте-Карло более эффективен, чем расчет при помощи разностных схем. Метод Монте-Карло с успехом используется для различных физических и математических задач и процессов: для моделирования систем массового обслуживания, информационных потоков, процессов протекания, процессов распространения нейтронов в средах и т.д.

Все вышеизложенное касается только классических задач. Для квантовых моделей и термодинамики существуют более совершенные алгоритмы, специально адаптированные под конкретные проблемы. Они будут рассмотрены позже.

11.4. Марковская цепь и принцип детального равновесия

11.4.1. Марковская цепь. Понятие эргодичности

Для дальнейшего изложения необходимо ввести понятие **марковского процесса**, или **марковской цепи**. Допустим, моделируется броуновское движение, и на каждом вычислительном (и временном) шаге одна из частиц перемещается на какое-то расстояние, что приводит к новому расположению частиц. После передвижения частица «не помнит» своего начального положения, т.е. информация о предыдущем состоянии «стирается». Случайное блуждание является примером марковской цепи. На каждом шаге появляется новое состояние системы, и процесс представляет собой цепь последовательных состояний. Переход из предыдущего состояния в новое зависит только от предыдущего состояния, или, точнее, вероятность нахождения системы в данном состоянии зависит только от предыдущего состояния. Обозначим через

$$x_0, x_1, \dots, x_n, \dots \quad (11.107)$$

последовательность состояний, где под x_i подразумеваются все степени свободы рассматриваемой системы (например, совокупность координат и импульсов), описывающие ее состояние (система может быть многочастичной). Например, x_i может обозначать какую-либо из базисных функций системы, и тогда (11.107) описывает последовательные переходы от одной базисной функции к другой.

Обозначим через

$$P_{x_0, \dots, x_{n-1} \rightarrow x_n} \quad (11.108)$$

вероятность появления нового состояния x_n при условии реализации предыдущих состояний x_0, \dots, x_{n-1} (условная вероятность перехода), тогда марковскую цепь можно определить как последовательность $x_0, x_1, \dots, x_n, \dots$ состояний системы, если для любого n выполняется условие:

$$P_{x_0, \dots, x_{n-1} \rightarrow x_n} = P_{x_{n-1} \rightarrow x_n}. \quad (11.109)$$

Абсолютная вероятность реализации последовательности x_0, \dots, x_n будет равна

$$P(x_0, x_1, \dots, x_n) = P(x_0)P_{x_0 \rightarrow x_1} \dots P_{x_{n-2} \rightarrow x_{n-1}} P_{x_{n-1} \rightarrow x_n}, \quad (11.110)$$

здесь $P(x_0)$ – абсолютная вероятность реализации состояния x_0 .

Согласно (11.110), **любую** реализацию последовательности состояний x_0, x_1, \dots, x_n можно получить из начального состояния x_0 , вероятность реализации такой последовательности будет

$$P = P_{x_0 \rightarrow x_1} \dots P_{x_{n-2} \rightarrow x_{n-1}} P_{x_{n-1} \rightarrow x_n}. \quad (11.111)$$

Существует инвариантное распределение состояний системы $P(x_i)$, которое не зависит от начальных условий, и достичь которого позволяет марковская цепь.

Например, для канонического ансамбля таким инвариантным распределением является распределение Гиббса:

$$P(x_i) \sim e^{-H(x_i)/T}, \quad (11.112)$$

где H – гамильтониан системы.

Для того, чтобы марковская цепь могла достичь инвариантного распределения, на вероятности переходов (11.109) следует наложить ряд условий.

Во-первых, определим само понятие **инвариантного** или **стационарного** распределения вероятностей $P(x_i)$ следующими условиями:

$$\begin{aligned} P(x_i) &> 0; \\ \sum_i P(x_i) &= 1; \\ P(x_j) &= \sum_i P(x_i)P_{x_i \rightarrow x_j}. \end{aligned} \quad (11.113)$$

Последнее условие в (11.113) означает, что абсолютная вероятность каждого состояния складывается из всех возможных

переходов системы в это состояние. Матрица переходов $P_{x_i \rightarrow x_j}$ называется **стохастической**.

Марковская цепь называется **неприводимой**, если каждое ее состояние может быть получено из каждого другого состояния (возможно, через ряд других состояний и переходов). Таким образом, в неприводимой марковской цепи не может быть «ловушек» – состояний или групп состояний, достигнув которых, система уже не выходит из них.

Состояние, входящее в марковскую цепь, называется **периодическим**, если, достигнув этого состояния, система возвращается в него через определенное число шагов (период). Если таких состояний нет, марковская цепь называется **апериодической**, и тогда состояния также называются апериодическими.

Пусть $P_{x_i \rightarrow x_j}^{(n)}$ обозначает вероятность того, что в процессе, стартующем из состояния x_i , первый переход в x_j осуществляется на n -м шаге. Кроме того, пусть $P_{x_i \rightarrow x_i}^{(0)} = 0$, тогда $P_{x_i \rightarrow x_j} = \sum_{n=1}^{\infty} P_{x_i \rightarrow x_j}^{(n)}$ есть вероятность того, что, стартуя из состояния x_i , система пройдет через состояние x_j . Если при этом $P_{x_i \rightarrow x_j} = 1$, то состояние x_i называется **устойчивым**, а величина $\mu_i = \sum_{n=1}^{\infty} n P_{x_i \rightarrow x_j}^{(n)}$ – **средним возвратным временем**.

Марковская цепь, состоящая из апериодических и устойчивых с конечным временем возврата состояний называется **эргодической** или **связной**, и сами состояния, составляющие ее, также называются эргодическими.

Теперь сформулируем важное для приложений утверждение. **Неприводимая апериодическая марковская цепь имеет инвариантное распределение тогда и только тогда, когда она является эргодической**. Другими словами, для достижения инвариантного распределения марковский процесс должен быть

сконструирован так, чтобы за некоторое конечное число шагов из любого состояния x_i можно было бы достичь любого другого состояния x_j . При этом число таких шагов не должно быть сравнимо с длиной всей марковской цепи. В этом и заключается практическое руководство для реализации эргодической схемы.

Задача 11.1. Доказать, что стохастическая матрица

$$P = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

не реализует неприводимую марковскую цепь.

11.4.2. Принцип детального равновесия

Основная задача статистической механики, как уже отмечалось ранее, состоит в расчете наблюдаемых термодинамических величин из статистического усреднения:

$$\langle A \rangle = \frac{\int d\Omega A(\Omega) \rho(\Omega)}{Z}; \quad (11.114)$$

$$Z = \int d\Omega \rho(\Omega).$$

Здесь интегрирование производится по всему фазовому пространству Ω , ρ – функция распределения (в частном случае – распределение Гиббса (11.109)).

Среднее (11.114) в общем случае представляет собой многомерный интеграл по фазовому пространству. Общие правила расчета этого интеграла методом предпочтительной выборки в рамках алгоритма Монте-Карло справедливы и здесь. Допустим, создана цепь случайных состояний Ω_i для оценки интегралов (11.114) с некоторым заданным распределением $P(\Omega)$. Тогда справедлива оценка

$$\langle A \rangle \approx \frac{\sum_{i=1}^N A(\Omega_i) \rho(\Omega_i) P^{-1}(\Omega_i)}{\sum_{i=1}^N \rho(\Omega_i) P^{-1}(\Omega_i)}. \quad (11.115)$$

Если в качестве вероятности $P(\Omega)$ выбрать функцию распределения ρ ,

$$P(\Omega) = \frac{\rho(\Omega)}{Z}, \quad (11.116)$$

то вычисление $\langle A \rangle$ сводится к простому арифметическому среднему:

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A(\Omega_i). \quad (11.117)$$

Так как распределение (11.116) является инвариантным для рассматриваемой системы, марковская цепь на основе такого распределения должна быть эргодической. Сформулируем принцип, согласно которому можно сконструировать алгоритм реализации распределения (11.116).

Прежде всего, для эргодичности схемы должны быть выполнены условия (11.113), и для практической реализации алгоритма необходимо выполнение дополнительных ограничительных условий на вероятности перехода:

$$\begin{aligned} P_{\Omega' \rightarrow \Omega} &\geq 0; \\ \sum_{\Omega'} P_{\Omega \rightarrow \Omega'} &= 1; \\ P(\Omega) &= \sum_{\Omega'} P_{\Omega' \rightarrow \Omega} P(\Omega'). \end{aligned} \quad (11.118)$$

Первое условие – вероятности переходов должны выбираться неотрицательными. Второе условие означает, что полная вероятность того, что система перейдет из любого состояния Ω в какое-либо другое состояние, равна единице, т.е. из состояния Ω обязательно есть выход, оно не является «ловушкой». Третье условие эквивалентно последнему из соотношений (11.113) и означает, что искомое распределение $P(\Omega)$ – инвариантное, т.е. сумма вероятностей перехода из всех состояний в данное Ω реализует вероятность этого события $P(\Omega)$.

Каждому шагу $\Omega_i \rightarrow \Omega_j$ марковского процесса можно условно поставить в соответствие промежуток времени dt , время расчета шага, это время отражает масштаб реального времени релаксации физической системы. Предел отношения вероятности перехода к этому промежутку времени

$$W_{\Omega' \rightarrow \Omega} = \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{P_{\Omega' \rightarrow \Omega}}{dt} \quad (11.119)$$

называется **интенсивностью перехода** или **плотностью вероятности перехода**. Предел (11.119) понимается в смысле того, что полное время расчета много больше dt , так что можно аппроксимировать дискретные шаги непрерывным процессом.

Последнее из соотношений (11.118) можно с учетом эволюции системы во времени t переписать следующим образом:

$$P(\Omega, t + dt) = \sum_{\Omega'} P_{\Omega' \rightarrow \Omega, dt} P(\Omega', t), \quad (11.120)$$

где $P_{\Omega' \rightarrow \Omega, dt}$ – условная вероятность перехода системы из состояния Ω' в состояние Ω за время dt . Далее выделим в (11.120) слагаемое с $\Omega' = \Omega$:

$$P(\Omega, t + dt) = P_{\Omega \rightarrow \Omega, dt} P(\Omega, t) + \sum_{\Omega' \neq \Omega} P_{\Omega' \rightarrow \Omega, dt} P(\Omega', t). \quad (11.121)$$

Соотношение сохранения вероятностей, второе в (11.118), можно представить следующим образом:

$$P_{\Omega \rightarrow \Omega, dt} = 1 - \sum_{\Omega' \neq \Omega} P_{\Omega \rightarrow \Omega', dt}. \quad (11.122)$$

Подставив (11.123) в (11.122), получаем:

$$P(\Omega, t + dt) = P(\Omega, t) \left(1 - \sum_{\Omega' \neq \Omega} P_{\Omega \rightarrow \Omega', dt} \right) + \sum_{\Omega' \neq \Omega} P_{\Omega' \rightarrow \Omega, dt} P(\Omega', t) \Rightarrow \quad (11.123)$$

$$P(\Omega, t + dt) - P(\Omega, t) = - \sum_{\Omega' \neq \Omega} P_{\Omega \rightarrow \Omega', dt} P(\Omega, t) + \sum_{\Omega' \neq \Omega} P_{\Omega' \rightarrow \Omega, dt} P(\Omega', t).$$

Поделив (11.123) на dt и учитывая определение (11.119), эволюцию вероятности $P(\Omega)$ можно описать в виде своеобразного **уравнения баланса** или **скоростного уравнения**, описывающего производную по времени – времени расчета – этой величины:

$$\frac{dP(\Omega)}{dt} = - \sum_{\Omega' \neq \Omega} W_{\Omega \rightarrow \Omega'} P(\Omega) + \sum_{\Omega' \neq \Omega} W_{\Omega' \rightarrow \Omega} P(\Omega'). \quad (11.124)$$

Первый член справа в (11.124) описывает скорость всех переходов из состояния Ω во все другие состояния, а второй – скорость переходов из всех состояний, отличных от Ω , в состояние Ω . Слагаемые с $\Omega' = \Omega$ в обеих суммах компенсируют друг друга. Выражение (11.124) называется также **уравнением Колмогорова** (или уравнением Колмогорова – Чэпмена, см. [2]).

В состоянии равновесия производная $\frac{dP}{dt}$ в (11.124) равна нулю, и

$$\sum_{\Omega'} W_{\Omega \rightarrow \Omega'} P(\Omega) = \sum_{\Omega'} W_{\Omega' \rightarrow \Omega} P(\Omega'). \quad (11.125)$$

Используя (11.125), можно убедиться в справедливости соотношения, аналогичного последнему соотношению в (11.118):

$$\sum_{\Omega'} W_{\Omega' \rightarrow \Omega} P(\Omega') = \frac{P(\Omega)}{dt}. \quad (11.126)$$

Для облегчения дальнейшего практического применения уравнения детального баланса, на (11.125) можно наложить более сильные ограничения. Потребуем, чтобы (11.125) было справедливо для **каждого** состояния Ω' под знаком суммы:

$$W_{\Omega \rightarrow \Omega'} P(\Omega) = W_{\Omega' \rightarrow \Omega} P(\Omega'). \quad (11.127)$$

Соотношение (11.127) называется условием **детального равновесия** или **детального баланса**. Это соотношение дает существенную свободу при выборе интенсивности переходов.

Приведем два из наиболее употребительных вариантов выбора интенсивности переходов, удовлетворяющей детальному балансу. Алгоритм Метрополиса [44, 45] использует следующий вид $W_{\Omega' \rightarrow \Omega}$:

$$W_{\Omega' \rightarrow \Omega} = \begin{cases} \frac{P(\Omega')}{P(\Omega)}, & \text{если } \frac{P(\Omega')}{P(\Omega)} < 1; \\ 1, & \text{если } \frac{P(\Omega')}{P(\Omega)} \geq 1. \end{cases} \quad (11.128)$$

Несложно убедиться прямой подстановкой, что условие (11.127) справедливо для (11.128).

Задача 11.2. Убедиться в справедливости (11.127) при условии (11.128).

Можно сформулировать более общий вариант алгоритма Метрополиса, выбрав $W_{\Omega' \rightarrow \Omega}$ следующим образом:

$$W_{\Omega' \rightarrow \Omega} = \min\left(\frac{1}{\tau}; \frac{1}{\tau} \frac{P(\Omega')}{P(\Omega)}\right), \quad (11.129)$$

где $\tau \sim 1$ – произвольная константа. Соотношение (11.127) также удовлетворяет условию (11.129) при любом параметре τ . Варьируя параметр τ , можно менять скорость сходимости алгоритма Монте-Карло.

Задача 11.3. Убедиться в справедливости (11.127) при условии (11.129).

В алгоритме тепловой ванны (thermal bath) используется следующий вид интенсивности переходов:

$$W_{\Omega' \rightarrow \Omega} = \frac{P(\Omega')}{P(\Omega) + P(\Omega')}, \quad (11.130)$$

это выражение также удовлетворяет детальному балансу (11.127).

Задача 11.4. Убедиться в справедливости (11.127) при условии (11.130).

11.5. Практическая реализация методов Монте-Карло

Для демонстрации эффективности методов Монте-Карло рассмотрим их использование при исследовании различных физических моделей.

11.5.1. Модель Изинга

11.5.1.1. Формулировка модели и некоторые аналитические результаты

Рассмотрим уже упоминавшуюся в гл. 7 модель Изинга

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z - H \sum_i S_i^z, \quad (11.131)$$

здесь $S_i^z = \pm 1$ – проекция спина на узле i , H – внешнее поле, J_{ij} – обменный интеграл. В этой модели на каждом узле есть только две степени свободы. Модель Изинга наиболее проста, наглядна и достаточно удобна при изложении отдельных проблем теории магнетизма, а также для численного моделирования.

Кратко остановимся на известных аналитических результатах для модели Изинга.

Основное состояние модели Изинга при нулевой температуре совпадает с основным состоянием модели Гейзенберга, когда спины «заморожены» и ориентированы либо вдоль поля (ферромагнитное состояние, случай $J_{ij} > 0$), либо чередуются (антиферромагнитное состояние, случай $J_{ij} < 0$):

$$\begin{aligned} \dots \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \dots & \quad J_{ij} > 0; \\ \dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots & \quad J_{ij} < 0. \end{aligned} \tag{11.132}$$

В обоих случаях основное состояние модели Изинга является упорядоченным состоянием со спонтанной намагниченностью, и только при достаточно большой температуре ($\Theta \sim 10^3$ K), называемой **температурой Кюри** для ферромагнетика и **температурой Нееля** для антиферромагнетика, происходит фазовый переход в неупорядоченное, **парамагнитное состояние**. Средний магнитный момент системы в ферромагнитном состоянии максимален, а в антиферромагнитном равен нулю.

Будем рассматривать в (11.131) взаимодействие только с ближайшими соседями, поэтому полагаем все обменные интегралы J_{ij} одинаковыми и равными некоторой постоянной величине J размерности энергии (обычно обменное взаимодействие в реальных физических системах имеет масштаб $J \sim 0.1 \div 1$ эВ).

Рассмотрим решение модели Изинга в **приближении среднего поля** [10, 46]. В этом приближении суммарное поле H_i , действующее на спин i ,

$$H_i = J \sum_{\langle j \rangle} S_j^z + H \tag{11.133}$$

(здесь суммирование производится по всем соседям узла i), заменяется его средним значением:

$$H_i \rightarrow \langle H_i \rangle = J \sum_{\langle j \rangle} \langle S_j^z \rangle + H = JZ \langle S_j^z \rangle + H, \quad (11.134)$$

где Z – число ближайших соседей.

В приближении среднего поля и ближайших соседей [46] для ферромагнитного случая можно получить самосогласованное уравнение для среднего магнитного момента, приходящегося на один узел (рис. 11.22):

$$R = \text{th} \left(\frac{H + ZJR}{T} \right), \quad (11.135)$$

здесь $R = \langle S_j^z \rangle = M/N$; N – число узлов в системе; M – полный магнитный момент,

$$M = \frac{\langle N_{\uparrow} \rangle - \langle N_{\downarrow} \rangle}{N}, \quad (11.136)$$

где $\langle N_{\uparrow} \rangle, \langle N_{\downarrow} \rangle$ – среднее число спинов с $S^z = +1$ и $S^z = -1$, соответственно, а усреднение $\langle \dots \rangle$ понимается как усреднение по каноническому ансамблю Гиббса:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n A_n e^{-\beta E_n}}{Z}; \quad (11.137)$$

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}; \quad \beta = 1/T.$$

Температура Кюри, при которой магнитный момент обращается в нуль в нулевом внешнем поле, в приближении среднего поля равна

$$\Theta = ZJ \sim 1000\text{K}. \quad (11.138)$$

Это температура фазового перехода «ферромагнетик – парамагнетик», при этом роль параметра порядка для этого фазового перехода играет величина R .

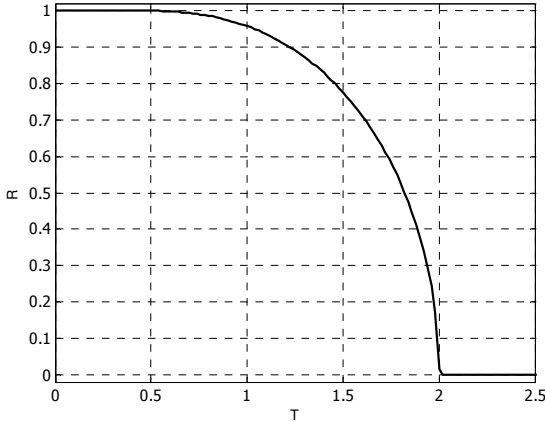


Рис. 11.22. Зависимость среднего магнитного момента от температуры в одномерной модели Изинга в приближении среднего поля и ближайших соседей. Внешнее поле $H = 0$; $Z = 2$; $J = 1$

В предельных случаях малых температур и вблизи температуры Кюри средний магнитный момент, описываемый в общем случае в отсутствие внешнего магнитного поля уравнением

$$R = \text{th} \left(\frac{\Theta}{T} R \right), \quad (11.139)$$

ведет себя следующим образом:

$$\begin{aligned} R &= 1 - 2e^{-\frac{2\Theta}{T}}, \quad T \rightarrow 0; \\ R^2 &= 3y - \frac{12}{5}y^2, \quad T \rightarrow \Theta, \quad y = \frac{\Theta - T}{\Theta} \ll 1. \end{aligned} \quad (11.140)$$

Экспериментально измеряемую удельную магнитную восприимчивость системы можно рассчитать следующим образом:

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial M}{\partial H} \Big|_{H \rightarrow 0} = \frac{1}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (11.141)$$

Выражение (11.141) можно рассчитать в приближении среднего поля. Вблизи точки фазового перехода магнитная восприимчивость ферромагнетика подчиняется **закону Кюри** (рис. 11.23):

$$\chi \sim \frac{1}{|T - \Theta|}. \quad (11.142)$$

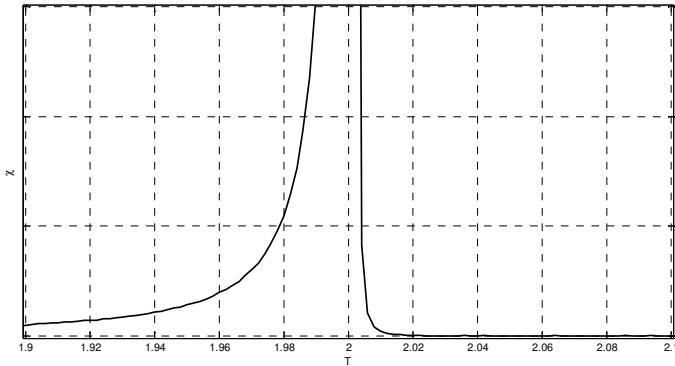


Рис. 11.23. Зависимость восприимчивости от температуры в модели Изинга в приближении среднего поля и ближайших соседей. Внешнее поле $H = 0$; $Z = 2$; $J = 1$

Выражение для восприимчивости в приближении среднего поля и при $H \rightarrow 0$ выглядит следующим образом:

$$\chi = \frac{1 - R^2}{T - \Theta(1 - R^2)}, \quad (11.143)$$

в предельных случаях

$$\chi = \begin{cases} \frac{4}{T} e^{-2\frac{\Theta}{T}}, & T \rightarrow 0; \\ \frac{1}{2(T - \Theta)}, & T \rightarrow \Theta - 0; \\ \frac{1}{\Theta - T}, & T \rightarrow \Theta + 0. \end{cases} \quad (11.144)$$

Приведем также соотношения для теплоемкости и свободной энергии в приближении среднего поля, выраженные через параметр порядка R :

$$F = -T \ln Z = \frac{NH_0 R}{2T} - TN \ln \left(2 \operatorname{ch} \left(\frac{H + H_0}{T} \right) \right); H_0 = ZJR; \quad (11.145)$$

$$C = \frac{dE}{dT} = -\frac{N\Theta}{2} \frac{dR^2}{dT} = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}.$$

При численном моделировании теплоемкость системы предпочтительней рассчитывать через флуктуацию энергии:

$$C = \frac{1}{T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2). \quad (11.146)$$

Качественная температурная зависимость теплоемкости от температуры в приближении среднего поля показана на рис. 11.24.

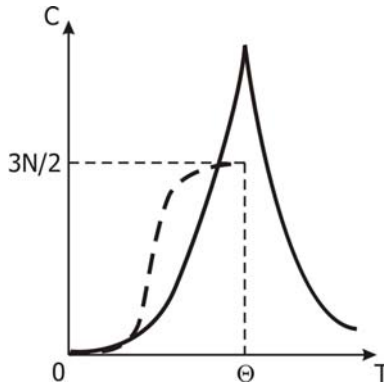


Рис. 11.24. Качественная температурная зависимость теплоемкости от температуры в приближении среднего поля (штриховая линия) и с учетом флуктуаций (сплошная линия)

Учет флуктуаций, т.е. выход за рамки приближения среднего поля, приводит к характерной для фазового перехода второго рода особенности теплоемкости в точке перехода (сплошная линия на рис. 11.24) [46].

В предельных случаях приближение среднего поля дает следующие результаты:

$$C = \begin{cases} \frac{3}{2}N, & T \rightarrow \Theta; \\ 4\left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 \text{Ne}^{-\frac{\Theta}{T}}, & T \rightarrow 0. \end{cases} \quad (11.147)$$

В случае антиферромагнитной модели ($J < 0$) средний магнитный момент в упорядоченном состоянии равен нулю, и для описания системы ее искусственно разделяют на две подрешетки (со спином $+1$ и со спином -1), так что модель Изинга в приближении среднего поля описывается уже двумя параметрами порядка:

$$\begin{aligned} R^+ &= -\text{th}\left(\frac{ZJR^- - H}{T}\right); \\ R^- &= -\text{th}\left(\frac{ZJR^+ - H}{T}\right), \end{aligned} \quad (11.148)$$

при этом выражение для точки фазового перехода (температуры Нееля) совпадает с выражением для температуры Кюри в случае ферромагнетика:

$$\Theta = ZJ. \quad (11.149)$$

Принципиально отличается поведение восприимчивости (рис. 11.25), которая испытывает не расходимость, а только излом производной в точке $T = \Theta$:

$$\chi = \frac{1 - R^2}{T + (1 - R^2)\Theta}, \quad (11.150)$$

где $R(T)$ удовлетворяет уравнению (11.139).

В предельных случаях восприимчивость (11.150) описывается следующими соотношениями:

$$\chi = \begin{cases} \frac{4}{T} e^{-2\frac{\Theta}{T}}, & T \rightarrow 0; \\ \frac{1}{2\Theta}(1 - \gamma), & \gamma = \frac{\Theta - T}{\Theta}, \quad T \rightarrow \Theta - 0; \\ \frac{1}{\Theta + T}, & T \rightarrow \Theta + 0. \end{cases} \quad (11.151)$$

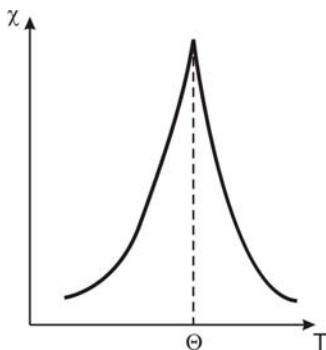


Рис. 11.25. Качественный рисунок зависимости восприимчивости антиферромагнетика от температуры в приближении среднего поля. В отличие от ферромагнитного случая, восприимчивость не расходится в точке перехода, а имеет разрыв производной

Модель Изинга (11.131) при $J_{ij} \equiv J$ решена **точно** для одномерного и двумерного случаев. Статистическая сумма для одномерной замкнутой изинговской цепочки уже рассчитывалась в гл. 7 (см. (7.90)). Пользуясь результатами разд. 7.4.3, можно показать, что для бесконечной системы ($N \rightarrow \infty$) фазовый переход «ферромагнетик – парамагнетик» отсутствует, и магнитный момент является аналитической функцией температуры и внешнего поля (рис. 11.26):

$$R = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial H} = \frac{\text{sh} \beta H}{\sqrt{\text{sh}^2 \beta H + e^{-4\beta J}}}. \quad (11.152)$$

Соответственно,

$$\chi = \beta e^{2\beta J}. \quad (11.153)$$

В температурной зависимости восприимчивости отсутствуют особенности как для ферромагнетика, так и для антиферромагнетика (рис. 11.27), что соответствует отсутствию фазового перехода в одномерном случае.

Для теплоемкости при нулевом магнитном поле имеем

$$C = N \frac{(\beta J)^2}{\text{ch}^2 \beta J}, \quad (11.154)$$

эта кривая также не имеет особенностей (рис. 11.28).

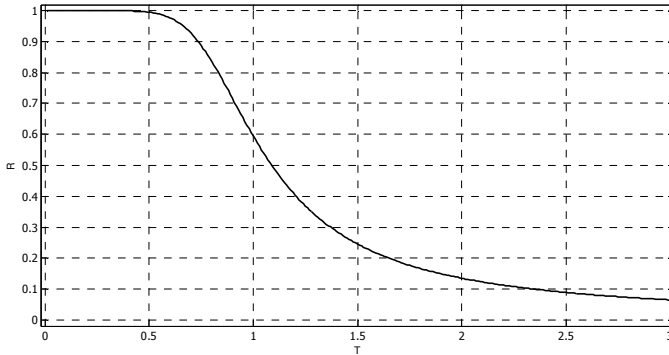


Рис. 11.26. Зависимость магнитного момента от температуры в одномерной бесконечной модели Изинга. Точное решение. Фазовый переход в модели отсутствует

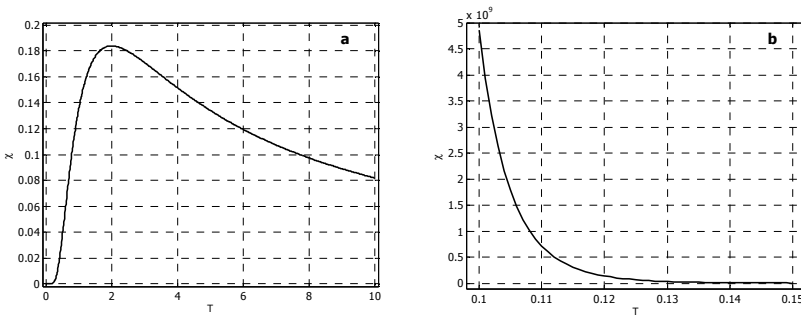


Рис. 11.27. Зависимость восприимчивости от температуры в одномерной бесконечной модели Изинга. Точное решение для антиферромагнетика $J = -1$ (а) и ферромагнетика $J = 1$ (б)

Задача 11.5. Используя выражение для статсуммы (9.90), получить выражения для свободной энергии, магнитного момента, восприимчивости и теплоемкости для одномерной модели Изинга.

В двумерном случае Онзагером в 1944 г. было показано, что в плоской квадратной решетке существует фазовый переход при температуре, удовлетворяющей уравнению [36]

$$\text{th}\left(\frac{J}{\Theta}\right) = \sqrt{2} - 1. \quad (11.155)$$

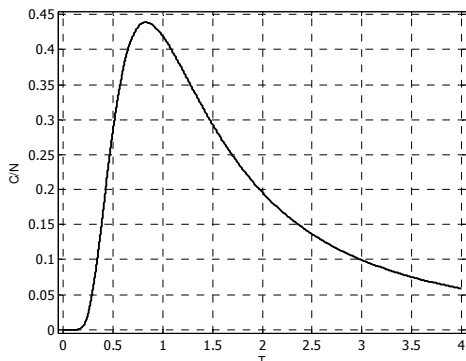


Рис. 11.28. Зависимость удельной теплоемкости от температуры в одномерной бесконечной модели Изинга. Точное решение

Задача 11.6. Решить уравнение (11.155) относительно критической температуры и сравнить результат с решением в приближении среднего поля.

В этом случае теплоемкость в точке фазового перехода имеет логарифмическую особенность:

$$C(T \rightarrow \Theta) \sim \ln |T - \Theta|. \quad (11.156)$$

Трехмерная модель Изинга не имеет аналитического решения, но в этом случае с хорошей точностью справедливо приближение среднего поля, которое тем лучше, чем больше число ближайших соседей. Фазовый переход имеет место при температуре

$$\Theta \cong ZJ. \quad (11.157)$$

11.5.1.2. Метод Монте-Карло для модели Изинга

Здесь будет рассмотрен метод Монте-Карло для модели Изинга, позволяющий рассчитывать вышеперечисленные термодинамические величины для достаточно большой системы спинов. Модель Изинга – одна из первых физических моделей, которая была исследована стохастическими численными методами.

Сначала перечислим различные варианты реализации принципа детального равновесия в данной модели. Будет рассматриваться канонический ансамбль в присутствии внешнего термостата с

температурой $T = 1/\beta$, поэтому за искомое инвариантное распределение следует взять гиббсовский вес конфигурации Ω :

$$P(\Omega) = e^{-E(\Omega)\beta}, \quad (11.158)$$

здесь $E(\Omega)$ – энергия конфигурации спинов в системе. Под конфигурациями (или базисными функциями) понимается совокупность "мгновенных" состояний всех узлов пространственной решетки спинов, например,

$$|\Omega\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\dots\rangle, \quad (11.159)$$

это такие же базисные функции, какие рассматривались при изучении спиновой статистики – собственные функции оператора проекции спина S^z и оператора S^2 , соответственно, размерность базиса будет равна 2^N , N – число спинов.

Гамильтониан модели Изинга (11.131) в базисе (11.159) диагонален, поэтому каждой конфигурации n можно поставить в соответствие конкретное значение энергии:

$$E(\Omega_n) = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} (S_i^z S_j^z)_n - H \sum_i (S_i^z)_n, \quad n = 1, 2, \dots, 2^N. \quad (11.160)$$

При формировании марковской цепи каждая следующая конфигурация спинов получается из предыдущей попыткой изменения одной из степеней свободы (например, попыткой переворота одного из спинов). Новая конфигурация принимается (т.е. спин переворачивается) с вероятностью, зависящей от отношения гиббсовских весов новой и старой конфигураций. Наиболее употребительное выражение для интенсивности перехода (11.119) в этом случае – алгоритм Метрополиса – представимо в виде:

$$W_{1 \rightarrow 2} = \begin{cases} e^{\beta(E_1 - E_2)}, & E_1 < E_2; \\ 1, & E_1 \geq E_2, \end{cases} \quad (11.161)$$

где E_1, E_2 – энергии старой и новой конфигураций спинов соответственно.

В алгоритме тепловой ванны (11.130) на каждом шаге один выбранный спин приводится в состояние равновесия с термостатом

при фиксированной конфигурации остальной системы. Вероятность принятия новой конфигурации определяется гиббсовскими весами двух возможных состояний:

$$W_{1 \rightarrow 2} = \frac{e^{-\beta E_2}}{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2}}; \quad (11.162)$$

$$W_{2 \rightarrow 1} = \frac{e^{-\beta E_1}}{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2}}.$$

При расчете модели Изинга без внешнего поля можно представить еще один вариант задания интенсивности переходов. Пусть элементарный шаг алгоритма заключается в перевороте спина i : $S_i \rightarrow -S_i$. Уравнение детального баланса (11.127) для этого случая выглядит следующим образом:

$$W_{S_i \rightarrow -S_i} P(S_i) = W_{-S_i \rightarrow S_i} P(-S_i). \quad (11.163)$$

Отсюда находим:

$$\frac{W_{S_i \rightarrow -S_i}}{W_{-S_i \rightarrow S_i}} = \frac{P(-S_i)}{P(S_i)} = e^{-2S_i E_i \beta}, \quad (11.164)$$

здесь, согласно (11.131),

$$E_i = J \sum_{j \neq i} S_j - \quad (11.165)$$

энергия взаимодействия выделенного спина i с остальными спинами (как правило, рассматриваются ближайшие соседи). Глаубер [47] предложил такое выражение для интенсивности переходов:

$$W_{S_i \rightarrow -S_i} = \frac{1}{2\tau} (1 - S_i \text{th}(E_i \beta)) \quad (11.166)$$

Соотношение (11.166) называется **функцией Глаубера**. Оно также удовлетворяет условию детального баланса, при этом имеется возможность подбора параметра τ для увеличения эффективности алгоритма при моделировании конкретной системы.

Сформулируем теперь конкретную схему алгоритма Монте-Карло. Она показана на рис. 11.29 для расчета модели Изинга с использованием алгоритма Метрополиса (11.128).

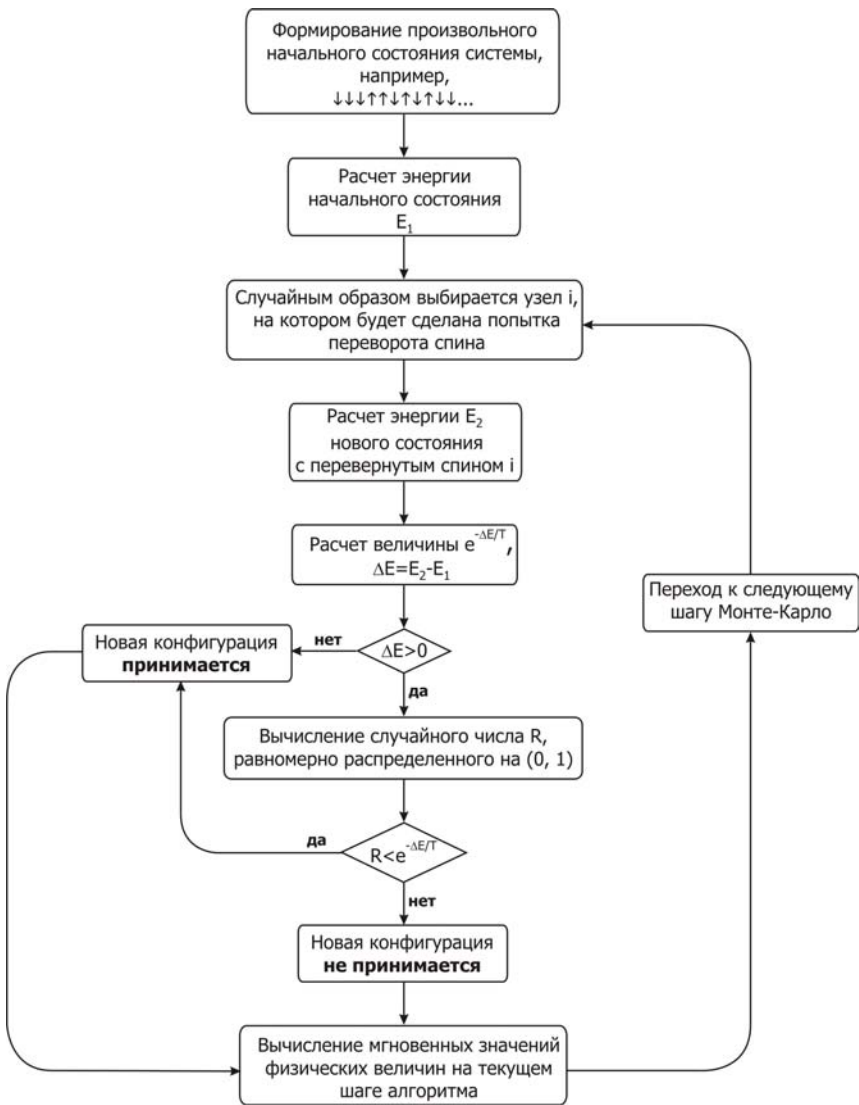


Рис. 11.29. Схема процедуры расчета модели Изинга с использованием алгоритма Метрополиса (11.128)



Рис. 11.30. Перерасчет энергии затрагивает только узел i и соседние с ним

Следует отметить особо, что если суммирование в (11.131) производится **только по ближайшим соседям**, то при расчете энергии E_2 новой конфигурации, получающейся из предыдущей конфигурации переверотом спина на узле i , достаточно лишь пересчитать изменение энергии ΔE вблизи спина i :

$$E_2 = E_1 + \Delta E. \quad (11.167)$$

Например, если рассматривается одномерный случай, то различие в энергии между новой и старой конфигурациями, в соответствии с (11.131), будет равно (рис. 11.30)

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_2 - E_1 = \\ &= \left[-\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J S_i^z S_j^z - H \sum_i S_i^z \right]_{\text{new}} - \left[-\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J S_i^z S_j^z - H \sum_i S_i^z \right]_{\text{old}} = \\ &= -\frac{1}{2} J ([S_{i-1}^z S_i^z]_{\text{new}} + [S_i^z S_{i+1}^z]_{\text{new}} - [S_{i-1}^z S_i^z]_{\text{old}} - [S_i^z S_{i+1}^z]_{\text{old}}) - \\ &- H ([S_i^z]_{\text{new}} - [S_i^z]_{\text{old}}) = -([S_i^z]_{\text{new}} - [S_i^z]_{\text{old}}) \left(\frac{1}{2} J (S_{i-1}^z + S_{i+1}^z) + H \right) = \\ &= 2[S_i^z]_{\text{old}} \left(\frac{1}{2} J (S_{i-1}^z + S_{i+1}^z) + H \right). \quad (11.168) \end{aligned}$$

Вне зависимости от принятия или непринятия новой конфигурации необходимо на каждом шаге Монте-Карло вычислять искомую физическую величину A по данной мгновенной конфигурации. В результате реализуется неприводимая марковская цепь, выполняется детальный баланс (11.163), так что искомое среднее значение A равно (см. (11.117))

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A_i, \quad (11.169)$$

где M – число шагов Монте-Карло.

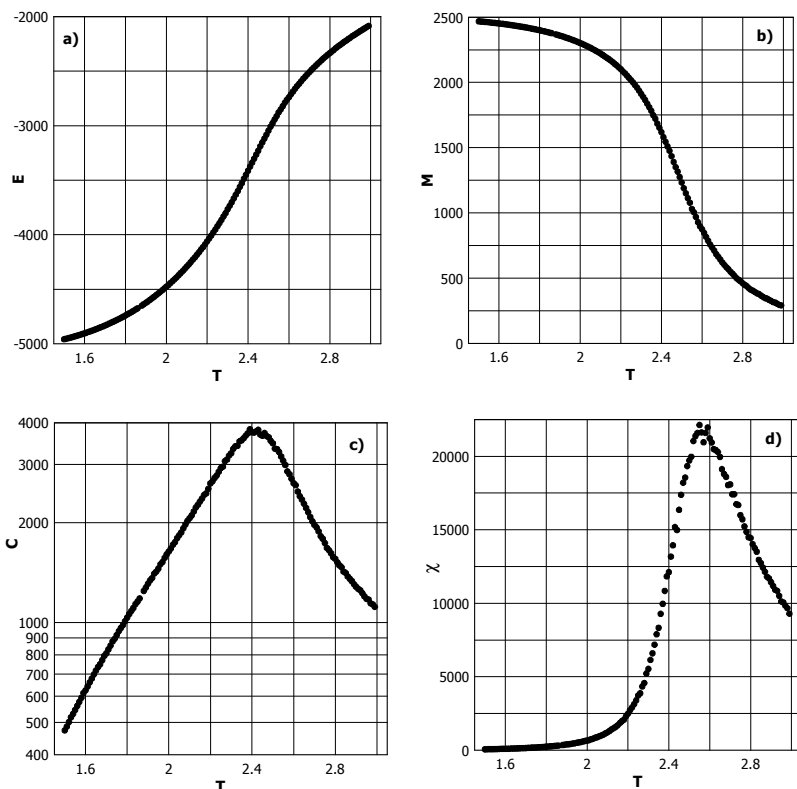


Рис. 11.31. Зависимость: **a)** энергии; **b)** магнитного момента; **с)** теплоемкости (в логарифмическом масштабе); **d)** восприимчивости от температуры в двумерной модели Изинга, полученные методом Монте-Карло. Система 50×50 , внешнее поле $H = 0.03$

На рис. 11.31 представлены результаты моделирования двумерной модели Изинга методом Монте-Карло. Рассматривалась квадратная решетка размера 50×50 с периодическими граничными условиями, внешнее поле $H = 0.03$. Значения теплоемкости и восприимчивости рассчитывались из флуктуаций энергии и магнитного момента соответственно: $C = \frac{1}{NT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$, $\chi = \frac{1}{T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$. Значение температуры фазового перехода близко к (11.155), различие связано с конечностью размера системы. Различие значений критической температуры, определенных по теплоемкости

(рис. 11.31, с) и восприимчивости (рис. 11.31, d), объясняется ненулевым значением внешнего магнитного поля.

Заметим, что результаты на рис. 11.31, с для теплоемкости хорошо согласуются с теоретическим результатом Онзагера (11.166).

11.5.2. Решеточный газ

Следует отметить, что рассмотренное выше моделирование спиновой системы неявно учитывало условия большого канонического ансамбля, т.е. переменного числа частиц. Роль числа частиц играла суммарная проекция спина системы на ось z , которая менялась в процессе моделирования. Так как эта величина является инвариантом модели (см. гл. 7), то алгоритм Монте-Карло может быть реализован и с сохранением суммарной проекции спина, т.е. в условиях канонического ансамбля. Такое моделирование предложил, например, Кавасаки [48], в этом алгоритме (он называется «динамикой Кавасаки») происходят одновременные перевороты пар противоположных спинов, что не изменяет полного спина системы.

Теперь рассмотрим алгоритм Монте-Карло, **явно** учитывающий большой канонический ансамбль и переменное число частиц; для реализации этого алгоритма потребуется некоторая модификация принципа детального баланса.

11.5.2.1. Формулировка модели и некоторые аналитические результаты

Рассмотрим простую кубическую (или квадратную) решетку с числом узлов $N_a = L_x \times L_y \times L_z$ (или, соответственно, $N_a = L_x \times L_y$). Каждому узлу решетки поставим в соответствие числа заполнения $n_i = 0; 1$, моделирующие нахождение или отсутствие частицы в данном узле (рис. 11.32). Полное число состояний в системе совпадает с числом состояний в модели Изинга: 2^{N_a} . Граничные

условия можно выбрать либо периодическими, либо нулевыми (в этом случае частицы не пересекают границы решетки). Для достаточно большой системы влиянием граничных условий на термодинамику системы можно пренебречь.

Данная постановка задачи напоминает рассмотренную в начале главы задачу перколяции, однако, в отличие от простой стохастической схемы для идеальных невзаимодействующих частиц, здесь будем рассматривать **газ взаимодействующих частиц** на решетке и применим для реализации алгоритма схему Метрополиса.

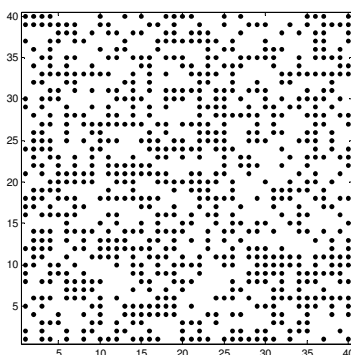


Рис. 11.32. Модель решеточного газа на квадратной решетке 40×40 . Точки соответствуют узлам решетки, занятым частицами

Пусть взаимодействие частиц друг с другом V_{ij} носит ван-дер-ваальсовский характер, так чтобы на бесконечности частицы притягивались, а сблизиться им мешало очень сильное отталкивание. Пример такого взаимодействия – потенциал Леннарда – Джонса (или потенциал "6–12") между атомами инертных газов (рис. 11.33), физическая причина которого – наведенное диполь-дипольное взаимодействие:

$$V_{ij} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^6 \right], \quad (11.170)$$

здесь ϵ, σ – параметры потенциала: характерный масштаб энергии и характерное межчастичное расстояние.

Взаимодействие V_{ij} не обязательно должно иметь вид (11.170). Можно рассмотреть и другие, достаточно сложные формы межчастичного взаимодействия. Схема алгоритма Монте-Карло при этом не изменится. В этом состоит одно из важных преимуществ метода Монте-Карло.

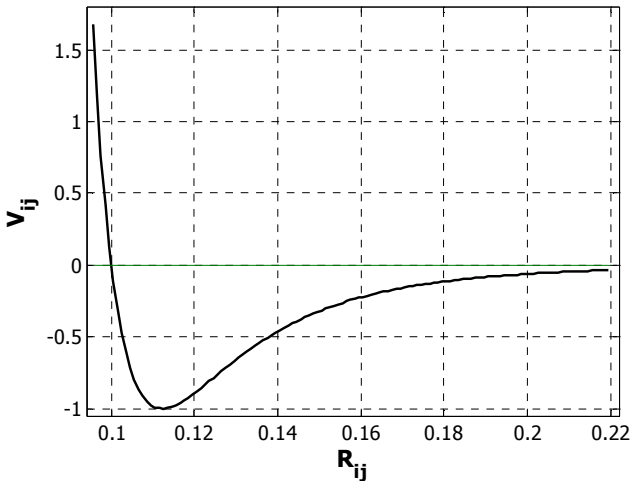


Рис. 11.33. Потенциал Леннарда – Джонса для параметров $\epsilon = 1$; $\sigma = 0.1$

Определим безразмерную плотность частиц в такой постановке задачи как

$$\rho = \frac{\left\langle \sum_i n_i \right\rangle}{N_a} = \frac{N}{N_a}, \quad (11.171)$$

здесь N – среднее полное число частиц в системе (число занятых узлов), угловые скобки означают термодинамическое усреднение. Соответственно, за объем системы выбрано число пространственных узлов решетки N_a . Модельный гамильтониан, описывающий систему, представляется следующим выражением:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} n_i n_j - \mu \sum_i n_i. \quad (11.172)$$

Химический потенциал μ отвечает переменному числу частиц в системе и является функцией внешнего давления P . Можно аналитически связать величины μ и P через термодинамические соотношения:

$$N \partial \mu = V \partial P;$$

$$V \equiv N_a \Rightarrow \frac{\partial \mu}{\partial P} = \frac{N_a}{N} \Rightarrow \frac{\partial \mu}{\partial P} = \frac{\partial \mu}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial P} \Rightarrow \frac{\partial \mu}{\partial \rho} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \rho} \Rightarrow$$

$$P(\rho) = \rho \mu(\rho) - \int_0^\rho \mu(\rho') d\rho'. \quad (11.173)$$

В последнем соотношении в (11.173) учтено, что $P \rightarrow 0$ при $\rho \rightarrow 0$.

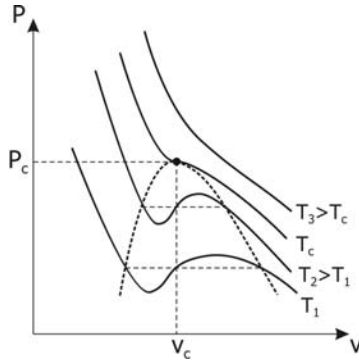


Рис. 11.34. Качественный рисунок изотерм, описываемых уравнением (11.175).

В области, обведенной пунктирной линией, реализуется равновесие жидкой и газообразной фаз с постоянным давлением, поэтому петля на изотермах в этой области неустойчива. На рисунке показана также трикритическая точка P_c, V_c, T_c

Известно решение модели (11.172) в приближении среднего поля (см., например, [10]). В этом приближении химический потенциал связан с плотностью и температурой следующим соотношением

$$\mu = -\rho u(0) - T \ln \frac{1-\rho}{\rho}; \quad u(0) = \sum_j V_{ij}, \quad (11.174)$$

а уравнение состояния имеет вид

$$P = -\frac{\rho^2}{2} u(0) - T \ln(1 - \rho), \quad (11.175)$$

которое описывает изотермы, качественно совпадающие с изотермами модели Ван-дер-Ваальса (рис. 11.34).

Решеточная модель, таким образом, описывает фазовый переход первого рода "жидкость – газ", так что система переходит из области $\rho \approx 0$ (предел идеального газа) в область $\rho \approx 1$ (предел несжимаемой жидкости) по изотермам, показанным на рис. 11.34.

Трикритическая точка (см. рис. 11.34), характеризующаяся условиями

$$\frac{\partial P}{\partial v} = 0; \quad \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} = 0; \quad v = \frac{1}{\rho}, \quad (11.176)$$

отвечает температуре, выше которой не реализуется фазового перехода (существует только газовое состояние); в приближении среднего поля, согласно уравнению состояния (11.175), эта ситуация возникает при следующих значениях плотности, давления и температуры:

$$\rho_c = \frac{1}{v_c} = \frac{1}{2}; \quad T_c = \frac{u(0)}{4}; \quad P_c = \frac{u(0)}{4} \left(\ln 2 - \frac{1}{2} \right). \quad (11.177)$$

11.5.2.2. Реализация алгоритма Монте-Карло

Модель (11.172) диагональна в базисе чисел заполнения $|\Omega_{nN}\rangle = |n_1^{(nN)}, n_2^{(nN)}, \dots, n_{N_a}^{(nN)}\rangle$, поэтому для каждой пространственной конфигурации Ω_{nN} и заданного числа частиц N энергия системы будет равна

$$E_{nN} = \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} n_i^{(nN)} n_j^{(nN)} - \mu \sum_i n_i^{(nN)}. \quad (11.178)$$

Для практического использования метода Монте-Карло необходимо реализовать принцип детального равновесия в условиях переменного числа частиц, т.е. в условиях большого канонического ансамбля. Для этого элементарные шаги Монте-Карло разобьем на

типы **подпроцессов**. Все подпроцессы также представим как **прямые** и **обратные**.

В рассматриваемой модели решеточного газа для эффективного перебора состояний системы достаточно ввести два типа подпроцессов:

- 1) **движение** частиц (**move**); соответствующие этому типу вероятности перехода обозначим как W^m ;
- 2) **рождение** (**creation**) и **уничтожение** (**annihilation**) частиц с вероятностями перехода, соответственно, W^c и W^a .

Подпроцессы движения являются сразу и прямыми, и обратными, так как движение частицы $i \rightarrow j$ с узла i на узел j обратно движению $j \rightarrow i$. Процедура рождения частицы обратна процедуре уничтожения частицы. Необходимо потребовать, чтобы принцип детального равновесия выполнялся отдельно для каждого типа подпроцессов, т.е. **соотношение детального баланса должно быть выполнено для каждой пары прямой и обратной процедур внутри одного типа подпроцессов**, независимо от других типов подпроцессов. Для подпроцессов движения уравнение детального баланса выглядит следующим образом:

$$W_{i \rightarrow j}^m P(i) = W_{j \rightarrow i}^m P(j), \quad (11.179)$$

где $P(i)$ – статистический вес состояния с занятым узлом i . Число частиц при движении частиц не изменяется, поэтому вторая пара подпроцессов рождения и уничтожения частиц не влияет на детальный баланс (11.179). Выберем стандартную схему Метрополиса, удовлетворяющую этому детальному балансу:

$$W_{i \rightarrow j}^m = \begin{cases} \frac{P(\Omega_j)}{P(\Omega_i)} = e^{-\beta(E_j - E_i)}, & E_i < E_j; \\ 1, & E_i \geq E_j. \end{cases} \quad (11.180)$$

При реализации процедур рождения и уничтожения частиц следует обратить внимание на следующее обстоятельство. Пусть в системе есть N частиц, и схема Монте-Карло обращается к процедуре рождения частицы на каком-либо узле решетки. При этом из всего массива узлов N_a случайным образом с вероятностью $p_c = 1/N_a$ выбирается узел, на котором будет реализована попытка рождения

частицы. Если эта попытка окажется успешной, в системе появится новая частица на выбранном узле, и общее число частиц в системе станет $N+1$. Если теперь схема Монте-Карло обратится к процедуре уничтожения частицы на каком-либо узле, то, аналогично, с вероятностью $p_a = 1/N_a$ можно обратиться к случайному узлу решетки, на котором будет реализована попытка уничтожения частицы. Однако, если число частиц в системе много меньше числа узлов, $N \ll N_a$, то процедура уничтожения частиц будет малоэффективной – при выборе узлов с большой вероятностью будут попадаться свободные узлы, на которых нельзя уничтожить частицу. В этом случае предпочтительнее выбирать случайным образом узел из множества **занятых узлов**, вероятность обращения к таким узлам будет $p_a = 1/(N+1)$, так как в системе в данный момент имеется $N+1$ частица. Как видно, при таком выборе $p_a \neq p_c$ (для сравнения, аналогичные вероятности для подпроцессов движения совпадают, именно поэтому они сокращаются и не присутствуют в уравнении детального баланса (11.179)). Для соблюдения детального равновесия необходимо внести вероятности обращения к узлам решетки p_a и p_c **непосредственно** в балансовое соотношение, так что для пары подпроцессов рождения и уничтожения имеем:

$$W_{N \rightarrow N+1}^c p_c(N)P(N) = W_{N+1 \rightarrow N}^a p_a(N+1)P(N+1), \quad (11.181)$$

где $P(N)$ – статистический вес конфигурации системы с N частицами, а вероятности обращения равны

$$p_c(N) = \frac{1}{N_a} = \text{const};$$

$$p_a(N) = \frac{1}{N}. \quad (11.182)$$

Выбор вероятностей перехода, удовлетворяющих соотношению (11.181), может быть, например, таким:

$$W_{N \rightarrow N+1}^c = \begin{cases} W_N^+ = \tau \frac{p_a(N+1)}{p_c(N)} \frac{P_{N+1}}{P_N} = \frac{\tau N_a}{N+1} e^{-\beta[E(N+1)-E(N)]}, & W_N^+ < 1; \\ 1, & W_N^+ \geq 1; \end{cases} \quad (11.183)$$

$$W_{N \rightarrow N-1}^a = \begin{cases} W_N^- = \frac{1}{\tau} \frac{p_c(N)}{p_a(N-1)} \frac{P_{N-1}}{P_N} = \frac{N-1}{\tau N_a} e^{-\beta[E(N-1)-E(N)]}, & W_N^- < 1; \\ 1, & W_N^- \geq 1. \end{cases}$$

Легко заметить, что величина вероятности уничтожения W^- равна обратной вероятности рождения, $W^- = 1/W^+$, как если бы после рождения была сделана попытка именно эту родившуюся частицу уничтожить.

Задача 11.7. Убедиться прямой подстановкой, что соотношения (11.183) удовлетворяют уравнению баланса (11.181).

Множитель τ , входящий в (11.183), является произвольным и дает дополнительную степень свободы; его выбор (обычно $\tau \sim 1$) позволяет несколько оптимизировать обновление конфигураций. Заметим также, что множители $N \pm 1$ в выражениях для W^c и W^a «отслеживают» постоянно флуктуирующее число частиц в процессе работы алгоритма Монте-Карло.

На рис. 11.35 представлена схема алгоритма Монте-Карло для расчета модели решеточного газа.

Вначале формируется произвольная стартовая конфигурация, например, можно просканировать всю решетку и с вероятностью $1/2$ заполнить каждый из узлов частицей, а можно обнулить все числа заполнения. От начальной конфигурации результаты не зависят. Далее рассчитывается энергия начальной конфигурации E_0 , число частиц N , и запоминаются массив чисел заполнения и массив занятых частицами узлов. После формирования стартовой конфигурации начинается собственно алгоритм Монте-Карло. На каждом шаге Монте-Карло случайным образом выбирается один из возможных подпроцессов: движение, рождение или уничтожение. Суммарная вероятность выбора какого-либо подпроцесса должна быть равна единице, т.е.

$$P\{\text{движение}\} + P\{\text{рождение}\} + P\{\text{уничтожение}\} = 1. \quad (11.184)$$

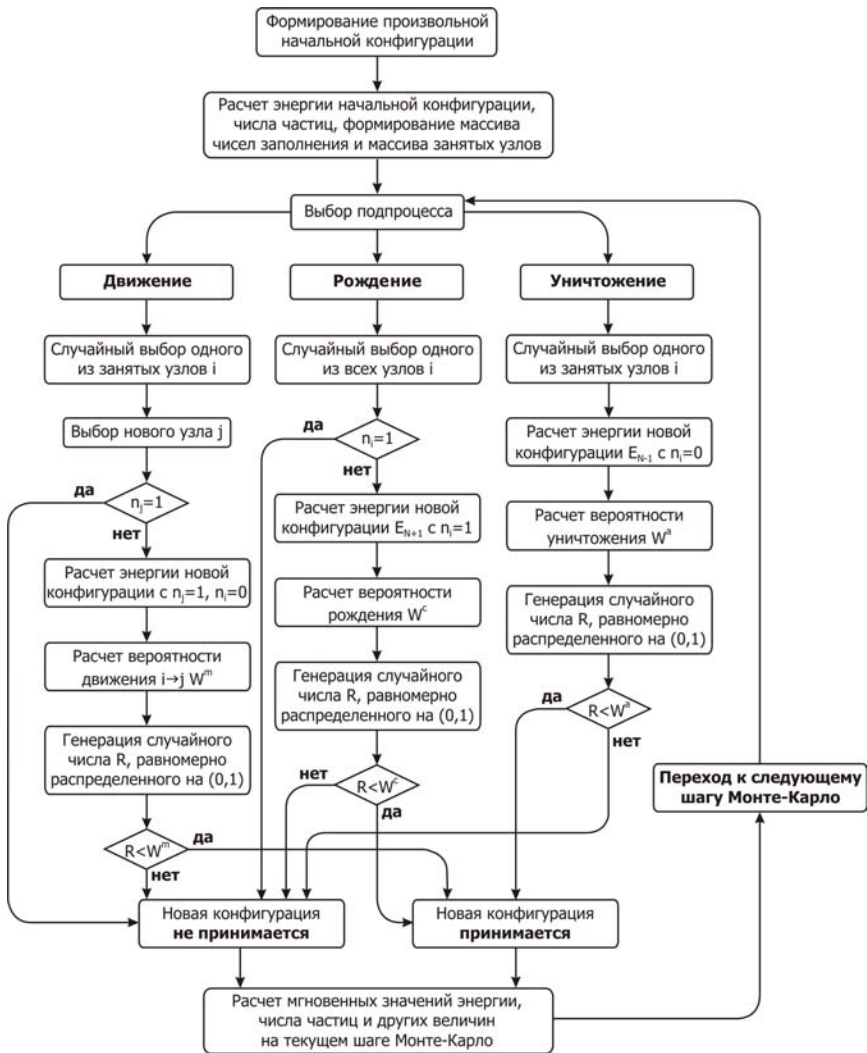


Рис. 11.35. Схема алгоритма Монте-Карло для расчета модели решеточного газа

Кроме того, необходимо, чтобы вероятности выбора прямой или обратной процедур, отвечающих одному подпроцессу, были равны:
 $P\{\text{рождение}\} = P\{\text{уничтожение}\}.$ (11.185)

Например, если потребовать, чтобы подпроцесс "движение" выбирался с вероятностью $\frac{1}{2}$, то тогда вероятность подпроцесса "рождение-уничтожение" также будет равна $\frac{1}{2}$, а вероятности прямой и обратной процедур, входящих в этот подпроцесс, т.е. вероятности выбора рождения или уничтожения, будут равны $\frac{1}{4}$.

Конкретные значения вероятностей в (11.184) являются дополнительными свободными параметрами, которые можно варьировать для увеличения эффективности расчета.

Если выбран подпроцесс "движение", то далее случайным образом выбирается один из заполненных узлов i , а затем случайным образом выбирается новое положение частицы – узел j (если прыжки частиц разрешены только на ближайшие узлы, то узел j должен выбираться из множества ближайших соседей узла i). Если после определения узла j оказывается, что он уже занят, т.е. $n_j = 1$, то процедура движения не реализуется и система остается в текущей конфигурации. Если же $n_j = 0$, то рассчитывается энергия новой конфигурации, в которой $n_i = 0$ и $n_j = 1$. Затем рассчитывается вероятность реализации движения $W_{i \rightarrow j}^m$ согласно (11.180). Далее происходит генерация случайного числа R , равномерно распределенного на отрезке $(0,1)$, и если $W_{i \rightarrow j}^m > R$, новая конфигурация принимается, если нет, частица остается на узле i . В любом случае, поменяла ли частица свое положение или осталась на узле i , происходит вычисление и запоминание в соответствующие массивы мгновенных значений всех рассчитываемых в алгоритме физических величин на данном шаге алгоритма.

Если выбран подпроцесс рождения частицы, то случайным образом выбирается один узел i из всех узлов решетки (вероятность выбора конкретного узла будет, таким образом, $p_c = 1/N_a$). Если после выбора узла i окажется, что $n_i = 1$, т.е. этот узел занят и рождение частицы невозможно, то процедура рождения не реализуется, и система остается в текущей конфигурации. Если же $n_i = 0$, то рассчитывается энергия новой конфигурации, в которой $n_i = 1$, а затем рассчитывается вероятность реализации рождения W^c

согласно (11.183). Далее происходит генерация случайного числа R , равномерно распределенного на отрезке $(0,1)$, и если $W^c > R$, новая конфигурация принимается, если нет, частица на узле i не рождается. Вне зависимости от того, произошло ли рождение частицы на узле i или нет, происходит вычисление и запоминание в соответствующие массивы мгновенных значений всех рассчитываемых в алгоритме физических величин на данном шаге алгоритма.

Если выбран подпроцесс уничтожения частицы, то случайным образом определяется один узел i из всех заполненных узлов решетки (вероятность выбора конкретного узла будет, таким образом, $p_a = 1/N$, где N – число частиц в системе на данный момент). Затем рассчитываются энергия нового состояния, в котором $n_i = 0$, и вероятность реализации уничтожения W^a согласно (11.183). Далее происходит генерация случайного числа R , равномерно распределенного на отрезке $(0,1)$, и если $W^a > R$, частица на узле i уничтожается, в противном случае – остается текущее число частиц. Вне зависимости от того, произошло ли уничтожение частицы на узле i или нет, происходит вычисление и запоминание в соответствующие массивы мгновенных значений всех рассчитываемых в алгоритме физических величин на данном шаге алгоритма.

Число шагов в алгоритме Монте-Карло определяется достижением необходимой сходимости рассчитываемых величин. Оценка погрешности расчета будет обсуждаться далее.

Для модели решеточного газа процедура Монте-Карло позволяет при любом виде межчастичного взаимодействия V_{ij} рассчитать фазовую диаграмму "жидкость – газ", и, в частности, построить изотермы. Порядок расчета изотерм следующий. При заданной температуре T меняется внешний параметр – химический потенциал μ в (11.169). Каждый расчет Монте-Карло при конкретных значениях μ и T определяет среднее число частиц $\langle N \rangle$

в системе, и, соответственно, плотность $\rho(\mu) = \rho(\langle N \rangle) = \frac{\langle N \rangle}{N_a}$. Из

зависимости $\rho(\mu)$ вычисляется значение давления, которое, согласно (11.173), можно представить не только как функцию ρ , но и как функцию μ (с точностью до аддитивной постоянной C):

$$P(\mu) = \int_{\mu_0}^{\mu} \rho(\mu') d\mu' + C. \quad (11.186)$$

Значение параметра μ_0 следует выбирать как нижнюю границу области сканирования по μ , эту величину можно, например, выбрать согласно приближению среднего поля (11.175) как значение химического потенциала, отвечающее достаточно малой плотности $\rho = \rho_{\min} \leq 0.1$:

$$\mu_0 = -\rho_{\min} u(0) - T \ln \left(\frac{1}{\rho_{\min}} - 1 \right). \quad (11.187)$$

Согласно уравнению состояния в приближении среднего поля (11.175), величина давления в этой точке также будет мала, поэтому с хорошей точностью аддитивной постоянной в (11.187) можно пренебречь.

Таким образом, рассчитывая для ряда значений μ при постоянной температуре T плотность ρ и, соответственно, единичный объем $v = \frac{1}{\rho}$, и вычисляя давление P согласно (11.186), можно построить изотермы в модели решеточного газа.

На рис. 11.36 показаны рассчитанные методом Монте-Карло изотермы решеточного газа для двумерной решетки 100×100 . Для расчета был выбран потенциал Леннарда – Джонса (11.170) с параметрами $\varepsilon = 1$, $\sigma = 3$ (предполагается, что все энергетические величины и температуры в задаче обезразмерены на величину ~ 0.01 эВ, и размер пространственной ячейки в модели равен 1 \AA). Для моделирования зародыша жидкой фазы в систему вводилась одна примесь в виде потенциальной ямы с потенциалом притяжения $V_{\text{imp}}(r) = -2\text{ch}^{-2}(r)$. Давление P рассчитывалось из соотношения (11.186), при этом постоянная C определялась из минимального значения химического потенциала $\mu_0 \cong -0.2 \div -0.25$,

при котором плотность практически была равна нулю. В этом пределе, согласно (11.174) – (11.175), находим

$$C = P(\mu_0)_{\rho_{\min} \rightarrow 0} \cong T e^{\mu_0 / T}. \quad (11.188)$$

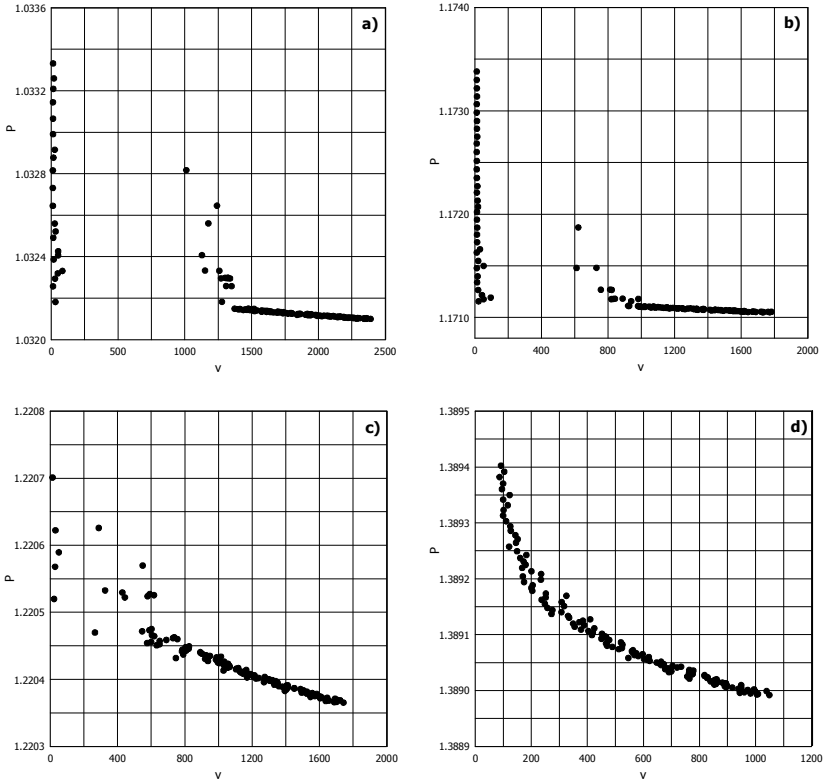


Рис. 11.36. Изотермы решеточного газа для двумерной решетки 100×100 , рассчитанные методом Монте-Карло при температуре: **a)** $T = 1.3$; **b)** $T = 1.4$; **c)** $T = 1.45$; **d)** $T = 1.55$

Моделирование проводилось посредством изменения химического потенциала μ , начиная от значения μ_0 , с шагом 0.001. Расчет состоял из $\sim 10^7$ элементарных шагов Монте-Карло для каждой точки на графиках. На рис. 11.36 показаны результаты для четырех

значений температуры системы. По оси абсцисс отложен единичный объем $v = 1/\rho$.

Проанализируем полученные данные. При достаточно низкой температуре $T = 1.3$ (рис. 11.36,а) в диапазоне $20 < v < 1300$, $1.0322 < P < 1.0328$ заметна область неоднозначности, в которой система может находиться как в жидкой плотной фазе ($v \sim 20$), так и в менее плотной газообразной ($v \sim 1300$). При расчете **в зависимости от начального случайного распределения частиц** зародыш жидкой фазы либо зацеплялся за достаточно слабую введенную в модель примесь V_{imp} , либо не успевал этого сделать, что привело к появлению обеих фаз на графике. Если бы примесей было больше, то система сразу перешла бы в плотную жидкую фазу, и получить ван-дер-ваальсовские ветви не удалось бы.

При повышении температуры до $T = 1.4$ (рис. 11.36, b) область неоднозначности заметно сжимается по диапазону объемов, теперь $25 < v < 800$, и затем при более высоких температурах (рис. 11.36, c и 11.21, d) исчезает, так что система все время остается в газообразной фазе. Значение температуры в трикритической точке можно оценить как $T_c \approx 1.5$, что хорошо согласуется с расчетом в приближении среднего поля.

11.5.3. Моделирование вихревой структуры в высокотемпературных сверхпроводниках

Здесь рассмотрим достаточно сложный пример моделирования методом Монте-Карло – расчет решетки Абрикосова в сверхпроводниках. Дело в том, что для корректного описания процессов перемагничивания, наблюдаемых экспериментально в сверхпроводящем состоянии, оказывается необходимым ввести в схему Монте-Карло несколько "сортов" частиц, взаимодействующих между собой, и количество подпроцессов в алгоритме возрастает. Более того, корректный учет границы сверхпроводника приводит к дополнительным сложностям. Покажем, как в такой ситуации

реализовать схему Монте-Карло и правильно учесть детальный баланс.

11.5.3.1. Формулировка модели и некоторые аналитические и экспериментальные данные

Прежде чем переходить к математическим аспектам проблемы, кратко опишем достаточно сложную физическую постановку задачи, при этом не будем касаться описания самого явления сверхпроводимости (подробности см., например, в [19, 20]).

Известно, что в сверхпроводниках второго рода (типичные представители таких сверхпроводников – NbN , Nb_3Sn , $NbTi$, а также **все** высокотемпературные соединения) при промежуточных магнитных полях $H_{c1} < H < H_{c2}$ ($H_{c1} \sim 100 \div 400$ Э; $H_{c2} \cong 20 \div 100$ Тл) существует, помимо мейснеровского состояния, характеризующегося идеальным диамагнетизмом, так называемое **смешанное** или **вихревое** состояние. Кривые намагничивания сверхпроводника второго рода показаны на рис. 11.37.

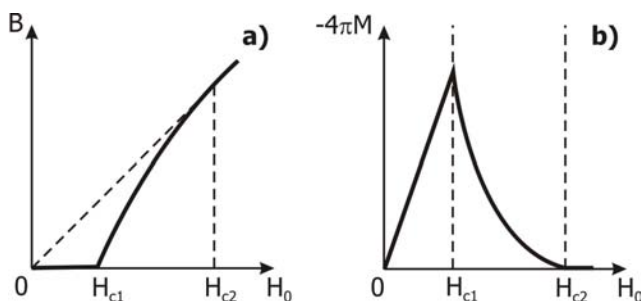


Рис. 11.37. Кривые намагничивания сверхпроводника второго рода:

а) зависимость магнитной индукции B от внешнего поля H_0 ;

при $H < H_{c1}$ $B = 0$ – мейснеровское состояние;

б) зависимость плотности магнитного момента от H_0 ; $M = (B - H) / 4\pi$ при $H < H_{c1}$

Смешанное состояние характеризуется частичным проникновением магнитного потока в область сверхпроводника, при этом проникновение происходит через области нормальной фазы

цилиндрической геометрии, называемые **флюксоидами**, или **вихрями Абрикосова**, по имени российского ученого, лауреата Нобелевской премии А.А. Абрикосова, предсказавшего и описавшего это физическое явление.

Размер нормальной области (кора вихря) мал ($\xi \sim 50 \div 100 \text{ \AA}$), при этом вихрь окружен вихревыми экранирующими токами на гораздо большем расстоянии $\lambda \sim 2000 \text{ \AA}$ (рис. 11.38).

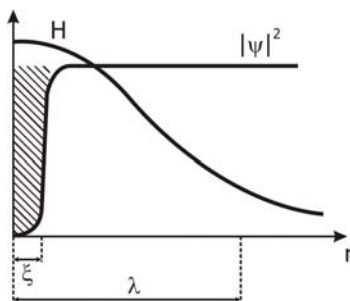


Рис. 11.38. Структура вихря в сверхпроводнике. Распределение параметра порядка $|\psi|^2$ сверхпроводника и создаваемого вихрем магнитного поля (см. (11.189)).

Заштрихованная область – кор вихря – область нормального состояния

Величина ξ называется **сверхпроводящей корреляционной длиной**, а λ – **глубиной проникновения** магнитного поля. Внутри вихря, в нормальной области, магнитное поле максимально, вне вихря оно спадает на расстоянии $\sim \lambda$. Каждый вихрь несет в

себе квант магнитного потока $\Phi_0 = \frac{\pi \hbar c}{e} = 2.07 \cdot 10^{-7} \text{ Гс} \cdot \text{см}^2$, при

этом при низких температурах в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, вихри образуют плоскую треугольную структуру (рис. 11.39), и двумерная плотность вихрей n_f определяется индукцией магнитного поля, так что $n_f = B / \Phi_0$.

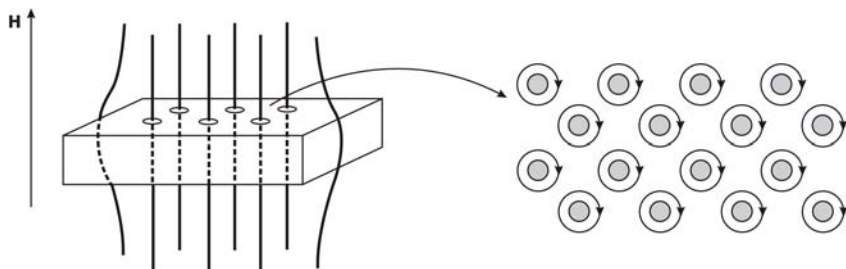


Рис. 11.39. Вихревое состояние сверхпроводника второго рода. Вихри образуют правильную треугольную решетку. В сердцевинах вихрей – нормальное состояние

Распределение магнитного поля как функции радиального расстояния от центра вихря в цилиндрической геометрии подчиняется следующему соотношению:

$$B(\rho) = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} K_0\left(\frac{\rho}{\lambda}\right), \quad (11.189)$$

где K_0 – функция Макдональда (или функция Бесселя мнимого аргумента), при малых значениях аргумента она логарифмически возрастает, а при больших значениях экспоненциально падает:

$$K_0(x)|_{x \rightarrow 0} \approx \ln\left(\frac{1}{x}\right);$$

$$K_0(x)|_{x \rightarrow \infty} \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{-x}. \quad (11.190)$$

Экспериментально решетку Абрикосова напрямую наблюдают на сколах кристаллов сверхпроводников методом магнитного декорирования (распылением мелкодисперсного ферромагнитного порошка). Также вихревые структуры можно анализировать по дифракции нейтронов над сверхпроводником благодаря наличию у нейтрона магнитного момента. Более современные методы наблюдения вихревой решетки – мюонная спектроскопия (распад мюона в твердом теле $\mu^+ \rightarrow e^+ + \gamma_\mu + \gamma_e$), магнитооптические исследования на основе эффекта Фарадея и сканирующая холловская микроскопия (системы миниатюрных холловских датчиков).

Кривые намагничивания сверхпроводника (см. рис. 11.37, b) экспериментально получают напрямую, измеряя его отклик на внешнее поле – магнитный момент

$$M = \frac{B - H}{4\pi}. \quad (11.191)$$

Исследование вихревого состояния в сверхпроводниках – чрезвычайно актуальная задача, так как все перспективные сверхпроводящие соединения, в том числе и открытые в 1986 г. высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП), являются сверхпроводниками второго рода. При наличии транспортного тока в сверхпроводнике собственное поле тока, как правило, больше нижнего критического поля H_{c1} , и сверхпроводник сразу же переходит в вихревое состояние. Все транспортные и магнитные свойства сверхпроводников, таким образом, определяются динамикой вихревой структуры квантов магнитного потока, взаимодействие которых между собой, с дефектами и с границей сверхпроводника определяет величину критического тока, омические и гистерезисные потери, форму вольт-амперной характеристики и петель перемагничивания.

Особый случай – высокотемпературные соединения, которые характеризуются сильной анизотропией проводящих и сверхпроводящих свойств. Для задачи моделирования вихревой структуры **упрощенно** можно представить такой сверхпроводник как набор сверхпроводящих слоев (плоскостей), вдоль которых сверхпроводящие свойства высоки, а межслоевое пространство имеет существенно подавленные сверхпроводящие характеристики. Моделирование проводится при направлении магнитного поля, перпендикулярного слоям.

Вихрь Абрикосова, представляющий из себя вихревой ток, пронизывающий сверхпроводящие слои (рис. 11.40), имеет существенно разные упругие свойства внутри сверхпроводящего слоя и вне его, такому магнитному образованию можно приписать тензор упругих постоянных. Вне слоя вихрь более "рыхлый", а внутри имеет более высокие упругие свойства. При возрастании температуры вихри начинают переплетаться вне сверхпроводящих слоев, теряют упорядочение и межслоевую когерентность

(см. рис. 11.40), в то время как внутри слоев все еще сохраняется упорядочение (треугольная решетка) (так называемый **фазовый переход «3D – 2D»** или **decoupling**). При температурах $T \geq 10 \text{ K}$, на порядок более низких по сравнению с критической (а в висмутовых ВТСП, например в $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$, критическая температура равна $T_c \approx 110 \text{ K}$), система практически превращается в совокупность невзаимодействующих сверхпроводящих слоев, внутри которых пронизывающие их части вихрей имеют вид плоских "блинов" ("**pancakes**"), которые сильно взаимодействуют друг с другом внутри слоя и практически не взаимодействуют с соседними слоями.

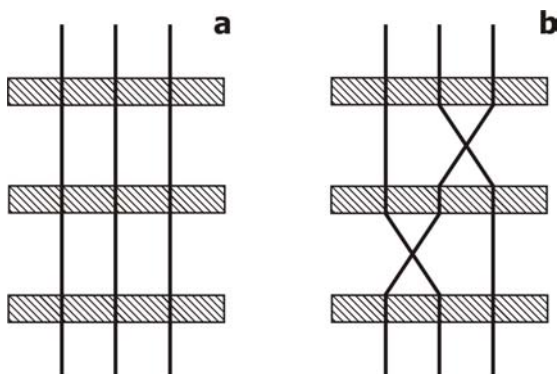


Рис. 11.40. Вихрь Абрикосова имеет существенно разные упругие свойства внутри сверхпроводящих слоев (заштрихованные области) и вне их. Случай **a** отвечает температуре $T \ll T_c$; при возрастании температуры до значений $T \sim T_c$ (случай **b**) вихри начинают переплетаться вне сверхпроводящих слоев, в то время как внутри слоев все еще сохраняется треугольная решетка

Выбрав один из сверхпроводящих слоев для исследования, можно написать модельный гамильтониан для плоских вихрей (pancakes) и сформулировать алгоритм Монте-Карло для этой системы. Так как из-за потери когерентности между слоями вклад каждого слоя в общие свойства системы будет аддитивен, то моделирование одной плоскости с хорошей точностью будет аналогично расчету усредненного отклика всех слоев. Как будет видно далее, из-за сложности взаимодействий данная задача принципиально не поддается аналитическому решению. Такую

сильнокоррелированную двумерную задачу наиболее корректно рассчитывать численными стохастическими методами.

Прежде всего приведем выражения для собственной энергии вихрей, энергии взаимодействия вихрей между собой, с дефектами структуры и с границей сверхпроводника (см. [19, 20]). В модели также будет использоваться следующая температурная зависимость глубины проникновения магнитного поля от температуры, хорошо аппроксимирующая экспериментальные данные по висмутовым ВТСП:

$$\lambda \equiv \lambda(T) = \lambda_0 \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3.3} \right)^{-1/2}; \quad \lambda_0 \equiv \lambda(T = 0). \quad (11.192)$$

Такая же температурная зависимость предполагается и у сверхпроводящей длины, при этом обозначают $\xi(T = 0) \equiv \xi_0$.

Собственная энергия вихревой нити (на единицу длины нити) равна (см., например, [49])

$$\varepsilon = \left(\frac{\Phi_0}{4\pi\lambda} \right)^2 \left(\ln \frac{\lambda_0}{\xi_0} + 0.52 \right), \quad (11.193)$$

это энергия, заключенная в магнитном поле, пронизывающем нормальную область (кор) вихря.

Энергия взаимодействия двух вихревых нитей описывается следующим выражением:

$$U_{ij} = U_0 K_0 \left(\frac{r_{ij}}{\lambda} \right); \quad U_0 = \frac{(\bar{\Phi}_0)_1 (\bar{\Phi}_0)_2}{8\pi^2 \lambda^2} \delta, \quad (11.194)$$

здесь δ – толщина сверхпроводящего слоя, $\bar{\Phi}_0 = \Phi_0 n$; $n = \pm 1$ – знак магнитного поля, создавшего вихрь. Как видно из (11.194), вихри одного знака отталкиваются ($U_{ij} > 0$), как и полагается вихревым токам с одинаковым направлением закрутки (рис. 11.41).



Рис. 11.41. Взаимодействие вихрей.

Вихри разных знаков притягиваются, одного знака – отталкиваются

Характерный масштаб межвихревого взаимодействия – длина λ . Эта величина также отражает общий характерный масштаб всех взаимодействий в системе.

Энергия взаимодействия уединенного вихря с плоской границей сверхпроводника

$$U_{\text{surf}}(x) = -\frac{1}{2} U_0 K_0 \left(\frac{2x}{\lambda} \right), \quad (11.195)$$

где x – расстояние от вихря до границы (рис. 11.42).

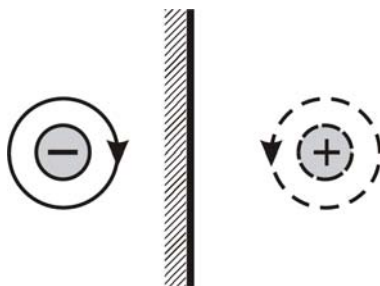


Рис. 11.42. Взаимодействие вихря с плоской границей сверхпроводника аналогично взаимодействию вихря со своим зеркальным изображением

Взаимодействие вихря с границей можно свести к взаимодействию вихря со своим зеркальным изображением – вихрем противоположного знака – антивихрем. Как следует из (11.185), вихрь притягивается к границе.

Необходимо учитывать также **взаимодействие вихря с дефектами**. Дефекты в данной модели будут представляться как локальные области с пониженными или нулевыми сверхпроводящими свойствами, и, соответственно, наличие таких областей энергетически невыгодно для сверхпроводящего состояния. Понизить энергию системы "вихрь – дефект" возможно, если вихрь совместит свой кор с дефектом (рис. 11.43). Это приведет к эффективному притяжению вихря к дефекту и зацеплению его на дефекте, это явление называется **пиннингом** (от англ. pin – булавка). В результате каждый дефект относительно

вихревой системы можно трактовать как локальную потенциальную яму.



Рис. 11.43. Притяжение вихря к дефекту

В рассматриваемой задаче будет выбран следующий вид взаимодействия вихря с дефектом:

$$U_p(r) = -\alpha |U_0(T)| \frac{1}{r/\xi + 1} e^{-\frac{r}{2\xi}}, \quad (11.196)$$

здесь α – безразмерный параметр, характеризующий глубину потенциальной ямы дефекта; r – расстояние между вихрем и дефектом. Такой выбор взаимодействия соответствует случаю, когда только один вихрь может зацепиться за дефект. Явление пиннинга вихревой решетки важно для описания транспортных свойств системы, так как при наличии транспортного тока запиннированные вихри не сдвигаются силой Лоренца, и в системе не происходит диссипации энергии вплоть до критических значений тока. Также при перемагничивании системы зацепленные дефектами вихри, имеющие противоположный полюс знак, будут оставаться в системе (так называемый **замороженный поток**), что приводит к гистерезисным явлениям.

Взаимодействие вихрей с мейсснеровским током на границе (рис. 11.44) **и транспортным током** описывается следующим образом. С любым внешним током плотностью \vec{j} вихрь взаимодействует посредством силы Лоренца, поэтому на единицу длины вихря имеем

$$f_L = \frac{1}{c} [\vec{j}, \vec{\Phi}_0]. \quad (11.197)$$

Мейсснеровский ток $j_m(x)$, созданный внешним магнитным полем H_0 , проникающим вглубь сверхпроводника на длину $\sim \lambda$ ($H(x) = H_0 e^{-x/\lambda}$), отталкивает вихрь от границы, при этом энергия

взаимодействия вихря с таким током на расстоянии x от плоской границы равна работе W_M тока над вихрем по перемещению вихря от границы на расстояние x , взятой с обратным знаком:

$$U_M = -W_M = \int_0^x f_L(x') dx' = \frac{H_0 \Phi_0}{4\pi} (e^{-x/\lambda} - 1). \quad (11.198)$$

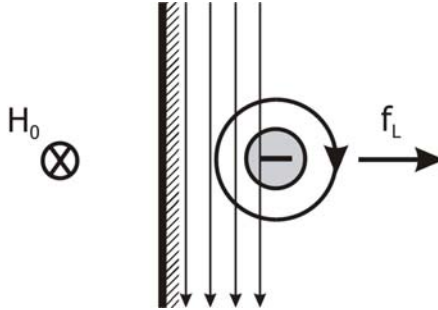


Рис. 11.44. Мейсснеровский ток, созданный внешним полем H_0 , отталкивает вихрь от поверхности

Плотность транспортного тока неравномерно распределена по сечению сверхпроводника, поэтому энергию взаимодействия вихрей с транспортным током U_T следует рассчитывать в зависимости от геометрии системы. Далее конкретизируем это взаимодействие.

Окончательно можно сформулировать модель системы вихрей в плоском сверхпроводящем слое ВТСП толщиной δ , представив их как **ансамбль классических частиц** на плоскости, взаимодействующих между собой, с дефектами, границей и токами согласно всем вышеперечисленным взаимодействиям:

$$\hat{H} = N \delta \varepsilon + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} + \sum_{j_{im}} U_p(r_{ij_{im}}) + U_{surf} + \delta (U_M + U_T), \quad (11.199)$$

здесь N – число вихрей в системе; $r_{ij_{im}} = |r_i - r_{j_{im}}|$ – расстояние от i -го вихря до j_{im} -го примесного центра. Отметим, что модель (11.199) сформулирована для переменного числа вихрей, т.е. для условий большого канонического ансамбля.

11.5.3.2. Метод Монте-Карло для сверхпроводящей ВТСП-пластины

Рассмотрим представленную ранее модель вихревой системы (11.199) для конкретного случая сверхпроводника в виде плоской пластины конечной толщины, т.е. будем полагать, что сверхпроводящие слои расположены в плоскости xy , вдоль оси x толщина пластины равна d ($-d/2 < x < d/2$), а вдоль оси y образец много больше по размерам: $L_y \gg d$, и для удобства вдоль оси y введены периодические граничные условия (рис. 11.45).

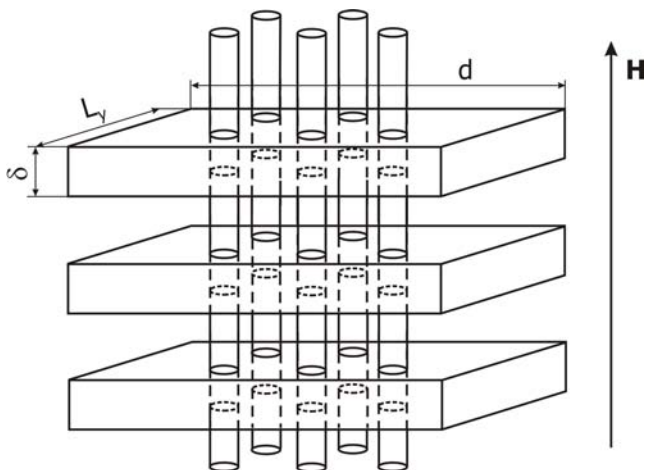


Рис. 11.45. Постановка задачи для моделирования сверхпроводящей ВТСП-пластины

Магнитное поле направим по оси z , перпендикулярно сверхпроводящим слоям и параллельно поверхности границы для исключения эффектов размагничивания [19, 20]. Предполагается, что толщина сверхпроводящего слоя вдоль оси z мала и сопоставима со сверхпроводящей корреляционной длиной, $\delta \sim \xi \ll \lambda$, в то время как толщина пластины вдоль оси x – макроскопическая величина: $d \sim 10 \div 20 \lambda \sim 20 \div 40$ мкм.

Рассмотрим теперь применительно к данной постановке задачи входящие в (11.199) слагаемые, отвечающие за взаимодействие вихрей с поверхностью сверхпроводника и с токами и зависящие от геометрии задачи [49].

Взаимодействие U_{surf} (11.195) для случая пластины толщины d с границами $x = -d/2$ и $x = d/2$ строго записывается в виде бесконечного ряда:

$$U_{\text{surf}}(x) = \frac{U_0}{2} \left(2 \sum_{j=1}^{\infty} K_0 \left(\frac{2jd}{\lambda} \right) - \sum_{j=0}^{\infty} \left(K_0 \left(\frac{2x + jd}{\lambda} \right) + K_0 \left(\frac{2(d-x) + jd}{\lambda} \right) \right) \right), \quad (11.200)$$

точно учитывающего граничное условие $B_n(x = \pm d) = 0$. Если пластина достаточно широкая ($d \gg \lambda$), то можно ограничиться только первыми слагаемыми ряда с $j = 0$:

$$U_{\text{surf}}(x) = -\frac{1}{2} U_0 \left(K_0 \left(\frac{2x}{\lambda} \right) + K_0 \left(\frac{2(d-x)}{\lambda} \right) \right). \quad (11.201)$$

Следует учесть также взаимодействие вихря с изображениями других вихрей:

$$U_{\text{surf}}(r_i, r_j) = -\frac{1}{2} U_0 K_0 \left(\frac{|r_i - r_j^{(\text{image})}|}{\lambda} \right), \quad (11.202)$$

где $r^{(\text{image})}$ – радиусы-векторы изображений вихрей.

Распределение плотности мейсснеровского и транспортного токов в пластине (рис. 11.46) представляется, соответственно, слагаемыми

$$j = -\frac{cH_0}{4\pi\lambda} \frac{\text{sh}(x/\lambda)}{\text{ch}(d/2\lambda)} + \frac{cH_1}{4\pi\lambda} \frac{\text{ch}(x/\lambda)}{\text{sh}(d/2\lambda)}, \quad (11.203)$$

где $H_1 = \frac{2\pi I}{c}$ – поле, создаваемое транспортным током на поверхности пластины; I – полный ток через поперечное сечение пластины [19, 20].

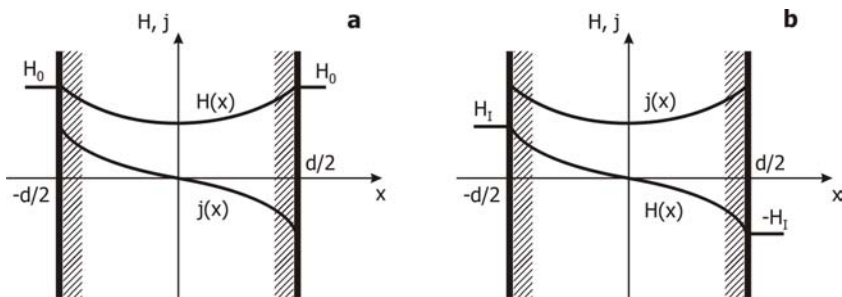


Рис. 11.46. Распределение в сверхпроводящей пластине внешнего магнитного поля и связанного с ним тока (а); распределение транспортного тока и создаваемого им магнитного поля (б)

Энергия взаимодействия вихря с токами рассчитывается через работу силы Лоренца ΔW_I на единицу длины вихря, совершенную токами над вихрем при его перемещении от края пластины вглубь образца [50]:

$$\begin{aligned}
 -(U_M + U_T) = \Delta W_I &= \frac{1}{4\pi} \int_{\pm \frac{d}{2}}^x \vec{j} \vec{\Phi}_0 dx = \\
 &= \frac{\vec{\Phi}_0}{4\pi} \left[\vec{H}_0 \left(1 - \frac{\text{ch}(x/\lambda)}{\text{ch}(d/2\lambda)} \right) + \vec{H}_1 \left(\frac{\text{sh}(x/\lambda)}{\text{sh}(d/2\lambda)} \mp 1 \right) \right],
 \end{aligned}
 \tag{11.204}$$

знак "минус" перед единицей берется в том случае, если вихрь появился справа (в положительной области оси x), плюс – в случае рождения вихря на левом краю пластины.

Следует отметить, что учет взаимодействия вихря со своим изображением у границы и взаимодействия с мейсснеровским током естественным образом моделирует известный барьер Бина – Ливингстона для проникновения вихря с границы образца [20].

Элементарные шаги Монте-Карло следует для данной задачи также разбить на несколько типов подпроцессов. Дело в том, что в системе могут одновременно существовать вихри разных знаков. При перемагничивании (т.е. смене знака поля или тока) вихри одного знака, зацепленные за дефекты ("запиннигованные"), могут остаться в пластине, в то время как вихри противоположного знака, возникающие с границ сверхпроводника, начнут

продвигаться вглубь пластины. В такой ситуации возможно, что вихрь и антивихрь могут оказаться на небольшом расстоянии друг от друга, и им энергетически выгодно будет аннигилировать. Соответственно, следует допустить возможность таких подпроцессов. Более того, согласно рис. 11.46, в присутствии транспортного тока обязательно возникают созданные полем тока вихри разных знаков, которые будут проникать вглубь пластины с левой и правой границ, и взаимно аннигилировать вблизи центра системы.

Перечислим все подпроцессы, необходимые для создания эргодической схемы Монте-Карло для эффективного перебора состояний системы.

1. Движение вихря. Для реализации этого подпроцесса из имеющегося массива случайным образом выбирается вихрь и делается попытка переместить его на расстояние $\sim \lambda$ в произвольном направлении. Вероятности перехода рассчитываются согласно алгоритму Метрополиса аналогично (11.180).

2. Рождение вихря. "Зона рождения" определяется как приграничная полоса шириной $\sim \lambda$ слева и справа от краев пластины, в которой может возникнуть вихрь. Возможности создать вихрь или антивихрь выбираются с вероятностью $1/2$, затем случайным образом в зоне рождения выбирается точка рождения. Общая вероятность подпроцесса рассчитывается аналогично (11.183), только вероятность обращения к конкретной точке рождения выбирается в виде

$$p_c = \frac{1}{\lambda L_y}, \quad (11.205)$$

где в знаменателе стоит величина, пропорциональная площади зоны рождения.

3. Обратный подпроцессу рождения вихря процесс уничтожения вихря. "Зона уничтожения" также определяется как приграничная полоса шириной $\sim \lambda$; из массива вихрей выбирается вихрь или антивихрь и делается попытка его уничтожить. Общая вероятность рассчитывается аналогично (11.183), вероятность обращения к вихрю выбирается в виде

$$p_a = \frac{1}{2N}, \quad (11.206)$$

где N – число вихрей в системе на данный момент. Множитель $1/2$ в выражении для p_a появляется из-за того, что в системе присутствует два сорта вихрей: так как при процедуре рождения сорт вихря выбирался с вероятностью $1/2$, а в данной процедуре уничтожение идет независимо, из общего массива, для правильного детального баланса необходимо учесть этот множитель и в процедуре уничтожения. Можно было бы сделать по-другому: отдельно проводить процедуры рождения и уничтожения для разных сортов вихрей, создав соответствующие независимые подпроцессы, тогда дополнительных множителей не появляется.

4. Аннигиляция вихрь-антивихрь. Эта процедура необходима для эффективного перемагничивания системы, она также является одной из основных в системе в присутствии транспортного тока. В этом случае происходит обращение к паре вихрей, одному из массива вихрей N_+ и другому из массива антивихрей N_- , с вероятностью обращения

$$p_a = \frac{1}{N_+ N_-}, \quad (11.207)$$

далее проверяется, расположены ли вихрь и антивихрь на малом расстоянии $\sim 10\xi \ll \lambda$, и, если это так, делается попытка уничтожения этой пары вихрей. Согласно соотношению (11.194), вихрь и антивихрь притягиваются друг к другу, но уничтожение пары приведет также к понижению энергии на удвоенную собственную энергию вихря 2ε (см. (11.193)). Оценка этого процесса должна происходить согласно алгоритму Метрополиса, но, как правило, почти с единичной вероятностью аннигиляция произойдет. Тем не менее, для соблюдения детального баланса необходимо ввести подпроцесс, обратный подпроцессу аннигиляции пары – рождение пары.

5. Рождение пары вихрь-антивихрь. В этом случае случайным образом выбирается место в пластине для рождения пары, затем предпринимается попытка создать вихрь в этой точке и антивихрь в случайной точке (или наоборот) в окрестности $\sim 10\xi$ от точки

рождения вихря. Вероятность обращения к точкам рождения вихрей в этом случае

$$p_c = \frac{1}{100 \xi^2 dL_y}. \quad (11.208)$$

Вероятность рождения рассчитывается с учетом предыдущего прямого процесса в рамках детального баланса:

$$W_{N \rightarrow N+2}^c p_c(N) P_N = W_{N+2 \rightarrow N}^a p_a(N+2) P_{N+1}. \quad (11.209)$$

Отсюда

$$W_{N \rightarrow N+2}^c = \begin{cases} W_N^{++} = \tau \frac{p_a(N+2) P_{N+2}}{p_c(N) P_N} = \frac{\tau 100 \xi^2 dL_y}{(N_+ + 1)(N_- + 1)} e^{-\beta[E(N+2) - E(N)]}, & W_N^{++} \leq 1; \\ 1, & W_N^{++} > 1; \end{cases} \quad (11.210)$$

$$W_{N \rightarrow N-2}^a = \begin{cases} W_N^{--} = \frac{1}{\tau} \frac{p_c(N) P_{N-2}}{p_a(N-2) P_N} = \frac{(N_+ - 1)(N_- - 1)}{\tau 100 \xi^2 dL_y} e^{-\beta[E(N-2) - E(N)]}, & W_N^{--} \leq 1; \\ 1, & W_N^{--} > 1. \end{cases}$$

Сам алгоритм Монте-Карло состоит из следующих шагов.

- 1.** Создается произвольная начальная конфигурация вихрей, рассчитывается их энергия.
- 2.** Случайным образом выбирается один из пяти подпроцессов.
- 3.** Проводится соответствующая процедура выбора вихря или места для рождения или движения. Рассчитываются вероятности перехода W и после сравнения W со случайным числом, равномерно распределенным на $(0,1)$, принимается или нет новая конфигурация.
- 4.** Происходит сбор информации для расчета средней энергии, распределения вихрей и их количества.
- 5.** Переход к следующему шагу Монте-Карло: возврат к п. 2.

В частности, индукция магнитного поля в зависимости от числа вихрей в такой геометрии рассчитывалась следующим образом:

$$B = \frac{N\Phi}{S} + \frac{2\lambda H}{d}(1 - e^{-d/\lambda}), \quad (11.211)$$

где $S = dL_y$. В последнем слагаемом в (11.211) отражен вклад мейсснеровских токов у границ пластины. Кроме того, вместо кванта потока в (11.211) записан эффективный квант вихря Φ , искажающийся вблизи границы сверхпроводника [20, 49]:

$$\Phi(x) = \Phi_0 \left(1 - \frac{2}{\pi} \int_{x/\lambda}^{\infty} y K_0(y) \arccos\left(\frac{x}{y\lambda}\right) dy \right). \quad (11.212)$$

11.5.3.3. Результаты моделирования для ВТСП-пластины

Кратко рассмотрим некоторые результаты моделирования методом Монте-Карло для ВТСП-пластины [49, 50, 55]. Для расчета взяты параметры, характерные для сверхпроводника $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$: $\delta = 0.27$ нм; $\lambda_0 = 180$ нм; $\xi_0 = 2$ нм; $T_c = 84$ К. Толщина пластины была выбрана $d = 3$ мкм; диапазон изменений внешнего поля $0 \leq |H| \leq 0.1$ Тл; глубина потенциальной ямы дефекта (центра пиннинга) равнялась ~ 0.01 эВ.

Практически все физические особенности поведения вихревой системы в сверхпроводнике с центрами пиннинга во внешнем поле и токе можно наглядно продемонстрировать в **процессах перемещения**. Именно эти явления и будут проанализированы в данном разделе как результат численного моделирования методом Монте-Карло.

В начале расчета дефекты случайным образом размещались по площади пластины, затем задавалась температура T , внешнее поле H , транспортный ток I ; результатом работы алгоритма Монте-Карло были средние значения числа вихрей, далее рассчитывались магнитная индукция B согласно (11.211) и намагниченность $M = (B - H) / 4\pi$. Также рассчитывалось пространственное распределение средней вихревой плотности, что позволяло при необходимости восстанавливать профиль распределения индукции

поля и итогового тока по сечению пластины. Затем значение поля (тока) менялось, и расчет проводился заново, причем последняя конфигурация вихрей использовалась как стартовая (так же, как это было сделано в модели решеточного газа). Такая последовательность расчета важна для правильного моделирования фазовых переходов первого рода.

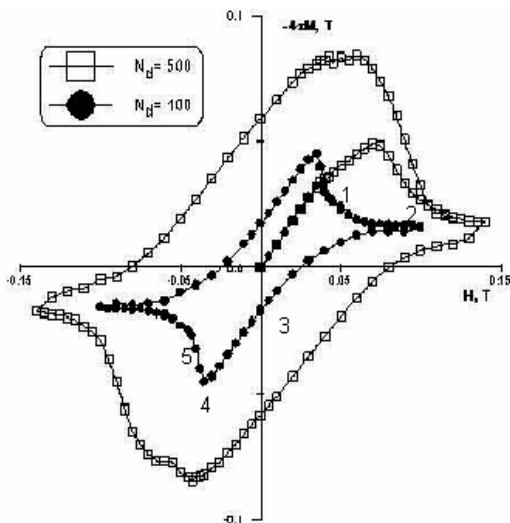


Рис. 11.47. Петли намагниченности для разного количества дефектов N_d

На рис. 11.47 представлены петли перемагничивания пластины во внешнем поле в отсутствие транспортного тока при температуре $T = 5\text{K}$. Каждая точка на графике – отдельный расчет Монте-Карло. Видно, что ширина петли возрастает с увеличением числа центров пиннинга.

Качественно процесс перемагничивания можно описать следующим образом. Рассмотрим, например, петлю с малым количеством дефектов на рис. 11.47. При первоначальном увеличении внешнего магнитного поля вихри не рождаются и не проникают в пластину, так как на границе существует энергетический барьер (барьер Бина – Ливингстона) – комбинация отталкивания вихря мейсснеровскими токами и притяжения вихря к своему зеркальному

изображению. На графике эта область (ее называют **мейсснеровской**) соответствует прямой линии из начала координат до точки 1. После достижения первого критического поля H_{c1} вихри начинают входить в пластину, при этом намагниченность уменьшается (участок 1-2). После достижения значения $H = 0.1$ Тл начинаем уменьшать внешнее поле, однако барьер не дает выйти вихрям из пластины, и в поведении намагниченности возникает необратимость. При дальнейшем уменьшении внешнего поля до нулевого значения поверхностный барьер исчезает, и некоторое число вихрей выходит из пластины (участок 2-3), при этом существует остаточная намагниченность, обусловленная наличием запиннигованных вихрей. При увеличении внешнего магнитного поля противоположного знака вихри остаются закрепленными на центрах пиннинга, а поверхностный барьер мешает войти в образец антивихрям (участок 3-4), поэтому намагниченность линейно падает пропорционально внешнему полю. При дальнейшем возрастании величины внешнего поля противоположного знака его значение достигает поля перегрева мейсснеровского состояния, антивихри начинают проникать в пластину и аннигилировать с вихрями, закрепленными на центрах пиннинга, т.е. начинается процесс перемагничивания пластины (участок 4-5 и далее). Затем при обратном изменении внешнего магнитного поля картина повторяется, и петля намагниченности замыкается.

Рассмотрим теперь процесс **перемагничивания током** в отсутствие внешнего поля [50]. Он во многом похож на перемагничивание полем, однако имеют место некоторые особенности. Кривая перемагничивания током на рис. 11.48 приведена только для одной из геометрических половин пластины (относительно нулевой координаты по оси x), так как в каждой из половин магнитные потоки имеют разный знак, и суммарная намагниченность в отсутствие поля была бы приближенно равна нулю, что не отражало бы адекватно энергетические потери в образце.

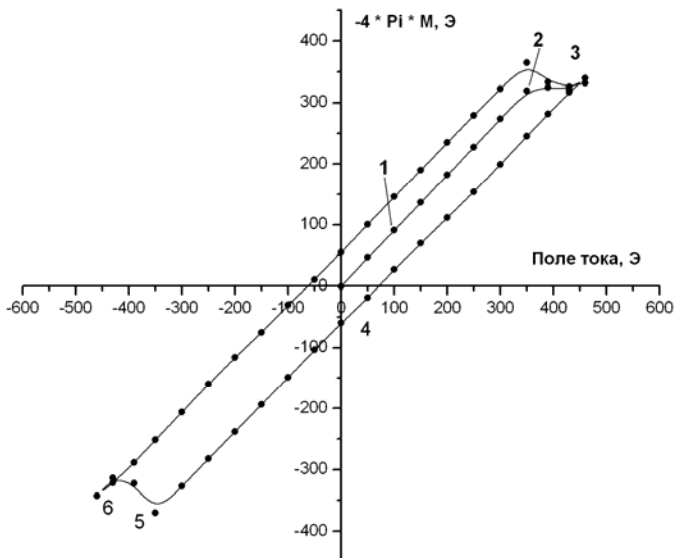


Рис. 11.48. Петля намагниченности для в случае перемагничивания током. Количество дефектов 200

Несмотря на некоторое различие в форме петель для токовой и полевой ситуации, физические процессы проникновения в пластину вихрей во многом очень похожи.

Вплоть до первого критического поля H_{c1} вихри в образец не проникают, за исключением поверхностного слоя шириной порядка λ (точка 1 на рис. 11.48). Заметим, что на каждой из сторон образуются **вихри разных знаков**, в соответствии со знаком поля, создаваемого током. После прохождения точки первого критического поля начинается лавинообразное проникновение вихрей в пластину (точка 2). По мере проникновения их продвижение замедляется, вихри оседают на центрах пиннинга. В итоге, при достаточно сильном токе, вихри заполняют всю пластину (точка 3), стараясь выстроиться в треугольную решетку в каждой половине, и в тоже время активно аннигилируют с вихрями противоположного знака в геометрической середине пластины, образуя целую выделенную область аннигиляции. Это явно заметно на картине распределения вихревой плотности – в середине

пластины есть пространство, свободное от вихрей. При аннигиляции пары вихрь-антивихрь на краях пластины образуются новые вихри, сохраняя детальное равновесие. По мере уменьшения поля тока вплоть до полного выключения тока, вихри, не осевшие на дефектах, начинают покидать пластину (точка 4), часть потока при этом остается замороженной на дефектах. Далее, с увеличением тока противоположного направления после достижения первого критического поля, в каждую из пластин начинают проникать вихри соответствующего знака, аннигилируя при этом с вихрями, оставшимися на дефектах от предыдущего намагничивания (участок 5-6), при этом наблюдаются так называемые «волны аннигиляции» [49, 50, 55], когда выстраивается фронт вихрей одного знака,двигающийся на вихри другого знака, разделенный полосой аннигиляции (рис. 11.49).

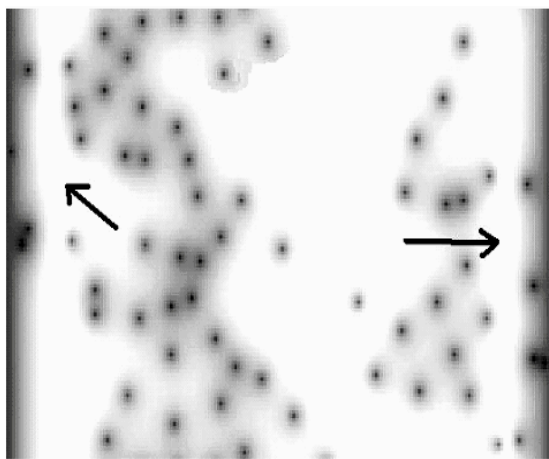


Рис. 11.49. Волны аннигиляции в процессе перемагничивания током. Стрелками указан фронт волны

Таким образом, моделирование вихревой системы ВТСП методом Монте-Карло приводит к корректному описанию поведения физической системы. Представленные результаты по перемагничиванию пластины током и во внешнем поле качественно, а в ряде случаев и количественно, совпадают с экспериментальными данными.

11.6. Расчет термодинамических средних и оценка погрешности. Автокорреляционный анализ в стохастическом моделировании

Рассмотрим математические аспекты расчета термодинамических средних и оценки погрешности при моделировании методами Монте-Карло (результаты этого раздела будут справедливы и для других методов стохастического моделирования). Основной целью раздела является формулировка практических рекомендаций по корректному расчету погрешностей, поэтому математические вопросы, связанные с критерием χ^2 , доверительными интервалами и др., здесь рассматриваться не будут.

В процессе моделирования после реализации каждого элементарного шага алгоритма в память компьютера или в файл необходимо заносить то значение A_i рассчитываемой физической величины A , которое на данный момент реализовано "мгновенной" конфигурацией i . В конце процесса моделирования, после M шагов сбора информации (или M **итераций**), рассчитывается искомое среднее $\langle A \rangle$, которое, как доказывалось при рассмотрении принципа детального равновесия, является простым арифметическим средним мгновенных значений:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A_i. \quad (11.213)$$

Для ускорения сходимости и более корректной оценки погрешности рекомендуется сбор информации производить не сразу, а после некоторого количества начальных шагов, так называемых шагов **термализации** системы. Действительно, ответ не должен зависеть от начального состояния системы, а так как старт моделирования осуществляется с некоторого случайного, как правило, не соответствующего термодинамически равновесной ситуации, начального состояния, первые мгновенные значения A_i будут далеки от ответа, и внесут хаотические флуктуации в расчет среднего, удлиняя время сходимости (рис. 11.50).

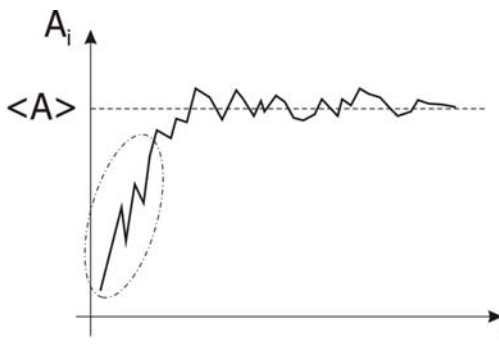


Рис. 11.50. Если состояние, с которого начинается моделирование, сильно отличается от равновесного (показано штриховой линией), то первые несколько шагов (обведены штрихпунктирной линией) дадут большой вклад в погрешность результата

Для исключения начальных флуктуаций некоторое количество M_0 первых шагов Монте-Карло проводят без запоминания значений рассчитываемой величины, так что среднее значение рассчитывается по формуле:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M - M_0} \sum_{i=M_0+1}^M A_i. \quad (11.214)$$

Величина области термализации M_0 может быть велика и достигать четверти времени всего расчета M . Будем далее полагать, что термализация проведена, и отсчитывать шаги Монте-Карло только от начала сбора физической информации, т.е. далее в тексте будут введены переобозначения $i \rightarrow i - M_0$; $M \rightarrow M - M_0$.

Рассмотрим теперь важный вопрос об оценке погрешности δA величины $\langle A \rangle$. Следует заметить, что расчет погрешности (так называемая **несмещенная оценка**) через среднеквадратичное отклонение,

$$\delta A = \sqrt{\frac{1}{M(M-1)} \sum_i (A_i - \langle A \rangle)^2} \cong \sqrt{\frac{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}{M}} = \sqrt{\frac{DA}{M}}, \quad (11.215)$$

справедливый для независимых случайных величин, приведет к некорректной оценке в данном случае, так как мгновенные значения A_i , получаемые в процессе работы алгоритма, являются звеньями марковской цепи, поэтому каждое следующее мгновенное

значение имеет определенную корреляцию с предыдущим, $A_{i+1} = f(A_i)$, и эти величины не могут рассматриваться как статистически независимые. Однако ввиду того, что каждое из значений A_i , входящих в марковскую цепь, определяется не всеми предыдущими состояниями A_0, A_1, \dots, A_{i-1} , а только последним A_{i-1} , то корреляция между A_i и мгновенным значением на $(i+k)$ -м шаге A_{i+k} будет ослабляться с ростом k , и, в конце концов, при определенном значении k величины A_i и A_{i+k} станут статистически независимыми. Оценка корреляций между различными мгновенными значениями A_i осуществляется при помощи **автокорреляционной функции** [51]; минимальное количество итераций, необходимое для реализации двух статистически независимых мгновенных значений A_i , определяется **автокорреляционным временем** расчета величины A . Эти понятия рассматриваются далее.

Прежде всего, представим процесс Монте-Карло как непрерывную развивающуюся во времени эволюцию системы, так же, как это делалось при рассмотрении принципа детального равновесия. Каждая из итераций μ , рассматриваемых выше, может состоять из сотни или тысячи элементарных шагов Монте-Карло, так как информация может собираться необязательно на каждом элементарном шаге. Поставим в соответствие каждой такой итерации интервал времени δt , так что полное время расчета в момент итерации μ равно $t_\mu = \mu \delta t$. Тогда усреднение по конфигурациям эквивалентно интегрированию вдоль стохастической фазовой траектории в фазовом пространстве, удовлетворяющей динамическому уравнению Колмогорова (11.124):

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A_i \equiv \frac{1}{t_M} \int_0^{t_M} A(t) dt. \quad (11.216)$$

Если схема алгоритма эргодическая, **усреднение по времени** (11.216) **эквивалентно усреднению с гиббсовскими весами** $P(x)$ **по полному ансамблю состояний системы**, т.е. в пределе большого числа итераций имеем:

$$\lim_{t_M \rightarrow \infty} \frac{1}{t_M} \int_0^{t_M} A(t) dt = \langle A \rangle = \sum_{\{x\}} P(x) A(x), \quad (11.217)$$

где $\{x\}$ означает сумму по всем состояниям (конфигурациям) системы.

Введем понятие **корреляционной функции** двух физических величин A и B следующим образом:

$$\langle A(t)B(0) \rangle = \frac{1}{t_M - t} \int_t^{t_M} A(t')B(t' - t) dt, \quad (11.218)$$

при этом усреднение (11.218) при $t_M \rightarrow \infty$ совпадает с термодинамическим усреднением (11.217), а это подразумевает, что статистические веса состояний $P(x, t)$, по которым отобраны значения величин A и B , практически совпадают с равновесными весами $P(x)$. Заметим, что если t_M недостаточно велико, то соответствующее среднее $\langle A(t_M) \rangle$ зависит от времени наблюдения.

В общем случае определим **среднее по ансамблю** $\langle A(t) \rangle$ через корреляционную функцию между $A(t)$ и статистическим весом $P(x)$, и интерпретируем его эволюцию следующим образом:

$$\langle A(t) \rangle = \sum_{\{x\}} P(x, t) A(x(0)) = \sum_{\{x\}} P(x, 0) A(x(t)). \quad (11.219)$$

Заметим, что перенос временной зависимости от статистического веса $P(x, t)$ к усредняемой величине $A(x(t))$ в (11.219) эквивалентен в квантовой механике переходу от шредингеровского представления к гейзенберговскому.

Практически рассчитывать (11.219) можно, задав определенное число шагов t алгоритма Монте-Карло, а затем многократно запускать алгоритм, стартуя с различных начальных конфигураций, и суммировать частичные средние

$$A(t) = \frac{1}{t} \int_0^t A(t') dt' \quad (11.220)$$

для каждого запуска i :

$$\langle A(t) \rangle \cong \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r A(t, i), \quad (11.221)$$

где r – полное число запусков, $r \gg 1$. В начальной области эволюции при малом t среднее (11.221) отличается от предела (11.218),

$$\langle A(t) \rangle - \langle A(\infty) \rangle \neq 0; \quad \langle A(\infty) \rangle = \langle A \rangle. \quad (11.222)$$

Исследуем сходимость величины $\langle A(t) \rangle$ к рассчитываемому пределу $\langle A(\infty) \rangle$, который в дальнейшем будем обозначать просто $\langle A \rangle$. Рассмотрим среднеквадратичную статистическую погрешность величины $\langle A(t_M) \rangle$, характеризующую отклонение ее значений от среднего значения (11.213),

$$(\delta A)^2 = \langle (A(t_M) - \langle A \rangle)^2 \rangle. \quad (11.223)$$

Это и есть погрешность, которую следует указывать в результате расчета при достаточно длительном итерационном процессе:

$$A = \langle A \rangle \pm \delta A. \quad (11.224)$$

Преобразуем (11.223):

$$\begin{aligned} (\delta A)^2 &= \left\langle \left[\frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M (A_{\mu} - \langle A \rangle) \right]^2 \right\rangle = \frac{1}{M^2} \sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=1}^M \langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} - 2A_{\mu_1} \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \\ &= \frac{1}{M^2} \sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=1}^M \langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} \rangle - \langle A \rangle^2. \end{aligned} \quad (11.225)$$

Вспользуемся соотношением

$$\sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=1}^M = 2 \sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=\mu_1+1}^M + \sum_{\mu_1=1}^M, \quad (11.226)$$

тогда из (11.225) имеем:

$$\begin{aligned} (\delta A)^2 &= \frac{1}{M^2} \left[2 \sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=\mu_1+1}^M \langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} \rangle + M \langle A^2 \rangle \right] - \langle A \rangle^2; \\ \langle A^2 \rangle &= \left\langle \frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M A_{\mu}^2 \right\rangle. \end{aligned} \quad (11.227)$$

Добавляя и вычитая одинаковые слагаемые в двойной сумме, находим далее:

$$\begin{aligned}
(\delta A)^2 &= \frac{1}{M^2} \left[2 \sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=\mu_1+1}^M \left(\langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} \rangle - \langle A \rangle^2 \right) + (M^2 - M) \langle A \rangle^2 + M \langle A^2 \rangle \right] - \langle A \rangle^2 \equiv \\
&\equiv \frac{1}{M} \left(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right) + \frac{2}{M^2} \sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=\mu_1+1}^M \left(\langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} \rangle - \langle A \rangle^2 \right). \quad (11.228)
\end{aligned}$$

Преобразуем выражение в двойной сумме следующим образом:

$$\begin{aligned}
\sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=\mu_1+1}^M \langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} \rangle &= \sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu=1}^{M-\mu_1} \langle A_0 A_{\mu} \rangle = \\
&= \sum_{\mu=1}^M \langle A_0 A_{\mu} \rangle \sum_{\mu_1=1}^{M-\mu} 1 = \sum_{\mu=1}^M (M-\mu) \langle A_0 A_{\mu} \rangle. \quad (11.229)
\end{aligned}$$

В (11.229) использовано, что при достаточно большом числе усреднений по ансамблю справедливо равенство

$$\langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} \rangle = \langle A_0 A_{\mu_2-\mu_1} \rangle, \quad (11.230)$$

т.е. коррелятор зависит только от "расстояния" между итерациями. С учетом (11.229) и последнего замечания двойная сумма (11.228) становится однократной и выражение для погрешности принимает вид:

$$(\delta A)^2 = \frac{1}{M} \left\{ \left(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right) + 2 \sum_{\mu=1}^M \left(1 - \frac{\mu}{M} \right) \left(\langle A_0 A_{\mu} \rangle - \langle A \rangle^2 \right) \right\}. \quad (11.231)$$

Для удобства дальнейшего анализа перейдем к динамической интерпретации процесса Монте-Карло и введем, как указывалось выше, интервал времени δt для каждой итерации и полное время итерации μ : $t_{\mu} = \mu \delta t$. Заменяя сумму интегралом, перепишем (11.231):

$$(\delta A)^2 = \frac{1}{M} \left\{ \left(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right) + \frac{2}{\delta t} \int_0^{t_M} dt \left(1 - \frac{t}{t_M} \right) \left(\langle A_0 A_t \rangle - \langle A \rangle^2 \right) \right\}. \quad (11.232)$$

Введем **автокорреляционную функцию** физической величины A следующим образом:

$$\varphi_A(t) = \frac{\langle A_0 A_t \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}, \quad (11.233)$$

при этом $\varphi_A(0) = 1$, а $\varphi_A(\infty) = 0$, так как

$$t \rightarrow \infty \Rightarrow \langle A_0 A_t \rangle \approx \langle A_0 \rangle \langle A_t \rangle \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \langle A \rangle^2. \quad (11.234)$$

Автокорреляционная функция отражает степень корреляции между различными реализациями рассчитываемой величины, и чем ближе она к нулю, тем слабее корреляция. Соотношение (11.234) иллюстрирует **принцип ослабления корреляций** при увеличении времени наблюдения между измерениями.

Автокорреляционная функция уникальна для каждой рассчитываемой величины, т.е. различна, например, для энергии E и числа частиц N для одной и той же системы и в одном и том же расчете Монте-Карло.

Перепишем выражение для погрешности через автокорреляционную функцию:

$$(\delta A)^2 = \frac{1}{M} \left(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right) \left\{ 1 + \frac{2}{\delta t} \int_0^{t_M} dt \left(1 - \frac{t}{t_M} \right) \varphi_A(t) \right\} \quad (11.235)$$

и введем безразмерный параметр **автокорреляционное время** физической величины A следующим образом:

$$\tau_A = \frac{1}{2} + \frac{1}{\delta t} \int_0^{\infty} dt \varphi_A(t) = \frac{1}{2} + \sum_{\mu=1}^M \varphi_A(t_{\mu}). \quad (11.236)$$

Чем меньше автокорреляционное время, тем быстрее сходимость. Это видно из оценки погрешности, которая с учетом (11.236) выражается следующим образом:

$$(\delta A)^2 = \frac{2\tau_A}{M} \left(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right). \quad (11.237)$$

В (11.237) предполагается, что $\varphi_A(t)$ отлична от нуля при $t \ll t_M$, поэтому под знаком интеграла в (11.235) можно положить $\left(1 - \frac{t}{t_M} \right) \rightarrow 1$.

Минимальное значение $\tau_A = 1/2$, это соответствует случаю отсутствия корреляций, когда величина $\tau_A \delta t$ порядка времени δt между итерациями, и погрешность совпадает со среднеквадратичной (11.215). Более того, в этом случае она

чувствительна к выбору δt , и сбор информации нужно проводить на каждом элементарном шаге Монте-Карло.

Как правило, однако, оказывается, что $\tau_A \gg 1$. Тогда погрешность, рассчитанная в соответствии с (11.237), может отличаться от среднеквадратичного отклонения в десятки раз. В этом случае оценка (11.237) нечувствительна к выбору δt до тех пор, пока δt не будет сопоставима с $\tau_A \delta t$, и информацию нужно собирать не чаще, чем с интервалом $\tau_A \delta t$.

При практической реализации выражения (11.232) – (11.237) достаточно громоздки и неудобны для расчета. Строго говоря, согласно (11.221), следует провести многократный запуск алгоритма при различных начальных конфигурациях, для того чтобы осуществить усреднение по ансамблю. Однако на практике есть несколько удобных способов расчета автокорреляционных времен и погрешностей в одном длительном расчете, имитируя усреднение по ансамблю.

Один из таких методов – **метод разбиений ("bins")**, который состоит в следующем. Разобьем все M измерений физической величины A на n частей (bins) длиной $r = M/n$ (рис. 11.51). Для каждой из частей рассчитаем частичное среднее

$$\langle A(r) \rangle_b = \frac{1}{r} \sum_{j=(b-1)r+1}^{br} A_j; \quad b = 1, \dots, n. \quad (11.238)$$

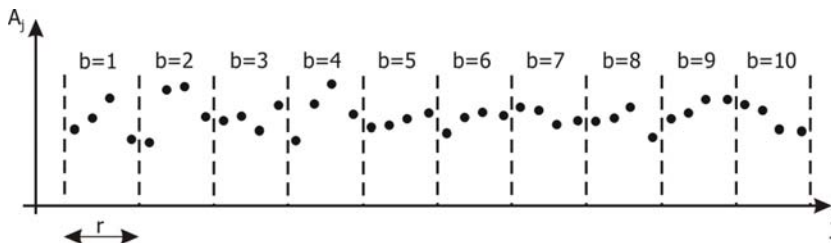


Рис. 11.51. Все $M = 40$ измерений разбиты на $n = 10$ частей длиной $r = 4$

Рассчитаем дисперсию A по этим частичным средним:

$$\sigma^2(r) = \frac{1}{n-1} \sum_{b=1}^n \left(\langle A^2(r) \rangle_b - \langle A \rangle^2 \right). \quad (11.239)$$

Заметим, что величина

$$\sigma^2(1) = \frac{1}{M-1} \sum_{j=1}^M \left(A_j^2 - \langle A \rangle^2 \right) \quad (11.240)$$

равна обычной полной дисперсии по представительной выборке.

С учетом (11.239) и (11.240) автокорреляционное время и оценку погрешности можно рассчитать следующим образом:

$$\begin{aligned} \tau_A(r) &= \frac{r \sigma^2(r)}{2 \sigma^2(1)}; \\ (\delta A)^2 &= \frac{r}{M} \sigma^2(r). \end{aligned} \quad (11.241)$$

В пределе $r \rightarrow \infty$ определенные таким образом автокорреляционное время и погрешность стремятся к своим асимптотическим значениям, совпадающим с (11.236) – (11.237). При увеличении M появляется возможность разбивать данные на части все большей длины r , при этом необходимо, чтобы количество разбиений также было велико: $n \gg 1$. В процессе расчета строят зависимость $\tau_A(r)$, добиваясь ее насыщения (рис. 11.52).

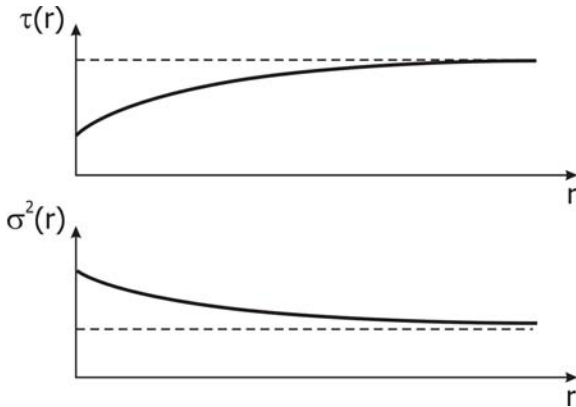


Рис. 11.52. С ростом r зависимости $\tau(r)$ и $\sigma^2(r)$ выходят на насыщение

Такое разбиение всего массива измерений на части все большего размера r и расчет по этим частям среднего и дисперсий имитирует усреднение по ансамблю в пределе больших r .

На практике величины r удобно выбирать в виде последовательности значений

$$r = 2^\alpha; \quad \alpha = 0, 1, 2, \dots, \quad (11.242)$$

ограничиваясь числом r_{\max} , таким, при котором количество разбиений $n \cong 10^3$.

Есть еще одна, более простая процедура расчета погрешностей величин, полученных при помощи алгоритма Монте-Карло, без строгого автокорреляционного анализа, так называемый **метод "1/2 файла"**. Он заключается в следующем.

1. На каждом шаге сбора информации μ рассчитывается и запоминается в соответствующий массив текущее среднее значение:

$$\langle A \rangle_\mu = \frac{1}{\mu} \sum_{j=1}^{\mu} A_j, \quad (11.243)$$

соответственно, для самого последнего шага сбора информации $\mu = M$ имеем $\langle A \rangle_M \cong \langle A \rangle$.

2. Отсекаем первую половину файла, т.е. значения $\langle A \rangle_1, \langle A \rangle_2, \dots, \langle A \rangle_{\mu/2}$ и для оценки погрешности используем только вторую половину файла, т.е. значения $\langle A \rangle_{\frac{\mu}{2}+1}, \langle A \rangle_{\frac{\mu}{2}+2}, \dots, \langle A \rangle_\mu$.

Отсечка первой половины массива убирает начальную флуктуационную область, при этом с течением времени счета граница отсечки все время сдвигается вправо, и результаты все более стремятся к предельному $\langle A \rangle$.

3. Из отобранных частичных средних находим максимальное и минимальное (рис. 11.53), тогда погрешность расчета будет равна

$$\delta A = \frac{\max(\langle A \rangle_{\frac{M}{2}+1}, \dots, \langle A \rangle_{\mu}) - \min(\langle A \rangle_{\frac{M}{2}+1}, \dots, \langle A \rangle_{\mu})}{2}. \quad (11.244)$$

Как правило, погрешность, рассчитанная методом "1/2 файла" – оценка сверху для (11.237). В пределе $M \gg 1$ значения (11.241) и (11.244) стремятся к одному результату (11.237).

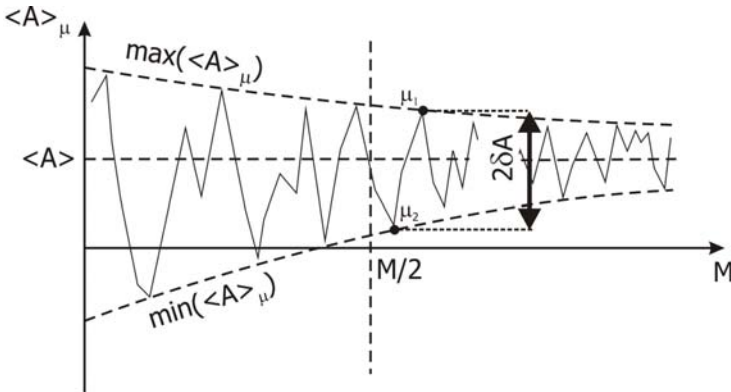


Рис. 11.53. Расчет погрешности методом "1/2 файла".
С ростом M флуктуации среднего значения $\langle A \rangle$ уменьшаются

Заметим, что флуктуационная граница "1/2 файла" – условна, можно использовать оценку "3/4 файла" или любую другую, конкретное значение в асимптотике не имеет значения, главное, задавшись этим параметром, не менять его в процессе расчета.

Если фиксировать точки, при которых были отобраны минимальные и максимальные частичные средние,

$$\mu_1 : \langle A \rangle_{\mu_1} = \max(\langle A \rangle_{\frac{M}{2}+1}, \langle A \rangle_{\frac{M}{2}+2}, \dots, \langle A \rangle_{\mu}); \quad (11.245)$$

$$\mu_2 : \langle A \rangle_{\mu_2} = \min(\langle A \rangle_{\frac{M}{2}+1}, \langle A \rangle_{\frac{M}{2}+2}, \dots, \langle A \rangle_{\mu}),$$

то автокорреляционное время можно оценить следующим образом:

$$\frac{\mu_1 + \mu_2}{2M} - \frac{1}{2} \begin{cases} \ll 1 \Rightarrow \tau_A \sim 1; \\ \sim 1 \Rightarrow \tau_A \gg 1. \end{cases} \quad (11.246)$$

Оценку автокорреляционного времени можно получить также из зависимости автокорреляционной функции $\varphi_A(t)$ (рис. 11.54). Обычно полагают, что автокорреляционное время равно величине, при которой значение автокорреляционной функции становится меньше 0.1.

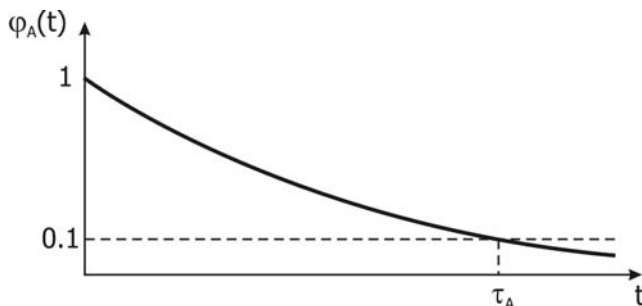


Рис.11.54. Оценка автокорреляционного времени через автокорреляционную функцию

Автокорреляционное время является удобным параметром для сопоставления эффективности различных стохастических методов вычислений. Чем меньше τ_A , тем более эффективен тот или иной метод (Монте-Карло, молекулярной динамики и т.д.) для расчета физической величины A . При этом следует помнить, что автокорреляционное время различно для различных физических величин, поэтому при оценке эффективности алгоритма следует выбирать автокорреляционное время той величины, сходимость которой в данном алгоритме медленнее всего. Такая оценка эффективности универсальна, так как не зависит ни от конкретного вида компьютера и операционной системы, ни от языка программирования.

Автокорреляционное время отражает реальные временные и релаксационные процессы в системе. Известно, что при приближении к точке фазового перехода "парамагнетик – ферромагнетик" в модели Изинга автокорреляционные времена для восприимчивости и теплоемкости резко возрастают (так называемое **критическое замедление** алгоритма), что отражает факт нарастания флуктуаций и, соответственно, времен релаксации и корреляционных длин. При этом те физические величины,

которые не испытывают скачков или изломов производных в этой точке (например, энергия и намагниченность), не испытывают и существенного изменения своих автокорреляционных времен.

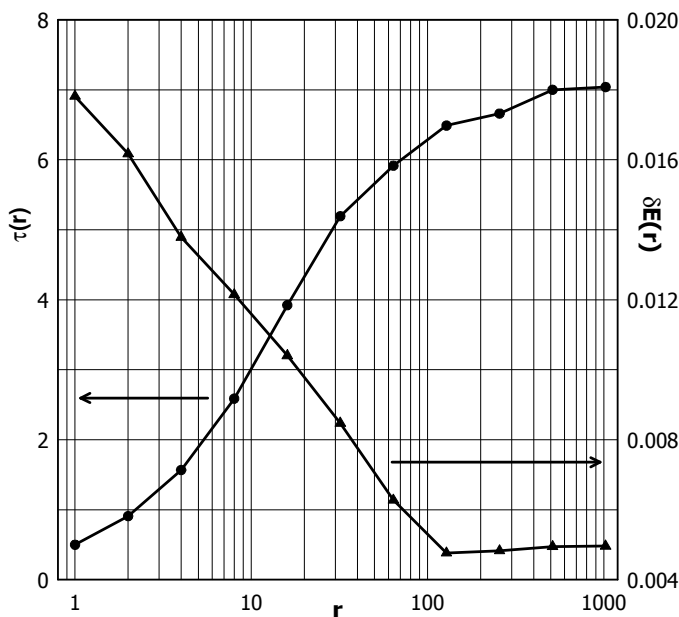


Рис. 11.55. Зависимость автокорреляционного времени (круги) и погрешности энергии (треугольники) в одномерной модели Изинга (число узлов 100; $J = 1$; $T = 0.5$; $H = 0.1$). Полное число измерений 990000

На рис. 11.55 показаны зависимости автокорреляционного времени и погрешности при расчете энергии в одномерной модели Изинга (11.131) с параметрами $J = 1$; $H = 0.1$; $T = 0.5$; число узлов 100; всего было произведено 990000 шагов сбора информации. При $r \approx 500$ зависимости выходят на насыщение, при этом $E = -109.6250 \pm 0.0049$. Погрешность, рассчитанная методом "1/2 файла", составила $(\delta E)_{1/2} = 0.0052$.

11.7. Диаграммные методы и высокотемпературное разложение. Преобразование операторов физических величин

Существуют схемы Монте-Карло, использующие **суммирование диаграмм** для эффективного перебора конфигурационного пространства. Эти методы близки к аналитической диаграммной технике (см., например, решение Онзагера для двумерной модели Изинга [36]) и часто позволяют асимптотически просуммировать **весь ряд диаграмм** там, где аналитические подходы неприменимы.

В этом разделе будет рассмотрено так называемое **высокотемпературное разложение** в сочетании с **"алгоритмом червя"** (worm) для большого канонического ансамбля на примере модели Изинга [52]. В общем случае высокотемпературное разложение может быть использовано для большого количества классических дискретных моделей, но именно для модели Изинга его применение наиболее наглядно.

Рассмотрим статистическую сумму для ферромагнитной модели Изинга

$$Z = \text{Tr}(e^{-\hat{H}/T}) = \sum_n e^{-E_n/T}, \quad (11.247)$$

где энергия для каждой конфигурации спинов имеет вид

$$E = -\sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i; \quad S_i = \pm 1, \quad (11.248)$$

здесь H – внешнее поле; обменное взаимодействие $J = 1$.

Разложим экспоненты в статистической сумме следующим образом:

$$\begin{aligned} e^{-\beta E} &= e^{\beta \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + \beta H \sum_i S_i} = \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta S_i S_j} \prod_m e^{\beta H S_m} = \\ &= \left(\prod_{b=\langle ij \rangle} \sum_{N_b=0}^{\infty} \frac{\beta^{N_b} S_i^{N_b} S_j^{N_b}}{N_b!} \right) \left(\prod_m \sum_{n_m=0}^{\infty} \frac{\beta^{n_m} H^{n_m} S_m^{n_m}}{n_m!} \right), \end{aligned} \quad (11.249)$$

здесь первый множитель соответствует учету межчастичного взаимодействия, второй – взаимодействия с внешним полем, при этом чем выше температура T (меньше обратная температура β), тем лучше сходимость ряда (11.249). Это разложение называется **высокотемпературным**.

Рассмотрим сначала первый множитель:

$$\left(\prod_{b=\langle ij \rangle} \sum_{N_b=0}^{\infty} \frac{\beta^{N_b} S_i^{N_b} S_j^{N_b}}{N_b!} \right), \quad (11.250)$$

т.е. положим внешнее поле равным нулю. Для каждой из пар $\langle ij \rangle$, занумерованных как связи под номером b , имеем отдельное разложение экспоненты. Статистическая сумма в этом случае выглядит так:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{S_1, S_2, \dots, S_N\}} \prod_{b=\langle ij \rangle} \left(\sum_{N_b=0}^{\infty} \frac{\beta^{N_b} (S_i S_j)^{N_b}}{N_b!} \right) = \quad (11.251) \\ &= \sum_{\{S_1, S_2, \dots, S_N\}} \left(\sum_{N_{1 \leftrightarrow 2}=0}^{\infty} \sum_{N_{2 \leftrightarrow 3}=0}^{\infty} \dots \frac{\beta^{N_{1 \leftrightarrow 2}} (S_1 S_2)^{N_{1 \leftrightarrow 2}}}{N_{1 \leftrightarrow 2}!} \frac{\beta^{N_{2 \leftrightarrow 3}} (S_2 S_3)^{N_{2 \leftrightarrow 3}}}{N_{2 \leftrightarrow 3}!} \dots \right) = \\ &= \sum_{N_{1 \leftrightarrow 2}, N_{2 \leftrightarrow 3}, \dots=0}^{\infty} \frac{\beta^{N_{1 \leftrightarrow 2} + N_{2 \leftrightarrow 3} + \dots}}{N_{1 \leftrightarrow 2}! N_{2 \leftrightarrow 3}! \dots} \sum_{S_1=\pm 1} (S_1)^{N_{1 \leftrightarrow 2} + \dots} \sum_{S_2=\pm 1} (S_2)^{N_{1 \leftrightarrow 2} + N_{2 \leftrightarrow 3} + \dots} \dots \end{aligned}$$

Заметим, что операторы $S_i \equiv S_i^Z$ коммутируют между собой, так что их можно свободно переставлять в произведении (11.251). Таким образом, для системы с коммутирующими операторами суммирование по узельным состояниям (в данном случае – по конфигурациям спинов) можно внести внутрь полной статистической суммы, и заранее рассчитать вклад в нее от каждого узла:

$$Q_i \equiv Q(k_i) = \sum_{S_i=\pm 1} (S_i)^{k_i}, \quad (11.252)$$

здесь k_i обозначает суммарное число связей, входящих в узел i (рис. 11.56).

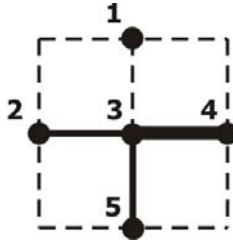


Рис. 11.56. Число связей, входящих в узел 3, равно
 $k_3 = N_{1 \leftrightarrow 3} + N_{2 \leftrightarrow 3} + N_{3 \leftrightarrow 4} + N_{3 \leftrightarrow 5} = 0 + 1 + 2 + 1 = 4$

Будем называть каждое слагаемое внутри (11.251) под знаком внешней суммы **коррелированной парой** (CP), так что суммирование в (11.251) можно представить как суммирование по всевозможным коррелированным парам:

$$Z = \sum_{CP} W_{CP}; \quad (11.253)$$

$$W_{CP} = \frac{\beta^{N_{b_1} + N_{b_2} + \dots}}{N_{b_1}! N_{b_2}! \dots} Q(k_1) Q(k_2) \dots$$

Каждое слагаемое в (11.253) подразумевает попарное произведение по узлам и связям между ними, например слагаемые

$$W_{CP1} = \frac{\beta^{N_{1 \leftrightarrow 2} + N_{2 \leftrightarrow 3}}}{N_{1 \leftrightarrow 2}! N_{2 \leftrightarrow 3}!} Q(N_{1 \leftrightarrow 2}) Q(N_{1 \leftrightarrow 2} + N_{2 \leftrightarrow 3}) Q(N_{2 \leftrightarrow 3}), \quad (11.254)$$

$$W_{CP2} = \frac{\beta^{N_{1 \leftrightarrow 2} + N_{2 \leftrightarrow 3} + N_{3 \leftrightarrow 4} + N_{4 \leftrightarrow 1}}}{N_{1 \leftrightarrow 2}! N_{2 \leftrightarrow 3}! N_{3 \leftrightarrow 4}! N_{4 \leftrightarrow 1}!} Q(N_{1 \leftrightarrow 2} + N_{4 \leftrightarrow 1}) Q(N_{1 \leftrightarrow 2} + N_{2 \leftrightarrow 3}) \times \\ \times Q(N_{2 \leftrightarrow 3} + N_{3 \leftrightarrow 4}) Q(N_{3 \leftrightarrow 4} + N_{4 \leftrightarrow 1})$$

отвечают конфигурациям, показанным на рис. 11.57.

Каждому слагаемому W_{CP} на пространственной решетке спинов можно поставить в соответствие рисунок – **диаграмму**, заключающую в себе траекторию, соединяющую атомы в соответствии с разрешенными в произведении связями $\langle ij \rangle$ (в данном случае – с ближайшими соседями). Каждая траектория характеризуется как состоянием узлов $Q(k_i)$ (**site state**), входящих в нее, так и состояниями связей (**bond state**) – числами $N_{i \leftrightarrow j}$, из которых она состоит. При этом

$$k_i = \sum_{\langle ij \rangle} N_{i \leftrightarrow j} = \sum_{b_i} N_{b_i} \quad (11.255)$$

есть состояние узла, равное числу связей, входящих в узел i . Каждая связь $\langle ij \rangle$ имеет статистический вес $\beta^{N_{i \leftrightarrow j}} / N_{i \leftrightarrow j}!$.

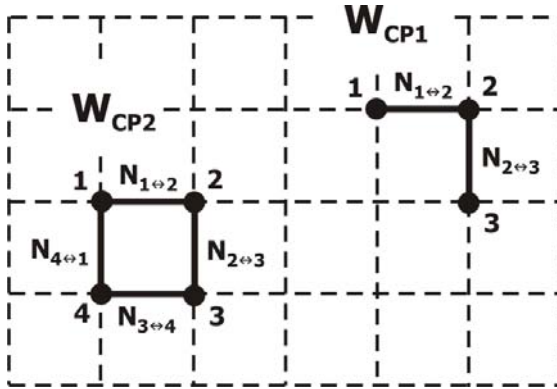


Рис. 11.57. Две из возможных конфигураций, дающих вклад в статистическую сумму (11.253)

В такой постановке суммирование проводится не по состояниям узельных спинов, а по всем возможным замкнутым конфигурациям коррелированных пар, как соприкасающихся, так и не связанных друг с другом, с самопересечениями и самоперекрытиями. То, что все траектории должны быть замкнуты, следует из того факта, что любая сумма $Q(k_i) = \sum_{S_i = \pm 1} (S_i)^{k_i}$ не нулевая только лишь в случае, когда узел i соединен четным числом связей с соседями.

Способ разложения и правила построения диаграмм могут быть и другими. Для сравнения приведем здесь способ разложения, предложенный Онзагером (см. [36]) для аналитического решения двумерной модели Изинга.

В этом подходе все узлы квадратной решетки размера $L \times L$ нумеруются парой индексов S_{kj} , где $1 \leq k, j \leq L$ – дискретные координаты. Тогда гамильтониан модели Изинга в приближении ближайших соседей и без учета магнитного поля имеет вид

$$H = - \sum_{k,j=1}^L (S_{kj} S_{k,j+1} + S_{kj} S_{k+1,j}) .$$

Соответственно, статистическая сумма запишется следующим образом:

$$Z = \sum_{\{S\}} e^{\beta \sum_{kj} (S_{kj} S_{k,j+1} + S_{kj} S_{k+1,j})} = \sum_{\{S\}} \prod_{k,j=1}^L e^{\beta (S_{kj} S_{k,j+1} + S_{kj} S_{k+1,j})}.$$

Далее, учитывая, что $S_{kj} = \pm 1$, получаем:

$$e^{\beta S_{kj} S_{k\bar{j}}} = \text{ch} \beta + S_{kj} S_{k\bar{j}} \text{sh} \beta = \text{ch} \beta (1 + S_{kj} S_{k\bar{j}} \text{th} \beta).$$

Окончательно, для статистической суммы находим:

$$Z = (1 - (\text{th} \beta)^2)^{L^2} S;$$

$$S = \sum_{\{S\}} \prod_{k,j=1}^L (1 + \text{th} \beta S_{kj} S_{k,j+1}) (1 + \text{th} \beta S_{kj} S_{k+1,j}).$$

Можно заметить, что выражение для статистической суммы представляет собой сумму произведений всевозможных степеней $\text{th} \beta$ и S_{kj} . Каждому слагаемому из этой суммы можно сопоставить диаграмму. Например, выражениям

$$(\text{th} \beta)^2 S_{kj} (S_{k+1,j})^2 S_{k+1,j-1};$$

$$(\text{th} \beta)^4 (S_{kj})^2 (S_{k+1,j})^2 (S_{k+1,j-1})^2 (S_{k,j-1})^2$$

отвечают диаграммы, показанные, соответственно, на рис. 11.58.

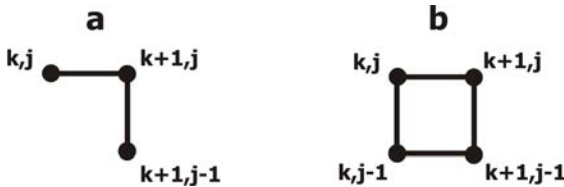


Рис. 11.58. Диаграммы Онзагера

Ненулевой вклад в статистическую сумму будут давать только замкнутые диаграммы, которые содержат четные степени S_{kj} .

В принципе, далее можно сформулировать алгоритм Монте-Карло в этой постановке, но предыдущая схема более общая, годится не только для модели Изинга и в ней легче учесть внешнее магнитное поле.

Для модели Изинга для любого четного k имеем

$$Q(k) = \sum_{S_i = \pm 1} (S_i)^k \equiv 2. \quad (11.256)$$

Следует подчеркнуть, что величина Q – результат суммирования по узельным состояниям, и в общем случае она зависит от конкретной статистики и модели. Эту величину можно отдельно рассчитать

аналитически или численно, в том числе и для непрерывных степеней свободы. Более того, величина Q может быть уникальна для каждого узла (например, в случае присутствия в системе примесного потенциала или неоднородного поля) [53].

Перебирать всевозможные состояния – диаграммы удобно с помощью следующего вспомогательного приема. Определим **спиновую корреляционную функцию** для модели Изинга

$$G(i_1 - i_2) = \langle S_{i_1} S_{i_2} \rangle = \frac{g(i_1 - i_2)}{Z}, \quad (11.257)$$

где

$$g(i_1 - i_2) = \sum_{\{S_i\}} S_{i_1} S_{i_2} e^{-E(\{S_i\})/T}. \quad (11.258)$$

Конфигурации, дающие вклад в g , отличаются от конфигураций, дающих вклад в статистическую сумму, тем, что теперь существуют два выделенных узла i_1 и i_2 с **нечетным** числом связей. Соответствующие состояния узлов i_1 и i_2 тогда определяются выражениями

$$k_{i_1} = 1 + \sum_{b_{i_1}} N_{b_{i_1}}; \quad k_{i_2} = 1 + \sum_{b_{i_2}} N_{b_{i_2}}. \quad (11.259)$$

Эти узлы являются единственными точками, в которых траектория может быть разорвана (рис. 11.59). Вес конфигураций, дающих вклад в g , определяется точно так же, как и для замкнутых конфигураций, **при этом для выделенных узлов полагается**, что

$$Q(k_{i_1}) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{S_{i_1}=\pm 1} (S_{i_1})^{k_{i_1}} |S_{i_1}| \equiv 2; \quad (11.260)$$

$$Q(k_{i_2}) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{S_{i_2}=\pm 1} (S_{i_2})^{k_{i_2}} |S_{i_2}| \equiv 2,$$

так же, как и для остальных узлов. Возможность такого определения веса незамкнутых конфигураций объясняется ниже.

Далее в методе используется так называемый **алгоритм червя** ("worm"), в котором конфигурации, дающие вклад в g , формируются за счет перемещения точек i_1 и i_2 . Под червем

подразумевается разорванная траектория, начинающаяся в узле i_1 и заканчивающаяся в узле i_2 .

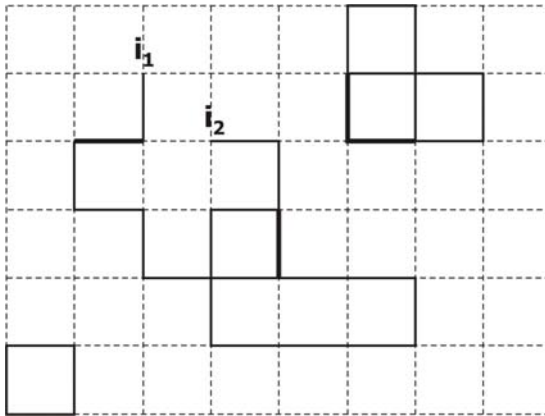


Рис. 11.59. Конфигурация, дающая вклад в спин-спиновую корреляционную функцию G , но не дающая вклада в статистическую сумму. Точки i_1 и i_2 – начало и конец червя соответственно. Толщина линий пропорциональна числу связей между соответствующими узлами, пустые связи показаны пунктирными линиями

В процессе генерации конфигураций могут возникать ситуации, когда начало и конец разорванной траектории совпадают: $i_1 = i_2$; тогда **червь замыкается, и возникает конфигурация, дающая вклад в статистическую сумму (11.251). Только** в эти моменты можно суммировать физические величины, такие как энергия, магнитный момент и т.д. Этим и объясняется возможность выбора веса незамкнутых конфигураций в соответствии с (11.260), так как **вклада в рассчитываемые физические величины разорванные траектории не дают.**

Определим типы подпроцессов, которые реализуют перебор конфигураций:

- 1)** движение левого i_1 или правого i_2 концов червя на соседний узел, с соответствующим увеличением или уменьшением числа связей $N_b \rightarrow N_b \pm 1$;
- 2)** если червь замкнут ($i_1 = i_2$), то появляется возможность передвинуть концы червя в новое произвольное место, т.е. даже

если начало и конец червя совпадают, информация о нем сохраняется.

Алгоритм перебора состояний заключается в следующем.

Вначале определяется тип подпроцесса, в соответствии с которым будет проведено обновление конфигурации: перемещение концов замкнутого червя или движение левого или правого конца имеющегося разомкнутого червя.

Если выбран подпроцесс перемещения концов замкнутого червя, то проверяется, замкнут червь или нет. Если червь незамкнут, то подпроцесс не реализуется, и осуществляется переход к следующему шагу алгоритма. В противном случае случайным образом выбирается новое расположение концов червя i_{new} , и полагается $i_1 = i_2 = i_{\text{new}}$. Далее производится расчет физических величин.

Если выбран процесс движения червя, то проверяется, замкнут он или нет. Если червь замкнут, то процесс не реализуется, и производится расчет физических величин. В противном случае случайным образом выбирается, какой из концов червя будет перемещаться, а затем – узел, на который переместится конец червя (в данном случае это один из ближайших соседей); наконец, выбирается тип действия: рождение или уничтожение связи. Если связь между исходным и новым узлами пуста, а выбрано уничтожение связи, процесс не реализуется.

Получим выражения для подпроцессов рождения и уничтожения связи. Заметим, что процесс рождения связи обратен процессу уничтожения, и, согласно детальному балансу, сдвиг конца червя $i \rightarrow j$ рождение связи $N_{b=\langle ij \rangle} \rightarrow N_b + 1$ уравновешены сдвигом $j \rightarrow i$ и уничтожением связи $N_{b=\langle ji \rangle} \rightarrow N_b - 1$.

Исходя из правил детального баланса, вероятности подпроцессов рождения и уничтожения связи имеют вид:

$$\begin{aligned}
 W_{N_b \rightarrow N_b+1}^{i \rightarrow j, c} &= \frac{\beta}{N_b + 1}; \\
 W_{N_b \rightarrow N_b-1}^{i \rightarrow j, a} &= \frac{N_b}{\beta}.
 \end{aligned}
 \tag{11.261}$$

Задача 11.8. Получить выражения для вероятностей остальных подпроцессов.

Заметим, что в общем случае узельные статистические веса $Q(k_i)$ не являются постоянными величинами, как в рассматриваемом здесь случае модели Изинга (см. (11.256)). Для того, чтобы формулы (11.261) были корректными в общем случае, их нужно модифицировать следующим образом:

$$\begin{aligned}
 W_{N_b \rightarrow N_b+1}^{i \rightarrow j, c} &= \frac{\beta}{N_b + 1} \frac{Q(k_j + 2)}{Q(k_j)}; \\
 W_{N_b \rightarrow N_b-1}^{i \rightarrow j, a} &= \frac{N_b}{\beta} \frac{Q(k_i)}{Q(k_i - 2)}.
 \end{aligned}
 \tag{11.262}$$

Далее, после сравнения вероятностей (11.262) со случайным числом, равномерно распределенным на $(0,1)$, принимается или нет новая конфигурация.

Расчет физических величин осуществляется только в том случае, когда червь замкнут.

Рассмотрим теперь модификацию алгоритма при учете в модели внешнего магнитного поля.

Член в разложении статистической суммы (11.249), учитывающий влияние внешнего поля – это второй множитель

$$\prod_m \sum_{n_m=0}^{\infty} \frac{\beta^{n_m} H^{n_m} (S_m)^{n_m}}{n_m!}.
 \tag{11.263}$$

Теперь, помимо подпроцессов изменения конфигураций, описанных выше, появляются еще несколько подпроцессов, «отвечающих» за поле.

Будем графически отмечать символом * степени величины β_{HS} в (11.263). Тогда типичные конфигурации будут иметь вид, показанный на рис. 11.60.

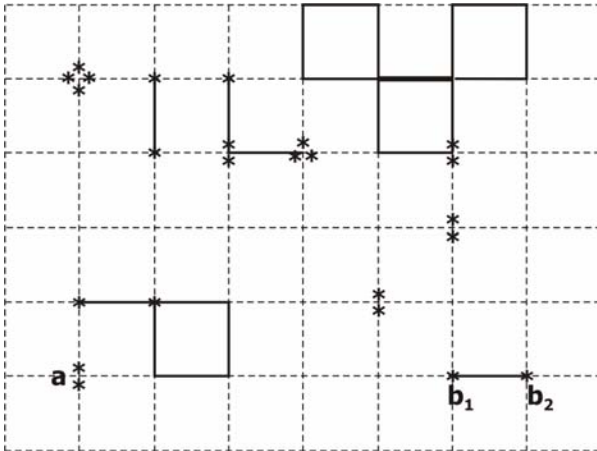


Рис. 11.60. Конфигурация, полученная с учетом внешнего поля. Звездочки соответствуют степеням величины β_{HS} в (11.263)

По сравнению с (11.256), вклад в статистическую сумму от каждого узла будет теперь таким:

$$Q_i \equiv Q(k_i + k_{i*}) = \sum_{S_i = \pm 1} (S_i)^{k_i + k_{i*}}, \quad (11.264)$$

где k_{i*} – число "звездочек", находящихся на узле i . Заметим, что теперь ненулевой вклад в статистическую сумму дают такие конфигурации Q_i , у которых **суммарное число связей и звездочек четное**.

Для учета влияния поля понадобятся еще два подпроцесса. Один из них будет отвечать за рождение и уничтожение пар звездочек на каком-то одном, случайно выбранном узле (конфигурация **a** на рис. 11.60); другой – за рождение и уничтожение комбинации из двух звездочек и связи между ними на случайно выбранных соседних узлах (конфигурация **b1-b2** на рис. 11.60). Необходимость включения в алгоритм первого подпроцесса рождения и

уничтожения пар звездочек на одном узле следует из условия эргодичности алгоритма.

Вероятность рождения пары звездочек на узле i , на котором перед этим находилось n_m звездочек, будет равна

$$W_{n_m \rightarrow n_m+2}^c = \frac{\beta H}{(n_m + 1)(n_m + 2)} \frac{Q(k_i + 2)}{Q(k_i)}. \quad (11.265)$$

Задача 11.9. Получить выражения для вероятностей остальных подпроцессов.

В заключение раздела обсудим вопрос о расчете термодинамических средних. Заметим, что после предварительного расчета всех узельных статистических сумм Q_i суммирование в алгоритме Монте-Карло проводится по новым степеням свободы – конфигурациям-диаграммам. Это эквивалентно переходу в новое представление (переходу к новому базису системы), поэтому необходимо вывести все рассчитываемые физические величины (энергию, магнитный момент, теплоемкость, восприимчивость и т.д.) в этом новом представлении.

Получим вид оператора энергии в новом представлении. Рассмотрим для наглядности только взаимодействие системы с внешним полем, т.е. в выражении для статистической суммы (11.249) оставим только второй член:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\text{CP}} W_{\text{CP}} = \sum_{\{S_1, S_2, \dots, S_N\}} \prod_m \left(\sum_{n_m=0}^{\infty} \frac{(\beta H)^{n_m} (S_m)^{n_m}}{n_m!} \right) = \\ &= \sum_{n_1, n_2, \dots, n_m=0}^{\infty} \frac{(\beta H)^{n_1+n_2+\dots+n_m}}{n_1! n_2! \dots n_m!} \sum_{S_1=\pm 1} (S_1)^{n_1+n_2+\dots+n_m} \dots \sum_{S_m=\pm 1} (S_m)^{n_1+n_2+\dots+n_m}. \end{aligned} \quad (11.266)$$

Выражение для энергии имеет тогда следующий вид:

$$\begin{aligned} E &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \\ &= -\frac{1}{Z} \sum_i H S_i \sum_{n_1, n_2, \dots, n_m=0}^{\infty} \frac{(\beta H)^{n_1+n_2+\dots+n_m}}{n_1! n_2! \dots n_m!} \sum_{S_1=\pm 1} (S_1)^{n_1+n_2+\dots+n_m} \dots \sum_{S_m=\pm 1} (S_m)^{n_1+n_2+\dots+n_m}. \end{aligned} \quad (11.267)$$

Для того, чтобы получить выражение для энергии в новом представлении, необходимо представить (11.267) в виде

$$E = \frac{\sum_{CP} E_{CP} W_{CP}}{\sum_{CP} W_{CP}} = \frac{\sum_{CP} E_{CP} W_{CP}}{Z}. \quad (11.268)$$

С учетом того, что в (11.266) и (11.267) перебираются все возможные конфигурации и, соответственно, в суммах перебираются все возможные степени S_i , после достаточно простых преобразований получаем:

$$E = \frac{\sum_{CP} \left(-\frac{1}{\beta} \sum_i k_{i*} \right) W_{CP}}{\sum_{CP} W_{CP}}. \quad (11.269)$$

Таким образом, оператор энергии в случае взаимодействия спинов только с внешним полем имеет следующий вид:

$$E = -\frac{1}{\beta} \sum_i k_{i*}, \quad (11.270)$$

где суммирование проводится по всем узлам, k_{i*} – число звездочек на узле i . Фактически следует просто посчитать полное число звездочек в диаграмме и поделить его на $-\beta$. Именно эта величина и есть энергия мгновенной конфигурации, которую следует подставлять в расчет термодинамического среднего.

Приведем далее без вывода выражения для остальных термодинамических величин в новом представлении.

С учетом внешнего поля и обменного взаимодействия оператор энергии будет иметь вид

$$E = -\frac{1}{\beta} \left(\sum_b N_b + \sum_i k_{i*} \right), \quad (11.271)$$

первое слагаемое означает суммирование по всем связям между всеми соседними узлами, N_b – число связей между конкретной парой узлов.

Теплоемкость системы определяется следующим выражением:

$$C = \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) - \beta \langle |E| \rangle, \quad (11.272)$$

где энергия находится из выражения (11.271).

Выражения для магнитного момента и восприимчивости будут такими:

$$M = \frac{1}{\beta H} \sum_i k_{i*};$$

$$\chi = \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (11.273)$$

Задача 11.10. Получить выражения (11.271) – (11.273).

Представленный в данном разделе алгоритм обладает большей скоростью сходимости, чем обычный алгоритм Монте-Карло, работающий в узельном представлении. В частности, расчет обычным алгоритмом резко замедляется при приближении к критической точке $T \rightarrow \theta$, так как в этой области нарастают автокорреляционные времена (так называемое **критическое замедление**), в то время как сходимость величин, рассчитываемых при помощи алгоритма червя, основанного на высокотемпературном разложении, практически не изменяется при этих температурах [52].

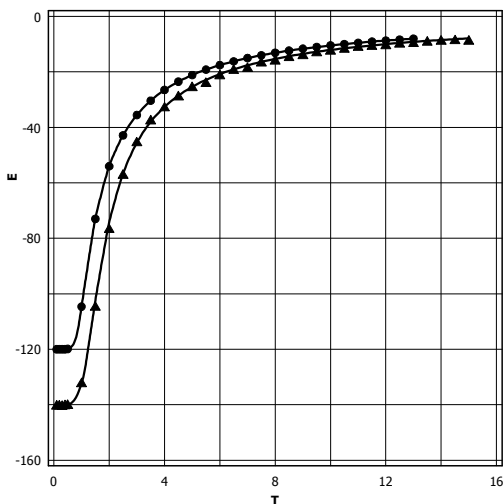


Рис. 11.61. Энергия ферромагнитной цепочки Изинга из 100 узлов. Точки и треугольники – расчет алгоритмом червя, сплошные линии – аналитический расчет. Треугольниками обозначен расчет при магнитном поле $H = 0.4$, точками – при $H = 0.2$

Для демонстрации точности алгоритма на рис. 11.61 представлен расчет энергии одномерной периодической цепочки Изинга длиной $L = 100$ узлов, в сравнении с точным аналитическим решением. Для расчета каждой точки осуществлялось $\sim 10^7$ элементарных шагов диаграммного алгоритма Монте-Карло.

Задачи

11.11. Реализовать алгоритм генерации случайных чисел с заданным законом распределения, используя метод фон Неймана. С его помощью сгенерировать N случайных чисел, распределенных с плотностью $p(x) \sim e^{-x^2}$ на отрезке $[0.5, 1]$. Построить гистограммы полученного распределения с шагом 0.05 для $N = 10000$ и $N = 100000$. Нормировав гистограммы, сравнить их огибающие с функцией $p(x)$.

11.12. Реализовать алгоритм генерации нормально распределенных случайных чисел с плотностью $p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} e^{-\frac{x^2}{2a}}$. С его помощью сгенерировать N случайных чисел, построить гистограммы полученного распределения для $N = 10000$ и $N = 100000$. Нормировав гистограммы, сравнить их огибающие с функцией $p(x)$.

11.13. Реализовать алгоритм генерации экспоненциально распределенных случайных чисел на интервале (a, b) , используя метод обратной функции. Построить гистограммы полученного распределения для $N = 10000$ и $N = 100000$ случайных чисел. Нормировать гистограммы и сравнить их огибающие с функцией распределения. Используя полученные случайные числа $\xi_i, i = 1, \dots, N$, рассчитать $\langle \xi \rangle$ и $\langle \xi^2 \rangle$, сравнить полученные результаты с точными значениями.

11.14. Реализовать алгоритм генерации случайных чисел с распределением Пуассона с параметром $\mu = 5$. Построить гистограммы полученного распределения для $N = 10000$ и $N = 100000$ случайных чисел. Используя полученные случайные числа $\xi_i, i = 1, \dots, N$, рассчитать $M(\xi)$ и $D(\xi)$, сравнить полученные результаты с точными значениями.

11.15. Обобщить алгоритм из задачи 11.1 для генерации двумерных распределений случайных величин методом фон Неймана. Сгенерировать N случайных чисел, распределенных с плотностью $f(x, y) \sim e^{-x^2 - y^2}$ в круге единичного радиуса. Построить гистограммы полученного распределения для $N = 50000$ и $N = 200000$. Нормировав гистограммы, сравнить их огибающие с функцией f .

11.16. Исследовать одномерную ферромагнитную модель Изинга

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z - H \sum_i S_i^z$$

с периодическими граничными условиями методом Монте-Карло. Рассчитать среднюю энергию системы, средний магнитный момент, теплоемкость и намагниченность для систем из $N = 8, 12, 24, 48, 96$ узлов и построить их температурные зависимости для значений внешнего поля $H = 0; 0.2J; 0.5J$ для температур $T = 0 \div 5J$.

На тех же графиках построить **точные** зависимости всех величин в пределе бесконечной большой системы. Сравнить результаты.

Построить графики зависимостей всех рассчитанных величин от размера системы. Аппроксимировать результаты к термодинамическому пределу и сравнить с точным решением.

11.17. Исследовать двумерную ферромагнитную модель Изинга

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z - H \sum_i S_i^z$$

с периодическими граничными условиями методом Монте-Карло. Рассчитать среднюю энергию системы, средний магнитный момент, теплоемкость и намагниченность для систем $4 \times 4; 8 \times 8; 16 \times 16$ и построить их температурные зависимости для значений внешнего поля $H = 0; 0.2J; 0.5J$ для температур $T = 0 \div 5J$.

Сравнить полученные результаты с решением Онзагера и приближением среднего поля.

Построить графики зависимостей всех рассчитанных величин от размера системы. Аппроксимировать результаты к термодинамическому пределу и сравнить с точным решением.

11.18. В условиях задачи 11.16 исследовать антиферромагнитную одномерную модель Изинга с максимальной проекцией спина на узле $S_{\max} = 3/2$.

11.19. В условиях задачи 11.17 исследовать антиферромагнитную двумерную модель Изинга с максимальной проекцией спина на узле $S_{\max} = 3/2$.

11.20. Решить задачу 11.16 методом высокотемпературного разложения.

11.21. Решить задачу 11.17 методом высокотемпературного разложения.

11.22. Решить задачу 11.18 методом высокотемпературного разложения.

11.23. Решить задачу 11.19 методом высокотемпературного разложения.

Список литературы

(жирным шрифтом выделена основная литература)

1. **Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория.** М.: Наука, 1989. 768 с.
2. **Вентцель Е.С., Овчаров Л.А. Теория вероятностей.** М.: Наука, 1973. 364 с.; **Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Т. 1, 2.** М.: Наука, 1964. 493 с.
3. **Маделунг О. Теория твердого тела.** М.: Наука, 1980. 416 с.
4. **Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела.** М.: Мир, 1979. В 2-х т.
5. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands // Proc. Roy. Soc., London. 1963. Ser. A, v. 276. P. 238.
6. Rushan H., *et al.* Calculation of the parameters of extended Hubbard Hamiltonian for superconducting copper oxides // J. Phys. Cond. Matter. 1991. V. 3. P. 8059.
7. Lieb E.H., Wu F.Y. Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension // Phys. Rev. Lett. 1968. V. 20. P. 1445.
8. Изюмов Ю.А., Скрябин Ю.Н. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. М.: Наука, 1987. 264 с.
9. Hubbard J. // Proc. Roy. Soc., London. 1964. Ser. A, v. 277. P. 237.
10. **Елесин В.Ф., Кашурников В.А. Физика фазовых переходов.** М.: МИФИ, 1997. 178 с.
11. Изюмов Ю.А., Кацнельсон М.И., Скрябин Ю.Н. Магнетизм коллективизированных электронов. М.: ФМЛ, 1994. 366 с.
12. Fisher M.P.A., Weichman P.B., Grinstein G., and Fisher D.S. Boson localization and the superfluid – insulator transition // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. P. 546.
13. Greiner M. *et al.* // Nature. 2002. V. 415. P. 39.
14. Giamarchi T. and Schulz H.J. Anderson localization and interactions in one dimensional metal // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 325.
15. Kashurnikov V.A., Svistunov B.V. Exact diagonalization plus renormalization group accurate method for 1D superfluid – insulator transition study // Phys. Rev. B. 1996. V. 53. P. 11776.
16. Runge K.J. Numerical study of the onset of superfluidity in two-dimensional, disordered, hard core bosons // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. P. 13136.
17. Kashurnikov V.A., Krasavin A.V., Svistunov B.V. Phase Transitions in One-Dimensional Truncated Bosonic Hubbard Model and Its Spin-1 Analog // Phys.Rev. B. 1998. V. 58. P. 1826.

18. Byers N., Yang C.N. Theoretical considerations concerning quantized magnetic flux in superconducting cylinders // Phys. Rev. Lett. 1961. V. 7. P. 46.
19. Жен П. Сверхпроводимость металлов и сплавов. М.: Мир, 1968. 280 с.
20. **Шмидт В.В. Введение в физику сверхпроводников.** М.: МЦНМО, 2000. 397 с.
21. Scalapino D.J., White S.K., Zang S. Insulator, metal or superconductor: The criteria // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 7995; Asaad F.F., Hanke W., Scalapino D.J. Temperature derivative of the superfluid density and flux quantization as a criteria for superconductivity in two-dimensional Hubbard models // Phys. Rev. B. 1994. V. 50. P. 12835.
22. Aharonov V., Bohm D. Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory // Phys. Rev. 1959. V. 115. P. 485.
23. Wilczek F. // Phys. Rev. Lett. 1982. V. 49. P. 957.
24. Tupitsyn I.S., Barbara B. Quantum Tunneling in Molecular Complexes with Large Spins. Effect of the Environment // Review in book "Magnetoscience from Molecules to Materials", ed. Miller and Drillon, Wiley VCH Verlag GmbH, July 2000.
25. Карцев П.Ф., Кашурников В.А. Влияние анизотропии на запутанность квантовых состояний в спиновой цепочке // Письма в ЖЭТФ. 2004. Т. 80. С. 498.
26. Елютин П.В., Кривченков В.Д. Квантовая механика с задачами. М.: Наука, 1976. 336 с.
27. Звездин А.К. Магнитные молекулы и квантовая механика // Природа. 2000. Т. 12.
28. Изюмов Ю.А., Скрыбин Ю.Н. Базовые модели в квантовой теории магнетизма. Екатеринбург. УрО РАН, 2002. 260 с.
29. Botet R., Jullien R. and Kolb M. Finite-size-scaling study of the spin-1 Heisenberg-Ising chain with uniaxial anisotropy // Phys. Rev. B. 1983. V. 28. P. 3914.
30. Sólyom J., and Ziman T.A.L. Ground-state properties of axially anisotropic quantum Heisenberg chains // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. P. 3980.
31. **Киттель Ч. Введение в физику твердого тела.** М.: Наука, 1978. 792 с.
32. **Займан Дж. Принципы теории твердого тела.** М.: Мир, 1966.
33. Кашурников В.А., Подливаев А.И., Свистунов Б.В. Сверхтекучесть в одномерной бозонной модели Хаббарда: численный спектроскопический анализ // Письма в ЖЭТФ. 1995. Т. 61. С. 375.
34. Писсанецки С. Технология разреженных матриц. М.: Мир, 1988.
35. **Маделунг О. Физика твердого тела. Локализованные состояния.** М.: Наука, 1985. 184 с.
36. **Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. Ч. 1.** М.: Наука, 1976. 584 с.

37. **Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Теоретическая физика. Т. 9. Статистическая физика. Ч. 2.** М.: Наука, 1978. 448 с.
38. Economou E.N. Green's Functions in Quantum Physics. Springer Verlag, 1979. 251 p.
39. Друзкин В.Л., Кижнерман Л.А. // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1991. Т. 31. С. 970.
40. Климонтович Ю.Л. Статистическая физика. М.: Наука, 1982. 608 с.
41. Румер Ю.Б., Рывкин М.Ш. Термодинамика. Статистическая физика и кинетика. М.: Наука, 1972. 400 с.
42. **Соболь И.М. Метод Монте-Карло.** М.: Наука, 1985. 80 с.
43. Уиттл П. Вероятность. М.: Наука, 1982. 288 с.
44. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth H.N., *et al.* Equation of State Calculations by Fast Computing Machines // J. Chem. Phys. 1953. V. 21. P. 1087.
45. **Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике.** М.: Наука, 1990. 132 с.
46. **Браут Р. Фазовые переходы.** М.: Мир, 1967. 288 с.
47. Glauber R.J. // J. Math. Phys. 1963. V. 4. P. 294.
48. Kawasaki K. Phase Transitions and Critical Phenomena / Eds C. Domb, M.S. Green. N.Y.: Academic Press. 1976. V. 2. P. 443.
49. Кашурников В.А., Руднев И.А., Зюбин М.В. Намагниченность двумерных сверхпроводников с дефектами // ЖЭТФ. 2002. Т. 121. С. 442.
50. Одинцов Д.С., Кашурников В.А., Руднев И.А. Намагниченность и транспортные потери сверхпроводящей пластины с током // Научная сессия МИФИ. Сборник трудов. Т. 4. С. 178.
51. Биндер К., Хеерман Д.В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. М.: Наука, 1995. 144 с.
52. Prokof'ev N.V., and Svistunov B.V. Worm Algorithms for Classical Statistical Models // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87. 160601.
53. Kashurnikov V.A., Prokof'ev N.V., and Svistunov B.V. Critical Temperature Shift in Weakly Interacting Bose Gas // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87. 120402.
54. Dagotto E. Correlated electrons in high-temperature superconductors // Rev. Mod. Phys. 1994. V. 60. P. 763.
55. Кашурников В.А., Руднев И.А., Зюбин М.В. Упорядоченные состояния и структурные переходы в системе вихрей Абрикосова с периодическим пиннингом // ЖЭТФ. 2003. Т. 123. С. 1212.