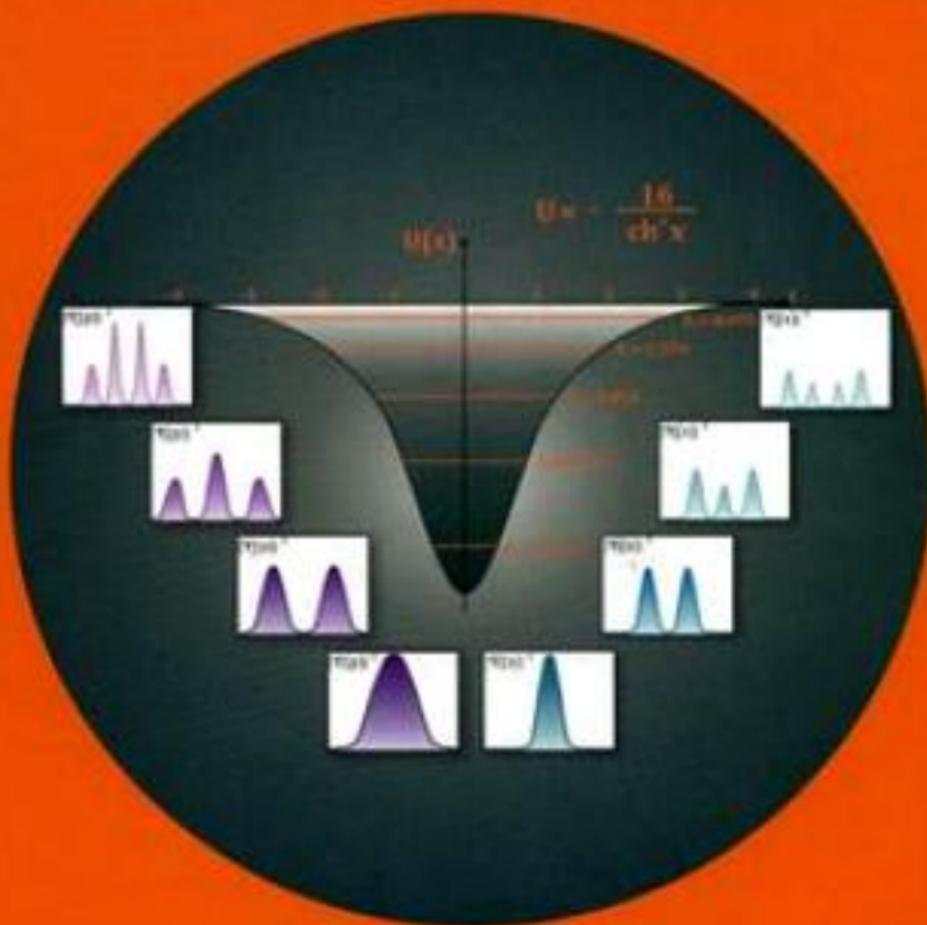


В.А. Кашурников, А.В. Красавин

# Численные методы квантовой статистики



**В. А. Кашурников**

**А. В. Красавин**

# **Численные методы квантовой статистики**

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие . . . . .	8
Введение . . . . .	10

### **I. Квантовые одночастичные задачи**

<b>Глава 1. Матричная формулировка квантовой механики. Операции с матрицами . . . . .</b>	<b>17</b>
1.1. Уравнение Шредингера . . . . .	17
1.2. Собственно-энергетическое представление и собственные функции оператора $H$ . . . . .	18
1.3. Определение спектра. Инварианты матриц . . . . .	21

<b>Глава 2. Квантовые одночастичные задачи . . . . .</b>	<b>24</b>
2.1. Бесконечная потенциальная яма . . . . .	25
2.2. Конечная потенциальная яма . . . . .	28
2.3. Одночастичная задача в импульсном представлении . . . . .	31

### **II. Квантовые многочастичные задачи**

<b>Глава 3. Формализм вторичного квантования. Представление чисел заполнения . . . . .</b>	<b>41</b>
3.1. Одномерный гармонический осциллятор . . . . .	41
3.2. Поле смещений в струне . . . . .	44
3.3. Формализм вторичного квантования . . . . .	47
3.3.1. Одночастичный базис (47). 3.3.2. Двух- и многочастичный базисы. Коммутационные соотношения (48). 3.3.3. Базис в представлении чисел заполнения. Действие операторов на волновые функции из этого базиса в случае статистики Ферми (53). 3.3.4. Операторы физических величин (56).	
3.4. Полевые операторы и вторичное квантование . . . . .	60

---

<b>Глава 4. Модели сильнокоррелированных систем. Статистика Ферми . . . . .</b>	62
4.1. Модель сильной связи . . . . .	62
4.2. Гамильтонова матрица и базис для модели сильной связи. . . . .	64
4.3. Аналитическое решение модели сильной связи без взаимодействия . . . . .	69
4.4. Модель Хаббарда . . . . .	73
4.4.1. Гамильтонова матрица модели Хаббарда и ее расширенных аналогов (76). 4.4.2. Спектр модели Хаббарда и приближение среднего поля (78). 4.4.3. Инварианты в модели Хаббарда (82).	
4.5. Расчет квантово-механических средних . . . . .	84
4.6. Расчет двумерной фермионной системы для задачи о дробном квантовом эффекте Холла . . . . .	87
4.6.1. Дробный и целый квантовые эффекты Холла (87). 4.6.2. Система уровней в первой зоне Ландау. Метод точной диагонализации (91). 4.6.3. Численное моделирование (93).	
<b>Глава 5. Бозе-статистика. Модель Бозе–Хаббарда . . . . .</b>	99
5.1. Вторичное квантование в случае статистики Бозе . . . . .	99
5.2. Модель Бозе–Хаббарда . . . . .	102
5.3. Построение гамильтоновой матрицы . . . . .	105
5.4. Аналитическое решение модели Бозе–Хаббарда без взаимодействия . . . . .	106
5.5. Инварианты в модели Бозе–Хаббарда . . . . .	109
5.6. Градиентно-инвариантная фаза. Токовые состояния . . . . .	111
<b>Глава 6. Спиновые степени свободы . . . . .</b>	122
6.1. Спиновые операторы и узельный базис . . . . .	122
6.2. Кvantовые спиновые модели . . . . .	128
6.3. Формирование гамильтоновой матрицы для спиновых моделей . . . . .	133
6.4. Инварианты в спиновых моделях . . . . .	136
6.5. Некоторые результаты для модели Гейзенберга. Спектр возбуждений . . . . .	140
6.6. Соотношения и предельные случаи для фермионных, бозонных и спиновых моделей . . . . .	147
6.6.1. Связь между бозонной и спиновыми моделями (147). 6.6.2. Соответствие между моделью Хаббарда и спиновыми моделями (149).	
<b>Глава 7. Некоторые физические и математические особенности метода точной диагонализации . . . . .</b>	151
7.1. Конечные кластеры и трансляционная инвариантность . . . . .	151
7.2. Точная диагонализация больших матриц. . . . .	167
7.2.1. Пространства и инвариантные подпространства. Процедура Рэлея–Ритца (168). 7.2.2. Алгоритм Ланцша (170).	
7.3. Расчет функций линейного отклика и плотности состояний . . . . .	173

### III. Термодинамика. Метод Монте-Карло

<b>Глава 8. Статистическое описание систем многих частиц . . . . .</b>	185
8.1. Микроканонический ансамбль . . . . .	187
8.2. Канонический ансамбль . . . . .	188
8.3. Большой канонический ансамбль . . . . .	191
8.4. Примеры . . . . .	194
8.4.1. Совокупность магнитных моментов (195). 8.4.2. Модели сильной связи (197). 8.4.3. Одномерная модель Изинга (200).	

<b>Глава 9. Статистика Больцмана, Ферми и Бозе. Плотность состояний . . . . .</b>	206
9.1. Функции распределения . . . . .	206
9.2. Плотность состояний . . . . .	211
9.3. Термодинамика идеального ферми-газа . . . . .	213
9.4. Термодинамика идеального бозе-газа. . . . .	217

<b>Глава 10. Методы Монте-Карло для физических систем . . . . .</b>	220
10.1. Случайные распределения. Вероятность . . . . .	220
10.1.1. Метод обратной функции и метод фон Неймана (221). 10.1.2. Нормальное распределение (227). 10.1.3. Почти линейная плотность распределения (230). 10.1.4. Двумерные распределения (233).	
10.2. Случайные величины и центральная предельная теорема. Общая схема метода Монте-Карло . . . . .	236
10.3. Расчет интегралов методом Монте-Карло . . . . .	244
10.4. Марковская цепь и принцип детального равновесия . . . . .	249
10.4.1. Марковская цепь. Понятие эргодичности (249). 10.4.2. Принцип детального равновесия (251).	
10.5. Практическая реализация методов Монте-Карло . . . . .	254
10.5.1. Модель Изинга (254). 10.5.2. Решеточный газ (265). 10.5.3. Моделирование вихревой структуры в высокотемпературных сверхпроводниках (275).	
10.6. Расчет термодинамических средних и оценка погрешности. Автокорреляционный анализ в стохастическом моделировании . . . . .	289
10.7. Диаграммные методы и высокотемпературное разложение. Преобразование операторов физических величин . . . . .	298

### IV. Квантовые методы Монте-Карло

<b>Глава 11. Дискретные квантовые алгоритмы Монте-Карло . . . . .</b>	313
11.1. Траекторный квантовый алгоритм Монте-Карло (World-Line Quantum Monte-Carlo Algorithm) . . . . .	313

11.1.1. Статистика Ферми (314).	11.1.2. Проблема знака (Minus Sign Problem) в квантовом алгоритме Монте-Карло (327).	11.1.3. Особенности статистики Бозе (330).	11.1.4. Winding numbers (332).	11.1.5. Связь фермионного знака и winding numbers в траекторных методах (334).	11.1.6. Особенности спиновой статистики (339).	11.1.7. Модификации траекторного алгоритма Монте-Карло для конкретных задач (342).	
11.2. Квантовый детерминантный метод МК . . . . .	362						
11.2.1. Основные принципы детерминантного алгоритма (362).							
11.2.2. Конкретная реализация метода (367).							
11.2.3. Расчет плотности состояний с помощью детерминантного алгоритма (374).							
11.2.4. Методы восстановления плотности состояний с помощью процедуры Монте-Карло (377).							
11.3. Петлевые алгоритмы (Loop algorithms) . . . . .	387						
11.4. Метод континуального интегрирования (Path integral Monte Carlo) . . . . .	396						
11.4.1. Матрица плотности и интегралы по траекториям (397).							
11.4.2. Формулировка алгоритма PIMC (408).							
11.4.3. Расчет квантовых средних и некоторые результаты (410).							
<b>Глава 12. Точные квантовые алгоритмы с отсутствием ошибки разложения Троттера . . . . .</b>	<b>413</b>						
12.1. Траекторный метод в непрерывном времени (Continuous Time World Line — CTWL) . . . . .	416						
12.1.1. Представление взаимодействия при конечных температурах (416).							
12.1.2. Общая формулировка CTWL-алгоритма (419).							
12.1.3. CTWL-алгоритм для дискретного базиса. Статистика Ферми и Бозе (421).							
12.1.4. Расчет средних и некоторые результаты расчета методом CTWL (434).							
12.1.5. Алгоритм CTWL для спиновой статистики (441).							
12.1.6. Проблема знака в алгоритме CTWL. Особенности непрерывного времени и winding numbers (444).							
12.1.7. Алгоритмы на основе CTWL (444).							
12.2. Континуальное интегрирование в непрерывном времени . . . . .	462						
12.2.1. Алгоритм PIMC-WA (462).							
12.2.2. Алгоритм PIMC-WA. Прямое суммирование диаграмм в континуальном представлении (479).							
12.3. Детерминантный метод для фермионов в непрерывном времени . . . . .	484						
12.3.1. Описание метода (485).							
12.3.2. Обновление конфигураций (486).							
12.3.3. Сдвиг взаимодействия для уменьшения проблемы знака (487).							
12.4. Редуцированный детерминантный метод для фермионов . . . . .	490						
12.4.1. Модель и метод (490).							
12.4.2. Численные результаты (493).							
12.5. Диаграммные методы Монте-Карло . . . . .	495						
12.5.1. Введение (495).							
12.5.2. Диаграммный метод Монте-Карло. Полярон Фрелиха (496).							
12.5.3. Обобщение диаграммного метода Монте-Карло на задачи о возбуждениях бозонного типа (514).							
12.5.4. Оптическая проводимость полярона Фрелиха (519).							
12.5.5. Полярон в модели Рашибы–Пекара (524).							
12.5.6. Задача об экситоне (527).							
12.5.7. Дырка с электронно-фоновым взаимодействием в $t$ - $J$ -модели (532).							
12.6. Обобщенный диаграммный метод Монте-Карло . . . . .	535						
12.6.1. Введение (535).							
12.6.2. Конфигурационное пространство собственных энергетических диаграмм (537).							
12.6.3. Заключение (554).							
12.7. Методы высокотемпературного разложения . . . . .	556						

---

12.7.1. Общая формулировка SSE-алгоритма (557). 12.7.2. Расчет квантовомеханических средних (560).		
12.8. Высокотемпературное разложение и петлевые алгоритмы . . . . .	569	
12.8.1. Формулировка SSE-алгоритма для XXZ-модели (571). 12.8.2. SSE с операторно-петлевыми обновлениями (572). 12.8.3. SSE с прямыми петлями (577). 12.8.4. Метод SSE с прямыми петлями для XXZ-модели (579).		
12.9. Процедуры перевзвешивания ( <i>Reweighting</i> ) . . . . .	584	
Заключение . . . . .	586	
 Приложение 1. Преобразование Хаббарда–Стратоновича . . . . .		587
Приложение 2. Теорема о следе экспоненты билинейной формы одиночастичных операторов . . . . .	590	
Приложение 3. Интегральное соотношение между спектральной плотностью и температурной функцией Грина . . . . .	592	
Приложение 4. Вывод разложения статистической суммы . . . . .	600	
Приложение 5. CTWL-метод: формулы для баланса . . . . .	602	
Приложение 6. CTWL-метод: алгоритм работы со списком имен . . . . .	604	
Приложение 7. Представление многочастичного коррелятора через определители от одночастичных функций Грина . . . . .	607	
Приложение 8. Процедуры обновлений для диаграммного метода Монте-Карло . . . . .	609	
П.8.1. Класс I: обновления, не изменяющие порядок диаграммы . . . . .	609	
П.8.1.1. Сдвиг вершины по времени (609). П.8.1.2. Изменение угла переданного импульса (609). П.8.1.3. Изменение модуля переданного импульса (610). П.8.1.4. Изменение структуры диаграммы (610). П.8.1.5. Изменение длины диаграммы во времени (610). П.8.1.6. Изменение константы связи (611). П.8.1.7. Изменение внешнего импульса (611).		
П.8.2. Класс II: обновления, изменяющие порядок диаграммы . . . . .	611	
П.8.2.1. Добавление и уничтожение фононных пропагаторов (612). П.8.2.2. Добавление и уничтожение пропагаторов, присоединенных к концу диаграммы (614).		
Список литературы . . . . .	615	

## Предисловие

Эта книга написана на основе курса лекций, читаемого в течение ряда лет студентам Московского инженерно-физического института (государственного университета), и включает в себя многие вопросы физики конденсированного состояния и численного моделирования, являющиеся предметом научных интересов авторов.

Материал книги 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. Последняя часть книги, посвященная квантовым методам Монте-Карло, требует более детальных знаний по физике конденсированного состояния вещества и срьезной теоретической подготовки по физико-математическим дисциплинам на уровне старших курсов физических факультетов.

Книга организована 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; далее дано представление о классических 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.

Последняя часть книги предназначена для более подготовленного читателя, знакомого как с современным состоянием физики конденсированного состояния, так и с новыми эффективными численными алгоритмами. Она посвящена подробному обзору современных квантовых методов Монте-Карло, развитых за последние десятилетия. Сначала рассказывается о дискретных по мнимому времени методах, первых квантовых алгоритмах Монте-Карло, начиная с работ Хирша и др. 1981 г., а далее обсуждаются более современные подходы в непрерывном времени, интенсивно развивающиеся в последние годы. Детально обсуждены основные особенности численных схем, построения алгоритмов, так что искушенный читатель может самостоятельно воспроизвести их. Кратко продемонстрированы реальные результаты расчетов в рамках наиболее востребованных моделей сильнокоррелированных систем. Подробно рассмотрены детали многих современных квантовых алгоритмов, таких как петлевые, детерминантные и червячные методы, диаграммные алгоритмы Монте-Карло. Обсуждены преимущества расчета в расширенном фазовом пространстве с использованием фиктивных слагаемых; рассматриваются проблема сбора статистики *winding numbers* и проблема знака.

Книга будет полезна студентам старших курсов физико-математических специальностей университетов, аспирантам и исследователям, изучающим физику сильнокоррелированных мезоскопических систем (nanoструктур) и интересующихся динамично развивающейся областью современной физики конденсированного состояния — численным моделированием реальных физических систем.

## **Введение**

Современная физика конденсированного состояния в настоящее время сконцентрирована на сложных мезоскопических системах и сильнокоррелированных структурах, таких как *nanoструктуры* (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 настоящей монографии является ознакомление читателя 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 последние годы область квантово-статистических численных методов претерпела революционные изменения. В задачах, десятилетиями остававшихся нерешенными, новые алгоритмы позволили получить ответы с точностью до долей процентов. Бурный алгоритмический прогресс продолжается с неубывающей производной.

Оборотной стороной быстрого прогресса является явное отставание учебной литературы и монографий от научных обзоров и оригинальных статей. Авторы надеются, что представленная книга поможет заполнить этот пробел.

В монографии 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.

Последняя часть книги посвящена достаточно подробному обзору современных методов квантового Монте-Карло, развитых за последние десятилетия. Рассмотрение начинается с первых дискретных по мнимому времени методов, траекторных и детерминантных квантовых алгоритмов Монте-Карло, начиная с работ Хирша и др. Затем обсуждаются более современные подходы в непрерывном времени и с расширенным, фиктивным фазовым пространством, интенсивно развивающиеся в последние годы: петлевые, червячные алгоритмы, расчеты в представлении матрицы плотности, высокотемпературное разложение, детерминантные и диаграммные квантовые методы Монте-Карло. Проводится детальное обсуждение основных особенностей численных схем, часто вплоть до построения алгоритмов. Продемонстрированы реальные результаты расчетов в рамках наиболее востребованных моделей сильнокоррелированных систем. Параллельно приводятся необходимые сведения из термодинамики, квантовой статистики, численных методов, диаграммной техники, техники функций Грина и др. Обсуждается известная проблема знака в квантовых алгоритмах Монте-Карло. Показываются методы расчета коллективных свойств с помощью статистики *winding numbers*.

## **Часть I**

# **КВАНТОВЫЕ ОДНОЧАСТИЧНЫЕ ЗАДАЧИ**

Целью данного раздела является формулировка численной схемы для расчета квантовых состояний одной частицы во внешних полях. Как правило, подобные задачи сводятся к дифференциальному уравнению второго порядка для волновой функции частицы, а далее ищется решение этого уравнения, и из условий ограниченности волновой функции и выполнения граничных условий находятся разрешенные значения энергии — спектр и соответствующие собственные функции. По крайней мере, для одномерных задач это достаточно эффективный метод расчета спектра и волновых функций [1]. Что касается двумерной или трехмерной ситуации, то аналитических решений в этом случае существенно меньше, а решение задачи в произвольном потенциале практически невозможно. В этом случае альтернативы численному анализу практически нет.

Для численного решения спектральной задачи предлагается следующая схема расчета: формулируется матричное представление для оператора энергии и других физических операторов в дискретном базисе. Далее задача сводится к спектральной задаче для гамильтоновой матрицы. Важно, что задачу можно решать для произвольного внешнего потенциала как в двумерном, так и в трехмерном случае. Показано, как работать с получающимися собственными волновыми функциями, разложенными по базисным функциям. Обсуждаются вопросы расчета корреляционных функций, квантовых средних. Показано, как формировать различные базисные функции (координатные, импульсные), демонстрируется независимость результатов от выбора базиса. Проводится анализ численного решения спектральной задачи, качественного различия дискретного и непрерывного спектров с точки зрения численного ответа. Обсуждаются некоторые математические аспекты расчета, необходимые для спектральной задачи — свойства матриц и их инварианты, вопросы вырожденных состояний, преобразования Фурье и т. п.

## Глава 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  $\Psi$  называется *волновой функцией* системы [1]. Согласно *принципу суперпозиции состояний* квантовой механики, все уравнения, которым удовлетворяют волновые функции, должны быть линейными по  $\Psi$ . Каждой вещественной физической величине может быть поставлен в соответствие эрмитов оператор, вид которого может быть определен из физических соображений.

Волновая функция  $\Psi$  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  $\Phi_n$  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:

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

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  $\Phi_n$ , так что  $\int \Phi_n \Phi_{n'} dx = \delta_{nn'}$ , а интеграл понимается в смысле скалярного произведения по степеням свободы. Разложим искомую волновую функцию  $\Psi$  уравнения Шредингера по этой полной системе:

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

Подставим это разложение в уравнение Шредингера, получим

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

Далее, умножим это уравнение с обеих сторон на  $\Phi_m^*$  и проинтегрируем по степеням свободы. В итоге, используя ортонормированность базисных функций  $\Phi_n$ , 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 ко-

эффициентов 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  $\Psi_m$ , обнаружим ее в состоянии  $\Phi_n$  из исходного базиса. Так как функции  $\Psi_m$  — собственные, то они обладают свойством  $H\Psi_m = E_m \Psi_m$ , т. е. в базисе функций  $\Psi$  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  $\Psi$  — собственная функция, отвечающая собственному значению  $E$ , то и  $C\Psi$  ( $C$  — константа) есть собственная функция, отвечающая тому же собственному значению.**

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

Утверждения 1 и 2 практически очевидны.

**3. Собственные функции  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ , отвечающие различным собственным значениям  $E_1$  и  $E_2$ , ортогональны.**

По определению  $H\Psi_1 = E_1\Psi_1$ ;  $H\Psi_2 = E_2\Psi_2$ . Умножим первое уравнение на  $\Psi_2$ , а второе — на  $\Psi_1$ , 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:

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

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  $\widehat{L}$  и  $\widehat{M}$  имеют общую систему собственных функций, то они коммутируют друг с другом:  $[\widehat{L}\widehat{M}] = \widehat{L}\widehat{M} - \widehat{M}\widehat{L} = 0$ . 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:

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

$\mu_n, \lambda_n$  — соответствующие собственные числа операторов, что и доказывает утверждение.

Докажем обратное утверждение. Общая система собственных функций означает, что обе матрицы  $L_{mn}$  и  $M_{mn}$  имеют диагональный вид в базисе этих

собственных функций. Рассмотрим, для определенности, систему собственных функций оператора  $L$ . Тогда имеем следующее:

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

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  $\lambda_n$  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  $M_{mn}$ .

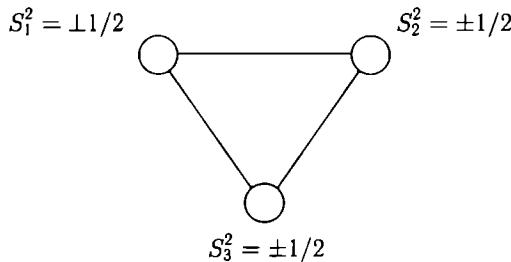
Это свойство можно проиллюстрировать применительно к конкретным физическим задачам следующим образом: если какой-нибудь оператор (например, оператор числа частиц, оператор суммарного спина системы и т. д.) коммутирует с гамильтонианом, то в собственно энергетическом представлении, после нахождения спектра 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.

Рассмотрим систему из трех спинов (подробно системы со спиновыми степенями свободы будут рассмотрены в гл. 8), описываемую гамильтонианом

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

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

Каждый из спинов, таким образом, может находиться в одном из двух состояний: либо в состоянии  $S_i = +1/2$ , либо в состоянии  $S_i = -1/2$ , всего в системе будет


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

$2^3 = 8$  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.  $H S^Z - S^Z H = 0$ , 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  $1 \times 1$ , отвечающий  $S^Z = 3/2$ ; блок размером  $3 \times 3$ , отвечающий  $S^Z = 1/2$ ; блок размером  $3 \times 3$ , отвечающий  $S^Z = -1/2$ ; и блок размером  $1 \times 1$ , отвечающий  $S^Z = -3/2$ .

### 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:

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

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 считаетсяолько 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:  $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_N|$ . Зададим произвольный вектор  $X_0$  и будем последовательно вычислять векторы  $X_{n+1} = HX_n$ . Разложим нулевой вектор по собственным функциям, как будто спектральная задача решена:  $X_0 = \sum_n C_n \Psi_n$ . Тогда можно показать, что

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

Отсюда получаем оценку для максимального собственного значения:

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

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

$$H \rightarrow H \pm \Lambda I, \quad (1.20)$$

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

## Глава 2

### КВАНТОВЫЕ ОДНОЧАСТИЧНЫЕ ЗАДАЧИ

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

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.1)$$

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

Для независящего от времени потенциала решения уравнения (2.1) можно искать в виде

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}. \quad (2.2)$$

Частица, находящаяся в состоянии, описываемом волновой функцией (2.2), имеет конкретное значение энергии  $E$ . Подставив (2.2) в (2.1), получаем *стационарное уравнение Шредингера*:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

или

$$H \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}), \quad (2.4)$$

где

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) \quad (2.5)$$

— *оператор энергии (гамильтониан)* системы.

Пусть оператор  $H$  имеет  $n$  собственных функций  $\varphi_n$  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. 2.1. Состояние с наименьшей энергией называется *основным состоянием* системы. Общее решение (2.4) можно представить в виде суперпозиции собственных функций гамильтониана:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n C_n \varphi_n(\mathbf{r}), \quad (2.6)$$

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

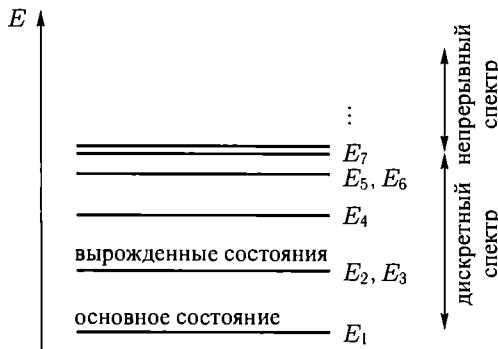


Рис. 2.1. Классификация собственных значений оператора энергии

## 2.1. Бесконечная потенциальная яма

Рассмотрим задачу о частице в одномерной потенциальной яме ширины  $a$  с бесконечно высокими стенками (рис. 2.2).

Гамильтониан этой системы имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x), \quad (2.7)$$

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

$$U(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } 0 < x < a; \\ \infty, & \text{если } x < 0, x > a. \end{cases} \quad (2.8)$$

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

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + U(x). \quad (2.9)$$

Так как потенциал ямы бесконечен при  $x < 0$  и  $x > a$ , то решение уравнения Шредингера (2.4) существует только в области  $0 < x < a$ . Подставляя (2.9) в (2.4), получаем

$$-\frac{1}{2} \Psi''(x) - E\Psi(x) = 0, \quad 0 < x < a. \quad (2.10)$$

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

$$\Psi''(x_i) = \frac{1}{h^2} (\Psi(x_{i-1}) - 2\Psi(x_i) + \Psi(x_{i+1})), \quad (2.11)$$

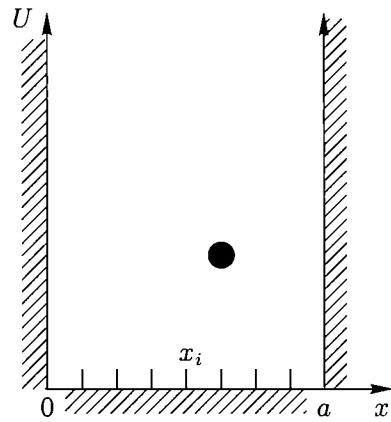


Рис. 2.2. Бесконечная одномерная потенциальная яма

тогда из (2.10) получаем

$$-\frac{1}{h^2}(\Psi_{i-1}-2\Psi_i+\Psi_{i+1})-E\Psi_i=0, \quad i=1,\dots,n, \quad (2.12)$$

здесь  $\Psi_i \equiv \Psi(x_i)$ .

Выберем в качестве ортонормированного базиса систему функций

$$\Phi_1 = |100\dots0\rangle; \quad \Phi_2 = |010\dots0\rangle; \quad \dots; \quad \Phi_n = |000\dots1\rangle, \quad (2.13)$$

где единица означает, что частица находится на соответствующем отрезке, например, базисная функция  $\Phi_2$  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  $\Phi$ :

$$\Psi(x) = \sum_{i=1}^n C_i \Phi_i, \quad (2.14)$$

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

$$H\Phi_i = -\frac{1}{2h^2}(\Phi_{i-1}-2\Phi_i+\Phi_{i+1}). \quad (2.15)$$

Таким образом, задача сводится к системе линейных уравнений

$$H\Psi = E\Psi, \quad (2.16)$$

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

$$H = \begin{pmatrix} 1/h^2 & -1/2h^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1/2h^2 & 1/h^2 & -1/2h^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1/2h^2 & 1/h^2 & -1/2h^2 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -1/2h^2 & 1/h^2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1/h^2 \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Для решения системы (2.16) и нахождения собственных функций и собственных значений матрицы  $H$  следует найти такое преобразование  $F$ , которое переводит базис  $\Phi$  в *собственный базис*  $\Phi'$ , в котором матрица  $H$  диагональна:

$$\begin{aligned} \Phi &\xrightarrow{F} \Phi', \\ H\Phi'_i &= E_i\Phi'_i. \end{aligned} \quad (2.18)$$

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*,

$$E = \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ \dots \\ E_n \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

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

$$C = \left( \begin{pmatrix} C_{11} \\ C_{21} \\ C_{31} \\ \dots \\ C_{n1} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} C_{12} \\ C_{22} \\ C_{32} \\ \dots \\ C_{n2} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} C_{1n} \\ C_{2n} \\ C_{3n} \\ \dots \\ C_{nn} \end{pmatrix} \right); \quad (2.20)$$

$$\Phi'_i = \sum_j C_{ji} \Phi_j. \quad (2.21)$$

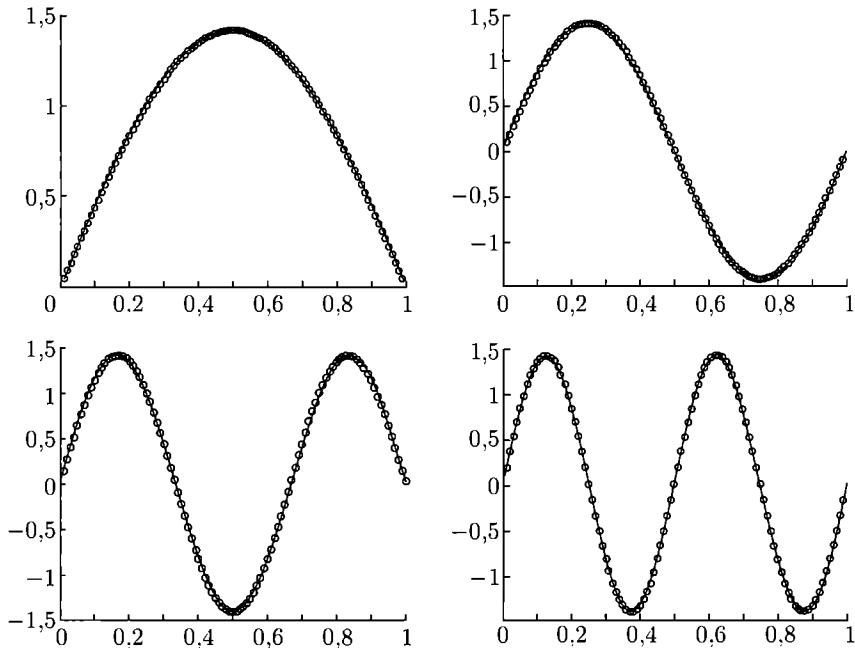


Рис. 2.3. Первые четыре собственные функции частицы в бесконечной потенциальной яме. По горизонтальной оси отложена координата частицы, по вертикальной — амплитуда волновой функции. Точками отмечено численное решение задачи, сплошной линией — точное аналитическое решение

На рис. 2.3 показаны собственные функции гамильтониана (2.9) при  $a = 1$ , отвечающие четырем наименьшим собственным значениям.

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

$$\begin{aligned}\Phi_i(x) &= \sqrt{2} \sin(\pi x i); \\ E_i &= \frac{\pi^2 i^2}{2}, \quad i = 1, 2, \dots, \infty,\end{aligned}\tag{2.22}$$

точками отмечено численное решение, полученное диагонализацией матрицы гамильтониана при помощи встроенной процедуры диагонализации в системе Matlab для  $n = 100$ . В табл. 2.1 приведены четыре наименьших значения энергии частицы в бесконечной яме, а также показана относительная разница между аналитическим и численным ответами.

Таблица 2.1. Сравнение результатов численного расчета с аналитическим решением (2.22) задачи о частице в яме с бесконечными стенками

Точное значение энергии, см. (2.22)	Значение энергии, полученное численным расчетом	Относительная разница, $\frac{E_i^a - E_i}{E_i^a}$
$E_1^a = \frac{\pi^2}{2} = 4,9348$	$E_1 = 4,9344$	$0,8 \times 10^{-6}$
$E_2^a = 2\pi^2 = 19,7932$	$E_2 = 19,7327$	$0,3 \times 10^{-5}$
$E_3^a = \frac{9\pi^2}{2} = 44,4132$	$E_3 = 44,3804$	$0,7 \times 10^{-5}$
$E_4^a = 8\pi^2 = 78,9568$	$E_4 = 78,8530$	$1,3 \times 10^{-3}$

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).

## 2.2. Конечная потенциальная яма

Рассмотрим теперь задачу о частице в конечной потенциальной яме (рис. 2.4), где

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & \text{если } x \leqslant 0; \\ -U_0, & \text{если } 0 < x < a; \\ 0, & \text{если } x \geqslant a. \end{cases}\tag{2.23}$$

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

$$E_c > \min(U(\pm\infty)).\tag{2.24}$$

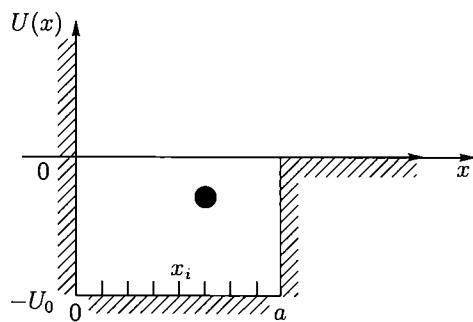


Рис. 2.4. Конечная потенциальная яма

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

$$\Psi_k \underset{x \rightarrow \infty}{\longrightarrow} \text{const} \times e^{ikx}, \quad (2.25)$$

а собственные волновые функции, отвечающие связанным состояниям, за пределами ямы затухают экспоненциально (рис. 2.5):

$$\Psi_n \sim e^{-\kappa x}, \quad \kappa > 0. \quad (2.26)$$

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. 2.5). 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.

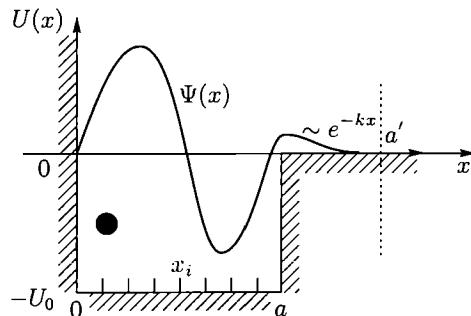


Рис. 2.5. За пределами ямы волновые функции, отвечающие связанным состояниям, экспоненциально затухают

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

$$-\frac{1}{2}\Psi''(x) + (U(x) - E)\Psi(x) = 0, \quad 0 < x < a'. \quad (2.27)$$

Разбивая область  $0 < x < a'$  на  $n$  отрезков длины  $h$  и аппроксимируя функции аналогично (2.5), получаем

$$-\frac{1}{h^2} (\Psi_{i-1} - 2\Psi_i + \Psi_{i+1}) + (U_i - E) \Psi_i = 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.28)$$

где

$$U_i \equiv U(x_i) = \begin{cases} -U_0, & \text{если } 0 \leq x_i \leq a; \\ 0, & \text{если } a < x_i \leq a'. \end{cases} \quad (2.29)$$

Матрица  $H$  будет теперь такой:

$$H = \begin{pmatrix} 1/h^2 + U_1 & -1/2h^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1/2h^2 & 1/h^2 + U_2 & -1/2h^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1/2h^2 & 1/h^2 + U_3 & -1/2h^2 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -1/2h^2 & 1/h^2 + U_4 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1/h^2 + U_n \end{pmatrix}. \quad (2.30)$$

Заметим, что если бы в задаче рассматривалась двумерная потенциальная яма (квадратная яма ширины  $a$  и глубины  $U_0$ ), в матрице (2.30) 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 (2.30) будет  $n - k$  решений, отвечающих состояниям непрерывного спектра. При численной диагонализации матрицы (2.30) 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 (2.30) можно использовать следующий прием. Сдвинем всю потенциальную картину на рис. 2.5 на достаточно большую величину  $U' > 0$ , так что

$$|U'| \gg |U_0|, \quad (2.31)$$

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

$$H' = H + \begin{pmatrix} U' & 0 & \dots & 0 \\ 0 & U' & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & U' \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

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  $U'$ :

$$E' = E + U', \quad (2.33)$$

а на собственные функции сдвиг потенциальной картины не окажет влияния:

$$\Psi' = \Psi. \quad (2.34)$$

На рис. 2.6 показаны волновые функции связанных состояний в конечной яме с параметрами  $U_0 = 30$ ,  $a = 2$ , соответствующие значения энергии равны:

$$\begin{aligned} E_1 &= -28,910, \\ E_2 &= -25,649, \\ E_3 &= -20,256, \\ E_4 &= -12,823, \\ E_5 &= -3,675; \end{aligned}$$

при данных параметрах в яме существует 5 связанных состояний. Пространственное разбиение при решении системы (2.28) 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  $C = 468,75$ .

Матрица  $H$  в (2.30) является матрицей общего вида для задачи о частице в одномерной конечной потенциальной яме. Задавая различные значения  $U_i$ , можно решить уравнение Шредингера (2.27) для потенциальной ямы произвольной формы.

### 2.3. Одночастичная задача в импульсном представлении

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 преобразованием Фурье координатного пространства.

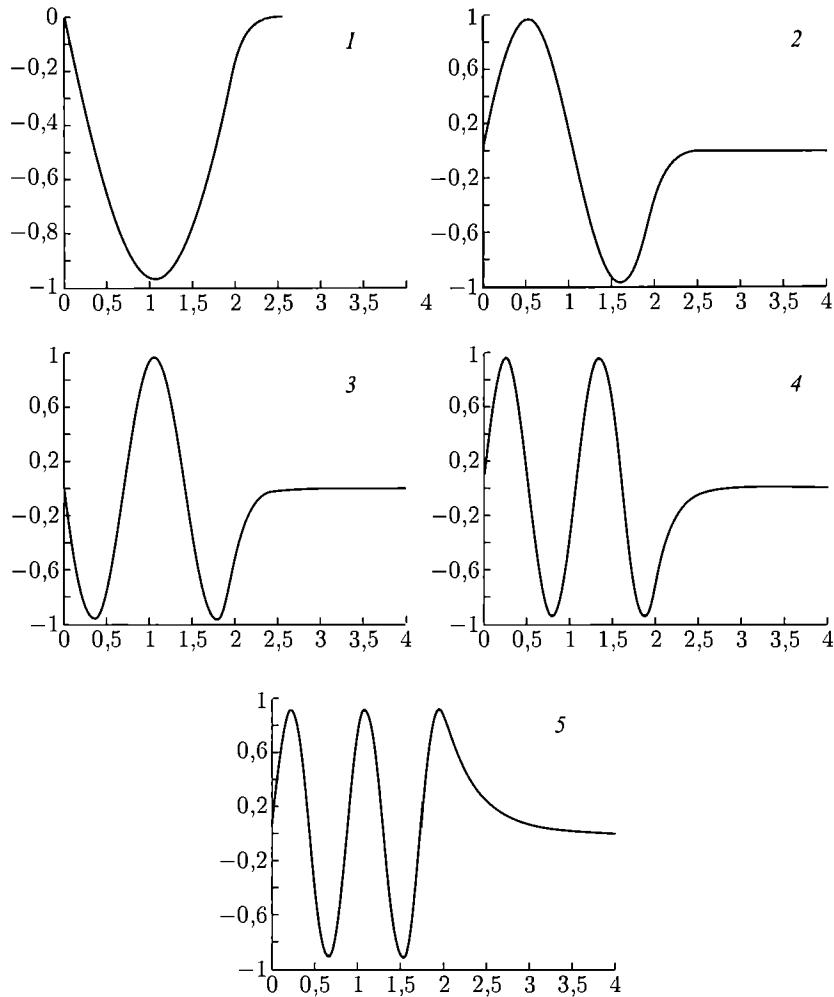


Рис. 2.6. Волновые функции частицы в конечной потенциальной яме

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

$$\Phi_k = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}, \quad (2.35)$$

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 (2.13),

$$\Phi_{k=1} = |100\dots0\rangle; \quad \Phi_{k=2} = |010\dots0\rangle; \dots; \quad \Phi_{k=n} = |000\dots1\rangle, \quad (2.36)$$

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

Рассмотрим задачу о частице в потенциальной яме

$$U(x) = -\frac{U}{\cosh^2 x}, \quad (2.37)$$

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

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

$$E_n = -\frac{1}{8} \left( 1 - 2n + \sqrt{1 + 8U} \right)^2, \quad (2.38)$$

где  $n$  — номер энергетического уровня. При  $U = 16$  в системе получаем шесть связанных состояний с энергиями:

$$\begin{aligned} E_1 &= -13,4105, & E_2 &= -8,7316, & E_3 &= -5,0527, \\ E_4 &= -2,3738, & E_5 &= -0,6949, & E_6 &= -0,0160. \end{aligned} \quad (2.39)$$

График зависимости  $U(x)$  вместе с разрешенными уровнями энергии приведен на рис. 2.7.

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:

$$\begin{aligned} E_1 &= -13,4110, & E_2 &= -8,7319, & E_3 &= -5,0532, \\ E_4 &= -2,3743, & E_5 &= -0,6845, \end{aligned} \quad (2.40)$$

а зависимость соответствующих амплитуд вероятности от координаты показана на рис. 2.8.

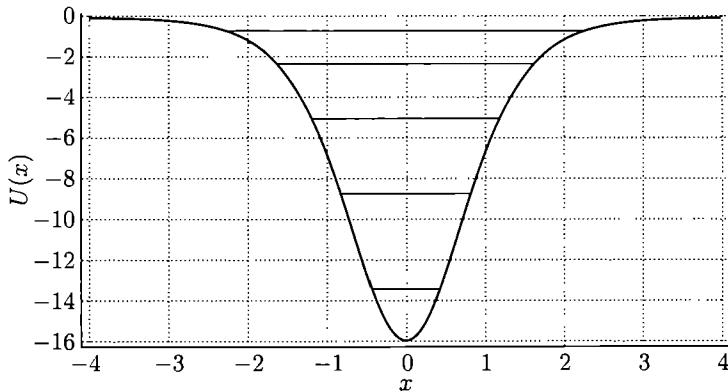


Рис. 2.7. Вид потенциальной ямы и дискретного спектра для (2.37)

Для решения задачи в импульсном представлении следует сначала записать гамильтониан в терминах импульсного базиса (2.36). Первое слагаемое в (2.9), отвечающее кинетической энергии частицы, запишется в виде

$$\langle \Phi_p | H_{kin} | \Phi_{p'} \rangle = \frac{p^2}{2} \delta_{pp'}, \quad (2.41)$$

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

Чтобы получить из собственных функций в импульсном представлении собственные функции в координатном представлении, необходимо выполнить обратное преобразование Фурье вида

$$\Phi'_{\alpha}(p) = \sum_{k=1}^m C_{k\alpha} \Phi_k = \frac{1}{\sqrt{2a}} \sum_{k=1}^m C_{k\alpha} e^{ix \frac{2\pi}{h} k}. \quad (2.46)$$

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

$$\Phi'_{\alpha}(x_j) = \frac{1}{\sqrt{2a}} \sum_{k=1}^m C_{k\alpha} \cos \left( x_j \frac{2\pi}{h} k \right) \quad (2.47)$$

для четных собственных функций (нечетные номера уровней), и

$$\Phi'_{\alpha}(x_j) = \frac{1}{\sqrt{2a}} \sum_{k=1}^m C_{k\alpha} \sin \left( x_j \frac{2\pi}{h} k \right) \quad (2.48)$$

для нечетных собственных функций (нечетные номера уровней).

Распределение частицы по координате для первых пяти связанных состояний, полученное из (2.47), (2.48), показано на рис. 2.10. Этот график практически идентичен рис. 2.8, который получен решением задачи в координатном представлении.

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

## **Часть II**

# **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 квантования, 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.

Далее будут рассмотрены модели сильнокоррелированных многочастичных систем с различной квантовой статистикой. Для численного анализа ферми-статистики будет рассмотрена модель Хаббарда — типичная модель сильной связи с взаимодействием. Для исследования особенностей бозе-статистики исследуется модель Бозе–Хаббарда — решеточные бозоны. Для представления спиновой статистики будут проанализированы различные модели Гейзенберга. Во всех случаях подробно анализируются принципы построения адекватного базиса для формирования гамильтоновой матрицы, автоматического учета тождественности частиц и симметрии состояний. Исследуются инварианты моделей и их использование для упрощения расчетов. Рассматривается возможность использования трансляционной инвариантности, фазового анализа, получения дисперсионных соотношений. Исследуется расчет сложных квантовых средних, таких как функции линейного отклика.

# Глава 3

## 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.

### 3.1. Одномерный гармонический осциллятор

Уравнение Шредингера для одномерного гармонического осциллятора имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}\hat{H}\Psi &= E\Psi, \\ \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2x^2}{2}.\end{aligned}\tag{3.1}$$

Здесь  $m$  — масса осциллятора,  $\omega$  — частота его колебаний.

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

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}),\tag{3.2}$$

где  $n$  — неотрицательные целые числа, а волновые функции этой системы —

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(z) e^{-z^2/2}, \quad z = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x,\tag{3.3}$$

$H_n(z)$  — полиномы Эрмита, определяемые формулой:

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n e^{-z^2}}{dz^n}.\tag{3.4}$$

Волновые функции осциллятора удовлетворяют уравнению:

$$\Psi_n'' + (\lambda_n - z^2)\Psi_n = 0, \quad \lambda_n = \frac{2E_n}{\hbar\omega} = 2n + 1.\tag{3.5}$$

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

Рассмотрим другой метод решения этой задачи. Введем безразмерные операторы:

$$\hat{Q} = \hat{x}\sqrt{m\omega/\hbar}, \quad \hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\omega\hbar}}; \quad P = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial Q}. \quad (3.6)$$

Они удовлетворяют следующему коммутационному соотношению:

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = \frac{1}{\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] = -i. \quad (3.7)$$

Гамильтониан в новых операторах запишется следующим образом:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{P}^2 + \hat{Q}^2). \quad (3.8)$$

Введем новые операторы:

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - i\hat{P}), \quad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} + i\hat{P}), \quad (3.9)$$

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

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \frac{1}{2} [\hat{Q}, -i\hat{P}] + \frac{1}{2} [i\hat{P}, \hat{Q}] = 1. \quad (3.10)$$

Тогда

$$\hat{a}^+ \hat{a} = \frac{1}{2} (\hat{Q}^2 + \hat{P}^2 - i [\hat{P}, \hat{Q}]) = \frac{1}{2} (\hat{P}^2 + \hat{Q}^2) - \frac{1}{2}, \quad (3.11)$$

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

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (3.12)$$

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

$$\left( \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \Psi = \varepsilon \Psi. \quad (3.13)$$

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

$$\begin{aligned} H\Psi_\varepsilon = \varepsilon\Psi_\varepsilon &\Rightarrow a^+ H\Psi_\varepsilon = \varepsilon a^+ \Psi_\varepsilon \Rightarrow \\ &\Rightarrow a^+ \left( a^+ a + \frac{1}{2} \right) \Psi_\varepsilon = a^+ \left( a^+ a - \frac{1}{2} \right) \Psi_\varepsilon = (H - 1) a^+ \Psi_\varepsilon. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Итак,

$$(H - 1) a^+ \Psi_\varepsilon = \varepsilon a^+ \Psi_\varepsilon, \quad (3.15)$$

или

$$H a^+ \Psi_\varepsilon = (\varepsilon + 1) a^+ \Psi_\varepsilon. \quad (3.16)$$

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

$$\begin{aligned} (\Psi_{\varepsilon+1}, \Psi_{\varepsilon+1}) &= ((a^+ \Psi_\varepsilon)^*, a^+ \Psi_\varepsilon) = (\Psi_\varepsilon a, a^+ \Psi_\varepsilon) = \\ &= \left( \Psi_\varepsilon \left( H + \frac{1}{2} \right) \Psi_\varepsilon \right) = \varepsilon + \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

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

$$a^+ \Psi_\varepsilon = \sqrt{\varepsilon + \frac{1}{2}} \Psi_{\varepsilon+1}. \quad (3.18)$$

Аналогично можно вывести правило для оператора уничтожения:

$$a \Psi_\varepsilon = \sqrt{\varepsilon - \frac{1}{2}} \Psi_{\varepsilon-1}. \quad (3.19)$$

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 — низший энергетический уровень. Ясно, что оператор уничтожения при действии на волновую функцию основного состояния даст нуль, так как нельзя создать уровень ниже самого нижнего. Воспользуемся этим условием:

$$a \Psi_0 = 0 \Rightarrow a^+ a \Psi_0 = 0 \Rightarrow \left( a^+ a + \frac{1}{2} \right) \Psi_0 = H \Psi_0 = \varepsilon_0 \Psi_0 = \frac{1}{2} \Psi_0. \quad (3.20)$$

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

$$E_n = \hbar\omega\varepsilon_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (3.21)$$

что совпадает с (3.2). Одновременно находим правила действия операторов рождения и уничтожения на собственные волновые функции:

$$a^+ \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}, \quad a \Psi_n = \sqrt{n} \Psi_{n-1}. \quad (3.22)$$

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

$$\begin{aligned} a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (Q - iP) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( Q - \frac{\partial}{\partial Q} \right), \\ a &= \frac{1}{\sqrt{2}} (Q + iP) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( Q + \frac{\partial}{\partial Q} \right). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Тогда имеем:

$$a \Psi_0 = 0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (Q - iP) \Psi_0 \Rightarrow Q \Psi_0 = -\frac{\partial \Psi_0}{\partial Q} \Rightarrow \Psi_0 = A e^{-Q^2/2}. \quad (3.24)$$

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

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

$$\begin{aligned} a^+ \Psi_n &= \sqrt{n+1} \Psi_{n+1} \Rightarrow \Psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n \Psi_0, \\ \Psi_n &= \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \left( Q - \frac{\partial}{\partial Q} \right)^n e^{-Q^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(Q) e^{-\frac{Q^2}{2}}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Здесь  $H_n(Q)$  — полиномы Эрмита, определяемые формулой (3.4). Полученный результат совпадает с (3.3).

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.

### 3.2. 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. 3.1).

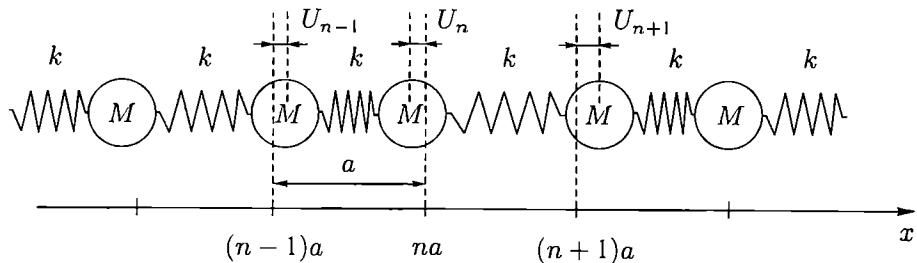


Рис. 3.1. Периодическая система атомов, соединенных одинаковыми пружинами

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.

Если обозначить смещение атома из положения равновесия как  $U_n$ , то

$$M\ddot{U}_n = -k(U_n - U_{n-1}) + k(U_{n+1} - U_n) = k(U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n). \quad (3.26)$$

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

$$\begin{aligned} U_{n+1} &= U(x_n + a) = U(x_n) + U'(x_n)a + \frac{1}{2}U''(x_n)a^2, \\ U_{n-1} &= U(x_n - a) = U(x_n) - U'(x_n)a + \frac{1}{2}U''(x_n)a^2. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Тогда уравнение движения приобретает привычный вид волнового уравнения:

$$M\ddot{U}(x) = ka^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}. \quad (3.28)$$

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

$$\rho\ddot{U}(x) = G \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}. \quad (3.29)$$

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

Напишем гамильтониан системы — сумму кинетической и потенциальной энергий атомов:

$$\begin{aligned} H &= \sum_n \left[ \frac{M\dot{U}_n^2}{2} + k \frac{(U_n - U_{n-1})^2}{2} \right] = a \sum_n \left[ \rho \frac{\dot{U}_n^2}{2} + G \frac{(\partial U_n / \partial x)^2}{2} \right] = \\ &= \int \left[ \rho \frac{(\dot{U}(x))^2}{2} + G \frac{(\partial U / \partial x)^2}{2} \right] dx. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Введем фурье-компоненты смещений по координате:

$$U(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k U(k, t) e^{ikx}, \quad (3.31)$$

тогда гамильтониан можно переписать следующим образом:

$$H = a \sum_k \left[ \rho \frac{\dot{U}(k, t)\dot{U}^*(k, t)}{2} + Gk^2 \frac{U(k, t)U^*(k, t)}{2} \right]. \quad (3.32)$$

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,

$$\ddot{U}(k, t) = -c^2 U(k, t) \Rightarrow U(k, t) = U_1(k) e^{i\omega_k t} + U_2(k) e^{-i\omega_k t}, \quad (3.33)$$

$$\omega_k = c|k|.$$

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

$$\begin{aligned} U^*(k, t) &= U_1^*(k) e^{-i\omega_k t} + U_2^*(k) e^{i\omega_k t}, \\ U^*(-k, t) &= U_1^*(-k) e^{-i\omega_k t} + U_2^*(-k) e^{i\omega_k t} \Rightarrow U_1^*(-k) = U_2(k). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Окончательно находим:

$$\begin{aligned} U(k, t) &= U(k) e^{-i\omega_k t} + U^*(-k) e^{i\omega_k t}, \\ U(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k [U(k) e^{ikx - i\omega_k t} + U^*(k) e^{-ikx + i\omega_k t}]. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Введем обобщенные координаты и импульсы:

$$Q(k, t) = U(k, t), \quad P(k, t) = \rho \dot{Q}(k, t). \quad (3.36)$$

Перепишем оператор энергии в обобщенных координатах:

$$H = \sum_k \left[ \frac{P_k P_{-k}}{2\rho} + \left( \frac{\rho \omega_k^2}{2} \right) Q_k Q_{-k} \right], \quad (3.37)$$

где  $P_k, Q_k$  — сопряженные обобщенные координаты и импульсы.

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

$$\begin{cases} \dot{Q}_{-k} = \frac{\partial H}{\partial P_k}; \\ \dot{P}_k = -\frac{\partial H}{\partial Q_{-k}}. \end{cases} \quad (3.38)$$

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

$$\begin{aligned} a_k(t) &= \sqrt{\frac{\rho \omega_k}{2\hbar}} Q_k(t) + i \frac{P_k(t)}{\sqrt{2\rho \omega_k \hbar}}, \\ a_k^+(t) &= \sqrt{\frac{\rho \omega_k}{2\hbar}} Q_{-k}(t) - i \frac{P_{-k}(t)}{\sqrt{2\rho \omega_k \hbar}}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

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:  $[P_k, Q_{-k}] = -i\hbar$ .

Окончательно гамильтониан системы представляется как сумма энергий гармонических операторов:

$$H = \sum_k \hbar \omega_k \left( a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \right), \quad (3.40)$$

при этом через эти операторы можно выразить и смещение:

$$U(k, t) = Q(k, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_k}} (a_k(t) + a_{-k}^+(t)),$$

$$(x, t) = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho L\omega_k}} (a_k(t)e^{ikx} + a_k^+(t)e^{-ikx}). \quad (3.41)$$

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.

### 3.3. Формализм вторичного квантования

Волновые функции в представлении Шредингера 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 устраниют, 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.

Представленный 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.

**3.3.1. 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:

$$|k\rangle \equiv a_k^+ |0\rangle. \quad (3.42)$$

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:

$$\langle 0 | a_k a_{k'}^+ | 0 \rangle = \delta_{kk'}. \quad (3.43)$$

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 — не обязательно плоские волны, а квантовое число  $k$  — не обязательно 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

$$|n\rangle = \sum_k |k\rangle \langle k | n \rangle. \quad (3.44)$$

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  $a_k^+$ :

$$a_n^+ = \sum_k a_k^+ \langle k | n \rangle. \quad (3.45)$$

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

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

$$|n\rangle = \sum_k e^{ikx} |k\rangle, \quad (3.46)$$

то соответствующие операторы рождения

$$a^+(x) \equiv \Psi^+(x) = \sum_k e^{-ikx} a_k^+ \quad (3.47)$$

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

**3.3.2. Двух- и многочастичный базисы. Коммутационные соотношения.** Рассмотрим теперь полный набор состояний двух частиц. В обычном (шредингеровском) представлении можно взять, например, произведение плоских волн:

$$|k', k''\rangle = e^{ik'x} e^{ik''x}, \quad (3.48)$$

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:

$$|k', k''\rangle \rightarrow a_{k'}^+ a_{k''}^+ |0\rangle. \quad (3.49)$$

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:

$$|k'', k'\rangle \rightarrow a_{k''}^+ a_{k'}^+ |0\rangle. \quad (3.50)$$

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

$$a_{k''}^+ a_{k'}^+ = F a_{k'}^+ a_{k''}^+; \quad a_{k'}^+ a_{k''}^+ = \frac{1}{F} a_{k''}^+ a_{k'}^+. \quad (3.51)$$

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:

$$a_{k''}^+ a_{k'}^+ = + a_{k'}^+ a_{k''}^+ \quad (3.52)$$

или

$$a_{k''}^+ a_{k'}^+ = - a_{k'}^+ a_{k''}^+. \quad (3.53)$$

Итак, возможна либо коммутация, либо антисимметрия операторов рождения. Частицы, операторы которых коммутируют, называются *бозонами*, частицы с антисимметрическими 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 векторы совпадают:  $k' = k''$ . Для случая бозонов получаем тривиальное тождество, а для фермионов находим

$$a_{k'}^+ a_{k'}^+ = -a_{k'}^+ a_{k'}^+ \equiv 0. \quad (3.54)$$

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:

$$a_{K+q}^+ a_{K-q}^+ = \pm a_{K-q}^+ a_{K+q}^+, \quad (3.55)$$

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  $\Psi(r_1, r_2) = \Psi(r, K) = \Phi(K)\varphi(r) = e^{2iKr} \sum_q g(q)\varphi_K(q)$ , где  $r, K$  — радиусы-векторы относительного движения и движения центра масс; функция  $\Phi(K)$  отвечает за движение системы как целого, а  $\varphi(r)$  — за внутренние степени свободы. Последнюю функцию разложим в ряд Фурье, компоненты которого представимы в числах заполнения:  $\varphi_K(q) = a_{K+q}^+ a_{K-q}^+ |0\rangle$ . Учтем уравнения коммутации:

$$\begin{aligned} \sum_q g(q) a_{K+q}^+ a_{K-q}^+ |0\rangle &= \pm \sum_q g(q) a_{K-q}^+ a_{K+q}^+ |0\rangle = \\ &= \pm \sum_q g(-q) a_{K+q}^+ a_{K-q}^+ |0\rangle. \end{aligned} \quad (3.56)$$

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 (бра-вектор) вводится следующим очевидным образом:

$$\langle k', k'' | = \langle 0 | a_{k''} a_{k'}. \quad (3.57)$$

Нормировка этой волновой функции

$$\langle 0 | a_{k''} a_{k'} a^+_{k'} a^+_{k''} | 0 \rangle = N_{k' k''} \quad (3.58)$$

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

$$\langle 0 | -a_{k'''} a_{k'} a^+_{k'} a^+_{k'''} | 0 \rangle = N_{k' k''} \delta_{k''' k''}. \quad (3.59)$$

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:

$$a_{k'} a^+_{k'} a^+_{k''} | 0 \rangle = N_{k' k''} a^+_{k''} | 0 \rangle, \quad (3.60)$$

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:

$$a_{k'} | 0 \rangle = 0. \quad (3.61)$$

Добавим для дальнейшего рассмотрения условие ортонормированности одночастичных состояний:

$$a_{k'} a^+_{k''} | 0 \rangle = \delta_{k' k''} | 0 \rangle. \quad (3.62)$$

Рассмотрим теперь коммутационные соотношения. Для операторов рождения мы уже их имеем. Применяя к (3.54) операцию комплексного сопряжения, находим коммутационные соотношения для операторов уничтожения:

$$\begin{aligned} a_{k''} a_{k'} &= +a_{k'} a_{k''} \quad (\text{бозоны}), \\ a_{k''} a_{k'} &= -a_{k'} a_{k''} \quad (\text{фермионы}). \end{aligned} \quad (3.63)$$

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

$$\begin{aligned} (a_{k'} a^+_{k''} - a^+_{k''} a_{k'}) &= \delta_{k' k''} \quad (\text{бозоны}), \\ (a_{k'} a^+_{k''} + a^+_{k''} a_{k'}) &= -\delta_{k' k''} \quad (\text{фермионы}). \end{aligned} \quad (3.64)$$

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:

$$(a_{k'}^+ a_{k''}^+ \mp a_{k'}^+ a_{k'}) a_{k'}^+ |0\rangle = (\pm a_{k'}^+ a_{k'}^+ a_{k''}^+ \mp a_{k''}^+) |0\rangle = \pm (N_{k'k''} - 1) a_{k''}^+ |0\rangle, \quad (3.65)$$

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  $N_{k'k''} = 1 \pm \delta_{k'k''}$ . Тогда при разных импульсах  $N_{k'k''} = 1$ , а при одинаковых квантовых числах получаем  $N_{k'k''} = 2$  для бозонов и  $N_{k'k''} = 0$  для фермионов. Физически для фермионов это 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:

$$\begin{aligned} a_{k'}^+ a_{k''}^+ \mp a_{k''}^+ a_{k'}^+ &= 0, \\ a_{k'}^+ a_{k''}^- \mp a_{k''}^- a_{k'}^+ &= 0, \\ a_{k'}^+ a_{k''}^- \mp a_{k''}^+ a_{k'}^- &= \delta_{k'k''}. \end{aligned} \quad (3.66)$$

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 (3.66), которые остаются для них справедливыми.

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

$$\begin{aligned} \langle 0 | a_{k'}^+ a_{k'}^+ a_{k'}^+ a_{k'}^+ | 0 \rangle &= 2 \langle 0 | a_{k'}^+ a_{k'}^+ | 0 \rangle; \\ \langle 0 | a_{k'}^+ a_{k'}^+ a_{k'}^+ a_{k'}^+ a_{k'}^+ a_{k'}^+ | 0 \rangle &= \langle 0 | a_{k'}^+ a_{k'}^+ (1 + a_{k'}^+ a_{k'}^+) a_{k'}^+ a_{k'}^+ | 0 \rangle = \\ &= 2 + 2 \langle 0 | a_{k'}^+ a_{k'}^+ a_{k'}^+ a_{k'}^+ | 0 \rangle = 6; \\ &\dots \\ \langle 0 | (a_{k'}^+)^n (a_{k'}^+)^n | 0 \rangle &= n! \end{aligned} \quad (3.67)$$

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

$$(n!)^{-\frac{1}{2}} (a_{k'}^+)^n |0\rangle. \quad (3.68)$$

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 каснемся вопросов о базисе в представлении чисел заполнения и о действиях операторов на волновые функции этого базиса в случае статистики Ферми.

**3.3.3. 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:

$$\begin{aligned}\Phi_1 &= |000111\rangle; & \Phi_2 &= |001011\rangle; & \Phi_3 &= |001101\rangle; \\ \Phi_4 &= |001110\rangle; & \Phi_5 &= |010011\rangle; & \Phi_6 &= |010101\rangle; \\ \Phi_7 &= |010110\rangle; & \Phi_8 &= |011001\rangle; & \Phi_9 &= |011010\rangle; \\ \Phi_{10} &= |011100\rangle; & \Phi_{11} &= |100011\rangle; & \Phi_{12} &= |100101\rangle; \\ \Phi_{13} &= |100110\rangle; & \Phi_{14} &= |101001\rangle; & \Phi_{15} &= |101010\rangle; \\ \Phi_{16} &= |101100\rangle; & \Phi_{17} &= |110001\rangle; & \Phi_{18} &= |110010\rangle; \\ \Phi_{19} &= |110100\rangle; & \Phi_{20} &= |111000\rangle.\end{aligned}\quad (3.69)$$

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 (3.69) будет обсуждаться далее.

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  $\alpha$  — 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,  $\Phi(4, 5, 6)$ ,  $\Phi(4, 6, 5)$ ,  $\Phi(5, 4, 6)$ ,  $\Phi(5, 6, 4)$ ,  $\Phi(6, 4, 5)$ ,  $\Phi(6, 5, 4)$ ), 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 одиночественной 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 состояния хотя бы одного узла в одной функции отличаются 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 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:

$$a_i |n_1 n_2 \dots n_i \dots\rangle = \begin{cases} |n_1 n_2 \dots 0 \dots\rangle, & \text{если } n_i = 1, \\ 0, & \text{если } n_i = 0; \end{cases} \quad (3.70)$$

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

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 уничтожать 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:

$$|001000\rangle = a_3^+ |000000\rangle,$$

$$|010001\rangle = a_2^+ a_6^+ |000000\rangle, \quad (3.71)$$

$$|101010\rangle = a_1^+ a_3^+ a_5^+ |000000\rangle.$$

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:

$$\begin{aligned} a_4^+ |001000\rangle &= a_4^+ a_3^+ |000000\rangle = -a_3^+ a_4^+ |000000\rangle = -|001100\rangle, \\ a_3^+ |101010\rangle &= a_3^+ a_1^+ a_3^+ a_5^+ |000000\rangle = -a_1^+ a_3^+ a_3^+ a_5^+ |000000\rangle \equiv 0, \quad (3.72) \\ a_3 |101010\rangle &= a_3 a_1^+ a_3^+ a_5^+ |000000\rangle = -|100010\rangle. \end{aligned}$$

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 антикоммутационных соотношений:

$$\begin{aligned} a_i a_j^+ + a_j^+ a_i &= \delta_{ij}, \\ a_i^+ a_j^+ + a_j^+ a_i^+ &= 0, \quad (3.73) \\ a_i a_j + a_j a_i &= 0. \end{aligned}$$

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

$$a_i^+ a_j^+ |0101\dots\rangle + a_j^+ a_i^+ |0101\dots\rangle = 0. \quad (3.74)$$

Приведенные антикоммутационные 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  $\Phi = |0101\dots\rangle$ ):

$$\begin{aligned} a_2^+ a_2 \Phi &= a_2^+ a_2 |0101\dots\rangle = 1 \times a_2^+ |0001\dots\rangle = \\ &\quad = 1 \times 1 |0101\dots\rangle = 1 \times \Phi = \Phi, \\ a_3^+ a_3 \Phi &= a_3^+ a_3 |0101\dots\rangle = (1 - a_3 a_3^+) |0101\dots\rangle = \\ &\quad = (1 - 1) |0101\dots\rangle = 0 |0101\dots\rangle = 0 \times \Phi \equiv 0. \quad (3.75) \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} |001000, 000100\rangle &= a_{3\uparrow}^+ a_{4\downarrow}^+ |000000, 000000\rangle, \\ |101010, 100100\rangle &= a_{1\uparrow}^+ a_{3\uparrow}^+ a_{5\uparrow}^+ a_{1\downarrow}^+ a_{4\downarrow}^+ |000000, 000000\rangle. \end{aligned} \quad (3.76)$$

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  $\sigma$ . Соотношения антисимметрии имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} a_{i\sigma} a_{j\sigma'}^+ + a_{j\sigma'}^+ a_{i\sigma} &= \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}, \\ a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma'}^+ + a_{j\sigma'}^+ a_{i\sigma}^+ &= 0, \\ a_{i\sigma} a_{j\sigma'} + a_{j\sigma'} a_{i\sigma} &= 0. \end{aligned} \quad (3.77)$$

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.

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

$$\begin{aligned} A|\xi\rangle &= \sum_{k'} A|k'\rangle \langle k'|\xi\rangle = \sum_{k',k''} |k''\rangle \langle k''|A|k'\rangle \langle k'|\xi\rangle = \\ &= \sum_{k',k''} |k''\rangle A_{k''k'} \langle k'|\xi\rangle. \end{aligned} \quad (3.78)$$

В (3.78) результат действия оператора  $A$  на вектор  $|\xi\rangle$  выражен через известные матричные элементы  $A_{k''k'}$ .

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

$$|\xi\rangle = \sum_k |k\rangle \langle k|\xi\rangle = \sum_k \langle k|\xi\rangle a_k^+ |0\rangle, \quad (3.79)$$

тогда

$$A|\xi\rangle = \sum_{k', k''} \langle k'' | A | k' \rangle \langle k' | \xi \rangle a_{k''}^+ |0\rangle. \quad (3.80)$$

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

$$A|\xi\rangle = \sum_{k'', k'''} \langle k'' | A | k''' \rangle (a_{k''}^+ a_{k'''}^-) \sum_{k'} \langle k' | \xi \rangle a_{k'}^+ |0\rangle. \quad (3.81)$$

Заметим, что вторая сумма в (3.81) — исходная функция  $|\xi\rangle$ . Следовательно, оператор  $A$  в формализме вторичного квантования имеет вид

$$A = \sum_{k', k''} \langle k'' | A | k' \rangle a_{k''}^+ a_{k'}^- . \quad (3.82)$$

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 (3.82) часто представляют в виде *диаграмм Фейнмана* (рис. 3.2).

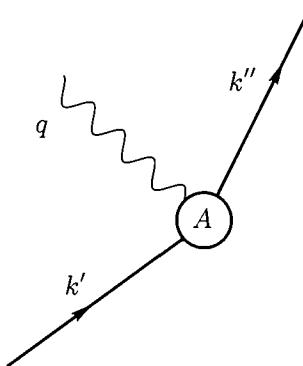


Рис. 3.2. Фейнмановская диаграмма для (3.82). Под действием оператора  $A$  частица из состояния  $k'$  переходит в состояние  $k''$ ;  $q = k'' - k'$

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:

$$\begin{aligned} p &= \sum_{k', k''} \left\langle k' \left| \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right| k'' \right\rangle a_{k''}^+ a_{k'}^- = \sum_{k', k''} \left[ \frac{\hbar}{i} \int e^{-ik'x} (ik'') e^{ik''x} dx \right] a_{k''}^+ a_{k'}^- = \\ &= \sum_{k', k''} \hbar k' \delta_{k' k''} a_{k''}^+ a_{k'}^- = \hbar \sum_k k a_k^+ a_k^- . \end{aligned} \quad (3.83)$$

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

$$K = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_k k^2 a_k^+ a_k; \quad (3.84)$$

оператор числа частиц —

$$N = \sum_k a_k^+ a_k. \quad (3.85)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{e^2}{r} &= \sum_{k', k''} \left\langle k' \left| \frac{e^2}{r} \right| k'' \right\rangle a_{k''}^+ a_{k'} = \\ &= e^2 \sum_{k', k''} \left( \int e^{-ik'r_1} \frac{1}{|r - r_1|} e^{-ik''r_1} d^3 r_1 \right) a_{k''}^+ a_{k'}. \end{aligned} \quad (3.86)$$

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

$$\frac{e^2}{r} = \frac{1}{\Omega} \int \frac{4\pi e^2}{q^2} e^{iqr} d^3 q. \quad (3.87)$$

Тогда находим:

$$\begin{aligned} \left\langle k' \left| \frac{e^2}{r} \right| k'' \right\rangle &= 4\pi e^2 \int q e^{iq(r-r_1)} \frac{1}{q^2} \frac{1}{\Omega} e^{i(k'-k'')r_1} d^3 r_1 d^3 = \\ &= 4\pi e^2 \int e^{iqr} \frac{1}{q^2} \frac{1}{\Omega} d^3 q \int e^{i(k'-k''-q)r_1} d^3 r_1 = \\ &= 4\pi e^2 \int e^{iqr} \frac{1}{q^2} \delta_{k'-k'', q} d^3 q \equiv \left( \int d^3 q \equiv \sum_q \right) \equiv \\ &\equiv \sum_q V(q) e^{iqr} \delta_{k'-k'', q}. \end{aligned} \quad (3.88)$$

Здесь  $V(q)$  — фурье-компоненты кулоновского потенциала  $V_c = \frac{4\pi e^2}{q^2}$ . Если кулоновский центр находится в начале координат, имеем

$$\frac{e^2}{r} = \sum_{k, q} V(q) a_k^+ a_{k+q}. \quad (3.89)$$

Рассмотрим теперь операторы, которые действуют на состояния двухчастичной системы и могут изменять состояния сразу двух частиц. В шре-

дингеровском представлении такие операторы задаются набором матричных элементов следующего вида:

$$\langle k_4 k_3 | B | k_2 k_1 \rangle. \quad (3.90)$$

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

$$B = \frac{1}{2} \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} \langle k_4 k_3 | B | k_2 k_1 \rangle a_{k_4}^+ a_{k_3}^+ a_{k_2} a_{k_1}. \quad (3.91)$$

Соотношение (3.91) 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. 3.3.

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

$$\langle k_4 k_3 | V | k_2 k_1 \rangle = \int e^{-ik_4 r_1 - ik_3 r_2} \frac{e^2}{r} e^{ik_2 r_2 + ik_1 r_1} d^3 r_1 d^3 r_2. \quad (3.92)$$

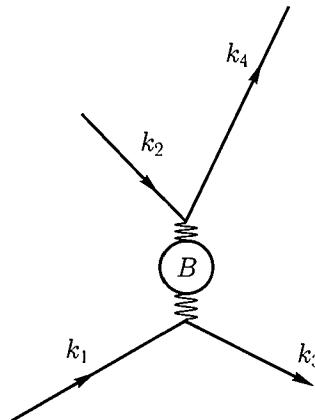


Рис. 3.3. Фейнмановская диаграмма для (3.91). Под действием оператора  $B$  частица в состоянии  $k_1$  переходит в состояние  $k_3$ , а частица в состоянии  $k_2$  — в состояние  $k_4$ .

Раскладывая взаимодействие в ряд Фурье аналогично одночастичному случаю, имеем (рис. 3.4):

$$\begin{aligned} \langle k_4 k_3 | V | k_2 k_1 \rangle &= \int V(q) d^3 q \int e^{i(k_1 - k_4 + q)r_1} d^3 r_1 e^{i(k_2 - k_3 - q)r_2} d^3 r_2 = \\ &= \sum_q V(q) \delta_{k_1 - k_4, q} \delta_{k_2 - k_3, q}. \end{aligned} \quad (3.93)$$

Окончательно находим:

$$\frac{e^2}{r_{12}} = \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 q} V(q) a_{k_1+q}^+ a_{k_2-q}^+ a_{k_2} a_{k_1}. \quad (3.94)$$

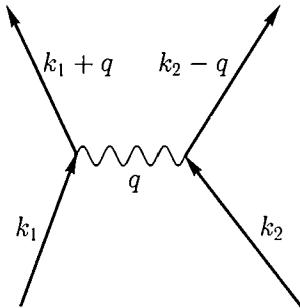


Рис. 3.4. Фейнмановская диаграмма для (3.94). Выполняется закон сохранения импульса: одна частица отдает импульс  $q$  через виртуальный фотон, а другая — получает

### 3.4. 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 одиночественной волновой функцией  $\Psi(r)$ . Эта функция подчиняется уравнению Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi. \quad (3.95)$$

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

$$L = \int \Psi^* \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \Psi d^3 r, \quad (3.96)$$

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

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

$$[\Psi(x), P(x')] = \frac{\hbar}{i} \delta(x - x') \Rightarrow [\Psi(x), \Psi^+(x')] = \delta(x - x'). \quad (3.97)$$

Соотношение (3.97) определяет необходимую коммутацию (для случая ферми-частиц коммутатор превращается в антикоммутатор) величин  $\Psi, \Psi^+$ . Это и есть *полевые операторы*, определяющие квантовое поле рассматриваемой системы. Можно разложить величины  $\Psi, \Psi^+$  по полному набору

функций одночастичного состояния в стандартном шредингеровском представлении  $\varphi_k(x)$ , например, по плоским волнам:

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= \sum_k a_k \varphi_k(x), \\ \Psi^+(x) &= \sum_k a_k^+ \varphi_k^*(x).\end{aligned}\tag{3.98}$$

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 антисимметрии), 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

$$A \rightarrow \int \Psi^+(r) \hat{A} \Psi(r) d^3r,\tag{3.99}$$

с учетом (3.98) имеем

$$A \rightarrow \sum_{kk'} \left\langle \left| \varphi_k \hat{A} \right| \varphi_{k'} \right\rangle a_k^+ a_{k'},\tag{3.100}$$

что совпадает с ранее полученным результатом в представлении чисел заполнения.

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

$$B \rightarrow \frac{1}{2} \int B(r_1 - r_2) \Psi^+(r_1) \Psi(r_1) \Psi^+(r_2) \Psi(r_2) d^3r_1 d^3r_2.\tag{3.101}$$

Это соотношение также после подстановки разложения (3.98) приводит к правильному ответу:

$$B \rightarrow \frac{1}{2} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \langle \varphi_{k_4} \varphi_{k_3} | B | \varphi_{k_2} \varphi_{k_1} \rangle a_{k_4}^+ a_{k_3}^+ a_{k_2} a_{k_1}.\tag{3.102}$$

# Глава 4

## МОДЕЛИ СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ. СТАТИСТИКА ФЕРМИ

### 4.1. Модель сильной связи

В твердом теле электрон ведет себя как квазичастица: в отсутствие примесей он не рассеивается на кристаллической решетке, имеет определенный квазимпульс (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  $\varphi(r)$  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 орбиталах, 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. 4.1), поэтому хорошим квантовым числом в приближении сильной связи электрона с узлом является номер узла  $i$ .

Если ввести операторы рождения  $a_{i\sigma}^+$  и уничтожения  $a_{i\sigma}$  электрона со спином  $\sigma$  на узле  $i$  (удовлетворяющие фермиевским коммутационным соотно-

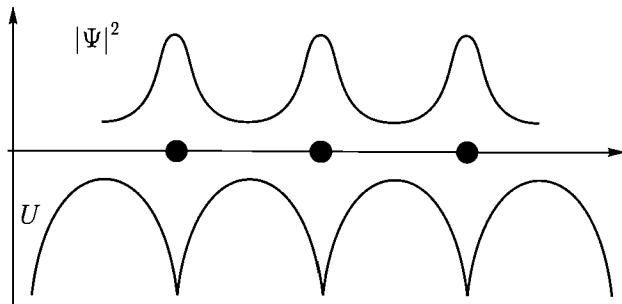


Рис. 4.1. Атомы кристаллической решетки создают периодический потенциал  $U$ ; волновая функция имеет хорошо выраженные максимумы вблизи узлов решетки

шениям  $a_{i\sigma}a_{i'\sigma'}^+ + a_{i'\sigma}^+a_{i\sigma} = \delta_{ii'\sigma\sigma'}$  как коэффициенты разложения в шредингеровской волновой функции,

$$\begin{aligned}\Psi_\sigma(r) &= \sum_{i, \sigma} a_{i\sigma} \varphi_i(r), \\ \Psi_\sigma^+(r) &= \sum_{i, \sigma} a_{i\sigma}^+ \varphi_i^*(r),\end{aligned}\tag{4.1}$$

то они означают именно «рождение» или «уничтожение» электронов в состояниях  $\varphi_i$  — полном наборе узельных одиночественных 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  $\varphi_i$  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:

$$H = \sum_{i, \sigma} \epsilon_0 a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} + \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}.\tag{4.2}$$

Первое слагаемое (потенциальная энергия) описывает «затравочную» энергию электронов, локализованных на узлах с узельной энергией  $\epsilon_0$ , и представляет собой сумму операторов числа частиц  $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$  с учетом проекции спина  $\sigma$ , умноженных на энергию электронного уровня  $\epsilon_0$  в атоме. Второй член гамильтониана (кинетическая энергия) описывает туннелирование (или перескоки) электронов на соседние узлы с амплитудой  $t_{ij}$  и сохранением проекции спина (рис. 4.2). Эта амплитуда согласно формализму вторичного квантования является матричным элементом оператора кинетической энергии:

$$t_{ij} = \left\langle \varphi_i \left| \frac{p^2}{2m} \right| \varphi_j \right\rangle.\tag{4.3}$$

Следует отметить, что функции  $\varphi_i$  экспоненциально затухают на больших расстояниях. Это означает, что амплитуда перескока фактически пропорцио-

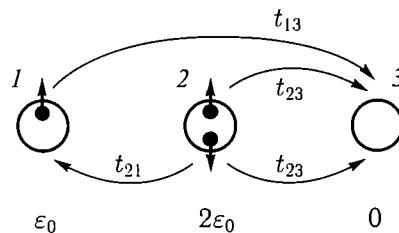


Рис. 4.2. Матричные элементы потенциальной и кинетической энергий для гамильтонана (4.2) в случае системы из трех узлов и трех электронов

нальна перекрытию волновых функций на соседних узлах решетки и зависит от координат следующим образом:

$$t_{ij} \sim e^{-\frac{|r_i - r_j|}{a_B}}, \quad (4.4)$$

$a_B$  — 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.

## 4.2. 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 системы<sup>1)</sup>, 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 ниже.

### 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  $\Phi_i$  получается из предыдущего  $\Phi_{i-1}$  по следующему правилу (рис. 4.3).

<sup>1)</sup> Например, размерность базиса системы из  $m = 20$  узлов, содержащей  $N = 10$  частиц с бозе-статистикой, равна  $R = C_{N+m-1}^N = \frac{(N+m-1)!}{N!(m-1)!} = \frac{29!}{10!19!} = 20\ 030\ 010$ , для ферми-частиц без учета спина размерность базиса будет  $R = C_m^N = \frac{m!}{N!(m-N)!} = \frac{20!}{10!10!} = 184\ 756$ .

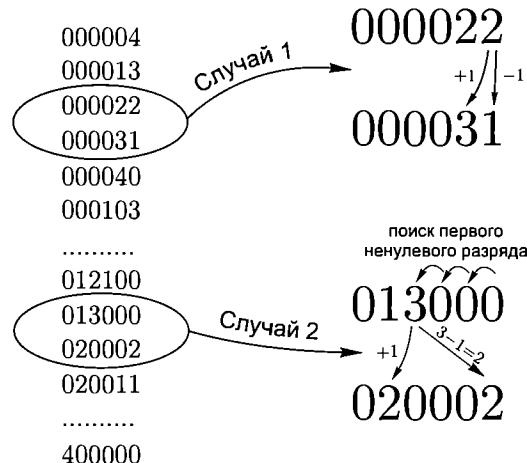


Рис. 4.3. Формирование узельного базиса для системы из 6 узлов и 4-х бозе-частиц

**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-х 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. 4.3 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 (4.2).

Слагаемое, описывающее потенциальную энергию электронов, локализованных на узлах,

$$H_0 = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_0 a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} = \varepsilon_0 \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}, \quad (4.5)$$

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  $\sigma$  на узле  $i$ :

$$\hat{n}_{i\sigma} | \dots n_{(i-1)\sigma} n_{i\sigma} n_{(i+1)\sigma} \dots \rangle = n_{i\sigma} | \dots n_{(i-1)\sigma} n_{i\sigma} n_{(i+1)\sigma} \dots \rangle. \quad (4.6)$$

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

$$\langle \Phi_m | H_0 | \Phi_p \rangle = \varepsilon_0 \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}^{(p)} \delta_{mp}, \quad (4.7)$$

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

Кинетическое слагаемое гамильтониана

$$H_k = \sum_{i \neq j} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \quad (4.8)$$

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 (3.72), имеем:

$$a_{j\sigma} | \dots n_{i\sigma} \dots n_{j\sigma} \dots \rangle = \\ = \begin{cases} 0, & \text{если } n_{j\sigma} = 0; \\ (-1)^{\sum_{k < j, \sigma} n_{k\sigma}} | \dots n_{i\sigma} \dots (n_{j\sigma} - 1) \dots \rangle, & \text{если } n_{j\sigma} \neq 0. \end{cases} \quad (4.9)$$

Далее,

$$a_{i\sigma}^+ | \dots n_{i\sigma} \dots (n_{j\sigma} - 1) \dots \rangle = \\ = \begin{cases} 0, & \text{если } n_{i\sigma} = 1; \\ (-1)^{\sum_{k < i, \sigma} n_{k\sigma}} | \dots (n_{i\sigma} + 1) \dots (n_{j\sigma} - 1) \dots \rangle, & \text{если } n_{i\sigma} \neq 1. \end{cases} \quad (4.10)$$

В итоге находим:

$$a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}^- | \dots n_{i\sigma} \dots n_{j\sigma} \dots \rangle = \\ = \begin{cases} 0, & \text{если } n_{j\sigma} = 0 \text{ или } n_{i\sigma} = 1; \\ (-1)^{\sum_{i < k < j, \sigma} n_{k\sigma}} | \dots (n_{i\sigma} + 1) \dots (n_{j\sigma} - 1) \dots \rangle, & \text{если } n_{j\sigma} \neq 0 \text{ или } n_{i\sigma} \neq 1. \end{cases} \quad (4.11)$$

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 (4.11) удобна для практического применения, так как уже не нужно представлять базисную функцию как произведение операторов рождения на вакуумную функцию, как это делалось в (3.72), достаточно подсчитать число единиц между узлами  $i$  и  $j$ .

Рассмотрим систему из периодически замкнутой цепочки из четырех узлов с двумя бессpinовыми ферми-частицами (рис. 4.4), гамильтониан которой имеет вид (4.2) с параметрами  $\varepsilon_0 = 0,3$ ,  $t_{ij} = -1$ :

$$H = \sum_{i=1}^4 (0,3n_i - a_i^+ a_{i+1}^- - a_i^+ a_{i-1}^-).$$

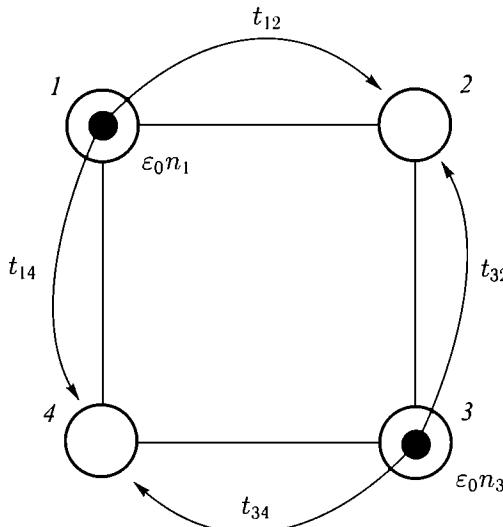


Рис. 4.4. Периодически замкнутая система из четырех узлов с двумя бессpinовыми ферми-частицами в состоянии  $\Phi_5 - |1010\rangle$

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:

$$\Phi_1 = |0011\rangle, \quad \Phi_2 = |0101\rangle, \quad \Phi_3 = |0110\rangle, \\ \Phi_4 = |1001\rangle, \quad \Phi_5 = |1010\rangle, \quad \Phi_6 = |1100\rangle.$$

Пользуясь выражениями для матричных элементов (4.6) и (4.11), 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 (3.72), что приводит к появлению множителя  $(-1)$ . После приведения гамильтоновой матрицы к диагональному виду получаем спектр системы:

$$E_1 = -1,4; \quad E_2 = -1,4; \quad E_3 = 0,6; \\ E_4 = 0,6; \quad E_5 = 2,6; \quad E_6 = 2,6.$$

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, приведенная ранее, примет вид:

$$H = \begin{pmatrix} 0,6 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0,6 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0,6 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0,6 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & 0,6 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0,6 \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

и спектр этой системы такой:

$$E_1 = -1,6361, \quad E_2 = -0,4, \quad E_3 = 0,6, \\ E_4 = 0,6, \quad E_5 = 1,6, \quad E_6 = 2,8361. \quad (4.13)$$

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.

### 4.3. 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  $a_{i\sigma}$ ,  $a_{i\sigma}^+$  по базису плоских волн:

$$a_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_k a_{k\sigma} e^{ikr_i}, \quad (4.14)$$

$$a_{i\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_k a_{k\sigma}^+ e^{-ikr_i}. \quad (4.15)$$

Подставляя (4.14) и (4.15) в гамильтониан (4.2), после некоторых преобразований и учета полноты базиса плоских волн получаем гамильтониан в диагональном виде:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{k, \sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}, \\ \epsilon_k &= \epsilon_0 + \sum_{R_i} t(R_i) e^{-ikr_i}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Таким образом, после перехода из узельного базиса в импульсный гамильтонова матрица принимает диагональный вид, т. е. импульсное представление является в данной задаче собственно энергетическим. Коэффициент при операторе числа частиц в новом представлении в (4.16) и есть энергия частиц как функция импульса. Подчеркнем, что  $\epsilon_k$  — одиночастичный спектр, полная энергия системы есть

$$E = \sum_{k, \sigma} \epsilon_k \langle n_{k\sigma} \rangle. \quad (4.17)$$

Заметим, что при каноническом преобразовании (4.14)–(4.15) 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

$$a_k a_{k'}^+ + a_{k'}^+ a_k = \delta_{kk'}. \quad (4.18)$$

Имеем:

$$\begin{aligned} a_k a_{k'}^+ + a_{k'}^+ a_k &= \frac{1}{N_a} \sum_{ij} (a_i a_j^+ + a_i^+ a_j) e^{i(k' r_j - k r_i)} = \\ &= \frac{1}{N_a} \sum_{ij} \delta_{ij} e^{i(k' r_j - k r_i)} = \frac{1}{N_a} \sum_i e^{i(k' - k) r_i} = \delta_{kk'}. \quad (4.19) \end{aligned}$$

Соотношение (4.19) 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  $\varepsilon_k$ , оставив в гамильтониане (4.2) 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 (4.2) 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

$$U = \exp \left( i\pi \sum_{\sigma} \sum_{i_A} a_{i\sigma}^{+A} a_{i\sigma}^A \right), \quad (4.20)$$

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

$$e^{-i\varphi a_{i\sigma}^{+A}} a_{i\sigma} a_{i\sigma} e^{i\varphi a_{i\sigma}^{+A}} = a_{i\sigma} e^{i\varphi}, \quad (4.21)$$

которое доказывается непосредственным дифференцированием по параметру  $\varphi$ .

Рассмотрим действие преобразования  $U$  на гамильтониан (4.2):

$$U^{-1} H U = U^{-1} (H_0 + H_{kin}) U = U^{-1} H_0 U + U^{-1} H_{kin} U, \quad (4.22)$$

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

Для второго слагаемого в (4.22) 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 (4.22) меняется на противоположный.

Первое слагаемое в (4.22) 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,

$$U^{-1} a^{+A} a^A U = U^{-1} a^{+A} U U^{-1} a^A U = a^{+A} a^A, \quad (4.23)$$

то получаем, что первое слагаемое инвариантно относительно преобразования  $U$ .

Далее для любой собственной функции  $\psi$  имеем:

$$\begin{aligned} H\psi = E\psi &\Rightarrow U^{-1}H\psi U = U^{-1}E\psi U \Rightarrow \\ &\Rightarrow U^{-1}HUU^{-1}\psi U = U^{-1}EUU^{-1}\psi U \Rightarrow \\ &\Rightarrow U^{-1}HUU^{-1}\psi U = EU^{-1}\psi U \Rightarrow \\ &\Rightarrow U^{-1}HU\Psi = E\Psi; \quad \Psi = U^{-1}\psi U. \end{aligned} \tag{4.24}$$

Из (4.24) 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 (4.16) для простой кубической решетки в приближении ближайших соседей будет иметь вид

$$\varepsilon_k = \varepsilon_0 - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \tag{4.25}$$

Рассмотрим для простоты одномерный случай:

$$\varepsilon_k = \varepsilon_0 - 2t \cos ka. \tag{4.26}$$

Этот закон дисперсии описывает полосу энергии шириной  $2Zt$  ( $Z$  — число ближайших соседей;  $Z = 2$  для одномерного случая), так называемую зону проводимости (рис. 4.5). 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. 4.5).

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

$$k_n^{(x)} = \frac{2\pi}{aL_x} n; \quad -\frac{L_x}{2} + 1 \leq n \leq \frac{L_x}{2}. \tag{4.27}$$

При этом закон дисперсии (4.26) останется справедлив, 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 (4.27) в системе имеется 6 разрешенных одиночастичных уровней энергии:

$$\begin{aligned} E_1 &= \varepsilon_0 - 2t \cos(0) = \varepsilon_0 - 2t, \quad E_{2,3} = \varepsilon_0 - 2t \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) = \varepsilon_0 - t, \\ E_{4,5} &= \varepsilon_0 - 2t \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) = \varepsilon_0 + t, \quad E_6 = \varepsilon_0 - 2t \cos \pi = \varepsilon_0 + 2t. \end{aligned} \tag{4.28}$$

Видно, что средние уровни дважды вырождены по импульсу (рис. 4.6).

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

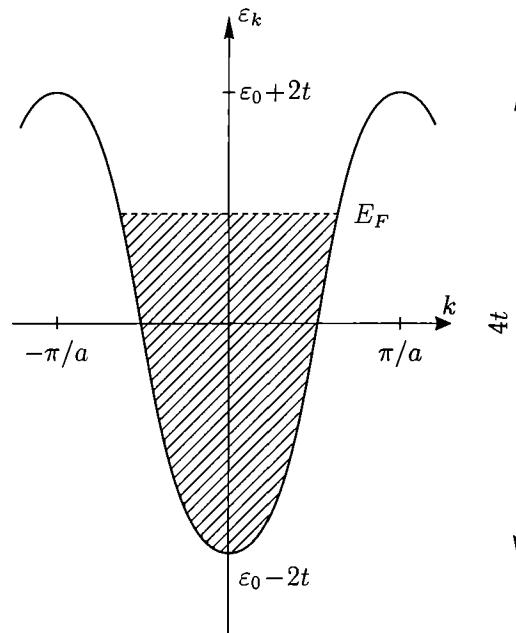


Рис. 4.5. Спектр свободной частицы

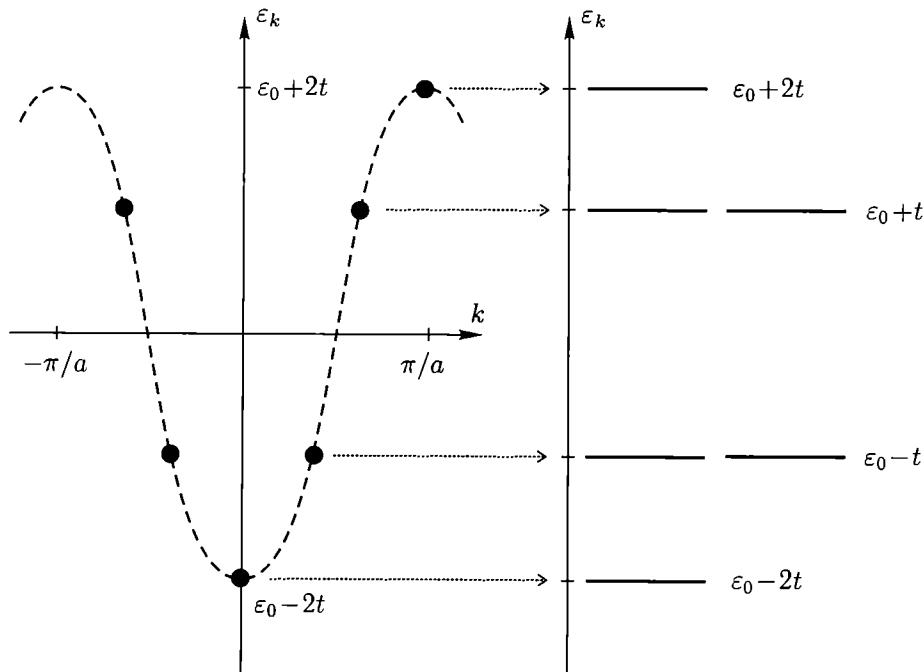


Рис. 4.6. Одночастичные энергетические уровни для системы из шести узлов. Средние уровни дважды вырождены по импульсу

другие — на втором и третьем. Полная энергия основного состояния системы равна

$$E_{(0)} = E_{\min} = E_1 + E_2 + E_3 = 3\varepsilon_0 - 4t, \quad (4.29)$$

причем основное состояние является невырожденным. Следующее, первое возбужденное состояние, имеет энергию  $E_{(1)} = 3\varepsilon_0 - 2t$  и является вырожденным (рис. 4.7).

Далее, располагая соответствующим образом частицы, получаем все 20 уровней полной энергии этой трехчастичной задачи. 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 удается 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.

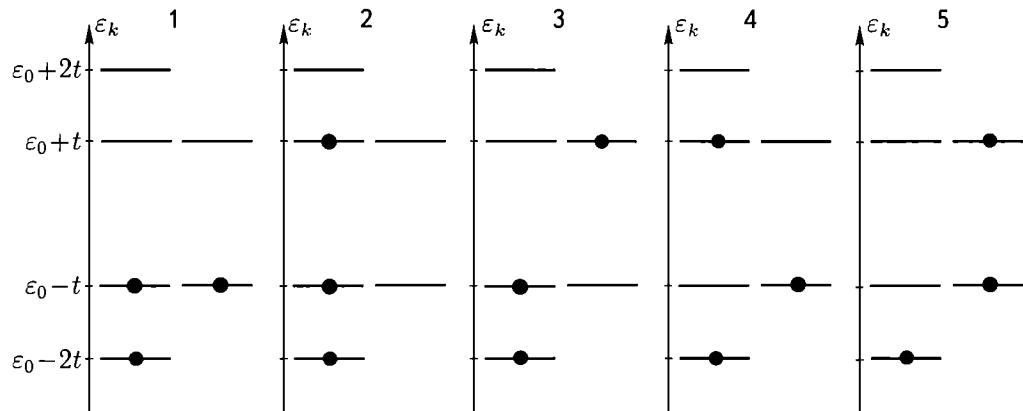


Рис. 4.7. Основное (1) и первое возбужденное (2–5) состояния для системы из трех частиц на шести узлах. Первое возбужденное состояние четырехкратно вырождено

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

#### 4.4. Модель Хаббарда

Для объяснения фазовых переходов «металл–изолят» 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:

$$H = \sum_{p, \sigma} \varepsilon_p a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{p_1, p_2, p'_1, p'_2, \sigma, \sigma'} V_{p_1 p_2 p'_1 p'_2} a_{p_1 \sigma}^+ a_{p_2 \sigma'}^+ a_{p'_2 \sigma'} a_{p'_1 \sigma}. \quad (4.30)$$

Вклад в спектр от кинетической части гамильтониана (4.30) 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:

$$a_{p\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j a_{i\sigma} e^{ipr_j}. \quad (4.31)$$

Здесь индекс  $j$  подразумевает базис волновых функций Ваннье 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 (4.30), получаем:

$$H_{kin} = \sum_{k \neq j, \sigma} t_{kj} a_{k\sigma}^+ a_{j\sigma}; \quad t_{kj} = \sum_{p, \sigma} \varepsilon_p e^{ip(r_k - r_j)} \sim e^{-\frac{|r_k - r_j|}{a_B}}. \quad (4.32)$$

(Здесь и далее все энергии отсчитываются от уровня  $\varepsilon_0$ .)

Подставив (4.31) в потенциальную часть гамильтониана (4.30), получим:

$$\begin{aligned} H_{int} &= \frac{1}{2} \sum_{i, j, k, l, \sigma, \sigma'} V_{ijkl} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma'}^+ a_{l\sigma'} a_{k\sigma}, \\ V_{ijkl} &= \frac{1}{N^2} \sum_{p_1, p_2, p'_1, p'_2} V_{p_1 p_2 p'_1 p'_2} e^{-i(p_1 r_i + p_2 r_j - p'_2 r_l - p'_1 r_k)}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Как правило, в металлах и полуметалах 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

$$V_{ijkl} \equiv V_{iiii} = V(|r| = 0) = U, \quad (4.34)$$

получаем гамильтониан Хаббарда:

$$H = \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i, \sigma} U a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} a_{i,-\sigma}^+ a_{i,-\sigma}. \quad (4.35)$$

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 (4.35) запишется в следующем виде:

$$H = -t \sum_{(ij), \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (4.36)$$

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. 4.8). Более того, если отсчитывать все энергии в единицах  $t$ , то остается единственный параметр  $t/U$ .

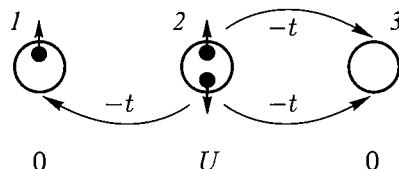


Рис. 4.8. Матричные элементы потенциальной и кинетической энергий для гамильтониана (4.36) в случае системы из трех узлов и трех электронов

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 транспорт-

ных, 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 сильновзаимодействующих 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.

**4.4.1. 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 (4.35) на базисную функцию в узельном представлении:

$$a_{i\sigma}^+ a_{i,-\sigma} a_{i,-\sigma}^+ a_{i,-\sigma} | \dots n_{i\sigma} \dots n_{i,-\sigma} \dots \rangle = n_{i\sigma} n_{i,-\sigma} | \dots n_{i\sigma} \dots n_{i,-\sigma} \dots \rangle. \quad (4.37)$$

Таким образом, получаем следующий диагональный матричный элемент:

$$\langle m | H_{int} | p \rangle = U \sum_i n_{i\uparrow}^{(p)} n_{i\downarrow}^{(p)} \delta_{mp}. \quad (4.38)$$

Итак, слагаемое в (4.35), 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. 4.9), гамильтониан которой имеет вид (4.35) с параметрами  $t = -1$ ;  $U = 4,3$ :

$$H = - \sum_{i=1}^3 (a_{i\sigma}^+ a_{i+1,\sigma} + a_{i-1,\sigma}^+ a_{i,\sigma}) + 4,3 \sum_{i=1}^3 a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow}. \quad (4.39)$$

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

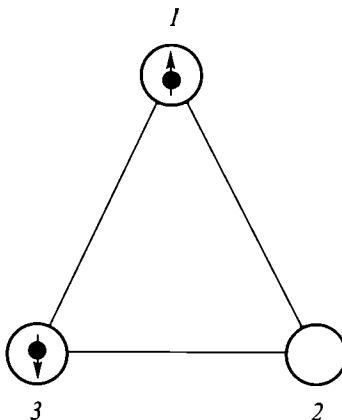


Рис. 4.9. Система из трех узлов и двух частиц с противоположными спинами в состоянии  $\Phi_3 = |100, 001\rangle$

Узельный базис системы будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= |001, 001\rangle; & \Phi_2 &= |010, 001\rangle; & \Phi_3 &= |100, 001\rangle; \\ \Phi_4 &= |001, 010\rangle; & \Phi_5 &= |010, 010\rangle; & \Phi_6 &= |100, 010\rangle; \\ \Phi_7 &= |001, 100\rangle; & \Phi_8 &= |010, 100\rangle; & \Phi_9 &= |100, 100\rangle. \end{aligned} \quad (4.40)$$

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:

$$H = \begin{pmatrix} 4,3 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 4,3 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 4,3 \end{pmatrix}. \quad (4.41)$$

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 (4.40)). На главной диагонали матрицы — вклад от взаимодействия, но только в 1-й, 5-й 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

$$H = -t \sum_{i \neq j, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_{\langle ij \rangle, \sigma, \sigma'} n_{i\sigma} n_{i\sigma'}. \quad (4.42)$$

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:

$$\langle m | H_V | p \rangle = V \sum_{\langle ij \rangle, \sigma, \sigma'} n_{i\sigma}^{(p)} n_{j\sigma'}^{(p)} \delta_{mp}. \quad (4.43)$$

Если рассмотреть частицы с ферми-статистикой, но без учета спина, то второе слагаемое в (4.42) исчезнет, и модель примет следующий вид:

$$H = -t \sum_{i \neq j} a_i^+ a_j + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j. \quad (4.44)$$

Рассмотрим периодически замкнутую систему из четырех узлов и двух частиц, описываемую гамильтонианом (4.44) с параметрами  $t = 1$ ;  $V = 2,1$ . В системе будет  $C_4^2 = 6$  состояний, узельный базис будет следующим:

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= |0011\rangle; & \Phi_2 &= |0101\rangle; & \Phi_3 &= |0110\rangle; \\ \Phi_4 &= |1001\rangle; & \Phi_5 &= |1010\rangle; & \Phi_6 &= |1100\rangle. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Построим гамильтонову матрицу этой системы:

$$H = \begin{pmatrix} 2,1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 2,1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 2,1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 2,1 \end{pmatrix}. \quad (4.46)$$

Теперь на главной диагонали ненулевые вклады расположены на 1-й, 3-й, 4-й 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  $H_{15}$ ,  $H_{26}$ ,  $H_{51}$ ,  $H_{62}$ ).

**4.4.2. 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:

$$H = -t \sum_{i \neq j, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (4.47)$$

Второе слагаемое можно упростить, если предположить, что с электроном со спином  $\sigma$  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

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \approx \langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow} \langle n_{i\downarrow} \rangle \equiv \langle n_{\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} + n_{i\uparrow} \langle n_{\downarrow} \rangle. \quad (4.48)$$

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 (4.47) принимает тогда следующий вид:

$$H = -t \sum_{i \neq j, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_{i, \sigma} n_{i\sigma} \langle n_{-\sigma} \rangle, \quad (4.49)$$

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

Переходя в импульсное представление, получаем гамильтониан в диагональном виде:

$$H = \sum_{k, \sigma} \varepsilon_{k\sigma} a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}; \quad \varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_k + U \langle n_{-\sigma} \rangle. \quad (4.50)$$

Здесь  $\varepsilon_k$  — известный закон дисперсии для модели сильной связи без взаимодействия (4.26). 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. 4.9, с базисом (4.40), и качественно сопоставим его с результатом в приближении среднего поля. Гамильтониан системы имеет вид ( $t = -1$ ):

$$H = - \sum_{i=1, \sigma}^3 (a_{i\sigma}^+ a_{i+1,\sigma} + a_{i\sigma}^+ a_{i-1,\sigma}) + U \sum_{i=1}^3 n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (4.51)$$

В базисе (4.40) получаем гамильтонову матрицу:

$$H = \begin{pmatrix} U & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & U & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & U \end{pmatrix}. \quad (4.52)$$

В отсутствие взаимодействия решение имеет вид

$$\varepsilon_k = -2\cos ka, \quad (4.53)$$

и разрешенные одночастичные уровни для одной проекции спина

$$\varepsilon_1 = -2\cos(0) = -2; \quad \varepsilon_{2,3} = -2\cos(\pm\frac{2\pi}{3}) = +1. \quad (4.54)$$

Сформируем спектр полных энергий системы. Так как спины у частиц в системе разные, то в основном состоянии обе частицы займут нижний уровень  $\varepsilon_1$ , и энергия основного состояния

$$E_{(0)} = 2\varepsilon_1 = -4, \quad (4.55)$$

причем оно является невырожденным (рис. 4.10).

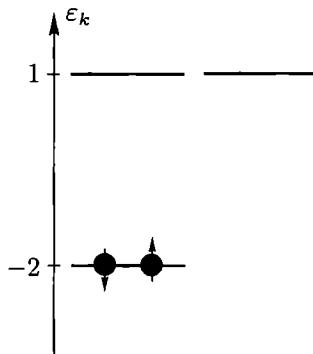


Рис. 4.10. Основное состояние для системы из трех узлов и двух частиц с противоположными спинами

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

$$E_{(1)} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = -1. \quad (4.56)$$

Это состояние четырехкратно вырождено: дважды по импульсу и дважды по проекции спина (рис. 4.11).

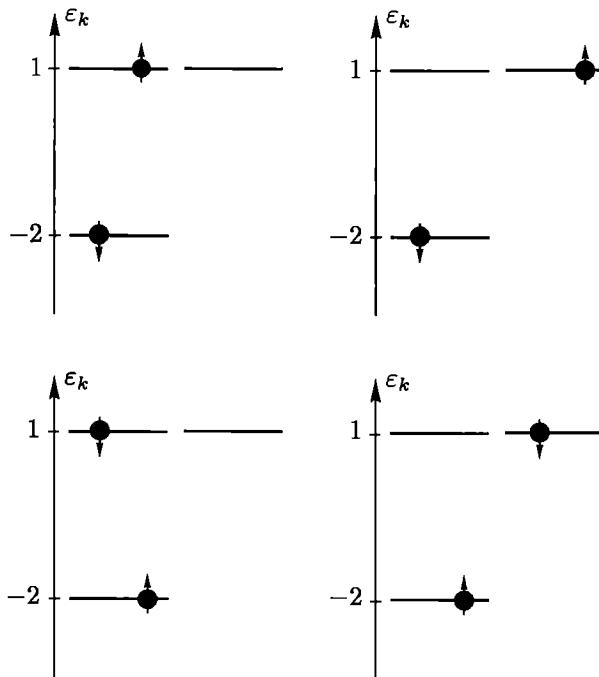


Рис. 4.11. Первое возбужденное состояние для системы из трех узлов и двух частиц с противоположными спинами четырехкратно вырождено: дважды по импульсу и дважды по спину

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

$$E_1 = -4, \quad E_{2,3,4,5} = -1, \quad E_{6,7,8,9} = 2. \quad (4.57)$$

Как же меняется ситуация при ненулевом кулоновском взаимодействии? Положим  $U = 0,3$ , тогда точная диагонализация матрицы (4.52) дает следующий ответ:

$$\begin{aligned} E_1 &= -3,903, & E_{2,3} &= -1, & E_{4,5} &= -0,8069, \\ E_6 &= 2, & E_{7,8} &= 2,1069, & E_9 &= 2,2033; \end{aligned} \quad (4.58)$$

Приближение среднего поля изменило бы спектр на величину порядка

$$\Delta E = U (\langle n_{\downarrow} \rangle + \langle n_{\uparrow} \rangle) = U \left( \frac{1}{3} + \frac{1}{3} \right) = 0,2 \quad (4.59)$$

(для точного расчета величины  $\Delta E$  в приближении среднего поля необходимо решать самосогласованную модель Стонера, но для качественной оценки достаточно результата (4.59)).

Для энергии основного состояния разница результатов (4.58) и (4.59) 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  $\Delta E$ .

Если при слабом взаимодействии еще удается 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.

**4.4.3. 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 бессpinовые 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

$$N = \sum_{i,\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}. \quad (4.60)$$

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

$$[H, N] = HN - NH = 0, \quad (4.61)$$

т. е. оператор числа частиц должен коммутировать с гамильтонианом (4.35). Оператор числа частиц тогда имеет общую с оператором энергии систему собственных функций, что позволяет решать задачу для заданного числа частиц в системе. Докажем свойство (4.61).

Коммутация оператора числа частиц со вторым членом из (4.35) очевидна, так как он сам состоит из произведения операторов числа частиц на узле. Докажем коммутативность с кинетической частью гамильтониана. Имеем:

$$\begin{aligned} \sum_{i,j,k} \sum_{\sigma, \sigma'} [t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}, a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma'}] &= \sum_{i,j,k} \sum_{\sigma, \sigma'} t_{ij} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma'} - a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma'} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}) = \\ &= \sum_{i,j,k} \sum_{\sigma, \sigma'} t_{ij} (a_{i\sigma}^+ (\delta_{jk} \delta_{\sigma\sigma'} - a_{k\sigma'}^+ a_{j\sigma}) a_{k\sigma'} - a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma'} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}) = \\ &= \sum_{i,j,k} \sum_{\sigma, \sigma'} t_{ij} (\delta_{jk} \delta_{\sigma\sigma'} a_{i\sigma}^+ a_{k\sigma'} - a_{i\sigma}^+ a_{k\sigma'}^+ a_{j\sigma} a_{k\sigma'} - a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma'} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}) = \\ &= \sum_{i,j,k} \sum_{\sigma, \sigma'} t_{ij} (\delta_{jk} \delta_{\sigma\sigma'} a_{i\sigma}^+ a_{k\sigma'} - a_{k\sigma'}^+ (\delta_{ik} \delta_{\sigma\sigma'} - a_{k\sigma'} a_{i\sigma}^+) a_{j\sigma} - a_{k\sigma'}^+ a_{k\sigma'} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}) = \\ &= \sum_{i,j,k} \sum_{\sigma, \sigma'} t_{ij} (\delta_{jk} \delta_{\sigma\sigma'} a_{i\sigma}^+ a_{k\sigma'} - \delta_{ik} \delta_{\sigma\sigma'} a_{k\sigma'}^+ a_{j\sigma}) \equiv 0. \quad (4.62) \end{aligned}$$

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:

$$H = \begin{pmatrix} N=1 & 0 & 0 \\ 0 & N=2 & 0 \\ 0 & 0 & \dots \end{pmatrix}. \quad (4.63)$$

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 (4.35) коммутирует с оператором  $S^Z$  полной проекции спина на ось  $z$ ,

$$S^Z = \frac{1}{2} \sum_i (a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} - a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow}) = \frac{1}{2} \sum_i (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}), \quad (4.64)$$

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:

$$H = \left( \begin{array}{cccccc} N=1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ S^Z = -1/2 & & & & & \\ 0 & N=1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & S^Z = +1/2 & & & & \\ 0 & 0 & N=2 & 0 & 0 & 0 \\ & & S^Z = -1 & & & \\ 0 & 0 & 0 & N=2 & 0 & 0 \\ & & & S^Z = 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & N=2 & 0 \\ & & & & S^Z = +1 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \end{array} \right), \quad (4.65)$$

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 (4.35) взаимодействуют еще и с поперечными полями, то в гамильтониане появляется дополнительный член вида

$$\Delta H \sim \sum_{i,\sigma} (a_{i\sigma} + a_{i\sigma}^+), \quad (4.66)$$

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.

#### 4.5. 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  $\Psi_n$  в виде коэффициентов разложения  $C_{mn}$  по исходным базисным функциям  $\Phi_m$ . Матричные элементы операторов в базисе  $\Phi$  также известны, с их помощью возможен расчет различных средних. Например, среднее число частиц на узле в основном состоянии

$$\begin{aligned} \langle n_i \rangle &= \langle \Psi_0 | n_i | \Psi_0 \rangle = \sum_{n,m} C_{n0}^* C_{m0} \langle \Phi_n | n_i | \Phi_m \rangle = \\ &= \sum_{n,m} C_{n0}^* C_{m0} n_i^{(n)} \delta_{nm} = \sum_n |C_{n0}|^2 n_i^{(n)}. \end{aligned} \quad (4.67)$$

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

$$\langle n_i n_j \rangle = \sum_n |C_{n0}|^2 n_i^{(n)} n_j^{(n)}. \quad (4.68)$$

Недиагональные корреляторы представимы в виде

$$\langle a_i^+ a_j \rangle = \sum_{n,m} C_{n0}^* C_{m0} \langle \Phi_n | a_i^+ a_j | \Phi_m \rangle, \quad (4.69)$$

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. 4.12).

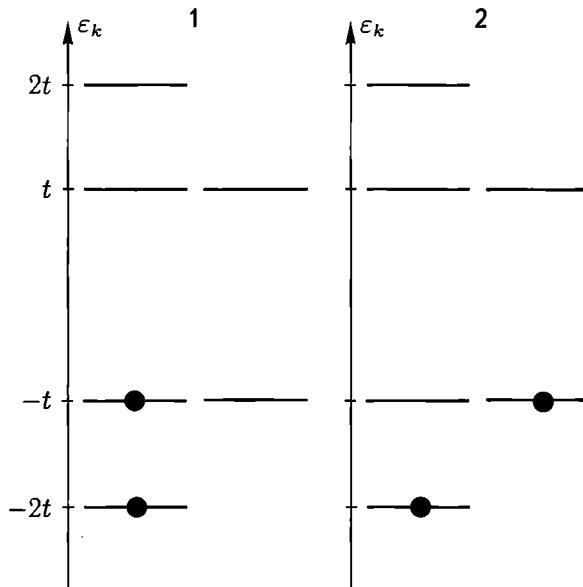


Рис. 4.12. Основное состояние системы из шести узлов с двумя невзаимодействующими бесспиновыми ферми-частицами двукратно вырождено

Расчет методом точной диагонализации среднего числа заполнения каждого узла в этих вырожденных состояниях дает следующий результат, представленный в табл. 4.1.

Таблица 4.1. 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. 4.1 должны стоять одинаковые значения, равные  $1/3$ . 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, векторы

этих состояний могут быть ориентированы как угодно (рис. 4.13). 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 бессpinовых ферми-частиц (см. рис. 4.12) волновая функция будет иметь вид

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 + e^{i\varphi} \Psi_2), \quad (4.70)$$

где функция  $\Psi_1$  отвечает состоянию 1 на рис. 4.12, а функция  $\Psi_2$  — состоянию 2, причем эти функции линейно независимы:  $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = 0$ .

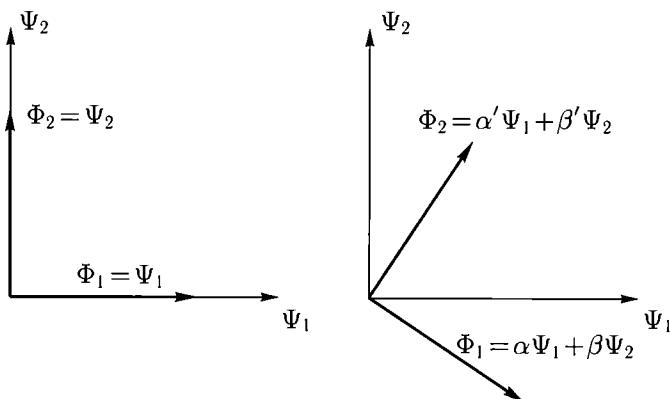


Рис. 4.13. Наглядное представление в виде векторов пары линейно независимых собственных функций  $\Psi_1$ ,  $\Psi_2$ , и  $\Phi_1$ ,  $\Phi_2$ , отвечающих двукратно вырожденному состоянию

Среднее заполнение на узле в этом случае

$$\begin{aligned} \langle n_i \rangle &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 + e^{-i\varphi} \Psi_2) \mid n_i \mid \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 + e^{i\varphi} \Psi_2) \right\rangle = \\ &= \frac{1}{2} \langle \Psi_1 \mid n_i \mid \Psi_1 \rangle + \frac{1}{2} \langle \Psi_2 \mid n_i \mid \Psi_2 \rangle = \frac{1}{2} \left( \langle n_i^{(1)} \rangle + \langle n_i^{(2)} \rangle \right) \end{aligned} \quad (4.71)$$

и не зависит от выбора фазового множителя  $e^{i\varphi}$ .

Подставляя значения чисел заполнения из табл. 4.1, убеждаемся, что теперь получается правильный результат  $\langle n_i \rangle = 1/3$ .

## 4.6. Расчет двумерной фермионной системы для задачи о дробном квантовом эффекте Холла

Как пример расчета достаточно сложной взаимодействующей фермионной системы рассмотрим задачу о двумерном ферми-газе в сильном магнитном поле в условиях квантового эффекта Холла [215–218].

**4.6.1. Дробный и целый квантовые эффекты Холла.** К 80-м годам XX в. была развита технология получения сложных плоских полупроводниковых сверхструктур (например, чередующиеся слои полупроводника GaAs в чистом виде, а также с примесью алюминия — AlGaAs) с поперечными размерами порядка сотен и даже десятков ангстрем. На основе таких структур изготавливают системы квантовых ям — наноструктуры. В результате оказалось возможным реализовать двумерные физические структуры (т. е. двумерный электронный газ). Измеряя Э.Д.С. Холла и магнитосопротивление в поперечном магнитном поле в этих структурах, фон Клитцинг с соавторами [216] в 1980 г. обнаружил, что в сильных полях ( $\sim 5$ – $10$  Тл) холловская проводимость квантуется и кратна отношению фундаментальных физических констант  $e^2/2\pi\hbar$ , где  $e$  — заряд электрона (рис. 4.14). Этот эффект был назван *целым квантовым эффектом Холла* (часто используется аббревиатура IQHE Integer Quantum Hall Effect), и в 1985 г. ученым-первооткрывателям была присуждена Нобелевская премия.

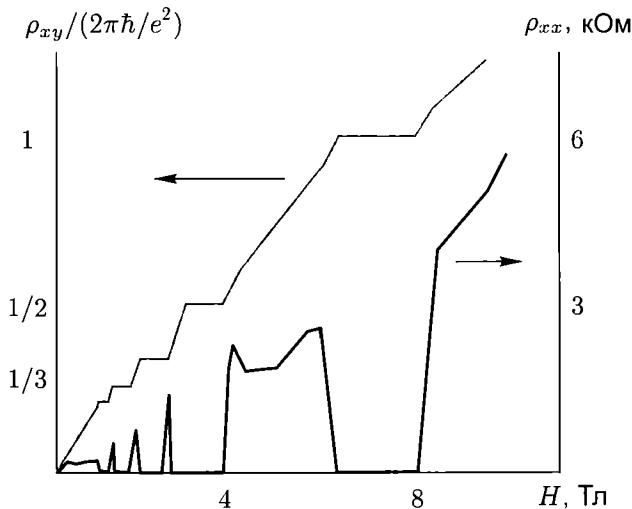


Рис. 4.14. Зависимость холловской проводимости  $\rho_{xy}$  и магнитосопротивления  $\rho_{xx}$  от напряженности магнитного поля в целом квантовом эффекте Холла

В 1981 г. Лафлину [217] в рамках теории квантования уровней электрона в магнитном поле удалось объяснить этот эффект. Вслед за этим последовало следующее открытие буквально через два года, в 1982 г., Д. С. Цуи, Х. Л. Штермер и А. С. Госсард [218] при низких температурах ( $T = 5$  К) и сильных полях ( $H \sim 10$  Тл) наблюдали ступеньки холловской проводимости

уже при значениях  $(e^2/2\pi\hbar)/3$  (рис. 4.15). В дальнейшем наблюдалась целая серия ступенек  $\mu e^2/2\pi\hbar$ , где  $\mu = 1/3, 1/5, 1/7, 2/9, \dots$ .

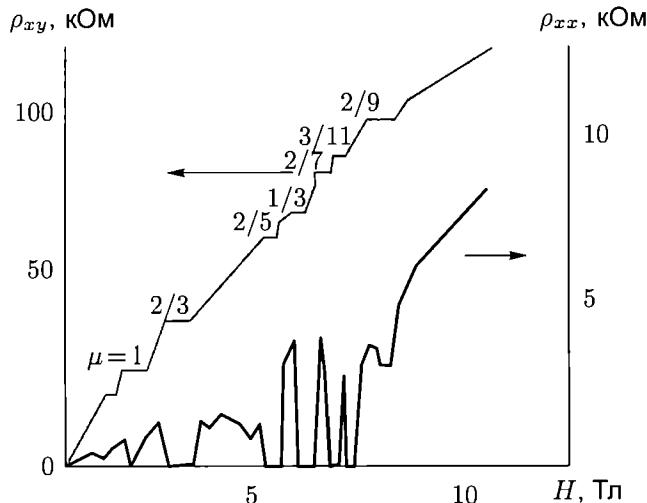


Рис. 4.15. Поперечная проводимость  $\rho_{xy}$  и магнитосопротивление  $\rho_{xx}$  в дробном квантовом эффекте Холла

Этот эффект назвали *дробным квантовым эффектом Холла* (FQHE – Fractional Quantum Hall Effect). Его также удалось объяснить (1983 г., Лафлин) [219], при этом оказалось, что двумерный электронный газ в сильном магнитном поле в этом случае переходит в новое основное состояние — несжимаемую квантовую жидкость (жидкость Лафлина). В 1998 г. теоретику Лафлину и экспериментаторам Тсуи и Штермеру была присуждена Нобелевская премия за открытие и объяснение дробного квантового эффекта Холла.

В настоящее время целый и дробный эффекты Холла наблюдают в двумерных инверсионных слоях МДП-структур  $n$ - и  $p$ -типа (например, на основе кремния), а также в полупроводниковых гетероструктурах (сверхрешетках) на основе GaAs, InP, InAs, GaSb и др.

Теоретическое объяснение целого и дробного эффектов Холла см., например, в [220].

Современные исследования дробного квантового эффекта Холла направлены еще на одно интересное явление — реализацию регулярной решетки из носителей заряда (в двумерной ситуации — плоской треугольной решетки). В начале 90-х годов все более доказательно стали звучать слова о реализации вблизи FQHE этого нового состояния двумерного электронного газа — *кристалла Вигнера*. Впервые возможность такой вигнеровской кристаллизации в двумерной электронной системе в сильном магнитном поле еще в 1975 г. рассмотрели Е. Ю. Лозовик и В. И. Юдсон [221].

Дело в том, что вблизи факторов заполнения первой зоны Ландау  $\mu = 1/3$  и  $\mu = 1/5$ , но вне реализации ступенек FQHE экспериментально наблюдают резкое экспоненциальное повышение магнитосопротивления с возрастанием температуры (активационный закон  $\rho \sim e^{E_g/kT}$ , где  $E_g \sim 5\text{K}$  — энергия акти-

вации). Жианг и др. [222] вблизи фактора заполнения  $\mu = 1/5$  (а точнее, при  $\mu = 0,19$  и  $\mu = 0,21$ ) наблюдали активационный закон вида  $\rho_{xx} \sim \exp(E_g/T)$ , причем энергия активации  $E_g \sim 1$  К. Голдман с сотрудниками [223] получили такое поведение магнитосопротивления при  $2/9 < \mu < 1/5$  и при  $\mu < \sim 1/5$ . Дорожкин и др. [224] экспериментально доказывают диэлектризацию при  $\mu < 0,28$ . Саджкото с сотрудниками [225] наблюдают диэлектризацию около ступенек FQHE при  $\mu = 1/5$  и  $\mu = 2/9$ .

Фактически к настоящему моменту надежно экспериментально установлено, что около факторов заполнения  $\mu = 1/3$  и  $\mu = 1/5$  имеет место активационный закон магнитосопротивления  $\rho_{xx}$ . Это косвенно свидетельствует о диэлектризации системы, о локализации электронов и реализации регулярной решетки из носителей заряда. В принципе, соображения, приводящие к возможности локализации (впервые рассмотренные Лозовиком и Юдсоном) достаточно очевидны: при усилении магнитного поля магнитная длина  $l_H$  — масштаб пространственной локализации волновой функции электрона — в присутствии магнитного поля уменьшается, т. е. при своем движении вокруг линий магнитного потока носители заряда все более сжимают радиус «витков» (если пользоваться классической аналогией движения) и фактически имеют определенные координаты в пространстве. При наличии сильного кулоновского отталкивания образуется газ практических классических частиц в двумерном пространстве, которые могут выстроиться в регулярную плоскую треугольную структуру для минимизации энергии, «запирая» себя в точках равновесия (см., например, рис. 4.16). Действительно, двумерная концентрация электронов определяется формулой  $n = \mu/2\pi l_H^2$ . С другой стороны, в треугольной плоской решетке с периодом  $a$  имеем из геометрических соображений  $n = 2/\sqrt{3}a^2$ . Отсюда получаем соотношение

$$\left(\frac{a}{l_H}\right)^2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}\mu}. \quad (4.72)$$

При усилении поля  $\mu$  уменьшается, и эффективно увеличивается период  $a$ . Физические размеры электрона (вернее, электронного «блина»), определяемые величиной магнитной длины  $l_H$ , уменьшаются относительно их расстояния друг от друга  $a$ , и они все более локализуются. Такая структура является диэлектриком с характерной энергией активации  $E_g \sim 1-5$  К, как и наблюдается на эксперименте. Заметим, что  $E_g$  оказывается близкой по порядку величины к характерным значениям энергии кулоновского взаимодействия в двумерной задаче (рис. 4.16),  $E_{\text{кул}} \sim e^2/\varepsilon l_H$  (точнее,  $E_{\text{кул}}(r) = 2\frac{e^2}{\varepsilon_0} \ln r$ ),

где  $\varepsilon$  — диэлектрическая постоянная. Если учесть, что в GaAs  $\varepsilon \sim 13$ , имеем масштаб  $E_{\text{кул}} \lesssim 10^{-3}$  эВ в магнитном поле  $\sim 1-5$  Тл.

Следует подчеркнуть, что точное теоретическое обоснование вигнеровской кристаллизации — очень непростая задача. Какие-либо аналитические оценки в сильно взаимодействующем электронном газе проблематичны из-за отсутствия параметров малости и невозможности использования теории возмущений. В последнее время развитие компьютерного моделирования привело к возможности численного анализа ограниченных низкоразмерных систем.

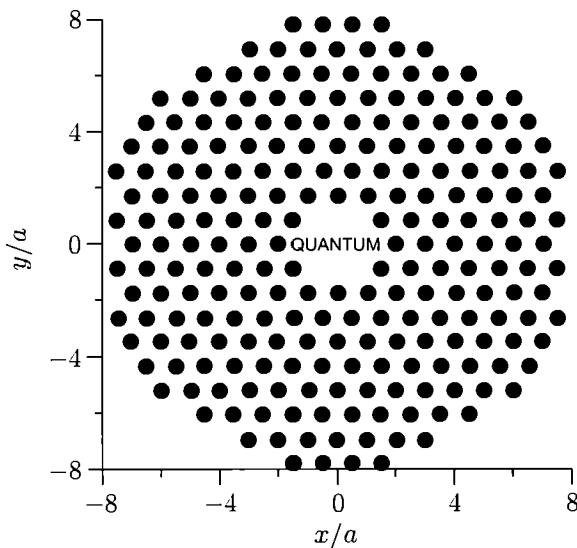


Рис. 4.16. Классическая треугольная решетка — вигнеровский кристалл

Расчеты методами МК и точной диагонализации гамильтоновой матрицы в двумерной взаимодействующей электронной системе проводятся на конечных (10–30 электронов) кластерах в различной геометрии. Рассчитывают энергию, волновые функции и различные корреляционные взаимодействия. Задачу для таких малых систем можно решить *точно*, без использования каких-либо приближений.

Приведем результаты некоторых наиболее характерных численных исследований по вигнеровской кристаллизации. Лам и Гирвин [226] в приближении Хартри–Фока рассчитали методом МК вблизи  $\mu = 1/3$  и  $\mu = 1/5$  энергии вигнеровского кристалла (WC) и лафлиновской жидкости (LL). Сопоставление этих энергий приводит к выводу о возможности кристаллизации при  $\mu = 1/5$ . Прайс, Плацман и Хе [227] провели вариационные расчеты МК и показали переход из жидкости LL в кристалл WC около значений  $\mu = 1/3; 1/5; 1/7$ . Также Плацман и Прайс [228] в приближенном подходе проанализировали переход по температуре из LL в WC, т. е. отогрев и замораживание системы при  $\mu = 1/3$  и  $\mu = 1/5$ . В этой работе была построена фазовая диаграмма на плоскости  $T_c \times r_s$  ( $r_s$  — параметр, напрямую связанный с плотностью электронного газа через соотношения:  $n = 1/2\pi a_b^2 r_s^2$ ;  $r_s^2 = \mu l_H^2/a_b^2$ ), показывающая области существования жидкости и кристалла.

Следует отметить, что приближенные вариационные расчеты не позволяют достоверно отличить состояния жидкости и твердой фазы, так как жидкость Лафлина имеет плотность, близкую к кристаллической фазе, и энергии состояний WC и LL сравнимы. С другой стороны, наиболее успешный известный *точный* численный расчет [229] был проведен не на плоскости, а на сфере с  $N = 12$  частицами на  $m = 25$  орбиталах. Однако оптимальная электронная конфигурация в вигнеровском кристалле должна иметь гексагональную (плоскую) элементарную ячейку. Отсюда число частиц в системе должно быть

близко к 7, 13 и т. д. для адекватного описания состояния WC (см., например, [230]). Эти значения принципиально нельзя реализовать в геометрии сферы.

**4.6.2. Система уровней в первой зоне Ландау. Метод точной диагонализации.** Для расчета двумерного электронного газа в сильном магнитном поле методом точной диагонализации следует задачу переформулировать в более удобном для расчета базисе.

Решим сначала двумерную задачу об одном электроне в сильном поперечном магнитном поле. В этом случае удобно выбрать не тороидальную, а цилиндрическую геометрию. Векторный потенциал можно выбрать в следующем виде (симметричная калибровка для поля  $\mathbf{H} = \{0, 0, H\}$ ):

$$\begin{aligned} A_\rho &= A_z = 0, \\ A_\varphi &= H\rho/2. \end{aligned} \quad (4.73)$$

Представляя оператор Гамильтона

$$\hat{H} = \frac{1}{2m^*} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \quad (4.74)$$

в цилиндрических координатах, ищем решение уравнения Шредингера в виде

$$\psi(\rho, \varphi, z) = R(\rho) \exp(ik_z z + im\varphi). \quad (4.75)$$

В задаче сохраняются поперечный импульс и угловой момент  $m$  – квантовое число, отражающее свойства симметрии волновой функции относительно вращения вокруг оси  $z$ .

Запишем действие оператора Гамильтона на волновую функцию в цилиндрической геометрии:

$$\begin{aligned} H\psi &= \frac{1}{2m^*} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi = \frac{p^2}{2m^*} \psi + \frac{e^2}{2m^* c^2} A^2 \psi - \frac{e}{2m^* c} [\mathbf{A} p \psi + p \mathbf{A} \psi]; \\ p &= \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial \rho} \mathbf{i}_\rho + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{i}_\varphi + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{i}_z \right), \\ H\psi &= -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \psi \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \psi \right] + \\ &\quad + \frac{e^2 H^2}{8m^* c^2} \rho^2 \psi - \frac{eH\hbar}{2m^* ci} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi. \end{aligned} \quad (4.76)$$

Далее, ищем решение уравнения Шредингера в виде

$$\psi(\rho, \varphi, z) = R(\rho) \exp[ik_z z + im\varphi]. \quad (4.77)$$

Подставляя это выражение в уравнение  $H\psi = E\psi$ , получим после алгебраических преобразований для радиальной части следующее уравнение:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} R + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} R - \frac{m^2}{\rho^2} R - \gamma^2 \rho^2 R + 2m\gamma R &= -\beta R; \\ \gamma &= \frac{eH}{2\hbar c} = \frac{1}{2l_H^2}; \\ \beta &= \frac{2m^* E}{\hbar^2} - k_z^2. \end{aligned} \quad (4.78)$$

Далее проводим перенормировку радиальной переменной на магнитную длину и вводим безразмерный параметр  $\xi = \gamma\rho^2$ , тогда уравнение (после некоторых преобразований) принимает вид:

$$\begin{aligned} \xi \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} R + \frac{\partial}{\partial \xi} R + R \left( \lambda - \frac{\xi}{4} - \frac{m^2}{4\xi} \right) &= 0; \\ \lambda &= \frac{\beta}{4\gamma} + \frac{m}{2}. \end{aligned} \quad (4.79)$$

Несложно видеть прямо из последнего уравнения асимптоты решения:

$$R(\xi) \sim \begin{cases} \exp\left(-\frac{\xi}{2}\right), & \xi \rightarrow \infty; \\ \xi^{|m|/2}, & \xi \rightarrow 0. \end{cases} \quad (4.80)$$

Ищем решение в виде  $R(\xi) = W(\xi) \exp\left(-\frac{\xi}{2}\right) \xi^{|m|/2}$ , где на функцию  $W$  следует наложить условия ограниченности в нуле и на бесконечности. В итоге после преобразований получаем окончательное уравнение:

$$\xi W'' + (|m| + 1 - \xi) W' + [\lambda - (|m| + 1)/2] W = 0. \quad (4.81)$$

Полученное дифференциальное уравнение — типичное уравнение для вырожденной гипергеометрической функции (Куммера):

$$W(\xi) = {}_1F_1(-\lambda - (|m| + 1)/2, |m| + 1, \xi). \quad (4.82)$$

Ограничение решения на бесконечности требует, чтобы выполнялось соотношение  $n = \lambda - (|m| + 1)/2$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ , тогда гипергеометрическая функция превращается в конечный полином. Последнее и есть искомый спектр, который после восстановления исходных обозначений принимает вид

$$E_{nm}(k_z) = \hbar\omega_c \left( n + \frac{|m|}{2} - \frac{m}{2} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}. \quad (4.83)$$

Здесь  $n$  — номер зоны Ландау. Таким образом, кроме обычного квантования по зонам Ландау имеет место квантование по угловому моменту  $m$ . Более того, согласно (4.83), энергия вырождена при  $m = 0, 1, 2, \dots$  (при  $m < 0$  значения энергии просто совпадают со значениями энергий уровней Ландау, только с квантовым числом  $n + |m|$ ). Таким образом, в каждой зоне Ландау с определенным  $n$  имеется бесконечный набор вырожденных энергетических уровней с энергией, совпадающей с обычной энергией уровня Ландау:  $E_{nm}(k_z) = \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$ .

Учитывая точное решение в виде вырожденной гипергеометрической функции (4.83), для первой зоны Ландау ( $n = 0$ ) получаем, что функция  $W(\xi) = {}_1F_1(n = 0, |m| + 1, \xi) = 1$ , т. е. полная волновая функция имеет вид

$$\psi(\rho, \varphi, z) = R(\rho) \exp[ik_z z + im\varphi] = \exp[ik_z z + im\varphi - \xi/2] \xi^{|m|/2}. \quad (4.84)$$

В плоской геометрии  $k_z = 0$ , и уравнение можно переписать следующим образом (только при неотрицательных  $m$ ):

$$\begin{aligned}\psi_m(z) &= \frac{z^m}{\sqrt{2\pi 2^m m!}} e^{-|z|^2/4}, \\ z &= \frac{x+iy}{l_H}.\end{aligned}\quad (4.85)$$

Окончательно, нормируя интеграл от квадрата модуля волновой функции по всей комплексной плоскости  $z$  на единицу, имеем

$$|m\rangle = \psi_m(z) = \frac{z^m}{\sqrt{2\pi 2^m m!}} e^{-|z|^2/4}, \quad (4.86)$$

Таким образом, электрон локализован в пространстве, имеющем линейный размер магнитной длины (точнее, квадрат радиуса орбиты  $\langle \rho^2 \rangle = \langle x^2 + y^2 \rangle$  равен  $2(m+1)/l_H^2$ ).

**4.6.3. Численное моделирование.** Рассмотрим двумерный ферми-газ с кулоновским взаимодействием, т. е. модель

$$H = \sum_j \left\{ \frac{1}{m^*} \left| \frac{\hbar}{i} \nabla_j - \frac{e}{c} \mathbf{A}_j \right| + V(\mathbf{r}_j) \right\} + \sum_{j>k} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|}, \quad (4.87)$$

где индексы  $j, k = 1, \dots, N$ ;  $V$  — потенциал однородного нейтрализующего фона.

Численно решать такую систему можно, перейдя от координатного представления в некоторый дискретный базис. Поэтому следует переписать гамильтониан (4.87) в представлении вторичного квантования в наиболее адекватном задаче полном базисе волновых функций. Как показано выше, в сильном магнитном поле (имеет смысл выбрать только одну ориентацию спина — все спины частиц направлены по полю) имеется хорошее квантовое число — угловой момент  $m$  в первой зоне Ландау. Поэтому удобно полный ортонормированный базис выбрать по соответствующим одночастичным состояниям электрона  $|m\rangle$  в этой зоне (4.86).

Учитывая только кулоновское взаимодействие между частицами, можно переписать гамильтониан ферми-газа в этом базисе следующим образом:

$$H = \sum_{m_1, m_2, m_3, m_4} V_{m_1 m_2 m_3 m_4} a_{m_1}^+ a_{m_2}^+ a_{m_3} a_{m_4}, \quad (4.88)$$

где  $a_m^+$  — оператор рождения электрона в состоянии (на орбитали)  $|m\rangle$ ;  $V_{m_1 m_2 m_3 m_4}$  — матричный элемент кулоновского взаимодействия в двумерном

случае. Его можно получить в явном виде:

$$V_{m_1 m_2 m_3 m_4} = \frac{(-1)^{m_1+m_3}}{2^M \left( \prod_{i=1}^4 m_i! \right)^{1/2}} \sum_{k_1=0}^{\min(m_1, m_4)} \sum_{k_2=0}^{\min(m_2, m_3)} (-2)^{k_1+k_2} k_1! k_2! \times \\ \times C_{k_1}^{m_1} C_{k_1}^{m_4} C_{k_2}^{m_2} C_{k_2}^{m_3} I(M, k_1, k_2), \quad (4.89)$$

$$I(M, k_1, k_2) = \int_0^\infty dq \frac{V_C(q)}{2\pi} q^{2M-2k_1-2k_2+1} e^{-q^2},$$

где  $M = m_1 + m_2$  — суммарный момент;  $V_C(q)$  — фурье-компоненты потенциала двухчастичного взаимодействия. В двумерной ситуации для кулоновского взаимодействия  $V_C(q) = 2\pi/q$ , и матричные элементы можно точно представить в виде ряда:

$$V_{m_1 m_2 m_3 m_4} = \frac{(-1)^{m_1+m_3} \sqrt{\pi}}{2^{M+1} \left( \prod_{i=1}^4 m_i! \right)^{1/2}} \sum_{k_1=0}^{\min(m_1, m_4)} \sum_{k_2=0}^{\min(m_2, m_3)} (-2)^{k_1+k_2} k_1! k_2! \times \\ \times (-4)^{k_1+k_2} [2(M - k_1 - k_2) - 1]!! C_{k_1}^{m_1} C_{k_1}^{m_4} C_{k_2}^{m_2} C_{k_2}^{m_3}. \quad (4.90)$$

Для гамильтониана (4.88) выполняется закон сохранения углового момента:  $m_1 + m_2 = m_3 + m_4$ . Для исследования перехода «кристалл–жидкость» упростим задачу и расположим исходно частицы в классическую треугольную решетку (рис. 4.16) с узлами, помещенными на низшую орбиталь  $m = 0$  в состояниях  $\Psi(z_j) = \Psi_{m=0}(z - z_j)$  и позициях  $z_j$ , соответствующих узлам решетки. Период такого вигнеровского кристалла WC  $a$  выражается через электронную плотность  $n_e$ , и фактор заполнения орбиталей  $\mu = 2\pi l_H^2 n_e$  определяется в соответствии с соотношением (4.72). Далее все расстояния будем исчислять в магнитных длинах, а все энергетические величины — в единицах  $e^2/\epsilon l_H$ ,  $\epsilon$  — диэлектрическая постоянная. Важно, что меняя период, в данной схеме можно менять фактор заполнения в соответствии с приложенным магнитным полем.

Для точного квантовомеханического расчета нужно «разморозить» центральную частицу, затем первую координационную сферу (еще 6 частиц), и, если позволяют возможности компьютера, то и следующую (еще 6 частиц) и т. д., и для этих частиц точно решить уравнение Шредингера. Однако число орбит в выражении (4.88) должно быть ограничено из физических соображений и из ограничений на компьютерную память и быстродействие. Нужно получить ситуацию, при которой последующее увеличение максимального значения рассматриваемой орбиты не меняет существенно заполнения орбит.

Метод точной диагонализации применительно к данной задаче заключается в следующем. Необходимо найти энергию и волновые функции гамильтониана (4.88), т. е. решить уравнение Шредингера, причем точно, но для ограниченной системы. Здесь ограниченность достигается ограничением на

число орбиталей  $m$  и число электронов  $N$ , заполняющих эти орбитали. Таким образом, для полного перебора всех возможных состояний системы нужно расположить  $N$  электронов на  $m$  орбиталях всеми возможными способами с учетом тождественности. Легко понять, что таких вариантов  $C_m^N$ . Это и есть размерность базиса системы. Далее рассчитываются все матричные элементы перехода из одного состояния в другие за счет действия оператора (4.88), и строится гамильтонова матрица. Задача сводится к диагонализации этой матрицы. Получающиеся при этом собственные числа и векторы являются, соответственно, энергетическим спектром и собственными волновыми функциями, разложенными по исходному базису  $|m\rangle$ . Размер гамильтоновой матрицы быстро растет с увеличением  $m$  и  $N$ . Например, при числе орбиталей  $m = 25$  и числе электронов  $N = 7$  число возможных состояний равно 480700. Ограничимся поэтому первой ячейкой вигнеровского кристалла и семью частицами и решим для них квантовую задачу точно.

Итак, выделим семь электронов с  $z_j = 0$  и  $z_j = a$  и рассмотрим для них полную квантовую задачу (4.88), удерживая другие электроны в состоянии с  $m = 0$  и оставляя взаимодействие их с первыми семью частицами в соответствии с (4.88) (рис. 4.16). «Замороженная» треугольная решетка стабилизирует задачу, является как бы «средним полем» для квантовой задачи, исследуемой в пределах первой координационной сферы, и допускает возможность вигнеровской кристаллизации. В принципе, уже первой координационной сферы достаточно, чтобы фиксировать переход от корреляций дальнего порядка в кристалле к длинноволновым корреляциям ближнего порядка, наблюдаемых в жидкости Лафлина. Отметим, что обычно радиус круга, вырезанного из бесконечной плоскости для «среднего поля», выбирался размером около 100 периодов решетки, так что граничные условия уже не влияли на результаты.

Для семи электронов была выбрана 31 орбиталь ( $m = 0, 1, \dots, 30$ ), их число подбиралось из условия, что числа заполнения  $\langle n_m \rangle$ , определяющие вероятность нахождения электрона в состоянии с орбитальным моментом  $m$ , не изменяются (с относительной точностью 0,001) при увеличении числа орбит, и следующие состояния ( $m > 30$ ) не заполнены с этой же точностью. Даже в этом случае линейный размер гамильтоновой матрицы равен 2 629 575. Кроме того, из-за кулоновского взаимодействия гамильтонова матрица является более плотной, чем в стандартных узельных задачах (модели Хаббарда,  $t-J$ , Бозе–Хаббарда, спиновые и т. д.), что усложняет ее хранение в памяти компьютера и обработку.

Таким образом, задача сводится к диагонализации матрицы с линейным размером более  $2,5 \times 10^6$  следующего гамильтониана:

$$H = \sum_{m_1, m_2, m_3, m_4} V_{m_1 m_2 m_3 m_4} a_{m_1}^+ a_{m_2}^+ a_{m_3} a_{m_4} + \sum_m V_m^{(MF)} a_m^+ a_m, \quad (4.91)$$

где  $V_m^{(MF)}$  — стабилизирующее «среднее поле» внешних «замороженных» электронов (его расчет — самостоятельная задача). В общем случае это поле несимметрично и вызывает переходы состояний электронов с изменением момента у внутренних электронов на  $\Delta m = \pm 6n$ , где  $n$  — целое. Очевидно, что эта симметрия с углами, кратными  $\pi/3$ , выгодна для «кристаллического»

состояния центрального кластера. Чтобы не облегчать системе кристаллизацию, будем игнорировать все переходы, кроме переходов с  $\Delta m = 0$ . Такая процедура эквивалентна усреднению по углам относительно вращения стабилизирующего потенциала вокруг центрального кластера, в итоге система сохраняет полный момент, и можно пользоваться этим инвариантом при расчете.

Для построения «среднеполевого» стабилизирующего потенциала  $V_m^{(MF)}$  следует рассчитать диагональные матричные элементы для одного электрона, находящегося на орбите  $|m\rangle$ , и другого электрона, «замороженного» на орбите  $\Psi_{m=0}(z - z_j)$ . После расчета получаем

$$V_m^{(MF)} = \sum_{j=2, 3, \dots} V_m(z_j), \quad (4.92)$$

где сумма подразумевается по всем координатам, начиная со второй координационной сферы, и

$$\begin{aligned} V_m(z_j) = & (-1)^m 2^{-m} m! \sum_{k=0}^m \frac{(-1)^k 2^k}{k![(m-k)!]^2} \times \\ & \times \int_0^\infty \frac{V_c(q)}{2\pi} q^{2m-2k+1} e^{-q} J_0(q|z_j|) dq. \end{aligned} \quad (4.93)$$

Здесь  $J_0(q)$  — функция Бесселя. Последнее выражение можно также представить в виде ряда.

Наиболее адекватной величиной, позволяющей выявить различие между «твердым» и «жидким» состояниями в рассматриваемой системе, является парная корреляционная функция, т. е. вероятность нахождения электрона в точке  $z_1$  при условии нахождения второго электрона в точке  $z_2$ . Из соображений симметрии можно ожидать (по крайней мере, для достаточно малого фактора заполнения), что одна частица будет расположена в центре кластера, а остальные 6 частиц будут иметь максимум плотности распределения на расстоянии примерно  $a(\mu)$ , т. е. на первой координационной сфере. Состояние этих электронов существенно зависит от угла  $\theta$  между координатами частиц на первой координационной сфере. Определим парную корреляционную функцию следующим образом:

$$\begin{aligned} g_G(\theta) = & \langle \alpha | \Psi^+(z_1) \Psi^+(z_2) \Psi(z_2) \Psi(z_1) | \alpha \rangle; \\ |z_1| = |z_2| = a, \end{aligned} \quad (4.94)$$

где  $\theta = \arg(z_1) - \arg(z_2)$  варьируется в интервале  $(0, \pi)$ ;  $|G\rangle$  — основное состояние, полученное из точной диагонализации. В твердом состоянии, обладающемальным порядком, следует ожидать три хорошо определенные осцилляции  $g(\theta)$ , в то время как в жидкой фазе, имеющей только ближний порядок, эти колебания должны быть сильно подавлены. В любом случае резкое (скачкообразное) изменение корреляционной функции основного состояния  $g_G(\theta)$  в зависимости от фактора заполнения  $\mu$  может служить критерием для перехода «жидкость—твердое тело».

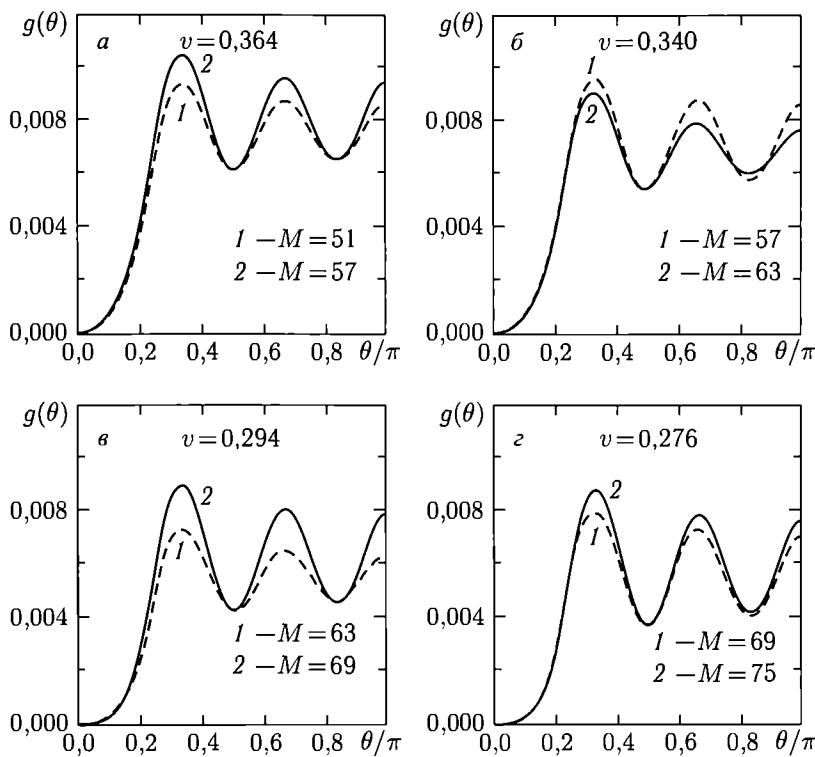


Рис. 4.17. Парная корреляционная функция  $g(\theta)$  для основного состояния в точках резкого изменения осцилляций, соответствующих изменениям углового момента  $51 \rightarrow 57; 57 \rightarrow 63; 63 \rightarrow 69; 69 \rightarrow 75$

На рис. 4.17 представлена корреляционная функция  $g(\theta)$ , рассчитанная для критического значения фактора заполнения  $\mu_M$ , для которого момент  $M_G$  резко меняется. При изменении момента  $M_G = 45 \rightarrow 51 \rightarrow 57$  в парной корреляционной функции скачкообразно увеличиваются амплитуды наблюдаемых осцилляций. Это свидетельствует об установлении в системе более строгого упорядочения, присущего твердому телу, хотя фактор заполнения еще слишком большой для ожидаемого WC-состояния в макроскопической системе.

На рис. 4.18 показана относительная амплитуда осцилляций последнего (третьего) пика как функция фактора заполнения для основного состояния. Видно, что в диапазоне  $0,294 < \mu < 0,34$  осцилляции подавлены, что свидетельствует о жидкости Лафлина, а вне этого диапазона реализуется кристалл Вигнера.

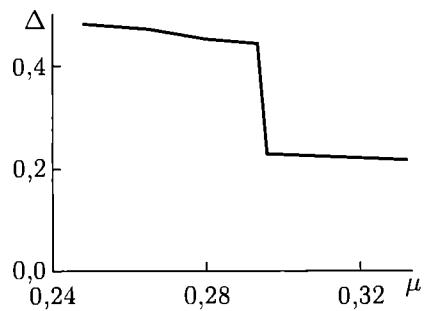


Рис. 4.18. Относительная амплитуда осцилляций парной корреляционной функции

Отметим также следующие важные факты. Нет сомнения в том, что точно при  $\mu = 1/3$  основное состояние хорошо описывается LL, поэтому следует ожидать, что угловой момент в основном состоянии будет равен  $M_G(a(\mu = 1/3)) = N(N - 1)/\mu = 63$ . Заранее этот факт в численную процедуру не был заложен. Результаты подтвердили, что угловой момент основного состояния действительно равен 63. Более того, обнаружилось, что  $M_G = 5N(n - 1) = 105$  при заполнении  $\mu = 0,198 \approx 1/5$ , как и должно быть в состоянии Лафлина. Также отметим, что разумность «среднеполевой» процедуры контроля плотности подтверждается тем, что при  $\mu < 1/2$  положение максимума плотности частиц  $\rho(R)$  совпадает с расстоянием до первой координационной сферы  $a(\mu)$ . Поэтому нет сомнения в адекватности подхода с физической точки зрения.

## Глава 5

### БОЗЕ-СТАТИСТИКА. МОДЕЛЬ БОЗЕ-ХАББАРДА

#### 5.1. 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:

$$\begin{aligned}\Phi_1 &= |0003\rangle; & \Phi_2 &= |0010\rangle; & \Phi_3 &= |0021\rangle; & \Phi_4 &= |0030\rangle; \\ \Phi_5 &= |0102\rangle; & \Phi_6 &= |0111\rangle; & \Phi_7 &= |0120\rangle; & \Phi_8 &= |0201\rangle; \\ \Phi_9 &= |0210\rangle; & \Phi_{10} &= |0300\rangle; & \Phi_{11} &= |1002\rangle; & \Phi_{12} &= |1011\rangle; \\ \Phi_{13} &= |1020\rangle; & \Phi_{14} &= |1101\rangle; & \Phi_{15} &= |1110\rangle; & \Phi_{16} &= |1200\rangle; \\ \Phi_{17} &= |2001\rangle; & \Phi_{18} &= |2010\rangle; & \Phi_{19} &= |2100\rangle; & \Phi_{20} &= |3000\rangle.\end{aligned}\quad (5.1)$$

Алгоритм формирования упорядоченного базиса для бозе-системы был описан ранее (см. гл. 4).

Размерность базиса бозе-системы существенно больше размерности системы с ферми-частицами при том же количестве частиц. Для бозе-системы размерность базиса равна

$$R = C_{N+m-1}^N = \frac{(N+m-1)!}{N!(m-1)!}, \quad (5.2)$$

где  $m$  — число узлов в системе,  $N$  — число частиц.

Для доказательства соотношения (5.2) 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. 5.1).



Рис. 5.1. 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

$$R_B = C_6^3 = \frac{6!}{3!3!} = 20; \quad R_F = C_4^3 = \frac{4!}{3!1!} = 4. \quad (5.3)$$

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. (3.66)):

$$\begin{aligned} a_i a_j^+ - a_j^+ a_i &= \delta_{ij}, \\ a_i^+ a_j^+ - a_j^+ a_i^+ &= 0, \\ a_i a_j - a_j a_i &= 0. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Правила действия операторов на узельные волновые функции следуют из соотношения

$$\langle 0 | (a_k)^n (a_k^+)^n | 0 \rangle = n!, \quad (5.5)$$

выведенного ранее (см. (3.67)), и из соответствующей нормировки волновой функции с  $n$  бозонами

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a_k^+)^n | 0 \rangle. \quad (5.6)$$

В отличие от ферми-статистики в данном случае порядок нумерации узлов не существенен, 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:

$$a^+ \Psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^+ (a^+)^n |0\rangle . \quad (5.7)$$

Получаем, таким образом, функцию с увеличенным на единицу количеством частиц, но с неправильной нормировкой. Восстановим ее:

$$\frac{1}{\sqrt{n!}} a^+ (a^+)^n |0\rangle = \frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} (a^+)^{n+1} |0\rangle = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}. \quad (5.8)$$

Из (5.7) и (5.8) получаем следующее правило:

$$a^+ \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}. \quad (5.9)$$

Рассмотрим теперь действие оператора уничтожения на бозонную функцию и учтем коммутационные соотношения:

$$\begin{aligned} a \Psi_n &= \frac{1}{\sqrt{n!}} a (a^+)^n |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+ a + 1) (a^+)^{n-1} |0\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( a^+ a (a^+)^{n-1} + (a^+)^{n-1} \right) |0\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( a^+ (a^+ a + 1) (a^+)^{n-2} + (a^+)^{n-1} \right) |0\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( (a^+)^2 a (a^+)^{n-2} + 2 (a^+)^{n-1} \right) |0\rangle = \dots = \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left( (a^+)^m a (a^+)^{n-m} + m (a^+)^{n-1} \right) |0\rangle = \dots = \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} n (a^+)^{n-1} |0\rangle . \end{aligned} \quad (5.10)$$

В последнем выражении в (5.10) выделяем функцию с уменьшенным на единицу числом частиц, правильно нормируем ее и находим

$$a \Psi_n = \sqrt{n} \Psi_{n-1}. \quad (5.11)$$

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 (3.18)–(3.19).

Несколько примеров применения правил (5.9) и (5.11):

$$\begin{aligned} a_4^+ |002000\rangle &= \sqrt{0+1} |002100\rangle, \\ a_3^+ |104010\rangle &= \sqrt{4+1} |105010\rangle = \sqrt{5} |105010\rangle, \\ a_2^+ |160010\rangle &= \sqrt{6} |150010\rangle, \quad a_3^+ |100000\rangle \equiv 0, \end{aligned} \quad (5.12)$$

т. е. при действии оператора уничтожения на функцию с нулевым заполнением получается тождественный нуль, а верхнего предела по заполнению нет; в силу коммутационных соотношений (5.4) 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:

$$a_i^+ a_i^- | \dots n_i \dots \rangle = n_i | \dots n_i \dots \rangle, \quad (5.13)$$

что сразу следует из (5.9) и (5.11).

## 5.2. Модель Бозе–Хаббарда

Для исследования систем с бозонными степенями свободы в приближении сильной связи была развита 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:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^+ a_j + h.c.) + \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j, \quad (5.14)$$

где  $a_i^+$  ( $a_i$ ) — 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;  $n_i = a_i^+ a_i$ ,  $0 \leq n_i \leq N$ ,  $N$  — число бозонов в системе.

Второе слагаемое в (5.14), 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. 5.2). 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.

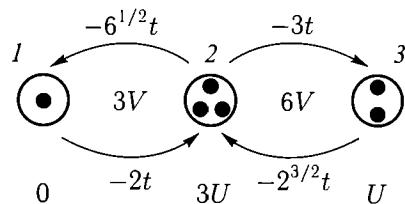


Рис. 5.2. Матричные элементы для гамильтониана (5.14) в случае системы из трех узлов и шести частиц

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:

$$e^{-i\varphi a_i^+ a_i} a_i e^{i\varphi a_i^+ a_i} = a_i e^{i\varphi}. \quad (5.15)$$

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 (5.14), 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 (5.14) 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.

$$n_i \leq N_{\max}, \quad (5.16)$$

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 диагонализовать гамильтонову матрицу на компьютере. В ряде случаев это приближение позволяет получить аналитические ответы, хотя *точного решения для бозонной модели Хаббарда (5.14) 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 (5.14) второе слагаемое пропадает. Такая модель называется *hard-core-моделью или бозонами с «жесткими сердцевинами»* (см., например, [16]):

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^+ a_j + h.c.) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j, \quad n_i \leq 1. \quad (5.17)$$

Фактически в модели (5.17) 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:

$$\begin{aligned} a_i a_j^+ - a_j^+ a_i &= 0, \quad i \neq j; \\ a_i^+ a_i + a_i a_i^+ &= 1. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Заметим, что узельный базис для этого случая полностью совпадает с базисом для случая бесспиновых фермионов (алгоритм формирования этого базиса был приведен в гл. 4), 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 (5.17) 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:

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= |0012\rangle, & \Phi_2 &= |0021\rangle, & \Phi_3 &= |0102\rangle, & \Phi_4 &= |0111\rangle, \\ \Phi_5 &= |0120\rangle, & \Phi_6 &= |0201\rangle, & \Phi_7 &= |0210\rangle, & \Phi_8 &= |1002\rangle, \\ \Phi_9 &= |1011\rangle, & \Phi_{10} &= |1020\rangle, & \Phi_{11} &= |1101\rangle, & \Phi_{12} &= |1110\rangle, \\ \Phi_{13} &= |1200\rangle, & \Phi_{14} &= |2001\rangle, & \Phi_{15} &= |2010\rangle, & \Phi_{16} &= |2100\rangle. \end{aligned} \quad (5.19)$$

При действии операторов на волновые функции следует учитывать это ограничение заполнения узлов, т. е.

$$a_i^+ | \dots n_{i-1} n_i n_{i+1} \dots \rangle \equiv 0 \quad \text{при } n_i = N_{\max}. \quad (5.20)$$

Дальнейшее ослабление ограничения чисел заполнения приведет в конце концов к *полной бозонной модели*, в которой отсутствует верхняя граница чисел заполнения.

### 5.3. Построение гамильтоновой матрицы

Рассчитаем матричные элементы от кинетической (первое слагаемое) и потенциальной (второе и третье слагаемые) энергии в бозонной модели (5.14). Рассмотрим сначала действие оператора из кинетической части:

$$\begin{aligned} a_i^+ a_j | \dots n_i \dots n_j \dots \rangle &= \\ &= \begin{cases} \sqrt{(n_i + 1)n_j} | \dots (n_i + 1) \dots (n_j - 1) \dots \rangle, & \text{если } n_i < N_{\max}, n_j > 0, \\ 0, & \text{если } n_i = N_{\max}, \\ 0, & \text{если } n_j = 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (5.21)$$

Таким образом, при действии оператора кинетической энергии получаем недиагональные матричные элементы

$$\langle \dots (n_i + 1) \dots (n_j - 1) \dots | a_i^+ a_j | \dots n_i \dots n_j \dots \rangle = \sqrt{(n_i + 1)n_j}. \quad (5.22)$$

Вклад в гамильтонову матрицу от потенциальной части (5.14) будет диагонален:

$$\begin{aligned} \left\langle \Phi_m \left| \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j \right| \Phi_p \right\rangle &= \\ &= \left( \frac{U}{2} \sum_i n_i^{(p)} (n_i^{(p)} - 1) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i^{(p)} n_j^{(p)} \right) \delta_{mp}. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Рассмотрим формирование гамильтоновой матрицы модели (5.14) на конкретном примере.

Пусть есть система из трех периодически замкнутых узлов и двух частиц, описываемая гамильтонианом (5.14) с параметрами  $t = -1$ ,  $U = 2,4$ ,  $V = 1,3$ :

$$H = \sum_{i=1}^3 (-a_i^+ a_{i+1} - a_i^+ a_{i-1} + 1,3n_i n_{i+1} + 1,3n_i n_{i-1} + 1,2(n_i - 1)n_i).$$

Узельный базис этой системы будет состоять из 6 функций:

$$\Phi_1 = |002\rangle, \quad \Phi_2 = |011\rangle, \quad \Phi_3 = |020\rangle, \quad \Phi_4 = |101\rangle, \quad \Phi_5 = |110\rangle, \quad \Phi_6 = |200\rangle.$$

Пользуясь (5.9) и (5.11), 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:

$$\Phi_1 = |011\rangle; \quad \Phi_2 = |101\rangle; \quad \Phi_3 = |110\rangle,$$

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.

#### 5.4. Аналитическое решение модели Бозе–Хаббарда без взаимодействия

В случае свободных бозе-частиц на решетке гамильтониан будет иметь вид

$$H = -t \sum_{\langle ik \rangle} (a_i^+ a_k + h.c.), \quad (5.24)$$

и можно, так же как в модели сильной связи (4.14), получить аналитический ответ и рассчитать спектр бозонов. Для этого следует перейти из узельного в импульсное представление:

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_k a_k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}; \quad a_j^+ = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_k a_k^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j}, \quad (5.25)$$

где  $N_a$  — число узлов решетки.

Такое преобразование не меняет бозе-статистики, так как

$$\begin{aligned} a_k a_{k'}^+ - a_{k'}^+ a_k &= \frac{1}{N_a} \sum_{i,j} (a_i a_j^+ - a_i^+ a_j) e^{i(k'R_j - kR_i)} = \\ &= \frac{1}{N_a} \sum_{i,j} \delta_{ij} e^{i(k'R_j - kR_i)} = \frac{1}{N_a} \sum_i e^{i(k' - k)R_i} = \delta_{kk'}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

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 (5.26) в (5.24) получаем гамильтониан в диагональном виде:

$$H = \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k; \quad \varepsilon_k = \sum_j t_j e^{-ikR_j}; \quad t_j \equiv -t. \quad (5.27)$$

Выражение для спектра системы получилось в точности совпадающим с выражением для спектра свободных ферми-частиц на решетке (4.16). Но тогда справедливо соотношение

$$\varepsilon_k = -2t (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \quad (5.28)$$

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:

$$\varepsilon_k \approx -2t \left( 1 - \frac{k^2 a^2}{2} \right), \quad (5.29)$$

и эффективная масса частиц

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2ta^2}. \quad (5.30)$$

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

$$E_{(0)} = -2tN, \quad (5.31)$$

где  $N$  — полное число частиц.

Еще раз отметим, что результат (5.28) 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 (5.9) и (5.11).

Рассмотрим в качестве примера периодически замкнутую систему из трех узлов и трех частиц, описываемую гамильтонианом (5.24). Одночастичный спектр системы

$$\varepsilon_k = -2t \cos ka \quad (5.32)$$

в этом случае имеет вид:

$$\varepsilon_1 = -2t \cos(0) = -2t; \quad \varepsilon_{2,3} = -2t \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) = t. \quad (5.33)$$

В основном состоянии все частицы занимают нижний уровень (рис. 5.3), состояние является невырожденным, и его энергия

$$E_{(0)} = 3\varepsilon_1 = -6t = -2Nt. \quad (5.34)$$

Следующее, первое возбужденное состояние будет двукратно вырождено по импульсу (рис. 5.4) и его энергия

$$E_{(1)} = 2\varepsilon_1 + \varepsilon_{2,3} = -3t. \quad (5.35)$$

Далее несложно рассчитать весь спектр с учетом вырождения.

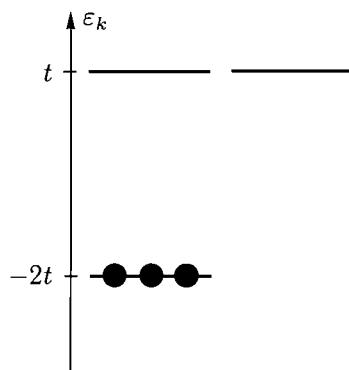


Рис. 5.3. Основное состояние системы из трех свободных бозе-частиц на решетке из трех узлов

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:

$$\begin{aligned} N_{\max} = 4 &\Rightarrow E_0 = -8t; \\ N_{\max} = 3 &\Rightarrow E_0 = -7,969t; \\ N_{\max} = 2 &\Rightarrow E_0 = -7,551t; \\ N_{\max} = 1 &\Rightarrow E_0 = -3,464t. \end{aligned} \tag{5.36}$$

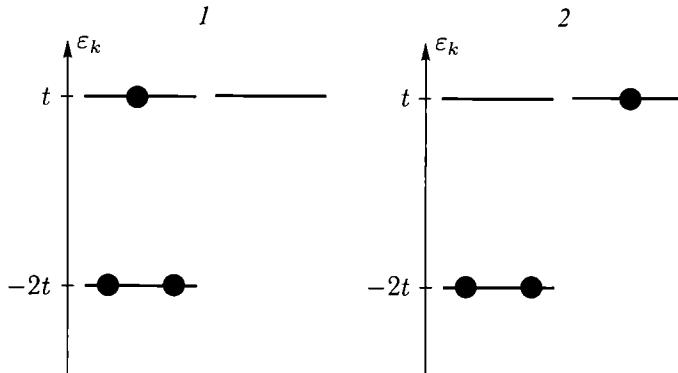


Рис. 5.4. Первое возбужденное состояние системы из трех свободных бозе-частиц на решетке из трех узлов двукратно вырождено

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 оп-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 других в бозонной модели Хаббарда проводится точно так же, как и для фермионных моделей, отличие лишь в правилах действия операторов рождения и уничтожения (5.9), (5.11).

## 5.5. Инварианты в модели Бозе–Хаббарда

Все обсуждаемые выше примеры системы 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 (5.14) коммутирует с оператором полного числа частиц,

$$N = \sum_i a_i^+ a_i; \quad [H, N] = 0. \tag{5.37}$$

Докажем соотношение (5.37). Рассмотрим коммутацию оператора числа частиц со слагаемым в кинетической части гамильтониана. Имеем:

$$\begin{aligned}
 [H_{kin}, N] &= \left[ \sum_{i,j} t_{ij} a_i^+ a_j, N \right] = \sum_{i,j,k} [t_{ij} a_i^+ a_j, a_k^+ a_k] = \\
 &= \sum_{i,j,k} t_{ij} (a_i^+ a_j a_k^+ a_k - a_k^+ a_k a_i^+ a_j) = \\
 &= \sum_{i,j,k} t_{ij} (a_i^+ (\delta_{jk} + a_k^+ a_j) a_k - a_k^+ a_k a_i^+ a_j) = \\
 &= \sum_{i,j,k} t_{ij} (\delta_{jk} a_i^+ a_k + a_i^+ a_k^+ a_j a_k - a_k^+ a_k a_i^+ a_j) = \\
 &= \sum_{i,j,k} t_{ij} (\delta_{jk} a_i^+ a_k + a_k^+ a_i^+ a_k a_j - a_k^+ a_k a_i^+ a_j) = \\
 &= \sum_{i,j,k} t_{ij} (\delta_{jk} a_i^+ a_k + a_k^+ (-\delta_{ik} + a_k a_i^+) a_j - a_k^+ a_k a_i^+ a_j) = \\
 &= \sum_{i,j,k} t_{ij} (\delta_{jk} a_i^+ a_k - \delta_{ik} a_k^+ a_j) \equiv 0.
 \end{aligned} \tag{5.38}$$

Коммутативность оператора числа частиц с потенциальной частью гамильтониана (5.14) 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:

$$\sum_i [n_i, (n_j)^k] = 0. \tag{5.39}$$

Таким образом, аналогично (4.63), если рассмотреть для модели (5.14) узельный базис с произвольным числом частиц, то гамильтонова матрица может быть представлена в блочном виде:

$$H = \begin{pmatrix} \boxed{N=1} & 0 & 0 \\ 0 & \boxed{N=2} & 0 \\ 0 & 0 & \boxed{\dots} \end{pmatrix}. \tag{5.40}$$

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

$$\sum_i (a_i + a_i^+), \tag{5.41}$$

и число частиц в системе перестанет быть инвариантом модели. Действительно, введение в оператор энергии члена вида (5.41) 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.

## 5.6. 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. 8).

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 с размерами  $L_x \times L_y$ , либо трехмерная система с размерами  $L_x \times L_y \times L_z$ .

Предположим, что в систему введен внешний магнитный поток, описываемый векторным потенциалом  $\mathbf{A}(x, y, z)$ , и по системе циркулирует ток. Пусть ток и векторный потенциал направлены вдоль оси  $x$ , т. е.  $\mathbf{A}(x, y, z) = -By\mathbf{e}_x$ ,  $\mathbf{B} = Be_z$  — магнитное поле, параллельное оси  $z$ . В такой геометрии автоматически справедлива калибровка Лоренца:  $\text{div}\mathbf{A} = 0$ .

Рассмотрим многочастичную задачу Шредингера, учитывая векторный потенциал. В общем случае в координатном представлении имеем

$$\frac{1}{2m} \sum_j \left[ \left( \frac{\hbar}{i} \nabla_j - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_j) \right)^2 + V(\mathbf{r}_j) \right] \Psi + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \Psi = E \Psi. \quad (5.42)$$

Здесь  $V$  — внешнее поле,  $U$  — межчастичное взаимодействие, которые далее полагаем зависящими только от модулей расстояний,  $\Psi$  — многочастичная волновая функция. Границные условия выбираем периодическими по каждой из координат:

$$\begin{aligned} \Psi(\dots, x_j + L_x, \dots) &\equiv \Psi(\dots, x_j, \dots), \\ \Psi(\dots, y_j + L_y, \dots) &\equiv \Psi(\dots, y_j, \dots). \end{aligned} \quad (5.43)$$

Векторный потенциал можно представить как градиент скалярной величины  $\chi$  — фазы и связать его с магнитным потоком  $\Phi$ , пронизывающим систему:

$$\mathbf{A} = \frac{\hbar c}{e} \nabla \chi; \quad \oint \mathbf{A} d\mathbf{l} = \iint \mathbf{B} d\mathbf{S} = \frac{\hbar c}{e} \Delta \chi = \Phi. \quad (5.44)$$

Полный магнитный поток пропорционален разности фаз  $\Delta \chi$  при обходе системы по контуру.

Сделаем следующую замену:

$$\Psi = \Psi' e^{i\chi}, \quad (5.45)$$

и перепишем уравнение Шредингера и граничные условия:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \sum_j \left[ \left( \frac{\hbar}{i} \nabla_j \right)^2 + V(\mathbf{r}_j) \right] \Psi' + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \Psi' &= E \Psi'; \\ \Psi'(\dots, x_j + L_x, \dots) &= \Psi'(\dots, x_j + L_x, \dots) e^{-i\Delta\chi}; \\ \Psi'(\dots, y_j + L_y, \dots) &= \Psi'(\dots, y_j + L_y, \dots). \end{aligned} \quad (5.46)$$

Следовательно, таким градиентным преобразованием волновой функции удается убрать векторный потенциал из уравнения Шредингера, но при этом появляется фазовый множитель в граничных условиях [18].

Из (5.42) и (5.45)–(5.46) следует, что для ввода в систему поля и тока достаточно на границе системы ввести фазовый множитель

$$e^{i\Delta\chi} = e^{i\frac{\hbar c}{e}\Phi} = e^{\frac{2\pi i\Phi}{\Phi_0}}; \quad \Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{e}; \quad (5.47)$$

где  $\Phi_0$  — квант потока. Удобно магнитный поток отсчитывать в единицах этой величины. Таким образом, при вводе магнитного потока методом изменения граничных условий (5.47) 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  $\Psi$ , квантово-механическое выражение для плотности тока, переносимого частицами системы массы  $m$  и заряда  $e$ , имеет следующий вид:

$$\mathbf{j} = \frac{e}{2m} (\Psi^* P \Psi + h.c.) = \frac{e\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{e^2}{mc} |\Psi|^2 \mathbf{A}. \quad (5.48)$$

Здесь  $P = \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}$  — оператор обобщенного импульса. Первая часть выражения (5.48) для тока — парамагнитный вклад, приводящий к увеличению 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:

$$\mathbf{j} \cong -\frac{e^2}{mc} |\Psi|^2 \mathbf{A} = -\frac{e\hbar}{m} \nabla \chi |\Psi|^2. \quad (5.49)$$

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  $\Phi$  либо на границе, либо распределить его вдоль заданного контура.

Рассмотрим теперь модель Бозе–Хаббарда (5.14) 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:

$$t_{ij}(A) = \int \Psi_i^* \frac{\left(p - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2m} \Psi_j d^3r \Rightarrow \int \left(\Psi'_i\right)^* \frac{p^2}{2m} \Psi'_j d^3r = \\ = \int \Psi_i^* \frac{p^2}{2m} \Psi_j e^{-i\chi(r_i) + i\chi(r_j)} d^3r = t_{ij} e^{i(\chi_j - \chi_i)}. \quad (5.50)$$

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:

$$a_i^+ a_j \Rightarrow a_i^+ a_j \exp \left( \frac{2\pi i}{\Phi_0} \int_i^j \mathbf{A} dl \right). \quad (5.51)$$

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 (5.51) 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:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^+ a_j \exp \left( \frac{2\pi i}{\Phi_0} \int_i^j \mathbf{A} dl \right). \quad (5.52)$$

Если положить, что фаза монотонно наращивается при движении частицы вдоль оси  $x$ , т. е. векторный потенциал  $\mathbf{A} = \Phi \frac{\mathbf{e}_x}{L_x}$  постоянен и, следовательно, интеграл в фазовом множителе в (5.52) одинаков для ближайших соседей, то для случая кубической симметрии или тороидальной геометрии имеем

$$H = -t \sum_i \left( a_i^+ a_{i+\mathbf{e}_x} \exp \left( \frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x} \right) + a_{i+\mathbf{e}_x}^+ a_i \exp \left( -\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x} \right) \right) - \\ - t \sum_i \left( a_i^+ a_{i+\mathbf{e}_y} + a_{i+\mathbf{e}_y}^+ a_i \right) - t \sum_i \left( a_i^+ a_{i+\mathbf{e}_z} + a_{i+\mathbf{e}_z}^+ a_i \right) + \\ + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j. \quad (5.53)$$

После формирования гамильтоновой матрицы получаем задачу на собственные значения эрмитовой матрицы. Недиагональные 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  $\Phi$ .

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

$$\begin{aligned} a_{L_x, y, z}^+ a_{1, y, z} &\Rightarrow a_{L_x, y, z}^+ a_{1, y, z} e^{\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0}}, \\ a_{1, y, z}^+ a_{L_x, y, z} &\Rightarrow a_{1, y, z}^+ a_{L_x, y, z} e^{-\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0}}. \end{aligned} \quad (5.54)$$

Таким образом, всю фазу можно учитывать только на границе, перпендикулярной оси  $x$ , и результаты расчета от этого не изменятся. В частном случае, если  $\Phi = \Phi_0/2$ , 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

$$\begin{aligned} a_{L_x, y, z}^+ a_{1, y, z} &\Rightarrow -a_{L_x, y, z}^+ a_{1, y, z}, \\ a_{1, y, z}^+ a_{L_x, y, z} &\Rightarrow -a_{1, y, z}^+ a_{L_x, y, z}. \end{aligned} \quad (5.55)$$

Оператор тока в узельном представлении имеет вид [21]:

$$j_x = -\frac{\partial H}{\partial A_x} = \frac{ite}{\hbar c} \sum_i \left( a_i^+ a_{i+\mathbf{e}_x} \exp\left(\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x}\right) - a_{i+\mathbf{e}_x}^+ a_i \exp\left(-\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x}\right) \right), \quad (5.56)$$

для малых  $\Phi$  получаем

$$j_x|_{\Phi>0} = \frac{ite}{\hbar c} \left( \sum_i (a_i^+ a_{i+\mathbf{e}_x} - a_{i+\mathbf{e}_x}^+ a_i) + \frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x} \sum_i (a_i^+ a_{i+\mathbf{e}_x} + a_{i+\mathbf{e}_x}^+ a_i) \right). \quad (5.57)$$

В отсутствие фазы ток равен нулю (первое слагаемое в (5.57)) 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:

$$\begin{aligned} H = -t \sum_i &\left( a_i^+ a_{i+\mathbf{e}_x} \exp\left(\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x}\right) + a_{i+\mathbf{e}_x}^+ a_i \exp\left(-\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x}\right) \right) - \\ - t \sum_i &\left( a_i^+ a_{i+\mathbf{e}_y} + a_{i+\mathbf{e}_y}^+ a_i \right) - t \sum_i \left( a_i^+ a_{i+\mathbf{e}_z} + a_{i+\mathbf{e}_z}^+ a_i \right), \quad \sum_i \equiv \sum_{xyz}. \end{aligned} \quad (5.58)$$

Применим фурье-преобразование в следующем виде:

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y L_z}} \sum_{k_x, k_y, k_z} a_k e^{i(k_x x_j + k_y y_j + k_z z_j)}. \quad (5.59)$$

Подставив (5.59) в выражение для гамильтониана (5.58), получим:

$$H = -t \frac{1}{L_x L_y L_z} \sum_{\substack{k_x, k_y, k_z \\ k'_x, k'_y, k'_z \\ x_i, y_i, z_i}} a_{k'}^+ a_k (T_x^+ + T_x^- + T_y^+ + T_y^- + T_z^+ + T_z^-);$$

$$\begin{aligned} T_x^+ &= \exp \left( i(k_x(x_i + e_x) - k'_x x_i + (k_y - k'_y)y_i + (k_z - k'_z)z_i) + \frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x} \right); \\ T_x^- &= \exp \left( i(k_x x_i - k'_x(x_i + e_x) + (k_y - k'_y)y_i + (k_z - k'_z)z_i) - \frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x} \right); \\ T_y^+ &= \exp (i((k_x - k'_x)x_i + k_y(y_i + e_y) - k'_y y_i + (k_z - k'_z)z_i)); \\ T_y^- &= \exp (i((k_x - k'_x)x_i + k_y y_i - k'_y(y_i + e_y) + (k_z - k'_z)z_i)); \\ T_z^+ &= \exp (i((k_x - k'_x)x_i + (k_y - k'_y)y_i + k_z(z_i + e_z) - k'_z z_i)); \\ T_z^- &= \exp (i((k_x - k'_x)x_i + (k_y - k'_y)y_i + k_z z_i - k'_z(z_i + e_z))). \end{aligned} \quad (5.60)$$

Учитывая, что

$$\delta_{k_x k'_x} = \frac{1}{L_x} \sum_x e^{i(k_x - k'_x)x}, \quad (5.61)$$

получаем:

$$\begin{aligned} H = -t \sum_{k_x, k_y, k_z} a_{k_x k_y k_z}^+ a_{k_x k_y k_z} &\left( e^{i(k_x e_x + \frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x})} + e^{-i(k_x e_x + \frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L_x})} \right) - \\ &- t \sum_{k_x, k_y, k_z} a_{k_x k_y k_z}^+ a_{k_x k_y k_z} (e^{ik_y e_y} + e^{-ik_y e_y}) - \\ &- t \sum_{k_x, k_y, k_z} a_{k_x k_y k_z}^+ a_{k_x k_y k_z} (e^{ik_z e_z} + e^{-ik_z e_z}). \end{aligned} \quad (5.62)$$

Отсюда спектр системы

$$\varepsilon(k, \Phi) = -2t \left( \cos \left( k_x e_x + \frac{2\pi \Phi}{\Phi_0 L_x} \right) + \cos(k_y e_y) + \cos(k_z e_z) \right). \quad (5.63)$$

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. 5.5).

Перебирая одночастичные состояния, находим спектр всей системы.

Заметим, что все фазовые зависимости спектра, рассмотренные выше, справедливы и для ферми-систем [21].

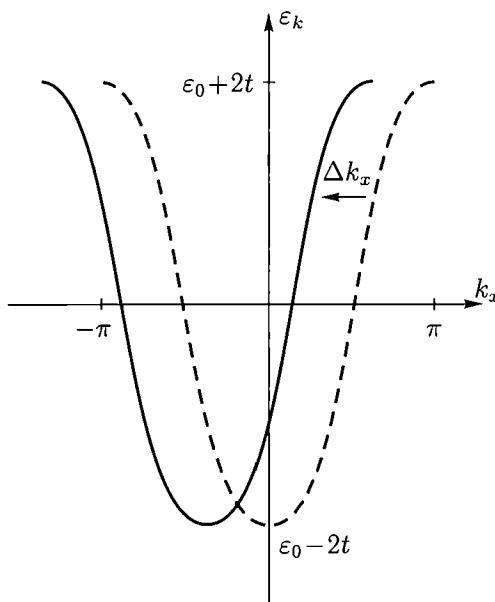


Рис. 5.5. Сдвиг спектра системы при учете градиентной фазы вдоль оси  $x$ ,  $\Delta k = 2\pi\Phi/\Phi_0 L_x$

Полная энергия системы, рассчитанная с учетом фазы, удовлетворяет условию периодичности по фазе:

$$E_0(\Phi + \Phi_0) = E_0(\Phi). \quad (5.64)$$

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. 5.6):

$$k_0 = 0, \quad k_{\pm 1} = \pm \frac{\pi}{3}, \quad k_{\pm 2} = \pm \frac{2\pi}{3}, \quad k_3 = \pi. \quad (5.65)$$

В случае конечного значения  $\Phi$  все импульсы получают сдвиг, равный  $\pi\Phi/3\Phi_0$ . Так как в основном состоянии все частицы имеют нулевой импульс, то

$$E_0 = -6t \cos\left(\frac{\pi}{3} \frac{\Phi}{\Phi_0}\right). \quad (5.66)$$

Выражение (5.66) 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. 5.7), все частицы перейдут на этот уровень, и энергия основного состояния станет равной

$$E_0 = -6t \cos\left(\frac{\pi}{3} \left(1 - \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\right). \quad (5.67)$$

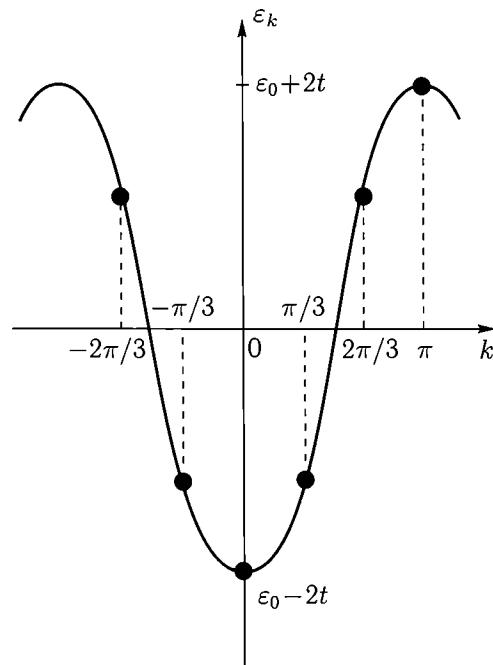


Рис. 5.6. Одночастичные состояния для свободных частиц на цепочке из шести узлов

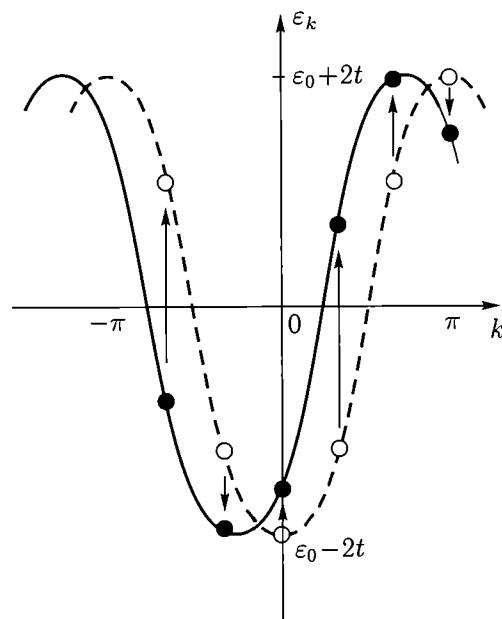


Рис. 5.7. Сдвиг энергетических уровней при градиентном преобразовании

Далее при достижении значения  $\Phi = \Phi_0$  ситуация повторится. Получаем, таким образом, периодическую зависимость  $E_0(\Phi)$  с периодом  $\Phi_0$  (рис. 5.8). Ток в системе также будет периодичен:

$$J = -\frac{\partial E}{\partial \Phi} = \begin{cases} -\frac{2\pi t}{\Phi_0} \sin\left(\frac{\pi\Phi}{3\Phi_0}\right), & 0 \leq \Phi \leq \frac{\Phi_0}{2}; \\ \frac{2\pi t}{\Phi_0} \sin\left(\frac{\pi}{3}\left(\frac{\Phi}{\Phi_0} - 1\right)\right), & \frac{\Phi_0}{2} < \Phi \leq \Phi_0. \end{cases} \quad (5.68)$$

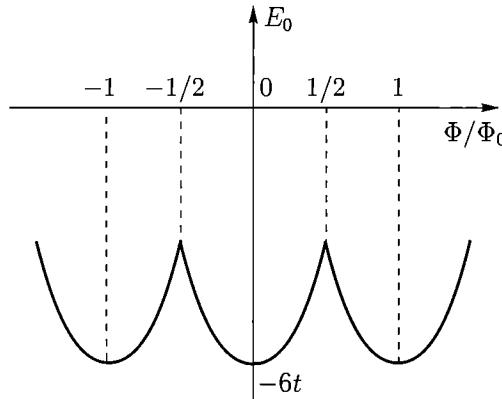


Рис. 5.8. Зависимость энергии основного состояния от фазы (5.66) – (5.67)

Подобные зависимости имеют место и для других физических величин в различных невзаимодействующих системах, в том числе и с фермистатистикой.

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  $0 \leq \Phi/\Phi_0 \leq 1/2$  заполнены только состояния с нулевым импульсом, поэтому

$$\begin{aligned} E_0(\Phi) &= \sum_k \varepsilon_k \langle n_k \rangle_{|k=k_0} = -2tN \cos\left(\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0 L_x}\right)_{|L_x \rightarrow \infty} = \\ &= -2tN \left(1 - 2\left(\frac{\pi\Phi}{\Phi_0 L_x}\right)^2\right) = E_0(0) + 4t\pi^2 N \frac{(\Phi/\Phi_0)^2}{L_x^2}; \quad (5.69) \end{aligned}$$

— при  $1/2 < \Phi/\Phi_0 \leq 1$  заполнены только состояния с импульсом  $k = k_{-1}$ , поэтому

$$\begin{aligned} E_0(\Phi) &= \sum_k \varepsilon_k \langle n_k \rangle_{|k=k_{-1}} = -2tN \cos\left(\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0 L_x} - \frac{2\pi}{L_x}\right)_{|L_x \rightarrow \infty} = \\ &= -2tN \left(1 - 2\frac{\pi}{L_x} \left(1 - \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2\right) = E_0(0) + 4t\pi^2 N \frac{(1-\Phi/\Phi_0)^2}{L_x^2}. \quad (5.70) \end{aligned}$$

Последнее слагаемое в (5.69) и (5.70) — 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 (5.46) и (5.47) следует, что при сдвиге разности фаз  $\Delta\chi$  на  $2\pi$  волновая функция не меняется, т. е. любые решения уравнения Шредингера и любые квантово-механические средние должны быть периодическими функциями  $\Phi$  с периодом  $\Phi_0$ .

Далее энергия и термодинамические функции системы являются четными функциями  $\Phi$ . Это следует из (5.46), так как замена  $\Phi \rightarrow -\Phi$  эквивалентна изменению направления оси  $x$ . Таким образом, вид любой термодинамической функции, в частности логарифма статистической суммы

$$Z = \sum_n e^{-E_n/T} \quad (5.71)$$

как функции  $\Phi$ , качественно будет такой, как показано на рис. 5.9 (заметим, что зависимость, показанная на рис. 5.9, согласуется с точным решением (5.67) в пределе  $T \rightarrow 0$ , когда  $F = -T \ln Z \rightarrow E$ ).

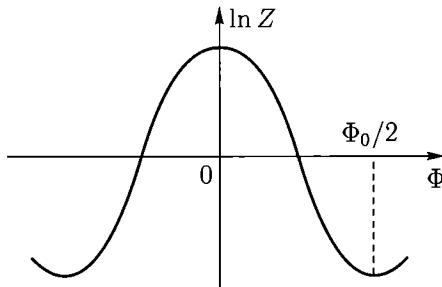


Рис. 5.9. Качественная зависимость логарифма статистической суммы от фазы

Более того, можно показать, что в идеальной, без диссиляции энергии, макроскопической системе реализуются только те значения магнитного потока, которые кратны кванту  $\Phi_0$ , т. е. имеет место *квантование магнитного потока* [18]:

$$\Phi = n\Phi_0, \quad n \text{ — целое.} \quad (5.72)$$

Действительно, в идеальной системе в равновесии и в отсутствие внешних токов парамагнитная часть (5.48) 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.

$$J = -\frac{\partial F}{\partial \Phi} = \frac{T \partial \ln Z}{\partial \Phi}. \quad (5.73)$$

Отсюда следует, что в термодинамическом пределе в равновесии реализуются только экстремальные значения  $\Phi$ , которые соответствуют условию

$$\frac{\partial F}{\partial \Phi} = 0. \quad (5.74)$$

Из рис. 5.9 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  $\chi_M$ :

$$\chi_M = \frac{\partial M}{\partial \Phi} = -\frac{\partial^2 F}{\partial \Phi^2} = \frac{T}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \Phi^2} < 0, \quad (5.75)$$

в (5.75) учтено, что  $\frac{\partial Z}{\partial \Phi} = 0$ .

Полученное условие (5.75) означает, что среди всех экстремальных значений  $\Phi$  только максимумы реализуются в зависимостях термодинамических величин, т. е. справедливо условие (5.71) квантования магнитного потока.

Отметим, что такое же квантование наблюдается при *эффекте Ааронова–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  $\Phi_0$  в два раза меньше, так как заряд пары электронов, переносящей сверхпроводящий ток, *кулеровской пары* в два раза больше:  $2e$  [20].

На рис. 5.10 показаны результаты численного моделирования методом точной диагонализации редуцированной модели Бозе–Хаббарда (5.14) [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.

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  $a_1^+ a_{N_a}$ .

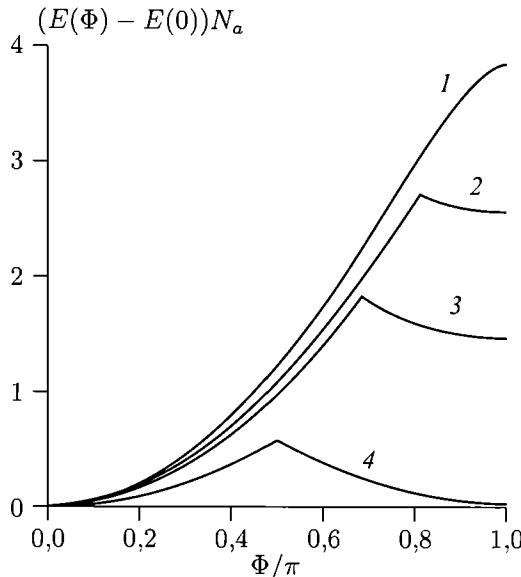


Рис. 5.10. Зависимость энергии основного состояния как функции фазы.

Точная диагонализация, число узлов  $N_a = 12$ .

$$1 - \frac{U}{t} = -5,5; 2 - \frac{U}{t} = -6,0; 3 - \frac{U}{t} = -6,5; 4 - \frac{U}{t} = -10,0$$

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  $\pi$  (при этом  $\Phi = \Phi_0/2$ ), если учесть фазу через границу явным множителем вида

$$a_{N_a}^+ a_1 \Rightarrow a_{N_a}^+ a_1 e^{\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0}}, \quad (5.76)$$

то при прохождении границы каждый раз будет меняться знак матричного элемента. Замена (5.76) 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  $\pi$ , 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  $\pi$ .

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 (апуон) и сцеплены с дробным квантом магнитного потока, значение которого и определяет симметрию волновой функции (впервые такое описание предложил Вильчек [23]).

# Глава 6

## 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 — наномагниты 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 удается. 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.

### 6.1. Спиновые операторы и узельный базис

Причиной наличия магнитных степеней свободы у различных веществ являются некомпенсированные спины либо электронов на верхних орбиталах, либо ядер атомов. В первом случае характерный масштаб магнитного момента электрона — магнетон Бора:

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc}. \quad (6.1)$$

В единицах СГСМ  $\mu_0 \sim 10^{-20}$ . Во втором случае магнитный момент равен ядерному магнетрону, который примерно в 2000 раз меньше:

$$\mu_{\text{я}} = \frac{c\hbar}{2M_p c}, \quad (6.2)$$

где  $M_p$  — масса протона.

С точностью до гиromагнитного отношения квантовый оператор спина  $S$  связан с соответствующим собственным магнитным моментом элементарной частицы:

$$\mu = \mu_0 S \quad \text{или} \quad \mu = \mu_s S. \quad (6.3)$$

При описании орбитального или другого движения оператор спина связан следующим образом с механическим моментом (моментом импульса):

$$M = \hbar S; \quad M = [r, p]. \quad (6.4)$$

Далее под «оператором спина» будет пониматься необязательно спин, а также операторы механического или орбитального момента.

Обсудим далее некоторые свойства оператора спина.

Оператор спина  $S = \{S^X, S^Y, S^Z\}$  состоит из трех компонент-проекций. 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:

$$M = [r, p] = i(yp_z - zp_y) + j(zp_x - xp_z) + k(xp_y - yp_x). \quad (6.5)$$

Из (6.5) и коммутационных соотношений для компонент операторов импульса и координаты

$$[p_\alpha, p_\beta] = -i\hbar\delta_{\alpha\beta}; \quad \alpha, \beta = x, y, z, \quad (6.6)$$

непосредственно следуют коммутационные соотношения для операторов спина. Для компонент оператора спина, относящихся к определенным узлам решетки  $j, j'$ , они выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} S_j^X S_{j'}^Y - S_{j'}^Y S_j^X &= i\delta_{jj'} S_j^Z, \\ S_j^Z S_{j'}^X - S_{j'}^X S_j^Z &= i\delta_{jj'} S_j^Y, \\ S_j^Y S_{j'}^Z - S_{j'}^Z S_j^Y &= i\delta_{jj'} S_j^X. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Заметим, что два последних соотношения коммутации можно получить из первого циклической перестановкой компонент спина. Для совпадающих индексов  $j = j'$  (6.7) можно записать в краткой форме:

$$[S^\alpha, S^\beta] = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S^\gamma; \quad \alpha, \beta, \gamma = x, y, z, \quad (6.8)$$

где  $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$  — единичный антисимметричный тензор третьего ранга.

Воспользуемся следствиями из коммутационных соотношений для вывода собственных значений оператора спина, формирования узельного базиса системы и конкретных правил действия операторов на базисные волновые функции.

Из (6.8) 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):

$$[S^\alpha, S^2] = [S^\alpha, S^X S^X + S^Y S^Y + S^Z S^Z] = 0. \quad (6.9)$$

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:

$$S^2 \Psi_{\gamma\mu} = \gamma \Psi_{\gamma\mu}; \quad S^\alpha \Psi_{\gamma\mu} = \mu \Psi_{\gamma\mu}. \quad (6.10)$$

Здесь  $\gamma, \mu$  — пока неизвестные собственные числа операторов  $S^2$  и  $S^\alpha$  соответственно.

Выделим одно из направлений, например направление  $z$ , и решим задачу (6.10) на собственные значения для пары операторов  $S^2$  и  $S^Z$ .

Введем следующие вспомогательные операторы:

$$S^+ = S^X + iS^Y; \quad S^- = S^X - iS^Y. \quad (6.11)$$

Пользуясь (6.7), несложно получить коммутационные соотношения для этих операторов:

$$\begin{aligned} [S_i^+, S_j^-] &= 2S_i^Z \delta_{ij}, \\ [S_i^Z, S_j^+] &= S_i^+ \delta_{ij}, \\ [S_i^Z, S_j^-] &= -S_i^- \delta_{ij}. \end{aligned}$$

Как будет видно из дальнейшего, тройка операторов  $S^Z, S^+, S^-$  с соответствующими коммутационными соотношениями более удобна для описания спиновых моделей, чем набор операторов  $S^X, S^Y, S^Z$  с коммутационными соотношениями (6.7).

Подействуем этими операторами на собственную волновую функцию  $\Psi_{\gamma\mu}$ :

$$\tilde{\Psi}_{\gamma\mu} = S^\pm \Psi_{\gamma\mu}. \quad (6.12)$$

Узнаем, каковы свойства у получившейся новой функции  $\tilde{\Psi}_{\gamma\mu}$ . Для этого подействуем на нее оператором  $S^Z$ :

$$\begin{aligned} S^Z S^\pm \Psi_{\gamma\mu} &= S^Z (S^X \pm iS^Y) \Psi_{\gamma\mu} = (S^X S^Z + iS^Y \pm i(S^Y S^Z - iS^X)) \Psi_{\gamma\mu} = \\ &= (S^X \pm iS^Y) (S^Z \pm 1) \Psi_{\gamma\mu} \equiv S^\pm (\mu \pm 1) \Psi_{\gamma\mu}. \end{aligned} \quad (6.13)$$

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  $S^Z$ :

$$S^+ \Psi_{\gamma,\mu-1} = A_\mu \Psi_{\gamma\mu}, \quad S^- \Psi_{\gamma\mu} = B_\mu \Psi_{\gamma,\mu-1}. \quad (6.14)$$

Здесь  $A, B$  — нормировочные множители. Из (6.14) видно, что оператор  $S^+$  повышает, а оператор  $S^-$  понижает на единицу собственное число  $\mu$  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

$$A_\mu^* = (S^+ \Psi_{\gamma,\mu-1}, \Psi_{\gamma\mu}) = (\Psi_{\gamma,\mu-1}, S^- \Psi_{\gamma\mu}) = B_\mu. \quad (6.15)$$

Таким образом, нормировочные множители  $A$  и  $B$  могут отличаться друг от друга только фазовым множителем вида  $e^{i\theta}$ , где  $\theta$  — действительное, и подбором  $\theta$  можно добиться, чтобы нормировочные множители в (6.14) для обоих операторов совпадали и были действительными:

$$S^+ \Psi_{\gamma,\mu-1} = A_\mu \Psi_{\gamma\mu}, \quad S^- \Psi_{\gamma\mu} = A_\mu \Psi_{\gamma,\mu-1}. \quad (6.16)$$

Для собственных чисел оператора квадрата спина имеем

$$\begin{aligned} \gamma &= \left( \Psi_{\gamma\mu}, \left( (S^X)^2 + (S^Y)^2 + (S^Z)^2 \right) \Psi_{\gamma\mu} \right) = \\ &= \mu^2 + \left( \Psi_{\gamma\mu}, (S^X)^2 \Psi_{\gamma\mu} \right) + \left( \Psi_{\gamma\mu}, (S^Y)^2 \Psi_{\gamma\mu} \right). \end{aligned} \quad (6.17)$$

Два последних слагаемых в (6.17) выпишем отдельно и убедимся, что они неотрицательны:

$$\begin{aligned} \left( \Psi_{\gamma\mu}, (S^X)^2 \Psi_{\gamma\mu} \right) &= (S^X \Psi_{\gamma\mu}, S^X \Psi_{\gamma\mu}) \geq 0, \\ \left( \Psi_{\gamma\mu}, (S^Y)^2 \Psi_{\gamma\mu} \right) &= (S^Y \Psi_{\gamma\mu}, S^Y \Psi_{\gamma\mu}) \geq 0, \end{aligned} \quad (6.18)$$

так как норма любой функции неотрицательна. Отсюда следует, что

$$\gamma \geq \mu^2, \quad (6.19)$$

т. е. при каком-то определенном значении квадрата спина  $\gamma$  значения проекции спина на ось  $z$  ограничены как сверху, так и снизу. Положим  $\mu_{\min}$  и  $\mu_{\max}$  — наименьшее и наибольшее собственные значения. Тогда очевидны соотношения:

$$S^- \Psi_{\gamma\mu_{\min}} = 0; \quad S^+ \Psi_{\gamma\mu_{\max}} = 0. \quad (6.20)$$

Из (6.7) и (6.11) имеем:

$$\begin{aligned} 0 &= S^+ S^- \Psi_{\gamma\mu_{\min}} = \left( S^2 - (S^Z)^2 + S^Z \right) \Psi_{\gamma\mu_{\min}} = \\ &= (\gamma - \mu_{\min}^2 + \mu_{\min}) \Psi_{\gamma\mu_{\min}}, \\ 0 &= S^- S^+ \Psi_{\gamma\mu_{\max}} = \left( S^2 - (S^Z)^2 - S^Z \right) \Psi_{\gamma\mu_{\max}} = \\ &= (\gamma - \mu_{\max}^2 - \mu_{\max}) \Psi_{\gamma\mu_{\max}}. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Отсюда

$$\begin{cases} \gamma - \mu_{\min}^2 + \mu_{\min} = 0, \\ \gamma - \mu_{\max}^2 - \mu_{\max} = 0, \end{cases} \Rightarrow (\mu_{\max} - \mu_{\min} + 1)(\mu_{\max} + \mu_{\min}) = 0. \quad (6.22)$$

Учитывая, что  $\mu_{\max} \geq \mu_{\min}$ , находим

$$\mu_{\max} = -\mu_{\min} = S. \quad (6.23)$$

Величиной  $S$  в дальнейшем будет обозначаться максимальная проекция спина на ось  $z$ .

Итак, согласно соотношениям (6.22)–(6.23), собственные числа оператора квадрата спина и оператора проекции спина на ось  $z$  могут принимать следующие значения:

$$\gamma = S(S+1), \quad -S \leq \mu \leq S. \quad (6.24)$$

Таким образом, проекция спина на ось  $z$  принимает  $2S+1$  значений, отличающихся на единицу (6.13), при этом разность  $\mu_{\max} - \mu_{\min} = 2S$  должна быть целым числом. Отсюда значения возможных проекций спина на ось  $z$  [1, 26]:

$$S^Z = -S, -S+1, \dots, S-1, S, \quad (6.25)$$

где  $S$  — целое или полуцелое число.

В табл. 6.1 приведены возможные значения собственных чисел оператора квадрата спина и оператора проекции спина на ось  $z$  для некоторых значений максимальной проекции  $S$ .

Таблица 6.1. 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:

$$\Psi = |S_1 S_2 \dots S_j \dots S_{N_a}\rangle, \quad (6.26)$$

где  $N_a$  — число узлов в системе, а состояние каждого узла  $S_j$  — это  $z$ -проекции спина на узле  $j$ . Размерность базиса (6.26) равна

$$R = (2S+1)^{N_a}. \quad (6.27)$$

Теперь необходимо описать действие спиновых операторов на выбранные базисные волновые функции. В базисе (6.26) 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

(6.26) сводится к появлению множителя перед волновой функцией, равного  $z$ -проекции спина на узле  $j$ :

$$\hat{S}_j^Z = |\dots S_j \dots\rangle = S_j |\dots S_j \dots\rangle. \quad (6.28)$$

Аналогично действует и оператор квадрата спина:

$$\hat{S}_j^2 = |\dots S_j \dots\rangle = S_j(S_j + 1) |\dots S_j \dots\rangle. \quad (6.29)$$

Для определения нормировочных множителей в (6.16) рассмотрим один из узлов решетки, на котором проекция спина на ось  $z$  равна  $S^Z$ , при максимальной проекции  $S$ , и обозначим через  $\Psi_{S,S^Z}$  соответствующую волновую функцию.

Из (6.16), (6.24) и (6.25) имеем

$$S^+ S^- \Psi_{S,S^Z-1} = A_{S^Z} S^- \Psi_{S,S^Z} = A_{S^Z}^2 \Psi_{S,S^Z-1}. \quad (6.30)$$

С другой стороны, используя (6.21), получаем

$$\begin{aligned} S^- S^+ \Psi_{S,S^Z-1} &= \left( S(S+1) - (S^Z - 1)^2 - (S^Z - 1) \right) \Psi_{S,S^Z-1} = \\ &= A_{S^Z}^2 \Psi_{S,S^Z-1}. \end{aligned} \quad (6.31)$$

Из (6.30) и (6.31) находим значение нормировочной константы:

$$A_{S^Z} = \sqrt{S(S+1) - (S^Z - 1)^2 - (S^Z - 1)} = \sqrt{(S + S^Z)(S - S^Z + 1)}. \quad (6.32)$$

Окончательно,

$$\begin{aligned} S_j^+ |\dots (S_j^Z - 1) \dots\rangle &= \sqrt{(S + S_j^Z)(S - S_j^Z + 1)} |\dots S_j^Z \dots\rangle; \\ S_j^- |\dots S_j^Z \dots\rangle &= \sqrt{(S + S_j^Z)(S - S_j^Z + 1)} |\dots (S_j^Z - 1) \dots\rangle. \end{aligned} \quad (6.33)$$

Из (6.11) и (6.33) получаем также:

$$\begin{aligned} S_j^X |\dots (S_j^Z - 1) \dots\rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{(S + S_j^Z)(S - S_j^Z + 1)} |\dots S_j^Z \dots\rangle; \\ S_j^Y |\dots (S_j^Z - 1) \dots\rangle &= -\frac{i}{2} \sqrt{(S + S_j^Z)(S - S_j^Z + 1)} |\dots S_j^Z \dots\rangle. \end{aligned} \quad (6.34)$$

Сразу следует отметить, что на практике работать с формулами (6.34) 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  $\sigma^\alpha$ :

$$S^\alpha = \frac{1}{2} \sigma^\alpha; \quad \sigma^X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma^Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma^Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (6.35)$$

Матрицы Паули действуют на двухкомпонентные волновые функции-столбцы:

$$\psi^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \psi^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (6.36)$$

функция  $\psi^1$  отвечает состоянию со спином вверх ( $S^Z = +1/2$ ), а функция  $\psi^2$  — состоянию со спином вниз ( $S^Z = -1/2$ ). Для операторов  $S^+$  и  $S^-$  вводят, соответственно, матрицы:

$$\sigma^+ = \sigma^X + i\sigma^Y = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.37)$$

и

$$\sigma^- = \sigma^X - i\sigma^Y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.38)$$

которые переворачивают спины в состояниях  $\psi^1$  и  $\psi^2$ :

$$\begin{aligned} \sigma^+ \psi^2 &= \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 2\psi^1, \\ \sigma^+ \psi^1 &= \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv 0, \\ \sigma^- \psi^1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 2\psi^2, \\ \sigma^- \psi^2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv 0. \end{aligned} \quad (6.39)$$

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  $S^+, S^-, S^Z$  (6.11).

## 6.2. 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:

$$H_{\mathbf{H}} = -\mathbf{H}\hat{\mathbf{S}} = -\left(H_x\hat{S}^X + H_y\hat{S}^Y + H_z\hat{S}^Z\right). \quad (6.40)$$

Таким образом, приложенное магнитное поле стремится направить спины (магнитные моменты) узлов вдоль линий магнитной индукции. Здесь и в дальнейшем размерный множитель  $\mu_0(\mu_\text{я})$  будет опускаться.

Взаимодействие спинов между собой также описывается скалярным произведением:

$$H_{\text{int}} = -J_{jj'} \hat{\mathbf{S}}_j \hat{\mathbf{S}}_{j'}, \quad (6.41)$$

величина  $J_{jj'}$  называется *обменным взаимодействием*. Если гамильтониан (6.41) 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  $\varphi(r)$  следующим образом:

$$\varphi_{mn}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_m(r_1)\varphi_n(r_2) \pm \varphi_m(r_2)\varphi_n(r_1)). \quad (6.42)$$

Знак в (6.42) 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

$$\begin{aligned} \varphi_{\uparrow\downarrow}(r_1, r_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_m(r_1)\varphi_n(r_2) - \varphi_m(r_2)\varphi_n(r_1)), \\ \varphi_{\uparrow\uparrow}(r_1, r_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_m(r_1)\varphi_n(r_2) + \varphi_m(r_2)\varphi_n(r_1)). \end{aligned} \quad (6.43)$$

Рассмотрим выражение для кулоновской энергии взаимодействия двух электронов на узлах  $m$  и  $n$ :

$$E_{mn} = \langle \varphi_{mn} | V_c | \varphi_{mn} \rangle = \int \varphi_{mn}^*(r_1, r_2) \left( \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \right) \varphi_{mn}(r_1, r_2) d^3r_1 d^3r_2. \quad (6.44)$$

С учетом (6.43) находим:

$$\begin{aligned} E_{\uparrow\uparrow} &= E_0 - J_{mn}; \quad E_{\uparrow\downarrow} = E_0 + J_{mn}; \\ J_{mn} &= \int \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \varphi_m^*(r_1) \varphi_n^*(r_2) \varphi_m(r_2) \varphi_n(r_1) d^3r_1 d^3r_2; \\ E_0 &= \int \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} |\varphi_n(r_1)|^2 |\varphi_m(r_2)|^2 d^3r_1 d^3r_2, \end{aligned} \quad (6.45)$$

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 (6.45) можно переписать в более компактной форме:

$$E = E_0 + E_{\text{обм}}, \quad E_{\text{обм}} = -J_{mn} \mathbf{S}_m \mathbf{S}_n. \quad (6.46)$$

Таким образом, если  $J_{mn} > 0$ , то выгодна параллельная ориентация спинов:

$$\dots \uparrow\uparrow\uparrow\dots, \quad (6.47)$$

если же  $J_{mn} < 0$ , то в основном состоянии соседние спины будут антипараллельны:

$$\dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots. \quad (6.48)$$

Случай (6.47) называется *ферромагнитным упорядочением*, случай (6.48) — *антиферромагнитным упорядочением*.

Величина обменного интеграла определяется кулоновским взаимодействием на соседних атомах, расположенных на расстоянии периода решетки  $a$ , уменьшенным в меру перекрытия волновых функций (рис. 6.1):

$$J \sim \frac{e^2}{a} e^{-a/a_0} \sim 0,1 \div 1 \text{ эВ}, \quad (6.49)$$

где  $a_0$  — характерный масштаб волновой функции, имеющей величину порядка боровского радиуса.

Обменный интеграл  $J_{mn}$  является аналогом амплитуды перескока  $t_{mn}$ , рассматриваемой ранее в узельных моделях сильной связи для ферми- и бозе-систем.

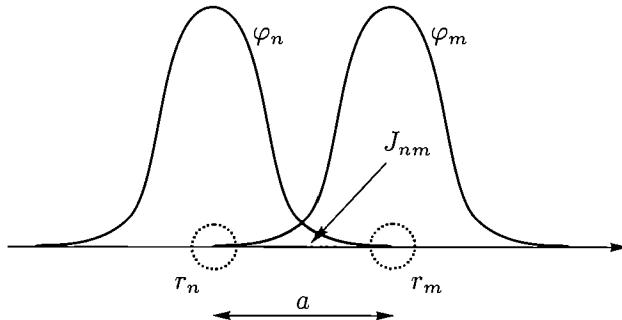


Рис. 6.1. Величина обменного интеграла  $J_{nm}$  (закрашенная область) определяется площадью области перекрытия волновых функций электронов, находящихся в узлах решетки  $n$  и  $m$ ;  $a = |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|$

Модель, учитывающая взаимодействие системы узельных спинов между собой (6.41) и с внешним полем (6.40), называется *моделью Гейзенберга*, гамильтониан этой модели имеет вид

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \mathbf{H} \sum_i \mathbf{S}_i, \quad (6.50)$$

где  $\mathbf{S}_i$  — оператор спина на узле  $i$ :  $\mathbf{S}_i = \{S_i^X, S_i^Y, S_i^Z\}$ . При  $J_{ij} > 0$  гамильтониан (6.50) 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:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (J_{ij}^X S_i^X S_j^X + J_{ij}^Y S_i^Y S_j^Y + J_{ij}^Z S_i^Z S_j^Z) - \mathbf{H} \sum_i \mathbf{S}_i. \quad (6.51)$$

Вообще говоря, обменный интеграл является тензором  $J^{\alpha\beta}$ , поэтому в (6.51) 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:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (J^X S_i^X S_j^X + J^Y S_i^Y S_j^Y + J^Z S_i^Z S_j^Z) - \mathbf{H} \sum_i \mathbf{S}_i. \quad (6.52)$$

Модель (6.52) 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

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (J_{\perp} (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y) + J_{\parallel} S_i^Z S_j^Z) - \mathbf{H} \sum_i \mathbf{S}_i \quad (6.53)$$

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

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y). \quad (6.54)$$

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  $z$ :

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^Z S_j^Z - H^Z \sum_i S_i^Z, \quad (6.55)$$

модель (6.55) называется *моделью Изинга*, ось  $z$  в этой ситуации — ось легкого намагничивания для исходной XXZ-модели.

Наконец, возможна полностью изотропная модель Гейзенберга:

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{(ij)} (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y + S_i^Z S_j^Z) - \mathbf{H} \sum_i \mathbf{S}_i, \quad (6.56)$$

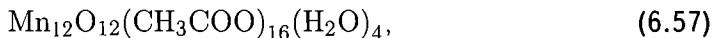
эта модель называется *XXX-моделью*.

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. 6.2 [24].

Простейшая модель, описывающая магнитные свойства кластера (6.57), имеет вид

$$\begin{aligned} H = & J_1 (S_1 S_7 + S_2 S_9 + S_3 S_{11} + S_4 S_5) + \\ & + J_2 (S_1 S_6 + S_1 S_8 + S_2 S_8 + S_2 S_{10} + S_3 S_{10} + S_3 S_{12} + S_4 S_6 + S_4 S_{12}) + \\ & + J_3 (S_1 S_2 + S_2 S_3 + S_3 S_4 + S_1 S_4) + \\ & + J_4 (S_5 S_6 + S_6 S_7 + S_7 S_8 + S_8 S_9 + S_9 S_{10} + S_{10} S_{11} + S_{11} S_{12} + S_5 S_{12}), \end{aligned} \quad (6.58)$$

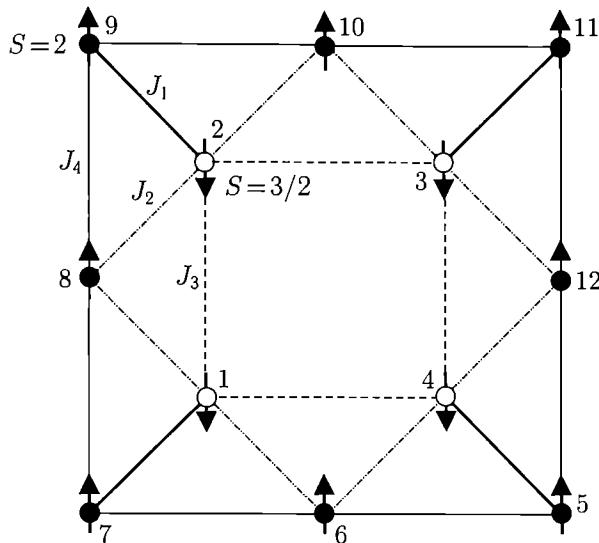


Рис. 6.2. Схематичное изображение нанокластера (6.57). Кружками показаны атомы марганца, внутренние атомы имеют максимальную проекцию спина  $S = 3/2$ , внешние —  $S = 2$

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]

$$J_1 \approx 215 \text{ K}; \quad J_2 \approx 85 \text{ K}; \quad J_3 \approx -85 \text{ K}; \quad J_4 \approx -45 \text{ K}. \quad (6.59)$$

### 6.3. Формирование гамильтоновой матрицы для спиновых моделей

Для построения гамильтоновой матрицы перепишем сначала слагаемое, отвечающее взаимодействию спинов в модели (6.50), в терминах операторов  $S^+$  и  $S^-$ :

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \left( S_i^Z S_j^Z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_{-j}^- + S_i^- S_{+j}^+) \right). \quad (6.60)$$

Аналогично для слагаемого, отвечающего взаимодействию с внешним полем, имеем

$$\begin{aligned} H_H &= - \sum_i (H^X S_i^X + H^Y S_i^Y + H^Z S_i^Z) = \\ &= -H^Z \sum_i S_i^Z - \frac{H^X}{2} \sum_i (S_i^+ + S_i^-) - \frac{H^Y}{2i} \sum_i (S_i^+ - S_i^-). \end{aligned} \quad (6.61)$$

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 (6.61) остаются лишь два первых слагаемых.

Далее полагаем, что внешнее поле направлено вдоль оси  $z$ , и гамильтониан модели имеет вид

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \left( S_i^Z S_j^Z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right) - H^Z \sum_i S_i^Z. \quad (6.62)$$

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

$$n_i = S + S_i^Z. \quad (6.63)$$

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:

$$|S^Z = -1\rangle \Rightarrow |n = 0\rangle; \quad |S^Z = 0\rangle \Rightarrow |n = 1\rangle; \quad |S^Z = 1\rangle \Rightarrow |n = 2\rangle. \quad (6.64)$$

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  $S = 3/2$  функция  $| -3/2, 1/2, 3/2, \dots \rangle$  в спиновом базисе в соответствии с (6.63) 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 (6.63):

$$\begin{aligned} S_i^Z | \dots n_i \dots \rangle &= (n_i - S) | \dots n_i \dots \rangle; \\ S_i^+ | \dots (n_i - 1) \dots \rangle &= \sqrt{n_i(2S - n_i + 1)} | \dots n_i \dots \rangle; \\ S_i^- | \dots n_i \dots \rangle &= \sqrt{n_i(2S - n_i + 1)} | \dots (n_i - 1) \dots \rangle. \end{aligned} \quad (6.65)$$

В частности, для  $S = 1/2$  имеем:

$$\begin{aligned} S_i^Z | \dots n_i \dots \rangle &= \left( n_i - \frac{1}{2} \right) | \dots n_i \dots \rangle; \\ S_i^+ | \dots 0_i \dots \rangle &= | \dots 1_i \dots \rangle; \quad S_i^- | \dots 1_i \dots \rangle = | \dots 0_i \dots \rangle. \end{aligned} \quad (6.66)$$

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 (6.62) операторы можно переставлять друг с другом, знаки матричных элементов при этом не изменяются. Рассмотрим сначала слагаемые гамильтониана, дающие диагональный вклад в гамильтонову матрицу:

$$\begin{aligned} & \left\langle \dots S_i \dots S_j \dots \mid \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i^Z S_j^Z + H^Z \sum_i S_i^Z \mid \dots S_i \dots S_j \dots \right\rangle = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \langle \dots S_i \dots S_j \dots \mid S_i^Z S_j^Z \mid \dots S_i \dots S_j \dots \rangle + \\ &+ \sum_i H^Z \langle \dots S_i \dots S_j \dots \mid S_i^Z \mid \dots S_i \dots S_j \dots \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j + H^Z \sum_i S_i. \quad (6.67) \end{aligned}$$

Оставшиеся слагаемые гамильтониана (6.62) дают недиагональный вклад в гамильтонову матрицу. Например,

$$\begin{aligned} & \langle \dots (S_i - 1) \dots S_j \dots \mid S_i^+ S_j^- \mid \dots S_i \dots (S_j - 1) \dots \rangle = \\ &= \sqrt{(S + S_i)(S - S_i + 1)(S + S_j)(S - S_j + 1)} \equiv \\ &\equiv \sqrt{n_i(2S - n_i + 1)n_j(2S - n_j + 1)}, \quad n_m = S + S_m. \quad (6.68) \end{aligned}$$

Рассмотрим далее конкретный пример построения гамильтоновой матрицы для спиновой системы.

Пусть есть периодически замкнутая система из трех узлов ( $N_a = 3$ ), описываемая XXX-моделью с гамильтонианом

$$H = - \sum_{i=1}^3 (S_i^X S_{i+1}^X + S_i^Y S_{i+1}^Y + S_i^Z S_{i+1}^Z),$$

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:

$$\begin{aligned}\Phi_1 &= |012\rangle, \quad \Phi_2 = |021\rangle, \quad \Phi_3 = |102\rangle, \quad \Phi_4 = |111\rangle, \\ \Phi_5 &= |120\rangle, \quad \Phi_6 = |201\rangle, \quad \Phi_7 = |210\rangle.\end{aligned}$$

которые соответствуют следующим спиновым конфигурациям:

$$\begin{aligned}\Phi_1 &\Rightarrow |-1; 0; 1\rangle, \quad \Phi_2 \Rightarrow |-1; 1; 0\rangle, \quad \Phi_3 \Rightarrow |0; -1; 1\rangle, \quad \Phi_4 \Rightarrow |0; 0; 0\rangle; \\ \Phi_5 &\Rightarrow |0; 1; -1\rangle, \quad \Phi_6 \Rightarrow |1; -1; 0\rangle, \quad \Phi_7 \Rightarrow |1; 0; -1\rangle.\end{aligned}$$

С учетом (6.67) и (6.68) 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  $\Psi_0$  — собственная функция основного состояния системы. Каждая полученная после диагонализации собственная волновая функция гамильтониана представляет собой линейную комбинацию исходных узельных функций

$$\Psi_m = \sum_n C_{nm} \Phi_n, \quad (6.69)$$

где  $C_{nm}$  — коэффициенты разложения собственных функций  $\Psi$  по базису  $\Phi$ . Поскольку матричные элементы оператора  $S_i^Z S_j^Z$  в базисе  $\Phi$  известны, то

$$\langle S_i S_j \rangle_0 = \sum_{nn'} C_{n0} C_{n'0} \langle \Phi_n | S_i S_j | \Phi_{n'} \rangle. \quad (6.70)$$

Аналогично рассчитываются и другие физические величины. Все правила расчета, справедливые для фермионов и бозонов, также применимы и для спиновых систем.

#### 6.4. Инварианты в спиновых моделях

Рассмотрим модель Гейзенберга с внешним полем, направленным вдоль оси  $z$ :

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - H^Z \sum_i S_i^Z. \quad (6.71)$$

Оказывается, в этом случае в системе сохраняется проекция полного спина системы на ось  $z$ :

$$S^Z = \sum_i S_i^Z = \text{const.} \quad (6.72)$$

Докажем утверждение (6.72), для чего рассмотрим коммутатор  $[H, S^Z]$ . Имеем:

$$\begin{aligned} [H, S^Z] &= \left[ H, \sum_k S_k^Z \right] = \left[ -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - H^Z \sum_i S_i^Z, \sum_k S_k^Z \right] = \\ &= \left[ -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \sum_k S_k^Z \right] = \left[ -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y + S_i^Z S_j^Z), \sum_k S_k^Z \right] = \\ &= \left[ -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y), \sum_k S_k^Z \right] = \\ &= \left[ -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i^X S_j^X, \sum_k S_k^Z \right] + \left[ -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i^Y S_j^Y, \sum_k S_k^Z \right] = \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} (-i\delta_{kj} S_i^X S_k^Y - i\delta_{ik} S_k^Y S_j^X + i\delta_{kj} S_i^Y S_k^X + i\delta_{ik} S_k^X S_j^Y) = \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} (-iS_i^X S_j^Y - iS_i^Y S_j^X + iS_i^Y S_j^X + iS_i^X S_j^Y) \equiv 0, \quad (6.73) \end{aligned}$$

что и доказывает утверждение (6.72).

Гамильтонова матрица, таким образом, разбивается на блоки, стоящие на главной диагонали и отвечающие различным суммарным проекциям спина, все элементы вне этих блоков равны нулю:

$$H = \begin{pmatrix} \boxed{S^Z = -1/2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \boxed{S^Z = 1/2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \boxed{S^Z = -1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \boxed{S^Z = 0} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \boxed{S^Z = 1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix}, \quad (6.74)$$

и задача распадается на группу отдельных задач для каждого значения суммарной проекции спина.

Рассмотрим ту же модель, что и в п. 6.3, 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  $R = 3^3 = 27$ :

$$\begin{aligned}\Phi_1 &= |-1; -1; -1\rangle; & \Phi_2 &= |-1; -1; 0\rangle; & \Phi_3 &= |-1; -1; 1\rangle; \\ \Phi_4 &= |-1; 0; -1\rangle; \dots; & \Phi_{26} &= |1; 1; 0\rangle; & \Phi_{27} &= |1; 1; 1\rangle.\end{aligned}$$

Переходя к представлению фиктивных бозонов и сортируя функции в соответствии с суммарной проекцией спина, получаем узельный базис, состоящий из семи групп (табл. 6.4):

Таблица 6.2. 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	$ 000\rangle$	$ 001\rangle$ $ 010\rangle$ $ 100\rangle$	$ 002\rangle$ $ 011\rangle$ $ 020\rangle$ $ 101\rangle$ $ 110\rangle$ $ 200\rangle$	$ 012\rangle$ $ 021\rangle$ $ 102\rangle$ $ 111\rangle$ $ 120\rangle$ $ 201\rangle$ $ 210\rangle$	$ 022\rangle$ $ 112\rangle$ $ 121\rangle$ $ 202\rangle$ $ 211\rangle$ $ 220\rangle$		

Используя (6.67) и (6.68), получаем гамильтонову матрицу, портрет которой (места ненулевых элементов) изображен на рис. 6.3.

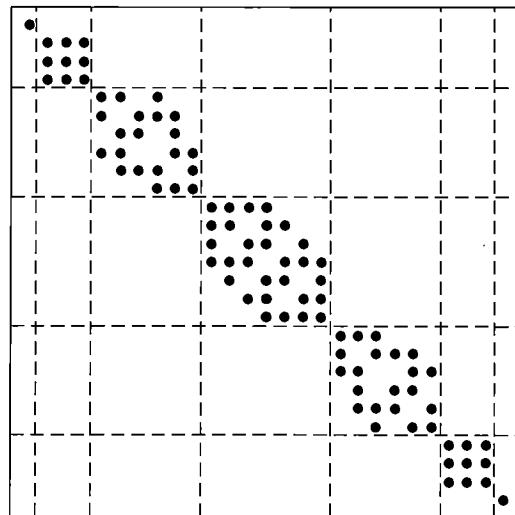


Рис. 6.3. Портрет гамильтоновой матрицы

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:

$$\begin{aligned}
 S^Z = -3 : \quad H_{-3} &= (-3); \\
 S^Z = -2 : \quad H_{-2} &= \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}; \\
 S^Z = -1 : \quad H_{-1} &= \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}; \\
 S^Z = 0 : \quad H_0 &= \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}; \\
 S^Z = +1 : \quad H_{+1} &= \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}; \\
 S^Z = +2 : \quad H_{+2} &= \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}; \\
 S^Z = +3 : \quad H_{+3} &= (-3).
 \end{aligned}$$

Заметим, что матрица, соответствующая нулевой суммарной проекции спина, получилась в точности совпадающей с матрицей в задаче с фиксированной полной проекцией спина.

Утверждение (6.72) также становится понятным, если записать гамильтониан в терминах операторов  $S^+$  и  $S^-$  (см. (6.62)). 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 (6.71) появится дополнительное слагаемое вида

$$\Delta H = H^X \sum_i S_i^X = \frac{1}{2} H^X \sum_i (S_i^+ + S_i^-), \quad (6.75)$$

и суммарная проекция спина на ось  $z$  уже не будет сохраняться. Соответственно из-за того, что операторы, входящие в (6.75), меняют суммарную проекцию спина в системе, в гамильтоновой матрице (6.74) 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,  $z \uparrow\uparrow H$ , задачу можно свести к (6.71). Тогда следующие две квантовые задачи будут эквивалентны:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y + S_i^Z S_j^Z) - H^Z \sum_i S_i^Z;$$

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y + S_i^Z S_j^Z) - H^X \sum_i S_i^X.$$

## 6.5. Некоторые результаты для модели Гейзенберга. Спектр возбуждений

Рассмотрим анизотропную XX-модель во внешнем продольном поле:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (J_\perp (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y) + J_\parallel S_i^Z S_j^Z) - H^Z \sum_i S_i^Z. \quad (6.76)$$

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:

$$e^{-i\varphi S^Z} S^\pm e^{i\varphi S^Z} = S^\pm e^{\mp i\varphi}. \quad (6.77)$$

В этом несложно убедиться дифференцированием по параметру  $\varphi$  и использованием коммутационных соотношений.

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

$$U = \exp \left( i\pi \sum_{i_A} S_{i_A}^Z \right), \quad (6.78)$$

которое согласно (6.77) меняет знак у операторов  $S^\pm$  подрешетки  $A$ :

$$U^{-1} S_{i_A}^\pm U = -S_{i_A}^\pm. \quad (6.79)$$

Тогда, применяя это унитарное преобразование к гамильтониану, находим

$$U^{-1} H U = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (J_\perp (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y) - J_\parallel S_i^Z S_j^Z) - H^Z \sum_i S_i^Z. \quad (6.80)$$

В результате преобразования у поперечной составляющей обменного взаимодействия поменялся знак, а спектр оператора  $H$  при этом преобразовании не изменился (см. (4.24)). 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 XX-модели для  $S = 1/2$  [8], получение которого 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

$$E_0 = -N_a Z J_{\parallel} S^2 / 2, \quad (6.81)$$

где  $Z$  — число ближайших соседей.

Были получены ответы и для ситуации антиферромагнитной цепочки,  $J_{\parallel} < J_{\perp}$ , и рассчитан спектр возбуждений. Известны также аналитические результаты для одномерной XY-модели (6.52) [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 (6.55), 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 двух- 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:

$$H = -H^Z \sum_k \sigma_k^Z - \frac{1}{2} \sum_{kk'} J_{kk'} \sigma_k^{\perp} \sigma_{k'}^{\perp}, \quad (6.82)$$

где  $\sigma_k^{\perp} = \{\sigma_k^X, \sigma_k^Y, 0\}$ ;  $\sigma_k^X, \sigma_k^Y, \sigma_k^Z$  — матрицы Паули.

Анизотропный гамильтониан (6.82) 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:

$$\sigma_k \sigma_{k'} \approx \langle \sigma_k \rangle \sigma_{k'} + \sigma_k \langle \sigma_{k'} \rangle - \langle \sigma_k \rangle \langle \sigma_{k'} \rangle, \quad (6.83)$$

где  $\langle \sigma_k \rangle$  — среднее значение спина на узле  $k$ . Это означает, что каждый спин взаимодействует с усредненным полем остальных спинов. Разложение (6.83) справедливо с точностью до квадратичных поправок по отклонению спина от среднего, так как его можно переписать в виде

$$(\sigma_k - \langle \sigma_k \rangle)(\sigma_{k'} - \langle \sigma_{k'} \rangle) \approx 0. \quad (6.84)$$

Введем среднее поле спинов, действующих на выделенный спин  $\sigma_k$ , в следующем виде:

$$\Delta_k = \sum_{k'} J_{kk'} \langle \sigma_{k'}^\perp \rangle, \quad (6.85)$$

тогда гамильтониан (6.82) запишется следующим образом:

$$H = - \sum_k (\sigma_k^Z H^Z + \sigma_k^\perp \Delta_k) + \frac{1}{2} \sum_k \Delta_k \langle \sigma_k^\perp \rangle. \quad (6.86)$$

С учетом определения матриц Паули каждое из слагаемых в первой сумме в (6.86) может быть записано в виде

$$\Delta_k = \sigma_k^Z H^Z + \sigma_k^\perp \Delta_k = \begin{pmatrix} H^Z & \Delta_k^X - i\Delta_k^Y \\ \Delta_k^X + i\Delta_k^Y & -H^Z \end{pmatrix}. \quad (6.87)$$

Эту матрицу несложно диагонализовать, т. е. решить секулярное уравнение  $\Delta - \lambda I = 0$ . Собственные числа будут

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{(H^Z)^2 + |\Delta|^2}; \quad |\Delta|^2 = (\Delta^X)^2 + (\Delta^Y)^2, \quad (6.88)$$

и матрицы  $\Delta_k$  принимают диагональный вид:

$$\Delta_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} H_k = \sigma_k^Z H_k; \quad H_k = \sqrt{(H^Z)^2 + |\Delta_k|^2}. \quad (6.89)$$

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  $\sigma_k^Z$  будут квантоваться вдоль новой оси. С учетом (6.86) гамильтониан принимает вид

$$H = - \sum_k \sigma_k^Z H_k + \frac{1}{2} \sum_k \Delta_k \langle \sigma_k^\perp \rangle. \quad (6.90)$$

Энергия основного состояния, следовательно, равна

$$E_0 = - \sum_k H_k + \frac{1}{2} \sum_k \Delta_k \langle \sigma_k^\perp \rangle. \quad (6.91)$$

В выражении (6.91) пока не известен параметр  $\langle \sigma_k^\perp \rangle$ . Для его определения следует проварировать (6.91) по  $\langle \sigma_k^\perp \rangle$  для фиксированного узла  $k$ :

$$\frac{\partial E_0}{\partial \langle \sigma_k^\perp \rangle} = 0 \Rightarrow \Delta_k = \sum_{k'} J_{kk'} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{(H^Z)^2 + (\Delta_{k'})^2}}. \quad (6.92)$$

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:

$$\Delta_k \equiv \Delta = \sqrt{(ZJ)^2 - (H^Z)^2}; \quad \langle \sigma_k^\perp \rangle = \frac{\Delta}{ZJ}, \quad (6.93)$$

где  $Z$  — число ближайших соседей. Окончательно для энергии основного состояния имеем

$$E_0 = \sum_k \left( -H_k + \frac{\Delta_k \sigma_k^\perp}{2} \right) = -\frac{N_a}{2ZJ} \left( (ZJ)^2 + (H^Z)^2 \right). \quad (6.94)$$

Полученное выражение отвечает основному состоянию системы спинов, в котором все они повернуты по направлению новой оси квантования вдоль поля  $H_k$  (рис. 6.4).

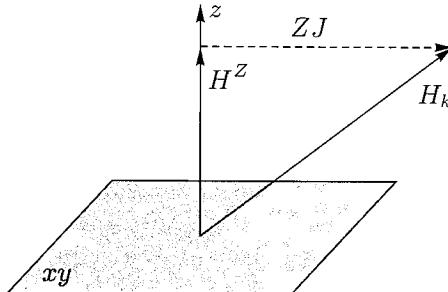


Рис. 6.4. Новая ось квантования направлена вдоль поля  $H_k$

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 XXX-модель (6.56) без внешнего поля и запишем гамильтониан в терминах операторов  $S^Z, S^\pm$ :

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \left( S_i^Z S_j^Z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right). \quad (6.95)$$

Обобщим сначала результат (6.81) 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 (6.47) дают только операторы  $S^Z$  в (6.95), 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 (6.81) для энергии основного состояния остается справедливым.

Для антиферромагнитного случая ( $J < 0$ ) все обстоит не так просто. Для описания антиферромагнитного состояния (см. (6.48)) 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 *неелевским*) 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

$$E_0 \approx -\frac{N_a Z |J_{\parallel}| S^2}{2}. \quad (6.96)$$

Отличие точного значения энергии основного состояния от (6.96) 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. 6.5).

Таблица 6.3. 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$ ; $S = 1$	$E_0 = -10,0$	$E_0 = -14,09413$
1D: $N_a = 3 \times 3$ ; $ 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 (6.96).

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 (6.95) начинают давать ненулевой вклад, что приводит к перемещению возбуждения с узла на узел (рис. 6.5). 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  $S^{\pm}$ .

Для дальнейшей аналитической диагонализации вводят новые операторы:

$$a_i^+ = \frac{S_i^-}{\sqrt{2S}}; \quad a_i = \frac{S_i^+}{\sqrt{2S}}; \quad a_i^+ a_i = n_i = S - S_i^Z. \quad (6.97)$$

Можно заметить, что с учетом перенормировки на  $\sqrt{2S}$  эти операторы описывают рассмотренные ранее фиктивные бозоны (см. (6.63)–(6.65)), вводимые

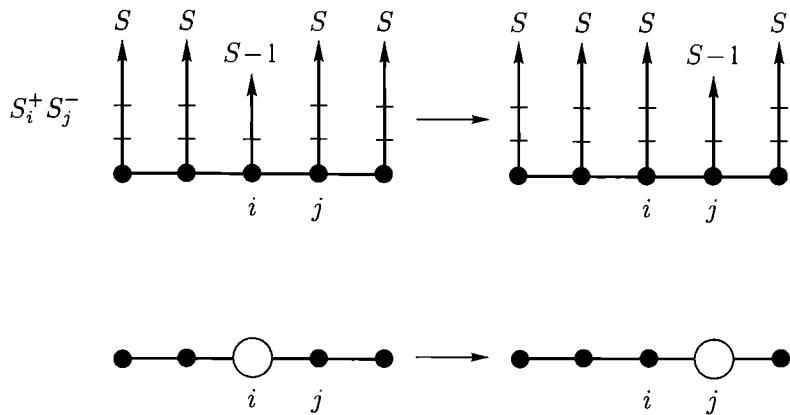


Рис. 6.5. Изменение проекций спина на узлах  $i$  и  $j$  эквивалентно перемещению магнона по решетке

для формирования гамильтоновой матрицы. В случае  $S^Z \approx S = \text{const}$  из (6.97) немедленно получаем стандартные бозе-связанные соотношения коммутации:

$$a_i a_{i'}^+ - a_{i'}^+ a_i = \delta_{ii'}. \quad (6.98)$$

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 (6.95) согласно (6.97) и учитывая малость числа возбуждений, находим

$$H = E_0 + SJ \sum_{\langle ij \rangle} (\delta_{ij} - 1) a_i^+ a_j. \quad (6.99)$$

Переходя к фурье-компонентам, получаем спектр магнонов  $\omega(q)$ :

$$\begin{aligned} H &= E_0 + \sum_q \hbar \omega(q) a_q^+ a_q; \\ \omega(q) &= SJ \sum_j (1 - e^{iqr_j}) \approx SJ a^2 q^2 |_{q \rightarrow 0}, \end{aligned} \quad (6.100)$$

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 (6.81).

Для антиферромагнетика спектр возбуждений находится подобным же образом [10], только вводятся две подрешетки, и фиктивные бозоны определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \text{для подрешетки «+»: } \quad a_i^+ &= \frac{S_i^-}{\sqrt{2S}}; \quad a_i = \frac{S_i^+}{\sqrt{2S}}; \\ \text{для подрешетки «-»: } \quad a_i^+ &= \frac{S_i^+}{\sqrt{2S}}; \quad a_i = \frac{S_i^-}{\sqrt{2S}}. \end{aligned} \quad (6.101)$$

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]:

$$H = E_0 + \sum_q \left[ \hbar\omega(q) \left( a_q^+ a_q + \frac{1}{2} \right) - \hbar A_q \right], \quad (6.102)$$

$$\omega(q) = \sqrt{A_q^2 - B_q^2} \approx \frac{SJZa}{\sqrt{3}} \Big|_{q \rightarrow 0}, \quad A_q = SJZ, \quad B_q = SJ \sum_j e^{iqr_j}.$$

Таким образом, бозевские возбуждения для антиферромагнетика имеют при малых значениях импульса линейный спектр  $\omega \cong vq$ , их называют *спиновыми волнами*, а величина  $v = SJZa/\sqrt{3}$  является скоростью спиновых волн. Заметим, что в выражении для энергии антиферромагнетика (6.102) при нулевой температуре отсутствуют возбуждения (вклад  $\langle a_q^+ a_q \rangle = 0$ ), но энергия отличается от выражения (6.96) для  $E_0$  на аддитивную поправку  $\left( - \sum_q \hbar A_q \right)$ , 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.

Рассмотрим спиновую цепочку с  $S = 1$ , описываемую следующей моделью:

$$H = -\frac{J_\perp}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + J_\parallel \sum_{\langle ij \rangle} S_i^Z S_j^Z + U \sum_i (S_i^Z)^2, \quad (6.103)$$

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  $xy$ ).

Фазовая диаграмма основного состояния этой модели изучалась в [17, 29, 30] точной диагонализацией цепочек с  $N_a \leq 12$  (рис. 6.6). 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  $X$ -жидкость (бесщелевое состояние с  $\langle S^Z \rangle = \pm 1$  в первом возбужденном состоянии). Кроме того, в [29] наблюдалась еще одна фаза, так называемая

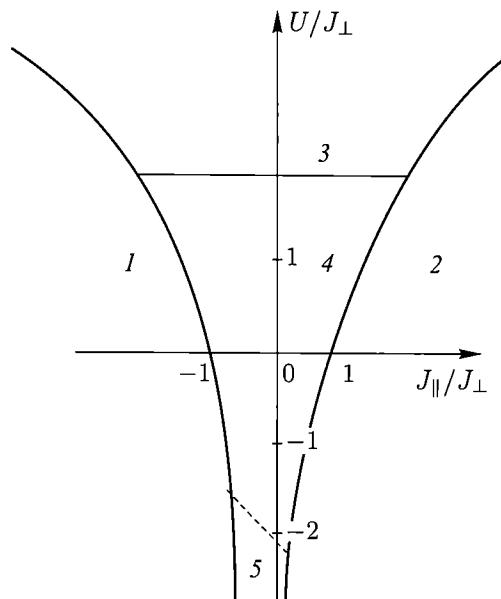


Рис. 6.6. Фазовая диаграмма модели (6.103)

«spin-1/2-like»  $X$ -фаза (область 5 на рис. 6.6), которая характеризуется  $\langle S^Z \rangle = 0$  в основном состоянии и  $\langle S^Z \rangle = \pm 2$  в первом возбужденном.

## 6.6. Соотношения и предельные случаи для фермионных, бозонных и спиновых моделей

Модели, рассмотренные в главах 6, 7 и 8 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 сверхтекущей системы.

**6.6.1. Связь между бозонной и спиновыми моделями.** Одним из предельных случаев бозонной модели Хаббарда (5.14) является XXZ-модель (6.53). 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

$$a_i a_j^+ - a_j^+ a_i = 0, \quad i \neq j; \quad a_i a_i^+ + a_i^+ a_i = 1. \quad (6.104)$$

Для бозонной модели Хаббарда (5.14) эта ситуация эквивалентна случаю бесконечного отталкивания на узлах:

$$\frac{U}{t} \gg 1. \quad (6.105)$$

При условии (6.105) главную роль в гамильтониане (5.14) играет межузельное взаимодействие  $V$ . Запишем гамильтониан *hard-core*-модели, включив в него явно химический потенциал  $\mu$ , допуская взаимодействие необязательно с ближайшими соседями:

$$H = - \sum_{i \neq j} t_{ij} a_i^+ a_j + \sum_{i \neq j} V_{ij} n_i n_j - \mu \sum_k n_k. \quad (6.106)$$

Введем спиновые операторы  $S^X, S^Y, S^Z$  по следующим правилам:

$$S_i^Z = \frac{1}{2} - a_i^+ a_i, \quad a_i^+ = S_i^X - i S_i^Y, \quad a_i = S_i^X + i S_i^Y. \quad (6.107)$$

Преобразование (6.107) 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:

$$S^X = \frac{1}{2} \sigma^X, \quad S^Y = \frac{1}{2} \sigma^Y, \quad S^Z = \frac{1}{2} \sigma^Z, \quad (6.108)$$

а рождение или уничтожение бозона на узле  $i$  эквивалентно, соответственно, уменьшению или увеличению  $z$ -проекции спина на узле  $i$ , т. е.

$$S_i^- = a_i^+, \quad S_i^+ = a_i. \quad (6.109)$$

Подставляя соотношения (6.108) в гамильтониан (6.106), получаем

$$H = - \sum_{i \neq j} t_{ij} (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y) + \sum_{i \neq j} V_{ij} S_i^Z S_j^Z + \sum_{i \neq j} V_{ij} \left( \frac{1}{4} - S_i^Z \right) - \mu \sum_i \left( \frac{1}{2} - S_i^Z \right), \quad (6.110)$$

или, убирая несущественные постоянные в химический потенциал и предполагая, что  $t_{ij} \equiv t$ ,  $V_{ij} \equiv V$ , имеем

$$H = -t \sum_{i \neq j} (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y) + V \sum_{i \neq j} S_i^Z S_j^Z - \mu' \sum_i \left( \frac{1}{2} - S_i^Z \right). \quad (6.111)$$

Гамильтониан (6.111) является XXZ-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 анти-

ферромагнитное — по оси  $z$ . Соотношение между числом бозонов в *hard-core*-модели и полной проекцией спина на ось  $z$  в спиновой модели имеет вид

$$N = \frac{N_a}{2} - \sum_i \langle S_i^Z \rangle, \quad (6.112)$$

так что полная проекция спина на ось  $z$  равна нулю при  $N = \frac{N_a}{2}$ .

**6.6.2. 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:

$$H = -t \sum_{i \neq j, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (6.113)$$

в пределе

$$\frac{t}{U} \ll 1. \quad (6.114)$$

Разделим гамильтониан (6.113) на несколько слагаемых:

$$H = T_d + T_h + T_{mix} + V, \quad (6.115)$$

где

$$\begin{aligned} V &= U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \\ T_d &= -t \sum_{i \neq j, \sigma} (n_{i,-\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} n_{j,-\sigma} + h.c.), \\ T_h &= -t \sum_{i \neq j, \sigma} ((1 - n_{i,-\sigma}) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + h.c.), \\ T_{mix} &= -t \sum_{i \neq j, \sigma} ((1 - n_{i,-\sigma}) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} n_{j,-\sigma} + n_{i,-\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + h.c.). \end{aligned}$$

Вклад  $T_d$  в (6.6.2) описывает перескоки электрона с узла на узел, когда оба узлы 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:

$$H_{eff} = e^{-iQ} H e^{iQ}. \quad (6.116)$$

Раскладывая далее (6.116) по параметру  $t/U$ , имеем

$$H_{eff} \approx H - i [Q, H]. \quad (6.117)$$

При этом удобно часть гамильтониана переписать в спиновых операторах для спина  $S = 1/2$ , вводимых следующим образом:

$$S_i^+ = a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow}, \quad S_i^- = a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\uparrow}, \quad S_i^Z = \frac{1}{2} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}). \quad (6.118)$$

С учетом (6.118) эффективный гамильтониан принимает следующий окончательный вид [10, 11]:

$$\begin{aligned} H_{eff} = & -t \sum_{i \neq j, \sigma} ((1 - n_{i,-\sigma}) a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + h.c.) + \\ & + \frac{2t^2}{U} \sum_{ij} \left( \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right). \end{aligned} \quad (6.119)$$

Гамильтониан (6.119) — 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 (6.119) становится равным нулю, и модель становится точной изотропной антиферромагнитной моделью Гейзенберга для спина  $S = 1/2$  (за вычетом несущественной постоянной):

$$H_{eff} = \frac{2t^2}{U} \sum_{ij} \left( \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} \right). \quad (6.120)$$

## Глава 7

# 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.

### 7.1. Конечные кластеры и трансляционная инвариантность

В большинстве случаев рассматриваемые конечные системы, кластеры, выбираются с периодическими граничными условиями (рис. 7.1) 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  $L_x \times L_y \times L_z$ .

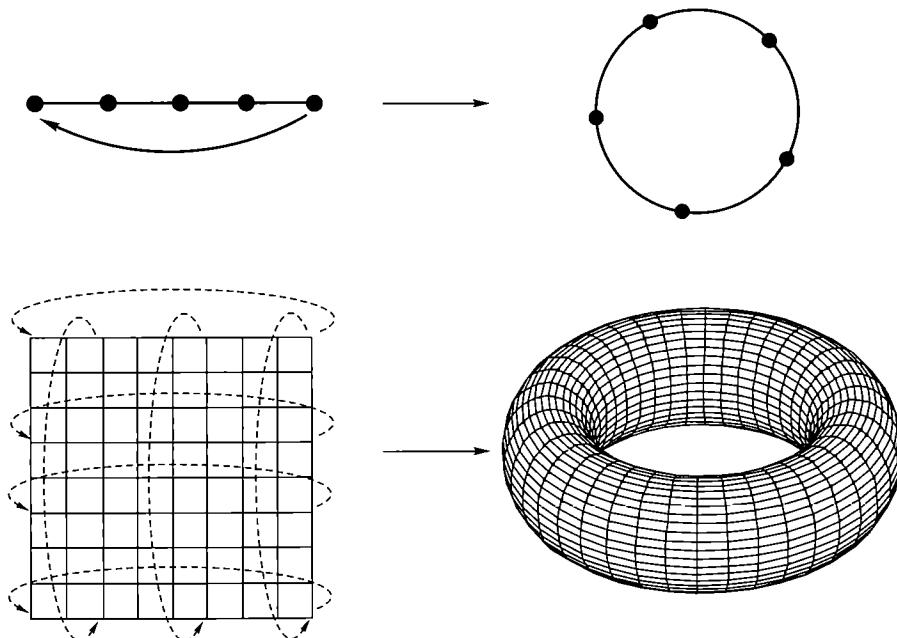


Рис. 7.1. Периодические граничные условия для одномерной и двумерной систем

Для конкретных случаев может быть выбрана и другая, не обязательно 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 инвариантные, связанные с периодичностью пространства.

Если имеется пространственная периодическая структура (кристаллическая решетка), то вектор трансляции  $r$  на этой структуре определяется как

$$r = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3, \quad (7.1)$$

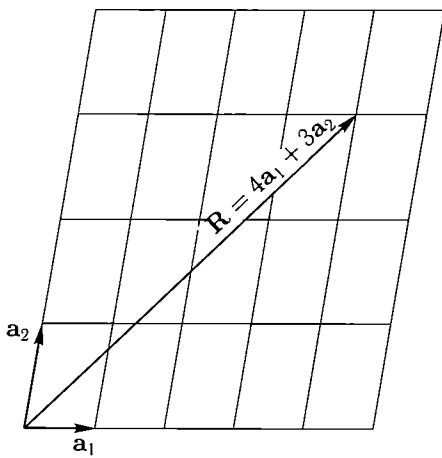


Рис. 7.2. Двумерная решетка Бравэ

где  $n_1, n_2, n_3$  — целые числа,  $a_1, a_2, a_3$  — базисные векторы решетки. Периодическая структура с определенным на ней вектором трансляции называется *решеткой Бравэ* (рис. 7.2).

Выбрав один из узлов решетки и задавая различные  $n_1, n_2, n_3$ , можно полностью определяют пространственную решетку Бравэ.

Для каждого вектора трансляции введем *оператор трансляции*  $T_R$ , под действием которого аргумент любой функции  $f(r)$ , определенной в пространстве решетки, сдвигается на  $r$ :

$$T_R f(r) = f(r + r). \quad (7.2)$$

Результат двух последовательных трансляций не зависит от порядка их применения, так как

$$T_R T_{R'} f(r) = T_{R'} T_R f(r) = f(r + r + r'). \quad (7.3)$$

Таким образом, оператор трансляции обладает свойством:

$$T_R T_{R'} = T_{R'} T_R = T_{R+R'}. \quad (7.4)$$

Рассмотрим задачу Шредингера на периодической решетке:

$$H\Psi = E\Psi, \quad (7.5)$$

где гамильтониан  $H$  также является периодическим с периодом решетки. Тогда справедливо следующее:

$$T_R H\Psi = H(r+R)\Psi(r+R) = H(r)\Psi(r+R) = HT_R\Psi. \quad (7.6)$$

Таким образом,

$$[T_R, H] = 0, \quad (7.7)$$

т. е. оператор трансляции коммутирует с гамильтонианом. Это означает, что для операторов  $H$  и  $T$  существует общая система собственных функций, для которых справедливо:

$$H\Psi = E\Psi; \quad T_R\Psi = c(R)\Psi, \quad (7.8)$$

где  $c(R)$  — собственные значения оператора трансляции. Из (7.4) получаем, что

$$\begin{aligned} T_{R'}T_R\Psi &= c(R)T_{R'}\Psi = c(R)c(R')\Psi, \\ T_{R'}T_R\Psi &= T_{R+R'}\Psi = c(R+R')\Psi, \end{aligned} \quad (7.9)$$

а значит,

$$c(R+R') = c(R)c(R'). \quad (7.10)$$

В общем случае, для каждого базисного вектора решетки можно записать:

$$c(a_j) = e^{2\pi i x_j}, \quad (7.11)$$

где  $x_j$  — комплексное число. Пользуясь свойствами собственного значения оператора трансляции (7.10), находим для вектора трансляции  $r$ :

$$c(R) = c(a_1)^{n_1}c(a_2)^{n_2}c(a_3)^{n_3} = e^{2\pi i(x_1 n_1 + x_2 n_2 + x_3 n_3)} = e^{ikr}, \quad (7.12)$$

где  $k$  — вектор, имеющий размерность вектора обратной решетки.

Вектор  $k$  в (7.12) определен с точностью до произвольного вектора  $g$  вида

$$ga = 2\pi n, \quad (7.13)$$

$n$  — целое число. Множество таких векторов можно представить в виде разложения

$$g = \sum_{\alpha=1}^3 b_{\alpha} m_{\alpha}, \quad (7.14)$$

где  $m_{\alpha}$  — целые числа, а векторы  $b$  обычно выбираются в виде

$$b_i = \frac{2\pi [a_j a_k]}{(a_1 [a_2 a_3])}, \quad i \neq j \neq k. \quad (7.15)$$

Для простой кубической решетки с периодом  $a$  имеем:

$$b_1 = \frac{2\pi}{a} e_1; \quad b_2 = \frac{2\pi}{a} e_2; \quad b_3 = \frac{2\pi}{a} e_3. \quad (7.16)$$

Векторы  $\mathbf{b}_i$  называются *базисными векторами обратной решетки*. Они выбраны так, что ортогональны базисным векторам прямой решетки:

$$\mathbf{b}_i \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}. \quad (7.17)$$

Любой вектор  $\mathbf{k}$  обратной решетки может быть разложен по базису векторов  $\mathbf{b}_i$ :

$$\mathbf{k} = x_1 \mathbf{b}_1 + x_2 \mathbf{b}_2 + x_3 \mathbf{b}_3. \quad (7.18)$$

Заметим, что векторы обратной решетки естественным образом появляются при рассмотрении квантовой задачи с периодическим потенциалом.

Таким образом, собственные функции гамильтониана (7.5) могут быть выбраны так, чтобы они удовлетворяли условию:

$$T_R \Psi = \Psi(r + R) = c(R) \Psi = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Psi(r), \quad (7.19)$$

при этом, как будет показано далее, вектор  $\mathbf{k}$  связан с оператором импульса.

Оператор трансляций может быть записан в виде

$$T_R = e^{i\hat{\mathbf{k}}\mathbf{r}}, \quad (7.20)$$

где  $\hat{\mathbf{k}}$  — некоторый оператор, собственное число которого равно  $\mathbf{k}$ .

Оператор трансляции унитарен:

$$TT^+ \equiv TT^{-1} = 1 \Rightarrow T^+ = T^{-1}, \quad (7.21)$$

и, следовательно, его действие на гамильтониан можно представить как унитарное преобразование

$$T_R H(r) T_R^+ = H(r + R), \quad (7.22)$$

так как

$$H\Psi = E\Psi \Rightarrow T_R H T_R^+ T_R \Psi = E T_R \Psi \Rightarrow T_R H T_R^+ \Psi' = E\Psi'; \quad \Psi' = T_R \Psi, \quad (7.23)$$

где  $\Psi'$  — блоховская волновая функция:

$$\Psi' = \Psi(\mathbf{r} + \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}). \quad (7.24)$$

Для выяснения физического смысла собственного числа  $\mathbf{k}$  рассмотрим малую трансляцию  $\delta\mathbf{a}$ , например, на минимальный шаг трансляции:

$$T_{\delta\mathbf{a}} H T_{\delta\mathbf{a}}^+ = H(\mathbf{r} + \delta\mathbf{a}) \approx H(\mathbf{r}) + \nabla H \delta\mathbf{a}. \quad (7.25)$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned} H(\mathbf{r} + \delta\mathbf{a}) &= T_{\delta\mathbf{a}} H T_{\delta\mathbf{a}}^+ \approx (1 + i\mathbf{k}\delta\mathbf{a}) H(1 - i\mathbf{k}\delta\mathbf{a}) = \\ &= H(\mathbf{r}) + i(\mathbf{k}H - H\mathbf{k}) \delta\mathbf{a} = H(\mathbf{r}) + i[\mathbf{k}, H] \delta\mathbf{a}. \end{aligned} \quad (7.26)$$

Отсюда

$$\nabla H(\mathbf{r}) = i[\mathbf{k}, H]. \quad (7.27)$$

Равенство (7.27) позволяет определить физический смысл оператора  $\mathbf{k}$ . Действительно, оператор импульса по отношению к любой функции коорди-

ната  $f$ , определенной на дискретной решетке, удовлетворяет следующему соотношению [1, 26]:

$$[p, f] = pf - fp = \frac{\hbar}{i} \nabla f. \quad (7.28)$$

Из (7.27) получаем, что

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}, \quad (7.29)$$

и является интегралом движения, так как из (7.7) и (7.20) следует, что

$$[\mathbf{k}, H] = 0, \quad (7.30)$$

так что одновременно со спектром при решении задачи Шредингера в периодическом потенциале можно определить и разрешенные волновые векторы.

Итак, собственную волновую функцию гамильтониана в условиях периодического потенциала можно представить как произведение экспоненциального множителя на периодическую функцию:

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \varphi(\mathbf{r}); \quad \varphi(\mathbf{r} + R) = \varphi(\mathbf{r}). \quad (7.31)$$

Полученное соотношение (7.31) называется *теоремой Блоха* [4, 31], а вектор  $\mathbf{k}$  — *блоховским волновым вектором*. Докажем, что он действителен.

Наложим на волновую функцию периодические граничные условия:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r} + L_x \mathbf{a}_x) &\equiv \Psi(\mathbf{r}), \\ \Psi(\mathbf{r} + L_y \mathbf{a}_y) &\equiv \Psi(\mathbf{r}), \\ \Psi(\mathbf{r} + L_z \mathbf{a}_z) &\equiv \Psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (7.32)$$

Эти граничные условия называются *условиями Борна–Кармана* [4, 32]. Согласно теореме Блоха, получаем:

$$\Psi(\mathbf{r} + L_\alpha \mathbf{a}_\alpha) = e^{iL_\alpha \mathbf{k} \mathbf{a}_\alpha} \Psi(\mathbf{r}); \quad \alpha = x, y, z. \quad (7.33)$$

Из условия ортогональности базисных векторов получаем:

$$e^{2\pi i L_\alpha x_\alpha} = 1 \Rightarrow x_\alpha = \frac{m_\alpha}{L_\alpha}, \quad (7.34)$$

где  $m$  — целое. Следовательно, разрешенные значения блоховского волнового вектора действительны и равны

$$\mathbf{k} = \frac{m_x}{L_x} \mathbf{b}_x + \frac{m_y}{L_y} \mathbf{b}_y + \frac{m_z}{L_z} \mathbf{b}_z. \quad (7.35)$$

Для простой кубической решетки находим

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{m_x}{L_x} \mathbf{e}_x + \frac{m_y}{L_y} \mathbf{e}_y + \frac{m_z}{L_z} \mathbf{e}_z \right). \quad (7.36)$$

Таким образом, доказано, что решение задачи Шредингера (7.5), которое удовлетворяет трансляционной инвариантности, следует искать в виде блоховской волновой функции (7.31), при этом вектор  $\mathbf{k}$  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 одномер-

ной цепочки, описываемой моделью Бозе–Хаббарда, с числом узлов  $N_a = 4$  и числом частиц  $N = 3$ . Узельный базис этой системы состоит из 20 функций:

$$\begin{aligned}\Phi_1 &= |0003\rangle, \quad \Phi_2 = |0012\rangle, \quad \Phi_3 = |0021\rangle, \quad \Phi_4 = |0030\rangle, \\ \Phi_5 &= |0102\rangle, \quad \Phi_6 = |0111\rangle, \quad \Phi_7 = |0120\rangle, \quad \Phi_8 = |0201\rangle, \\ \Phi_9 &= |0210\rangle, \quad \Phi_{10} = |0300\rangle, \quad \Phi_{11} = |1002\rangle, \quad \Phi_{12} = |1011\rangle, \\ \Phi_{13} &= |1020\rangle, \quad \Phi_{14} = |1101\rangle, \quad \Phi_{15} = |1110\rangle, \quad \Phi_{16} = |1200\rangle, \\ \Phi_{17} &= |2001\rangle, \quad \Phi_{18} = |2010\rangle, \quad \Phi_{19} = |2100\rangle, \quad \Phi_{20} = |3000\rangle.\end{aligned}\quad (7.37)$$

Рассортируем все функции базиса (7.37) на классы с индексом  $\xi$  так, что узельные функции  $\varphi_\xi(n)$  в каждом классе будут порождаться производящей функцией  $\varphi_\xi(0)$  посредством последовательных трансляций:

$$T\varphi_\xi(n) = \varphi_\xi(n+1); \quad 0 \leq n \leq N_\xi; \quad T\varphi_\xi(N_\xi) = \varphi_\xi(0). \quad (7.38)$$

При этом число  $N_\xi + 1$  — максимальное число функций класса  $\xi$ . Например, функции

$$\Phi_1 = |0003\rangle, \quad \Phi_4 = |0030\rangle, \quad \Phi_{10} = |0300\rangle, \quad \Phi_{20} = |3000\rangle \quad (7.39)$$

получаются друг из друга последовательными трансляциями вдоль цепочки.

Выберем в качестве производящей функции класса  $\xi = 1$  функцию

$$\varphi_1(0) = |3000\rangle, \quad (7.40)$$

тогда

$$\begin{aligned}T\varphi_1(0) &= \varphi_1(1) = |0300\rangle, \\ T^2\varphi_1(0) &= T\varphi_1(1) = \varphi_1(2) = |0030\rangle, \\ T^3\varphi_1(0) &= T^2\varphi_1(1) = T\varphi_1(2) = \varphi_1(3) = |0003\rangle, \\ N_1 &= 3.\end{aligned}\quad (7.41)$$

Для остальных классов имеем:

$$\begin{aligned}\varphi_2(0) &= |1200\rangle, \quad \varphi_2(1) = |0120\rangle, \quad \varphi_2(2) = |0012\rangle, \quad \varphi_2(3) = |2001\rangle, \\ \varphi_3(0) &= |2100\rangle, \quad \varphi_3(1) = |0210\rangle, \quad \varphi_3(2) = |0021\rangle, \quad \varphi_3(3) = |1002\rangle, \\ \varphi_4(0) &= |2010\rangle, \quad \varphi_4(1) = |0201\rangle, \quad \varphi_4(2) = |1020\rangle, \quad \varphi_4(3) = |0102\rangle, \\ \varphi_5(0) &= |1011\rangle, \quad \varphi_5(1) = |1101\rangle, \quad \varphi_5(2) = |1110\rangle, \quad \varphi_5(3) = |0111\rangle,\end{aligned}\quad (7.42)$$

$$N_2 = 3; \quad N_3 = 3; \quad N_4 = 3; \quad N_5 = 3.$$

Получилось пять классов по четыре функции.

В каждом из классов не обязательно находится одинаковое число функций. Для случая  $N_a = 4$  и  $N = 2$  имеем:

$$\begin{aligned}\Phi_1 &= |0002\rangle, \quad \Phi_2 = |0011\rangle, \quad \Phi_3 = |0020\rangle, \quad \Phi_4 = |0101\rangle, \quad \Phi_5 = |0110\rangle, \\ \Phi_6 &= |0200\rangle, \quad \Phi_7 = |1001\rangle, \quad \Phi_8 = |1010\rangle, \quad \Phi_9 = |1100\rangle, \quad \Phi_{10} = |2000\rangle,\end{aligned}$$

соответственно,

$$\begin{aligned}\varphi_1(0) &= |2000\rangle, \varphi_1(1) = |0200\rangle, \varphi_1(2) = |0020\rangle, \varphi_1(3) = |0002\rangle, \\ \varphi_2(0) &= |1100\rangle, \varphi_2(1) = |0110\rangle, \varphi_2(2) = |0011\rangle, \varphi_2(3) = |1001\rangle, \\ \varphi_3(0) &= |1010\rangle, \varphi_3(1) = |0101\rangle,\end{aligned}$$

$$N_1 = 3; N_2 = 3; N_3 = 1.$$

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:

$$\Psi_{m\xi} = \sum_{n=0}^{N_\xi} e^{i\mathbf{k}_m \mathbf{r}_n} A_\xi \varphi_\xi(n) = \sum_{n=0}^{N_\xi} e^{2i\pi m n / N_a} A_\xi \varphi_\xi(n), \quad (7.43)$$

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  $A_\xi$  определяются из условия ортонормированности новых базисных функций для конкретного импульса  $k_m$ :

$$\begin{aligned}\langle \Psi_{m\xi} \Psi_{m\eta} \rangle &= A_\xi^* A_\eta \sum_{n=0}^{N_\xi} \sum_{k=0}^{N_\eta} e^{2i\pi(mk - mn) / N_a} \langle \varphi_\xi(n) \varphi_\eta(k) \rangle = \\ &= A_\xi^* A_\eta \sum_{n=0}^{N_\xi} \sum_{k=0}^{N_\eta} e^{2i\pi(k-n)m / N_a} \delta_{\xi\eta} \delta_{nk} = |A_\xi|^2 \delta_{\xi\eta} \sum_{n=0}^{N_\xi} 1 = |A_\xi|^2 (N_\xi + 1) \delta_{\xi\eta},\end{aligned} \quad (7.44)$$

откуда

$$A_\xi = \frac{1}{\sqrt{N_\xi + 1}}. \quad (7.45)$$

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  $\xi$  (числу производящих функций). Точный размер каждого блока определяется числом всех классов  $\xi$ , 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  $\varphi_\xi$  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:

$$\Psi_m = \sum_{\xi} C_{\xi} \Psi_{m\xi} = \sum_{\xi} C_{\xi} \sum_{n=0}^{N_{\xi}} e^{\frac{2i\pi mn}{N_a}} \varphi_{\xi}(n), \quad (7.46)$$

где  $C_{\xi}$  — коэффициенты разложения, а суммирование по  $\xi$  проводится по всем классам, участвующим в данном секторе  $m$ . Далее,

$$\begin{aligned} T\Psi_m &= \sum_{\xi} C_{\xi} \sum_{n=0}^{N_{\xi}-1} e^{\frac{2i\pi mn}{N_a}} \varphi_{\xi}(n+1) + \sum_{\xi} C_{\xi} e^{\frac{2i\pi m N_{\xi}}{N_a}} \varphi_{\xi}(0) = \\ &= e^{-\frac{2i\pi m}{N_a}} \sum_{\xi} C_{\xi} \sum_{n=0}^{N_{\xi}} e^{\frac{2i\pi mn}{N_a}} \varphi_{\xi}(n) + \sum_{\xi} C_{\xi} \varphi_{\xi}(0) \left( e^{\frac{2i\pi m N_{\xi}}{N_a}} - e^{-\frac{2i\pi m}{N_a}} \right) = \\ &= e^{-\frac{2i\pi m}{N_a}} \Psi_m + \sum_{\xi} C_{\xi} \varphi_{\xi}(0) \left( e^{\frac{2i\pi m N_{\xi}}{N_a}} - e^{-\frac{2i\pi m}{N_a}} \right). \end{aligned} \quad (7.47)$$

Из (7.47) следует, что для того, чтобы функция  $\Psi_m$  являлась одновременно собственной функцией оператора трансляции и оператора импульса, т. е.

$$T\Psi_m = e^{-\frac{2i\pi m}{N_a}} \Psi_m, \quad (7.48)$$

необходимо, чтобы второе слагаемое в (7.47) было равно нулю, а значит,

$$\frac{2\pi m N_{\xi}}{N_a} = -\frac{2\pi m}{N_a} + 2\pi M, \quad (7.49)$$

где  $M$  — целое. Выражение (7.49) означает фактически условие на выбор классов  $\xi$ , участвующих в разложении (7.46):

$$m(N_{\xi} + 1) = MN_a. \quad (7.50)$$

Пользоваться условием (7.50) следует так: сначала выбираем конкретный сектор по импульсу  $m$  и перебираем все классы  $\xi$  так, чтобы для каждого класса (7.50) удовлетворялось для какого-нибудь значения  $M$ .

Например, если положить  $m = 0$ , то находим, что условию (7.50) удовлетворяют все пять классов из (7.41), (7.42), так как при  $M = 0$  (7.50) обращается в тождество, верное для любых  $N_{\xi}$ . Следовательно, размер блока в гамильтоновой матрице, отвечающего сектору импульсов  $m = 0$ , будет равен  $5 \times 5$ .

Далее при  $m = 1$  находим

$$N_{\xi} = N_a - 1 \quad \text{при} \quad M = 1. \quad (7.51)$$

Так как в (7.41), (7.42)  $N_\xi = 3 = N_a - 1$  для всех  $\xi$ , то и в этом случае условию (7.50) удовлетворяют все пять классов из (7.41), (7.42), и размер блока в гамильтоновой матрице, отвечающего сектору импульсов  $m = 1$ , также будет равен  $5 \times 5$ .

При  $m = 2$  имеем

$$N_\xi + 1 = \frac{MN_a}{2} = \begin{cases} \frac{N_a}{2} & \text{при } M = 1; \\ N_a & \text{при } M = 2. \end{cases} \quad (7.52)$$

В случае (7.41), (7.42) 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  $5 \times 5$ .

Аналогично находим, что и для последнего сектора по импульсу  $m = 3$  размер блока будет  $5 \times 5$ .

Таким образом, гамильтонова матрица разбивается на четыре блока размером  $5 \times 5$ :

$$H = \begin{pmatrix} \boxed{m=0} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \boxed{m=1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \boxed{m=2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \boxed{m=3} \end{pmatrix}. \quad (7.53)$$

Размер новой матрицы  $20 \times 20$  совпадает с размером гамильтоновой матрицы в базисе (7.37), так как общее число степеней свободы (размерность гильбертова пространства) системы не зависит от выбора базиса.

Для выше рассмотренного случая  $N_a = 4$ ,  $N = 2$  имеем:

1) сектор нулевого импульса  $m = 0$ . Здесь все классы удовлетворяют условию (7.49), поэтому размер блока в гамильтоновой матрице, соответствующего  $m = 0$ , будет  $3 \times 3$ ;

2)  $m = 1$ . В этом случае условию (7.50) удовлетворяют два класса  $\xi = 1$  и  $\xi = 2$ , т. е. размер соответствующего блока будет  $2 \times 2$ ;

3)  $m = 2$ . Согласно (7.51), в разложении участвуют все классы, и размер блока будет  $3 \times 3$ ;

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  $\xi = 1$  и  $\xi = 2$ , и размер блока  $2 \times 2$ .

В итоге гамильтонова матрица разбивается на четыре блока: два блока размером  $3 \times 3$  и два блока размером  $2 \times 2$ .

Рассмотрим более сложный случай. Пусть есть система из  $N = 8$  базисных 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
$R_m$	$810 \times 810$	$800 \times 800$	$808 \times 808$	$800 \times 800$	$809 \times 809$	$800 \times 800$	$808 \times 808$	$800 \times 800$

В этом случае классы  $\xi$  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 (7.49), в этот блок должны войти все классы  $\xi$ , их количество равно 810, это число и будет линейным размером этого блока.

Далее в сектор с импульсом  $m = 1$  согласно соотношению (7.50) войдут все классы с  $N_\xi = N_a - 1$ , т. е. первые 800 классов; для следующего сектора  $m = 2$ , согласно (7.51), 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  $m$ :

$$H_{\xi\eta} \equiv \langle \Psi_{m\eta} | H | \Psi_{m\eta} \rangle = \sum_{n=0}^{N_\xi} \sum_{k=0}^{N_\eta} \frac{e^{2\pi i(k-n)m/N_a} \langle \varphi_\xi(n) | H | \varphi_\eta(k) \rangle}{\sqrt{(N_\xi + 1)(N_\eta + 1)}}. \quad (7.54)$$

Если учесть трансляционную симметрию гамильтониана и узельных функций,

$$\begin{aligned} \langle \varphi_\xi(n) | H | \varphi_\eta(k) \rangle &= H_{\xi\eta} \equiv H_{\xi\eta_{n-1, k-1}} \equiv H_{\xi\eta_{0, k-n}} = \\ &= \langle \varphi_\xi(0) | H | \varphi_\eta(k-n) \rangle, \end{aligned} \quad (7.55)$$

то число слагаемых в (7.54) можно сократить в  $N_\xi$  раз:

$$H_{\xi\eta} = \frac{\sqrt{N_\xi + 1}}{\sqrt{N_\eta + 1}} \sum_{k=0}^{N_\eta} e^{2\pi i m k / N_a} \langle \varphi_\xi(0) | H | \varphi_\eta(k) \rangle. \quad (7.56)$$

Расчет матричных элементов (7.56) от диагональной части гамильтоновой матрицы в базисе  $\varphi$  приводит к следующему:

$$\begin{aligned} H_{\xi\eta}^{\text{diag}} &= \frac{\sqrt{N_\xi + 1}}{\sqrt{N_\eta + 1}} \sum_{k=0}^{N_\eta} e^{2\pi i m k / N_a} \langle \varphi_\xi(0) | H^{\text{diag}} | \varphi_\eta(k) \rangle = \\ &= \frac{\sqrt{N_\xi + 1}}{\sqrt{N_\eta + 1}} \sum_{k=0}^{N_\eta} e^{2\pi i m k / N_a} H_{\xi 0}^{\text{diag}} \delta_{\xi\eta} \delta_{k0} = H_{\xi 0}^{\text{diag}} \delta_{\xi\eta}. \end{aligned} \quad (7.57)$$

Матричные элементы  $H_{\xi 0}^{\text{diag}} = \langle \varphi_\xi(0) | H^{\text{diag}} | \varphi_\xi(0) \rangle$  в (7.57) — 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  $\varphi$  дает в общем случае ненулевые матричные элементы внутри всего блока, *в том числе и на главной диагонали*:

$$H_{\xi\xi}^{\text{nondiag}} = \sum_{k=0}^{N_\xi} e^{2\pi i m k / N_a} \langle \varphi_\xi(0) | H^{\text{nondiag}} | \varphi_\xi(k) \rangle \neq 0. \quad (7.58)$$

Докажем, что гамильтонова матрица в новом базисе также будет эрмитовой. Проще всего это получить из исходного выражения (7.54), применив операцию комплексного сопряжения:

$$H_{\eta\xi}^* = \sum_{n=0}^{N_\xi} \sum_{k=0}^{N_\eta} \frac{e^{-2\pi i (n-k)m / N_a} \langle \varphi_\eta(k) | H | \varphi_\xi(n) \rangle^*}{\sqrt{(N_\xi + 1)(N_\eta + 1)}}, \quad (7.59)$$

а с учетом того, что исходная матрица была эрмитова, т. е.

$$\langle \varphi_\eta(k) | H | \varphi_\xi(n) \rangle^* = \langle \varphi_\xi(n) | H | \varphi_\eta(k) \rangle, \quad (7.60)$$

получаем

$$H_{\eta\xi}^* = H_{\xi\eta}. \quad (7.61)$$

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.

Рассмотрим модель Бозе–Хаббарда с параметрами  $t = 1$ ,  $U = 2$  для системы из примера 1 ( $N_a = 4$ ,  $N = 2$ ):

$$H = -t \sum_{i=1}^4 (a_i^+ a_{i+1} + a_{i+1}^+ a_i) + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^4 n_i(n_i - 1) = H_{kin} + H_U.$$

Гамильтонова матрица этой системы в узельном базисе имеет вид

$$H = \begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2} & 2 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2} & -1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{2} & 2 & 0 & 0 & -\sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Разобьем теперь матрицу на блоки, соответствующие различным импульсам, для этого поставим в соответствие нумерацию исходного узельного базиса и нового:

Узельная функция	Класс $\xi$	Трансляция $n$	$N_\xi + 1$
$\Phi_{10} =  2000\rangle$	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  $m = 0$  отвечает блоку размером  $3 \times 3$ . Вклад от диагональных матричных элементов гамильтониана будет следующим:

$$\begin{aligned} H_{11}^{\text{diag}} &= \langle \varphi_1(0) | H_U | \varphi_1(0) \rangle = \langle \Phi_{10} | H_U | \Phi_{10} \rangle = 2; \\ H_{22}^{\text{diag}} &= \langle \varphi_2(0) | H_U | \varphi_2(0) \rangle = \langle \Phi_9 | H_U | \Phi_9 \rangle = 0; \\ H_{33}^{\text{diag}} &= \langle \varphi_3(0) | H_U | \varphi_3(0) \rangle = \langle \Phi_8 | H_U | \Phi_8 \rangle = 0. \end{aligned}$$

## 7.1. Конечные кластеры и трансляционная инвариантность

---

Теперь рассчитаем вклад от недиагональных матричных элементов:

$$\begin{aligned}
 H_{11}^{kin} &= \sum_{k=0}^{N_1} \langle \varphi_1(0) | H_{kin} | \varphi_1(k) \rangle = \\
 &= \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_{10} \rangle + \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_6 \rangle + \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_3 \rangle + \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_1 \rangle = 0, \\
 H_{12}^{kin} &= \frac{\sqrt{N_1 + 1}}{\sqrt{N_2 + 1}} \sum_{k=0}^{N_2} \langle \varphi_1(0) | H_{kin} | \varphi_2(k) \rangle = \\
 &= \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_9 \rangle + \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_5 \rangle + \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_2 \rangle + \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_7 \rangle = -2\sqrt{2}, \\
 H_{13}^{kin} &= \frac{\sqrt{N_1 + 1}}{\sqrt{N_3 + 1}} \sum_{k=0}^{N_3} \langle \varphi_1(0) | H_{kin} | \varphi_3(k) \rangle = \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_8 \rangle + \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_4 \rangle = 0; \\
 H_{23}^{kin} &= \frac{\sqrt{N_2 + 1}}{\sqrt{N_3 + 1}} \sum_{k=0}^{N_3} \langle \varphi_1(0) | H_{kin} | \varphi_3(k) \rangle = \\
 &= \langle \Phi_9 | H_{kin} | \Phi_8 \rangle + \langle \Phi_9 | H_{kin} | \Phi_4 \rangle = -2\sqrt{2}.
 \end{aligned}$$

Итоговая матрица действительна и имеет следующий вид:

$$m = 0 : \quad \begin{pmatrix} 2 & -2\sqrt{2} & 0 \\ -2\sqrt{2} & 0 & -2\sqrt{2} \\ 0 & -2\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}.$$

Проводим аналогичную процедуру для сектора  $m = 1$ , ему будет отвечать блок размера  $2 \times 2$ :

$$\begin{aligned}
 H_{11}^U &= 2; \quad H_{22}^U = 0; \\
 H_{11}^{kin} &= \sum_{k=0}^{N_1} e^{2\pi i m k / N_a} \langle \varphi_1(0) | H_{kin} | \varphi_1(k) \rangle = \\
 &= \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_{10} \rangle + e^{i\pi/2} \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_6 \rangle + e^{i\pi} \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_3 \rangle + \\
 &\quad + e^{3i\pi/2} \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_1 \rangle = 0; \\
 H_{12}^{kin} &= \frac{\sqrt{N_1 + 1}}{\sqrt{N_2 + 1}} \sum_{k=0}^{N_2} e^{\pi i k / 2} \langle \varphi_1(0) | H_{kin} | \varphi_2(k) \rangle = \\
 &= \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_9 \rangle + e^{i\pi/2} \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_5 \rangle + e^{i\pi} \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_2 \rangle + \\
 &\quad + e^{3i\pi/2} \langle \Phi_{10} | H_{kin} | \Phi_7 \rangle = \sqrt{2} (i - 1).
 \end{aligned}$$

Оставшиеся элементы получаются эрмитовым сопряжением полученных, итоговая матрица имеет вид

$$m = 1 : \quad \begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{2} (1 - i) \\ -\sqrt{2} (1 + i) & 0 \end{pmatrix}.$$

Аналогично получаем матрицы для остальных импульсов:

$$\begin{aligned}
 m = 2 : \quad &\begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{2} (1 - i) & 0 \\ -\sqrt{2} (1 + i) & 0 & -\sqrt{2} (1 + i) \\ 0 & -\sqrt{2} (1 - i) & 0 \end{pmatrix}; \\
 m = 3 : \quad &\begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{2} (1 + i) \\ -\sqrt{2} (1 - i) & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

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  $t = 1$ ,  $U = 2$ :

$$H = -t \sum_{i=1}^4 (a_i^+ a_{i+1} + a_{i+1}^+ a_i) + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^4 n_i (n_i - 1). \quad (7.62)$$

После диагонализации матрицы в узельном базисе находим спектр системы:

$$\begin{aligned} E_1 &= -4,84135, & E_{2,3} &= -2,10379, & E_4 &= -0,88573, \\ E_5 &= -0,00000, & E_6 &= 0,40943, & E_7 &= 0,80397; \dots \end{aligned} \quad (7.63)$$

Энергетические уровни отсортированы по возрастанию, но не по импульсам.

Применим процедуру разделения гамильтоновой матрицы на блоки, соответствующие определенным значениям импульса системы. С учетом (7.50) и (7.56) получаем четыре блока размером  $5 \times 5$ , соответствующие импульсам

$$k_m = \frac{2\pi}{N_a} m = \frac{1}{2}\pi m; \quad m = 0; 1; 2; 3. \quad (7.64)$$

После диагонализации каждого из блоков находим зависимость  $E(k)$  (табл. 7.1).

Таблица 7.1. 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. 7.1 с (7.63), то видно, что все уровни энергии отсортированы по импульсам. Полный нулевой импульс системы соответствует основному состоянию  $E_1$  и состоянию  $E_6$  (см. (7.63)). 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 звуковому возбуждению системы, отвечающему 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. 7.3. 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.

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 (7.56) сделать замену (см. п. 5.6):

$$2\pi i \frac{mn}{N_a} \longrightarrow 2\pi i \frac{(mn \pm \Phi/\Phi_0)}{N_a}, \quad (7.65)$$

при этом знак в (7.65) 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 (7.65) не нарушается.

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

$$H_{(\xi_x \xi_y \xi_z), (\eta_x \eta_y \eta_z)} = \sum_{k_x=0}^{N_{\eta_x}} \sum_{k_y=0}^{N_{\eta_y}} \sum_{k_z=0}^{N_{\eta_z}} \frac{\sqrt{N_{\xi_x} + 1}}{\sqrt{N_{\eta_x} + 1}} \cdot \frac{\sqrt{N_{\xi_y} + 1}}{\sqrt{N_{\eta_y} + 1}} \cdot \frac{\sqrt{N_{\xi_z} + 1}}{\sqrt{N_{\eta_z} + 1}} \times \\ \times e^{2\pi i \left( \frac{m_x k_x}{L_x} + \frac{m_y k_y}{L_y} + \frac{m_z k_z}{L_z} \right)} \langle \varphi_{\xi_x \xi_y \xi_z}(0) | H | \varphi_{\eta_x \eta_y \eta_z}(k_x, k_y, k_z) \rangle. \quad (7.66)$$

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.

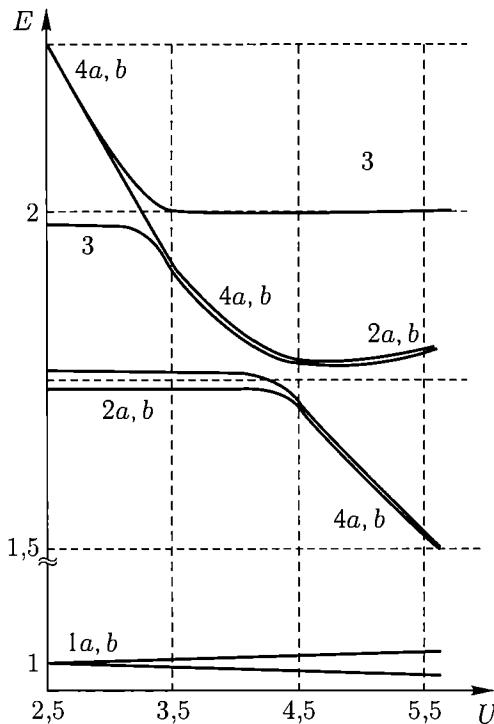


Рис. 7.3. Эволюция спектра с увеличением параметра взаимодействия  $U$  в модели Бозе — Хаббарда из [33]. Число узлов и частиц  $N_a = 11$ ,  $N = 7$  соответственно

Действительно, пусть есть гамильтонова матрица размера  $R \times R$ , и спектральная задача в матричном виде выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} H_{nm} &= \operatorname{Re}(H_{nm}) + i\operatorname{Im}(H_{nm}); \\ \operatorname{Re}(H_{nm}) &= \operatorname{Re}(H_{mn}); \quad \operatorname{Im}(H_{nm}) = -\operatorname{Im}(H_{mn}); \\ H_{mn}\Psi_m &= E\Psi_m, \quad \Psi = \operatorname{Re}(\Psi) + i\operatorname{Im}(\Psi). \end{aligned} \quad (7.67)$$

Можно показать, что задача (7.67) эквивалентна следующей задаче:

$$A_{nm}\Phi_m = E\Phi_m;$$

$$A_{nm} = \begin{pmatrix} \boxed{\operatorname{Re}(H)} & \boxed{-\operatorname{Im}(H)} \\ \boxed{\operatorname{Im}(H)} & \boxed{\operatorname{Re}(H)} \end{pmatrix}; \quad \Phi = \begin{pmatrix} \boxed{\operatorname{Re}(\Psi)} \\ \boxed{\operatorname{Im}(\Psi)} \end{pmatrix}. \quad (7.68)$$

Здесь матрица  $A$  составлена из блоков, состоящих из действительной и мнимой частей гамильтоновой матрицы, а векторы  $\Phi$  составлены из действительной и мнимой частей исходных волновых функций  $\Psi$ .

В справедливости (7.68) 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 (7.68):

$$E = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & E_2 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & E_R & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & E_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & E_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ 0 & 0 & & 0 & 0 & 0 & \dots & E_R \end{pmatrix}. \quad (7.69)$$

## 7.2. 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  $R = \frac{23!}{12! \cdot 11!} = 1352078$  (см. (5.2)). 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  $(\lambda, x)$ , где  $\lambda$  – 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.

**7.2.1. 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:

$$(x, y) = y^T x = \sum_{i=1}^n y_i x_i. \quad (7.70)$$

Множество  $S = \{s_1, s_2, \dots\}$  векторов размера  $n$  определяет *подпространство*  $\Sigma$  пространства  $E^n$ , являющееся множеством всех векторов, представимых в виде линейной комбинации  $s_1, s_2, \dots$ . Подпространство  $\Sigma$  называется *линейной оболочкой*, натянутой на векторы  $s_1, s_2, \dots$ . Указанному определению соответствует сокращенная запись

$$\Sigma = \text{span}(s_1, s_2, \dots) = \text{span}(S). \quad (7.71)$$

Множество  $S$  называется *образующим множеством* подпространства  $\Sigma$ . 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 ортонормированы, то базис называется *ортонормированным*. Подпространство  $\Sigma$  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  $\Sigma$  *инвариантно относительно*  $A$ , если для любого вектора  $x$  из  $\Sigma$  следует, что вектор  $Ax$  также принадлежит  $\Sigma$ . 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  $\Sigma$ , 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  $\Sigma$ : 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  $\Sigma$* . Таким образом,

$$AC = QC. \quad (7.72)$$

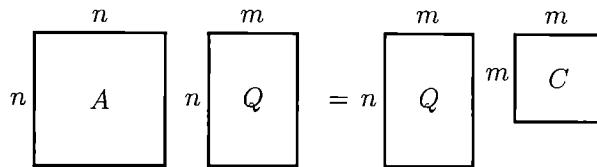


Рис. 7.4. Матрица Рэлея

Если столбцы матрицы  $Q$  образуют ортонормированный базис  $\Sigma$ , то

$$Q^T Q = I_m, \quad (7.73)$$

где  $I_m$  — единичная матрица порядка  $m$ , и

$$C = Q^T A Q \quad (7.74)$$

является симметричной матрицей, которая называется *матрицей Рэлея*. Пусть  $(\lambda, y)$  — собственная пара матрицы  $C$ , т. е.

$$Cy = \lambda y. \quad (7.75)$$

Тогда, умножая слева на  $Q$ , получаем  $QCy = \lambda Qy$ , или

$$A(Qy) = \lambda(Qy), \quad (7.76)$$

т. е.  $\lambda$  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  $\Sigma$  инвариантно относительно  $A$ . Однако такое подпространство нельзя выбрать заранее, так как это было бы равносильно нахождению собственных значений матрицы  $A$ . Обычно подпространство  $\Sigma$  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

$$H = Q^T A Q. \quad (7.77)$$

Здесь матрица Рэлея обозначена через  $H$ , чтобы подчеркнуть, что соотношение (7.72) 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  $H$ ,  $(\mu_i, h_i)$ ,  $i = 1, \dots, k$ . Таким образом,

$$H h_i = \mu_i h_i; \quad (7.78)$$

3) полученные значения Ритца  $\mu_i$  будут наилучшими приближениями к собственным значениям матрицы  $A$ , а векторы Ритца  $x_i = Q h_i$  — соответствующими приближениями к собственным векторам этой матрицы.

**7.2.2. Алгоритм Ланцоша.** Алгоритм Ланцоша реализуется в том случае, когда «почти» инвариантное подпространство  $\Sigma$ , в котором строятся аппроксимации Рэлея–Ритца, выбирается в виде *подпространства Крылова*.

Для произвольного ненулевого вектора  $b$  подпространство Крылова определяется следующим образом:

$$K^m = \text{span}(b, Ab, A^2b, \dots, A^{m-1}b). \quad (7.79)$$

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

$$u = \sum_{k=1}^m u_k(A)^{k-1} b. \quad (7.80)$$

Соответственно,

$$Au = \sum_{k=1}^m u_k(A)^k b, \quad (7.81)$$

причем все слагаемые в (7.81), 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 означает, что  $K^m$  почти инвариантно относительно  $A$ , причем близость  $K^m$  к инвариантному подпространству улучшается с увеличением  $m$ .

Выбор подпространства в виде (7.79) позволяет использовать следующие свойства.

### 1. Матрица Рэлея

$$T = Q^T A Q \quad (7.82)$$

является трехдиагональной; вычисление пар Ритца для трехдиагональных матриц — существенно более простая задача по сравнению с задачей на собственные пары для произвольных симметрических 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 (7.79) линейно независимы. Необходимо помнить, что  $Q_m$  — прямоугольная матрица размера  $n \times m$  с ортонормальными столбцами, т. е.

$$Q_m^T Q_m = I_m. \quad (7.83)$$

Из (7.82) и (7.83) 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:

$$AQ_m = Q_m T_m + R_m, \quad (7.84)$$

где  $R_m$  — матрица невязки, структура этой матрицы для случая  $m = 4$  показана на рис. 7.5.

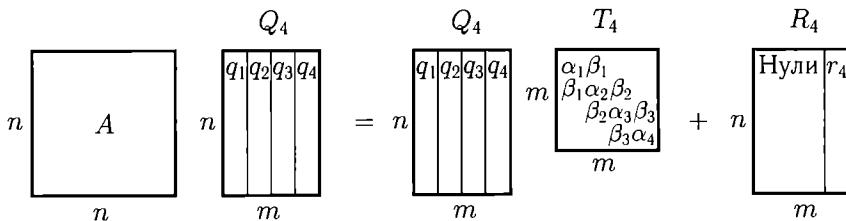


Рис. 7.5. Графическое представление алгоритма Ланцоша в случае  $m = 4$

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

$$q_i^T A q_j = 0; \quad j < i - 1. \quad (7.85)$$

Кроме того, матрица  $T_m$  является симметричной, а следовательно, учитывая (7.85), и трехдиагональной.

Из рис. 7.5 для частного случая  $m = 4$  непосредственно видно, что

$$\begin{cases} Aq_1 = \alpha_1 q_1 + \beta_1 q_2, \\ Aq_2 = \beta_1 q_1 + \alpha_2 q_2 + \beta_2 q_3, \\ Aq_3 = \beta_2 q_2 + \alpha_3 q_3 + \beta_3 q_4, \\ Aq_4 = \beta_3 q_3 + \alpha_4 q_4 + r_4. \end{cases} \quad (7.86)$$

Из определения матрицы  $T_m$  получаем, что

$$\alpha_4 = q_4^T A q_4; \quad \beta_3 = q_3^T A q_4. \quad (7.87)$$

Последнее из уравнений (7.86), таким образом, можно записать в виде

$$r_4 = Aq_4 - (q_3^T A q_4) q_3 - (q_4^T A q_4) q_3, \quad (7.88)$$

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,

$$q_5 = \frac{r_4}{\beta_4}; \quad \beta_4 = \|r_4\|. \quad (7.89)$$

Полагая для удобства  $q_0 = 0$ , получаем рекуррентное соотношение

$$Aq_i = \beta_{i-1} q_{i-1} + \alpha_i q_i + \beta_i q_{i+1}; \quad i \leq m. \quad (7.90)$$

В случае  $i = m$  (7.90) определяет вектор невязки  $r_m = \beta_m q_{m+1}$ .

Сформулируем теперь алгоритм Ланцша в явном виде. Стартовый вектор  $b$  выбирается либо в произвольном виде, либо с использованием априорной информации о собственных векторах матрицы  $A$ . Полагаем

$$q_0 = 0; \quad r_0 = b; \quad \beta_0 = \|b\|. \quad (7.91)$$

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  $(\mu_i, x_i)$ , аппроксимирующие собственные пары матрицы  $A$ , получаются посредством решения задачи на собственные значения для матрицы  $T_m$ :

$$T_m h_i = \mu_i h_i; \quad i = 1, 2, \dots, k, \quad k \leq m, \quad (7.92)$$

с последующим вычислением

$$x_i = Q_m h_i. \quad (7.93)$$

Для контроля сходимости хорошим критерием служит норма вектора невязки  $Ax_i - \mu_i x_i$ , равная

$$\|Ax_i - \mu_i x_i\| = \|(AQ_m - Q_m T_m)h_i\| = \|R_m h_i\| = \|r_m h_{im}\| = \beta_m |h_{im}|. \quad (7.94)$$

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.

### 7.3. 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

Ф. Оператор тока в представлении чисел заполнения уже рассматривался в п. 5.6; представим его, разложив до первого порядка по фазе:

$$\begin{aligned} j_x &= -\frac{\partial H}{\partial A_x} = \frac{ite}{\hbar c} \sum_i \left( a_i^+ a_{i+\mathbf{e}_x} e^{\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L}} - a_{i+\mathbf{e}_x}^+ a_i e^{-\frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L}} \right) = (\Phi > 0) \cong \\ &\cong \frac{ite}{\hbar c} \left( \sum_i (a_i^+ a_{i+\mathbf{e}_x} - a_{i+\mathbf{e}_x}^+ a_i) + \frac{2\pi i \Phi}{\Phi_0 L} \sum_i (a_i^+ a_{i+\mathbf{e}_x} + a_{i+\mathbf{e}_x}^+ a_i) \right). \end{aligned} \quad (7.95)$$

Введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned} j_x^P(i) &= \frac{it}{\hbar c} (a_i^+ a_{i+\mathbf{e}_x} - a_{i+\mathbf{e}_x}^+ a_i); \\ k_x(i) &= -t (a_i^+ a_{i+\mathbf{e}_x} + a_{i+\mathbf{e}_x}^+ a_i). \end{aligned} \quad (7.96)$$

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

$$\mathbf{a}_x(i) = \frac{\Phi \mathbf{e}_x}{L}, \quad (7.97)$$

поэтому плотность полного тока согласно (7.95) можно переписать следующим образом:

$$j_x(i) = -\frac{\partial H}{\partial A_x(i)} = ej_x^P(i) + e^2 k_x(i) A_x(i). \quad (7.98)$$

Используем далее известную формулу линейного отклика — соотношение Кубо (см., например, [35, 36]). Согласно этому соотношению, если на систему действует внешнее возмущение

$$V(t) = -xf(t), \quad (7.99)$$

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  $\bar{x}(\omega)$  и силы  $f(\omega)$ :

$$\bar{x}(\omega) = \alpha(\omega) f(\omega). \quad (7.100)$$

Величина  $\alpha(\omega)$  называется обобщенной восприимчивостью и равна

$$\begin{aligned} \alpha(\omega) &= \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty e^{i\omega t} \langle x_0(t) x_0(0) - x_0(0)x_0(t) \rangle dt; \\ x_0(t) &= e^{itH_0/\hbar} x e^{-itH_0/\hbar}. \end{aligned} \quad (7.101)$$

Здесь  $x_0(t)$  — гейзенберговский оператор, определяемый по невозмущенному гамильтониану  $H_0$  (т. е. без учета силы  $f$ ). В частности, величина  $\alpha(\omega)$  будет являться 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 (7.96) может быть записан в таком виде:

$$V = - \sum_i \left( ej_x^P(i) A_x(i) + \frac{e^2 k_x(i) A_x^2(i)}{2} \right). \quad (7.102)$$

Несложно убедиться в справедливости соотношения (7.98). 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:

$$\begin{aligned} A_x(l, t) &= \operatorname{Re}(A_x(q, \omega) e^{i\mathbf{q}\mathbf{l}-i\omega t}); \\ j_x(l, t) &= \operatorname{Re}(j_x(q, \omega) e^{i\mathbf{q}\mathbf{l}-i\omega t}). \end{aligned} \quad (7.103)$$

Тогда, согласно соотношению Кубо, имеем:

$$\begin{aligned} \langle j_x(q, \omega) \rangle &= -e^2 (\langle -k_x \rangle - \Lambda_{xx}(q, \omega)) A_x(q, \omega); \\ \Lambda_{xx}(q, \omega) &= \frac{i}{\hbar N_a} \int_0^\infty dt e^{(i\omega-\delta)t} \left. \langle j_x^P(q, t) j_x^P(-q, 0) \rangle \right|_{\delta>0}; \\ \langle j_x^P(q, t) j_x^P(-q, 0) \rangle &= j_x^P(q, t) j_x^P(-q, 0) - j_x^P(-q, 0) j_x^P(q, t); \\ j_x^P(q) &= \sum_l e^{-i\mathbf{q}\mathbf{l}} j_x^P(l); \quad \langle k_x \rangle = \frac{1}{N_a} \left\langle \sum_l k_x(l) \right\rangle. \end{aligned} \quad (7.104)$$

Средние значения в (7.104) понимаются в термодинамическом смысле:

$$\langle \dots \rangle \equiv \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | \dots | n \rangle e^{-E_n \beta}, \quad (7.105)$$

где  $\beta = 1/T$  — обратная температура.

Далее, учитывая связь векторного потенциала и напряженности электрического поля в длинноволновом пределе

$$A_x(q=0, \omega) = \left. \frac{E_x(q=0, \omega)}{i(\omega + i\delta)} \right|_{\delta \rightarrow 0}, \quad (7.106)$$

находим окончательно выражение для проводимости:

$$\sigma(\omega) = -e^2 \left. \frac{\langle -k_x \rangle - \Lambda_{xx}(q=0, \omega)}{i(\omega + i\delta)} \right|_{\delta \rightarrow 0}. \quad (7.107)$$

Таким образом, для расчета проводимости следует получить коррелятор «ток-ток»  $\Lambda_{xx}$ , зависящий от времени. Для вычисления выражения (7.104) следует учесть, что временная зависимость операторов понимается в гейзенберговском смысле:

$$B(t) = e^{\frac{iHt}{\hbar}} B(0) e^{-\frac{iHt}{\hbar}}, \quad (7.108)$$

так что временные средние в (7.104) имеют вид:

$$\begin{aligned} \langle j(q, t) j(-q, 0) \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{nm} \langle n | j(q, 0) | m \rangle \langle m | j(-q, 0) | n \rangle e^{\frac{i(E_n - E_m)t}{\hbar} - \frac{E_n}{T}} = \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{nm} |\langle n | j(q, 0) | m \rangle|^2 e^{\frac{i(E_n - E_m)t}{\hbar} - E_n \beta}. \end{aligned} \quad (7.109)$$

Окончательно, для нахождения проводимости следует решить сначала спектральную задачу в отсутствие фазы, найти собственные энергии и волновые функции системы, а затем рассчитать временные корреляторы (7.109) и подставить их в соотношение (7.104).

При низких температурах ( $\beta \rightarrow \infty$ ) главный вклад в (7.104) будет давать основное состояние, а также матричные элементы между основным состоянием и ближайшими возбужденными. Величина  $\Lambda_{xx}$  преобразуется в сумму дельта-функций, и наиболее сложная задача состоит в корректном расчете следующего спектрального коррелятора:

$$\sum_m |\langle m | j(q, 0) | 0 \rangle|^2 \delta(E_m - E_0 - \omega). \quad (7.110)$$

Выражение (7.110) можно вычислять непосредственно в процессе применения алгоритма Ланцоша, который с высокой точностью определяет несколько возбужденных состояний над основным.

Выражение (7.110) 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:

$$\sum_k f(\varepsilon_k), \quad (7.111)$$

где  $\varepsilon_k$  — 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 (7.111) по каждой проекции импульса, удобнее ввести плотность

состояний  $N(\varepsilon)$ :

$$\sum_k f(\varepsilon_k) = \int N(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon; \quad N(\varepsilon) = \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k). \quad (7.112)$$

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 (7.112) 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:

$$N(\omega) = \sum_k A(k, \omega), \quad (7.113)$$

где спектральная плотность  $A(k, \omega)$  системы при нулевой температуре имеет вид (см., например, [37, 38])

$$A(k, \omega) = \sum_{n\sigma} |\langle \Psi_n(N+1) | a_{k\sigma}^+ | \Psi_0(N) \rangle|^2 \delta(\omega - E_n(N+1) + E_0(N)) + \\ + \sum_{n\sigma} |\langle \Psi_n(N-1) | a_{k\sigma}^- | \Psi_0(N) \rangle|^2 \delta(\omega + E_n(N-1) - E_0(N)), \quad (7.114)$$

где  $a_{k\sigma}$  — оператор уничтожения частицы со спином  $\sigma$  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 (7.114) можно переписать в более удобном виде, перейдя от импульсного представления к узельным операторам:

$$N(\omega) = \sum_{i\sigma} (g_{i\sigma}^+(\omega) + g_{i\sigma}^-(\omega)), \quad (7.115)$$

где  $g_{i\sigma}^+(\omega)$  — парциальные вклады от узла  $i$ :

$$g_{i\sigma}^+(\omega) = \sum_{n\sigma} |\langle \Psi_n(N+1) | a_{i\sigma}^+ | \Psi_0(N) \rangle|^2 \delta(\omega - E_n(N+1) + E_0(N)), \quad (7.116)$$

$$g_{i\sigma}^-(\omega) = \sum_{n\sigma} |\langle \Psi_n(N-1) | a_{i\sigma}^- | \Psi_0(N) \rangle|^2 \delta(\omega - E_n(N-1) + E_0(N)). \quad (7.117)$$

Величина  $g_{i\sigma}^+(\omega)$  описывает состояния, которые могут заполняться фермионами со спином  $\sigma$ , а  $g_{i\sigma}^-(\omega)$  — состояния, заполняемые дырками (вакантными

местами). Интегралы от  $g_{i\sigma}^+(\omega)$  и  $g_{i\sigma}^-(-\omega)$  по энергии  $\omega$  дают средние числа заполнения фермионов и дырок со спином  $\sigma$  соответственно.

Рассмотрим величину

$$\Delta = \mu^+ - \mu^-, \quad (7.118)$$

где

$$\mu^+ = E_0(N+1) - E_0(N); \quad \mu^- = E_0(N) - E_0(N-1). \quad (7.119)$$

По физическому смыслу величина  $\mu^+$  — химический потенциал, равный приращению энергии к энергии основного состояния системы за счет добавления одной частицы, а  $\mu^-$  — химический потенциал, равный приращению энергии к энергии основного состояния системы при удалении одной частицы. Как следует из (7.116), (7.117), заполняемые фермионами состояния находятся в интервале энергий  $\omega > \mu^+$ , а состояния, заполняемые дырками, — в интервале  $\omega < \mu^-$ , что позволяет рассматривать величину  $\Delta$  из (7.118) как щель в спектре возбуждений. Если эта величина меньше нуля, то щели в спектре нет, и плотность состояний непрерывна как функция энергии.

Из (7.116), (7.117) видно, что как и при расчете проводимости необходимо вычислить сложный спектральный коррелятор вида

$$\sum_{n\sigma} |\langle \Psi_n(N \pm 1) | a_{i\sigma}^+ | \Psi_0(N) \rangle|^2 \delta(\omega - E_n(N \pm 1) + E_0(N)) \quad (7.120)$$

и, в отличие от выражения (7.110), здесь матричные элементы рассчитываются между состояниями с различным числом частиц. Тем не менее, выражение (7.120) 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 ((7.110)) и ((7.120))) следует рассчитывать сумму дельта-функций, умноженных на скалярное произведение некоторого 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 (7.110) и (7.120) 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.

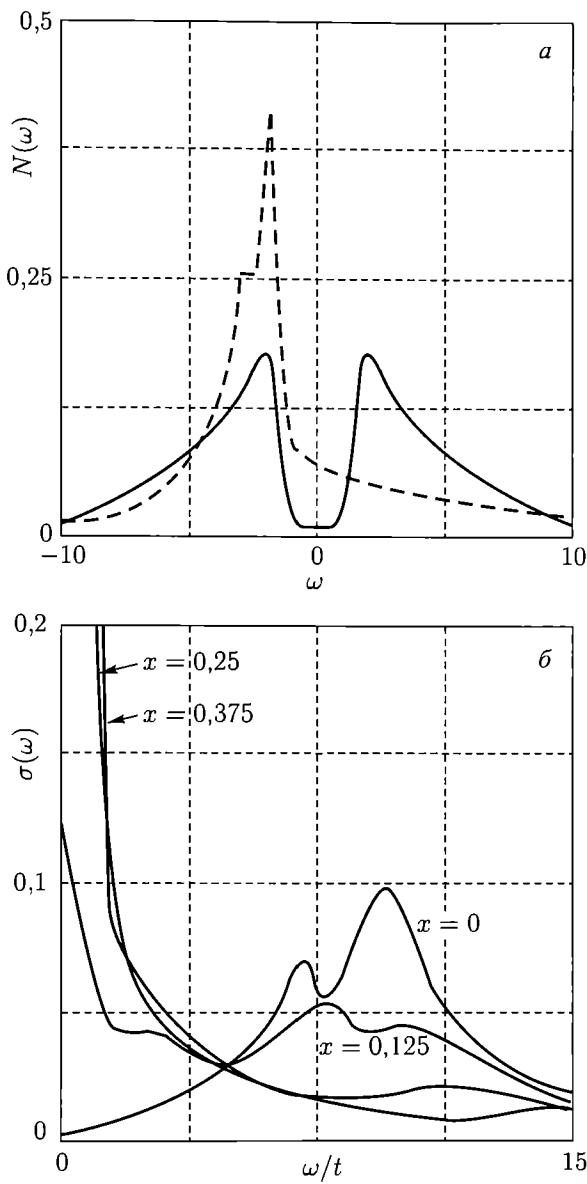


Рис. 7.6. Расчет проводимости  $\sigma(\omega)$  (а) и плотности состояний  $N(\omega)$  (б) для двумерной модели Хаббарда  $4 \times 4$  из [54]

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 (7.120) или проводимость (7.110)) в таком подходе можно представить следующей функцией энергии  $\omega$ :

$$\begin{aligned}\rho(\omega) &= C \sum_k f[(u, x_k)] \delta(\lambda_k - \omega); \\ \delta(E) &\approx \frac{1}{\pi} \left( \frac{\sigma}{E^2 + \sigma^2} \right)_{|\sigma \rightarrow 0},\end{aligned}\tag{7.121}$$

где  $C$  — нормирующий множитель;  $(u, x_k)$  — скалярное произведение вектора  $u$  с собственными векторами гамильтониана;  $f(x)$  — некоторая простая функция (например,  $x^2$ ),  $\sigma$  — параметр задачи, величина которого сопоставима с расстоянием между собственными числами  $\lambda_k$  гамильтониана. При определении выражения (7.121) 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  $u$ , как правило, мал (их амплитуда определяется вычислительными ошибками), и следовательно, паразитические векторы не влияют на результат расчета коррелятора.

На рис. 7.6 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  $\langle n \rangle = 1$ .

## **Часть III**

# **ТЕРМОДИНАМИКА. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО**

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.

В третьей части книги представлены различные описания системы — микроканонический, канонический и большой канонический ансамбли, показаны функции распределения Бозе–Эйнштейна, Ферми–Дирака и Больцмана, сформулирована термодинамическая задача для невзаимодействующих Бозе- и Ферми-газов. Далее обсуждаться метод Монте–Карло для математики и физики, принцип детального равновесия, формулировка метода Монте–Карло для реальных взаимодействующих физических моделей. Продемонстрированы методы корректной оценки погрешности расчета, автокорреляционного анализа, показана возможность формулировки метода Монте–Карло с помощью высокотемпературного разложения.

## Глава 8

# СТАТИСТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ СИСТЕМ МНОГИХ ЧАСТИЦ

Самой важной статистической характеристикой системы, которая, разумеется, зависит от внешних условий, в которых находится система, является **функция распределения** (или функция статистического распределения)  $\rho$ , 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  $\Omega$  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:

$$\langle f \rangle = \frac{\int f(\Omega) \rho(\Omega) d\Omega}{\int \rho(\Omega) d\Omega}. \quad (8.1)$$

Интегрирование в (8.1) производится по всему фазовому пространству. Такое соотношение справедливо как для классического, так и для квантового описания. Нормировочный множитель

$$Z = \int \rho(\Omega) d\Omega \quad (8.2)$$

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 представима 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  $\Psi$  можно разложить по этим базисным функциям:

$$\Psi = \sum_n a_n \varphi_n. \quad (8.3)$$

Среднее значение любой физической величины  $f$  может быть вычислено следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle f \rangle &= \int \Psi^*(\Omega) \hat{f} \Psi(\Omega) d\Omega = \sum_{nm} a_n^* a_m f_{nm}; \\ f_{nm} &= \int \varphi_n^* \hat{f} \varphi_m d\Omega, \end{aligned} \quad (8.4)$$

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 (8.4), основную информацию несет теперь матрица коэффициентов разложения

$$c_{mn} = a_n^* a_m, \quad (8.5)$$

которая и представляет собой *матрицу плотности* в энергетическом представлении, или *статистическую матрицу*. Можно также представить  $c_{mn}$  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 (8.4), но оно может оказаться достаточным для задач статистической физики. Заметим, что теперь любое среднее

$$\langle f \rangle = \sum_{nm} c_{mn} f_{nm} \quad (8.6)$$

можно записать в виде суммы диагональных элементов (следа матрицы) произведения операторов  $\hat{c}$  и  $\hat{f}$ :

$$\langle f \rangle = \sum_{nm} c_{mn} f_{nm} = \sum_n (\hat{c} \hat{f})_{nn} = \text{Tr} (\hat{c} \hat{f}). \quad (8.7)$$

Из (8.7) следует, что результат не зависит от исходного базиса, и может быть получен в различных представлениях, не обязательно в собственно-энергетическом.

Диагональные элементы матрицы плотности имеют смысл вероятности нахождения системы в соответствующем состоянии:

$$\rho_n = c_{nn} = |a_n|^2 \quad (8.8)$$

при условии нормировки

$$\sum_n |a_n|^2 = \sum_n c_{nn} = \text{Tr} \rho = 1. \quad (8.9)$$

Последнее выражение представляет собой статистическую сумму (8.2). Соответственно, диагональные элементы (8.8) являются квантовыми аналогами классической плотности распределения.

Выведем уравнение временной эволюции матрицы плотности. При учете временной эволюции системы разложение полной волновой функции системы по базису (8.3) сохраняется в любой момент времени, но каждый коэффициент разложения  $a_n$  будет зависеть от времени:

$$\Psi(t) = \sum_n a_n(t) \varphi_n. \quad (8.10)$$

Подставляя это выражение во временное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = H\Psi, \quad (8.11)$$

и используя ортонормированность волновых функций  $\varphi$ , получаем:

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = \sum_m a_m(t) H_{nm}, \quad H_{nm} = \int \varphi_n^*(\Omega) H \varphi_m(\Omega) d\Omega. \quad (8.12)$$

Комбинируя соотношение (8.12) с комплексно-сопряженным

$$-i\hbar \frac{da_m^*}{dt} = \sum_k a_k^*(t) H_{km}. \quad (8.13)$$

(При выводе (8.13) использовано свойство эрмитовости гамильтониана), находим следующее уравнение для матрицы плотности:

$$i\hbar \frac{dc_{nm}}{dt} = \sum_k (H_{nk}c_{km} - c_{nk}H_{km}) \Rightarrow i\hbar \frac{d\hat{c}}{dt} = (\hat{H}\hat{c} - \hat{c}\hat{H}) = [\hat{H}, \hat{c}]. \quad (8.14)$$

Этот результат — не что иное, как *квантовый аналог теоремы Лиувилля*. Действительно, в классической механике требование стационарности функции распределения приводит к тому, что плотность распределения  $\rho$  является интегралом движения. В квантовом случае из выражения (8.14) 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 собственно-энергетическом представлении *должна быть диагональна*.

Рассмотрим теперь кратко три основных статистических описания квантовых систем.

## 8.1. Микроканонический ансамбль

Рассмотрим какую-либо *замкнутую систему* и выберем в качестве базисных функций собственные функции этой системы  $\varphi_n(\Omega)$ . Временная эволюция коэффициентов разложения (8.12) тогда будет выглядеть следующим образом:

$$a_n(t) = a_n(0) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (8.15)$$

где  $E_n$  — значения энергии системы, соответствующие собственным функциям  $\varphi_n$ .

Соответственно, из (8.14) находим временную зависимость статистической матрицы:

$$c_{nm}(t) = c_{nm}(0) e^{-i\omega_{nm}t}, \quad \omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}. \quad (8.16)$$

Таким образом, в замкнутой системе диагональные элементы статистической матрицы не зависят от времени, и, следовательно, сохраняются:

$$\frac{dc_{nn}}{dt} = 0 \Rightarrow \rho_n = c_{nn} = \text{const.} \quad (8.17)$$

Среднее любой физической величины, сохраняющее свое значение в достаточно длительный промежуток времени, может быть, таким образом, рассчитано только из диагональной части статистической матрицы:

$$\langle f \rangle = \sum_n \rho_n f_{nn}. \quad (8.18)$$

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  $\rho_n$ . Как известно [36], энергия и логарифм матрицы плотности являются аддитивными величинами и связаны линейным соотношением

$$\ln \rho_n = \alpha + \beta E_n, \quad (8.19)$$

где  $\alpha, \beta$  — 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

$$\rho_n = \text{const} \times \delta(E - E_n) d\Omega. \quad (8.20)$$

## 8.2. 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

$$W(E) dE = \rho d\Omega \quad (8.21)$$

с условием нормировки

$$\int W(E) dE = 1. \quad (8.22)$$

Для макроскопического тела в равновесном состоянии вероятность распределения по энергии имеет резкий максимум вблизи среднего значения  $\langle E \rangle$  с малым разбросом  $\Delta E$  масштаба среднеквадратичной флюктуации (рис. 8.1). Тогда с высокой точностью с учетом (8.22) можно написать

$$W(\langle E \rangle) \Delta E = 1. \quad (8.23)$$

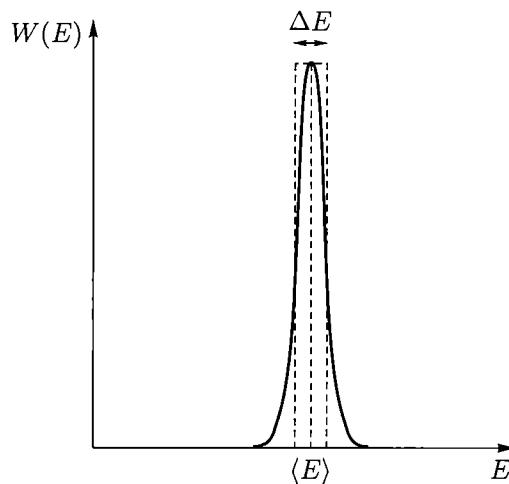


Рис. 8.1. Для макроскопического тела в равновесном состоянии вероятность распределения по энергии имеет резкий максимум вблизи среднего значения

Используя (8.21), перепишем (8.23) следующим образом:

$$\rho(\langle E \rangle) \Delta\Omega = 1; \quad \Delta\Omega = \frac{d\Omega(\langle E \rangle)}{dE} \Delta E. \quad (8.24)$$

Таким образом, интервалу  $\Delta E$  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

$$S = \ln \Delta\Omega \quad (8.25)$$

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 (8.19), имеем

$$\ln \rho(\langle E \rangle) = \alpha + \beta \langle E \rangle = \langle \ln \rho(E) \rangle. \quad (8.26)$$

Далее,

$$S = \ln \Delta \Omega = -\ln \rho(\langle E \rangle) = -\langle \ln \rho(E) \rangle = -\sum_n \rho(E_n) \ln \rho(E_n). \quad (8.27)$$

Таким образом, согласно (8.27) и (8.24) находим

$$\frac{d\Omega(\langle E \rangle)}{dE} = \frac{e^{s(\langle E \rangle)}}{\Delta E}. \quad (8.28)$$

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  $\Omega$ , и термостат с энергией  $E_0$  и степенями свободы  $\Omega_0$  вместе являются замкнутой системой с полной энергией  $E$ . Тогда имеет место микроканоническое распределение:

$$\rho(E) = \text{const} \times \delta(E - E_0 - E_n) d\Omega d\Omega_0. \quad (8.29)$$

Для того, чтобы из этого распределения выделить только степени свободы системы, следует проинтегрировать (8.29) по степеням свободы термостата:

$$\begin{aligned} \rho(E_n) &\sim \int \delta(E - E_0 - E_n) d\Omega_0 = \int \delta(E - E_0 - E_n) \frac{d\Omega_0}{dE_0} dE_0 = \\ &= \int \delta(E - E_0 - E_n) \frac{e^{S(E_0)}}{\Delta E_0} dE_0 = \frac{e^{S(E-E_n)}}{\Delta E_0}. \end{aligned} \quad (8.30)$$

Заметим, что согласно (8.30) вероятность реализации состояний пропорциональна множителю  $e^S$ . Следовательно, если система стремится к равновесию, она будет занимать состояния  $E_n$ , имеющие все бульшую вероятность, и, соответственно, все бульшую 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 (8.30) по малому параметру  $\frac{E_n}{E} \ll 1$ :

$$S(E - E_n) \cong S(E) - \frac{dS(E)}{dE} E_n. \quad (8.31)$$

Таким образом, распределение системы по энергиям  $E_n$  имеет вид

$$\rho(E_n) \sim e^{-\frac{dS(E)}{dE} E_n}. \quad (8.32)$$

Введем теперь понятие *температуры* как обратной производной энтропии по энергии:

$$T = \left( \frac{dS}{dE} \right)^{-1}, \quad (8.33)$$

где 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 неубывания энтропии. Более того, из-за постоянства полной энергии энтропия является функцией только одной величины (например,  $E_1$ ), поэтому

$$S = S_1(E_1) + S_2(E - E_1) \Rightarrow \frac{dS}{dE_1} = \frac{dS_1}{dE_1} + \frac{dS_2}{dE_2} \frac{dE_2}{dE_1} = \frac{dS_1}{dE_1} - \frac{dS_2}{dE_2} = 0. \quad (8.34)$$

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.

$$T_1 = T_2, \quad T_\alpha = \left( \frac{dS_\alpha}{dE_\alpha} \right)^{-1}, \quad \alpha = 1, 2. \quad (8.35)$$

Таким образом, состояние термодинамического равновесия характеризуется постоянной температурой всех частей замкнутой системы.

Окончательно, с учетом (8.33), каноническое распределение по энергии имеет вид знаменитого *распределения Гиббса*

$$\rho_n = \text{const} \times e^{-E_n/T}, \quad (8.36)$$

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.

### 8.3. Большой канонический ансамбль

Рассмотрим теперь ситуацию, когда между выделенной системой и термостатом, кроме выравнивания температур, происходит также обмен частицами, так что полное число частиц  $N$  флюкутирует 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,  $\rho_{nN}$  есть вероятность нахождения системы с  $N$  частицами в  $n$ -м состоянии.

Энтропия системы теперь также является функцией энергии и числа частиц, так что соотношение (8.30) обобщается следующим образом:

$$\rho_{nN} \equiv \rho(E_{nN}, N) \sim \frac{e^{S(E - E_{nN}, N_0 - N)}}{\Delta E_0}. \quad (8.37)$$

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 (8.37) по малым параметрам  $\frac{E_{nN}}{E}$  и  $\frac{N}{N_0}$  с точностью до линейного приближения:

$$S(E - E_{nN}, N_0 - N) \cong S(E, N_0) - \delta S(E_{nN}, N). \quad (8.38)$$

Перед тем, как вычислить вариацию энтропии в (8.38), уточним понятие температуры, введенное ранее в (8.33). Температура в случае большого канонического ансамбля вводится как обратная термодинамическая производная от энтропии при постоянном числе частиц:

$$\frac{1}{T} = \left( \frac{\partial S}{\partial E} \right)_N. \quad (8.39)$$

Введем также понятие *химического потенциала системы*  $\mu$ , который определяется как

$$\mu = \left( \frac{\partial E}{\partial N} \right)_S. \quad (8.40)$$

Фактически химический потенциал есть изменение энергии системы при изменении числа частиц на единицу:

$$\mu = E_{N+1} - E_N. \quad (8.41)$$

Его можно также сопоставить с внешним полем или давлением, «накачивающим» или «выкачивающим» частицы из резервуара.

Далее, используя известное термодинамическое равенство [36]:

$$dE = T dS + \mu dN \quad (8.42)$$

и заменяя вариацию энтропии в (8.31) согласно (8.39), (8.40) и (8.42), получаем

$$S(E - E_{nN}, N_0 - N) \cong S(E, N_0) - \frac{E_{nN}}{T} + \frac{\mu N}{T}. \quad (8.43)$$

Подчеркнем, что условие равновесия означает теперь не только равенство температур, но и равенство химических потенциалов системы и термостата.

Распределение Гиббса согласно (8.43) будет иметь следующий вид:

$$\rho_{nN} = \text{const} \times e^{-\frac{E_{nN} - \mu N}{T}}. \quad (8.44)$$

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 статисти-

ческая сумма  $Z$  в (8.2) в собственно энергетическом представлении имеет следующий вид:

$$Z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{T}}. \quad (8.45)$$

Если гамильтониан системы диагонализован, т. е. найден полный набор собственных волновых функций  $\varphi_n$  и спектр системы  $E_n$ , то любую термодинамическую величину  $A$  (термодинамическое среднее) можно определить следующим образом:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n A_n e^{-\frac{E_n}{T}}}{\sum_n e^{-\frac{E_n}{T}}} = \frac{1}{Z} \sum_n A_n e^{-\frac{E_n}{T}}, \quad (8.46)$$

при этом  $A_n$  — матричные элементы оператора, соответствующего физической величине  $A$ :

$$A_n = \langle \varphi_n | \hat{A} | \varphi_n \rangle. \quad (8.47)$$

Многие физические величины напрямую выражаются через статистическую сумму  $Z$  и ее производные. Для удобства введем далее понятие *обратной температуры*:

$$\beta = \frac{1}{T}. \quad (8.48)$$

Несложно убедиться, что средняя энергия системы может быть представлена как

$$E = \frac{1}{Z} \sum_n E_n e^{-E_n \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z. \quad (8.49)$$

Можно также получить следующую формулу для *теплоемкости* системы как флюктуации энергии

$$C = \frac{dE}{dT} = \frac{1}{T^2} \left( \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right). \quad (8.50)$$

В случае большого канонического ансамбля вводят также *обобщенную восприимчивость* системы  $\chi$ :

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{dN}{d\mu} = \frac{1}{T} \left( \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 \right); \\ \langle N \rangle &= -\frac{\partial F}{\partial \mu}; \quad F = -T \ln Z, \end{aligned} \quad (8.51)$$

где  $F$  — свободная энергия системы.

Приведем также некоторые важные термодинамические соотношения, связывающие свободную энергию системы, ее теплоемкость и энтропию:

$$\begin{aligned} F &= E - TS = -T \ln Z; \\ C &= -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}; \quad S = -\frac{1}{Z} \sum_n \rho_n \ln \frac{\rho_n}{Z}; \quad \rho_n = e^{-E_n \beta}. \end{aligned} \quad (8.52)$$

Заметим, что в случае классической системы, как правило, можно разделить кинетическую и потенциальную энергию 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:

$$F = -T \ln \left( \sum_N e^{\mu N \beta} \sum_n e^{-E_{nN} \beta} \right). \quad (8.53)$$

В общем случае для физической величины  $A$  имеем:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_N e^{\mu N \beta} \sum_n A_{nN} e^{-E_{nN} \beta}; \\ Z &= \sum_N e^{\mu N \beta} \sum_n e^{-E_{nN} \beta}. \end{aligned} \quad (8.54)$$

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 (8.25). 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:

$$Z = Z_1 \times Z_2 \times Z_3 \times \dots \quad (8.55)$$

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:

$$E = E_1 + E_2 + E_3 + \dots \quad (8.56)$$

## 8.4. Примеры

Для иллюстрации рассмотренных выше термодинамических и статистических соотношений рассмотрим примеры некоторых физических систем, для которых возможно аналитически рассчитать термодинамические средние.

**8.4.1. Совокупность магнитных моментов.** Рассмотрим систему из  $N$  магнитных моментов (рис. 8.2), расположенных в узлах произвольной кристаллической структуры и имеющих только две степени свободы — вдоль приложенного внешнего магнитного поля  $H$  и против него:

$$\hat{H} = - \sum_i \mu_i H; \quad \mu_i = \pm 1. \quad (8.57)$$

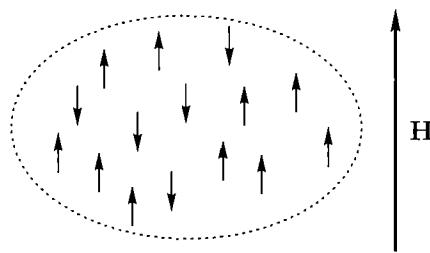


Рис. 8.2. Система невзаимодействующих магнитных моментов во внешнем поле  $H$

Имеем, соответственно, совокупность невзаимодействующих между собой подсистем, каждая из которых (отдельный магнитный момент) взаимодействует с внешним полем согласно (8.57) и находится при конечной температуре. Согласно (8.55), (8.56), задача сводится к расчету статистической суммы одного магнитного момента. Ее несложно получить:

$$Z_i = \sum_{\mu_i=\pm 1} e^{\beta \mu_i H} = 2 \operatorname{ch}(\beta H). \quad (8.58)$$

Тогда полная статистическая сумма

$$Z = (Z_i)^N = (2 \operatorname{ch}(\beta H))^N. \quad (8.59)$$

Энергия системы

$$E = - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -NH \operatorname{th}(\beta H). \quad (8.60)$$

Несложно видеть из (8.60), 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):

$$M = N \langle \mu_i \rangle = N \sum_{\mu_i=\pm 1} \frac{\mu_i e^{\beta \mu_i H}}{Z} = N \operatorname{th}(\beta H). \quad (8.61)$$

Выражение (8.61) можно также получить из термодинамического соотношения

$$M = - \frac{\partial F}{\partial H}. \quad (8.62)$$

Энтропия системы равна

$$S = -\frac{1}{Z} \sum_n \rho_n \ln \frac{\rho_n}{Z} = -\frac{1}{Z} \sum_n e^{-E_n \beta} \ln \left( \frac{e^{-E_n \beta}}{Z} \right) = \ln Z + E\beta, \quad (8.63)$$

отсюда сразу следует первое из термодинамических соотношений (8.52).

В пределе больших температур

$$S_{|\beta \rightarrow 0} = \ln Z_{|\beta \rightarrow 0} = \ln (2^N). \quad (8.64)$$

Этот результат показывает, что энтропия является логарифмом статистического веса системы (см. (8.25)), который в случае высоких температур и, соответственно, равенства вероятностей реализации различных состояний равен полному числу степеней свободы  $2^N$ .

Рассчитаем также теплоемкость системы:

$$C = \frac{dE}{dT} = N \left( \frac{H}{T} \right)^2 \operatorname{ch}^{-2} \left( \frac{H}{T} \right). \quad (8.65)$$

Графики энергии, магнитного момента и теплоемкости системы при внешнем поле  $H = 1$  (в расчете на один магнитный момент) представлены на рис. 8.3.

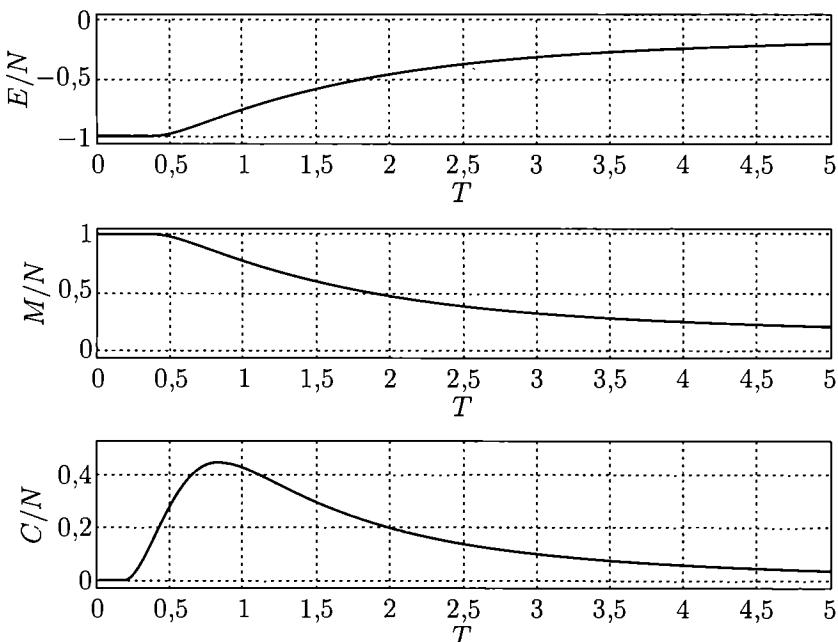


Рис. 8.3. Зависимость от температуры энергии (вверху), магнитного момента (посередине) и теплоемкости (внизу) системы невзаимодействующих магнитных моментов

Теплоемкость достигает своего максимума при температурах  $T \sim H$ , когда сравниваются энергии переворота спина за счет магнитного поля и масштаб

температурных флуктуаций. Выражение (8.65) можно получить также из второго соотношения (8.52) и из флуктуационного соотношения (8.50).

Рассчитаем также еще одну важную физическую величину — *магнитную восприимчивость*:

$$\chi = \left( \frac{dM}{dH} \right) \Big|_{H \rightarrow 0} = \frac{N}{T}. \quad (8.66)$$

Зависимость (8.66) 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

$$\chi = \beta \left( \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right). \quad (8.67)$$

Рассмотренная модель описывает также и большой канонический ансамбль. Действительно, перепишем (8.57) 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

$$n_i = \frac{\mu_i + 1}{2}; \quad n_i = 0; 1. \quad (8.68)$$

Магнитное поле теперь играет роль химического потенциала ( $\mu = 2H$ ) для частиц, и с точностью до несущественной аддитивной постоянной имеем большой канонический ансамбль свободных частиц:

$$\hat{H} = -\mu \sum_i n_i = -\mu N. \quad (8.69)$$

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 (8.51) для обобщенной восприимчивости и среднего числа частиц совпадают, соответственно, с флуктуационным выражением для магнитной восприимчивости (8.67) и термодинамическим соотношением для магнитного момента (8.62).

Возвратимся теперь к физическим системам, рассмотренным во второй части, а именно к бозонным и фермионным и спиновым системам в узельном базисе.

**8.4.2. 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. диагонализовать гамильтонову матрицу и найти уровни энергии  $E_n$  и соб-

ственные функции  $|\Phi_n\rangle$ , а затем уже вычислять любые термодинамические средние:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n A_n e^{-E_n \beta}, \quad A_n = \langle \Phi_n | \hat{A} | \Phi_n \rangle. \quad (8.70)$$

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:

$$E_m = \sum_k \varepsilon_k n_{mk}, \quad n_{mk} = 0, 1, 2, \dots; \\ \varepsilon_k = -2t (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a), \quad (8.71)$$

где  $n_{mk}$  — числа заполнения  $k$ -го импульса  $m$ -го энергетического состояния;  $a$  — расстояние между узлами трехмерной простой кубической решетки. Поэтому при расчете термодинамических средних вида (8.70) следует подставлять спектр (8.71), 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:

$$Z = \sum_n e^{-E_n \beta} = \sum_n \langle \Phi_n | e^{-\beta H} | \Phi_n \rangle = \text{Tr} (e^{-\beta H}). \quad (8.72)$$

Последнее соотношение означает, что статистическая сумма равна сумме диагональных элементов оператора  $e^{-\beta H}$ . 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, не обязательно собственно-энергетическом, представлении. Любые термодинамические средние согласно (8.7) также могут быть вычислены напрямую без предварительной диагонализации, если только возможно рассчитать матричные элементы вида  $\langle \Psi_i | Ae^{-\beta H} | \Psi_i \rangle$ :

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}(Ae^{-\beta H})}{Z} = \frac{1}{Z} \sum_i \langle \Psi_i | Ae^{-\beta H} | \Psi_i \rangle. \quad (8.73)$$

Например, для энергии и среднего числа частиц имеем:

$$E(T) = \frac{\text{Tr}(He^{-\beta H})}{Z}; \quad N(T) = \frac{\text{Tr}(Ne^{-\beta H})}{Z}. \quad (8.74)$$

Заметим, что для энергии остается справедливым выражение через производную от логарифма статистической суммы (8.49).

Практически использовать выражение (8.73) следует так: сначала рассчитываются матрицы  $H$  и  $A$  в исходном (узельном) базисе, затем производится вычисление оператора  $e^{-\beta H}$ :

$$\begin{aligned} e^{-\beta H} &= \sum_{n=0}^{k \rightarrow \infty} \frac{(-\beta H)^n}{n!} = \\ &= 1 - \beta H \left( 1 - \frac{\beta H}{2} \left( 1 - \frac{\beta H}{3} \left( 1 - \dots \left( 1 - \frac{\beta H}{k} \right) \right) \right) \right), \end{aligned} \quad (8.75)$$

суммирование обрезается 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 (8.74) 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

$$H = -t(a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1) + V \left( n_1 - \frac{1}{2} \right) \left( n_2 - \frac{1}{2} \right). \quad (8.76)$$

Базис этой системы состоит из четырех функций в представлении чисел заполнения:

$$\Phi_1 = |00\rangle, \quad \Phi_2 = |01\rangle, \quad \Phi_3 = |10\rangle, \quad \Phi_4 = |11\rangle. \quad (8.77)$$

Действие экспоненциального оператора рассчитывается аналитически:

$$\begin{aligned} e^{-\beta H} |00\rangle &= e^{-\beta V/4} |00\rangle, \quad e^{-\beta H} |11\rangle = e^{-\beta V/4} |11\rangle, \\ e^{-\beta H} |10\rangle &= e^{\beta V/4} (\text{ch}(\beta t) |10\rangle + \text{sh}(\beta t) |01\rangle), \\ e^{-\beta H} |01\rangle &= e^{\beta V/4} (\text{ch}(\beta t) |01\rangle + \text{sh}(\beta t) |10\rangle). \end{aligned} \quad (8.78)$$

Матрица статистического оператора имеет следующий вид:

$$e^{-\beta H} = \begin{pmatrix} e^{-\beta V/4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{\beta V/4} \text{ch}(\beta t) & e^{\beta V/4} \text{sh}(\beta t) & 0 \\ 0 & e^{\beta V/4} \text{sh}(\beta t) & e^{\beta V/4} \text{ch}(\beta t) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\beta V/4} \end{pmatrix}. \quad (8.79)$$

Из-за того, что гамильтониан сохраняет число частиц, матрица оператора  $e^{-\beta H}$  имеет блочно-диагональный вид: первым стоит блок размера  $1 \times 1$ , соответствующий числу частиц  $N = 0$ , затем расположен блок размера  $2 \times 2$  с  $N = 1$ , и далее — блок размера  $1 \times 1$  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:

$$\begin{aligned} E(T) &= \frac{\text{Tr}(He^{-\beta H})}{Z} = \frac{Ve^{-\beta V/2} - V\text{ch}(\beta t) - 4t\text{sh}(\beta t)}{4(e^{-\beta V/2} + \text{ch}(\beta t))}, \\ N(T) &= \frac{\text{Tr}(Ne^{-\beta H})}{Z} = 1. \end{aligned} \quad (8.80)$$

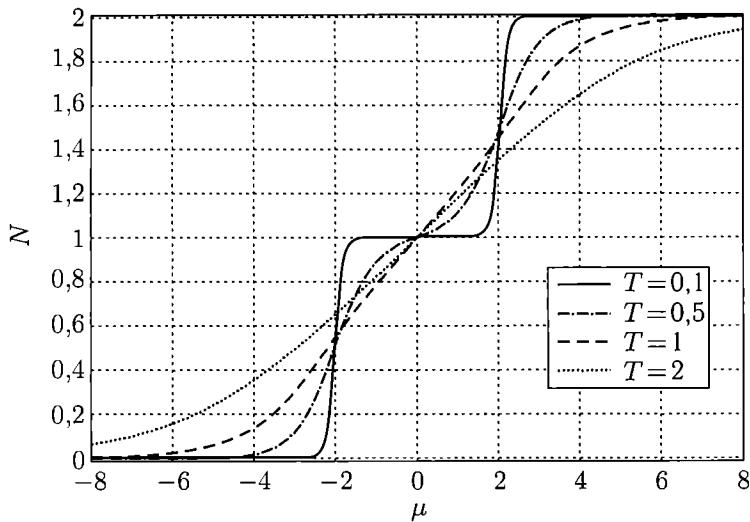


Рис. 8.4. Зависимость числа частиц в системе от химического потенциала при различной температуре

Рассмотрим теперь эту задачу в условиях большого канонического ансамбля, для этого в модель следует ввести химический потенциал, и тогда

$$E(T, \mu) = \frac{\text{Tr}(He^{-\beta(H-\mu N)})}{Z}, \quad N(T, \mu) = \frac{\text{Tr}(Ne^{-\beta(H-\mu N)})}{Z}, \quad (8.81)$$

т. е. выражения (8.80) справедливы только при  $\mu = 0$ . Для числа частиц тогда имеем:

$$N(T, \mu) = \frac{\text{ch}(\beta t) + e^{-\beta(\frac{V}{2}-\mu)}}{\text{ch}(\beta t) + e^{-\beta V/2}\text{ch}(\beta\mu)}; \quad (8.82)$$

$$N(\mu \rightarrow -\infty) = 0; \quad N(\mu \rightarrow +\infty) = 2.$$

Зависимость  $N(\mu)$  при  $t = 1$ ;  $V = 2$  и разных значениях температуры показана на рис. 8.4. 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.

**8.4.3. Одномерная модель Изинга.** Учтем в рамках модели магнитных моментов (8.57) во внешнем поле еще обменное взаимодействие между ними:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}J \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j - H \sum_i \mu_i. \quad (8.83)$$

Первое слагаемое в (8.83) описывает взаимодействие соседних магнитных моментов. Модель (8.83) называется *моделью Изинга*. В одномерном случае удается получить точное аналитическое решение модели Изинга.

Пусть есть одномерная цепочка с периодическими граничными условиями из  $N$  магнитных моментов, описываемая гамильтонианом (8.83). Рассчитаем для этого случая статистическую сумму.

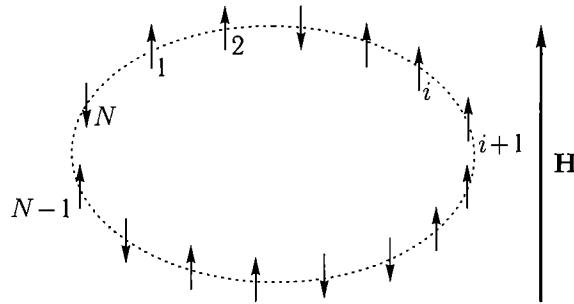


Рис. 8.5. Одномерная модель Изинга (8.83)

Несложно убедиться, что число слагаемых во взаимодействующей части (8.83) равно  $N$  (рис. 8.5). Перепишем (8.83) в виде одинарной суммы:

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^N (J\mu_i\mu_{i+1} + H\mu_i); \quad \mu_i = \pm 1; \quad \mu_{N+1} \equiv \mu_1. \quad (8.84)$$

Рассмотрим пару соседних узлов  $i$  и  $i + 1$ . Возможные энергии этой пары узлов такие:

$$\begin{aligned} E_{\uparrow\uparrow}^{i,i+1} &= -J - H; & E_{\downarrow\uparrow}^{i,i+1} &= J - H; \\ E_{\uparrow\downarrow}^{i,i+1} &= J + H; & E_{\downarrow\downarrow}^{i,i+1} &= -J + H. \end{aligned} \quad (8.85)$$

Введем матрицу размера  $2 \times 2$ , которая содержит в себе члены статистической суммы этой пары узлов:

$$A_{i,i+1} = \begin{pmatrix} e^{-\beta E_{\uparrow\uparrow}^{i,i+1}} & e^{-\beta E_{\downarrow\uparrow}^{i,i+1}} \\ e^{-\beta E_{\uparrow\downarrow}^{i,i+1}} & e^{-\beta E_{\downarrow\downarrow}^{i,i+1}} \end{pmatrix}. \quad (8.86)$$

Рассмотрим произведение таких соседних матриц:

$$A_{i,i+1} A_{i+1,i+2} = \dots \quad (8.87)$$

$$= \begin{pmatrix} e^{-\beta(E_{\uparrow\uparrow}^{i,i+1} + E_{\uparrow\uparrow}^{i+1,i+2})} + e^{-\beta(E_{\downarrow\uparrow}^{i,i+1} + E_{\uparrow\downarrow}^{i+1,i+2})} & \dots \\ \dots & e^{-\beta(E_{\uparrow\downarrow}^{i,i+1} + E_{\downarrow\downarrow}^{i+1,i+2})} + e^{-\beta(E_{\downarrow\uparrow}^{i,i+1} + E_{\downarrow\downarrow}^{i+1,i+2})} \end{pmatrix}.$$

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:

$$Z = \text{Tr}(A_{1,2} A_{2,3} A_{3,4} \dots A_{N,1}). \quad (8.88)$$

Но так как все узлы в системе эквивалентны, то и все матрицы  $A$  абсолютно одинаковы, так что

$$A_{i,i+1}A_{i+1,i+2} = A_{i,i+1}^2 \Rightarrow Z = \text{Tr} \left( (A_{1,2})^N \right). \quad (8.89)$$

Последнее соотношение позволяет рассчитать статистическую сумму аналитически при любом количестве узлов. След матрицы  $A_{1,2}$  в (8.89) не меняется при переходе к другому базису, в частности, к собственному базису, в котором матрица  $A_{1,2}$  диагональна. Пусть числа  $\lambda_1, \lambda_2$  — собственные числа матрицы  $A_{i,i+1}$ . Тогда статистическая сумма представима в виде

$$Z = \text{Tr} \left( \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}^N \right) = \lambda_1^N + \lambda_2^N. \quad (8.90)$$

Найдем собственные числа  $\lambda_1, \lambda_2$ , решив секулярное уравнение

$$\det \begin{pmatrix} e^{-\beta E_{11}^{i,i+1}} - \lambda & e^{-\beta E_{11}^{i,i+1}} \\ e^{-\beta E_{11}^{i,i+1}} & e^{-\beta E_{11}^{i,i+1}} - \lambda \end{pmatrix} = 0. \quad (8.91)$$

В результате имеем

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \text{ch}(\beta H) \pm \sqrt{e^{2\beta J} \text{sh}^2(\beta H) + e^{-2\beta J}}. \quad (8.92)$$

Далее, используя (8.92) и выражение для статистической суммы (8.90), можно рассчитать различные термодинамические средние.

Пользуясь общим выражением для термодинамического среднего (8.46), 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:

$$A(T) \sim e^{-\Delta/T}. \quad (8.93)$$

Этот асимптотический результат справедлив для любой квантовой или классической модели, он следует прямо из определения термодинамического среднего:

$$\begin{aligned} A(T) &= \frac{1}{Z} \sum_n A_n e^{-E_n \beta} = \left( \frac{A_0 e^{-E_0 \beta} + A_1 e^{-E_1 \beta} + \dots}{e^{-E_0 \beta} + e^{-E_1 \beta} + \dots} \right)_{|T \rightarrow 0} = \\ &= \left( \frac{A_0 + A_1 e^{-\beta \Delta} + \dots}{1 + e^{-\beta \Delta} + \dots} \right)_{|T \rightarrow 0} \approx A_0 + \text{const} \times e^{-\beta \Delta} + \dots \end{aligned} \quad (8.94)$$

Можно показать, что этот результат справедлив и в том случае, если при  $E \geq E_1$  энергетические уровни в системе образуют непрерывный спектр.

В заключение главы рассмотрим конкретную задачу о расчете зависимости числа частиц в системе от химического потенциала  $\mu$  для одномерной бозонной модели Хаббарда

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^+ a_j + h.c.) + \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) - \mu \sum_i n_i$$

с периодическими граничными условиями;  $t = 1$ ;  $U = 2$ ; максимальное заполнение на узле  $n_{\max} = 2$ ; число узлов  $m = 5$ , для температур  $T = 0, 0,05, 0,1, 0,2$ .

Узельный базис для этой задачи будет состоять из  $R = 243$  базисных функций:

$$\Phi_1 = |000000\rangle, \quad \Phi_2 = |000001\rangle, \quad \Phi_3 = |000002\rangle, \quad \dots, \quad \Phi_{243} = |222222\rangle.$$

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.

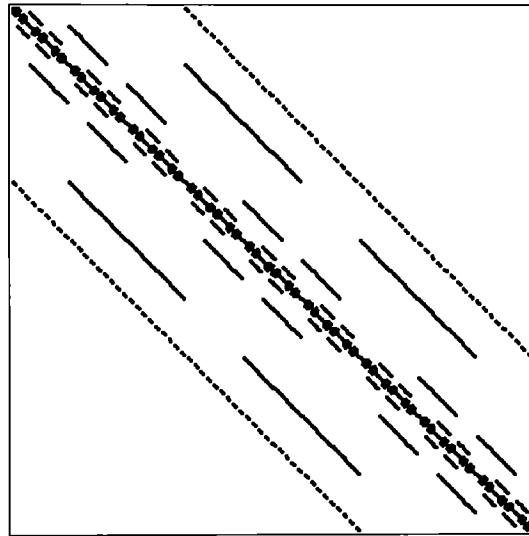


Рис. 8.6. Портрет гамильтоновой матрицы

Получив гамильтонову матрицу, находим ее собственные функции  $\varphi_\alpha$  и соответствующие собственные значения  $E_\alpha$ ,  $\alpha = 1, \dots, R$ . 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

$$\langle n \rangle_0 \equiv \langle \varphi_{\alpha'} | n | \varphi_{\alpha'} \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^R C_{i\alpha'} \Phi_i \middle| n \middle| \sum_{j=1}^R C_{j\alpha'} \Phi_j \right\rangle = \sum_{i=1}^R (C_{i\alpha'})^2 n_i,$$

где  $C_{ij}$  — коэффициенты разложения собственных функций  $\varphi$  по узельному базису  $\Phi$ ;  $n_i$  — суммарное число частиц в базисном состоянии  $\Phi_i$ .

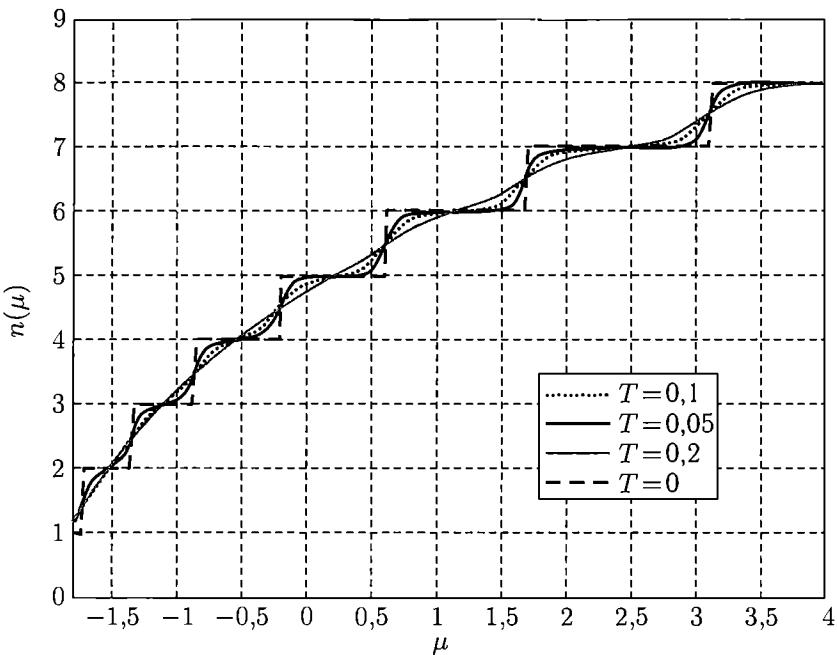


Рис. 8.7. Зависимость среднего числа частиц в системе от химического потенциала в диапазоне от -1,8 до 4 для различных значений температур

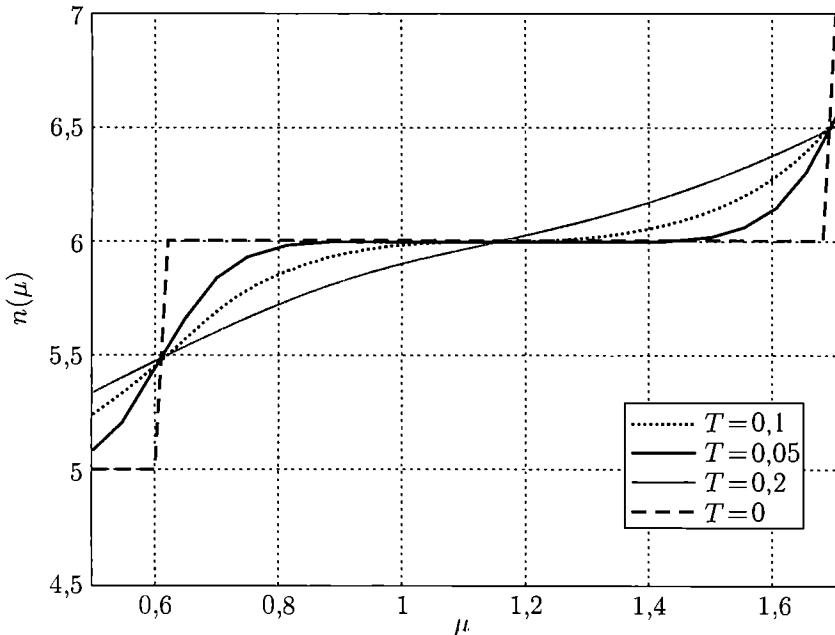


Рис. 8.8. Одна из ступенек рис. 8.7

#### 8.4. Примеры

---

Если температура отлична от нуля, то среднее число частиц в системе вычисляется по формуле:

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_{\alpha=1}^R n_\alpha e^{-E_\alpha/T}}{\sum_{\alpha=1}^R e^{-E_\alpha/T}},$$

где  $n_\alpha$  — число частиц в собственном состоянии  $\varphi_\alpha$ .

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  $0,02$ .

# Глава 9

## СТАТИСТИКА БОЛЬЦМАНА, ФЕРМИ И БОЗЕ. ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ

### 9.1. 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  $\varepsilon_k$  — 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, (4.25)):

$$\varepsilon(k) = -2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)), \quad (9.1)$$

а для свободного ферми- или бозе-газа справедлива квадратичная по импульсу дисперсионная зависимость

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (9.2)$$

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 нескольким тождественным частицам одно и то же состояние (для бозонов). Это предположение означает малость искомых средних чисел заполнения  $\langle n_k \rangle$ . К таким

## 9.1. Функции распределения

---

системам относятся, например, обычные молекулярные или атомарные газы при комнатных температурах и низком давлении. Условие

$$\langle n_k \rangle \ll 1 \quad (9.3)$$

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:

$$E = \sum_k \varepsilon_k n_k. \quad (9.4)$$

Запишем распределение Гиббса системы в условиях большого канонического ансамбля с переменным числом частиц  $N = \sum_k n_k$ , учитывая химический потенциал  $\mu$ :

$$\rho_{E,N} = e^{-(E-\mu N)\beta} = e^{-\beta \sum_k (\varepsilon_k - \mu) n_k} = \prod_k \left( e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} \right)^{n_k}. \quad (9.5)$$

Матрица плотности системы согласно (9.5) представляет собой произведение матриц плотности для каждого квантового состояния  $k$ . Соответственно, все физические величины будут аддитивными функциями от каждого из состояний  $k$ . Рассчитаем статистическую сумму и свободную энергию этих состояний. Суммирование состояний в статистической сумме будет происходить только по числам заполнения  $n_k$ :

$$Z_k = \sum_{n_k} \left( e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} \right)^{n_k}; \quad (9.6)$$

$$F_k = -T \ln \left( \sum_{n_k} \left( e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} \right)^{n_k} \right). \quad (9.7)$$

Так как для разреженного идеального газа  $\langle n_k \rangle \ll 1$ , свободную энергию в (9.7) можно разложить по степеням чисел заполнения (предполагая, что и экспоненты малы):

$$F_k \approx -T \ln \left( 1 + e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} + \dots \right) \approx -T e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} + \dots \quad (9.8)$$

Числа заполнения  $n_k$  равны либо нулю, либо единице, вероятность реализации других значений  $n_k \geq 2$  ввиду разреженности газа мала, поэтому

$$F_k \approx -T e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}. \quad (9.9)$$

Используя последнее из термодинамических соотношений (8.51), получаем окончательно так называемое *распределение Больцмана*:

$$\langle n_k \rangle = -\frac{\partial F_k}{\partial \mu} = e^{(\mu - \varepsilon_k)\beta}. \quad (9.10)$$

Распределение (9.10) фактически является распределением Гиббса для одной частицы, при этом роль энергии системы здесь играет одиночастичная энергия  $\varepsilon_k$  (9.1), (9.2). В формуле (9.10) следует еще учесть нормировку (одиночастичную статистическую сумму), так что окончательно

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{Z} e^{(\mu - \varepsilon_k)\beta}, \quad Z = \sum_k e^{(\mu - \varepsilon_k)\beta}. \quad (9.11)$$

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 (9.7):

$$F_k = -T \ln \left( \sum_{n_k=0;1} \left( e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} \right)^{n_k} \right) = -T \ln \left( 1 + e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} \right). \quad (9.12)$$

Соответствующий расчет среднего числа заполнения для квантового состояния  $k$  приводит к известному *распределению Ферми–Дирака*:

$$\langle n_k \rangle = -\frac{\partial F_k}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k - \mu)\beta} + 1}. \quad (9.13)$$

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

$$F_k = -T \ln \left( \sum_{n_k=0}^{\infty} \left( e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} \right)^{n_k} \right) = -T \ln \left( \sum_{n_k=0}^{\infty} \left( e^{-\beta n_k (\varepsilon_k - \mu)} \right) \right). \quad (9.14)$$

Заметим, что в (9.14) под знаком логарифма — бесконечная геометрическая прогрессия. Ее можно просуммировать, если  $\varepsilon_k > \mu$ . Однако минимальная одиночастичная энергия согласно (9.1), (9.2) равна  $(\varepsilon_k)_{\min} = 0$ . Поэтому для бозе-газа область физических решений (9.13) соответствует  $\mu < 0$ . В этом случае можем точно просуммировать (9.14) и получить следующее:

$$F_k = -T \ln \left( \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}} \right). \quad (9.15)$$

Окончательно дифференцируя (9.15) по химическому потенциалу, находим *распределение Бозе–Эйнштейна*:

$$\langle n_k \rangle = -\frac{\partial F_k}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_k - \mu)\beta} - 1}. \quad (9.16)$$

Распределения Ферми и Бозе также могут быть получены и из выражения для энтропии. Пусть все квантовые числа  $k$  будут сгруппированы по близким значениям энергии  $\varepsilon(k)$ . Положим, что количество состояний в каждой группе  $G_\varepsilon$ , количество частиц в группе  $N_\varepsilon$ , 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 каж-

дая группа  $G_\varepsilon$  является независимой подсистемой, суммарный статистический вес всей системы будет равен

$$\Delta\Omega = \prod_{\varepsilon} \Delta\Omega_{\varepsilon}. \quad (9.17)$$

Рассчитаем статистический вес в группе в случае ферми-частиц. Для этого следует рассчитать количество способов, которыми можно разместить  $N_\varepsilon$  частиц по  $G_\varepsilon$  состояний при выполнении принципа Паули:

$$\Delta\Omega_{\varepsilon} = \frac{G_\varepsilon!}{N_\varepsilon! (G_\varepsilon - N_\varepsilon)!}. \quad (9.18)$$

Для бозе-газа соответствующее число способов при отсутствии ограничения на числа заполнения гораздо больше (см. (5.2)):

$$\Delta\Omega_{\varepsilon} = \frac{(G_\varepsilon + N_\varepsilon - 1)!}{N_\varepsilon! (G_\varepsilon - 1)!}. \quad (9.19)$$

Соответственно, энтропия системы

$$S = \ln\Delta\Omega = \sum_{\varepsilon} (\pm\ln((G_\varepsilon \pm N_\varepsilon)!) - \ln(N_\varepsilon!) \mp \ln(G_\varepsilon!)), \quad (9.20)$$

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 (9.19) можно пренебречь.

Используя формулу Стирлинга:

$$\ln N! \approx N\ln N - N, \quad N \gg 1, \quad (9.21)$$

находим

$$S = \sum_{\varepsilon} (\pm (G_\varepsilon \pm N_\varepsilon) \ln G_\varepsilon - N_\varepsilon \ln N_\varepsilon \mp G_\varepsilon \ln G_\varepsilon). \quad (9.22)$$

Введем средние вероятности заполнения состояний:

$$\langle n_{\varepsilon} \rangle = \frac{N_{\varepsilon}}{G_{\varepsilon}} \equiv \langle n_{\varepsilon(k)} \rangle, \quad (9.23)$$

которые совпадают в термодинамическом пределе со средними числами заполнения  $\langle n_k \rangle$ . Тогда выражение для энтропии можно записать в следующем виде:

$$S = \sum_{\varepsilon} G_{\varepsilon} (\pm [1 \pm \langle n_{\varepsilon} \rangle] \ln (1 \pm \langle n_{\varepsilon} \rangle) - \langle n_{\varepsilon} \rangle \ln \langle n_{\varepsilon} \rangle). \quad (9.24)$$

Соотношение (9.24) — известное выражение для энтропии ферми- и бозе-газа [36], при этом суммирование по  $\varepsilon$  с весовыми множителями  $G_\varepsilon$  эквивалентно суммированию по всем квантовым числам:

$$\sum_{\varepsilon} G_{\varepsilon} \equiv \sum_k, \quad (9.25)$$

поэтому выпишем еще раз в привычных обозначениях энтропию ферми- и бозе-газа:

$$S = \sum_k (\pm [1 \pm \langle n_k \rangle] \ln (1 \pm \langle n_k \rangle) - \langle n_k \rangle \ln \langle n_k \rangle). \quad (9.26)$$

Чтобы рассчитать средние числа заполнения, согласно второму началу термодинамики следует найти условия максимума энтропии при заданном числе частиц  $N$  и энергии  $E$  системы:

$$N = \sum_k \langle n_k \rangle, \quad E = \sum_k \varepsilon_k \langle n_k \rangle. \quad (9.27)$$

Самый удобный способ нахождения максимума (9.26) при ограничениях (9.27) — приравнять нулю производную по искомым числам заполнения с вводом неопределенных множителей Лагранжа  $\alpha, \beta$  [36]:

$$\frac{\partial (S + \alpha N + \beta E)}{\partial \langle n_k \rangle} = 0. \quad (9.28)$$

Дифференцирование приводит к выражению

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_k)} \mp 1}. \quad (9.29)$$

Постоянные Лагранжа напрямую связаны с температурой и химическим потенциалом, достаточно сравнить вариацию (9.28) и термодинамическую вариацию энергии  $dE = T dS + \mu dN$ :

$$\alpha = \frac{\mu}{T}, \quad \beta = -\frac{1}{T}. \quad (9.30)$$

Таким образом, распределения (9.29) совместно с (9.30) 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  $\mu$ . Тогда справедливо условие нормировки

$$\langle N \rangle = \sum_k \langle n_k \rangle. \quad (9.31)$$

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

$$\begin{aligned} \langle N(\mu, T) \rangle &= \sum_k f(\varepsilon_k, \mu); \quad E(\mu, T) = \sum_k \varepsilon_k f(\varepsilon_k, \mu); \\ C(T) &= \sum_k \varepsilon_k \frac{df(\varepsilon_k, \mu)}{dT}; \quad \dots; \quad f(\varepsilon_k, \mu) = \langle n_k \rangle. \end{aligned} \quad (9.32)$$

Система (9.32) 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:

$$\begin{aligned} k_x &= \frac{2\pi}{aL_x}n; & k_y &= \frac{2\pi}{aL_y}m; & k_z &= \frac{2\pi}{aL_z}l; \\ n &= 0 \div L_x - 1; & m &= 0 \div L_y - 1; & l &= 0 \div L_z - 1; \\ \sum_k &= \frac{a^3 L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} \int d^3k \Rightarrow \sum_{nml}. \end{aligned} \quad (9.33)$$

## 9.2. 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  $\varepsilon_k$ , 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  $\varepsilon$ .

Введем понятие *плотности одночастичных состояний*  $N(\varepsilon)$ . По определению

$$N(\varepsilon) = \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k). \quad (9.34)$$

Физически  $N(\varepsilon)$  отвечает количеству возможных квантовых состояний, размещенных в интервале от  $\varepsilon$  до  $\varepsilon + d\varepsilon$ . Ранее эта величина вводилась при описании взаимодействующей системы (см. (7.112)).

Математически плотность одночастичных состояний позволяет перейти во всех суммах (9.32) к интегрированию по энергии:

$$\sum_k \Rightarrow \int N(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (9.35)$$

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 (9.32) с учетом (9.35) может быть представлена в следующем виде:

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \int N(\varepsilon) f(\varepsilon, \mu) d\varepsilon; & E(T) &= \int \varepsilon N(\varepsilon) f(\varepsilon, \mu) d\varepsilon \\ C(T) &= \int \varepsilon N(\varepsilon) \frac{df(\varepsilon, \mu)}{dT} d\varepsilon; & \dots \end{aligned} \quad (9.36)$$

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  $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , то для трехмерного случая находим:

$$N(\varepsilon) = \sum_k \delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) = V \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) d^3 k = V \frac{m\sqrt{m\varepsilon}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}. \quad (9.37)$$

Таким образом,  $N(\varepsilon) \sim \sqrt{\varepsilon}$ . Можно показать, что в двумерном случае  $N(\varepsilon) = \text{const}$ , а в одномерной ситуации  $N(\varepsilon) \sim 1/\sqrt{\varepsilon}$ .

Для рассматриваемых ранее узельных моделей в невзаимодействующем случае мы находили  $\varepsilon_k = -2t\cos(ka)$  (см. (5.28)) для одномерной системы. Расчет плотности состояний в одномерной ситуации в пределе бесконечно большой цепочки с таким спектром приводит к выражению

$$N(\varepsilon) = L \int \frac{1}{2\pi} \delta(\varepsilon + 2t\cos(ka)) dk = V \frac{\theta(2t - |\varepsilon|)}{2\pi a \sqrt{4t^2 - \varepsilon^2}}. \quad (9.38)$$

Таким образом, получаем полосу разрешенных энергий шириной  $4t$  с характерными для одномерной ситуации корневыми особенностями плотности состояний на границах (рис. 9.1).

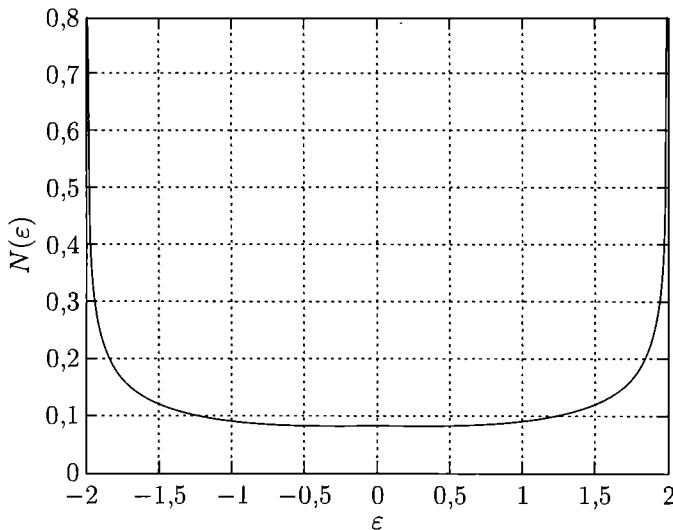


Рис. 9.1. Плотность состояний для одномерного идеального газа.  $V = 1; t = 1; a = 1$

Если в задаче рассматривается дискретная система небольшого размера, то переход (9.35) 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.

### 9.3. Термодинамика идеального ферми-газа

При нулевой температуре распределение Ферми превращается в ступеньку, ограниченную значением  $\mu(0)$  (рис. 9.2), называемым в этом случае энергией Ферми  $E_F$ :

$$f_k \equiv f(\varepsilon_k) = \left( \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 1} \right) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \theta(\mu(0) - \varepsilon_k); \quad \mu(0) = E_F. \quad (9.39)$$

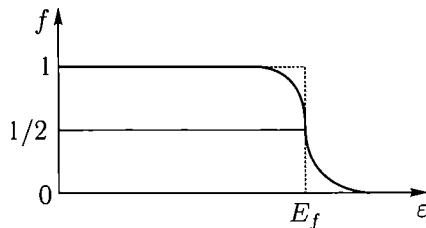


Рис. 9.2. Функция распределения для свободного ферми-газа. Штриховая линия отвечает температуре  $T = 0$ , сплошная линия — температуре  $0 < T \ll E_F$

В этом случае все частицы в соответствии с принципом Паули занимают в импульсном пространстве сферу Ферми с радиусом  $k_F$ , т. е. наименее по энергии состояния (рис. 9.3). Соответственно,  $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ .

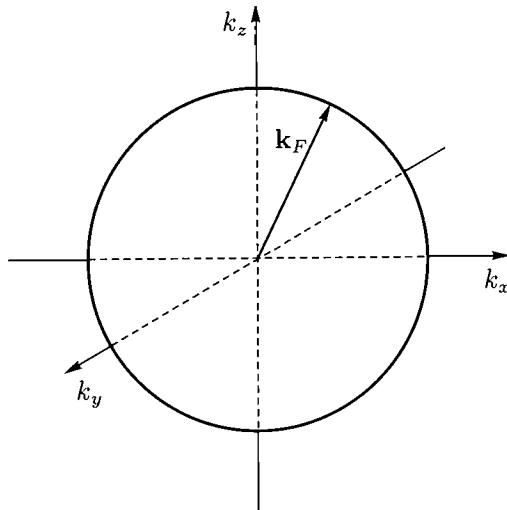


Рис. 9.3. Сфера Ферми в импульсном пространстве

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

$$N = \sum_{k\sigma} f_k = 2V \int_0^{k_F} \frac{k^2 dk}{(2\pi)^3} d\Omega \Rightarrow k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad n = \frac{N}{V}, \quad (9.40)$$

здесь учтено суммирование по двум проекциям спина.

Свободный ферми-газ является неплохим приближением для простых металлов: полагая  $n \sim 10^{22}$  см<sup>-3</sup> и массу  $m$  равной массе свободного электрона, находим  $E_F \sim 10$  эВ.

Можно получить следующие полезные соотношения:

$$N(E_F) = \frac{3}{2} \frac{N}{E_F}; \quad (9.41)$$

$$\frac{\langle E \rangle}{N} = \frac{3}{5} E_F. \quad (9.42)$$

Воспользовавшись термодинамическими соотношениями, получим уравнение состояния ферми-газа при нулевой температуре:

$$P = \frac{\partial E}{\partial V} = \frac{2E}{3V} \Rightarrow PV^{5/3} = \frac{\hbar^2}{5m} (3\pi^2)^{2/3} N^{5/3}. \quad (9.43)$$

Таким образом, даже при нулевой температуре существует конечное давление идеального ферми-газа, связанное с его квантовым вырождением и конечной плотностью. Уравнение (9.43) 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 (9.41) и зависимость (9.38), запишем плотность состояний в следующем виде:

$$N(\varepsilon) = \frac{3N\sqrt{\varepsilon}}{2E_F^{3/2}}. \quad (9.44)$$

Введем безразмерные энергию, температуру и химический потенциал:

$$E' = \frac{E}{E_F}, \quad \mu' = \frac{\mu}{E_F}, \quad T' = \frac{T}{E_F}. \quad (9.45)$$

Тогда система уравнений (9.36) имеет вид

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{3}{2} \int_0^{\infty} \sqrt{E'} \left( \frac{1}{e^{(E'-\mu')/T'} + 1} \right) dE'; \\ \frac{E'(T')}{N} &= \frac{3}{2} \int_0^{\infty} (E')^{3/2} \left( \frac{1}{e^{(E'-\mu')/T'} + 1} \right) dE'; \\ \frac{C(T')}{N} &= \frac{3}{8(T')^2} \int_0^{\infty} (E')^{3/2} (E' - \mu') \frac{dE'}{\operatorname{ch}^2 \left( \frac{E' - \mu'}{2T'} \right)}. \end{aligned} \quad (9.46)$$

Систему (9.46) строго можно решить только численно. Сначала из первого уравнения, рассматривая его как трансцендентное для химического потенциала, находим  $\mu'$  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

$$I = \int_0^{\infty} f(\varepsilon) \frac{d\varepsilon}{e^{(\varepsilon-\mu)/T} + 1} = \int_0^{\mu} f(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} T^2 f'(\mu) + \dots, \quad (9.47)$$

$$\frac{\mu}{T} \ll 1,$$

можно получить:

$$\begin{aligned} \mu &= E_F \left( 1 - \frac{T^2 \pi^2}{12 E_F} \right), \quad E = \frac{3}{5} N E_F \left( 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{T}{E_F} \right)^2 \right), \\ C &= \gamma T, \quad \gamma = \frac{\pi^2}{3} N (E_F). \end{aligned} \quad (9.48)$$

Заметим, что теплоемкость вырожденного ферми-газа пропорциональна температуре и плотности состояний на уровне Ферми (число  $\gamma$  называется *постоянной Зоммерфельда*).

При высоких температурах  $T \gg T_0$  статистика газа становится бульцевской, и зависимости энергии и теплоемкости электронного газа выходят на классический предел, так что

$$E \rightarrow \frac{3}{2} N T, \quad C \rightarrow \frac{3}{2} N. \quad (9.49)$$

Таким образом, теплоемкость ферми-газа выходит на насыщение и просто отражает число степеней свободы газа (по  $\frac{1}{2} k_B$  на каждую степень).

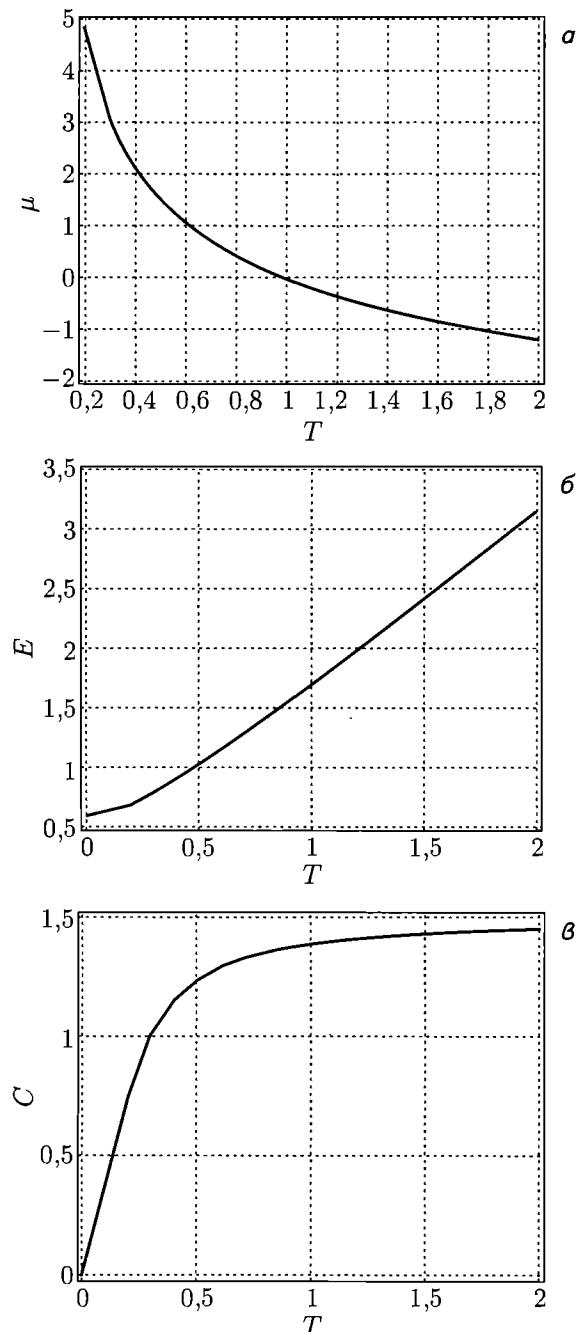


Рис. 9.4. Зависимость химического потенциала ( $\alpha$ ), энергии ( $\beta$ ) и теплоемкости ( $\gamma$ ) идеального ферми-газа от температуры

На рис. 9.4 показаны зависимости химического потенциала, энергии и теплоемкости идеального ферми-газа от температуры, полученные численным решением системы (9.46).

## 9.4. 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 наимизшем состоянии с энергией  $\varepsilon = 0$ . Рассмотрим уравнение нормировки при конечной температуре

$$N = \int_0^{\infty} N(\varepsilon) \frac{d\varepsilon}{e^{(\varepsilon-\mu)/T} - 1}. \quad (9.50)$$

При заданной плотности  $N/V$  при понижении температуры химический потенциал будет возрастать, оставаясь отрицательным. Он достигнет значения  $\mu = 0$  при температуре, определяемой из уравнения

$$N = \int_0^{\infty} N(\varepsilon) \frac{d\varepsilon}{e^{\varepsilon/T} - 1}. \quad (9.51)$$

Расчет этой температуры приводит к значению

$$T(\mu = 0) \equiv T_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{m\varsigma^{2/3}(3/2)} \left( \frac{N}{V} \right)^{2/3} = \frac{3,31\hbar^2}{m} n^{2/3}, \quad (9.52)$$

где  $\varsigma$  — 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]:

$$N_{\varepsilon=0} = N \left( 1 - \left( \frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \right). \quad (9.53)$$

Заметим, что температурная зависимость (9.53) хорошо описывает поведение жидкого гелия  ${}^4\text{He}$  при температурах  $T < 2,17$  К.

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 (9.53) 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

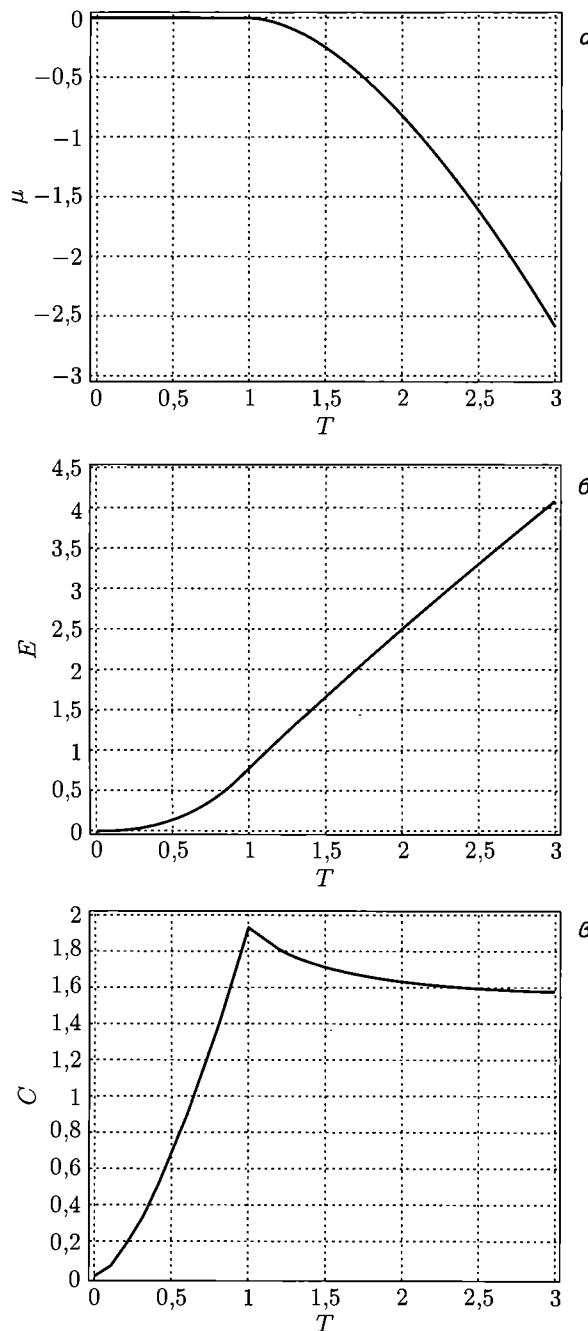


Рис. 9.5. Зависимость химического потенциала ( $\alpha$ ), энергии ( $\beta$ ) и теплоемкости ( $\gamma$ ) идеального бозе-газа (в расчете на одну частицу) от температуры

температурах средняя энергия и другие величины определяются только вкладами от частиц с энергиями  $\varepsilon > 0$ . Полагая  $\mu = 0$ , находим, например:

$$E = \frac{V\sqrt{2}m^{3/2}T^{5/2}}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty t^{3/2} \frac{dt}{e^t - 1} = \frac{15V\sqrt{2}m^{3/2}T^{5/2}\zeta(5/2)}{8\pi^{3/2}\hbar^3},$$

$$C(T) = \frac{5E}{2T} \sim T^{3/2}.$$
(9.54)

Таким образом, свойства бозе-газа ниже температуры конденсации резко отличаются от свойств Больцмановского и ферми-газа.

Для случая  $T > T_0$  удобно обезразмерить все физические параметры на температуру конденсации:

$$E' = \frac{E}{T_0}, \quad \mu' = \frac{\mu}{T_0}, \quad T' = \frac{T}{T_0}.$$
(9.55)

Тогда система уравнений для численной схемы принимает вид:

$$1 = \xi \int_0^\infty \sqrt{E'} \frac{dE'}{e^{(E'-\mu')/T'} - 1}, \quad \xi = \frac{2}{\sqrt{\pi}\zeta(3/2)} = 0,432,$$

$$\frac{E'(T')}{N} = \xi \int_0^\infty (E')^{3/2} \frac{dE'}{e^{(E'-\mu')/T'} - 1},$$

$$\frac{C(T')}{N} = \frac{\xi}{4} \frac{1}{(T')^2} \int_0^\infty (E')^{3/2} (E' - \mu') \frac{dE'}{\operatorname{sh}^2\left(\frac{E' - \mu'}{2T'}\right)}.$$
(9.56)

Решение (9.56) следует искать только для  $\mu < 0$ ,  $T' > 1$ .

Графики зависимости химического потенциала, энергии и теплоемкости идеального бозе-газа от температуры, полученные численным решением системы (9.56), показаны на рис. 9.5. В точке  $T = T_0$  график теплоемкости от температуры имеет излом (так называемая  $\lambda$ -точка), при этом [36]

$$\frac{C(T_0)}{C(T \rightarrow \infty)} = 1,28.$$
(9.57)

Так же, как и для ферми-газа, в пределе высоких температур  $T \gg T_0$  можно получить классический предел

$$E \rightarrow \frac{3}{2}NT, \quad C \rightarrow \frac{3}{2}N.$$
(9.58)

# Глава 10

## МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ

### 10.1. 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  $\mu$  при температуре  $T$ : *распределение Больцмана*

$$\rho(E) = e^{-\frac{E-\mu}{T}}, \quad (10.1)$$

*распределение Ферми–Дираха*

$$\rho(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{T}} + 1}, \quad (10.2)$$

*распределение Бозе–Эйнштейна*

$$\rho(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{T}} - 1}. \quad (10.3)$$

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  $\sim 2 \times 10^9$  (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  $\xi$  можно описать формулой

$$\xi_{n+1} = F(\xi_n), \quad (10.4)$$

где  $F$  — некоторый алгоритм, заложенный в данном генераторе. Можно показать, что последовательность (10.4) 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.

**10.1.1. 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  $\xi$ , определенная на интервале  $(a, b)$ , принимала значение, меньшее или равное  $x$ , с вероятностью  $P(\xi \leq x)$ . Тогда неубывающая функция

$$F(x) = P\{\xi \leq x\} \quad (10.5)$$

называется *функцией распределения* случайной величины  $\xi$ , при этом

$$\begin{aligned} F(x_1) &\leq F(x_2), \quad \text{если } x_1 \leq x_2; \\ F(a) &= 0, \quad F(b) = 1. \end{aligned} \quad (10.6)$$

*Плотность распределения*  $f(x)$  случайной величины  $\xi$  определяется следующим образом:

$$F(x) = \int_a^x f(t) dt, \quad (10.7)$$

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

$$\xi = F^{-1}(R), \quad (10.8)$$

где  $R$  — случайная величина, равномерно распределенная на  $(0, 1)$ .

Действительно,

$$P\{\xi \leq x\} = P\{F^{-1}(R) \leq x\} = P\{R \leq F(x)\} = F(x). \quad (10.9)$$

На практике метод обратной функции применяется следующим образом. Пусть нужно получить значения случайной величины  $\xi$ , распределенной с плотностью  $p(x)$  на интервале  $(a, b)$ . Докажем, что значения  $\xi$  можно находить из уравнения

$$\int_a^{\xi} p(x) dx = R, \quad (10.10)$$

где  $R$  — случайная величина, равномерно распределенная на  $(0, 1)$ .

Рассмотрим функцию

$$y(x) = \int_a^x p(t) dt, \quad (10.11)$$

при этом из свойств плотности распределения имеем:

$$y(a) = 0, \quad y(b) = 1, \quad y'(x) = p(x) > 0. \quad (10.12)$$

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  $\xi$  (рис. 10.1). Таким образом, единственность решения доказана.

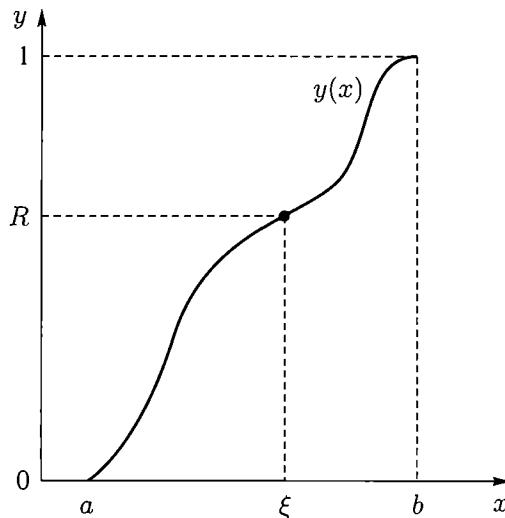


Рис. 10.1. Прямая  $y = R$  пересекает график функции  $y = y(x)$  в единственной точке

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. 10.2), а значит, вероятности этих событий равны:

$$P\{a' < \xi < b'\} = P\{y(a') < R < y(b')\}. \quad (10.13)$$

Так как  $R$  равномерно распределено на  $(0, 1)$ , то

$$P\{y(a') < R < y(b')\} = y(b') - y(a') = \int_{a'}^{b'} p(x) dx. \quad (10.14)$$

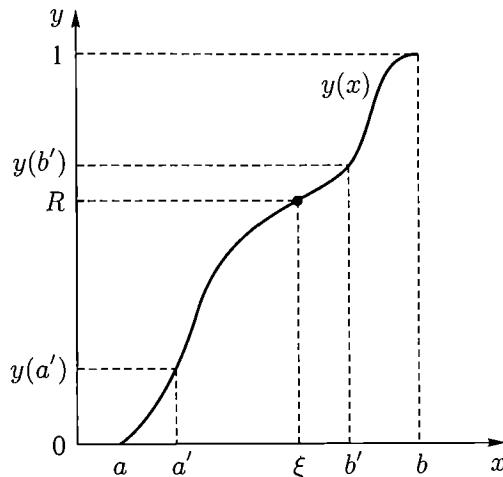


Рис. 10.2. Если  $\xi \in (a', b')$ , то  $R \in (y(a'), y(b'))$ , и наоборот, а значит, вероятности этих событий равны

Следовательно,

$$P\{a' < \xi < b'\} = \int_{a'}^{b'} p(x) dx, \quad (10.15)$$

что и означает: величина  $\xi$  имеет плотность распределения  $p(x)$ .

Таким образом, согласно (10.8), для нахождения необходимого распределения следует искать обратную функцию  $F^{-1}(x)$ .

Рассмотрим далее простой пример.

Пусть необходимо получить величину  $\xi$ , равномерно распределенную на интервале  $(a, b)$ . Нормированная плотность распределения  $\xi$  имеет вид

$$p(x) = \frac{1}{b-a}, \quad a \leq x \leq b. \quad (10.16)$$

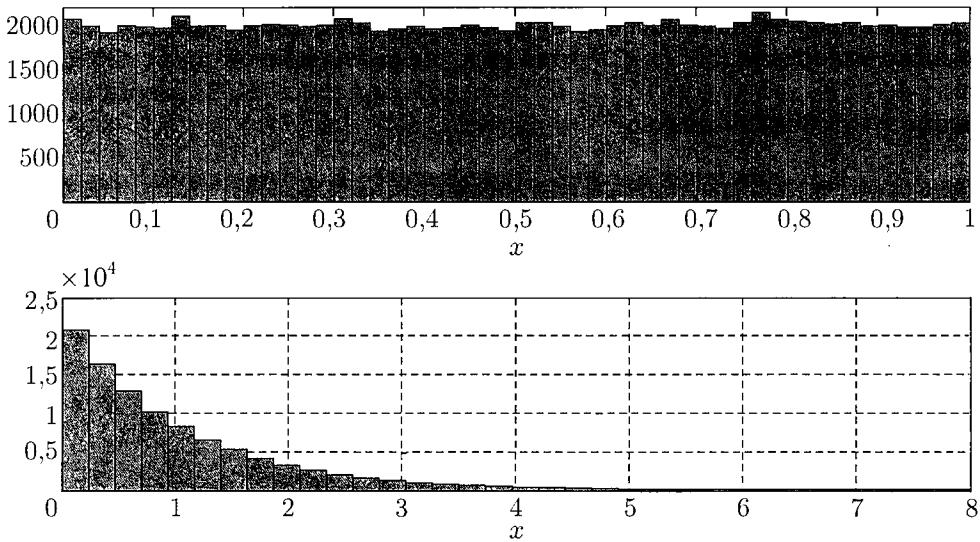


Рис. 10.3. Гистограмма экспоненциально распределенных случайных величин (внизу) получена из равномерного распределения (вверху) методом обратной функции (10.22). По вертикальной оси отложено число точек распределения, попадающих в соответствующий интервал гистограммы, общее число точек равно 100000

Тогда согласно методу обратной функции

$$\int_a^\xi \frac{dx}{b-a} = R. \quad (10.17)$$

Отсюда находим

$$\xi = a + R(b - a), \quad (10.18)$$

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

$$F(x) = 1 - e^{-x}, \quad x > 0, \quad (10.19)$$

и, соответственно, с плотностью распределения

$$f(x) = e^{-x}, \quad x > 0. \quad (10.20)$$

Применяя метод обратной функции, находим

$$y = F(x) = 1 - e^{-x}, \quad x = F^{-1}(y) = -\ln(1 - y). \quad (10.21)$$

Таким образом, случайная величина

$$\xi = -\ln(1 - R) \quad (10.22)$$

будет иметь экспоненциальное распределение (рис. 10.3).

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  $\xi$  имеет закон распределения Пуассона с параметром  $\mu$ , если она принимает значения  $0, 1, 2, \dots, m, \dots$  с вероятностью

$$P\{\xi = m\} = \frac{\mu^m e^{-\mu}}{m!}, \quad (10.23)$$

при этом математическое ожидание (среднее значение) и дисперсия  $\xi$  совпадают и равны  $\mu$ :

$$M(\xi) = \langle \xi \rangle = \mu, \quad D(\xi) = \mu. \quad (10.24)$$

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  $q \leftarrow qR$ ;
4. Если  $q \geq p$ , то значение  $N$  увеличивается на единицу:  $N \rightarrow N + 1$ , и возвращаемся к п. 2;
5. Если  $q < p$ , то число  $\xi = N$  имеет закон распределения Пуассона.

Блок-схема алгоритма показана на рис. 10.4.

На рис. 10.5 показана гистограмма случайных величин, имеющих распределение Пуассона с параметром  $\mu = 3,5$ , полученных при помощи алгоритма на рис. 10.4.

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

$$\begin{aligned} P\left\{(R_1 > q) \cap (R_1 R_2 \geq q) \cap \dots \cap (R_1 R_2 \dots R_n \geq q) \cap (R_1 R_2 \dots R_n R_{n+1} < q)\right\} = \\ = \frac{q(\ln(1/q))^n}{n!}, \quad 0 < q \leq 1. \end{aligned} \quad (10.25)$$

Производя замену

$$q = e^{-\mu}, \quad (10.26)$$

получаем требуемое распределение.

Однако интеграл (10.10) не всегда можно взять аналитически. Дж. фон Нейман предложил следующий способ обойти эту проблему. Предположим, что случайная величина  $\xi$  определена на интервале  $(a, b)$ , и ее плотность распределения ограничена:

$$P(x) \leq M_0. \quad (10.27)$$

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  $A$  на рис. 10.6), то искомое число  $\xi = x_1$  найдено;

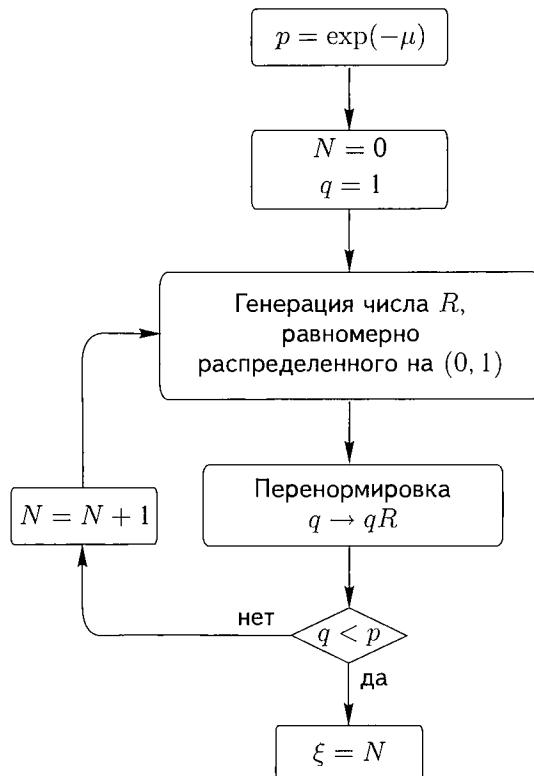


Рис. 10.4. Блок-схема алгоритма получения случайных чисел, распределенных по закону Пуассона

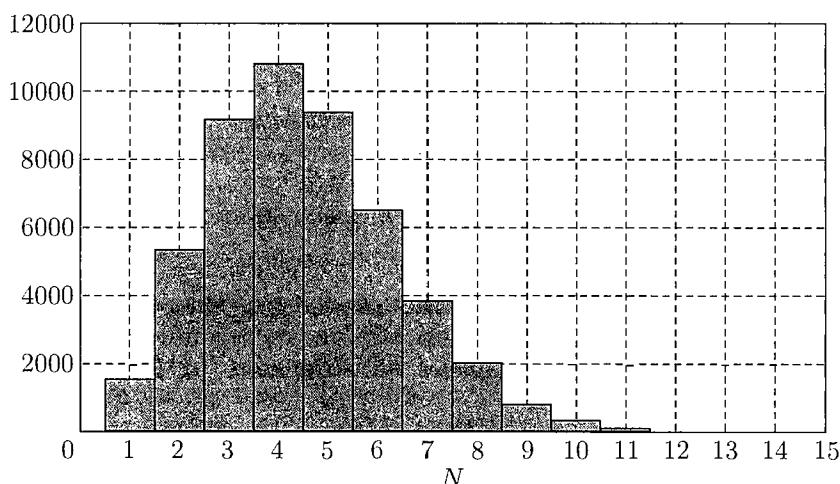


Рис. 10.5. Гистограмма случайных величин, имеющих распределение Пуассона с параметром  $\mu = 3,5$ , общее число точек равно 50000

если же точка лежит выше кривой (точка  $B$  на рис. 10.6), то пара  $R_1, R_2$  отбрасывается и выбирается новая пара.

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  $\xi$ , определенных на интервале  $(a, b)$ , с заданной плотностью распределения  $f(x)$ . Для этого достаточно просто разрешить уравнение

$$\int_a^{\xi} f(x) dx = R \quad (10.28)$$

относительно  $\xi$ , где  $R$  — равномерно распределенная на единичном отрезке случайная величина. Даже если интеграл (10.10) 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 (10.10) — неубывающая функция  $\xi$ , так что всегда существует единственное решение (10.10). 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.

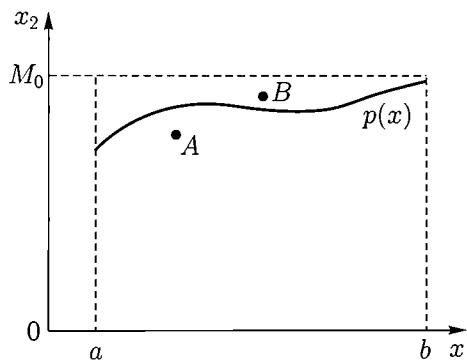


Рис. 10.6. Метод фон Неймана генерации случайных чисел с плотностью распределения  $p(x)$

**10.1.2. 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 поциальному закону с

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^x e^{-t^2/2} dt, \quad (10.29)$$

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 п. 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. 10.7.

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:

$$V_1 = r \cos \theta ; \quad V_2 = r \sin \theta , \quad (10.30)$$

тогда

$$\begin{aligned} S &= V_1^2 + V_2^2 = r^2; \\ \xi_1 &= V_1 \sqrt{\frac{-2 \ln S}{S}} = \sqrt{-2 \ln S} \cos \theta ; \quad \xi_2 = V_2 \sqrt{\frac{-2 \ln S}{S}} = \sqrt{-2 \ln S} \sin \theta . \end{aligned} \quad (10.31)$$

Введем новые полярные координаты:

$$\theta' = \theta, \quad r' = \sqrt{-2 \ln S}, \quad (10.32)$$

тогда

$$\xi_1 = r' \cos \theta', \quad \xi_2 = r' \sin \theta'. \quad (10.33)$$

Величина  $\theta'$  равномерно распределена на интервале  $(0, 2\pi)$ , а вероятность того, что  $r' \leq r$ , равна

$$\begin{aligned} P\{r' \leq r\} &= P\left\{\sqrt{-2 \ln S} \leq r\right\} = P\{-2 \ln S \leq r^2\} = \\ &= P\{2 \ln S \geq r^2\} = P\left\{S \geq e^{-r^2/2}\right\} = 1 - e^{-r^2/2}, \end{aligned} \quad (10.34)$$

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.

$$P\{r' \in (r, r + dr)\} = \frac{d}{dr} \left(1 - e^{-r^2/2}\right) = re^{-r^2/2} dr. \quad (10.35)$$

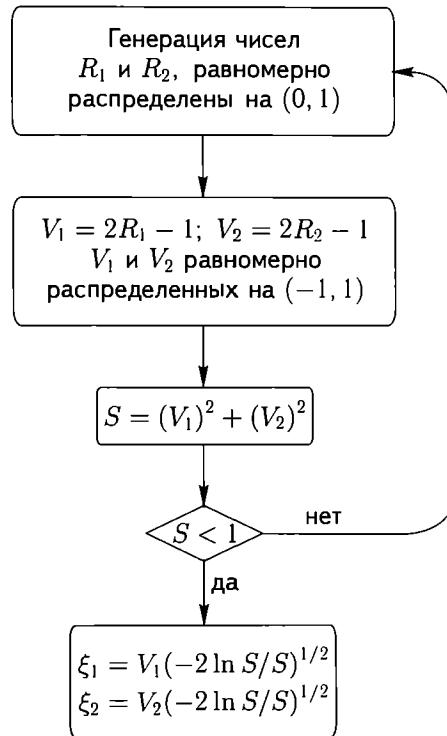


Рис. 10.7. Блок-схема алгоритма получения нормально распределенных случайных чисел

Вероятность попадания  $\theta'$  в интервал  $(\theta, \theta + d\theta)$  равна

$$P\{\theta' \in (\theta, \theta + d\theta)\} = \frac{d\theta}{2\pi}. \quad (10.36)$$

В итоге вероятность того, что  $\xi_1 \leq x_1$  и  $\xi_2 \leq x_2$ , равна

$$\begin{aligned} P\{(\xi_1 \leq x_1) \cap (\xi_2 \leq x_2)\} &= \frac{1}{2\pi} \int_{\substack{r \cos \theta \leq x_1 \\ r \sin \theta \leq x_2}} d\theta e^{-r^2/2} r dr = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\substack{x \leq x_1 \\ y \leq x_2}} e^{-(x^2+y^2)/2} dx dy = \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x_1} e^{-x^2/2} dx \right) \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x_2} e^{-y^2/2} dy \right), \end{aligned} \quad (10.37)$$

что и доказывает справедливость алгоритма.

На рис. 10.8 показана гистограмма нормально распределенных случайных величин, полученная из равномерного распределения при помощи алгоритма, изображенного на рис. 10.7.

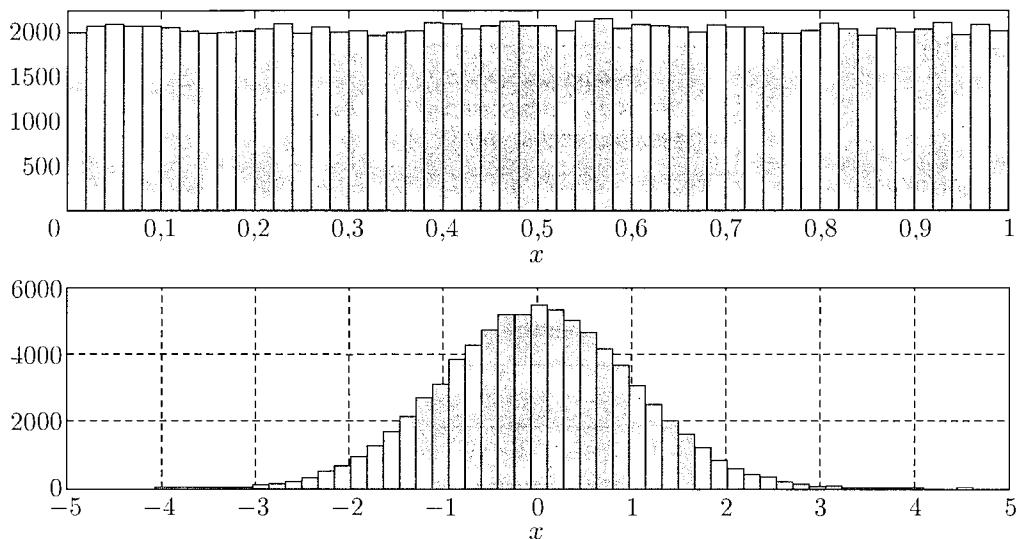


Рис. 10.8. Гистограмма нормально распределенных случайных величин (внизу) получена из равномерного распределения (вверху) при помощи алгоритма, изображенного на рис. 10.7. По вертикальной оси отложено число точек распределения, попадающих в соответствующий интервал гистограммы, общее число точек равно 100000

**10.1.3. Почти линейная плотность распределения.** Пусть требуется получить случайную величину с плотностью распределения  $f(x)$ , удовлетворяющей следующему условию:

$$\begin{aligned} f(x) &= 0, \quad \text{если } x < s \text{ или } x > s + h; \\ a - \frac{b(x-s)}{h} &\leq f(x) \leq b - \frac{b(x-s)}{h}, \quad \text{если } s \leq x \leq s + h. \end{aligned} \quad (10.38)$$

Плотность распределения (10.38) называется *почти линейной*, условию (10.38) 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. 10.9).

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 п. 4;
3. Если  $R_2 > R_1 + \frac{f(s+hR_1)}{b}$ , то возвращаемся к п. 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.

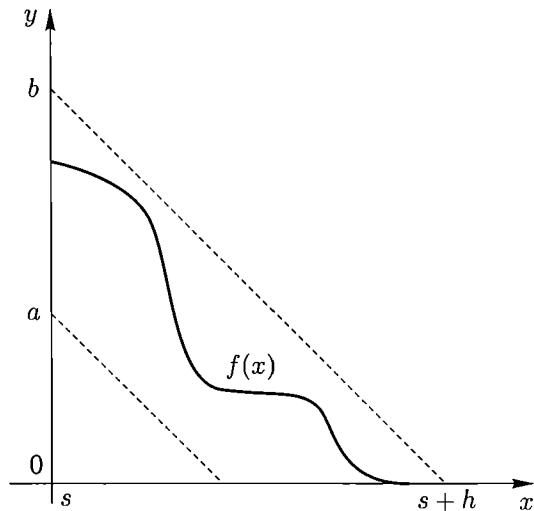


Рис. 10.9. Функция  $f(x)$  описывает почти линейную плотность распределения случайной величины

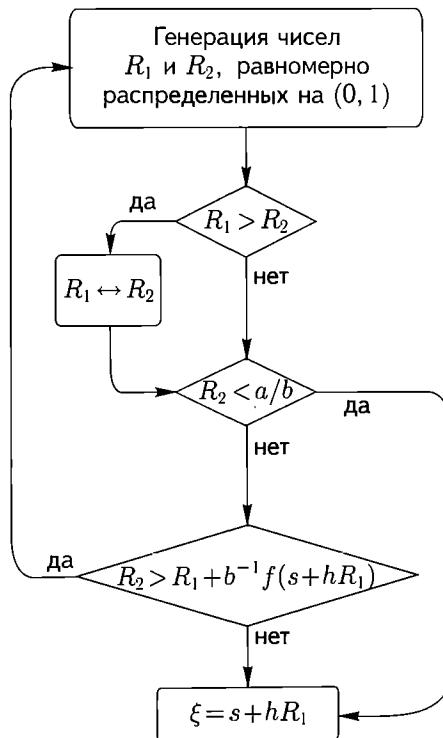


Рис. 10.10. Блок-схема алгоритма получения случайных чисел с почти линейной плотностью распределения

Блок-схема алгоритма показана на рис. 10.10.

Прежде всего, заметим, что п. 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. 10.11).

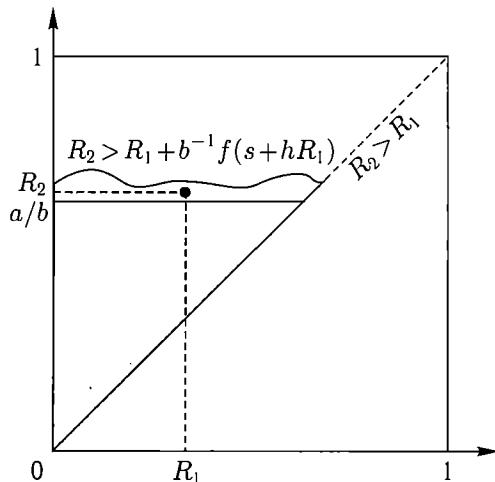


Рис. 10.11. Все точки  $(x, y)$ , попадающие в закрашенную область, имеют почти линейную плотность распределения

Докажем справедливость алгоритма.

При переходе к п. 4 алгоритма имеем, что точка с координатами  $(R_1, R_2)$  — это случайная точка в закрашенной области на рис. 10.11, при этом

$$0 \leq R_1 \leq R_2 \leq R_1 + \frac{1}{b} f(s + hR_1), \quad (10.39)$$

а из условия (10.38) имеем

$$\frac{a}{b} \leq \frac{x-s}{h} + \frac{f(x)}{b} \leq 1, \quad (10.40)$$

или, учитывая, что

$$x = s + hR_1, \quad (10.41)$$

получаем

$$\frac{a}{b} \leq R_1 + f(s + hR_1) \leq 1. \quad (10.42)$$

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.

$$P\{\xi \leq s + hR_1\} = \frac{\int_0^x b^{-1} f(s + hR_1) dR_1}{\int_0^1 b^{-1} f(s + hR_1) dR_1} = \frac{\int_s^{s+hx} f(u) du}{\int_s^1 f(u) du} = A \int_s^{s+hx} f(u) du, \quad (10.43)$$

где  $A$  — константа, соответствующей нормировкой можно добиться, чтобы  $A = 1$ .

Из (10.43) следует, что случайная величина  $\xi$  имеет почти линейную плотность распределения (10.38).

На рис. 10.12 показан пример генерации случайных величин с почти линейным законом распределения, определяемым плотностью распределения

$$f(x) = \begin{cases} \frac{e^{-x^2-x^4} - \pi^{-3}}{0,488}, & \text{если } 0,8 \leq x < 0,192; \\ 0, & \text{если } 1,192 \leq x \leq 1,25. \end{cases} \quad (10.44)$$

Плотность распределения  $f(x)$  показана в окне  $\beta$ , в окне  $a$  дана исходная гистограмма равномерно распределенных случайных величин, в окне  $\delta$  — гистограмма случайных величин с почти линейной плотностью распределения, полученных при помощи алгоритма на рис. 10.10.

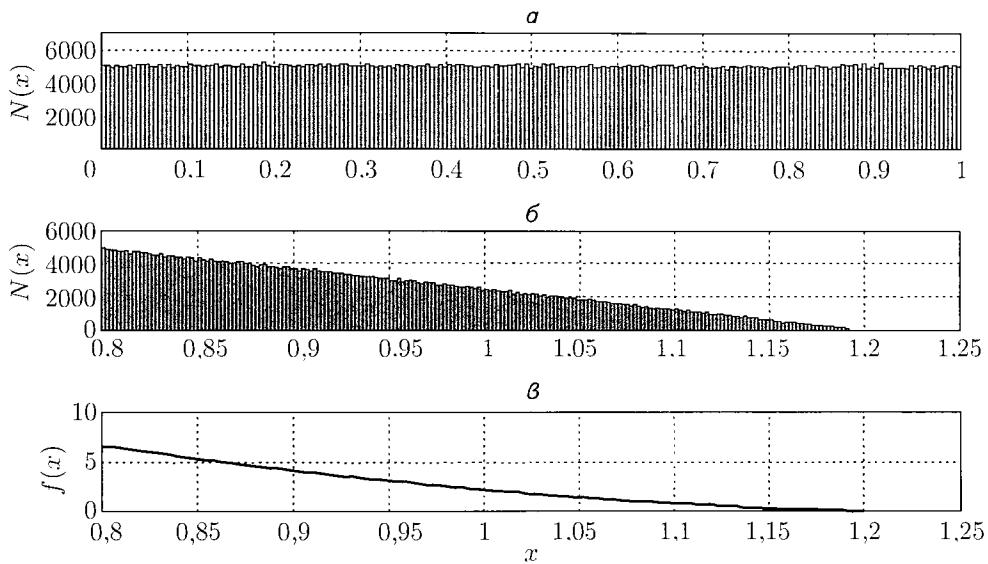


Рис. 10.12. Случайные величины, имеющие почти линейный закон распределения

**10.1.4. Двумерные распределения.** В этом разделе мы кратко каснемся 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  $xy$ .

Функцией распределения  $F(x, y)$  системы двух случайных величин  $(X, Y)$  называется вероятность совместного выполнения двух неравенств:  $X \leq x$ ,  $Y \leq y$ ,

$$F(x, y) = P \left\{ (X \leq x) \cap (Y \leq y) \right\}. \quad (10.45)$$

Геометрически  $F(x, y)$  интерпретируется как вероятность попадания случайной точки  $(X, Y)$  в закрашенную область на рис. 10.13, ограниченную снизу и слева только областью определения случайных величин  $X$  и  $Y$ .

Плотность распределения системы двух случайных величин находится как

$$f(x, y) = \frac{\partial^2 F(x, y)}{\partial x \partial y}. \quad (10.46)$$

Функция распределения системы случайных величин, связанных функциональной зависимостью  $z = g(X, Y)$ , определяется формулой

$$G(z) = \iint_{D(z)} f(x, y) dx dy, \quad (10.47)$$

где  $D(z)$  — область на плоскости  $xy$ , для которой  $g(x, y) < z$ .

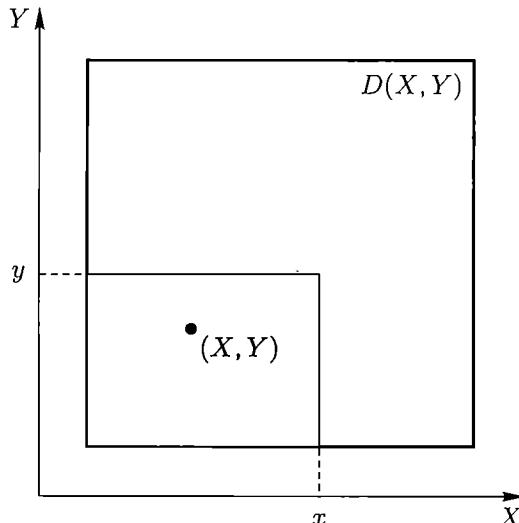


Рис. 10.13. Геометрическая интерпретация функции распределения системы двух случайных величин;  $D(X, Y)$  — область определения случайных величин  $X$  и  $Y$

Рассмотрим конкретный пример. Пусть необходимо получить систему случайных величин  $x$  и  $y$  с плотностью распределения

$$f(x, y) \sim e^{x-y}, \quad (10.48)$$

причем

$$0 \leq x < y \leq 1. \quad (10.49)$$

Поступим следующим образом. Сгенерируем сначала случайную величину  $y - x$ . Имеем функциональную зависимость

$$z = y - x, \quad (10.50)$$

и область  $D(z)$  определяется условием

$$D(z) : \quad y - x < z. \quad (10.51)$$

На плоскости  $xy$  в единичном квадрате область  $D(z)$  ограничена снизу прямой  $y = x$ , а сверху — прямой  $y = x + z$  (рис. 10.14). Функция распределения случайной величины  $z$  имеет вид

$$G(z) \sim \int_0^{1-z} dx \int_x^{x+z} e^{x-y} dy + \int_{1-z}^1 dx \int_x^1 e^{x-y} dy = ze^{1-z}, \quad (10.52)$$

после нормировки имеем

$$G(z) = ze^{1-z}. \quad (10.53)$$

Таким образом, согласно методу обратной функции, для нахождения  $z$  следует решить трансцендентное уравнение

$$ze^{1-z} = R_1, \quad (10.54)$$

где  $R_1$  — случайное число, равномерно распределенное на  $(0, 1)$ . Уравнение (10.54) имеет единственный корень и наиболее эффективно решается численно методом деления отрезка пополам.

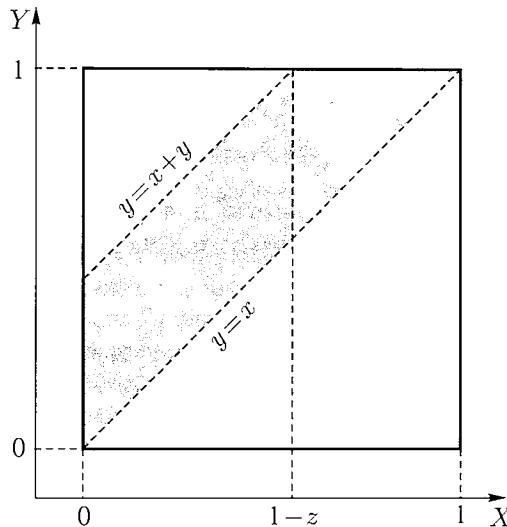


Рис. 10.14. Область интегрирования  $D(z)$  ограничена прямыми  $y = x$  и  $y = x + z$

Теперь, имея случайную величину  $z$  с законом распределения (10.53), найдем закон распределения случайной величины  $x$  при заданном  $z$ . Имеем

$$f(x)|_{z=y-x} = \int_0^x dx \int_0^1 e^{-z} dy \sim \int_0^x dx, \quad (10.55)$$

т. е. случайная величина  $x$  распределена равномерно на интервале  $(0, 1 - z)$ , так как по условию задачи  $x < y$ .

Таким образом,

$$x = R_2(1 - z), \quad y = z + x = z + R_2(1 - z), \quad (10.56)$$

$R_2$  — случайное число, равномерно распределенное на  $(0, 1)$ .

На рис. 10.15 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 (10.55).

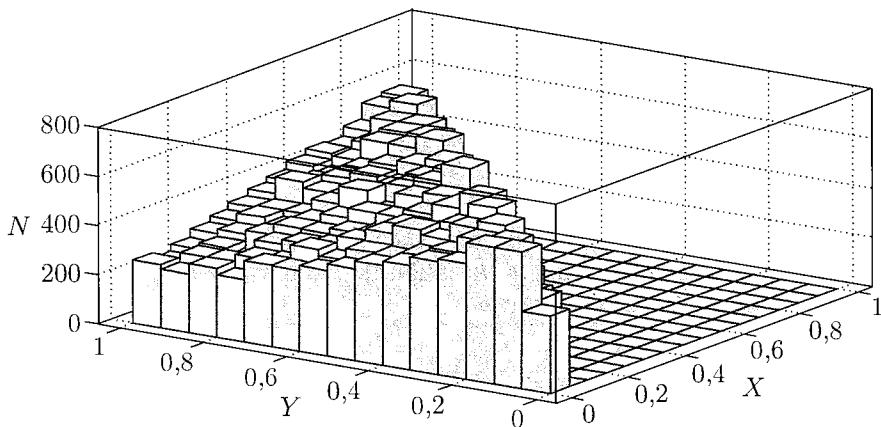


Рис. 10.15. Гистограмма системы двух случайных величин, имеющих плотность распределения (10.48) с условием (10.49). Общее число точек 50000

В заключение раздела отметим, что и для генерации двумерных распределений случайных величин справедлив метод фон Неймана.

## 10.2. Случайные величины и центральная предельная теорема. Общая схема метода Монте-Карло

При исследовании взаимодействующих систем расчет термодинамических средних вида (8.1) 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 (МК). 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 МК, 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. 10.16). 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

$$S \approx \frac{N'}{N}, \quad (10.57)$$

причем равенство улучшается с увеличением  $N$ .

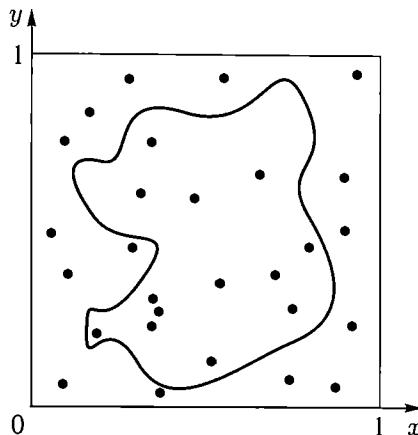


Рис. 10.16. Вычисление площади плоской фигуры методом МК

Аналогично можно сформулировать задачу расчета объема сложной формы, применяя предыдущую процедуру, а также объема произвольной многомерной замкнутой структуры.

Несомненное преимущество такого непосредственного использования метода МК — простая структура вычислительного алгоритма. Необходим лишь хороший генератор 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 МК 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. 10.17), называется *клластером*. В системе может существовать кластер, который связывает слева направо или снизу вверх всю систему — *стягивающий кластер* (рис. 10.18). Это означает, что в системе достигнут предел перколяции.

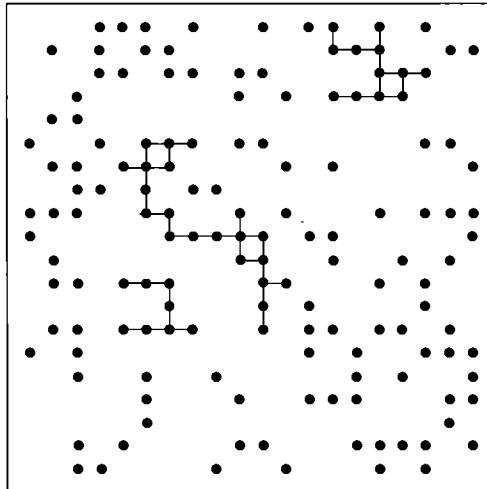


Рис. 10.17. Кластеры частиц в задаче перколяции

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

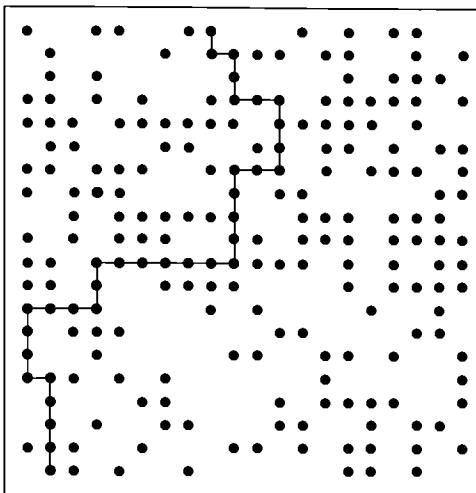


Рис. 10.18. Пример стягивающего кластера. В системе возможно протекание снизу вверх

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 МК становится специфичным для каждой конкретной задачи.

Прежде чем подробнее познакомиться с подходом МК 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 МК. Случайные величины уже рассматривались в п. 10.1, 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 МК.

Рассмотрим случайную величину  $\xi$ , распределенную с плотностью вероятности  $p(x)$  на интервале  $(a, b)$ . Соответственно, вероятность того, что величина  $\xi$  попадет в интервал  $(a', b')$ , содержащийся в  $(a, b)$ , будет равна

$$P\{a' < \xi < b'\} = \int_{a'}^{b'} p(x) dx. \quad (10.58)$$

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

$$M\xi = \int_a^b xp(x) dx, \quad (10.59)$$

т. е., фактически, среднее значение  $\xi$ .

Сразу отметим важное свойство математического ожидания. Выберем произвольную непрерывную функцию  $f(x)$  и рассмотрим случайную величину  $\eta = f(\xi)$ . Можно доказать, что

$$M\eta = Mf(\xi) = \int_a^b f(x)p(x) dx. \quad (10.60)$$

*Дисперсией* случайной величины называется число

$$D\xi = M(\xi - M\xi)^2 = \int_a^b x^2 p(x) dx - (M\xi)^2. \quad (10.61)$$

Из (10.61) 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  $\xi$  и  $\eta$ , то математическое ожидание и дисперсия являются аддитивными функциями:

$$M(\xi + \eta) = M\xi + M\eta, \quad D(\xi + \eta) = D\xi + D\eta. \quad (10.62)$$

Для нормального распределения (распределения Гаусса), которое рассматривалось в п. 10.1.2, с функцией распределения

$$p(\xi) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\xi-a)^2}{2\sigma^2}} \quad (10.63)$$

(рис. 10.19) математическое ожидание и дисперсия равны:

$$M\xi = a, \quad D\xi = \sigma^2. \quad (10.64)$$

Любые вероятности нормально распределенной величины вычисляются с помощью интеграла вероятностей (или интеграла ошибок)

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^x e^{-t^2/2} dt. \quad (10.65)$$

С помощью преобразования интегралов несложно показать, что

$$P\{x' < \xi < x''\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{t_1}^{t_2} e^{-t^2/2} dt = \frac{1}{2} (\Phi(t_2) - \Phi(t_1)), \quad (10.66)$$

$$t_1 = \frac{x' - a}{\sigma}, \quad t_2 = \frac{x'' - a}{\sigma}.$$

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.

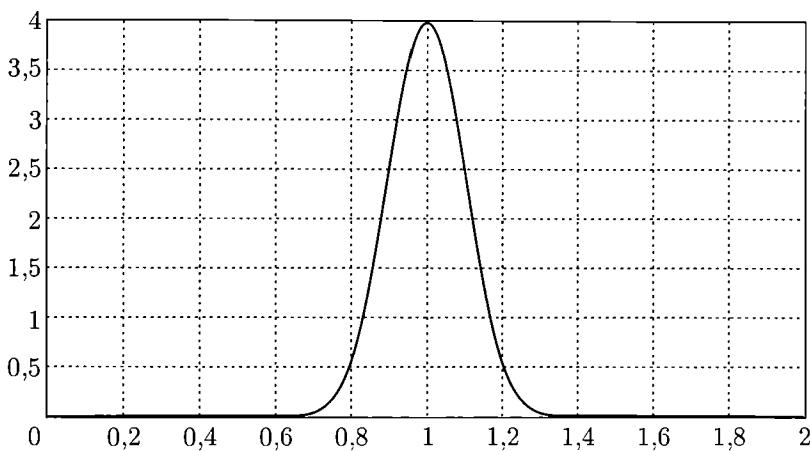


Рис. 10.19. Распределение Гаусса для параметров  $a = 1$ ;  $\sigma = 0,1$

Приведем важное свойство нормального распределения — «правило трех  $\sigma$ ». Если выбрать  $x' = a - 3\sigma$ ;  $x'' = a + 3\sigma$ , то согласно (10.66)  $t_1 = -3$ ,  $t_2 = 3$ . Отсюда находим

$$P\{a - 3\sigma < \xi < a + 3\sigma\} = \Phi(3) = 0,997 \cong 1. \quad (10.67)$$

Последняя формула интерпретируется так: при одном испытании практически невозможно получить значение  $\xi$ , отличающееся от  $M\xi$  больше, чем на  $3\sigma$ .

На практике в качестве погрешности часто выбирают не  $3\sigma$ , а другую величину — так называемую *вероятную ошибку*. Если рассмотреть величину  $r = 0,6745\sigma$ , то

$$P\{a - r < \xi < a + r\} = \Phi(0,6745) = 0,5. \quad (10.68)$$

Переформулируем (10.68) по-другому:

$$P\{|\xi - a| < r\} = 0,5, \quad (10.69)$$

но тогда и

$$P\{|\xi - a| > r\} = 1 - P\{|\xi - a| < r\} = 0,5. \quad (10.70)$$

Значит, для случайной величины  $\xi$  вероятность отклониться от своего среднего значения больше, чем на  $r$ , и меньше, чем на  $r$ , одинакова.

Рассмотрим теперь очень важную для дальнейшего описания методов МК 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  $\xi$  и  $\eta$ , нормально распределенные с дисперсиями, соответственно,  $\sigma_1^2$  и  $\sigma_2^2$  и математическими ожиданиями  $a_1$  и  $a_2$ , то, кроме того, что согласно свойству (10.62) математическое ожидание и дисперсия суммы  $\xi + \eta$  будут аддитивны, распределение суммы  $\xi + \eta$  будет также нормальным:

$$p(\xi + \eta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}} e^{-\frac{(\xi+\eta-(a_1+a_2))^2}{2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}} \quad (10.71)$$

Рассмотрим теперь более общую ситуацию. Пусть есть  $N$  одинаковых независимых случайных величин  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$  с одинаковым, но не обязательно нормальным распределением вероятностей. Очевидно, что математические ожидания и дисперсии этих величин совпадают. Обозначим

$$\begin{aligned} M\xi_1 &= M\xi_2 = \dots = M\xi_N = m; \\ D\xi_1 &= D\xi_2 = \dots = D\xi_N = b^2; \\ \rho_N &= \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N. \end{aligned} \quad (10.72)$$

Для распределения суммы независимых случайных величин справедливо

$$\begin{aligned} M\rho_N &= M(\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N) = Nm; \\ D\rho_N &= D(\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N) = Db^2. \end{aligned} \quad (10.73)$$

Рассмотрим теперь случайную величину  $\zeta_N$ , 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

$$P\{a' < \rho_N < b'\} \approx \int_{a'}^{b'} p_{\zeta_N}(x) dx. \quad (10.74)$$

Смысл (10.74) 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 МК. Пусть требуется вычислить среднее значение  $\langle A \rangle$  какой-либо физической величины  $A$ :

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i e^{-E_i/T}}{\sum_i e^{-E_i/T}}, \quad (10.75)$$

или, в более общем виде (см. (8.1)),

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A_i w_i}{\sum_i w_i} = \frac{\sum_i A_i w_i}{Z}, \quad (10.76)$$

где  $w_i$  — статистический вес, соответствующий собственному состоянию  $i$  системы.

Будем рассматривать значения  $A_i$  как независимые случайные величины, тогда  $M A_i = \langle A \rangle$ . Пусть дисперсия этих случайных величин равна  $D A_i = b^2$ .

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  $\sigma$  следует, что

$$P \left\{ N \langle A \rangle - 3b\sqrt{N} < \rho_N < N \langle A \rangle + 3b\sqrt{N} \right\} \approx 0,997, \quad (10.77)$$

следовательно,

$$P \left\{ \langle A \rangle - \frac{3b}{\sqrt{N}} < \frac{\rho_N}{N} < \langle A \rangle + \frac{3b}{\sqrt{N}} \right\} \approx 0,997. \quad (10.78)$$

Перепишем (10.78) следующим образом:

$$P \left\{ \left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i - \langle A \rangle \right| < \frac{3b}{\sqrt{N}} \right\} \approx 0,997. \quad (10.79)$$

Фактически, последнее соотношение дает и метод расчета и оценку погрешности. Действительно, сгенерируем  $N$  значений случайной величины  $\xi$ . Из (10.79) видно, что среднее арифметическое этих значений будет прибли-

женно равно искомому  $\langle A \rangle$ , и с большой вероятностью погрешность такого приближения не превосходит величины  $3b/\sqrt{N}$ , где

$$b^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\xi_i - \langle \xi \rangle)^2. \quad (10.80)$$

С увеличением  $N$  эта погрешность стремится к нулю. На практике часто предпочитают вместо этой погрешности выбирать вероятную ошибку  $0,6745b/\sqrt{N}$ .

### 10.3. Расчет интегралов методом Монте-Карло

Для конкретизации представленной в предыдущем разделе общей схемы рассмотрим теперь практическую задачу расчета определенного интеграла методом МК. 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

$$I = \int_a^b g(x) dx. \quad (10.81)$$

Для расчета выберем произвольную плотность распределения  $p(x)$ , определенную на том же интервале, причем

$$\int_a^b p(x) dx = 1. \quad (10.82)$$

Определим случайную величину

$$\eta = \frac{g(\xi)}{p(\xi)}, \quad (10.83)$$

где  $\xi$  — случайная величина, распределенная с плотностью  $p(x)$  на  $(a, b)$ . Тогда математическое ожидание  $\eta$  будет равно искомому интегралу:

$$M\eta = \int_a^b \frac{g(x)}{p(x)} p(x) dx = I. \quad (10.84)$$

Рассмотрим  $N$  независимых случайных величин  $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N$  и применим к их сумме центральную предельную теорему, тогда

$$P \left\{ \left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta_i - I \right| < 3 \sqrt{\frac{D\eta}{N}} \right\} \approx 0,997. \quad (10.85)$$

Таким образом, если выбрано  $N$  случайных значений  $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ , то при достаточно большом  $N$

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{g(\xi_i)}{p(\xi_i)} \approx I, \quad (10.86)$$

и погрешность расчета не превосходит  $3\sqrt{D\eta/N}$ , где

$$D\eta = M\eta^2 - I^2 = \int_a^b \frac{g^2(x)}{p(x)} dx - I^2 \cong \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{g^2(\xi_i)}{p(\xi_i)} - I^2. \quad (10.87)$$

Соотношения (10.86) и (10.87) для расчета интеграла и оценки погрешности получены корректно с учетом центральной предельной теоремы. Следует отметить, что сходимость результата (10.86) к точному значению следует также из закона больших чисел, согласно которому для любого  $\varepsilon > 0$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P \left\{ \left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta_i - I \right| < \varepsilon \right\} = 1. \quad (10.88)$$

Более того, справедлив *усиленный закон больших чисел*:

$$P \left\{ \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta_i = I \right\} = 1. \quad (10.89)$$

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:

$$\left( \int_a^b |u(x)v(x)| dx \right)^2 \leq \int_a^b u^2(x) dx \int_a^b v^2(x) dx. \quad (10.90)$$

Положим

$$u(x) = \frac{g(x)}{\sqrt{p(x)}}, \quad v(x) = \sqrt{p(x)}, \quad (10.91)$$

тогда из (10.90) находим

$$\left( \int_a^b |g(x)| dx \right)^2 \leq \int_a^b \left( \frac{g^2(x)}{p(x)} \right) dx \int_a^b p(x) dx \equiv \int_a^b \left( \frac{g^2(x)}{p(x)} \right) dx. \quad (10.92)$$

Комбинируя (10.92) и определение дисперсии (10.87), находим оценку снизу для дисперсии:

$$D\eta \geq \left( \int_a^b |g(x)| dx \right)^2 - I^2. \quad (10.93)$$

Выберем распределение

$$p_0(x) = C |g(x)|, \quad C^{-1} = \int_a^b |g(x)| dx. \quad (10.94)$$

Отсюда следует, что

$$\int_a^b \frac{g^2(x)}{p_0(x)} dx = \frac{1}{C} \int_a^b |g(x)| dx = \left( \int_a^b |g(x)| dx \right)^2. \quad (10.95)$$

Подставив (10.95) в выражение для дисперсии, имеем

$$D\eta = \left( \int_a^b |g(x)| dx \right)^2 - I^2. \quad (10.96)$$

Таким образом, выбор функции (10.94) в качестве функции распределения приводит к наименьшей ошибке (10.96), т. е. низшей границе неравенства (10.93). Такой расчет интеграла с наиболее близкой к (10.94) плотностью распределения называется *существенной выборкой*.

Для иллюстрации эффективности такого выбора приведем тестовый пример. Допустим, требуется рассчитать интеграл

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x dx = 1 \quad (10.97)$$

методом МК. Используем для расчета интеграла различные нормированные функции распределения, также определенные на интервале  $(0, \pi/2)$ :

$$p_1(x) = \frac{2}{\pi}, \quad p_2(x) = \frac{8x}{\pi^2}, \quad p_3(x) = \frac{3\sqrt{2}}{\pi\sqrt{\pi}} \sqrt{x} \quad (10.98)$$

(рис. 10.20).

В табл. 10.3 приведены расчетные формулы для генерации случайных чисел, распределенных на интервале  $(0, \pi/2)$  с функциями распределения (10.98), а также для расчета интеграла (10.97),  $R$  — случайное число, равномерно распределенное на отрезке  $(0, 1)$ .

На рис. 10.21 показан процесс сходимости расчетного значения интеграла  $I$  (10.97) к точному значению в зависимости от числа  $N$  сгенерированных случайных точек.

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  $p_1(x)$  наиболее близко к подынтегральной функции  $f(x)$  (см. рис. 10.20), поэтому дисперсия (10.93) значений  $I(N)$  при выборе этого распределения будет меньше, чем при выборе распределений  $p_1(x)$  и  $p_2(x)$ .

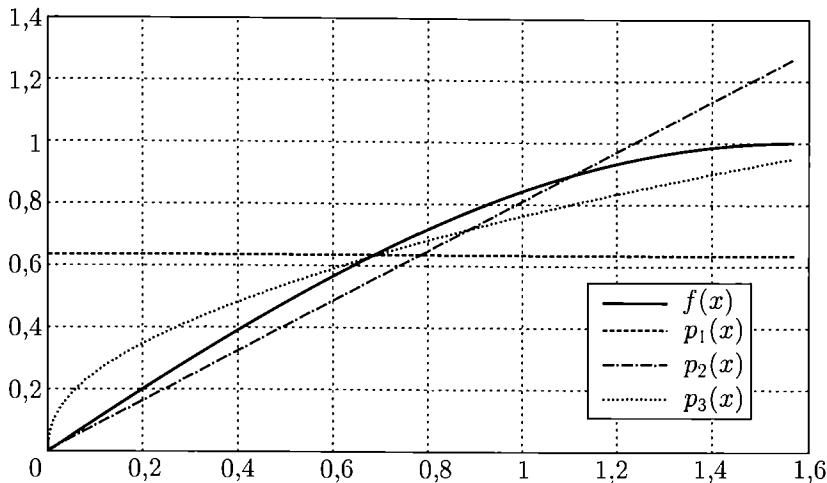


Рис. 10.20. Подынтегральная функция  $f(x)$  и различные плотности распределения для расчета интеграла методом МК

Таблица 10.1. Расчет интеграла (10.97) на основе случайных распределений (10.98)

Функция распределения $p(x)$	Случайные числа, распределенные по закону $p(x)$	Расчетное значение интеграла в зависимости от числа итераций
$p_1(x) = \frac{2}{\pi}x$	$\xi = \frac{\pi}{2}R$	$I(N) = \frac{\pi}{2N} \sum_{i=1}^N \sin \xi_i$
$p_2(x) = \frac{8x}{\pi^2}$	$\xi = \frac{\pi}{2}\sqrt{R}$	$I(N) = \frac{\pi^2}{8N} \sum_{i=1}^N \frac{\sin \xi_i}{\xi_i}$
$p_3(x) = \frac{3\sqrt{2}}{\pi\sqrt{\pi}}\sqrt{x}$	$\xi = \frac{\pi}{2}R^{3/2}$	$I(N) = \frac{\pi^{3/2}}{3\sqrt{2}N} \sum_{i=1}^N \frac{\sin \xi_i}{\sqrt{\xi_i}}$

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

$$I(N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\sin \xi_i}{\sin \xi_i} \equiv 1, \quad (10.99)$$

т. е. для любого количества генераций случайной величины мы сразу получаем точный ответ. Но это возможно потому, что нахождение случайной величины  $\xi$  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 МК напрямую зависит от удачного выбора функции распределения моделируемой случайной величины.

Эффективность метода МК также связана с так называемой *конструктивной размерностью* рассчитываемых величин. Пусть необходимо рассчитать

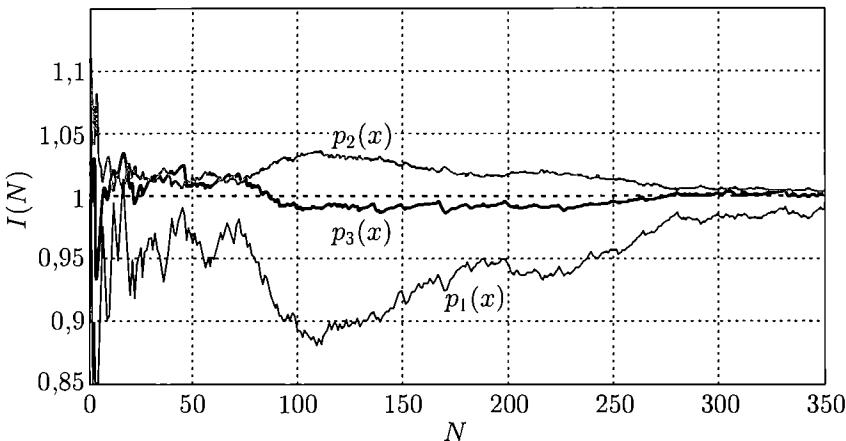


Рис. 10.21. Выбор функции распределения сильно влияет на скорость сходимости расчета интеграла методом МК

математическое ожидание случайной величины  $\xi$ . Если для расчета случайной величины  $\xi$  необходимо сгенерировать  $n$  случайных чисел  $R$ , т. е.

$$\xi = f(R_1, \dots, R_n), \quad (10.100)$$

то  $n$  есть конструктивная размерность  $\xi$ . 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 МК можно рассматривать как моделирование точки с декартовыми координатами  $(R_1, \dots, R_n)$ , равномерно распределенной в  $n$ -мерном единичном кубе:

$$0 \leq R_1 \leq 1, \quad 0 \leq R_2 \leq 1, \quad \dots, \quad 0 \leq R_n \leq 1, \quad (10.101)$$

в котором рассчитывается искомая величина:

$$M\xi = \int_0^1 \dots \int_0^1 f(R_1, \dots, R_n) dR_1 \dots dR_n \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f((R_1)_i, \dots, (R_n)_i). \quad (10.102)$$

Эффективность расчета зависит также от *трудоемкости* алгоритма. Рассмотрим опять задачу расчета математического ожидания величины  $\xi$ :  $\langle \xi \rangle = M\xi$ . После генерации  $N$  значений случайной величины имеем оценку

$$\langle \xi \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i. \quad (10.103)$$

Каждый расчет величины  $\xi_i$  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  $\xi_i$  (величина  $t$  может измеряться, например, в микросекундах, а может отражать число элементарных операций). Будем полагать, что  $t$

определенено для конкретного компьютера. Очевидно, полное время расчета равно

$$T = Nt. \quad (10.104)$$

Вероятная ошибка расчета

$$r_N = 0,6745 \sqrt{\frac{D\xi}{N}}, \quad (10.105)$$

где  $D\xi$  — дисперсия (10.105) с учетом (10.106) может быть записано следующим образом:

$$r_N = 0,6745 \sqrt{\frac{tD\xi}{T}}. \quad (10.106)$$

Если полное время расчета  $T$  фиксировано, то вероятная ошибка зависит от произведения  $tD\xi$ . Эта величина называется трудоемкостью алгоритма МК. Чем больше время, затрачиваемое на реализацию одного случайного значения в (10.103), тем большее погрешность при одном и том же времени счета.

Эффективность метода МК растет с размерностью рассчитываемого интеграла. Расчет двумерных и трехмерных интегралов методом МК более эффективен, чем расчет при помощи разностных схем. Метод МК 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.

## 10.4. Марковская цепь и принцип детального равновесия

**10.4.1. 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

$$x_0, x_1, \dots, x_n, \dots \quad (10.107)$$

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 (10.107) описывает последовательные переходы от одной базисной функции к другой.

Обозначим через

$$P_{x_0, x_1, \dots, x_{n-1} \rightarrow x_n} \quad (10.108)$$

вероятность появления нового состояния  $x_n$  при условии реализации предыдущих состояний  $x_0, x_1, \dots, x_{n-1}$  (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:

$$P_{x_0, x_1, \dots, x_{n-1} \rightarrow x_n} = P_{x_{n-1} \rightarrow x_n}. \quad (10.109)$$

*Абсолютная вероятность* реализации последовательности  $x_0, x_1, \dots, x_n$  будет равна

$$P(x_0, x_1, \dots, x_n) = P(x_0) P_{x_0 \rightarrow x_1} \dots P_{x_{n-2} \rightarrow x_{n-1}} P_{x_{n-1} \rightarrow x_n}, \quad (10.110)$$

здесь  $P(x_0)$  — абсолютная вероятность реализации состояния  $x_0$ .

Согласно (10.110), любую реализацию последовательности состояний  $x_0, x_1, \dots, x_n$  можно получить из начального состояния  $x_0$ , вероятность реализации такой последовательности будет

$$P = P_{x_0 \rightarrow x_1} \dots P_{x_{n-2} \rightarrow x_{n-1}} P_{x_{n-1} \rightarrow x_n}. \quad (10.111)$$

*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:

$$P(x_i) \sim e^{-\frac{H(x_i)}{T}}, \quad (10.112)$$

где  $H$  — гамильтониан системы.

Для того, чтобы марковская цепь могла достичь инвариантного распределения, на вероятности переходов (10.109) следует наложить ряд условий.

Во-первых, определим само понятие *инвариантного* или *стационарного* распределения вероятностей  $P(x_i)$  следующими условиями:

$$P(x_i) > 0, \quad \sum_i P(x_i) = 1, \quad P(x_j) = \sum_i P(x_i) P_{x_i \rightarrow x_j}. \quad (10.113)$$

Последнее условие в (10.113) 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 *аperiодической*, и тогда состояния также называются аperiодическими.

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 аperiодических 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 аperiодическая 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.

**10.4.2. Принцип детального равновесия.** Основная задача статистической механики, как уже отмечалось ранее, состоит в расчете наблюдаемых термодинамических величин из статистического усреднения:

$$\langle A \rangle = \frac{\int A(\Omega) \rho(\Omega) d\Omega}{Z}; \quad Z = \int \rho(\Omega) d\Omega. \quad (10.114)$$

Здесь интегрирование производится по всему фазовому пространству  $\Omega$ ,  $\rho$  — функция распределения (в частном случае — распределение Гиббса (10.109)).

Среднее (10.114) в общем случае представляет собой многомерный интеграл по фазовому пространству. Общие правила расчета этого интеграла методом предпочтительной выборки в рамках алгоритма МК справедливы и здесь. Допустим, создана цепь случайных состояний  $\Omega_i$  для оценки интегралов (10.114) с некоторым заданным распределением  $P(\Omega)$ . Тогда справедлива оценка

$$\langle A \rangle \approx \frac{\sum_{i=1}^N A(\Omega_i) \rho(\Omega_i) P^{-1}(\Omega_i)}{\sum_{i=1}^N \rho(\Omega_i) P^{-1}(\Omega_i)}. \quad (10.115)$$

Если в качестве вероятности  $P(\Omega)$  выбрать функцию распределения  $\rho$ ,

$$P(\Omega) = \frac{\rho(\Omega)}{Z}, \quad (10.116)$$

то вычисление  $\langle A \rangle$  сводится к простому арифметическому среднему:

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A(\Omega_i). \quad (10.117)$$

Так как распределение (10.116) является инвариантным для рассматриваемой системы, марковская цепь на основе такого распределения должна быть эргодической. Сформулируем принцип, согласно которому можно сконструировать алгоритм реализации распределения (10.116).

Прежде всего, для эргодичности схемы должны быть выполнены условия (10.113), и для практической реализации алгоритма необходимо выполнение дополнительных ограничительных условий на вероятности перехода:

$$P_{\Omega' \rightarrow \Omega} \geq 0, \quad \sum_{\Omega'} P_{\Omega \rightarrow \Omega'} = 1, \quad P(\Omega) = \sum_{\Omega'} P_{\Omega' \rightarrow \Omega} P(\Omega'). \quad (10.118)$$

Первое условие — вероятности переходов должны выбираться неотрицательными. Второе условие означает, что полная вероятность того, что система перейдет из любого состояния  $\Omega$  в какое-либо другое состояние, равна единице, т. е. из состояния  $\Omega$  обязательно есть выход, оно не является «ловушкой». Третье условие эквивалентно последнему из соотношений (10.113) и означает, что искомое распределение  $P(\Omega)$  — инвариантное, т. е. сумма вероятностей перехода из всех состояний в данное  $\Omega$  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

$$W_{\Omega' \rightarrow \Omega} = \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{P_{\Omega' \rightarrow \Omega}}{dt} \quad (10.119)$$

называется *интенсивностью перехода* или *плотностью вероятности перехода*. Предел (10.119) понимается в смысле того, что полное время расчета многое больше  $dt$ , так что можно аппроксимировать дискретные шаги непрерывным процессом.

Последнее из соотношений (10.118) можно с учетом эволюции системы во времени  $t$  переписать следующим образом:

$$P(\Omega, t+dt) = \sum_{\Omega'} P_{\Omega' \rightarrow \Omega, dt} P(\Omega', t), \quad (10.120)$$

где  $P_{\Omega' \rightarrow \Omega, dt}$  — условная вероятность перехода системы из состояния  $\Omega'$  в состояние  $\Omega$  за время  $dt$ . Далее выделим в (10.120) слагаемое с  $\Omega' = \Omega$ :

$$P(\Omega, t + dt) = P_{\Omega \rightarrow \Omega, dt} P(\Omega, t) + \sum_{\Omega' \neq \Omega} P_{\Omega \rightarrow \Omega', dt} P(\Omega', t). \quad (10.121)$$

Соотношение сохранения вероятностей, второе в (10.118), можно представить следующим образом:

$$P_{\Omega \rightarrow \Omega, dt} = 1 - \sum_{\Omega' \neq \Omega} P_{\Omega' \rightarrow \Omega, dt}. \quad (10.122)$$

Подставив (10.123) в (10.122), получаем:

$$\begin{aligned} P(\Omega, t+dt) &= P(\Omega, t) \left( 1 - \sum_{\Omega' \neq \Omega} P_{\Omega \rightarrow \Omega', dt} \right) + \sum_{\Omega' \neq \Omega} P_{\Omega' \rightarrow \Omega, dt} P(\Omega', t) \Rightarrow \\ &\Rightarrow P(\Omega, t+dt) - P(\Omega, t) = \\ &= - \sum_{\Omega' \neq \Omega} P_{\Omega \rightarrow \Omega', dt} P(\Omega, t) + \sum_{\Omega' \neq \Omega} P_{\Omega' \rightarrow \Omega, dt} P(\Omega', t). \end{aligned} \quad (10.123)$$

Поделив (10.123) на  $dt$  и учитывая определение (10.119), эволюцию вероятности  $P(\Omega)$  можно описать в виде своеобразного *уравнения баланса* или *скоростного уравнения*, описывающего производную по времени — времени расчета — этой величины:

$$\frac{dP(\Omega)}{dt} = - \sum_{\Omega' \neq \Omega} W_{\Omega \rightarrow \Omega'} P(\Omega) + \sum_{\Omega' \neq \Omega} W_{\Omega' \rightarrow \Omega} P(\Omega'). \quad (10.124)$$

Первый член справа в (10.124) описывает скорость всех переходов из состояния  $\Omega$  во все другие состояния, а второй — скорость переходов из всех состояний, отличных от  $\Omega$ , в состояние  $\Omega$ . Слагаемые с  $\Omega' = \Omega$  в обеих суммах компенсируют друг друга. Выражение (10.124) называется также *уравнением Колмогорова* (или *уравнением Колмогорова–Чэмпмена*, см. [2]).

В состоянии равновесия производная  $\frac{dP}{dt}$  в (10.124) равна нулю, и

$$\sum_{\Omega'} W_{\Omega \rightarrow \Omega'} P(\Omega) = \sum_{\Omega'} W_{\Omega' \rightarrow \Omega} P(\Omega'). \quad (10.125)$$

Используя (10.125), можно убедиться в справедливости соотношения, аналогичного последнему соотношению в (10.118):

$$\sum_{\Omega'} W_{\Omega' \rightarrow \Omega} P(\Omega') = \frac{dP(\Omega)}{dt}. \quad (10.126)$$

Для облегчения дальнейшего практического применения уравнения детального баланса, на (10.125) можно наложить более сильные ограничения. Потребуем, чтобы (10.125) было справедливо для каждого состояния  $\Omega'$  под знаком суммы:

$$W_{\Omega \rightarrow \Omega'} P(\Omega) = W_{\Omega' \rightarrow \Omega} P(\Omega'). \quad (10.127)$$

Соотношение (10.127) 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  $W_{\Omega' \rightarrow \Omega}$ :

$$W_{\Omega' \rightarrow \Omega} = \begin{cases} \frac{P(\Omega')}{P(\Omega)}, & \text{если } \frac{P(\Omega')}{P(\Omega)} < 1; \\ 1, & \text{если } \frac{P(\Omega')}{P(\Omega)} \geq 1. \end{cases} \quad (10.128)$$

Несложно убедиться прямой подстановкой, что условие (10.127) справедливо для (10.128).

Можно сформулировать более общий вариант алгоритма Метрополиса, выбрав  $W_{\Omega' \rightarrow \Omega}$  следующим образом:

$$W_{\Omega' \rightarrow \Omega} = \frac{1}{\tau} \min \left( 1; \frac{P(\Omega')}{P(\Omega)} \right), \quad (10.129)$$

где  $\tau \sim 1$  — произвольная константа. Соотношение (10.127) также удовлетворяет условию (10.129) при любом параметре  $\tau$ . Варьируя параметр  $\tau$ , можно менять скорость сходимости алгоритма МК.

В алгоритме *тепловой ванны* (*thermal bath*) используется следующий вид интенсивности переходов:

$$W_{\Omega' \rightarrow \Omega} = \frac{P(\Omega')}{P(\Omega) + P(\Omega')}, \quad (10.130)$$

это выражение также удовлетворяет детальному балансу (10.127).

## 10.5. Практическая реализация методов Монте-Карло

Для демонстрации эффективности методов МК рассмотрим их использование при исследовании различных физических моделей.

### 10.5.1. Модель Изинга.

**10.5.1.1. Формулировка модели и некоторые аналитические результаты.** Рассмотрим уже упоминавшуюся в гл. 7 модель Изинга:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i^Z S_j^Z - H \sum_i S_i^Z, \quad (10.131)$$

где  $S_i^Z = \pm 1$  — 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 либо «заморожены»

и ориентированы вдоль поля (ферромагнитное состояние, случай  $J_{ij} > 0$ ), либо чередуются (антиферромагнитное состояние, случай  $J_{ij} < 0$ ):

$$\begin{aligned} \dots & \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \dots & J_{ij} > 0, \\ \dots & \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots & J_{ij} < 0. \end{aligned} \quad (10.132)$$

В обоих случаях основное состояние модели Изинга является упорядоченным состоянием со спонтанной намагниченностью, и только при достаточно большой температуре ( $\Theta \sim 10^3$  К), называемой *температурой Кюри* для ферромагнетика и *температурой Нееля* для антиферромагнетика, происходит фазовый переход в неупорядоченное, *парамагнитное состояние*. Средний магнитный момент системы в ферромагнитном состоянии максимальен, а в антиферромагнитном равен нулю.

Будем рассматривать в (10.131) 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  $i$ ,

$$H_i = J \sum_{\langle j \rangle} S_j^Z + H \quad (10.133)$$

(здесь суммирование производится по всем соседям узла  $i$ ), заменяется его средним значением:

$$H_i \rightarrow \langle H_i \rangle = J \sum_{\langle j \rangle} S_j^Z + H = JZ \langle S_j^Z \rangle + H, \quad (10.134)$$

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. 10.22):

$$R = \tanh \left( \frac{H + ZJR}{T} \right). \quad (10.135)$$

Здесь  $R = \langle S_j^Z \rangle = M/N$ ;  $N$  — число узлов в системе;  $M$  — полный магнитный момент,

$$M = \frac{\langle N_\uparrow \rangle - \langle N_\downarrow \rangle}{N}, \quad (10.136)$$

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:

$$\langle A \rangle = \sum_n \frac{A_n e^{-\beta E_n}}{Z}; \quad Z = \sum_n e^{-\beta E_n}; \quad \beta = \frac{1}{T}. \quad (10.137)$$

Температура Кюри, при которой магнитный момент обращается в нуль в нулевом внешнем поле, в приближении среднего поля равна

$$\Theta = ZJ \sim 1000 \text{ К.} \quad (10.138)$$

Это температура фазового перехода «ферромагнетик–парамагнетик», при этом роль параметра порядка для этого фазового перехода играет величина  $R$ .

В предельных случаях малых температур и вблизи температуры Кюри средний магнитный момент, описываемый в общем случае в отсутствие внешнего магнитного поля уравнением

$$R = \operatorname{th}\left(\frac{\Theta}{T}R\right), \quad (10.139)$$

ведет себя следующим образом:

$$\begin{aligned} R &= 1 - 2e^{-2\frac{\Theta}{T}}, \quad T \rightarrow 0; \\ R^2 &= 3y - \frac{12}{5}y^2, \quad T \rightarrow \Theta, \quad y = \frac{\Theta-T}{\Theta} \ll 1. \end{aligned} \quad (10.140)$$

Экспериментально измеряемую удельную магнитную восприимчивость системы можно рассчитать следующим образом:

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial M}{\partial H} \Big|_{H=0} = \frac{1}{N} \left( \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right). \quad (10.141)$$

Выражение (10.141) можно рассчитать в приближении среднего поля. Вблизи точки фазового перехода магнитная восприимчивость ферромагнетика подчиняется закону Кюри (рис. 10.23):

$$\chi \sim \frac{1}{|T - \Theta|}. \quad (10.142)$$

Выражение для восприимчивости в приближении среднего поля и при  $H \rightarrow 0$  выглядит следующим образом:

$$\chi = \frac{1 - R^2}{T - \Theta (1 - R^2)}, \quad (10.143)$$

в предельных случаях:

$$\chi = \begin{cases} \frac{4}{T} e^{-2\frac{\Theta}{T}}, & T \rightarrow 0; \\ \frac{1}{2(T - \Theta)}, & T \rightarrow \Theta - 0; \\ \frac{1}{\Theta - T}, & T \rightarrow \Theta + 0. \end{cases} \quad (10.144)$$

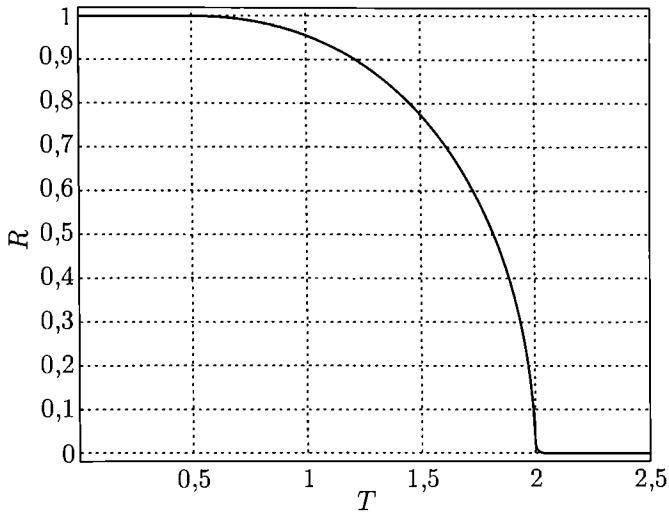


Рис. 10.22. Зависимость среднего магнитного момента от температуры в одномерной модели Изинга в приближении среднего поля и ближайших соседей. Внешнее поле  $H = 0$ ,  $Z = 2$ ,  $J = 1$

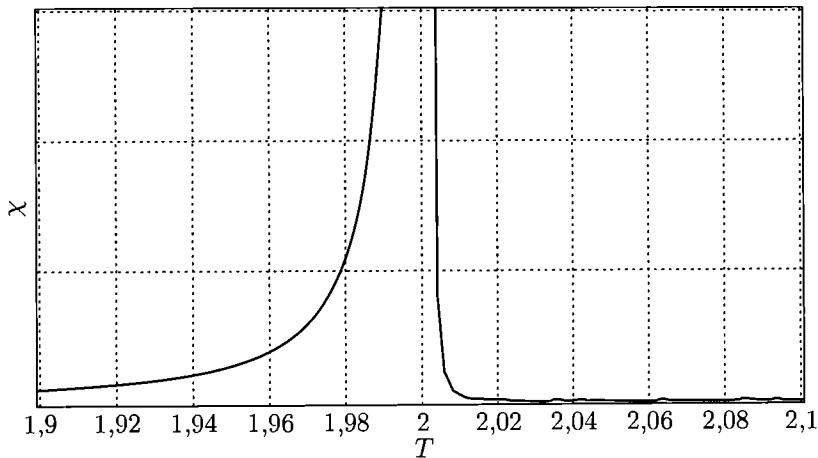


Рис. 10.23. Зависимость восприимчивости от температуры в модели Изинга в приближении среднего поля и ближайших соседей. Внешнее поле  $H = 0$ ,  $Z = 2$ ,  $J = 1$

Приведем также соотношения для теплоемкости и свободной энергии в приближении среднего поля, выраженные через параметр порядка  $R$ :

$$F = -T \ln Z = \frac{NH_0R}{2T} - TN \ln \left( 2 \operatorname{ch} \left( \frac{H + H_0}{T} \right) \right), \quad H_0 = ZJR, \quad (10.145)$$

$$C = \frac{dE}{dT} = -\frac{N\Theta}{2} \frac{dR^2}{dT} = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}.$$

При численном моделировании теплоемкость системы предпочтительней рассчитывать через флуктуацию энергии:

$$C = \frac{1}{T^2} \left( \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right). \quad (10.146)$$

Качественная температурная зависимость теплоемкости от температуры в приближении среднего поля показана на рис. 10.24.

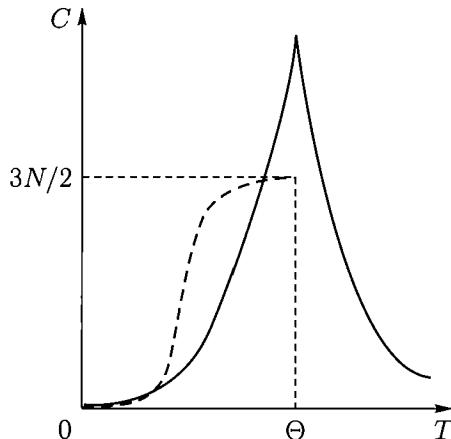


Рис. 10.24. Качественная температурная зависимость теплоемкости от температуры в приближении среднего поля (штриховая линия) и с учетом флуктуаций (сплошная линия)

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. 10.24) [46].

В предельных случаях приближение среднего поля дает следующие результаты:

$$C = \begin{cases} \frac{3}{2}N, & T \rightarrow \Theta; \\ 4\left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 Ne^{-2\frac{\Theta}{T}}, & T \rightarrow 0. \end{cases} \quad (10.147)$$

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:

$$R^+ = -\operatorname{th}\left(\frac{ZJR^- - H}{T}\right); \quad R^- = -\operatorname{th}\left(\frac{ZJR^+ - H}{T}\right), \quad (10.148)$$

при этом выражение для точки фазового перехода (температуры Нееля) совпадает с выражением для температуры Кюри в случае ферромагнетика:

$$\Theta = ZJ. \quad (10.149)$$

Принципиально отличается поведение восприимчивости (рис. 10.25), которая испытывает не расходимость, а только излом производной в точке  $T = \Theta$ :

$$\chi = \frac{1 - R^2}{T + (1 - R^2) \Theta}, \quad (10.150)$$

где  $R(T)$  удовлетворяет уравнению (10.139).

В предельных случаях восприимчивость (10.150) описывается следующими соотношениями:

$$\chi = \begin{cases} \frac{4}{T} e^{-2\frac{\Theta}{T}}, & T \rightarrow 0; \\ \frac{1}{2\Theta} (1 - y), \quad y = \frac{\Theta - T}{\Theta}, & T \rightarrow \Theta - 0; \\ \frac{1}{\Theta + T}, & T \rightarrow \Theta + 0. \end{cases} \quad (10.151)$$

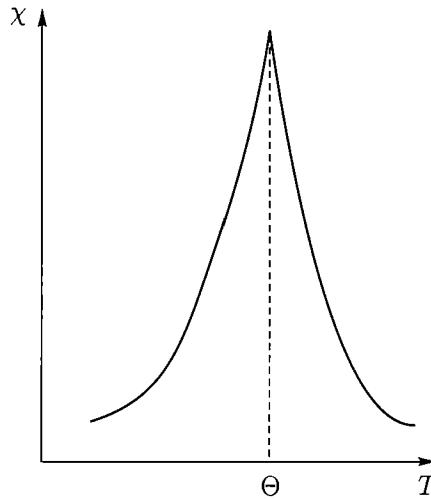


Рис. 10.25. Качественный рисунок зависимости восприимчивости антиферромагнетика от температуры в приближении среднего поля. В отличие от ферромагнитного случая восприимчивость не расходится в точке перехода, а имеет разрыв производной

Модель Изинга (10.131) при  $J_{ij} \equiv J$  решена точно для одномерного и двумерного случаев. Статистическая сумма для одномерной замкнутой изинговской цепочки уже рассчитывалась в гл. 8 (см. (8.90)). Пользуясь результатами п. 8.4.3, 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. 10.26):

$$R = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial H} = \frac{\operatorname{sh}(\beta H)}{\sqrt{\operatorname{sh}^2(\beta H) + 4e^{-4\beta J}}}. \quad (10.152)$$

Соответственно,

$$\chi = \beta e^{2\beta J}. \quad (10.153)$$

В температурной зависимости восприимчивости отсутствуют особенности как для ферромагнетика, так и для антиферромагнетика (рис. 10.27), что соответствует отсутствию фазового перехода в одномерном случае.

Для теплоемкости при нулевом магнитном поле имеем

$$C = N \frac{(\beta J)^2}{\operatorname{ch}^2(\beta J)}, \quad (10.154)$$

эта кривая также не имеет особенностей (рис. 10.28).

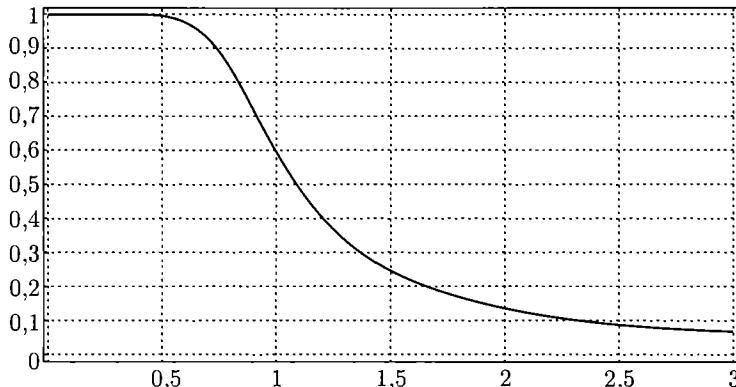


Рис. 10.26. Зависимость магнитного момента от температуры в одномерной бесконечной модели Изинга. Точное решение. Фазовый переход в модели отсутствует

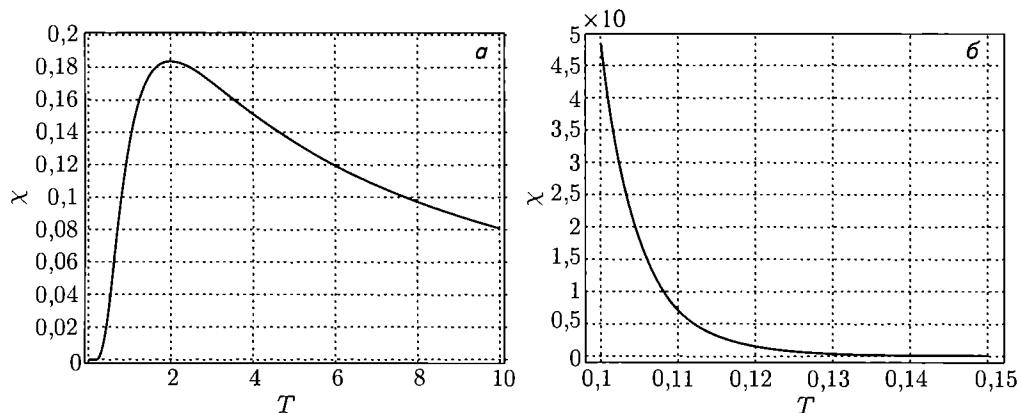


Рис. 10.27. Зависимость восприимчивости от температуры в одномерной бесконечной модели Изинга. Точное решение для антиферромагнетика  $J = -1$  (a) и ферромагнетика  $J = 1$  (б)

В двумерном случае Онзагером в 1944 г. было показано, что в плоской квадратной решетке существует фазовый переход при температуре, удовлетворяющей уравнению [36]:

$$\operatorname{th}\left(\frac{J}{\Theta}\right) = \sqrt{2} - 1. \quad (10.155)$$

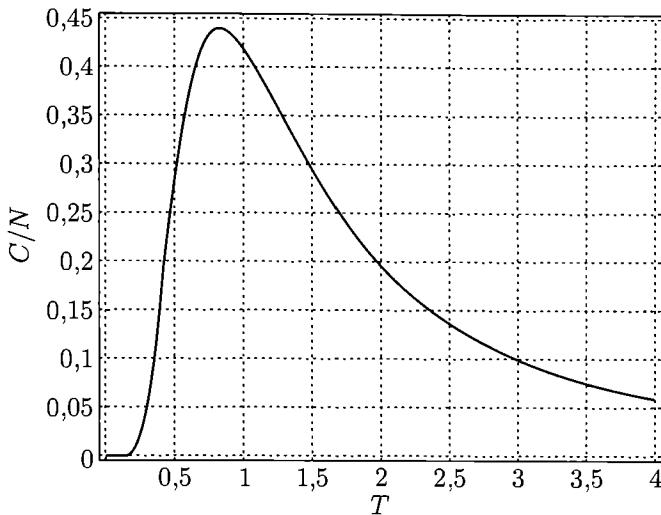


Рис. 10.28. Зависимость удельной теплоемкости от температуры в одномерной бесконечной модели Изинга. Точное решение

В этом случае теплоемкость в точке фазового перехода имеет логарифмическую особенность:

$$C(T \rightarrow \Theta) \sim \ln |T - \Theta|. \quad (10.156)$$

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

$$\Theta \sim ZJ. \quad (10.157)$$

**10.5.1.2. Метод Монте-Карло для модели Изинга.** Здесь будет рассмотрен метод МК 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  $\Omega$ :

$$P(\Omega) = e^{-E(\Omega)\beta}, \quad (10.158)$$

где  $E(\Omega)$  — энергия конфигурации спинов в системе. Под конфигурациями (или базисными функциями) понимается совокупность «мгновенных» состояний всех узлов пространственной решетки спинов, например,

$$|\Omega\rangle = |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\dots\rangle, \quad (10.159)$$

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 (10.131) в базисе (10.159) диагонален, поэтому каждой конфигурации  $n$  можно поставить в соответствие конкретное значение энергии:

$$E(\Omega_n) = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} (S_i^Z S_j^Z)_n - H \sum_i (S_i^Z)_n, \quad n = 1, 2, \dots, 2^N. \quad (10.160)$$

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 (10.119) в этом случае — алгоритм Метрополиса — представимо в виде

$$W_{1 \rightarrow 2} = \begin{cases} e^{\beta(E_1 - E_2)}, & E_1 < E_2; \\ 1, & E_1 \geq E_2, \end{cases} \quad (10.161)$$

где  $E_1, E_2$  — энергии старой и новой конфигураций спинов соответственно.

В алгоритме тепловой ванны (10.130) 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:

$$W_{1 \rightarrow 2} = \frac{e^{-\beta E_2}}{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2}}; \quad W_{2 \rightarrow 1} = \frac{e^{-\beta E_1}}{e^{-\beta E_1} + e^{-\beta E_2}}. \quad (10.162)$$

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 (10.127) для этого случая выглядит следующим образом:

$$2W_{S_i \rightarrow -S_i} P(S_i) = W_{-S_i \rightarrow S_i} P(-S_i). \quad (10.163)$$

Отсюда находим

$$\frac{W_{S_i \rightarrow -S_i}}{W_{-S_i \rightarrow S_i}} = \frac{P(-S_i)}{P(S_i)} = e^{-2S_i E_i \beta}, \quad (10.164)$$

здесь согласно (10.131)

$$E_i = J \sum_{j \neq i} S_j \quad (10.165)$$

есть энергия взаимодействия выделенного спина  $i$  с остальными спинами (как правило, рассматриваются ближайшие соседи). Глаубер [47] предложил такое выражение для интенсивности переходов:

$$W_{S_i \rightarrow -S_i} = \frac{1}{2\tau} (1 - S_i \text{th}(E_i \beta)). \quad (10.166)$$

Соотношение (10.166) называется *функцией Глаубера*. Оно также удовлетворяет условию детального баланса, при этом имеется возможность подбора параметра  $\tau$  для увеличения эффективности алгоритма при моделировании конкретной системы.

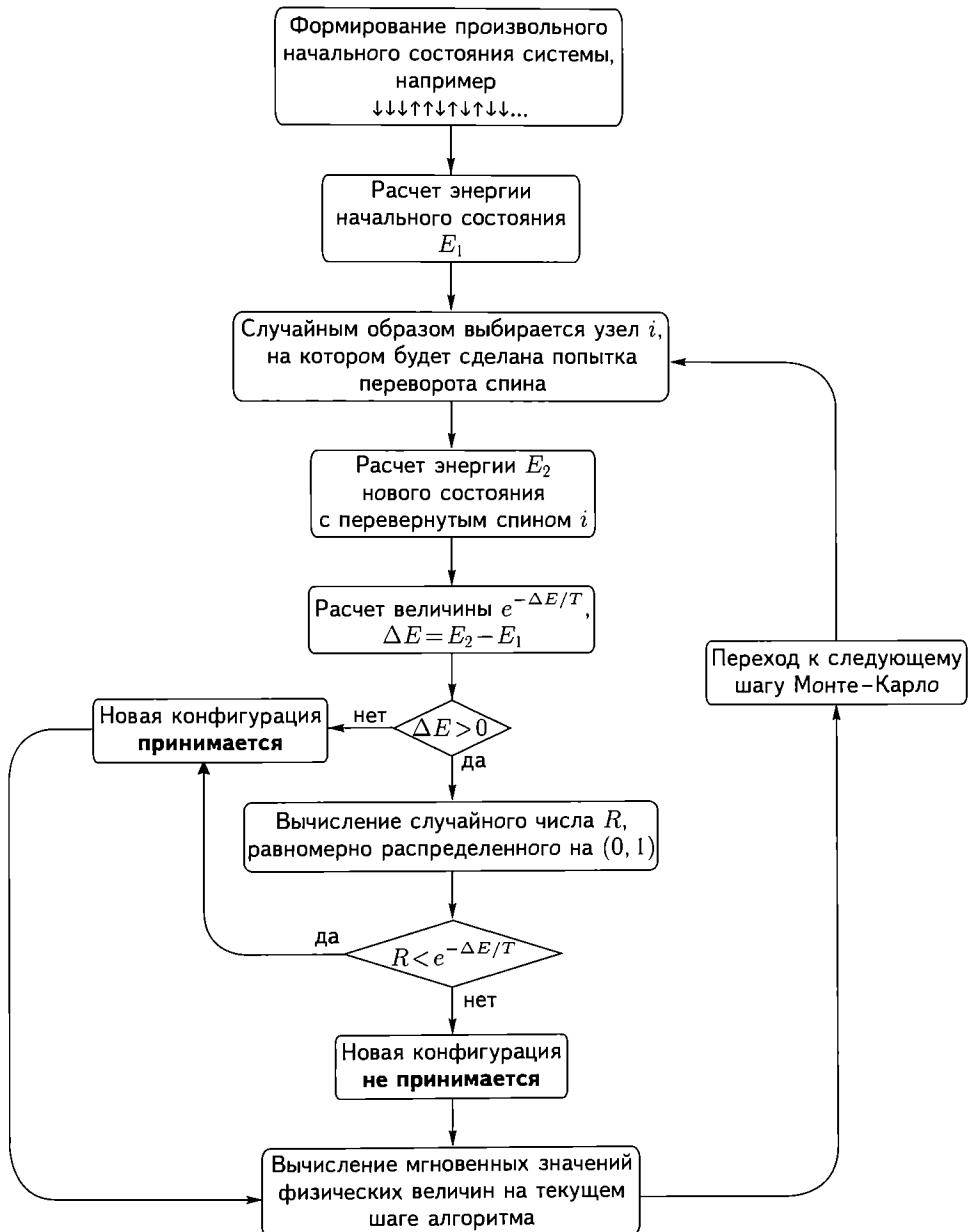


Рис. 10.29. Схема процедуры расчета модели Изинга с использованием алгоритма Метрополиса (10.128)

Сформулируем теперь конкретную схему алгоритма МК. Она показана на рис. 10.29 для расчета модели Изинга с использованием алгоритма Метрополиса (10.128).

Следует отметить особо, что если суммирование в (10.131) производится только по ближайшим соседям, то при расчете энергии  $E_2$  новой конфигурации, получающейся из предыдущей конфигурации переворотом спина на узле  $i$ , достаточно лишь пересчитать изменение энергии  $\Delta E$  вблизи спина  $i$ :

$$E_2 = E_1 + \Delta E. \quad (10.167)$$

Например, если рассматривается одномерный случай, то различие в энергии между новой и старой конфигурациями в соответствии с (10.131) будет равно (рис. 10.30)

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_2 - E_1 = \\ &= \left( -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} JS_i^Z S_j^Z - H \sum_i S_i^Z \right)_{\text{new}} - \left( -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} JS_i^Z S_j^Z - H \sum_i S_i^Z \right)_{\text{old}} = \\ &= -\frac{1}{2} J ((S_{i-1}^Z S_i^Z)_{\text{new}} + (S_i^Z S_{i+1}^Z)_{\text{new}} - (S_{i-1}^Z S_i^Z)_{\text{old}} - (S_i^Z S_{i+1}^Z)_{\text{old}}) - \\ &- H ((S_i^Z)_{\text{new}} - (S_i^Z)_{\text{old}}) = -((S_i^Z)_{\text{new}} - (S_i^Z)_{\text{old}}) \left( \frac{1}{2} J (S_{i-1}^Z + S_{i+1}^Z) + H \right) = \\ &= 2(S_i^Z)_{\text{old}} \left( \frac{1}{2} J (S_{i-1}^Z + S_{i+1}^Z) + H \right). \quad (10.168) \end{aligned}$$



Рис. 10.30. Перерасчет энергии затрагивает только узел  $i$  и соседние с ним

*Вне зависимости от принятия или непринятия новой конфигурации необходимо на каждом шаге МК вычислять искомую физическую величину  $A$  по данной мгновенной конфигурации. В результате реализуется неприводимая марковская цепь, выполняется детальный баланс (10.163), так что искомое среднее значение  $A$  равно (см. (10.117))*

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A_i, \quad (10.169)$$

где  $M$  — число шагов МК.

На рис. 10.31 представлены результаты моделирования двумерной модели Изинга методом МК. Рассматривалась квадратная решетка размера  $50 \times 50$  с периодическими граничными условиями, внешнее поле  $H = 0,03$ . Значения теплоемкости и восприимчивости рассчитывались из флюктуаций энергии и магнитного момента соответственно:  $C = (1/T^2) (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$ ,  $\chi = (1/T) (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$ . Значение температуры фазового перехода близко к (10.155), различие связано с конечностью размера системы. Различие значе-

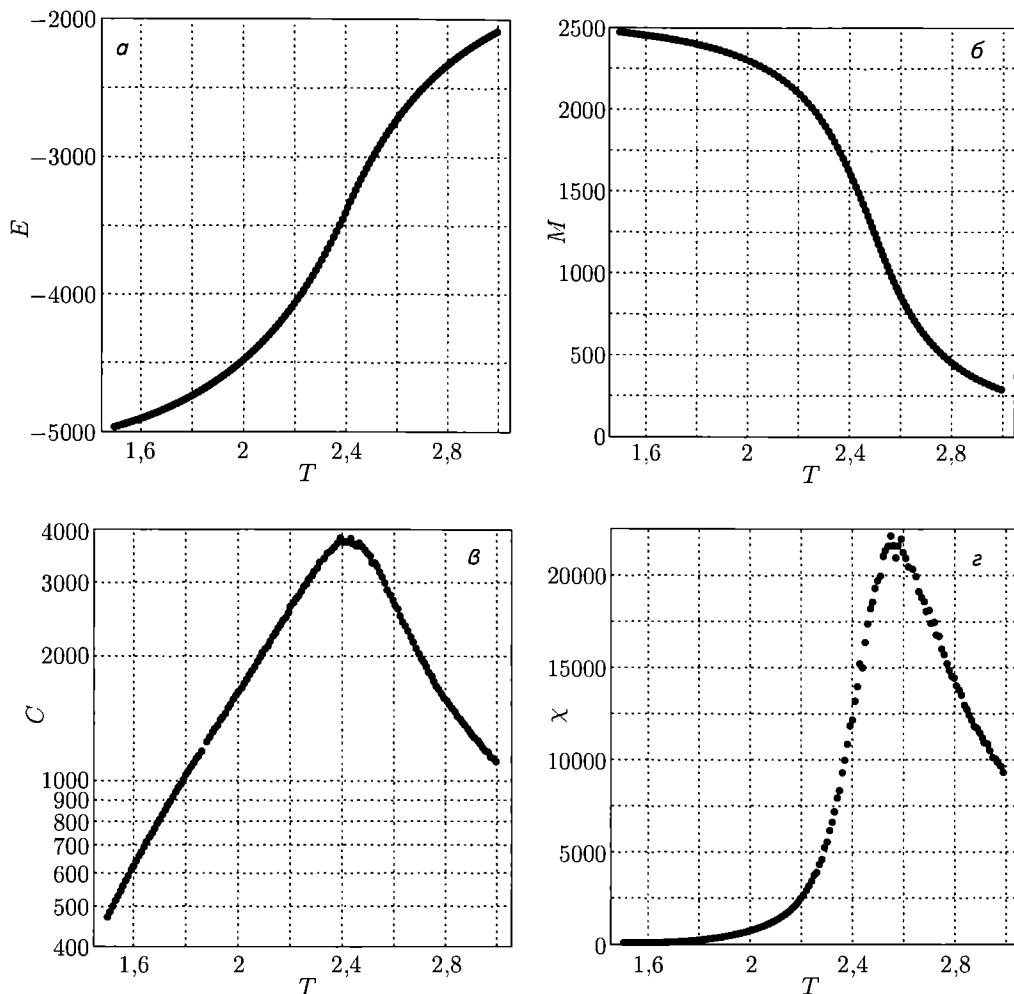


Рис. 10.31. Зависимость: *а* энергии; *б* магнитного момента; *в* теплоемкости (в логарифмическом масштабе); *г* восприимчивости от температуры в двумерной модели Изинга, полученные методом МК. Система  $50 \times 50$ , внешнее поле  $H = 0,03$

ний критической температуры, определенных по теплоемкости (рис. 10.31, *в*) и восприимчивости (рис. 10.31, *г*), объясняется ненулевым значением внешнего магнитного поля.

Заметим, что результаты на рис. 10.31, *с* для теплоемкости хорошо согласуются с теоретическим результатом Онзагера (10.166).

**10.5.2. 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. 6), то алгоритм МК может быть реализован и с сохранением суммарной проекции спина, т. е. в условиях канонического ансамбля. Такое моделирование пред-

ложил, 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 МК, явно учитывающий большой канонический ансамбль и переменное число частиц; для реализации этого алгоритма потребуется некоторая модификация принципа детального баланса.

**10.5.2.1. 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. 10.32). Полное число состояний в системе совпадает с числом состояний в модели Изинга:  $2^{N_a}$ . Границные 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.

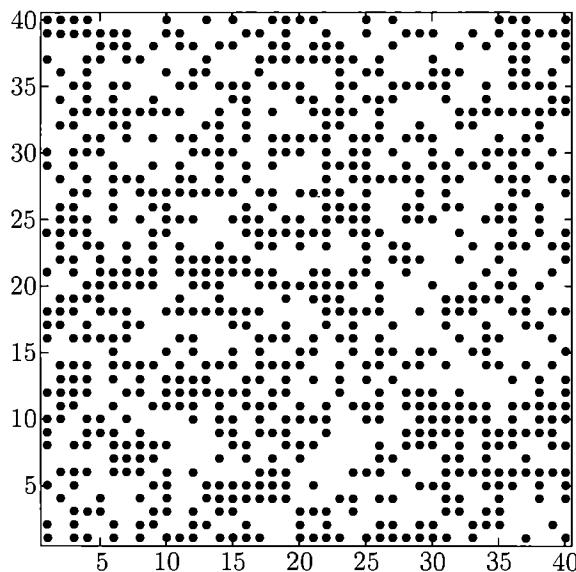


Рис. 10.32. Модель решеточного газа на квадратной решетке  $40 \times 40$ . Точки соответствуют узлам решетки, занятым частицами

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.

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. 10.33), физическая причина которого — наведенное диполь-дипольное взаимодействие:

$$V_{ij} = 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^6 \right), \quad (10.170)$$

где  $\epsilon$ ,  $\sigma$  — параметры потенциала: характерный масштаб энергии и характерное межчастичное расстояние.

Взаимодействие  $V_{ij}$  необязательно должно иметь вид (10.170). Можно рассмотреть и другие, достаточно сложные формы межчастичного взаимодействия. Схема алгоритма МК при этом не изменится. В этом состоит одно из важных преимуществ метода МК.

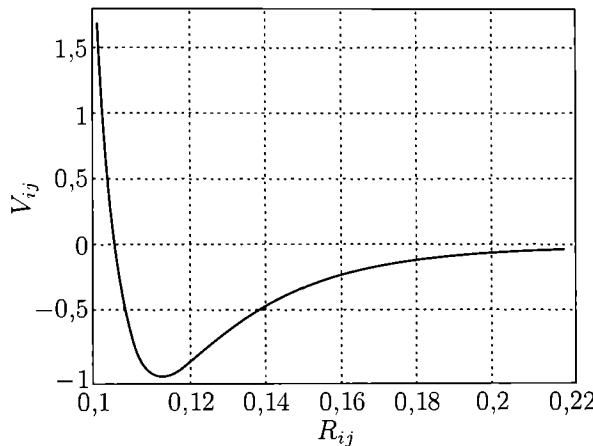


Рис. 10.33. Потенциал Леннарда — Джонса для параметров  $\epsilon = 1$ ;  $\sigma = 0.1$

Определим безразмерную плотность частиц в такой постановке задачи как

$$\rho = \frac{\left\langle \sum_i n_i \right\rangle}{N_a} = \frac{N}{N_a}, \quad (10.171)$$

где  $N$  — 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:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} n_i n_j - \mu \sum_i n_i. \quad (10.172)$$

Химический потенциал  $\mu$  отвечает переменному числу частиц в системе и является функцией внешнего давления  $P$ . Можно аналитически связать вели-

чины  $\mu$  и  $P$  через термодинамические соотношения:

$$\begin{aligned} N \partial \mu &= V \partial P; \\ V \equiv N_a \Rightarrow \frac{\partial \mu}{\partial P} &= \frac{N_a}{N} \Rightarrow \frac{\partial \mu}{\partial P} = \frac{\partial \mu}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial P} \Rightarrow \frac{\partial \mu}{\partial \rho} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \rho} \Rightarrow \\ &\Rightarrow P(\rho) = \rho \mu(\rho) - \int_0^\rho \mu(\rho') d\rho'. \end{aligned} \quad (10.173)$$

В последнем соотношении в (10.173) учтено, что  $P \rightarrow 0$  при  $\rho \rightarrow 0$ .

Известно решение модели (10.172) в приближении среднего поля (см., например [10]). В этом приближении химический потенциал связан с плотностью и температурой следующим соотношением:

$$\mu = -\rho u(0) - T \ln \frac{1-\rho}{\rho}; \quad u(0) = \sum_j V_{ij}, \quad (10.174)$$

а уравнение состояния имеет вид

$$P = -\frac{\rho^2}{2} u(0) - T \ln(1-\rho), \quad (10.175)$$

которое описывает изотермы, качественно совпадающие с изотермами модели Ван-дер-Ваальса (рис. 10.34).

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. 10.34.

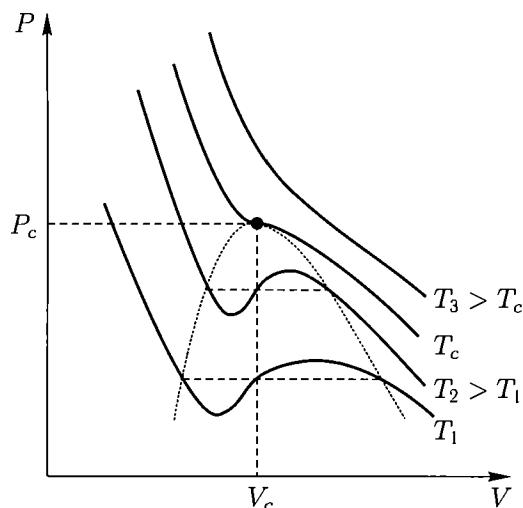


Рис. 10.34. Качественный рисунок изотерм, описываемых уравнением (10.175). В области, обведенной пунктирной линией, реализуется равновесие жидкой и газообразной фаз с постоянным давлением, поэтому петля на изотермах в этой области неустойчива. На рисунке показана также трикритическая точка  $P_c, v_c, T_c$

Трикритическая точка (см. рис. 10.34), характеризующаяся условиями:

$$\frac{\partial P}{\partial v} = 0, \quad \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} = 0, \quad v = \frac{1}{\rho}, \quad (10.176)$$

отвечает температуре, выше которой не реализуется фазового перехода (существует только газовое состояние); в приближении среднего поля согласно уравнению состояния (10.175) эта ситуация возникает при следующих значениях плотности, давления и температуры:

$$\rho_c = \frac{1}{v_c} = \frac{1}{2}, \quad T_c = \frac{u(0)}{4}, \quad P_c = \frac{u(0)}{4} \left( \ln 2 - \frac{1}{2} \right). \quad (10.177)$$

**10.5.2.2. Реализация алгоритма Монте-Карло.** Модель (10.172) 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  $\Omega_{nN}$  и заданного числа частиц  $N$  энергия системы будет равна

$$E_{nN} = \frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} n_i^{(nN)} n_j^{(nN)} - \mu \sum_i n_i^{(nN)}. \quad (10.178)$$

Для практического использования метода МК необходимо реализовать принцип детального равновесия в условиях переменного числа частиц, т. е. в условиях большого канонического ансамбля. Для этого элементарные шаги МК 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:

$$W_{i \rightarrow j}^m P(i) = W_{j \rightarrow i}^m P(j), \quad (10.179)$$

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 (10.179). Выберем стан-

дартную схему Метрополиса, удовлетворяющую этому детальному балансу:

$$W_{i \rightarrow j}^m = \begin{cases} \frac{P(\Omega_j)}{P(\Omega_i)} = e^{-\beta(E_j - E_i)}, & E_i < E_j; \\ 1, & E_i \geq E_j. \end{cases} \quad (10.180)$$

При реализации процедур рождения и уничтожения частиц следует обратить внимание на следующее обстоятельство. Пусть в системе есть  $N$  частиц, и схема МК 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 МК 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 (10.179)). 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

$$W_{N \rightarrow N+1}^c p_c(N) P(N) = W_{N+1 \rightarrow N}^a p_a(N+1) P(N+1), \quad (10.181)$$

где  $P(N)$  — статистический вес конфигурации системы с  $N$  частицами, а вероятности обращения равны:

$$p_c(N) = \frac{1}{N_a} = \text{const}; \quad p_a(N) = \frac{1}{N}. \quad (10.182)$$

Выбор вероятностей перехода, удовлетворяющих соотношению (10.181), может быть, например, таким:

$$\begin{aligned} W_{N \rightarrow N+1}^c &= \\ &= \begin{cases} W_N^+ = \tau \frac{p_a(N+1)}{p_c(N)} \frac{P_{N+1}}{P_N} = \frac{\tau N_a}{N+1} e^{-\beta[E(N+1)-E(N)]}, & W_N^+ < 1; \\ 1, & W_N^+ \geq 1; \end{cases} \\ W_{N \rightarrow N-1}^a &= \\ &= \begin{cases} W_N^- = \frac{1}{\tau} \frac{p_c(N-1)}{p_a(N)} \frac{P_{N-1}}{P_N} = \frac{N}{\tau N_a} e^{-\beta[E(N-1)-E(N)]}, & W_N^- < 1; \\ 1, & W_N^- \geq 1. \end{cases} \end{aligned} \quad (10.183)$$

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.

Множитель  $\tau$ , входящий в (10.183), 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 флюктуирующее число частиц в процессе работы алгоритма МК.

На рис. 10.35 представлена схема алгоритма МК 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 МК. На каждом шаге МК случайным образом выбирается один из возможных подпроцессов: движение, рождение или уничтожение. Суммарная вероятность выбора какого-либо подпроцесса должна быть равна единице, т. е.

$$P\{\text{движение}\} + P\{\text{рождение}\} + P\{\text{уничтожение}\} = 1. \quad (10.184)$$

Кроме того, необходимо, чтобы вероятности выбора прямой или обратной процедур, отвечающих одному подпроцессу, были равны:

$$P\{\text{рождение}\} = P\{\text{уничтожение}\}. \quad (10.185)$$

Например, если потребовать, чтобы подпроцесс «движение» выбирался с вероятностью  $1/2$ , то тогда вероятность подпроцесса «рождение-уничтожение» также будет равна  $1/2$ , а вероятности прямой и обратной процедур, входящих в этот подпроцесс, т. е. вероятности выбора рождения или уничтожения, будут равны  $1/4$ .

Конкретные значения вероятностей в (10.184) 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 (10.180). 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

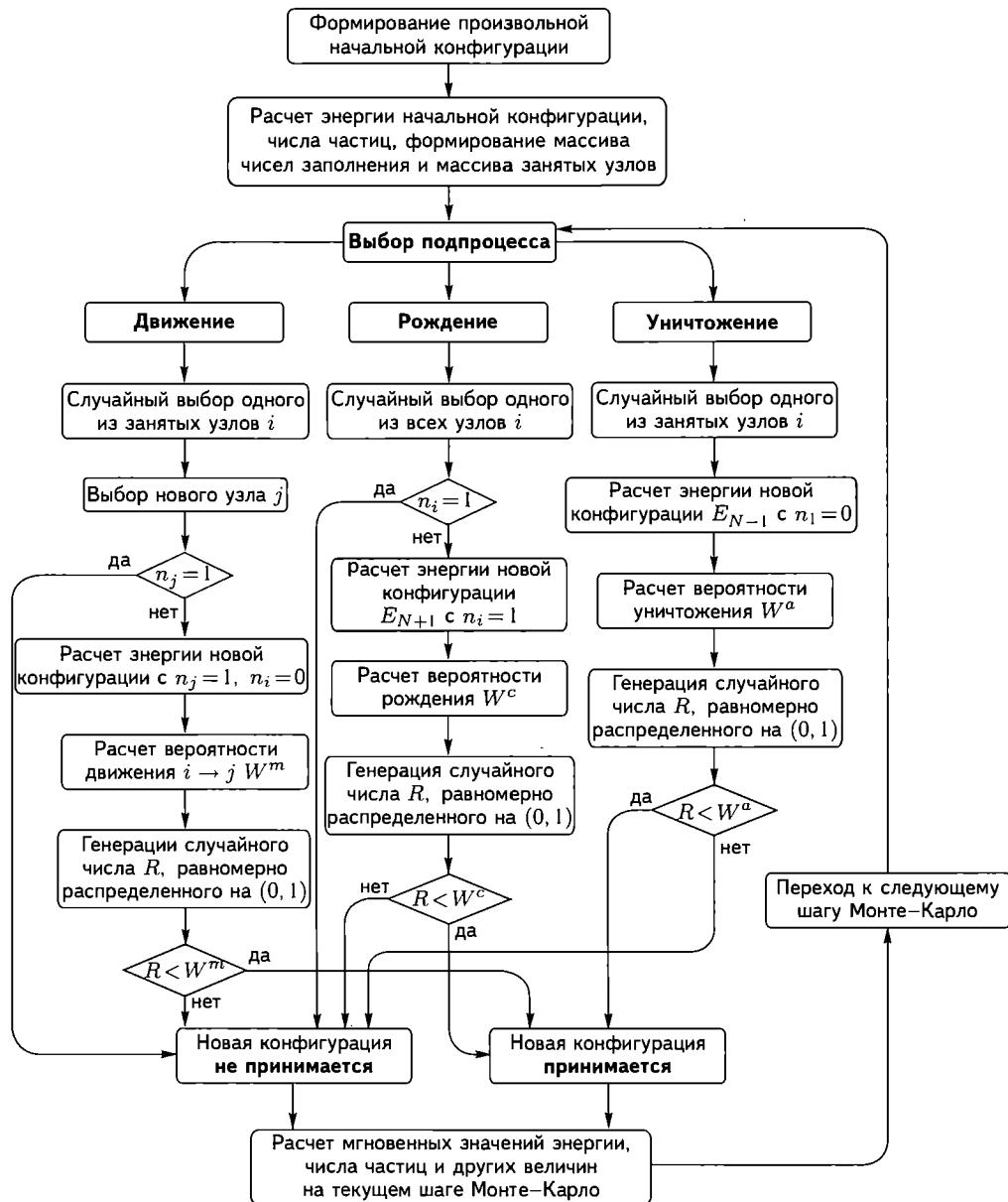


Рис. 10.35. Схема алгоритма МК для расчета модели решеточного газа

мгновенных значений всех рассчитываемых в алгоритме физических величин на данном шаге алгоритма.

Если выбран подпроцесс рождения частицы, то случайнным 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 (10.183). Далее происходит генерация случайного числа  $R$ , равномерно распределенного на отрезке  $(0, 1)$ , и если  $W^c > R$ , то 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 случайнм 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 (10.183). 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 МК определяется достижением необходимой сходимости рассчитываемых величин. Оценка погрешности расчета будет обсуждаться далее.

Для модели решеточного газа процедура МК 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  $\mu$  в (10.169). Каждый расчет МК при конкретных значениях  $\mu$  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 (10.173) можно представить не только как функцию  $\rho$ , но и как функцию  $\mu$  (с точностью до аддитивной постоянной  $C$ ):

$$P(\mu) = \int_{\mu_0}^{\mu} \rho(\mu') d\mu' + C. \quad (10.186)$$

Значение параметра  $\mu_0$  следует выбирать как нижнюю границу области сканирования по  $\mu$  эту величину можно, например, выбрать согласно приближению среднего поля (10.175) как значение химического потенциала, отвечающее достаточно малой плотности  $\rho = \rho_{\min} \leq 0,1$ :

$$\mu_0 = -\rho_{\min} u(0) - T \ln \left( \frac{1}{\rho_{\min}} - 1 \right). \quad (10.187)$$

Согласно уравнению состояния в приближении среднего поля (10.175), величина давления в этой точке также будет мала, поэтому с хорошей точностью аддитивной постоянной в (10.187) можно пренебречь.

Таким образом, рассчитывая для ряда значений  $\mu$  при постоянной температуре  $T$  плотность  $\rho$  и, соответственно, единичный объем  $v = \frac{1}{\rho}$  и вычисляя давление  $P$  согласно (10.186), можно построить изотермы в модели решеточного газа.

На рис. 10.36 показаны рассчитанные методом МК изотермы решеточного газа для двумерной решетки  $100 \times 100$ . Для расчета был выбран потенциал Леннарда–Джонса (10.170) с параметрами  $\varepsilon = 1$ ,  $\sigma = 3$  (предполагается, что все энергетические величины и температуры в задаче обезразмерены на величину  $\sim 0,01$  эВ, и размер пространственной ячейки в модели равен  $1 \text{ \AA}$ ). Для моделирования зародыша жидкой фазы в систему вводилась одна примесь в виде потенциальной ямы с потенциалом притяжения  $V_{imp}(r) = -2ch^{-2}(r)$ . Давление  $P$  рассчитывалось из соотношения (10.186), при этом постоянная  $C$  определялась из минимального значения химического потенциала  $\mu_0 \cong -0,2 \div -0,25$ , при котором плотность практически была

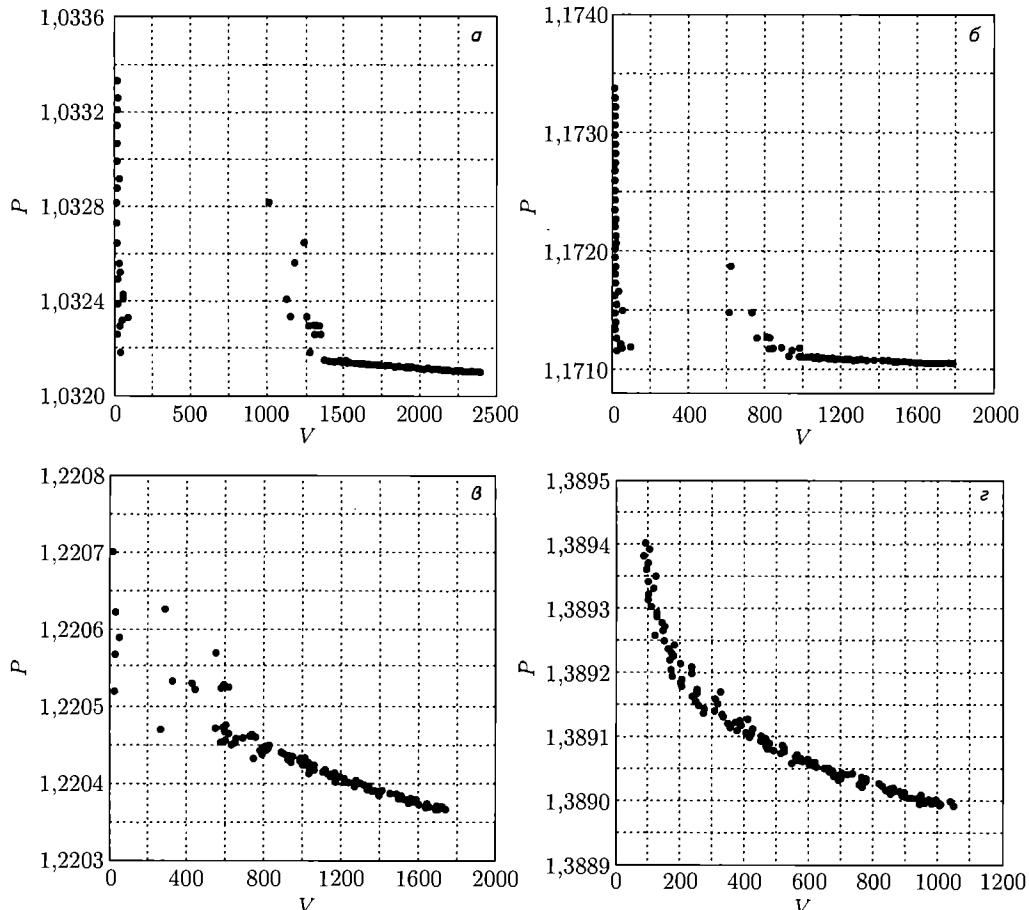


Рис. 10.36. Изотермы решеточного газа для двумерной решетки  $100 \times 100$ , рассчитанные методом МК при температуре: а)  $T = 1,3$ ; б)  $T = 1,4$ ; в)  $T = 1,45$ ; г)  $T = 1,55$

равна нулю. В этом пределе, согласно (10.174), (10.175) находим

$$C = P(\mu_0)_{|\rho_{\min} \rightarrow 0} \cong T e^{\mu_0/T}. \quad (10.188)$$

Моделирование проводилось посредством изменения химического потенциала  $\mu$ , начиная от значения  $\mu_0$ , с шагом 0,001. Расчет состоял из  $\sim 10^7$  элементарных шагов МК для каждой точки на графиках. На рис. 10.36 показаны результаты для четырех значений температуры системы. По оси абсцисс отложен единичный объем  $v = \frac{1}{\rho}$ .

Проанализируем полученные данные. При достаточно низкой температуре  $T = 1,3$  (см. рис. 10.36, 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  $T = 1,4$  (см. рис. 10.36, б) область неоднозначности заметно сжимается по диапазону объемов, теперь  $25 < v < 800$ , и затем при более высоких температурах (см. рисунки 10.36, в и 10.21, г) 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.

**10.5.3. Моделирование вихревой структуры в высокотемпературных сверхпроводниках.** Здесь рассмотрим достаточно сложный пример моделирования методом МК — расчет решетки Абрикосова в сверхпроводниках. Дело в том, что для корректного описания процессов перемагничивания, наблюдаемых экспериментально в сверхпроводящем состоянии, оказывается необходимым ввести в схему МК 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 МК и правильно учесть детальный баланс.

**10.5.3.1. 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<sub>3</sub>Sn, NbTi, а также все высокотемпературные соединения) при промежуточных магнитных полях  $H_{c1} < H < H_{c2}$  ( $H_{c1} \sim 100 \div 400$  Э;  $H_{c2} \sim 20 \div 100$  Тл) существует помимо мейсснеровского состояния, характеризующегося идеальным диамагнетизмом, так называемое

смешанное, или вихревое состояние. Кривые намагничивания сверхпроводника второго рода показаны на рис. 10.37.

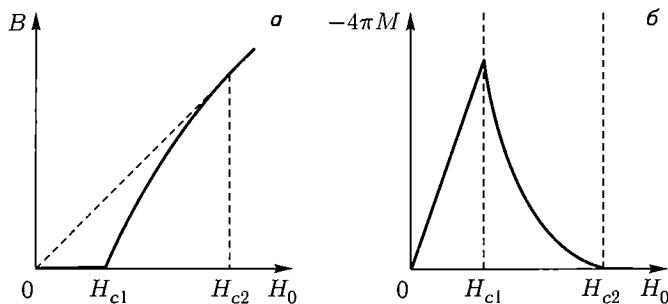


Рис. 10.37. Кривые намагничивания сверхпроводника второго рода:

- а)* зависимость магнитной индукции  $B$  от внешнего поля  $H_0$ ;  
при  $H < H_{c1}$   $B = 0$  — мейсснеровское состояние;
- б)* зависимость плотности магнитного момента от  $H_0$ ;  $M = \frac{B - H}{4\pi}$  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. 10.38).

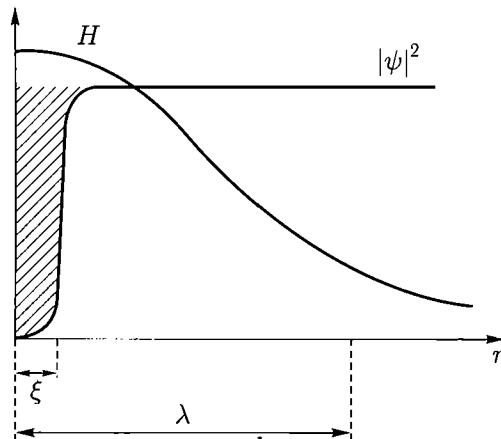


Рис. 10.38. Структура вихря в сверхпроводнике. Распределение параметра порядка  $|\psi|^2$  сверхпроводника и создаваемого вихрем магнитного поля (см. (10.189)).

Заштрихованная область — кора вихря — область нормального состояния

Величина  $\xi$  называется сверхпроводящей корреляционной длиной, а  $\lambda$  — глубиной проникновения магнитного поля. Внутри вихря, в нормальной об-

ласти, магнитное поле максимально, вне вихря оно спадает на расстоянии  $\sim \lambda$ . Каждый вихрь несет в себе квант магнитного потока  $\Phi_0 = \frac{\pi \hbar c}{e} = 2,07 \times 10^{-7}$  Гс · см<sup>2</sup>, при этом при низких температурах в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, вихри образуют плоскую треугольную структуру (рис. 10.39), и двумерная плотность вихрей  $n_f$  определяется индукцией магнитного поля, так что  $n_f = B/\Phi_0$ .

Распределение магнитного поля как функции радиального расстояния от центра вихря в цилиндрической геометрии подчиняется следующему соотношению:

$$B(\rho) = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} K_0\left(\frac{\rho}{\lambda}\right), \quad (10.189)$$

где  $K_0$  — функция Макдональда (или функция Бесселя мнимого аргумента), при малых значениях аргумента она логарифмически возрастает, а при больших значениях экспоненциально падает:

$$K_0(x)|_{x \rightarrow 0} \approx \ln\left(\frac{1}{x}\right); \quad K_0(x)|_{x \rightarrow \infty} \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} e^{-x}. \quad (10.190)$$

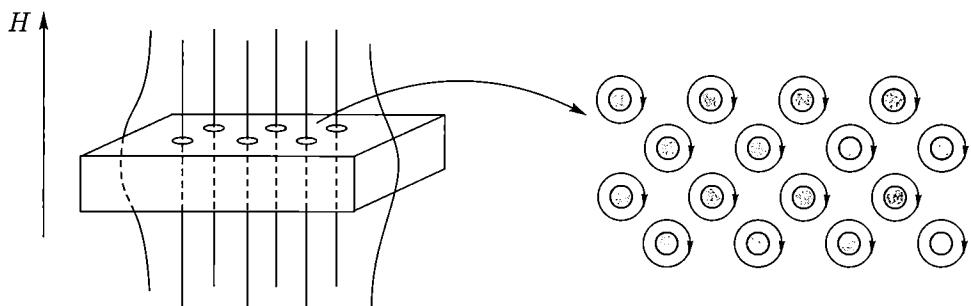


Рис. 10.39. Вихревое состояние сверхпроводника второго рода. Вихри образуют правильную треугольную решетку. В сердцевинах вихрей — нормальное состояние

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 нейтрана 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. 10.37, б) экспериментально получают напрямую, измеряя его отклик на внешнее поле — магнитный момент

$$M = \frac{B - H}{4\pi}. \quad (10.191)$$

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. 10.40), имеет существенно разные упругие свойства внутри сверхпроводящего слоя и вне его, такому магнитному образованию можно приписать тензор упругих постоянных. Вне слоя вихрь более «крыхлый», а внутри имеет более высокие упругие свойства. При возрастании температуры вихри начинают переплетаться вне сверхпроводящих слоев, теряют упорядочение и межслоевую когерентность (см. рис. 10.40), в то время как внутри слоев все еще сохраняется упорядочение (треугольная решетка) (так называемый *фазовый переход «3D–2D»* или *decoupling*). При температурах  $T \geq 10$  К, на порядок более низких по сравнению с критической (а в высокотемпературных ВТСП, например в  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$ , критическая температура равна  $T_c \approx 110$  К), 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.

Выбрав один из сверхпроводящих слоев для исследования, можно написать модельный гамильтониан для плоских вихрей (*pancakes*) и сформулировать алгоритм МК 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

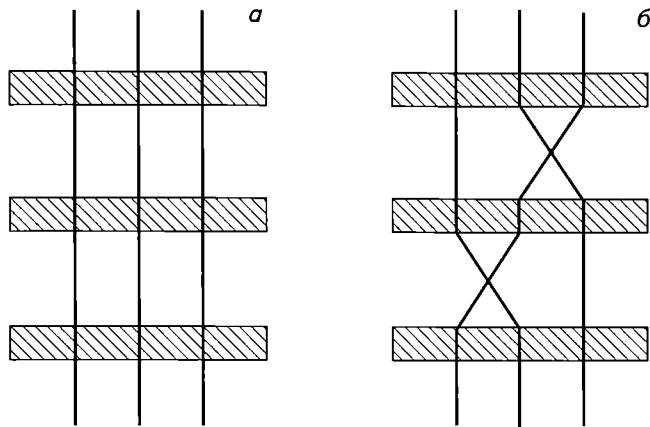


Рис. 10.40. Вихрь Абрикосова имеет существенно разные упругие свойства внутри сверхпроводящих слоев (заштрихованные области) и вне их. Случай *а* отвечает температуре  $T \ll T_c$ ; при возрастании температуры до значений  $T \sim T_c$  (случай *б*) вихри начинают переплетаться вне сверхпроводящих слоев, в то время как внутри слоев все еще сохраняется треугольная решетка

висмутовым ВТСП:

$$\lambda \equiv \lambda(T) = \lambda_0 \left(1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3,3}\right)^{-1/2}; \quad \lambda_0 \equiv \lambda(T=0). \quad (10.192)$$

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])

$$\varepsilon = \left(\frac{\Phi_0}{4\pi\lambda}\right)^2 \left(\ln \frac{\lambda_0}{\xi_0} + 0,52\right), \quad (10.193)$$

это энергия, заключенная в магнитном поле, пронизывающем нормальную область (кор) вихря.

*Энергия взаимодействия двух вихревых нитей* описывается следующим выражением:

$$U_{ij} = U_0 K_0 \left(\frac{r_{ij}}{\lambda}\right), \quad U_0 = \frac{(\Phi_0)_1 (\Phi_0)_2}{8\pi^2 \lambda^2} \delta, \quad (10.194)$$

где  $\delta$  — толщина сверхпроводящего слоя,  $\Phi_0 = \Phi_0 n$ ;  $n = \pm 1$  — знак магнитного поля, создавшего вихрь. Как видно из (10.194), вихри одного знака отталкиваются ( $U_{ij} > 0$ ), как и полагается вихревым токам с одинаковым направлением закрутки (рис. 10.41).



Рис. 10.41. Взаимодействие вихрей. Вихри разных знаков притягиваются, одного знака — отталкиваются

Характерный масштаб межвихревого взаимодействия — длина  $\lambda$ . Эта величина также отражает общий характерный масштаб всех взаимодействий в системе.

*Энергия взаимодействия уединенного вихря с плоской границей сверхпроводника*

$$U_{\text{surf}}(x) = -\frac{1}{2} U_0 K_0 \left( \frac{2x}{\lambda} \right), \quad (10.195)$$

где  $x$  — расстояние от вихря до границы (рис. 10.42).

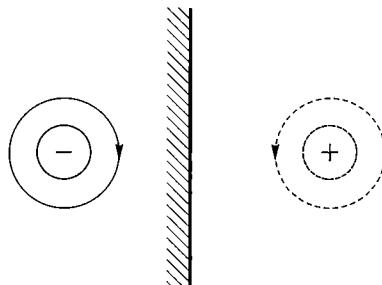


Рис. 10.42. Взаимодействие вихря с плоской границей сверхпроводника аналогично взаимодействию вихря со своим зеркальным изображением

Взаимодействие вихря с границей можно свести к взаимодействию вихря со своим зеркальным изображением — вихрем противоположного знака — антивихрем. Как следует из (10.185), 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. 10.43). 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.

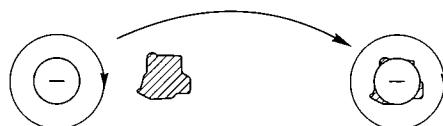


Рис. 10.43. Притяжение вихря к дефекту

В рассматриваемой задаче будет выбран следующий вид взаимодействия вихря с дефектом:

$$U_p(r) = -\alpha |U_0(T)| \frac{1}{\frac{r}{\xi} + 1} e^{-\frac{r}{2\xi}}, \quad (10.196)$$

где  $\alpha$  — безразмерный параметр, характеризующий глубину потенциальной ямы дефекта;  $r$  — расстояние между вихрем и дефектом. Такой выбор взаимодействия соответствует случаю, когда только один вихрь может за-

цепиться за дефект. Явление пиннинга вихревой решетки важно для описания транспортных свойств системы, так как при наличии транспортного тока запиннигованные вихри не сдвигаются силой Лоренца, и в системе не происходит диссипации энергии вплоть до критических значений тока. Так же при перемагничивании системы зацепленные дефектами вихри, имеющие противоположный полю знак, будут оставаться в системе (так называемый замороженный поток), что приводит к гистерезисным явлениям.

*Взаимодействие вихрей с мейсснеровским током на границе* (рис. 10.44) и транспортным током описывается следующим образом. С любым внешним током плотностью  $j$  вихрь взаимодействует посредством силы Лоренца, поэтому на единицу длины вихря имеем

$$f_L = \frac{1}{c} [j, \Phi_0]. \quad (10.197)$$

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:

$$U_M = -W_M = \int_0^x f_L(x') dx' = \frac{H_0 \Phi_0}{4\pi} \left( e^{-x/\lambda} - 1 \right). \quad (10.198)$$

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.

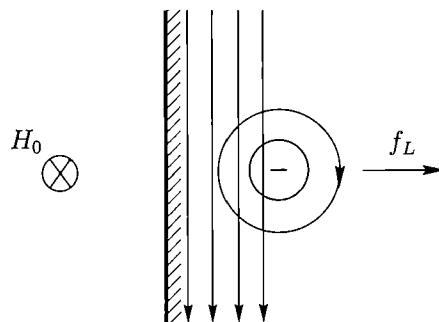


Рис. 10.44. Мейсснеровский ток, созданный внешним полем  $H_0$ , отталкивает вихрь от поверхности

Окончательно можно сформулировать модель системы вихрей в плоском сверхпроводящем слое ВТСП толщиной  $\delta$ , представив их как *ансамбль классических частиц* на плоскости, взаимодействующих между собой, с дефектами, границей и токами согласно всем вышеперечисленным взаимодействиям:

$$\hat{H} = N\delta\varepsilon + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} + \sum_{ij_{im}} U_p(r_{ij_{im}}) + U_{\text{surf}} + \delta(U_M + U_T), \quad (10.199)$$

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 (10.199) сформулирована для переменного числа вихрей, т. е. для условий большого канонического ансамбля.

#### 10.5.3.2. Метод Монте-Карло для сверхпроводящей ВТСП-пластины.

Рассмотрим представленную ранее модель вихревой системы (10.199) 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. 10.45).

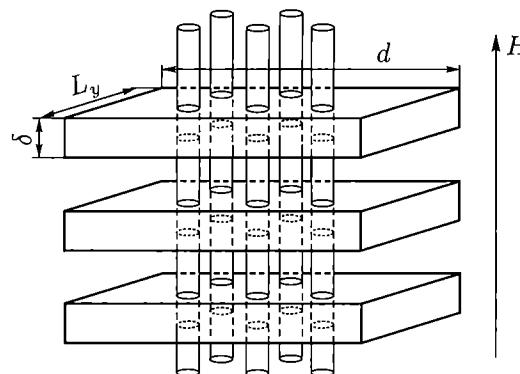


Рис. 10.45. Постановка задачи для моделирования сверхпроводящей ВТСП-пластины

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 (10.199) слагаемые, отвечающие за взаимодействие вихрей с поверхностью сверхпроводника и с токами и зависящие от геометрии задачи [49].

Взаимодействие  $U_{\text{surf}}$  (10.195) для случая пластины толщины  $d$  с границами  $x = -\frac{d}{2}$  и  $x = \frac{d}{2}$  строго записывается в виде бесконечного ряда:

$$U_{\text{surf}}(x) = \frac{U_0}{2} \left( 2 \sum_{j=1}^{\infty} K_0 \left( \frac{2jd}{\lambda} \right) - \sum_{j=0}^{\infty} \left( K_0 \left( \frac{2x+jd}{\lambda} \right) + K_0 \left( \frac{2(d-x)+jd}{\lambda} \right) \right) \right), \quad (10.200)$$

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  $j = 0$ :

$$U_{\text{surf}}(x) = -\frac{1}{2} U_0 \left( K_0 \left( \frac{2x}{\lambda} \right) + K_0 \left( \frac{2(d-x)}{\lambda} \right) \right). \quad (10.201)$$

Следует учесть также взаимодействие вихря с изображениями других вихрей:

$$U_{\text{surf}}(r_i, r_j) = -\frac{1}{2} U_0 K_0 \left( \frac{|r_i - r_j^{(\text{image})}|}{\lambda} \right), \quad (10.202)$$

где  $r^{(\text{image})}$  — радиусы-векторы изображений вихрей.

Распределение плотности мейсснеровского и транспортного токов в пластине (рис. 10.46) представляется, соответственно, слагаемыми:

$$j = -\frac{cH_0}{4\pi\lambda} \frac{\sh(x/\lambda)}{\ch(d/2\lambda)} + \frac{cH_I}{4\pi\lambda} \frac{\ch(x/\lambda)}{\sh(d/2\lambda)}, \quad (10.203)$$

где  $H_I = \frac{2\pi I}{c}$  — поле, создаваемое транспортным током на поверхности пластины;  $I$  — полный ток через поперечное сечение пластины [19, 20].

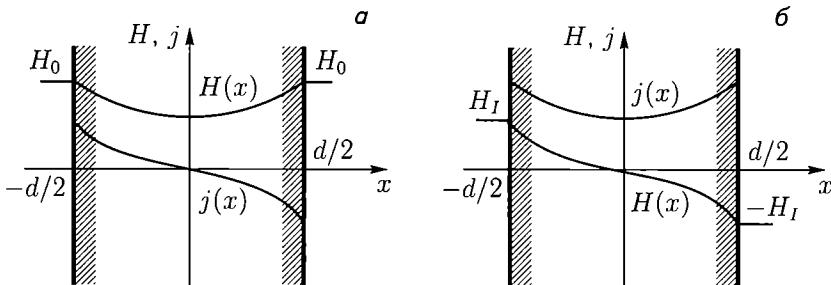


Рис. 10.46. Распределение в сверхпроводящей пластине внешнего магнитного поля и связанного с ним тока (a); распределение транспортного тока и созданного им магнитного поля (b)

Энергия взаимодействия вихря с токами рассчитывается через работу силы Лоренца  $\Delta W_I$  на единицу длины вихря, совершенную токами над вихрем при его перемещении от края пластины вглубь образца [50]:

$$\begin{aligned} -(U_M + U_T) = \Delta W_I &= \frac{1}{4\pi} \int_{\pm d/2}^x \mathbf{j} \cdot \mathbf{\Phi}_0 dx = \\ &= \frac{\Phi_0}{4\pi} \left[ H_0 \left( 1 - \frac{\ch(x/\lambda)}{\ch(d/2\lambda)} \right) + H_I \left( \frac{\sh(x/\lambda)}{\sh(d/2\lambda)} \mp 1 \right) \right], \end{aligned} \quad (10.204)$$

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 МК 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 («запиннинговые»), 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. 10.46, 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 МК для эффективного перебора состояний системы.

**1. Движение вихря.** Для реализации этого подпроцесса из имеющегося массива случайнм образом выбирается вихрь и делается попытка переместить его на расстояние  $\sim \lambda$  в произвольном направлении. Вероятности перехода рассчитываются согласно алгоритму Метрополиса аналогично (10.180).

**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 случайнм образом в зоне рождения выбирается точка рождения. Общая вероятность подпроцесса рассчитывается аналогично (10.183), только вероятность обращения к конкретной точке рождения выбирается в виде

$$p_c = \frac{1}{\lambda L_y}, \quad (10.205)$$

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 (10.183), вероятность обращения к вихрю выбирается в виде

$$p_a = \frac{1}{2N}, \quad (10.206)$$

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 основ-

ных 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

$$p_a = \frac{1}{N_+ N_-}; \quad (10.207)$$

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 (10.194) вихрь и антивихрь притягиваются друг к другу, но уничтожение пары приведет также к понижению энергии на удвоенную собственную энергию вихря  $2\varepsilon$  (см. (10.193)). 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

$$p_c = \frac{1}{100\xi^2 dL_y}. \quad (10.208)$$

Вероятность рождения рассчитывается с учетом предыдущего прямого процесса в рамках детального баланса:

$$W_{N \rightarrow N+2}^c p_c(N) P_N = W_{N+2 \rightarrow N}^a p_a(N+2) P_{N+2}. \quad (10.209)$$

Отсюда

$$\begin{aligned} W_{N \rightarrow N+2}^c &= \begin{cases} W_N^{++}, & W_N^{++} \leq 1; \\ 1, & W_N^{++} > 1; \end{cases} \\ W_{N \rightarrow N-2}^a &= \begin{cases} W_N^{--}, & W_N^{--} \leq 1; \\ 1, & W_N^{--} > 1; \end{cases} \end{aligned} \quad (10.210)$$

где

$$\begin{aligned} W_N^{++} &= \tau \frac{p_a(N+2)}{p_c(N)} \frac{P_{N+2}}{P_N} = \frac{100\tau\xi^2 dL_y}{(N_+ + 1)(N_- + 1)} e^{-\beta[E(N+2) - E(N)]}, \\ W_N^{--} &= \frac{1}{\tau} \frac{p_c(N-2)}{p_a(N)} \frac{P_{N-2}}{P_N} = \frac{N_+ N_-}{100\tau\xi^2 dL_y} e^{-\beta[E(N-2) - E(N)]} \end{aligned}$$

Сам алгоритм МК 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 МК: возврат к п. 2 алгоритма.

В частности, индукция магнитного поля в зависимости от числа вихрей в такой геометрии рассчитывалась следующим образом:

$$B = \frac{N\Phi}{S} + \frac{2\lambda H}{d} \left( 1 - e^{-d/\lambda} \right), \quad (10.211)$$

где  $S = dL_y$ . В последнем слагаемом в (10.211) отражен вклад мейсснеровских токов у границ пластины. Кроме того, вместо кванта потока в (10.211) записан эффективный квант вихря  $\Phi$ , искажающийся вблизи границы сверхпроводника [20, 49]:

$$\Phi(x) = \Phi_0 \left( 1 - \frac{2}{\pi} \int_{x/\lambda}^{\infty} y K_0(y) \arccos\left(\frac{x}{y\lambda}\right) dy \right). \quad (10.212)$$

**10.5.3.3. Результаты моделирования для ВТСП-пластины.** Кратко рассмотрим некоторые результаты моделирования методом МК 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  $\sim 0,01$  эВ.

Практически все физические особенности поведения вихревой системы в сверхпроводнике с центрами пиннинга во внешнем поле и токе можно наглядно продемонстрировать в *процессах перемагничивания*. Именно эти явления и будут проанализированы в данном разделе как результат численного моделирования методом МК.

В начале расчета дефекты случайным образом размещались по площади пластины, затем задавалась температура  $T$ , внешнее поле  $H$ , транспортный ток  $I$ ; результатом работы алгоритма МК были средние значения числа вихрей, далее рассчитывались магнитная индукция  $B$  согласно (10.211) 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.

На рис. 10.47 представлены петли перемагничивания пластины во внешнем поле в отсутствие транспортного тока при температуре  $T = 5$  К. Каждая точка на графике — отдельный расчет МК. 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. 10.47. При первоначальном увеличении внешнего магнитного поля вихри

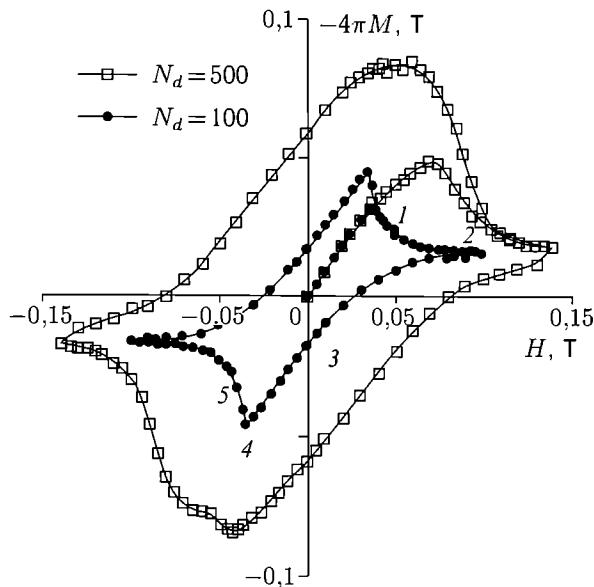


Рис. 10.47. Петли намагниченности для разного количества дефектов  $N_d$

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 запиннингованных 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 в током на рис. 10.48

приведена для одной из геометрических относительно нулевой координаты по оси  $x$  половин пластины, 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.

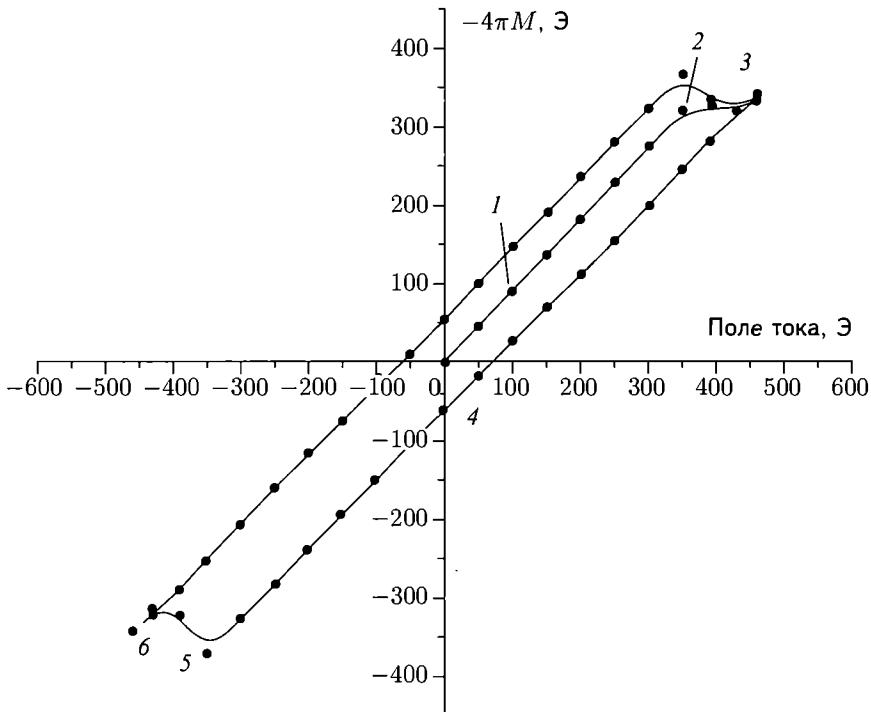


Рис. 10.48. Петля намагниченности в случае перемагничивания током. Количество дефектов 200

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  $\lambda$  (точка 1 на рис. 10.48). 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 аннигилируя 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, надвигающийся на вихри другого знака, разделенный полосой аннигиляции (рис. 10.49).

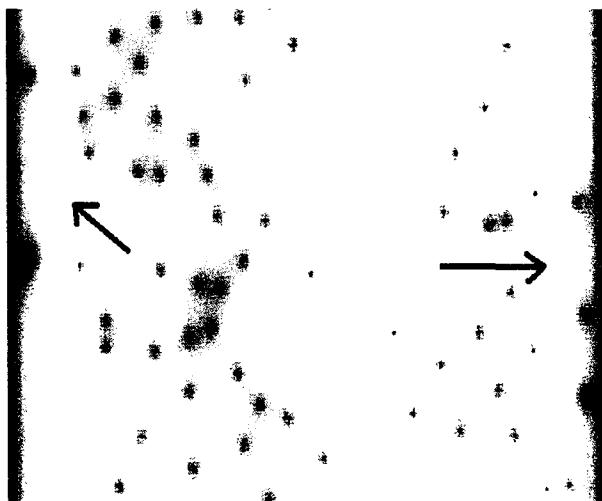


Рис. 10.49. Волны аннигиляции в процессе перемагничивания током. Стрелками указан фронт волны

Таким образом, моделирование вихревой системы ВТСП методом МК 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.

## 10.6. Расчет термодинамических средних и оценка погрешности. Автокорреляционный анализ в стохастическом моделировании

Рассмотрим математические аспекты расчета термодинамических средних и оценки погрешности при моделировании методами МК (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  $\chi^2$ , 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:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A_i. \quad (10.213)$$

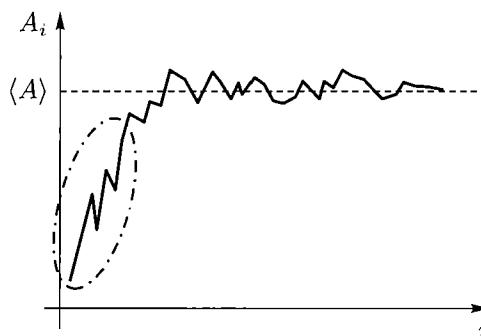


Рис. 10.50. Учет термализации. Если состояние, с которого начинается моделирование, сильно отличается от равновесного (показано штриховой линией), то первые несколько шагов (обведены штрихпунктирной линией) дадут большой вклад в погрешность результата

Для 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. 10.50).

Для исключения начальных флуктуаций некоторое количество  $M_0$  первых шагов МК проводят без запоминания значений рассчитываемой величины, так что среднее значение рассчитывается по формуле

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M - M_0} \sum_{i=M_0+1}^M A_i. \quad (10.214)$$

Величина области термализации  $M_0$  может быть велика и достигать четверти времени всего расчета  $M$ . Будем далее полагать, что термализация проведена, и отсчитывать шаги МК только от начала сбора физической ин-

формации, 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  $\delta A$  величины  $\langle A \rangle$ . Следует заметить, что расчет погрешности (так называемая *несмешенная оценка*) через среднеквадратичное отклонение,

$$\delta A = \sqrt{\frac{1}{M(M-1)} \sum_i (A_i - \langle A \rangle)^2} \cong \sqrt{\frac{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}{M}} = \sqrt{\frac{D_A}{M}}, \quad (10.215)$$

справедливый для независимых случайных величин, приведет к некорректной оценке в данном случае, так как мгновенные значения  $A_i$ , получаемые в процессе работы алгоритма, являются звенями 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 МК как непрерывную развивающуюся во времени эволюцию системы, так же, как это делалось при рассмотрении принципа детального равновесия. Каждая из итераций  $\mu$ , рассматриваемых выше, может состоять из сотни или тысячи элементарных шагов МК, так как информация может собираться не обязательно на каждом элементарном шаге. Поставим в соответствие каждой такой итерации интервал времени  $\delta t$ , так что полное время расчета в момент итерации  $\mu$  равно  $t_\mu = \mu \delta t$ . Тогда усреднение по конфигурациям эквивалентно интегрированию вдоль стохастической фазовой траектории в фазовом пространстве, удовлетворяющей динамическому уравнению Колмогорова (10.124):

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A_i \equiv \frac{1}{t_M} \int_0^{t_M} A(t) dt. \quad (10.216)$$

Если схема алгоритма эргодическая, *усреднение по времени* (10.216) эквивалентно *усреднению с гиббсовскими весами*  $P(x)$  по полному ансамблю состояний системы, т. е. в пределе большого числа итераций имеем

$$\lim_{t_M \rightarrow \infty} \frac{1}{t_M} \int_0^{t_M} A(t) dt = \langle A \rangle = \sum_{\{x\}} P(x) A(x), \quad (10.217)$$

где  $\{x\}$  означает сумму по всем состояниям (конфигурациям) системы.

Введем понятие корреляционной функции двух физических величин  $A$  и  $B$  следующим образом:

$$\langle A(t) B(0) \rangle = \frac{1}{t_M - t} \int_t^{t_M} A(t') B(t' - t) dt, \quad (10.218)$$

при этом усреднение (10.218) при  $t_M \rightarrow \infty$  совпадает с термодинамическим усреднением (10.217), 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:

$$\langle A(t) \rangle = \sum_{\{x\}} P(x, t) A(x(0)) = \sum_{\{x\}} P(x, 0) A(x(t)). \quad (10.219)$$

Заметим, что перенос временной зависимости от статистического веса  $P(x, t)$  к усредняемой величине  $A(x(t))$  в (10.219) эквивалентен в квантовой механике переходу от шредингеровского представления к гейзенберговскому.

Практически рассчитывать (10.219) можно, задав определенное число шагов  $t$  алгоритма МК, а затем многократно запускать алгоритм, стараясь с различных начальных конфигураций, и суммировать частичные средние

$$A(t) = \frac{1}{t} \int_0^t A(t') dt' \quad (10.220)$$

для каждого запуска  $i$ :

$$\langle A(t) \rangle \cong \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r A(t, i), \quad (10.221)$$

где  $r$  — полное число запусков,  $r \gg 1$ . В начальной области эволюции при малом  $t$  среднее (10.221) отличается от предела (10.218),

$$\langle A(t) \rangle - \langle A(\infty) \rangle \neq 0; \quad \langle A(\infty) \rangle = \langle A \rangle. \quad (10.222)$$

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 (10.213),

$$(\delta A)^2 = \langle (A(t_M) - \langle A \rangle)^2 \rangle. \quad (10.223)$$

Это и есть погрешность, которую следует указывать в результате расчета при достаточно длительном итерационном процессе:

$$A = \langle A \rangle \pm \delta A. \quad (10.224)$$

Преобразуем (10.223):

$$\begin{aligned}
 (\delta A)^2 &= \left\langle \left( \frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M (A_\mu - \langle A \rangle) \right)^2 \right\rangle = \\
 &= \frac{1}{M^2} \sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=1}^M \left\langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} - 2A_{\mu_1} \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \right\rangle = \\
 &= \frac{1}{M^2} \sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=1}^M \langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} \rangle - \langle A \rangle^2. \quad (10.225)
 \end{aligned}$$

Воспользуемся соотношением

$$\sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=1}^M = 2 \sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=\mu_1+1}^M + \sum_{\mu_1=1}^M, \quad (10.226)$$

тогда из (10.225) имеем:

$$\begin{aligned}
 (\delta A)^2 &= \frac{1}{M^2} \left( 2 \sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=\mu_1+1}^M \langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} \rangle + M \langle A \rangle^2 \right) - \langle A \rangle^2, \\
 \langle A \rangle^2 &= \left\langle \frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M A_\mu^2 \right\rangle. \quad (10.227)
 \end{aligned}$$

Добавляя и вычитая одинаковые слагаемые в двойной сумме, находим далее

$$\begin{aligned}
 (\delta A)^2 &= \\
 &= \frac{1}{M^2} \left( 2 \sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=\mu_1+1}^M \left( \langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} \rangle - \langle A \rangle^2 \right) + (M^2 - M) \langle A \rangle^2 + M \langle A \rangle^2 \right) - \langle A \rangle^2 \equiv \\
 &\equiv \frac{1}{M} \left( \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right) + \frac{2}{M^2} \sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=\mu_1+1}^M \left( \langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} \rangle - \langle A \rangle^2 \right). \quad (10.228)
 \end{aligned}$$

Преобразуем выражение в двойной сумме следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu_2=\mu_1+1}^M \langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} \rangle &= \sum_{\mu_1=1}^M \sum_{\mu=1}^{M-\mu_1} \langle A_0 A_\mu \rangle = \\
 &= \sum_{\mu=1}^M \langle A_0 A_\mu \rangle \sum_{\mu_1=1}^{M-\mu} 1 = \sum_{\mu=1}^M (M - \mu) \langle A_0 A_\mu \rangle. \quad (10.229)
 \end{aligned}$$

В (10.229) использовано, что при достаточно большом числе усреднений по ансамблю справедливо равенство

$$\langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} \rangle = \langle A_0 A_{\mu_2 - \mu_1} \rangle, \quad (10.230)$$

т. е. коррелятор зависит только от «расстояния» между итерациями. С учетом (10.229) и последнего замечания двойная сумма (10.228) становится однократной и выражение для погрешности принимает вид:

$$(\delta A)^2 = \frac{1}{M} \left\{ \left( \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right) + 2 \sum_{\mu=1}^M \left( 1 - \frac{\mu}{M} \right) \left( \langle A_0 A_{\mu} \rangle - \langle A \rangle^2 \right) \right\}. \quad (10.231)$$

Для удобства дальнейшего анализа перейдем к динамической интерпретации процесса МК и введем, как указывалось выше, интервал времени  $\delta t$  для каждой итерации и полное время итерации  $\mu$ :  $t_{\mu} = \mu \delta t$ . Заменяя сумму интегралом, перепишем (10.231):

$$(\delta A)^2 = \frac{1}{M} \left\{ \left( \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right) + \frac{2}{\delta t} \int_0^{t_M} \left( 1 - \frac{t}{t_M} \right) \left( \langle A_0 A_t \rangle - \langle A \rangle^2 \right) dt \right\}. \quad (10.232)$$

Введем *автокорреляционную функцию* физической величины  $A$  следующим образом:

$$\varphi_A(t) = \frac{\langle A_0 A_t \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}, \quad (10.233)$$

при этом  $\varphi_A(0) = 1$ , а  $\varphi_A(\infty) = 0$ , так как

$$t \rightarrow \infty \Rightarrow \langle A_0 A_t \rangle \approx \langle A_0 \rangle \langle A_t \rangle \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \langle A \rangle^2. \quad (10.234)$$

Автокорреляционная функция отражает степень корреляции между различными реализациями рассчитываемой величины, и чем ближе она к нулю, тем слабее корреляция. Соотношение (10.234) 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 МК.

Перепишем выражение для погрешности через автокорреляционную функцию:

$$(\delta A)^2 = \frac{1}{M} \left( \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right) \left\{ 1 + \frac{2}{\delta t} \int_0^{t_M} \left( 1 - \frac{t}{t_M} \right) \varphi_A(t) dt \right\} \quad (10.235)$$

и введем безразмерный параметр *автокорреляционное время* физической величины  $A$  следующим образом:

$$\tau_A = \frac{1}{2} + \frac{1}{\delta t} \int_0^{\infty} \varphi_A(t) dt = \frac{1}{2} + \sum_{\mu=1}^M \varphi_A(t_{\mu}). \quad (10.236)$$

Чем меньше автокорреляционное время, тем быстрее сходимость. Это видно из оценки погрешности, которая с учетом (10.236) выражается следующим образом:

$$\langle \delta A \rangle^2 = \frac{2\tau_A}{M} \left( \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right). \quad (10.237)$$

В (10.237) предполагается, что  $\varphi_A(t)$  отлична от нуля при  $t \ll t_M$ , поэтому под знаком интеграла в (10.235) 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  $\delta t$  между итерациями, и погрешность совпадает со среднеквадратичной (10.215). Более того, в этом случае она чувствительна к выбору  $\delta t$ , и сбор информации нужно проводить на каждом элементарном шаге МК.

Как правило, однако, оказывается, что  $\tau_A \gg 1$ . Тогда погрешность, рассчитанная в соответствии с (10.237), может отличаться от среднеквадратичного отклонения в десятки раз. В этом случае оценка (10.237) нечувствительна к выбору  $\delta t$  до тех пор, пока  $\delta t$  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 (10.232)–(10.237) достаточно громоздки и неудобны для расчета. Строго говоря, согласно (10.221), 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. 10.51). Для каждой из частей рассчитаем частичное среднее

$$\langle A(r) \rangle_b = \frac{1}{r} \sum_{j=(b-1)r+1}^{br} A_j, \quad b = 1, \dots, n. \quad (10.238)$$

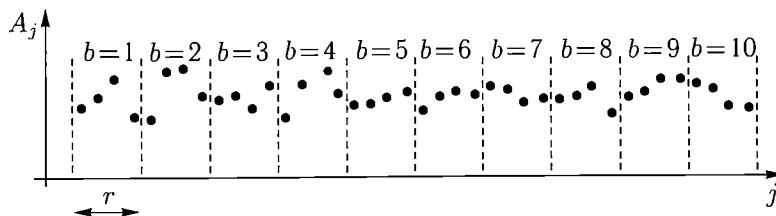


Рис. 10.51. Все  $M = 40$  измерений разбиты на  $n = 10$  частей длиной  $r = 4$

Рассчитаем дисперсию  $A$  по этим частичным средним:

$$\sigma^2(r) = \frac{1}{n-1} \sum_{b=1}^n \left( \langle A^2(r) \rangle_b - \langle A \rangle^2 \right). \quad (10.239)$$

Заметим, что величина

$$\sigma^2(1) = \frac{1}{M-1} \sum_{j=1}^M (A_j^2 - \langle A \rangle^2) \quad (10.240)$$

равна обычной полной дисперсии по представительной выборке.

С учетом (10.239) и (10.240) автокорреляционное время и оценку погрешности можно рассчитать следующим образом:

$$\tau_A(r) = \frac{r\sigma^2(r)}{2\sigma^2(1)}, \quad (\delta A)^2 = \frac{r}{M}\sigma^2(r). \quad (10.241)$$

В пределе  $r \rightarrow \infty$  определенные таким образом автокорреляционное время и погрешность стремятся к своим асимптотическим значениям, совпадающим с (10.236), (10.237). 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. 10.52).

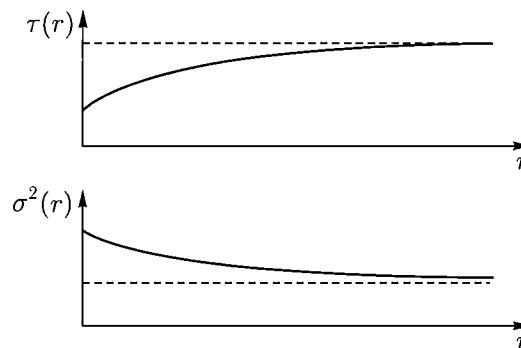


Рис. 10.52. С ростом  $r$  зависимости  $\tau(r)$  и  $\sigma^2(r)$  выходят на насыщение

*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

$$r = 2^\alpha, \quad \alpha = 0, 1, 2, \dots, \quad (10.242)$$

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 МК, без строгого автокорреляционного анализа, так называемый метод «1/2 файла». Он заключается в следующем.

1. На каждом шаге сбора информации  $\mu$  рассчитывается и запоминается в соответствующий массив текущее среднее значение

$$\langle A \rangle_\mu = \frac{1}{\mu} \sum_{j=1}^{\mu} A_j, \quad (10.243)$$

соответственно, для самого последнего шага сбора информации  $\mu = M$  имеем  $\langle A \rangle_M \equiv \langle A \rangle$ .

**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  $\langle A \rangle_{\mu/2+1}, \langle A \rangle_{\mu/2+2}, \dots, \langle A \rangle_\mu$ . Отсечка первой половины массива убирает начальную флюктуационную 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. 10.53), тогда погрешность расчета будет равна

$$\delta A = \frac{\max(\langle A \rangle_{\mu/2+1}, \dots, \langle A \rangle_\mu) - \min(\langle A \rangle_{\mu/2+1}, \dots, \langle A \rangle_\mu)}{2}. \quad (10.244)$$

Как правило, погрешность, рассчитанная методом «1/2 файла» — оценка сверху для (10.237). В пределе  $M \gg 1$  значения (10.241) и (10.244) стремятся к одному результату (10.237).

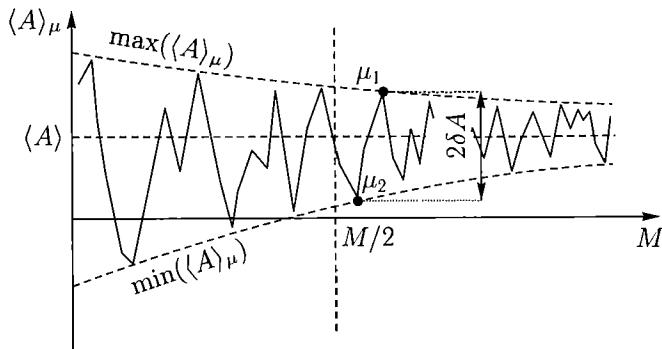


Рис. 10.53. Расчет погрешности методом «1/2 файла». С ростом  $M$  флюктуации среднего значения  $\langle A \rangle$  уменьшаются

Заметим, что флюктуационная 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,

$$\begin{aligned} \mu_1 : \langle A_{\mu_1} \rangle &= \max(\langle A \rangle_{\mu/2+1}, \langle A \rangle_{\mu/2+2}, \dots, \langle A \rangle_\mu), \\ \mu_1 : \langle A_{\mu_1} \rangle &= \min(\langle A \rangle_{\mu/2+1}, \langle A \rangle_{\mu/2+2}, \dots, \langle A \rangle_\mu), \end{aligned} \quad (10.245)$$

то автокорреляционное время можно оценить следующим образом:

$$\frac{\mu_1 + \mu_2}{2M} - \frac{1}{2} \quad \left\{ \begin{array}{l} \ll 1 \Rightarrow \tau_A \sim 1; \\ \sim 1 \Rightarrow \tau_A \gg 1. \end{array} \right. \quad (10.246)$$

Оценку автокорреляционного времени можно получить также из зависимости автокорреляционной функции  $\varphi_A(t)$  (рис. 10.54). Обычно полагают, что автокорреляционное время равно величине, при которой значение автокорреляционной функции становится меньше 0,1.

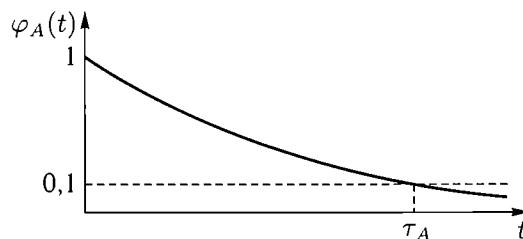


Рис. 10.54. Оценка автокорреляционного времени через автокорреляционную функцию

Автокорреляционное время является удобным параметром для сопоставления эффективности различных стохастических методов вычислений. Чем меньше  $\tau_A$ , тем более эффективен тот или иной метод (МК, 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.

На рис. 10.55 показаны зависимости автокорреляционного времени и погрешности при расчете энергии в одномерной модели Изинга (10.131) с параметрами  $J = 1$ ;  $T = 0,5$ ;  $H = 0,1$ ; число узлов 100; всего было произведено 990 000 шагов сбора информации. При  $t \approx 500$  зависимости выходят на насыщение, при этом  $E = -109,6250 \pm 0,0049$ . Погрешность, рассчитанная методом «1/2 файла», составила  $(\delta E)_{1/2} = 0,0052$ .

## 10.7. Диаграммные методы и высокотемпературное разложение. Преобразование операторов физических величин

Существуют схемы МК, использующие *суммирование диаграмм* для эффективного перебора конфигурационного пространства. Эти методы близки к аналитической диаграммной технике (см., например, решение Онзагера для

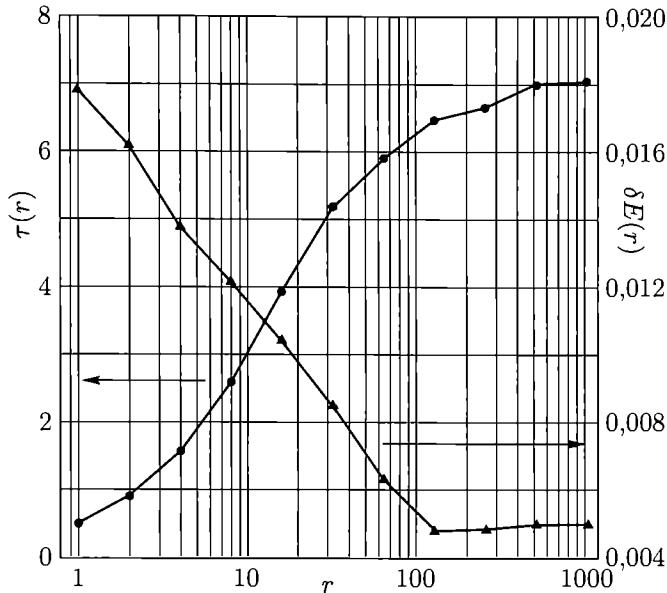


Рис. 10.55 Зависимость автокорреляционного времени (круги) и погрешности энергии (треугольники) в одномерной модели Изинга (число узлов 100;  $J = 1$ ;  $T = 0,5$ ;  $H = 0,1$ ). Полное число измерений 990000

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:

$$Z = \text{Tr} \left( e^{-\hat{H}/T} \right) = \sum_n e^{-E_n/T}, \quad (10.247)$$

где энергия для каждой конфигурации спинов имеет вид

$$E = - \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i; \quad S_i = \pm 1. \quad (10.248)$$

Здесь  $H$  — внешнее поле; обменное взаимодействие  $J = 1$ .

Разложим экспоненты в статистической сумме следующим образом:

$$\begin{aligned} e^{-\beta E} &= e^{\beta \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + \beta H \sum_i S_i} = \prod_{\langle ij \rangle} e^{\beta S_i S_j} \prod_m e^{\beta H S_m} = \\ &= \left( \prod_{b=\langle ij \rangle} \sum_{N_b=0}^{\infty} \frac{\beta^{N_b} S_i^{N_b} S_j^{N_b}}{N_b!} \right) \left( \prod_m \sum_{n_m=0}^{\infty} \frac{\beta^{n_m} H^{n_m} S_m^{n_m}}{n_m!} \right). \quad (10.249) \end{aligned}$$

Здесь первый сомножитель соответствует учету межчастичного взаимодействия, второй — взаимодействия с внешним полем, при этом чем выше температура  $T$  (меньше обратная температура  $\beta$ ), тем лучше сходимость ряда (10.249). Это разложение называется *высокотемпературным*.

Рассмотрим сначала первый множитель

$$\prod_{b=\langle ij \rangle} \sum_{N_b=0}^{\infty} \frac{\beta^{N_b} S_i^{N_b} S_j^{N_b}}{N_b!}, \quad (10.250)$$

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:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{S_1, S_2, \dots, S_N\}} \prod_{b=\langle ij \rangle} \left( \sum_{N_b=0}^{\infty} \frac{\beta^{N_b} (S_i S_j)^{N_b}}{N_b!} \right) = \\ &= \sum_{\{S_1, S_2, \dots, S_N\}} \left( \sum_{N_{1 \leftrightarrow 2}=0}^{\infty} \sum_{N_{2 \leftrightarrow 3}=0}^{\infty} \dots \frac{\beta^{N_{1 \leftrightarrow 2}} (S_1 S_2)^{N_{1 \leftrightarrow 2}}}{N_{1 \leftrightarrow 2}!} \frac{\beta^{N_{2 \leftrightarrow 3}} (S_2 S_3)^{N_{2 \leftrightarrow 3}}}{N_{2 \leftrightarrow 3}!} \dots \right) = \\ &= \sum_{N_{1 \leftrightarrow 2}, N_{2 \leftrightarrow 3}, \dots = 0}^{\infty} \frac{\beta^{N_{1 \leftrightarrow 2} + N_{2 \leftrightarrow 3} + \dots}}{N_{1 \leftrightarrow 2}! N_{2 \leftrightarrow 3}! \dots} \sum_{S_1 = \pm 1} (S_1)^{N_{1 \leftrightarrow 2} + \dots} \sum_{S_2 = \pm 1} (S_2)^{N_{2 \leftrightarrow 3} + N_{1 \leftrightarrow 2} + \dots} \dots \end{aligned} \quad (10.251)$$

Заметим, что операторы  $S_i \equiv S_i^Z$  коммутируют между собой, так что их можно свободно переставлять в произведении (10.251). 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:

$$Q_i \equiv Q(k_i) = \sum_{S_i = \pm 1} (S_i)^{k_i}, \quad (10.252)$$

здесь  $k_i$  обозначает суммарное число связей, входящих в узел  $i$  (рис. 10.56).

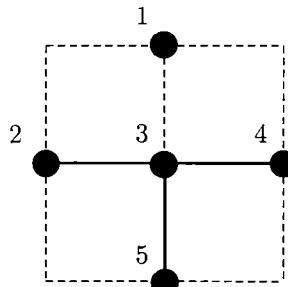


Рис. 10.56. Число связей, входящих в узел 3, равно  
 $k_3 = N_{1 \leftrightarrow 3} + N_{2 \leftrightarrow 3} + N_{3 \leftrightarrow 4} + N_{3 \leftrightarrow 5} = 0 + 1 + 2 + 1 = 4$

Будем называть каждое слагаемое внутри (10.251) под знаком внешней суммы коррелированной парой (СР), так что суммирование в (10.251) можно представить как суммирование по всевозможным коррелированным парам:

$$Z = \sum_{CP} W_{CP}, \quad W_{CP} = \frac{\beta^{N_{b_1} + N_{b_2} + \dots}}{N_{b_1}! N_{b_2}! \dots} Q(k_1) Q(k_2) \dots \quad (10.253)$$

Каждое слагаемое в (10.253) подразумевает попарное произведение по узлам и связям между ними, например слагаемые

$$\begin{aligned} W_{CP1} &= \frac{\beta^{N_{1\leftrightarrow 2} + N_{2\leftrightarrow 3}}}{N_{1\leftrightarrow 2}! N_{2\leftrightarrow 3}!} Q(N_{1\leftrightarrow 2}) Q(N_{1\leftrightarrow 2} + N_{2\leftrightarrow 3}) Q(N_{2\leftrightarrow 3}), \\ W_{CP2} &= \frac{\beta^{N_{1\leftrightarrow 2} + N_{2\leftrightarrow 3} + N_{3\leftrightarrow 4} + N_{4\leftrightarrow 1}}}{N_{1\leftrightarrow 2}! N_{2\leftrightarrow 3}! N_{3\leftrightarrow 4}! N_{4\leftrightarrow 1}!} Q(N_{1\leftrightarrow 2} + N_{4\leftrightarrow 1}) \times \\ &\quad \times Q(N_{1\leftrightarrow 2} + N_{2\leftrightarrow 3}) Q(N_{2\leftrightarrow 3} + N_{3\leftrightarrow 4}) Q(N_{3\leftrightarrow 4} + N_{4\leftrightarrow 1}) \end{aligned} \quad (10.254)$$

отвечают конфигурациям, показанным на рис. 10.57.

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

$$k_i = \sum_{\langle ij \rangle} N_{i\leftrightarrow j} = \sum_{b_i} N_{b_i} \quad (10.255)$$

есть состояние узла, равное числу связей, входящих в узел  $i$ . Каждая связь  $\langle ij \rangle$  имеет статистический вес  $\frac{\beta^{N_{i\leftrightarrow j}}}{N_{i\leftrightarrow j}!}$ .

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

$$H = - \sum_{k,j=1}^L (S_{kj} S_{k,j+1} + S_{kj} S_{k+1,j}).$$

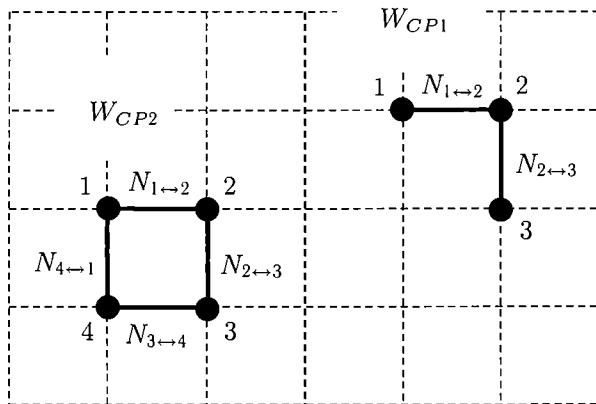


Рис. 10.57. Две из возможных конфигураций, дающих вклад в статистическую сумму (10.253)

Соответственно, статистическая сумма записывается 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

$$e^{\beta S_{kj} S_{k'j'}} = \text{ch}\beta + S_{kj} S_{k'j'} \text{sh}\beta = \text{ch}\beta (1 + S_{kj} S_{k'j'} \text{th}\beta).$$

Окончательно, для статистической суммы находим

$$Z = \left(1 - (\text{th}\beta)^2\right)^{L^2} S, \quad S = \sum_{\{S\}} \prod_{k,j=1}^L (1 + S_{kj} S_{k,j+1} \text{th}\beta) (1 + S_{kj} S_{k+1,j} \text{th}\beta).$$

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

$$(\text{th}\beta)^2 S_{kj} (S_{k+1,j})^2 S_{k+1,j-1}, \quad (\text{th}\beta)^4 (S_{kj})^2 (S_{k+1,j})^2 (S_{k+1,j-1})^2 (S_{k,j-1})^2$$

отвечают диаграммы, показанные, соответственно, на рисунках 10.58, а и 10.58, б.

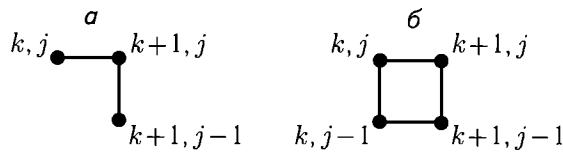


Рис. 10.58. Диаграммы Онзагера

Ненулевой вклад в статистическую сумму будут давать только замкнутые диаграммы, которые содержат четные степени  $S_{kj}$ .

В принципе, далее можно сформулировать алгоритм МК 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

$$Q(k) = \sum_{S_i=\pm 1} (S_i)^k \equiv 2. \quad (10.256)$$

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 *спин-спиновую корреляционную функцию* для модели Изинга:

$$G(i_1 - i_2) = \langle S_{i_1} S_{i_2} \rangle = \frac{g(i_1 - i_2)}{Z}, \quad (10.257)$$

где

$$g(i_1 - i_2) = \sum_{\{S_i\}} S_{i_1} S_{i_2} e^{-E(\{S_i\})/T}. \quad (10.258)$$

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

$$k_{i_1} = 1 + \sum_{b_{i_1}} N_{b_{i_1}}, \quad k_{i_2} = 1 + \sum_{b_{i_2}} N_{b_{i_2}}. \quad (10.259)$$

Эти узлы являются единственными точками, в которых траектория может быть разорвана (рис. 10.59). Вес конфигураций, дающих вклад в  $g$ , определяется точно так же, как и для замкнутых конфигураций, при этом для выделенных узлов полагается, что

$$\begin{aligned} Q(k_{i_1}) &\stackrel{\text{def}}{=} \sum_{S_{i_1}=\pm 1} (S_{i_1})^{k_{i_1}} |S_{i_1}| \equiv 2, \\ Q(k_{i_2}) &\stackrel{\text{def}}{=} \sum_{S_{i_2}=\pm 1} (S_{i_2})^{k_{i_2}} |S_{i_2}| \equiv 2, \end{aligned} \quad (10.260)$$

так же, как и для остальных узлов. Возможность такого определения веса незамкнутых конфигураций объясняется ниже.

Далее в методе используется так называемый *алгоритм червя* («*worm algorithm*»), 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  $i_2$ .

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 (10.251). 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 (10.260), так как вклада в рассчитываемые физические величины разорванные траектории не дают.

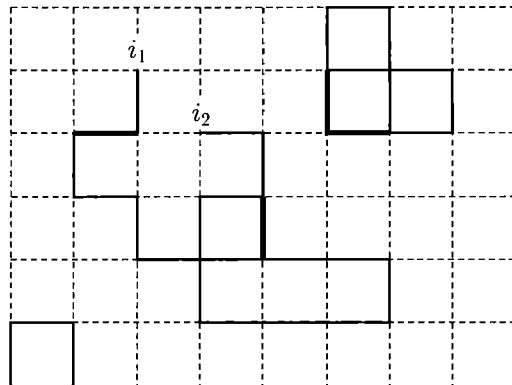


Рис. 10.59. Конфигурация, дающая вклад в спин-спиновую корреляционную функцию  $G$ , но не дающая вклада в статистическую сумму. Точки  $i_1$  и  $i_2$  — начало и конец червя, соответственно. Толщина линий пропорциональна числу связей между соответствующими узлами, пустые связи показаны пунктирными линиями

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  $i_{\text{new}}$ , 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  $i \rightarrow j$  и рождение связи  $N_{b=\langle ij \rangle} \rightarrow N_b + 1$  уравновешены сдвигом  $j \rightarrow i$  и уничтожением связи  $N_{b=\langle ij \rangle} \rightarrow N_b - 1$ .

Исходя из правил детального баланса, вероятности подпроцессов рождения и уничтожения связи имеют вид:

$$W_{N_b \rightarrow N_b + 1}^{c_{i \rightarrow j}} = \frac{\beta}{N_b + 1}, \quad W_{N_b \rightarrow N_b - 1}^a = \frac{N_b}{\beta}. \quad (10.261)$$

Заметим, что в общем случае узельные статистические веса  $Q(k_i)$  не являются постоянными величинами, как в рассматриваемом здесь случае модели Изинга (см. (10.256)). Для того, чтобы формулы (10.261) были корректными в общем случае, их нужно модифицировать следующим образом:

$$W_{N_b \rightarrow N_b + 1}^{c_{i \rightarrow j}} = \frac{\beta}{N_b + 1} \frac{Q(k_j + 2)}{Q(k_j)}, \quad W_{N_b \rightarrow N_b - 1}^a = \frac{N_b}{\beta} \frac{Q(k_i)}{Q(k_i - 2)}. \quad (10.262)$$

Далее, после сравнения вероятностей (10.262) со случайнм 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 (10.249), учитывающий влияние внешнего поля — это второй сомножитель

$$\prod_m \sum_{n_m=0}^{\infty} \frac{\beta^{n_m} H^{n_m} S_m^{n_m}}{n_m!}. \quad (10.263)$$

Теперь, помимо подпроцессов изменения конфигураций, описанных выше, появляются еще несколько подпроцессов, «отвечающих» за поле.

Будем графически отмечать символом степени величины  $\beta HS$  в (10.263). Тогда типичные конфигурации будут иметь вид, показанный на рис. 10.60.

По сравнению с (10.256), вклад в статистическую сумму от каждого узла будет теперь таким:

$$Q_i \equiv Q(k_i + k_{i*}) = \sum_{S_i=\pm 1} (S_i)^{k_i + k_{i*}}, \quad (10.264)$$

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*.

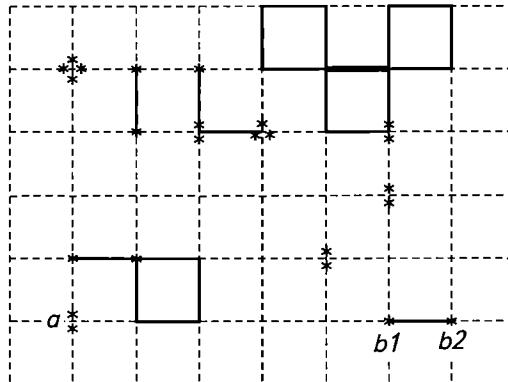


Рис. 10.60. Конфигурация, полученная с учетом внешнего поля. Звездочки соответствуют степеням величины  $\beta HS$  в (10.263)

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. 10.60); другой — за рождение и уничтожение комбинации из двух звездочек и связи между ними на случайно выбранных соседних узлах (конфигурация  $b1-b2$  на рис. 10.60). 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

$$W_i^c_{n_m \rightarrow n_m + 2} = \frac{\beta H}{(n_m + 1)(n_m + 2)} \cdot \frac{Q(k_i + 2)}{Q(k_j)}. \quad (10.265)$$

В заключение раздела обсудим вопрос о расчете термодинамических средних. Заметим, что после предварительного расчета всех узельных статистических сумм  $Q_i$  суммирование в алгоритме МК 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 (10.249) оставим только второй член:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{CP} W_{CP} = \sum_{\{S_1, S_2, \dots, S_N\}} \prod_m \left( \sum_{n_m=0}^{\infty} \frac{(\beta H)^{n_m} (S_m)^{n_m}}{n_m!} \right) = \\ &= \sum_{n_1, \dots, n_m=0}^{\infty} \frac{(\beta H)^{n_1+n_2+\dots+n_m}}{n_1! n_2! \dots n_m!} \sum_{S_1=\pm 1} (S_1)^{n_1+n_2+\dots+n_m} \dots \sum_{S_m=\pm 1} (S_m)^{n_1+n_2+\dots+n_m}. \end{aligned} \quad (10.266)$$

Выражение для энергии имеет тогда следующий вид:

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -\frac{1}{Z} \sum_i H S_i \times \\ \times \sum_{n_1, \dots, n_m=0}^{\infty} \frac{(\beta H)^{n_1+n_2+\dots+n_m}}{n_1! n_2! \dots n_m!} \sum_{S_1=\pm 1} (S_1)^{n_1+n_2+\dots+n_m} \dots \sum_{S_m=\pm 1} (S_m)^{n_1+n_2+\dots+n_m}. \quad (10.267)$$

Для того, чтобы получить выражение для энергии в новом представлении, необходимо представить (10.267) в виде

$$E = \frac{\sum_{CP} E_{CP} W_{CP}}{\sum_{CP} W_{CP}} = \frac{\sum_{CP} E_{CP} W_{CP}}{Z}. \quad (10.268)$$

С учетом того, что в (10.266) и (10.267) перебираются все возможные конфигурации и, соответственно, в суммах перебираются все возможные степени  $S_i$ , после достаточно простых преобразований получаем

$$E = \frac{\sum_{CP} \left( -\frac{1}{\beta} \sum_i k_{i*} \right) W_{CP}}{\sum_{CP} W_{CP}}. \quad (10.269)$$

Таким образом, оператор энергии в случае взаимодействия спинов только с внешним полем имеет следующий вид:

$$E = -\frac{1}{\beta} \sum_i k_{i*}, \quad (10.270)$$

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

$$E = -\frac{1}{\beta} \left( \sum_b N_b + \sum_i k_{i*} \right), \quad (10.271)$$

первое слагаемое означает суммирование по всем связям между всеми соседними узлами,  $N_b$  — число связей между конкретной парой узлов.

Теплоемкость системы определяется следующим выражением:

$$C = \beta^2 \left( \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right) - \beta \langle |E| \rangle, \quad (10.272)$$

где энергия находится из выражения (10.271).

Выражения для магнитного момента и восприимчивости будут такими:

$$M = \frac{1}{\beta H} \sum_i k_i^*, \quad \chi = \beta \left( \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right). \quad (10.273)$$

Представленный в данном разделе алгоритм обладает большей скоростью сходимости, чем обычный алгоритм МК, 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 (*критическое замедление*), в то время как сходимость величин, рассчитываемых при помощи алгоритма червя, основанного на высокотемпературном разложении, практически не изменяется при этих температурах [52].

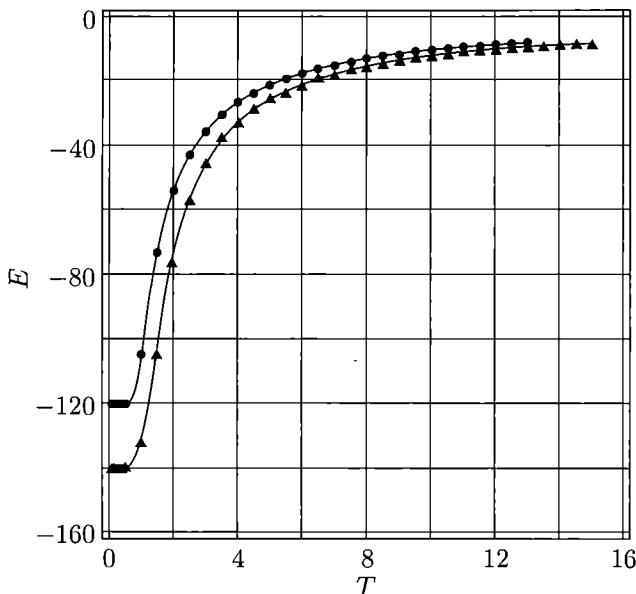


Рис. 10.61. Энергия ферромагнитной цепочки Изинга из 100 узлов. Точки и треугольники — расчет алгоритмом червя, сплошные линии — аналитический расчет. Треугольниками обозначен расчет при магнитном поле  $H = 0,4$ , точками — при  $H = 0,2$ .

Для демонстрации точности алгоритма на рис. 10.61 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 МК.

## **Часть IV**

# **КВАНТОВЫЕ МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО**

Принципиальным недостатком методов точной диагонализации (МТД) гамильтоновой матрицы, рассмотренных в первой и второй частях книги, является ограничение на размеры кластеров, накладываемое объемом оперативной памяти и быстродействием компьютеров, что не дает возможности исследовать влияние размеров кластеров на физические характеристики и термодинамические свойства и делать выводы о макроскопических свойствах реальных квантовых систем, так как достаточно выбрать кластер размером  $N_a \sim 20$ , и даже для случая фермионной статистики задача становится недостижимой для МТД.

Для исследования квантовых характеристик макроскопически больших кластеров (с  $N_a = 100 \div 200$ ) можно использовать квантовые методы Монте-Карло (МК). Более того, во многих конкретных ситуациях им нет альтернативы аналогично тому, как не было альтернативы классическим методам МК, рассмотренным в третьей части книги, для исследования термодинамических свойств больших классических систем. Возможность в едином расчете получать такие термодинамические характеристики, как энергия системы, числа заполнения, корреляционные функции, спектральные распределения и др., не используя при этом большие объемы оперативной памяти, является неоспоримым преимуществом квантовых методов МК.

В последнее время квантовые методы МК с успехом используются для решения самых различных физических задач. Достаточно упомянуть, что с помощью методов МК была рассчитана плотность одночастичных состояний в рамках обобщенных моделей Хаббарда [56–58], распределение по импульсам [60–64], зарядовые, спиновые и парные корреляционные функции [65–67], изучался вопрос о симметрии спаривания [65] для одномерных и двумерных систем в моделях типа модели Хаббарда. Расчеты бозонных [17, 68] и спиновых [17, 69, 70] систем в различной геометрии, исследования элементарных возбуждений [71] и фазовых переходов [53, 72], проблемы бозе-конденсации и сверхтекучести [72, 73] также все чаще решаются с помощью квантовых методов МК. Недавние исследования касаются сложных систем с сильным межчастичным взаимодействием и смешанной статистикой — это, например, такие системы, как бозонные оптические решетки, реализующиеся в магнитных ловушках при сверхнизких температурах [17, 69, 72, 74–81]. Другой пример — точный учет электрон-фононного взаимодействия, например, в модели Холстейна–Хаббарда [82]. Следует также отметить спин-фононные модели, интенсивно исследуемые в последнее время [83], и модели типа Рашибы–Пекара [84] для системы экситон-поляронов, а также различные фермионные модели [85, 86].

В настоящее время существуют две группы алгоритмов МК: вариационные методы МК [87, 88], основанные на минимизации функционала энергии с вариационной функцией различного вида, и квантовые («тепловые») методы МК, использующие разложение Судзуки–Троттера [89, 90] и алгоритм Метрополиса [91]. Вариационные методы МК, в ряде случаев удовлетворительно описывающие основное состояние, очень сильно чувствительны к начальному приближению (т. е. к набору начальных, стартовых параметров алгоритма)

и виду исследуемой модели; кроме того, на результаты расчетов этими методами сильно влияет выбор типа вариационной функции [87, 88]. В этом смысле квантовые методы МК более универсальны. К ним относятся детерминантные алгоритмы [92], обобщенные для взаимодействующей системы [93, 94] с помощью дискретного преобразования Хаббарда–Стратоновича, предложенного в работе [95], и траекторные методы [96–99]. В этих алгоритмах  $d$ -мерная квантовая задача сводится к  $(d + L)$ -мерной классической, причем  $L = 1$  для траекторных методов МК и  $L \geq 1$  для детерминантных методов. Следует отметить, что траекторные алгоритмы гораздо более эффективны и обладают более быстрой сходимостью по сравнению с детерминантными. Они с успехом используются для исследования одномерных фермионных систем, двумерных гейзенберговских антиферромагнетиков [100], одномерных [96] и двумерных [101] систем с бозонными степенями свободы.

Существует также достаточно эффективный метод квантового алгоритма МК, напрямую суммирующий фейнмановские диаграммы в представлении матрицы плотности [102, 103] и применимый для моделей с дальнодействующим потенциалом сложной формы. Этот подход позволяет рассчитать свойства сверхтекущего  ${}^4\text{He}$  [104] и описать поведение системы вблизи области фазового перехода [73].

Для систем с ферми-статистикой и систем со спиновыми степенями свободы были развиты петлевые алгоритмы (*Loop algorithms*) [105, 106]. Они являются обобщением траекторных методов и обладают большей скоростью сходимости.

Все отмеченные выше подходы основываются на разложении Судзуки–Троттера — разбиении шкалы мнимого времени на дискретные отрезки, что приводит к систематической ошибке, неэффективности обновления траекторий в фазовом пространстве и не позволяет в ряде случаев описать низкотемпературные свойства системы.

В последнее время появились новые эффективные алгоритмы, использующие представление с непрерывной шкалой мнимого времени. Это, прежде всего, траекторный метод в непрерывном времени (*CTWL* — *Continuous Time World Line Algorithm*) [107, 108], высокотемпературные разложения (*SSE* — *Stochastic Series Expansion*) [109, 110], а также комбинации петлевых алгоритмов и SSE [111–113]. Эти методы лишены ошибок разложений Троттера, а также других недостатков траекторных методов, позволяют проводить расчеты в большом каноническом ансамбле и получать мацубаровскую функцию Грина. Они обладают наибольшей скоростью сходимости и позволяют рассчитывать характеристики систем при низких температурах, недоступных для дискретных методов.

Следует констатировать, что квантовые алгоритмы МК на данный момент — динамично развивающаяся область современной физики, позволяющая в полной мере проводить численный эксперимент для реальных макроскопических квантовых систем.

Далее подробно рассмотрены различные квантовые алгоритмы МК.

## Глава 11

### ДИСКРЕТНЫЕ КВАНТОВЫЕ АЛГОРИТМЫ МОНТЕ-КАРЛО

Основная идея дискретных алгоритмов МК — преобразование квантовой  $d$ -мерной задачи к  $(d + 1)$ -мерной классической путем введения «временных» разрезов в пространстве мнимого времени  $0 < \tau < \beta = 1/T$ . Это достигается с помощью так называемого разбиения Судзуки–Троттера [89, 90] — разбиения шкалы мнимого времени на  $M \gg 1$  частей  $\Delta\tau = \beta/M$ . В этом случае статистическую сумму системы можно представить в виде произведения операторов эволюции вида  $e^{-\Delta\tau H}$ :

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \text{Tr} \prod_{k=1}^M e^{-\Delta\tau(V+K)} \approx \text{Tr} (e^{-\Delta\tau V} e^{-\Delta\tau K} \dots e^{-\Delta\tau V} e^{-\Delta\tau K}), \quad (11.1)$$

верного с точностью  $O((\Delta\tau)^2)$  [89, 90]. В (11.1)  $V$  — часть гамильтониана  $H$ , отвечающая за взаимодействие;  $K$  — кинетическая (невзаимодействующая) часть. В последнем равенстве использовано известное операторное тождество Хаусдорфа–Бейкера:

$$e^{(A+B)} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}, \quad (11.2)$$

где коммутатор  $[A, B]$  — число.

Таким образом, после этого разбиения с точностью не хуже  $(\Delta\tau)^2$  статистический оператор представляет собой произведение сомножителей, относящихся к различным «временным» срезам, т. е. к разным точкам шкалы мнимого времени в пространстве состояний системы. Это и позволяет представить квантовую задачу как некоторую классическую, эволюционирующую по шкале мнимого времени как по дополнительной классической переменной.

Использование разложения (11.1) для различных квантовых методов МК различно, далее будут рассмотрены применения (11.1) для конкретных реализаций.

#### 11.1. Траекторный квантовый алгоритм Монте-Карло (World-Line Quantum Monte-Carlo Algorithm)

Рассмотрим более подробно траекторные дискретные алгоритмы МК [97, 98, 114, 115]. Развитые впервые в работах [97, 98, 116], они используются в большинстве случаев для одномерных систем. Основная идея алгоритма — отмеченное выше преобразование квантовой  $d$ -мерной задачи к классической  $(d + 1)$ -мерной за счет введения «временных» разрезов в пространстве мнимого времени, т. е. представление статистической суммы в виде дискретного функционального интеграла, и реализации МК-процедуры в пространстве (мнимое время  $\tau$ )  $\otimes$  (координата  $L$ ). Двумерный вариант алгоритма в реаль-

ном пространстве [98] использовался для исследования систем с бозонными степенями свободы [96, 100, 101]. Для фермионных моделей в двумерном случае этот подход будет рассмотрен в применении к высокотемпературным сверхпроводникам.

Эффективность траекторных методов основана на том, что с ростом числа узлов системы  $N_a$  количество необходимых для расчета МК-шагов растет линейно с  $N_a$ , в то время как в случае детерминантных методов МК эта величина  $\sim N_a^3$  [94]. Также траекторные алгоритмы менее чувствительны к мно-гозонности исследуемых моделей, чем детерминантные, так как размерность соответствующей классической задачи для детерминантных методов растет с числом зон и заведомо не ниже  $(d + 1)$ , в то время как для траекторных методов МК она всегда равна  $(d + 1)$ .

**11.1.1. Статистика Ферми.** Рассмотрим конкретный случай системы со статистикой Ферми и продемонстрируем на ее примере особенности траекторного метода.

**11.1.1.1. Алгоритм шахматной доски (Checkerboard algorithm).** Пусть имеется одномерная система, описываемая гамильтонианом Хаббарда следующего вида:

$$H = \sum_i \Delta_i n_i + \sum_{ij} V_{ij} n_i n_j - \sum_{ij} t_{ij} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) \equiv H_0 + K, \quad (11.3)$$

где

$$K = - \sum_{ij} t_{ij} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) \quad (11.4)$$

есть оператор кинетической энергии,  $\Delta_i$  — узельный потенциал,  $V_{ij}$  — межчастичное взаимодействие. В случае ферми-статистики подразумевается, что индексы  $i$  и  $j$ , помимо координаты, учитывают и проекцию спина частиц.

Сначала запишем выражение для статистической суммы для модели (11.3) с учетом разбиения Судзуки — Троттера (11.1):

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr}(e^{-\beta H}) \approx \text{Tr} \prod_{k=1}^M e^{-\Delta\tau H} \approx \\ &\approx \text{Tr} \left( \prod_{k=1}^M \exp \left( \Delta\tau \sum_{ij} (-t_{ij} + \Delta_i \delta_{ij}) a_i^\dagger a_j \right) \prod_i \exp(-\Delta\tau V_{ij} n_i n_j) \right). \end{aligned} \quad (11.5)$$

Далее разобьем гамильтониан на два слагаемых с различным типом связей (например, в одномерном случае — четных и нечетных [98, 114]):

$$\begin{aligned} H &= H_1 + H_2, \\ H_1 &= \sum_{\langle ij \rangle_1} H_{ij}, \quad H_2 = \sum_{\langle ij \rangle_2} H_{ij}. \end{aligned} \quad (11.6)$$

Внутри каждой из сумм в (11.6) слагаемые коммутируют между собой.

Для простоты изложения ограничимся сначала случаем бессpinовых фермионов на одномерной решетке, а также перемещениями частиц по решетке, вызываемыми действием кинетического слагаемого  $K$  в (11.3), только на соседние узлы. В этом случае взаимодействие  $V_{ij}n_i n_j$  отсутствует, а кинетическая энергия согласно (11.6) разбивается на два слагаемых:

$$\begin{aligned} K &= -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^+ a_j + a_j^+ a_i) = K_1 + K_2, \\ K_1 &= -t \sum_i (a_{2i}^+ a_{2i+1} + a_{2i+1}^+ a_{2i}), \\ K_2 &= -t \sum_i (a_{2i+1}^+ a_{2i+2} + a_{2i+2}^+ a_{2i+1}). \end{aligned} \quad (11.7)$$

Такое разбиение на четные и нечетные связи можно провести для всего гамильтониана, включая часть  $H_0$ , отвечающую за взаимодействие частиц.

Пусть теперь  $\{|\varphi_j\rangle\}$  — полный набор состояний, относящийся к временному срезу  $\tau_j$ . Тогда

$$\begin{aligned} Z = \sum_{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_{2M-1}} &\left\langle \varphi_0 \left| e^{-\frac{\Delta\tau}{2}H_0} e^{-\Delta\tau K_1} \right| \varphi_1 \right\rangle \left\langle \varphi_1 \left| e^{-\frac{\Delta\tau}{2}H_0} e^{-\Delta\tau K_2} \right| \varphi_2 \right\rangle \times \dots \\ &\dots \times \left\langle \varphi_{2M-1} \left| e^{-\frac{\Delta\tau}{2}H_0} e^{-\Delta\tau K_2} \right| \varphi_0 \right\rangle. \end{aligned} \quad (11.8)$$

В (11.8) была использована симметрия  $H_0$  при разбиении на четные и нечетные связи.

Выберем состояния  $|\varphi_j\rangle$  в представлении чисел заполнения  $|n_1, n_2, \dots, n_L\rangle$ . Тогда в этом полном наборе состояний оператор  $H_0$  будет диагонален, и поэтому надо определить лишь матричные элементы  $\langle \varphi_j | e^{-\Delta\tau K_i} | \varphi_{j+1} \rangle$ , которые благодаря (11.6) оказываются произведением множителей простого вида:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_j | e^{-\Delta\tau K_i} | \varphi_{j+1} \rangle &= \left\langle n_1^{(i)} n_2^{(j)} \left| e^{\Delta\tau t(a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1)} \right| n_1^{(j+1)} n_2^{(j+1)} \right\rangle \times \dots \\ &\dots \times \left\langle n_{L-1}^{(j)} n_L^{(j)} \left| e^{\Delta\tau t(a_{L-1}^+ a_L + a_L^+ a_{L-1})} \right| n_{L-1}^{(j+1)} n_L^{(j+1)} \right\rangle. \end{aligned} \quad (11.9)$$

Соответственно,

$$\begin{aligned} \langle \varphi_j | e^{-\Delta\tau H_i} | \varphi_{j+1} \rangle &= \\ &= \left\langle n_1^{(j)} n_2^{(j)} \left| e^{\Delta\tau [t(a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1) - \frac{\Delta_1 n_1}{2} - \frac{\Delta_2 n_2}{2}]} \right| n_1^{(j+1)} n_2^{(j+1)} \right\rangle \times \\ &\dots \times \left\langle n_{L-1}^{(j)} n_L^{(j)} \left| e^{\Delta\tau [t(a_{L-1}^+ a_L + a_L^+ a_{L-1}) - \frac{\Delta_{L-1} n_{L-1}}{2} - \frac{\Delta_L n_L}{2}]} \right| n_{L-1}^{(j+1)} n_L^{(j+1)} \right\rangle. \end{aligned} \quad (11.10)$$

Фактически задача свелась к расчету матричных элементов двухузельной задачи. Легко показать, что эти матричные элементы имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \langle 00 | e^{-\Delta\tau H_i} | 00 \rangle &= 1, \\ \langle 11 | e^{-\Delta\tau H_i} | 11 \rangle &= e^{-\Delta\tau(\Delta_i + \Delta_{i+1})/2}, \\ \langle 01 | e^{-\Delta\tau H_i} | 01 \rangle &= e^{-\Delta\tau\Delta_{i+1}/2} \operatorname{ch}(\Delta\tau t), \\ \langle 10 | e^{-\Delta\tau H_i} | 10 \rangle &= e^{-\Delta\tau\Delta_i/2} \operatorname{ch}(\Delta\tau t), \\ \langle 01 | e^{-\Delta\tau H_i} | 10 \rangle &= e^{-\Delta\tau\Delta_{i+1}/2} \operatorname{sh}(\Delta\tau t), \\ \langle 10 | e^{-\Delta\tau H_i} | 01 \rangle &= e^{-\Delta\tau\Delta_i/2} \operatorname{sh}(\Delta\tau t), \end{aligned} \quad (11.11)$$

а все остальные матричные элементы равны нулю, так гамильтониан сохраняет число частиц. В третьей части книги уже рассматривался пример расчета таких операторов эволюции (см. (8.78)). Можно обобщить соотношения (11.11) на случай взаимодействия  $H_0$  более общего вида, а также для фермионов со спином.

Весь набор состояний  $\{|\varphi_0\rangle, |\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_{2M-1}\rangle\}$  представляет собой мгновенную конфигурацию системы в пространстве (координата)  $\otimes$  (мнимое время), формирующуюся на каждом шаге алгоритма МК. Полное число частиц в каждом из состояний  $|\varphi_j\rangle$ , т. е. в момент мнимого времени  $\tau = \tau_j$  ( $j = 0, \dots, M - 1$ ) одно и то же, при переходе к следующему по времени состоянию  $|\varphi_{j+1}\rangle$  частицы могут перемещаться на соседние узлы, подчиняясь действующему в этот момент оператору  $H_1$  или  $H_2$ . Положения частицы образуют замкнутую траекторию, что можно наглядно представить графически (рис. 11.1).

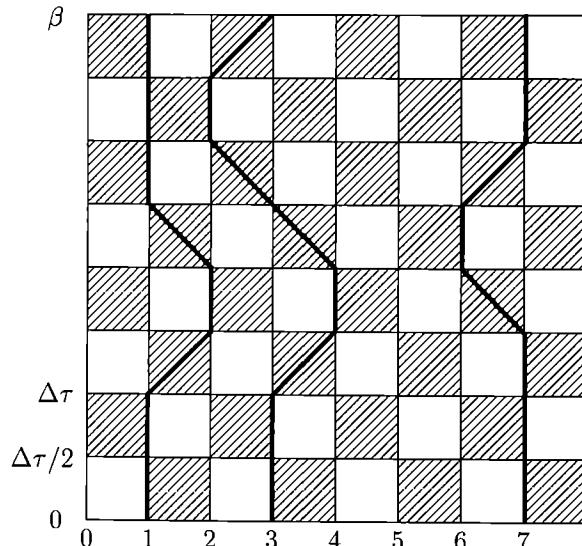


Рис. 11.1. Представление шахматной доски

По горизонтальной оси отложены номера узлов, по вертикальной — мнимое время  $\tau$ , меняющееся от 0 до  $\beta$ . Заштрихованные клетки обозначают

действие  $H_1$  или  $H_2$ ; в пустых областях операторы не действуют. Такое представление называется *представлением шахматной доски (checkerboard decomposition)*, а непрерывные линии на рисунке обозначают траектории частиц в фазовом пространстве. Из-за принципа Паули фазовые траектории для фермионной ситуации не могут пересекаться. При этом по оси мнимого времени рисунок замкнут, так как согласно выражению (11.8) для статистической суммы первая и последняя обкладки матричных элементов (волновые функции  $\varphi_0$ ) совпадают, а по пространственной переменной замкнутость картины диктуется граничными условиями. Если система имеет периодические граничные условия, то левый и правый края шахматной доски также должны быть замкнуты, и система представляет собой тор в фазовом пространстве, но тогда следует следить за тем, чтобы в системе было четное число узлов.

Чтобы получить статистический вес мгновенной конфигурации, надо перемножить все матричные элементы (11.11), отвечающие заштрихованным клеткам. Отсюда видно, что при вычислениях требуется хранить информацию о каждой заштрихованной клетке, и объем памяти, требуемый для вычислений, при увеличении количества шагов мнимого времени растет линейно. Поэтому обычно  $M$  не слишком велико, порядка нескольких десятков. Для относительной точности расчета порядка нескольких процентов этого обычно достаточно.

Обобщение метода на случай многомерной решетки и учет следующих координационных сфер в третьем слагаемом в (11.3) производится изменением вида частей, на которые разбивается пространственная решетка. Также не вызывает трудностей случай, когда частицы имеют бозонную статистику (особенности бозе-систем будут обсуждаться далее).

Часть спин у фермионов можно двумя способами — либо рассматривать систему как состоящую из двух шахматных досок, расположенных одна над другой (рис. 11.2) и взаимодействующих между собой через слагаемые типа  $p_{\uparrow}p_{\downarrow}$  в гамильтониане; либо оставить одну шахматную доску, но с более сложной картиной мировых линий (рис. 11.3).

В обоих случаях следует учесть, что на узле может быть четыре состояния:

$$|00\rangle, |10\rangle, |01\rangle, |11\rangle,$$

где первый индекс соответствует числу частиц на узле со спином вверх, а второй — со спином вниз. Соответственно, необходимо пересчитать матричные элементы (11.11), т. е. матрицу оператора эволюции  $e^{-\Delta t H}$  размера  $4 \times 4$ .

Для расчета статистической суммы (11.8) необходимо перебрать все возможные состояния системы, т. е. все возможные диаграммы, подобные рис. 11.2 или 11.3. В процессе работы алгоритма МК перебор конфигураций происходит за счет их преобразования — из одной конфигурации получается некоторая другая, отличающаяся от исходной определенным образом. При этом алгоритм устроен так, что перебираются не все возможные конфигурации, а преимущественно те, которые дают основной вклад в (11.8). В простейшем варианте траекторного алгоритма МК в дискретном времени для преобразования системы мировых линий используются две пары процессов (рис. 11.4).

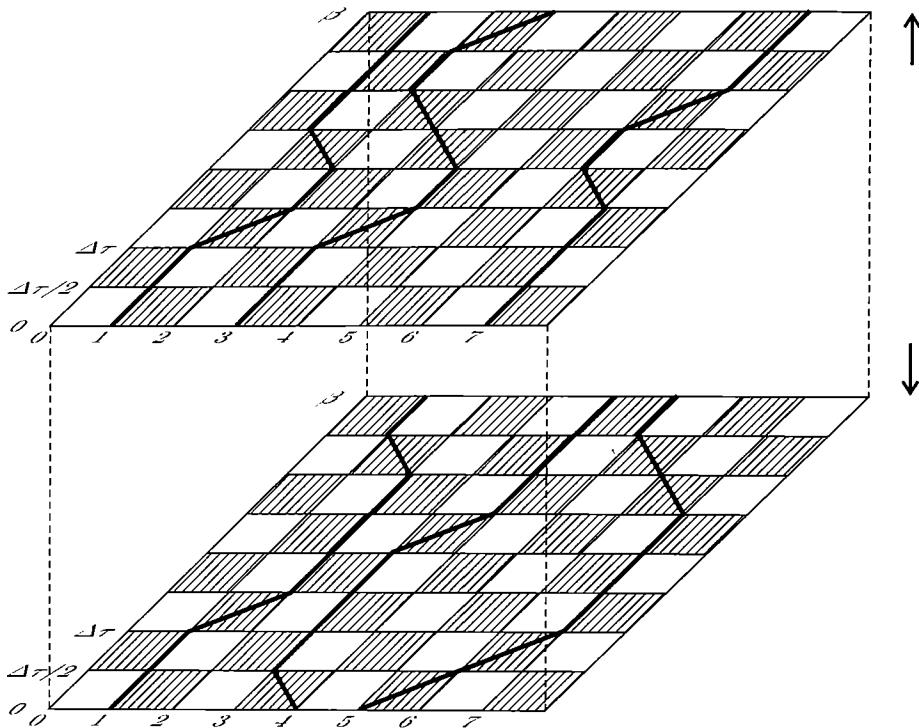


Рис. 11.2. Один из возможных вариантов учета спина у фермионов в траекторном методе. На верхней доске находятся траектории частиц со спином вверх, на нижней — со спином вниз. Между траекториями частиц с разными спинами может быть взаимодействие, если такой член имеется в гамильтониане

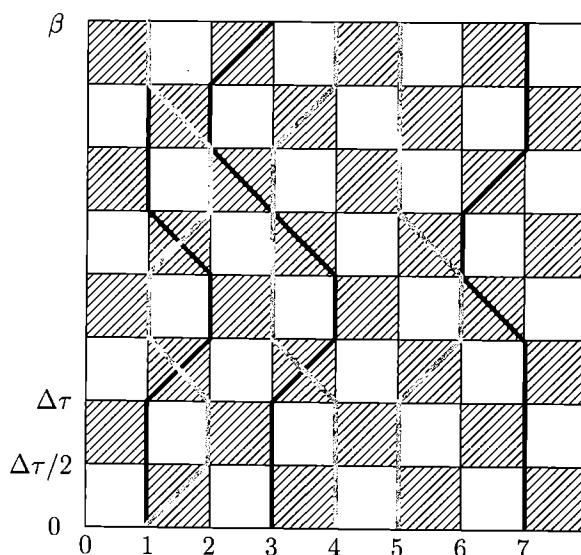


Рис. 11.3. Другой вариант учета спина у фермионов в траекторном методе. Чёрные линии соответствуют частицам со спином вверх, серые — со спином вниз

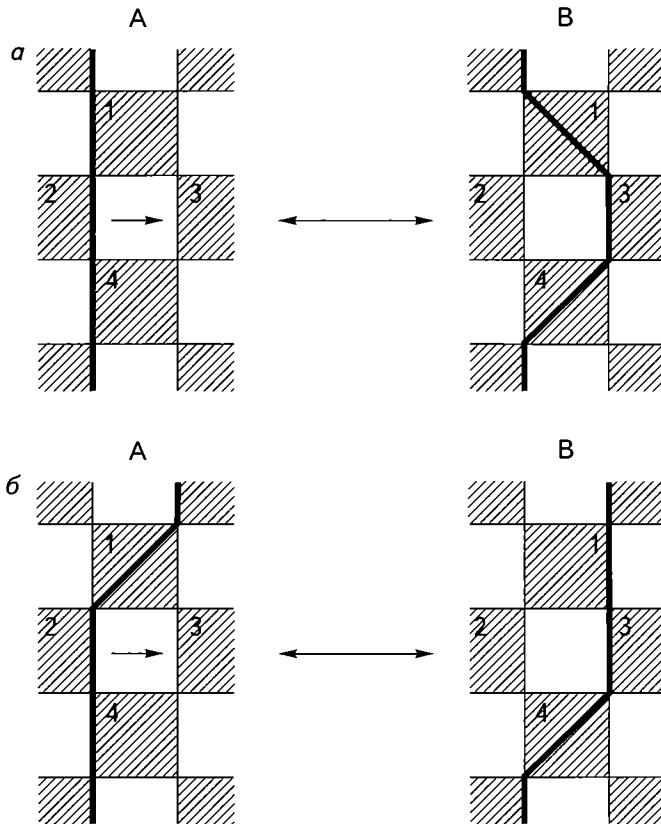


Рис. 11.4. Простейшие обновления траекторий мировых линий частиц в траекторном алгоритме

Оба варианта, как видно из рисунков, сводятся к перемещению фазовой траектории с одной стороны незаштрихованного квадрата шахматной доски на другую. Таким образом, для расчета вероятности перехода следует пересчитать состояния только четырех заштрихованных квадратов вокруг выбранного незаштрихованного, что делает алгоритм локальным и позволяет сократить число расчетов для каждого элементарного шага МК. Например, при обновлении траектории, показанной на рис. 11.4, б, из состояния *A* в состояние *B*, требуется рассчитать четыре новых матричных элемента:  $\langle 01 | e^{-\Delta\tau H_i} | 01 \rangle_B$  для квадрата 1;  $\langle 00 | e^{-\Delta\tau H_{i-1}} | 00 \rangle_B$  для квадрата 2;  $\langle 10 | e^{-\Delta\tau H_{i+1}} | 10 \rangle_B$  для квадрата 3 и  $\langle 01 | e^{-\Delta\tau H_i} | 10 \rangle_B$  для квадрата 4 и сравнить их с соответствующими исходными матричными элементами  $\langle 01 | e^{-\Delta\tau H_i} | 10 \rangle_A$ ;  $\langle 01 | e^{-\Delta\tau H_{i-1}} | 01 \rangle_A$ ;  $\langle 00 | e^{-\Delta\tau H_{i+1}} | 00 \rangle_A$ ;  $\langle 10 | e^{-\Delta\tau H_i} | 10 \rangle_A$ .

Далее алгоритм МК основывается на правилах, уже рассмотренных в третьей части книги. Кратко напомним их с учетом особенностей метода.

Все процедуры для обновления мгновенных конфигураций разбиваются попарно на «прямые» и «обратные», при этом каждая пара процедур удовле-

творяет уравнению детального баланса:

$$W^{(\text{old})} P_{\rightarrow} p_{\rightarrow} = W^{(\text{new})} P_{\leftarrow} p_{\leftarrow}. \quad (11.12)$$

Здесь  $W^{(\text{old})}$  и  $W^{(\text{new})}$  — статистические веса старой и новой конфигураций соответственно (фактически это есть произведение четырех операторов эволюции, согласно процедурам обновлений шахматной доски);  $P_{\rightarrow}$  и  $P_{\leftarrow}$  — вероятности вызова прямой и обратной процедур в алгоритме;  $p_{\rightarrow}$  и  $p_{\leftarrow}$  — вероятности, с которыми принимаются эти процедуры, и именно последние величины подлежат определению для выполнения детального баланса, так как остальные зависят от конкретной ситуации и параметров задачи.  $P_{\rightarrow}$  и  $P_{\leftarrow}$  определяются особенностями конкретной реализации алгоритма, для данного конкретного случая они равны друг другу:  $P_{\rightarrow} = P_{\leftarrow} = 1/ML$ ,  $L \equiv N_a$  — размер системы, т. е. случайным образом выбирается один из пустых квадратов на шахматной доске, вокруг которого будет осуществляться изменение траектории. Тогда  $\frac{p_{\rightarrow}}{p_{\leftarrow}} = \frac{W^{(\text{new})} P_{\leftarrow}}{W^{(\text{old})} P_{\rightarrow}} \equiv R$ . Для рассмотренного выше случая обновления конфигурации на рис. 11.4, б статистические веса старой и новой конфигурации будут равны, соответственно,

$$\begin{aligned} W^{(\text{old})} &= \\ &= \langle 01 | e^{-\Delta\tau H_i} | 10 \rangle_A \langle 01 | e^{-\Delta\tau H_{i-1}} | 01 \rangle_A \langle 00 | e^{-\Delta\tau H_{i+1}} | 00 \rangle_A \langle 10 | e^{-\Delta\tau H_i} | 10 \rangle_A, \\ W^{(\text{new})} &= \\ &= \langle 01 | e^{-\Delta\tau H_i} | 01 \rangle_B \langle 00 | e^{-\Delta\tau H_{i-1}} | 00 \rangle_B \langle 10 | e^{-\Delta\tau H_{i+1}} | 10 \rangle_B \langle 01 | e^{-\Delta\tau H_i} | 10 \rangle_B. \end{aligned}$$

Так как вероятности подчиняются естественному требованию  $0 \leq p \leq 1$ , то простейшим вариантом выбора  $p_{\rightarrow}$  и  $p_{\leftarrow}$  является следующий (*схема Метрополиса*):

$$\begin{aligned} p_{\rightarrow} &= \begin{cases} R, & \text{если } R < 1, \\ 1, & \text{если } R \geq 1; \end{cases} \\ p_{\leftarrow} &= \begin{cases} 1, & \text{если } R < 1, \\ 1/R, & \text{если } R \geq 1. \end{cases} \end{aligned} \quad (11.13)$$

Иногда для обновления конфигураций пользуются *алгоритмом тепловой ванны* с  $p_{\rightarrow} = R/(1+R)$ , как в исходных работах [97, 98].

**11.1.1.2. Расчет средних величин.** Среднее значение любого оператора  $A$  при использовании алгоритма Метрополиса рассчитывается стандартно по формуле:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n A_n W_n}{\sum_n W_n} = \frac{\sum_i A_i}{\sum_{MC} 1}. \quad (11.14)$$

Последняя сумма подчеркивает то обстоятельство, что при переборе состояний по алгоритму Метрополиса расчет сводится к простому арифметическому среднему.

Следует заметить, что в отличие от гибсовских статистических весов в классическом методе МК статистические вклады мгновенных конфигураций

в квантовом алгоритме, рассчитываемые из матричных элементов операторов эволюции, могут иметь любой знак. Это обстоятельство приводит к *проблеме знака – Minus Sign Problem*. Далее в следующих разделах проблема знака будет обсуждаться подробнее здесь же отметим, что вероятности должны быть положительны, поэтому в уравнение детального баланса входит модуль отношения  $\left| \frac{W^{(\text{new})}}{W^{(\text{old})}} \right|$ , и итоговая формула имеет вид

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n A_n |W_n| \operatorname{sgn} W_n}{\sum_n |W_n| \operatorname{sgn} W_n} = \frac{\sum_{MC} A_i \operatorname{sgn} W_i}{\sum_{MC} \operatorname{sgn} W_i}. \quad (11.15)$$

Все измеряемые в численном эксперименте величины можно разделить на две категории: физические величины, операторы которых сохраняют локально числа частиц, т. е. сохраняют число частиц в пределах каждого заштрихованного квадрата в схеме шахматной доски, и, соответственно, нелокальные величины, операторы которых не сохраняют локально число частиц.

К первым, локальным величинам, можно отнести полное число частиц в системе

$$N = \sum_i n_i; \quad (11.16)$$

*диагональные корреляционные функции* типа корреляторов плотность-плотность, ток-ток:

$$\begin{aligned} &\langle n_i(\tau) n_j(0) \rangle, \quad n_i(\tau) = e^{\tau H} n_i e^{-\tau H}; \\ &\langle j(\tau) j(0) \rangle, \quad j(\tau) = i \sum_j \left( a_j^+(\tau) a_{j+1}(\tau) - a_{j+1}^+(\tau) a_j(\tau) \right); \end{aligned} \quad (11.17)$$

энергию системы:

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \langle \hat{H} \rangle. \quad (11.18)$$

Среди нелокальных величин следует отметить *недиагональную матрицу плотности*

$$\rho(i, j) = \langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle, \quad (11.19)$$

описывающую дальний недиагональный порядок в системе; *мацубаровскую функцию Грина*

$$G_\sigma(i, j, \tau) = \langle a_{i\sigma}(\tau) a_{j\sigma}^+(0) \rangle, \quad (11.20)$$

необходимую для расчета плотности состояний и спектра элементарных возбуждений, при этом узлы  $i$  и  $j$  — не обязательно ближайшие соседи. Также примером нелокального коррелятора может служить *парная корреляционная функция*

$$D(i, j, \tau) = \langle a_{j\uparrow}^+(\tau) a_{j\downarrow}^+(\tau) a_{i\downarrow}(0) a_{i\uparrow}(0) \rangle, \quad (11.21)$$

расчет которой может дать информацию о возможности синглетного спаривания носителей заряда в системе и появления сверхпроводящих свойств.

**11.1.1.2.1. Расчет величин, локально сохраняющих число частиц.** Пусть  $A$  — оператор локальной физической величины. Разобьем его, как и оператор энергии, на слагаемые по двум типам связей:

$$A = A_1 + A_2, \\ A_1 = \sum_{\langle ij \rangle_1} A_{ij}, \quad A_2 = \sum_{\langle ij \rangle_2} A_{ij}. \quad (11.22)$$

В случае одиночстичных операторов типа оператора числа частиц это разбиение можно представить разными способами, например:

$$A_1 = \sum_{i=1,3,5,\dots} A_i, \quad A_2 = \sum_{i=2,4,6,\dots} A_i, \quad (11.23)$$

или

$$A_1 = \frac{1}{2} \sum_i A_i, \quad A_2 = \frac{1}{2} \sum_i A_i \quad (11.24)$$

в зависимости от удобства расчета.

Введем следующие обозначения для операторов эволюции согласно разбиению (11.6):

$$U_{1,2} = e^{-\Delta\tau H_{1,2}}. \quad (11.25)$$

Вероятность реализации конкретной мгновенной конфигурации (обозначим ее индексом  $k$ ) запишется согласно разложению (11.8) в следующем виде:

$$P[\varphi_0(k) \dots \varphi_{2M-1}(k)] = \\ = \frac{\langle \varphi_0(k) | U_1 | \varphi_1(k) \rangle \langle \varphi_1(k) | U_2 | \varphi_2(k) \rangle \dots \langle \varphi_{2M-1}(k) | U_2 | \varphi_0(k) \rangle}{\sum_{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_{2M-1}} \langle \varphi_0(k) | U_1 | \varphi_1(k) \rangle \langle \varphi_1(k) | U_2 | \varphi_2(k) \rangle \dots \langle \varphi_{2M-1}(k) | U_2 | \varphi_0(k) \rangle}. \quad (11.26)$$

Тогда среднее от оператора  $A$  представимо следующим образом:

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}(Ae^{-\beta H})}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} \equiv \frac{\text{Tr}\left(A(U_1 U_2)^M\right)}{Z} = \\ = \text{Tr}\left[P[\varphi_0 \dots \varphi_{2M-1}] \left( \frac{\langle \varphi_0(k) | A_1 U_1 | \varphi_1(k) \rangle}{\langle \varphi_0(k) | U_1 | \varphi_1(k) \rangle} + \right.\right. \\ \left.\left. + \frac{\langle \varphi_{2M-1}(k) | A_2 U_2 | \varphi_0(k) \rangle}{\langle \varphi_{2M-1}(k) | U_2 | \varphi_0(k) \rangle} \right) \right]. \quad (11.27)$$

В выражении (11.27) оператор  $A$  был отнесен к первому и последнему временным срезам, но это необязательно. Информацию можно собирать с любой пары временных срезов, так как все временные срезы эквивалентны. На практике информацию собирают со всей фазовой картины, а затем усредняют результаты по всем  $M$  срезам.

В частном случае диагонального оператора числа частиц для произвольного узла  $l$  имеем

$$\langle n_l \rangle = \lim_{P \rightarrow \infty} \frac{1}{2MLP} \sum_{k=1}^P \sum_{i=0}^{2M-1} \sum_{j=1}^L n_k(i, j), \quad (11.28)$$

$$n_k(i, j) = \langle \varphi_i(k) | n_l | \varphi_i(k) \rangle.$$

Здесь  $n_k(i, j)$  — число частиц на узле  $j$  на  $i$ -м временном срезе для  $k$ -й МК-конфигурации. Поэтому для расчета величин, диагональных в представлении чисел заполнения, в процессе перебора конфигураций следует одновременно собирать информацию о мгновенных числах заполнения со всех узлов.

При расчете энергии системы также следует собирать информацию со всех пар временных срезов, усредняя результат:

$$\langle H \rangle = \frac{1}{M} \text{Tr} \left[ P[\varphi_0 \dots \varphi_{2M-1}] \left\{ \sum_{i=0}^M \left( \frac{\langle \varphi_{2i-1}(k) | H_1 U_1 | \varphi_{2i}(k) \rangle}{\langle \varphi_{2i-1}(k) | U_1 | \varphi_{2i}(k) \rangle} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \left( \frac{\langle \varphi_{2i}(k) | H_2 U_2 | \varphi_{2i+1}(k) \rangle}{\langle \varphi_{2i}(k) | U_2 | \varphi_{2i+1}(k) \rangle} \right) \right\} \right] \quad (11.29)$$

при этом каждое отношение матричных элементов распадается на произведение отношений матричных элементов только по заштрихованным квадратам шахматной доски:

$$\frac{\langle \varphi_{2i-1}(k) | H_1 U_1 | \varphi_{2i}(k) \rangle}{\langle \varphi_{2i-1}(k) | U_1 | \varphi_{2i}(k) \rangle} = \\ = \sum_j \left( \frac{\langle n_k(2i-1, 2j-1) n_k(2i-1, 2j) | H_1 U_1 | n_k(2i, 2j-1) n_k(2i, 2j) \rangle}{\langle n_k(2i-1, 2j-1) n_k(2i-1, 2j) | U_1 | n_k(2i, 2j-1) n_k(2i, 2j) \rangle} \right). \quad (11.30)$$

Расчет таких отношений для всех возможных состояний двухузельной задачи проводится заранее. Например, для бесспиновых фермионов в модели (11.3) имеем (индексом  $i$  обозначен первый из двух узлов):

$$\frac{\langle 00 | He^{-\Delta\tau H} | 00 \rangle}{\langle 00 | e^{-\Delta\tau H} | 00 \rangle} = 0, \\ \frac{\langle 11 | He^{-\Delta\tau H} | 11 \rangle}{\langle 11 | e^{-\Delta\tau H} | 11 \rangle} = \frac{1}{2} (\Delta_i + \Delta_{i+1}), \\ \frac{\langle 01 | He^{-\Delta\tau H} | 01 \rangle}{\langle 01 | e^{-\Delta\tau H} | 01 \rangle} = \frac{1}{2} (\Delta_i + \Delta_{i+1}) - te^{\frac{(\Delta_{i+1}-\Delta_i)}{2}} \text{th}(\Delta\tau t), \\ \frac{\langle 10 | He^{-\Delta\tau H} | 10 \rangle}{\langle 10 | e^{-\Delta\tau H} | 10 \rangle} = \frac{1}{2} (\Delta_i + \Delta_{i+1}) - te^{\frac{(\Delta_i-\Delta_{i+1})}{2}} \text{th}(\Delta\tau t), \\ \frac{\langle 10 | He^{-\Delta\tau H} | 01 \rangle}{\langle 10 | e^{-\Delta\tau H} | 01 \rangle} = \frac{1}{2} (\Delta_i + \Delta_{i+1}) - te^{\frac{(\Delta_i-\Delta_{i+1})}{2}} \text{cth}(\Delta\tau t), \\ \frac{\langle 01 | He^{-\Delta\tau H} | 10 \rangle}{\langle 01 | e^{-\Delta\tau H} | 10 \rangle} = \frac{1}{2} (\Delta_i + \Delta_{i+1}) - te^{\frac{(\Delta_{i+1}-\Delta_i)}{2}} \text{cth}(\Delta\tau t). \quad (11.31)$$

В табл. 11.1 приведены данные для модели (11.3) при  $\Delta_i = 0$  для бесспиновых фермионов, рассчитанные в [98], по сравнению с результатами точной диагонализации.

Таблица 11.1. Значения энергии системы бесспиновых фермионов с гамильтонианом (11.3) из [98] для случая  $\Delta_i = 0$  и  $N = N_a/2$  в сравнении с результатами точной диагонализации

$N_a$	$E_{MC}/N_a$	$E_{exact}/N_a$
4	$-0,242 \pm 0,001$	$-0,242$
8	$-0,389 \pm 0,001$	$-0,388$
16	$-0,540 \pm 0,001$	$-0,539$
24	$-0,594 \pm 0,001$	$-0,593$

**11.1.1.2.2. Расчет величин, не сохраняющих локально число частиц.** Корреляционные функции даже при совпадающих временах (одновременные корреляторы), такие, как парный коррелятор

$$D(i, j) = \langle a_{j\uparrow}^+ a_{j\downarrow}^+ a_{i\downarrow} a_{i\uparrow} \rangle \quad (11.32)$$

или недиагональная матрица плотности

$$\rho(i, j) = \langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle, \quad (11.33)$$

являются в общем случае существенно нелокальными величинами, не сохраняющими локально числа заполнения и разрывающими фермионные мировые линии. Действительно, если узлы  $i, j$  не принадлежат одной заштрихованной ячейке шахматной доски, то действие коррелятора сводится к рождению в ячейке, содержащей узел  $j$ , дополнительной частицы и одновременно уничтожению частицы в ячейке, содержащей узел  $i$ .

В этом случае вводится дополнительный временной разрез [98] (рис. 11.5), на котором допустимы разрывы траекторий. Для расчета термодинамических средних от нелокального оператора  $Q$  вида (11.32), (11.33) имеем:

$$\langle Q \rangle = \frac{\langle Q_1 \rangle}{\langle W_1 \rangle}, \quad (11.34)$$

$$\langle Q_1 \rangle = \text{Tr} [\langle i_1 | Q | i_{1'} \rangle U_{1',2}(k) U_{2,3}(k) \dots U_{2L,1}(k)], \quad (11.35)$$

$$\langle W_1 \rangle = \text{Tr} [\langle i_1 | i_{1'} \rangle U_{1',2}(k) U_{2,3}(k) \dots U_{2L,1}(k)], \quad (11.36)$$

$$U_{LM}(k) = \langle \varphi_L(k) | U_{1,2} | \varphi_M(k) \rangle. \quad (11.37)$$

Для расчета (11.34) необходимо реализовать независимую МК-процедуру для числителя и знаменателя и рассчитать термодинамические средние (11.35) и (11.36). Эти процессы можно объединить, внося вклад либо в числитель, либо в знаменатель в течение МК-симуляции в зависимости от того, какой из матричных элементов  $\langle i | Q | i' \rangle$  или  $\langle i | i' \rangle$  не равен нулю. Кроме того, можно исключать все МК-реализации, где оба матричных элемента равны нулю. Вся полезная информация для расчета коррелятора снимается только

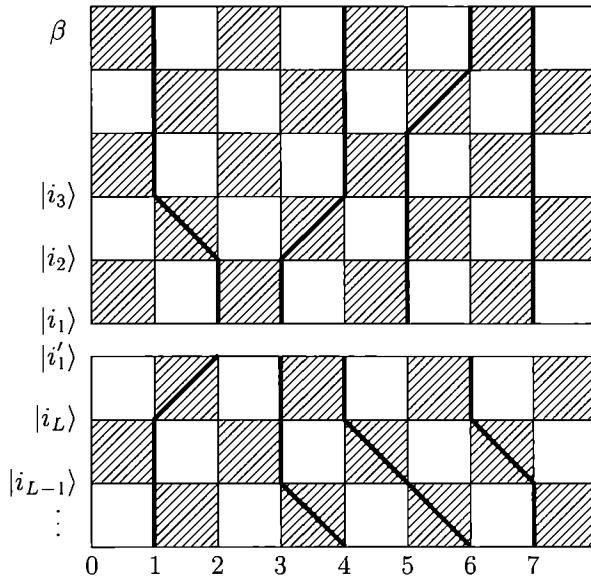


Рис. 11.5. Схема шахматной доски для расчета нелокальных корреляторов. Траектории частиц могут испытывать разрыв между временными срезами  $|i_1\rangle$  и  $|i'_1\rangle$

с одного временного разреза  $\langle i | i' \rangle$ . Это уменьшает скорость сходимости в  $2L = M$  раз, однако она все равно остается прямо пропорциональной размеру кластера.

Приведем метод расчета нелокальной физической величины с разновременными операторами, например мацубаровской функции Грина

$$G_\sigma(i, j, \tau) = \langle a_{i\sigma}(\tau) a_{j\sigma}^+(0) \rangle. \quad (11.38)$$

В этом случае в схему расчета необходимо внести два дополнительных временных разреза, разнесенных на величину  $\tau$  по шкале мнимого времени. Расчет функции Грина проводится, исходя из следующих соотношений:

$$\langle G \rangle = \frac{\langle G_1 \rangle}{\langle W_1 \rangle}, \quad (11.39)$$

$$\langle G_1 \rangle = \text{Tr} [\langle i_1 | a^+ | i_1' \rangle U_{1',2}(k) U_{2,3}(k) \dots \langle i_\tau | a | i_\tau' \rangle \dots U_{2L,1}(k)], \quad (11.40)$$

$$\langle W_1 \rangle = \text{Tr} [\langle i_1 | i_1' \rangle U_{1',2}(k) U_{2,3}(k) \dots \langle i_\tau | i_\tau' \rangle \dots U_{2L,1}(k)]. \quad (11.41)$$

Если в системе  $N$  частиц, то при расчете функции Грина между временными срезами  $|i_1\rangle$  и  $|i_\tau\rangle$  на одну частицу больше —  $(N + 1)$  частиц. Кроме того, параллельно генерируются конфигурации с  $N$  частицами в промежутке между этими срезами для расчета статистического веса  $W_1$  таким образом, чтобы временные срезы вне этого промежутка были общими для обоих МК-расчетов (11.40) и (11.41). В результате МК-расчет проводится на усложненной пространственно-временной сетке (рис. 11.6). Вся информация снимается с временных срезов  $|i_1\rangle$ ,  $|i'_1\rangle$ ,  $|i_\tau\rangle$  и  $|i'_\tau\rangle$ , так что сходимость ухудшается в  $M$  раз ( $M$  — полное число временных срезов), однако все равно остается пропорциональной числу узлов  $N_a$  [117].

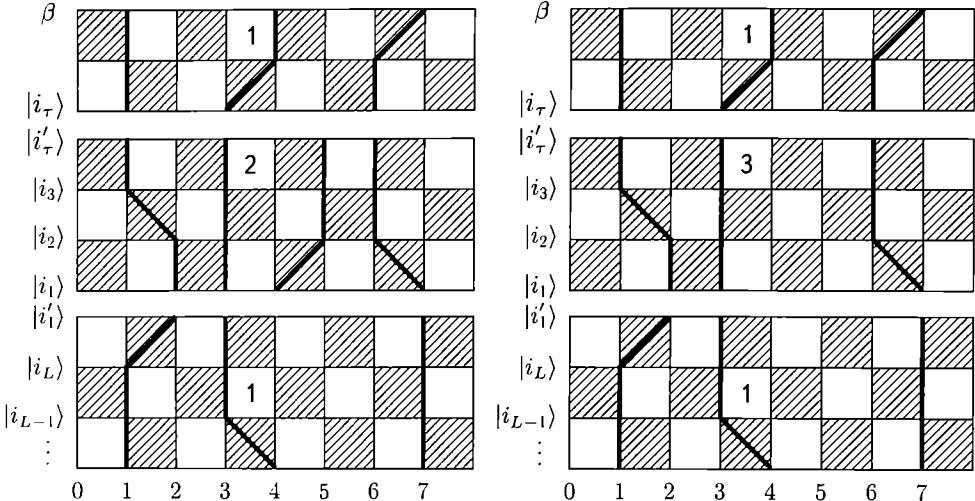


Рис. 11.6. Усложненная схема шахматной доски для расчета мацубаровской функции Грина. В области 2 в конфигурации слева на 1 частицу больше, чем в областях 1 и 3. Такие конфигурации генерируются для сбора статистики для мацубаровской функции Грина. Конфигурации справа генерируются для расчета статистических весов  $W_1$  в (11.41). Пары конфигураций слева генерируются одновременно, при этом области 1 — для обеих конфигураций одинаковы

Для улучшения сходимости из возможных МК-конфигураций исключаются те, для которых произведение матричных элементов  $\langle i_\tau | a | i'_\tau \rangle \langle i_1 | a^+ | i'_1 \rangle$  по области  $1 \otimes 2$  (см. рис. 11.6) или  $\langle i_\tau | i'_\tau \rangle \langle i_1 | i'_1 \rangle$  по области  $1 \otimes 3$  равно нулю. Кроме того, через определенное число МК-шагов расчет проводится заново для новой исходной конфигурации. Затем результаты, полученные при различных начальных конфигурациях, усредняются. Это уменьшает статистический шум результатов. Для каждого времени  $\tau$  проводится самостоятельный МК-расчет.

В заключение раздела приведем результаты расчета (рис. 11.7, 11.8) из [98] для следующих нелокальных корреляционных функций:

### 1. Коррелятор волны зарядовой плотности

$$G_{CDW}(l) = (-1)^l \langle n_{i+l} n_i \rangle .$$

### 2. Коррелятор волны спиновой плотности

$$G_{SDW}(l) = (-1)^l \langle S_{i+l}^z S_i^z \rangle , \quad S_i^z = \frac{1}{2} (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) .$$

### 3. Парная корреляционная функция синглетного спаривания

$$G_{SS}(l) = \left\langle a_{i+l\downarrow} a_{i+l\uparrow} a_{i\uparrow}^+ a_{i\downarrow}^+ \right\rangle$$

для расширенной (со взаимодействием на соседних узлах) модели Хаббарда с  $N_a = 20$ , 10 фермионов со спином вверх и 10 — со спином вниз,  $\beta = 4$ :

$$H = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_i n_i n_{i+1} - t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + h.c.). \quad (11.42)$$

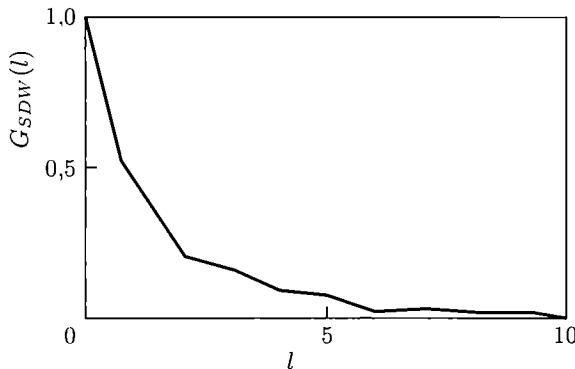


Рис. 11.7. Коррелятор волны спиновой плотности из [98] для модели (11.42) с параметрами  $U = 6$ ,  $V = 0$

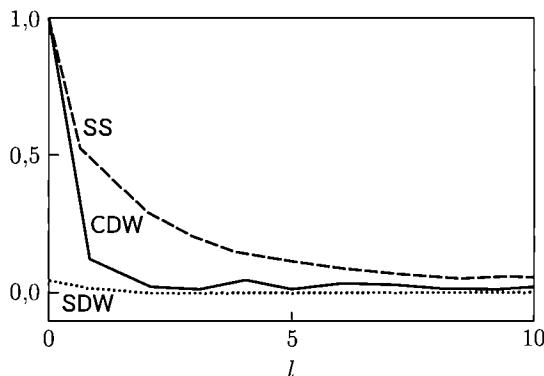


Рис. 11.8. Корреляторы волны спиновой плотности (SDW), волны зарядовой плотности (CDW) и парная корреляционная функция синглетного спаривания (SS) из [98] для модели (11.42) с параметрами  $U = -6$ ,  $V = -0,4$

**11.1.2. Проблема знака (Minus Sign Problem) в квантовом алгоритме Монте-Карло.** Как было отмечено в предыдущем разделе, статистические веса в квантовом алгоритме МК могут иметь любой знак; это приводит к тому, что при расчете средних от операторов приходиться суммировать знакопеременные ряды. Это известная проблема знака — *Minus Sign Problem*. В результате любое среднее от оператора  $A$ , строго говоря, следует рассчитывать

следующим образом:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n A_n |W_n| \operatorname{sgn} W_n}{\sum_n |W_n| \operatorname{sgn} W_n} = \frac{\sum_{MC} A_i \operatorname{sgn} W_i}{\sum_{MC} \operatorname{sgn} W_i}. \quad (11.43)$$

Проблема знака, в основном, имеет место при расчете фермионных систем в двумерном и трехмерном случаях [118] и возникает из-за антисимметрии фермионной волновой функции. Это приводит к увеличению статистических ошибок и возрастанию времени расчета. В [118] предлагаются различные способы решения этой проблемы в зависимости от того, стремится ли среднее значение знака конфигурации к нулю или к постоянному значению при  $T \rightarrow 0$ . Отметим, что при рассмотрении квантовой спиновой системы с учетом не только первой, но и второй координационной сферы также приходится решать проблему знака [119].

**11.1.2.1. Два типа проблемы знака.** В общем случае, согласно (11.43), для вычисления статистической суммы и среднего от оператора физической величины  $A$  необходимо суммировать отношение двух знакопеременных рядов. При уменьшении температуры и числитель, и знаменатель в формуле (11.43) стремятся к нулю, из-за этого статистические ошибки получаемых при расчете величин сильно возрастают, а при некоторой низкой температуре вычисления становятся невозможны.

Рассмотрим систему фермионов или бозонов на двумерной решетке с перескоками на первую и вторую координационные сферы:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^+ a_j - t' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} a_i^+ a_j + \sum_i \Delta_i n_i, \quad t' < 0. \quad (11.44)$$

На рис. 11.9 показаны примеры конфигураций, имеющих веса разного знака.

Таким образом, одним из источников проблемы знака является положительный знак матричных элементов возмущения. Даже одно положительное слагаемое в возмущении может изменить знак статистического веса и тем самым вызвать проблему знака.

Есть еще один источник проблемы знака, не зависящий от возмущения. Это — антисимметрия волновой функции фермионов относительно перестановок частиц. От этого знака нельзя избавиться, меняя возмущение, так как он напрямую связан со статистикой частиц. Это — *фермионная проблема знака*.

**11.1.2.2. Модели, свободные от проблемы знака.** Проблема знака иногда отсутствует из-за особенностей модели.

Почти единственный пример фермионной системы без фермионного знака — это бесспиновые электроны на одномерной цепочке с перескоком между ближайшими соседями в случае нечетного числа частиц: единственный тип перескока, в котором траектория пересекает другие — перескок через границу, при этом число пересечений всегда четно, и в результате фермионный знак любой конфигурации равен +1. По этой причине практически не используются траекторные методы МК для двух- и трехмерных фермионных систем

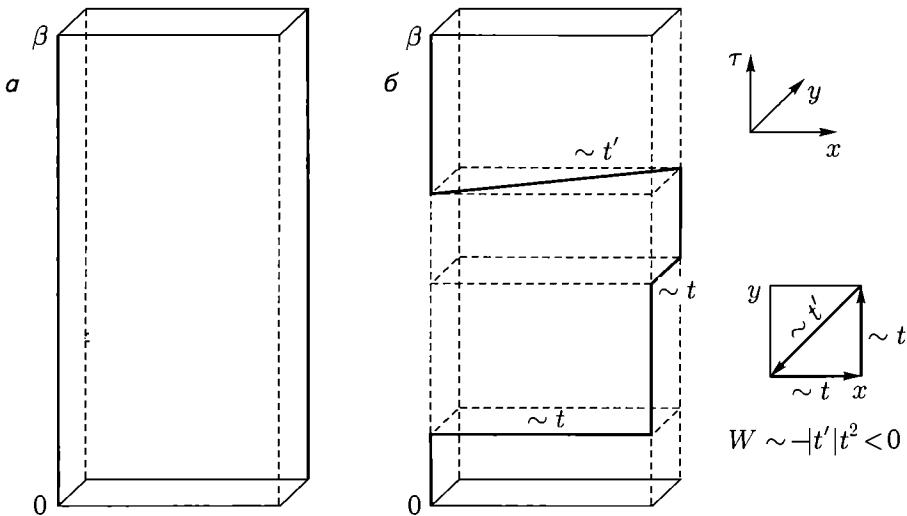


Рис. 11.9. Конфигурация (а) имеет положительный вес, в то время как вес конфигурации (б)  $W \sim -|t'| t^2 < 0$  из-за вклада перескока со второй координационной сферы (исключение — методы МК для плоскости CuO<sub>2</sub> в высокотемпературных сверхпроводниках, рассматриваемых далее).

Задачи, где отсутствует знак, связанный с возмущением, рассматриваются чаще. Например, это бозонная модель Хаббарда на квадратной решетке с перескоками только на первую координационную сферу. Число перескоков в этом случае всегда четно, и при любом знаке перескока общий знак будет положителен. Также свободны от проблемы знака спиновые модели с взаимодействием между ближайшими соседями из-за симметричной по перестановкам волновой функции.

**11.1.2.3. Быстрый расчет и коррекция энергии основного состояния.** Проблема знака при уменьшении температуры замедляет расчет и серьезно увеличивает флуктуации получаемых величин. Но для энергии основного состояния существует простой метод коррекции, позволяющий заметно улучшить точность результата. Суть этого метода заключается в следующем.

Определим средний знак конфигурации по формуле:

$$\langle \text{Sgn} \rangle = \frac{\sum_{MC} \text{sgn} W}{\sum_{MC} 1} = \frac{Z_{\text{со знаком}}}{Z_{\text{без знака}}}. \quad (11.45)$$

При низкой температуре статистическую сумму в общем виде можно представить следующим образом:  $Z = g_0 e^{-\beta E_0} + g_1 e^{-\beta E_1} + \dots$ , и поэтому средний знак при  $\beta \rightarrow 0$  экспоненциально затухает:

$$\langle \text{Sgn} \rangle \sim e^{-\beta(E_0^{\text{со знаком}} - E_0^{\text{без знака}})}. \quad (11.46)$$

(кстати, отсюда видно, что при учете знака основной уровень энергии повышается). В случае без знака флуктуации энергии, как и всех средних вообще,

значительно меньше, поэтому легче рассчитать  $E_0^{\text{без знака}}$  и скорректировать его на значение  $\Delta E = E_0^{\text{с со знаком}} - E_0^{\text{без знака}}$ , полученное из асимптотики зависимости  $\langle \text{Sgn} \rangle$  от  $\beta$ .

Метод коррекции энергии основного состояния позволяет значительно сократить время, необходимое для вычислений, а во многих случаях расчет без него просто невозможен.

Далее при рассмотрении методов МК в непрерывном времени будет описан способ расчета знака конфигурации, исходя из топологических характеристик фазовых траекторий.

**11.1.3. Особенности статистики Бозе.** В 1992 г. был разработан метод траекторного дискретного алгоритма МК для бозонной модели Хаббарда, уже рассмотренной в гл. 5 [96]:

$$H = -t \sum_{\langle ik \rangle} (a_i^+ a_k + h.c.) + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) + V \sum_{\langle ik \rangle} n_i n_k - \mu \sum_i n_i. \quad (11.47)$$

Схема алгоритма МК — та же, как и для фермионной статистики; так же используется разложение Судзуки–Троттера:

$$\begin{aligned} Z = & \sum_{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_{2M-1}} \left\langle \varphi_0 \left| e^{-\frac{\Delta\tau}{2}(H_0+2W_1)} e^{-\Delta\tau K_1} \right| \varphi_1 \right\rangle \times \\ & \times \left\langle \varphi_1 \left| e^{-\frac{\Delta\tau}{2}(H_0+2W_2)} e^{-\Delta\tau K_2} \right| \varphi_2 \right\rangle \times \dots \\ & \dots \times \left\langle \varphi_{2M-1} \left| e^{-\frac{\Delta\tau}{2}(H_0+2W_2)} e^{-\Delta\tau K_2} \right| \varphi_0 \right\rangle \end{aligned} \quad (11.48)$$

со стандартным разбиением на кинетическую энергию и взаимодействие:

$$\begin{aligned} K_1 &= -t \sum_{\langle ik \rangle_1} (a_i^+ a_k + h.c.), \quad K_2 = -t \sum_{\langle ik \rangle_2} (a_i^+ a_k + h.c.), \\ W_1 &= V \sum_{\langle ik \rangle_1} n_i n_k, \quad W_2 = V \sum_{\langle ik \rangle_2} n_i n_k, \\ H_0 &= \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu \sum_i n_i, \end{aligned} \quad (11.49)$$

что также приводит к схеме шахматной доски в фазовом пространстве.

Основное различие с рассмотренным выше фермионным алгоритмом — в отсутствии запрета на узельные числа заполнения  $n_i$ , что приводит к некоторым особенностям расчета.

Во-первых, возникают сложности при расчете матричных элементов в (11.48). Для частного случая *hard-core*-бозонов с заполнением  $n_i = 0; 1$  еще возможно аналитически рассчитать двухузельные матричные элементы

в схеме шахматной доски:

$$\begin{aligned}
 \langle 00 | e^{-\Delta\tau H} | 00 \rangle &= 1, \\
 \langle 11 | e^{-\Delta\tau H} | 11 \rangle &= e^{-\Delta\tau(V-\mu)}, \\
 \langle 01 | e^{-\Delta\tau H} | 01 \rangle &= e^{-\frac{\Delta\tau\mu}{2}} \text{ch}(\Delta\tau t), \\
 \langle 10 | e^{-\Delta\tau H} | 10 \rangle &= e^{-\frac{\Delta\tau\mu}{2}} \text{ch}(\Delta\tau t), \\
 \langle 01 | e^{-\Delta\tau H} | 10 \rangle &= e^{-\frac{\Delta\tau\mu}{2}} \text{sh}(\Delta\tau t), \\
 \langle 10 | e^{-\Delta\tau H} | 01 \rangle &= e^{-\frac{\Delta\tau\mu}{2}} \text{sh}(\Delta\tau t).
 \end{aligned} \tag{11.50}$$

В случае редуцированной бозонной модели ( $n_i = 0, 1, 2$ ) также возможно аналитически рассчитать матричные элементы.

Но при заполнении  $n_{\max} \geq 3$  результат можно получить только численно, что делается один раз перед началом расчета МК простым умножением матриц:

$$\langle e^{-\Delta\tau \hat{H}} \rangle = \sum_l \frac{(-\Delta\tau)^l \hat{H}^l}{l!}. \tag{11.51}$$

Ряд сходится быстро, так как  $\Delta\tau/\beta \ll 1$ . Так же рассчитываются все матричные элементы для операторов, средние от которых необходимо рассчитывать в МК процедуре:

$$\langle A e^{-\Delta\tau H} \rangle = \sum_l \frac{(-\Delta\tau)^l A H^l}{l!}. \tag{11.52}$$

Задавая в (11.52) значение  $n_{\max}$ , которое определяет линейный размер гамильтоновой матрицы, можно получить все необходимые матричные элементы.

Обычно ограничения  $n_{\max} \sim 5 \div 8$  достаточно, чтобы результаты с необходимой точностью совпадали с результатами полной бозонной модели (без ограничения статистики), так как даже в отсутствие взаимодействия вероятность встретиться на одном узле двум и более бозонам  $\sim 0.008$  [96].

Вторая особенность — вид фазовых траекторий на шахматной доске. На рис. 11.10 показан пример конфигурации траекторий бозонов на шахматной доске.

Как видно из рисунка, траектории бозонов могут накладываться друг на друга и пересекаться. Однако они по-прежнему непрерывны, так как локально в каждом заштрихованном квадрате число частиц не меняется вдоль шкалы мнимого времени.

Изменения траекторий происходят так же, как и в фермионом варианте: элементарный шаг МК — переброс слева направо (или наоборот) траектории одной частицы (линии с однократным заполнением) через пустой квадрат (рис. 11.11).

Расчет локальных и нелокальных величин осуществляется так же, как и для фермионов. Приведем для примера данные из [68] по определению щели в спектре возбуждений (рис. 11.12).

Третья особенность — в выражениях для вероятностей переходов отсутствует проблема знака, что связано с симметрией бозонной волновой

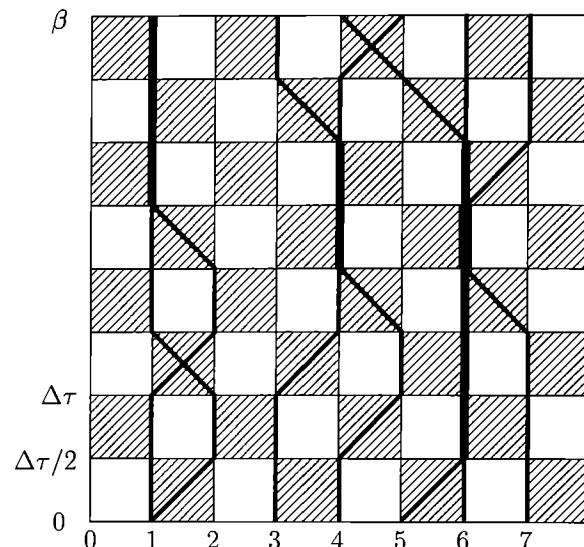


Рис. 11.10. Частицы с бозонной статистикой в схеме шахматной доски. Траектории частиц могут пересекаться и накладываться друг на друга, образуя многократное заполнение узлов. Многократное заполнение узлов показано жирными линиями

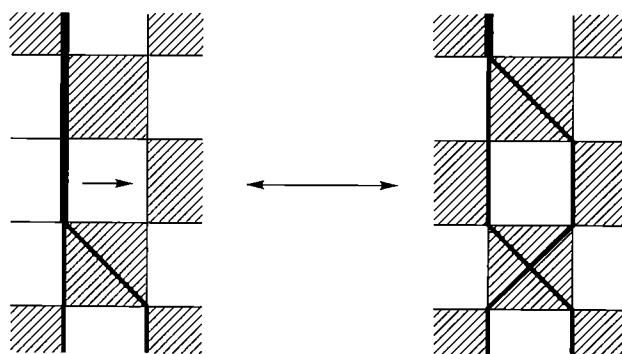


Рис. 11.11. Пример изменения траектории в случае бозонной статистики

функции. Выбор отрицательного знака матричного элемента перескока  $-t$  (возможность такого выбора рассмотрена в гл. 5) приводит к положительным матричным элементам вида (11.50). Это обстоятельство позволяет с успехом использовать траекторийный метод МК для двумерных и трехмерных бозонных моделей, а также опускаться до малых температур, наиболее интересных для физики конденсированного состояния. На рис. 11.13 схематично показан вариант шахматной доски для двумерной модели Бозе–Хаббарда из [98].

**11.1.4. Winding numbers.** Один из недостатков рассмотренных выше траекторийных методов в схеме шахматной доски заключается в том, что число оборотов траектории частицы по координатной или временной оси — *winding numbers* всегда остается фиксированным. Число оборотов траектории — естественно возникающая величина, которая показывает, сколько раз траектория

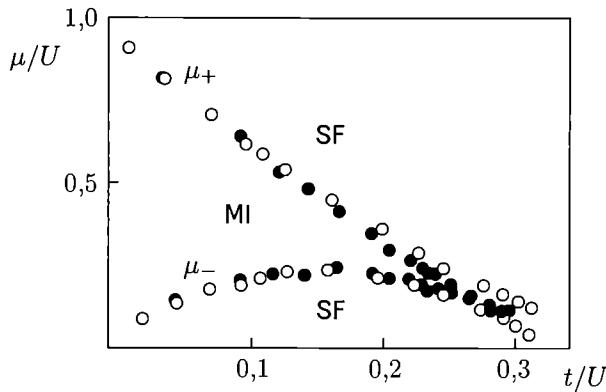


Рис. 11.12. Фазовая диаграмма для одномерной бозонной модели Хаббарда. Параметры модели:  $T = 0,0625t$ ;  $N_a = 16$  (открытые круги);  $N_a = 50$  (сплошные круги). Щель в спектре определяется разностью  $\Delta = \mu_+ - \mu_-$ , где  $\mu_+ = E(N_a + 1) - E(N_a)$ ,  $\mu_- = E(N_a) - E(N_a - 1)$

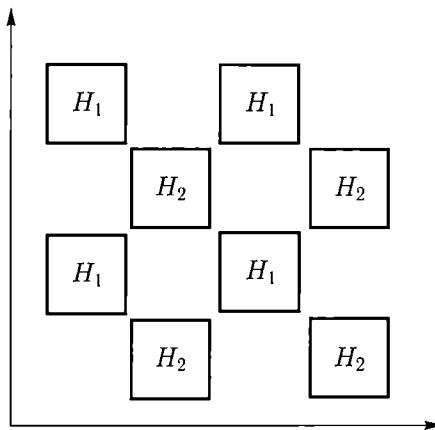


Рис. 11.13. Шахматная доска для двумерной модели (вид сверху). Роль клеток шахматной доски играют кубы, расположенные в фазовом пространстве  $(x, y, \tau)$ . Шкала мнимого времени перпендикулярна плоскости рисунка

пересекает время  $\tau = 0$ , или на сколько раз больше траектория пересекает границу, скажем, слева направо, чем наоборот.

На рис. 11.14 показаны две системы с разными числами оборотов (различными winding numbers).

Первая траектория (см. рис. 11.14, а) имеет  $W^{(\tau)} = 1$  и  $W^{(x)} = 0$ , а вторая (см. рис. 11.14, б) —  $W^{(\tau)} = 1$  и  $W^{(x)} = 1$ . Обе эти конфигурации имеют ненулевой вес и потому должны участвовать в расчетах. Но при помощи указанного ранее набора процессов для обновления траекторий не получится превратить одну конфигурацию в другую, и поэтому необходимо ввести процессы для глобальных изменений системы траектории с изменением чисел оборотов  $W^{(x)}$  и  $W^{(\tau)}$ , иначе схема расчета не будет являться эргодической. Более того, можно показать, что выражение для сверхтекущей плотности, используемое при расчете таких коллективных явлений, как сверхпроводимость или сверх-

текущесть, связано с квадратичной флюктуацией числа закруток  $\langle W_x^2 \rangle$  [120]. Таким образом, если схема расчета будет всегда находиться в классе траекторий (см. рис. 11.14, *a*), то невозможно будет рассчитать низкотемпературный коллективный отклик системы.

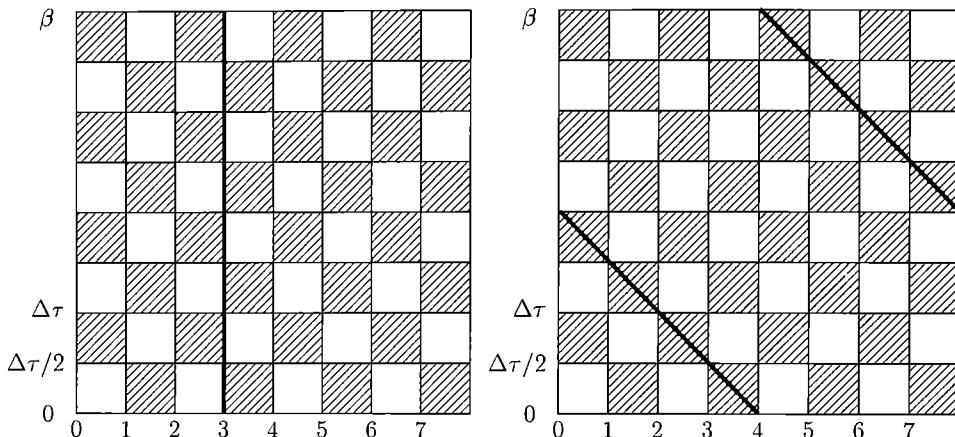


Рис. 11.14. Конфигурации с разными *winding numbers*

Вклад траекторий с ненулевым  $W$  растет с понижением температуры [120], так что при не очень низких температурах результаты расчета локальных корреляторов, энергии и других параметров системы вполне корректны. При необходимости проводятся расчеты с разными классами траекторий (разными  $W$ ) и в итоге определяются сверхтекущие характеристики [96, 101].

Проблема учета в расчете конфигураций с различными *winding numbers* была решена при разработке методов МК в непрерывном времени, рассматриваемых далее.

**11.1.5. Связь фермионного знака и *winding numbers* в траекторных методах.** Для ферми-моделей имеет место важное соотношение между знаком МК-конфигурации и числами *winding numbers*.

Как известно, антисимметрия волновых функций и тождественность частиц в ферми-системах являются причиной стандартного антикоммутационного соотношения в представлении вторичного квантования:

$$\{a_k, a_{k'}^+\}_+ = \delta_{kk'}. \quad (11.53)$$

При сквозной нумерации узлов в системе это приводит к известному выражению для матричных элементов операторов рождения и уничтожения [1]:

$$\begin{aligned} \langle n_1 \dots 0_k \dots | a_k | n_1 \dots 1_k \dots \rangle &= \langle n_1 \dots 1_k \dots | a_k^+ | n_1 \dots 0_k \dots \rangle = \\ &= (-1)^{\sum_{j=1}^{k-1} n_j}. \quad (11.54) \end{aligned}$$

Отсюда несложно получить:

$$\langle \dots 1_k \dots 0_l \dots | a_k^+ a_l | \dots 0_k \dots 1_l \dots \rangle = \begin{cases} (-1)^{\sum\limits_{j=k+1}^{l-1} n_j}, & \text{если } k < l; \\ (-1)^{\sum\limits_{j=l+1}^{k-1} n_j}, & \text{если } k > l. \end{cases} \quad (11.55)$$

Таким образом, в случае системы фермионов статистический вес любой системы траекторий, как уже отмечалось, помимо знака, связанного со знаком матричных элементов возмущения, имеет дополнительный знак, возникающий из-за антисимметрии волновой функции фермионов относительно перестановок частиц:

$$\widetilde{W} = W \prod_{k=1}^M (-1)^{\sum_{j=l_k+1}^{m_k-1} n_j^{(k)}}, \quad (11.56)$$

где  $M$  обозначает количество временных срезов,  $l_k$  и  $m_k$  — начальный и конечный узлы перескока частицы на  $k$ -м временном срезе, соответственно,  $n_j^{(k)}$  — число заполнения узла  $j$  на  $k$ -м временном срезе.

Может показаться, что этот знак странным образом зависит от порядка нумерации узлов и бессистемно меняется от конфигурации к конфигурации. Однако далее будет показано, что фермионный знак совершенно не зависит от нумерации узлов и отражает исключительно топологию системы мировых линий.

Изложенные в данном разделе результаты будут справедливы как для мгновенных МК-конфигураций с непрерывными фазовыми траекториями, так и для конфигураций с разрывами траекторий (например, для расчета функции Грина или нелокального коррелятора). Более того, результаты, полученные в этом разделе, будут справедливы и для квантовых методов МК в непрерывном времени, рассматриваемых далее.

**11.1.5.1. Конфигурации без разрывов.** Рассмотрим сначала конфигурации траекторий без разрывов. Расположим на вертикальной оси пространственную координату, на горизонтальной оси — шкалу мнимого времени. Заметим, что здесь под пространственной переменной подразумевается сквозная нумерация узлов, так что и для двумерной, и для трехмерной систем можно использовать одномерную «развертку» по вертикали. Будем полагать, что по координате соблюдаются периодические граничные условия, поэтому фазовую картину на рис. 11.15 следует понимать как плоскую проекцию тора, так как периодические граничные условия имеют место и по шкале мнимого времени.

Рассчитаем знак, который возникает из-за одного конкретного перескока. Из рис. 11.15 видно, что показателем степени в формуле (11.55) является число траекторий, пересекаемых в данный момент времени перемещающейся частицей, поэтому полное число пересечений всех траекторий, учтенное в показателе в (11.55), даст полный фермионный знак.

В дальнейшем для наглядности будем изображать траектории не ломаными линиями, а плавными кривыми, сохраняя их число пересечений и следя, чтобы в одной точке не пересекалось более двух траекторий.

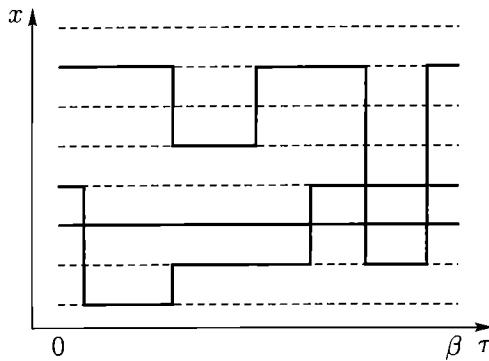
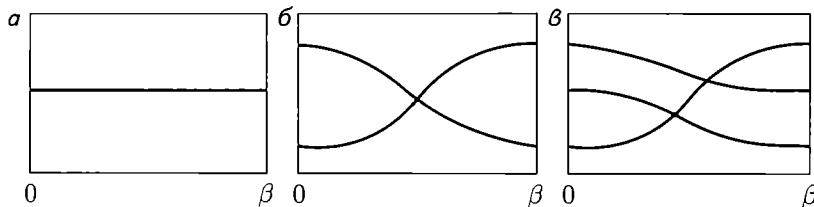


Рис. 11.15. Траектории без разрывов

Сначала рассмотрим самопересечения одной траектории. Все остальные частицы при этом можно не учитывать. Тогда получим системы типа показанных на рис. 11.16.

Рис. 11.16. Траектории с разными *winding numbers*

Траектории на рис. 11.16 различаются числами оборотов по времени (*temporal winding numbers*), т. е. разное количество раз проходят через отметку времени  $\tau = \beta$ :  $W_A = 1$ ,  $W_B = 2$ ,  $W_C = 3$ . В этом примере оказалось, что число самопересечений

$$N_{\text{self}} = W - 1. \quad (11.57)$$

Это соотношение выполняется и для  $W > 3$ , что легко показать по индукции. Шаг индукции происходит следующим образом: в систему к одиночной петле  $A$  с числом оборотов  $W_A$  добавляется другая замкнутая траектория с  $W_B = 1$  и производится один «перехлест», как показано на рис. 11.17.

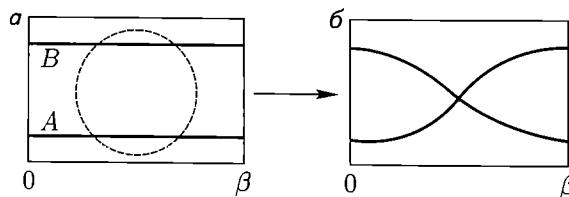


Рис. 11.17. Перехлест траекторий

Все другие виды траекторий можно получить, деформируя траектории простейшего вида. При деформации число пересечений изменяется на четное

число, поэтому знак в (11.56) не изменится, и формулу (11.57) можно считать верной с точностью до четного слагаемого.

Чтобы получить число пересечений различных траекторий, также достаточно рассмотреть простейшую ситуацию. Как и раньше, две петли с числами оборотов  $W_A$  и  $W_B$  можно превратить в одну, устроив один перехлест. Получится одна петля с числом оборотов по времени  $W_A + W_B$ , при этом число пересечений увеличится на 1, и по формуле (11.57) будет равно суммарному числу оборотов исходных петель. Но надо вычесть их числа самопересечений, и тогда получаем, что две замкнутые петли пересекаются всегда четное количество раз. Топологически это вполне очевидно. Поэтому фермионный знак статистического веса системы без разрывов траекторий определяется формулой:

$$\text{sgn} = (-1)^{\sum_k (W_k - 1)}, \quad (11.58)$$

где происходит суммирование по всем петлям.

Заметим, что фермионный знак, т. е. антисимметрия волновых функций в пространстве, оказался топологически связан с временным winding number  $W$ . Кроме того, для стандартного траекторного метода, рассмотренного ранее, для одномерной периодической системы всегда реализуется  $W = 1$ , поэтому *в этом случае нет фермионной проблемы знака*. Этим и объясняется успешное использование траекторных алгоритмов МК для одномерных фермионных систем.

**11.1.5.2. Конфигурации с двумя разрывами.** Теперь рассмотрим систему петель с двумя разрывами траекторий, как если бы проводился расчет нелокального коррелятора типа мацубаровской функции Грина  $\langle a_i(\tau_2) a_j^+(\tau_1) \rangle$ . При  $\tau = \tau_2 - \tau_1$  (рис. 11.18) в системе фазовых конфигураций имеет место «обрывок» фазовой траектории — *worm* (червь), соответствующий функции Грина. Каждый такой разрыв (левый или правый хвост траектории) — действие либо оператора рождения, либо оператора уничтожения — вносит в фермионный знак множитель, определяемый формулой (11.55). Поэтому можно понимать его как перескок частицы с узла  $k$  на границу, и заменить червя дугой, как показано на рис. 11.18, и в фермионный знак будет входить число пересечений этой дуги со всеми траекториями. Такая дуга характеризуется числом полных оборотов по времени  $W$  и временами хвостов  $\tau_1$  и  $\tau_2$ .

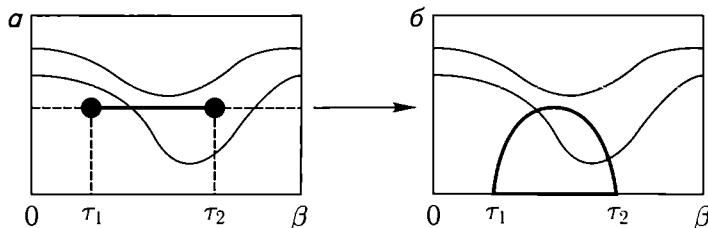


Рис. 11.18. Разрыв траектории — *worm*

Так как дуга не заходит за границы системы, ее можно превратить в петлю, замкнув ее концы отрезком по границе. И опять пересечения червяка и других траекторий, как разных замкнутых петель, можно не учитывать. Найдем число самопересечений дуги, соответствующей черви. Дуга, показанная на рис. 11.16, имеет число оборотов  $W_{\text{worm}} = 0$  и  $N_{\text{self}} = 0$ . Легко показать, что формула

$$N_{\text{self}} = W_{\text{worm}} \quad (11.59)$$

выполняется для всех  $W_{\text{worm}}$  — по индукции, применяя, как и раньше, перехлест дуги с замкнутой петлей с  $W = 1$  (рис. 11.19).

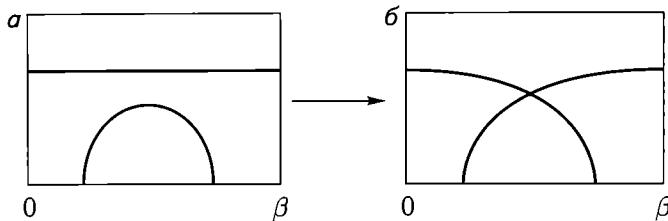


Рис. 11.19. Перехлест дуги с замкнутой петлей

**11.1.5.3. Конфигурации с несколькими разрывами.** И, наконец, рассмотрим систему с несколькими червями. Каждого представим дугой. Число самопересечений подчиняется формуле (11.59), и осталось рассмотреть пересечение червей между собой.

Пусть черви  $A$  и  $B$  имеют числа оборотов по времени, соответственно,  $W_A$  и  $W_B$ . С помощью  $W_A + W_B$  перехлестов уменьшим числа оборотов до нуля и сведем таким образом ситуацию к простейшей. На рис. 11.20 показаны два возможных варианта расположения хвостов червей.

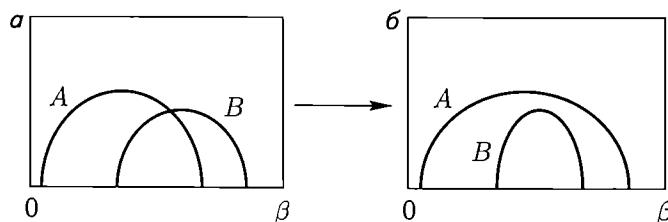


Рис. 11.20. Конфигурации с несколькими разрывами

В случае на рис. 11.20,  $a$  есть одно пересечение, в случае на рис. 11.20,  $b$  его нет. Поэтому введем параметр  $f_{AB}$ , отвечающий за взаимное расположение хвостов:

$$f_{AB} = \begin{cases} 1, & \text{в случае } (a); \\ 0, & \text{в случае } (b). \end{cases} \quad (11.60)$$

Тогда число пересечений дуг, отвечающих различным червям, будет равно  $f_{AB}$ . Добавка  $W_A + W_B$ , возникшая при уменьшении чисел полных оборотов,

полностью гасится числом самопересечений червяков, как следует из формулы (11.59).

Итоговая формула, определяющая фермионный знак конфигурации, такова:

$$\text{sgn} = (-1)^{\sum_k (W_k - 1) + \sum_{\text{worm}} W_{\text{worm}} + \sum_{A < B} f_{AB}}. \quad (11.61)$$

Таким образом, во время вычислений квантовым алгоритмом МК при элементарном изменении конфигурации надо следить лишь за изменением чисел  $W_A$ ,  $W_{\text{worm}}$  и  $f_{AB}$ . Соотношение (11.61), определяющее фермионный знак мгновенной МК-конфигурации, используется при реальных расчетах как в дискретных, так и в непрерывных методах МК, используемых для фермионных систем.

**11.1.6. Особенности спиновой статистики.** Параллельно с бозонными вариантами траекторного метода МК разрабатывались и методы расчета для систем со спиновой статистикой [100].

Для расчета спиновых систем также удобно перейти к неотрицательным числам заполнения — к *фиктивным бозонам* (или *псевдобозонам*) по правилу  $n_b = S + S^z$ . Тогда состоянию с минимальной проекцией спина ставится в соответствие нулевое заполнение и т. д. Для случая  $S = 1$  имеем:

$$\begin{aligned} |S^z = -1\rangle &\implies |n_b = 0\rangle, \\ |S^z = 0\rangle &\implies |n_b = 1\rangle, \\ |S^z = 1\rangle &\implies |n_b = 2\rangle. \end{aligned} \quad (11.62)$$

Отсюда следует, что число степеней свободы на узле для случая  $S = 1/2$  совпадает с числом степеней свободы в модели *hard-core*-бозонов, а для случая  $S = 1$  — с числом степеней свободы в редуцированной бозонной модели. Весь алгоритм расчета совпадает с алгоритмом шахматной доски для бозонов с тем отличием, что теперь максимальное заполнение  $n_{\max} = 2S$ , и матричные элементы переходов между состояниями также отличаются от бозонных.

Рассмотрим XXZ-модель Гейзенберга с анизотропным по одному из направлений взаимодействием (6.53):

$$\hat{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} [J_{\perp} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + J_{\parallel} S_i^z S_j^z] - H \sum_i S_i^z. \quad (11.63)$$

Внешнее поле  $H$  направлено по оси  $z$ . В этом случае удобно провести разбиение Троттера следующим образом:

$$\begin{aligned} Z = \sum_{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_{2M-1}} & \left\langle \varphi_0 \left| e^{-\frac{\Delta\tau}{2}(H_0+2V_1)} e^{-\Delta\tau K_1} \right| \varphi_1 \right\rangle \times \\ & \times \left\langle \varphi_1 \left| e^{-\frac{\Delta\tau}{2}(H_0+2V_2)} e^{-\Delta\tau K_2} \right| \varphi_2 \right\rangle \times \\ & \times \left\langle \varphi_{2M-1} \left| e^{-\frac{\Delta\tau}{2}(H_0+2V_2)} e^{-\Delta\tau K_2} \right| \varphi_0 \right\rangle \quad (11.64) \end{aligned}$$

с таким разбиением на недиагональную часть и диагональное взаимодействие:

$$\begin{aligned} K_1 &= -J_{\perp} \sum_{\langle ik \rangle_1} S_i^+ S_k^-, \quad K_2 = -J_{\perp} \sum_{\langle ik \rangle_2} S_i^+ S_k^-, \\ V_1 &= -J_{\parallel} \sum_{\langle ik \rangle_1} S_i^z S_k^z, \quad V_2 = -J_{\parallel} \sum_{\langle ik \rangle_2} S_i^z S_k^z, \\ H_0 &= -H \sum_i S_i^z. \end{aligned} \quad (11.65)$$

Расчет матричных элементов в этой двухузельной задаче также проводится перед началом процесса МК. В случае  $S = 1/2$  они могут быть вычислены аналитически:

$$\begin{aligned} \langle \downarrow \downarrow | e^{-\Delta\tau H} | \downarrow \downarrow \rangle &\equiv \langle 00 | e^{-\Delta\tau H} | 00 \rangle = e^{\Delta\tau(J_{\parallel}-2H)/4}, \\ \langle \uparrow \uparrow | e^{-\Delta\tau H} | \uparrow \uparrow \rangle &\equiv \langle 11 | e^{-\Delta\tau H} | 11 \rangle = e^{\Delta\tau(J_{\parallel}+2H)/4}, \\ \langle \downarrow \uparrow | e^{-\Delta\tau H} | \downarrow \uparrow \rangle &\equiv \langle 01 | e^{-\Delta\tau H} | 01 \rangle = e^{-\frac{\Delta\tau J_{\parallel}}{4}} \text{ch}(\Delta\tau J_{\perp}), \\ \langle \uparrow \downarrow | e^{-\Delta\tau H} | \uparrow \downarrow \rangle &\equiv \langle 10 | e^{-\Delta\tau H} | 10 \rangle = e^{-\frac{\Delta\tau J_{\parallel}}{4}} \text{ch}(\Delta\tau J_{\perp}), \\ \langle \downarrow \uparrow | e^{-\Delta\tau H} | \uparrow \downarrow \rangle &\equiv \langle 01 | e^{-\Delta\tau H} | 10 \rangle = e^{-\frac{\Delta\tau J_{\parallel}}{4}} \text{sh}(\Delta\tau J_{\perp}), \\ \langle \uparrow \downarrow | e^{-\Delta\tau H} | \downarrow \uparrow \rangle &\equiv \langle 10 | e^{-\Delta\tau H} | 01 \rangle = e^{-\frac{\Delta\tau J_{\parallel}}{4}} \text{sh}(\Delta\tau J_{\perp}). \end{aligned} \quad (11.66)$$

Проблема знака для спиновых моделей Гейзенберга связана со знаком обменного интеграла при поперечной ( $xy$ ) компоненте взаимодействия. Однако знак  $J_{\perp}$  не определяет фундаментальные свойства основного состояния — ферро- или антиферромагнитное упорядочение будет испытывать спиновая система. За это отвечает знак  $J_{\parallel}$  — обменное взаимодействие вдоль  $z$ -проекции спина. Но последнее является диагональным, и при расчете матричных элементов уходит в экспоненты (см. (11.66)), а знак  $J_{\perp}$  всегда можно выбрать положительным (для случая формулы (11.63)), это возможно благодаря свойствам модели. Последнее обстоятельство и позволяет использовать траекторные методы для двумерных и трехмерных спиновых моделей (см. обзор [100]).

Проблема знака может возникнуть даже в случае спиновой статистики с симметричными волновыми функциями, например в модели с взаимодействием через узел:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} [J_{\perp} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + J_{\parallel} S_i^z S_j^z] - J_2 \sum_i (S_i^x S_{i+2}^x + S_i^y S_{i+2}^y), \quad (11.67)$$

где  $J_2 \sim J_{\perp}$ . В этом случае избежать проблемы знака не удается, если  $J_2 > 0$ , а изменение знака этого взаимодействия за счет унитарных преобразований невозможно без изменения знака других частей гамильтониана.

Существуют различные методы решения проблемы знака в конкретных ситуациях. Например, в [121] предложен траекторный метод МК для модели с  $S = 1$ , описывающей димеризацию системы в случае конкуренции ферро- и антиферромагнитного упорядочения:

$$H = \sum_r (\mathbf{S}_r \mathbf{S}_{r+1}) \cos \omega + (\mathbf{S}_r \mathbf{S}_{r+1})^2 \sin \omega, \quad (11.68)$$

где  $-\frac{\pi}{2} \leq \omega \leq \frac{\pi}{6}$ . Видно, что обменное взаимодействие в (11.68) может иметь любой знак. В [121] рассчитывалась цепочка из 64 узлов. Для того, чтобы избежать проблемы знака, был осуществлен переход от  $z$ -проекций  $0, \pm 1$  к новому ортонормированному базису — трехфермионному представлению:

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle - |-1\rangle), \quad |y\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |-1\rangle), \quad |z\rangle = |0\rangle. \quad (11.69)$$

Спиновые операторы можно выразить через линейную комбинацию операторов рождения и уничтожения состояний  $|x\rangle, |y\rangle, |z\rangle$  в новом базисе:

$$\begin{aligned} S_r^x &= i\psi_{r,z}^+ \psi_{r,y} - i\psi_{r,y}^+ \psi_{r,z}, \\ S_r^y &= i\psi_{r,z}^+ \psi_{r,x} - i\psi_{r,x}^+ \psi_{r,z}, \\ S_r^z &= i\psi_{r,x}^+ \psi_{r,y} - i\psi_{r,y}^+ \psi_{r,x}, \end{aligned} \quad (11.70)$$

и тогда модель (11.68) представляется следующим образом:

$$\begin{aligned} H &= \cos \omega \left( \sum_{r; \alpha, \beta} \psi_{r,\alpha}^+ \psi_{r,\beta} \psi_{r+1,\beta}^+ \psi_{r+1,\alpha} - \psi_{r,\alpha}^+ \psi_{r,\beta} \psi_{r+1,\alpha}^+ \psi_{r+1,\beta} \right) + \\ &\quad + \sin \omega \left( \sum_{r; \alpha, \beta} 1 + \psi_{r,\alpha}^+ \psi_{r,\beta} \psi_{r+1,\alpha}^+ \psi_{r+1,\beta} \right) = \\ &= \sum_r \left( \sin \omega + \sum_{\alpha, \beta} \cos \omega \psi_{r,\alpha}^+ \psi_{r,\beta} \psi_{r+1,\beta}^+ \psi_{r+1,\alpha} + \right. \\ &\quad \left. + (\sin \omega - \cos \omega) \psi_{r,\alpha}^+ \psi_{r,\beta} \psi_{r+1,\alpha}^+ \psi_{r+1,\beta} \right). \quad (11.71) \end{aligned}$$

Таким образом, при условии  $(\sin \omega - \cos \omega) \leq 0$  проблема знака отсутствует — перед недиагональными слагаемыми стоят неположительные коэффициенты, и траекторный алгоритм можно эффективно использовать как алгоритм для бесспиновых фермионов. Реализация алгоритма шахматной доски практически совпадает со случаем ферми-статистики, рассмотренным ранее, отличия будут только в значениях матричных элементов.

Рассчитанные таким образом достаточно сложные корреляционные функции для  $S = 1/2$  и  $S = 1$  в [121] (рис. 11.21, 11.22) при довольно низкой для расчетов траекторным алгоритмом МК температуре  $\beta = 24$  имели малые погрешности, что позволило сделать вывод о наличии димеризации в системе.

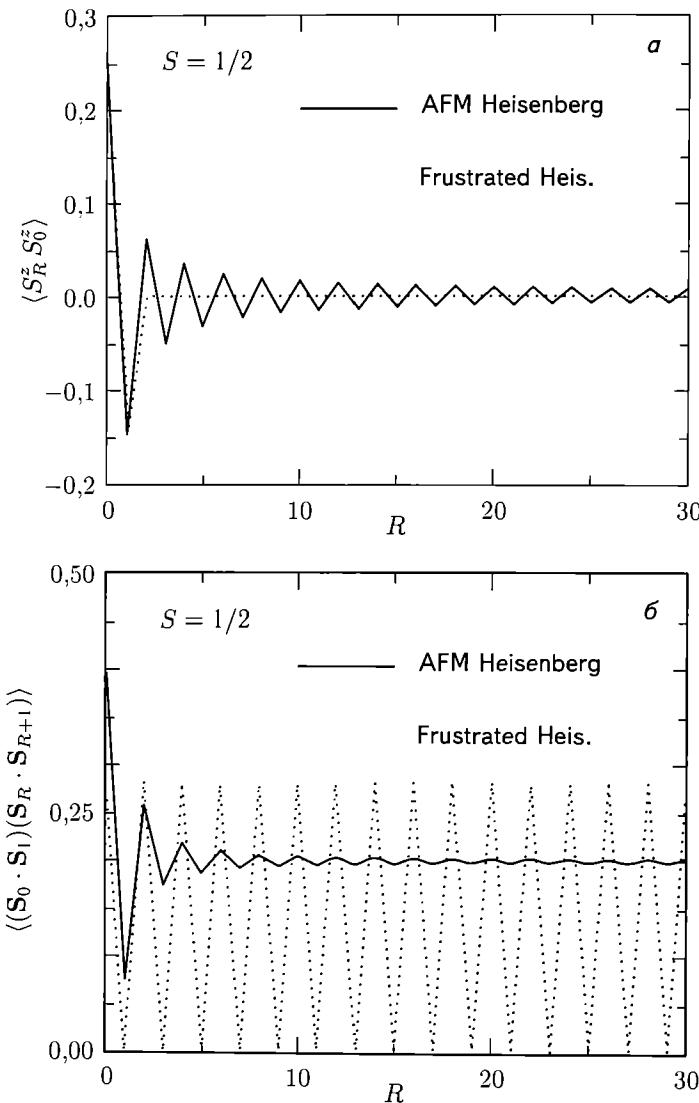


Рис. 11.21. Спиновые корреляционные функции из [121] для модели Гейзенберга с  $S = 1/2$ . Сплошной линией показана антиферромагнитная модель с  $H \sim \sum_r S_r S_{r+1}$ ; пунктирной — антиферромагнитная модель с дальнодействием  $(H \sim \sum_r (S_r S_{r+1} + 0,5 S_r S_{r+2}))$

### 11.1.7. Модификации траекторного алгоритма Монте-Карло для конкретных задач.

**11.1.7.1. Усеченные модели с ферми-статистикой.  $t$ - $J$ -модель.** Рассмотрим модель Хаббарда, в которой взаимодействие  $U$  велико ( $\frac{U}{t} \gg 1$ ), так что вероятность встретиться двум фермионам на одном узле с противоположными спинами мала. Это — так называемая  $t$ - $J$ -модель, и такой

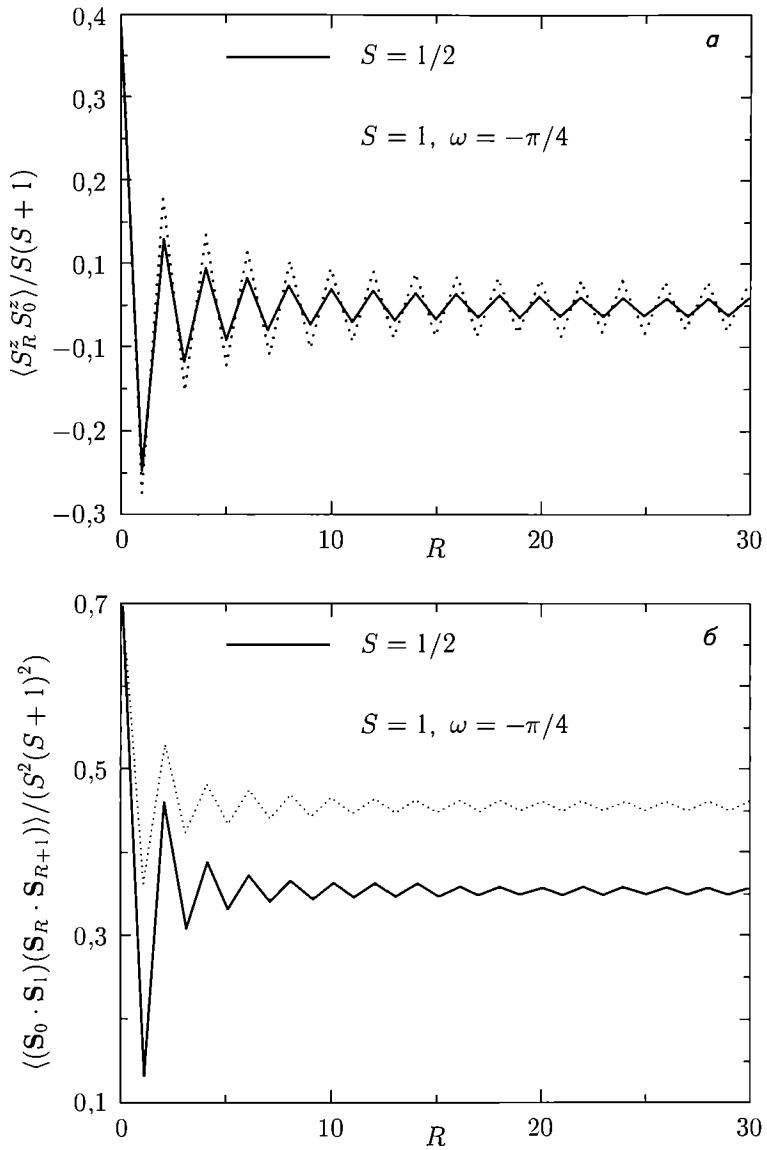


Рис. 11.22. Корреляционные функции из [121] для модели Гейзенберга с  $S = 1/2$  (сплошные линии) и  $S = 1$  (пунктирные линии)

пределенный случай был рассмотрен в Главе 6 (см. (6.119)):

$$H_{eff} = -t \sum_{i \neq j, \sigma} \{ (1 - n_{i,-\sigma}) a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + h.c. \} + J \sum_{ij} \left( \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right), \quad (11.72)$$

где  $J = 4t^2/U$ .

Фактически условие  $U/t \gg 1$  означает, что из всех возможных состояний системы эффективно исключаются «двойки» — состояния с заполнением  $|\uparrow\downarrow\rangle$  на узле. При расчете такой модели с помощью алгоритма МК можно применить стандартную схему шахматной доски, в которой введен запрет на появление «двоек».

Остановимся еще на траекторном алгоритме МК, который был предложен в работе [115] специально для  $t$ -J-модели (11.72).

Рассмотрим одномерную систему, описываемую моделью (11.72). В соответствии со схемой траекторного метода, разобьем оператор энергии на две части, описывающие четные и нечетные связи [115]:

$$\begin{aligned} H &= \sum_i H_{i,i+1} = H_{\text{odd}} + H_{\text{even}}, \\ H_{i,i+1} &= -t \sum_{\sigma} \left\{ (1 - n_{i+1,-\sigma}) a_{i+1,\sigma}^+ a_{i\sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) + h.c. \right\} + \\ &\quad + J \sum_{ij} \left( \mathbf{S}_{i+1} \mathbf{S}_i - \frac{1}{4} n_{i+1} n_i \right), \\ H_{\text{odd}} &= \sum_{i \text{ odd}} H_{i,i+1}, \quad H_{\text{even}} = \sum_{i \text{ even}} H_{i,i+1}. \end{aligned} \quad (11.73)$$

Для статистической суммы с учетом разложения Троттера получаем стандартное выражение в виде дискретного функционального интеграла:

$$\begin{aligned} Z = \text{Tr} (e^{-\beta H}) &= \text{Tr} \left[ \left( e^{-\Delta\tau(H_{\text{odd}}+H_{\text{even}})} \right)^M \right] = \\ &= \text{Tr} \left[ \left( e^{-\Delta\tau H_{\text{odd}}} e^{-\Delta\tau H_{\text{even}}} \right)^M \right] + O((\Delta\tau)^2) = \\ &= \sum_{i_1, i_2, \dots, i_{2M}} \langle i_1 | U_{\text{odd}} | i_{2M} \rangle \langle i_{2M} | U_{\text{even}} | i_{2M-1} \rangle \dots \\ &\quad \dots \langle i_3 | U_{\text{odd}} | i_2 \rangle \langle i_2 | U_{\text{even}} | i_1 \rangle + O((\Delta\tau)^2), \end{aligned} \quad (11.74)$$

где

$$U_{\text{odd}} = e^{-\Delta\tau H_{\text{odd}}}, \quad U_{\text{even}} = e^{-\Delta\tau H_{\text{even}}}; \quad \sum_{i_k} |i_k\rangle \langle i_k| = 1, \quad k = 1, 2, \dots, 2M.$$

В результате имеем картину фазового пространства в виде, показанном на рис. 11.23.

Матричные элементы в выражении (11.74) сводятся к матричным элементам для двухузельной задачи (заштрихованные квадраты на рис. 11.23), их можно рассчитать аналитически:

$$\begin{aligned} e^{-\Delta\tau H_{i,i+1}} |0, 0\rangle &= |0, 0\rangle, \\ e^{-\Delta\tau H_{i,i+1}} |\sigma, 0\rangle &= \text{ch}(\Delta\tau t) |\sigma, 0\rangle + \text{sh}(\Delta\tau t) |0, \sigma\rangle, \\ e^{-\Delta\tau H_{i,i+1}} |\sigma, \sigma\rangle &= |\sigma, \sigma\rangle, \\ e^{-\Delta\tau H_{i,i+1}} |\sigma, -\sigma\rangle &= e^{\Delta\tau J/2} \left[ \text{ch}\left(\frac{\Delta\tau J}{2}\right) |\sigma, -\sigma\rangle - \text{sh}\left(\frac{\Delta\tau J}{2}\right) |-\sigma, \sigma\rangle \right]. \end{aligned} \quad (11.75)$$

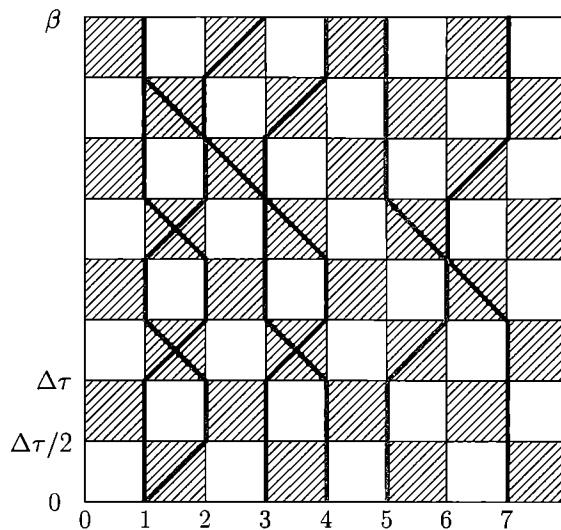


Рис. 11.23. Фазовое пространство для разложения (11.74). Серые и черные мировые линии соответствуют проекциям спина вниз и вверх соответственно

Таким образом, только 15 из возможных 81 матричных элементов не равны нулю, схематично они изображены на рис. 11.24.

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \diagdown \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \diagdown \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \diagdown \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \diagdown \end{array} = \operatorname{sh}(\Delta\tau t)$$

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \diagdown \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \diagdown \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \diagdown \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \diagdown \end{array} = \operatorname{ch}(\Delta\tau t)$$

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \diagdown \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \diagdown \end{array} = \exp(\Delta\tau J/2) \operatorname{ch}(\Delta\tau J/2)$$

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \diagdown \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \diagdown \end{array} = \exp(\Delta\tau J/2) \operatorname{sh}(\Delta\tau J/2)$$

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \diagdown \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \diagdown \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \diagdown \end{array} = 1$$

Рис. 11.24. Пятнадцать ненулевых элементов (11.75)

Следующий шаг — выбор элементарных изменений траекторий. На рис. 11.25 показаны возможные локальные изменения фазовых траекторий в данной схеме. Вариант изменений, показанный на рис. 11.25, б, необходим для обеспечения эргодичности алгоритма.

Расчет необходимых средних (энергии, диагональных и недиагональных корреляционных функций) проводится в соответствии со следующими выра-

жениями:

$$\langle E \rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_{2M}} P(i_1, i_2, \dots, i_{2M}) \left( \frac{\langle i_2 | U_{\text{odd}} H_{\text{odd}} | i_1 \rangle}{\langle i_2 | U_{\text{odd}} | i_1 \rangle} + \frac{\langle i_3 | U_{\text{even}} H_{\text{even}} | i_2 \rangle}{\langle i_3 | U_{\text{even}} | i_2 \rangle} \right) + O((\Delta\tau)^2), \quad (11.76)$$

$$P(i_1, i_2, \dots, i_{2M}) = \frac{\langle i_1 | U_{\text{odd}} | i_{2M} \rangle \dots \langle i_2 | U_{\text{even}} | i_1 \rangle}{\sum_{i_1, i_2, \dots, i_{2M}} |\langle i_1 | U_{\text{odd}} | i_{2M} \rangle \dots \langle i_2 | U_{\text{even}} | i_1 \rangle|}, \quad (11.77)$$

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_{2M}} P(i_1, i_2, \dots, i_{2M}) \frac{\langle i_2 | U_{\text{even}} S_i^z S_j^z + S_i^z S_j^z U_{\text{even}} | i_1 \rangle}{2 \langle i_2 | U_{\text{even}} | i_1 \rangle} + O((\Delta\tau)^2), \quad (11.78)$$

$$\langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle = \frac{\sum_{i', i_1, i_2, \dots, i_{2M}} P(i'_1, i_1, i_2, \dots, i_{2M}) \langle i'_1 | a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} | i_1 \rangle}{\sum_{i'_1, i_1, i_2, \dots, i_{2M}} P(i'_1, i_1, i_2, \dots, i_{2M}) \langle i'_1 | i_1 \rangle} + O(\Delta\tau), \quad (11.79)$$

$$P(i'_1, i_1, i_2, \dots, i_{2M}) = \frac{\langle i_1 | U_{\text{odd}} | i_{2M} \rangle \dots \langle i_2 | U_{\text{even}} | i'_1 \rangle}{\sum_{i'_1, i_1, i_2, \dots, i_{2M}} |\langle i_1 | U_{\text{odd}} | i_{2M} \rangle \dots \langle i_2 | U_{\text{even}} | i'_1 \rangle|}. \quad (11.80)$$

В выражении (11.79) для расчета недиагональной матрицы плотности введен дополнительный временной срез  $|i'_1\rangle$ , необходимый для учета разрывов траекторий (в соответствии со схемой, изложенной ранее для фермионов).

Особо следует обсудить проблему знака в данной схеме. Процедура МК требует положительности статистических весов  $P(i_1, i_2, \dots, i_{2M})$ , однако в общем случае это не так из-за антисимметрии фермионной волновой функции. Наличие проблемы знака здесь зависит от вида граничных условий в системе. При фиксированных (нулевых) граничных условиях можно показать, что, хотя матричные элементы (11.75) при взаимном переключении направлений двух спинов отрицательны, статистический вес  $P(i_1, i_2, \dots, i_{2M})$  всегда положителен. Также при расчете недиагонального коррелятора (11.79) статистический вес  $P(i'_1, i_1, i_2, \dots, i_{2M})$  может быть отрицателен, но комбинация величин  $P(i'_1, i_1, i_2, \dots, i_{2M}) \langle i'_1 | a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} | i_1 \rangle$  оказывается всегда положительной.

Если имеют место периодические граничные условия, то только конфигурации с ненулевым значением winding numbers имеют отрицательный вес. Однако для большинства задач главный вклад в статистику дают конфигурации с  $W = 0$ . Кроме того, при увеличении размера системы различия в результатах расчета физических величин исчезают (рис. 11.26).

Таким образом, проблема знака в  $t$ - $J$ -модели либо отсутствует, либо подавлена, что позволяет с высокой точностью рассчитать корреляционные функции. В [115] были рассчитаны структурные факторы, позволяющие явно наблюдать особенности спиновой и зарядовой плотности вблизи  $k = 2k_F$ . Результаты представлены на рис. 11.27.

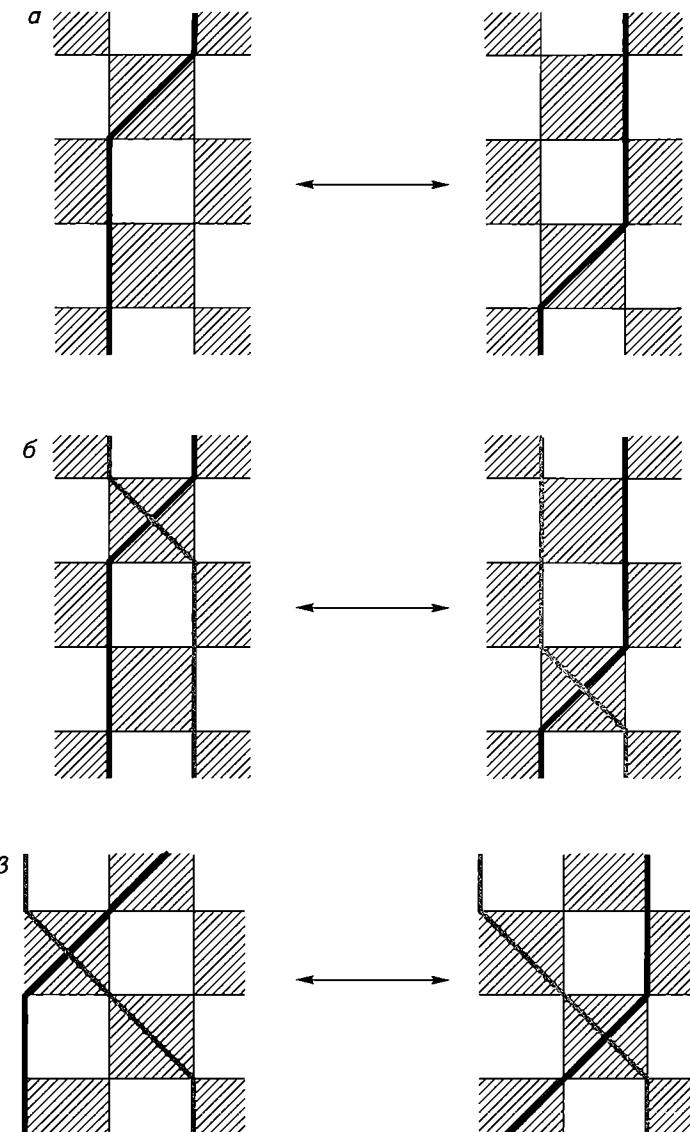


Рис. 11.25. Локальные изменения, используемые для обновления конфигураций. Линии разного цвета соответствуют разным проекциям спина

**11.1.7.2. Моделирование сверхпроводящих плоскостей в высокотемпературных сверхпроводниках.** Высокотемпературные сверхпроводящие соединения (ВТСП) — пример сложных сильнокоррелированных систем, описание которых при помощи аналитических методов, как правило, весьма затруднительно. Такие многокомпонентные структуры, как лантановые ВТСП —  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ , иттриевые —  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ , висмутовые —  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_2\text{O}_3$  и многие другие — обладают уникальными физическими свойствами как в нормальном (несверхпроводящем) состоянии, так и в сверхпроводящей

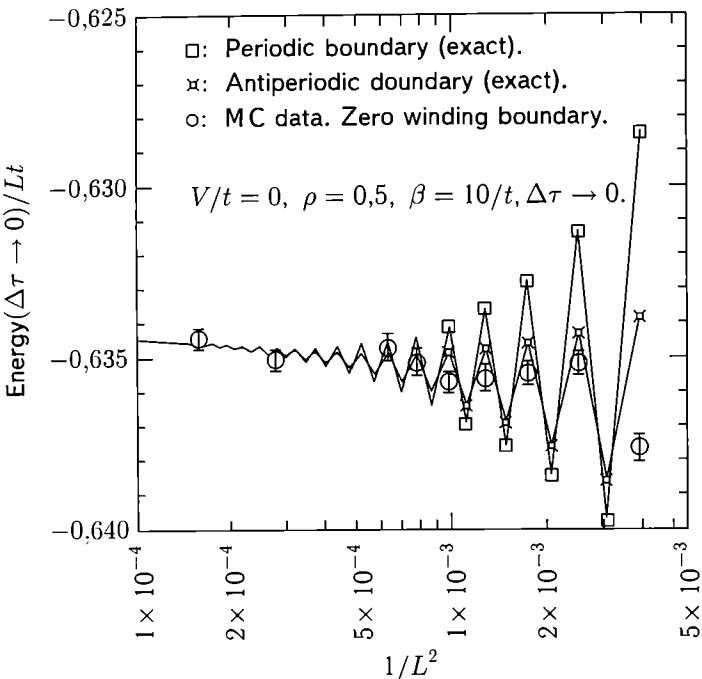


Рис. 11.26. Сравнение значений энергии системы из [115] для периодических (квадраты), непериодических (кресты) и нулевых (круги) граничных условий в зависимости от размера системы для  $t$ - $J$ -модели

фазе, испытывают помимо сверхпроводящего фазового превращения фазовые переходы «металл–диэлектрик», «парамагнетик–антиферромагнетик», структурные превращения и др.

Именно для этих систем были разработаны специфические траекторные квантовые алгоритмы МК, изложение которых и представляется в данном разделе. Кроме этого, для целостности изложения, в начале этого раздела приведено краткое знакомство с моделями ВТСП.

**11.1.7.2.1. Многозонная двумерная модель Эмери.** К настоящему моменту установлено, что за транспортные и сверхпроводящие свойства высокотемпературных металлооксидных сверхпроводников отвечают, главным образом, электроны на внешних оболочках атомов меди и кислорода [21, 54, 122–140]. При этом  $d$ -орбиталь иона меди  $\text{Cu}^{2+}$ , электронами которой в основном участвуют в переносе заряда, имеет  $d_{x^2-y^2}$ -симметрию. Она гибридизуется с двумя  $p$ -орбиталями ( $p_x$  и  $p_y$ ) иона  $\text{O}^{2-}$ .

Согласно экспериментальным данным, почти во всех ВТСП наблюдается дырочный характер проводимости. В отсутствие додирования (одна дырка на каждую элементарную ячейку в плоскости  $\text{CuO}_2$ ) ВТСП хорошо описываются моделью локализованных состояний со спином  $1/2$ , что является следствием антиферромагнитной природы этих соединений. Для описания движения дырок в плоскости  $\text{CuO}_2$  с учетом всех перечисленных выше особенностей электронной структуры ВТСП, а также с учетом различия атомных уровней на

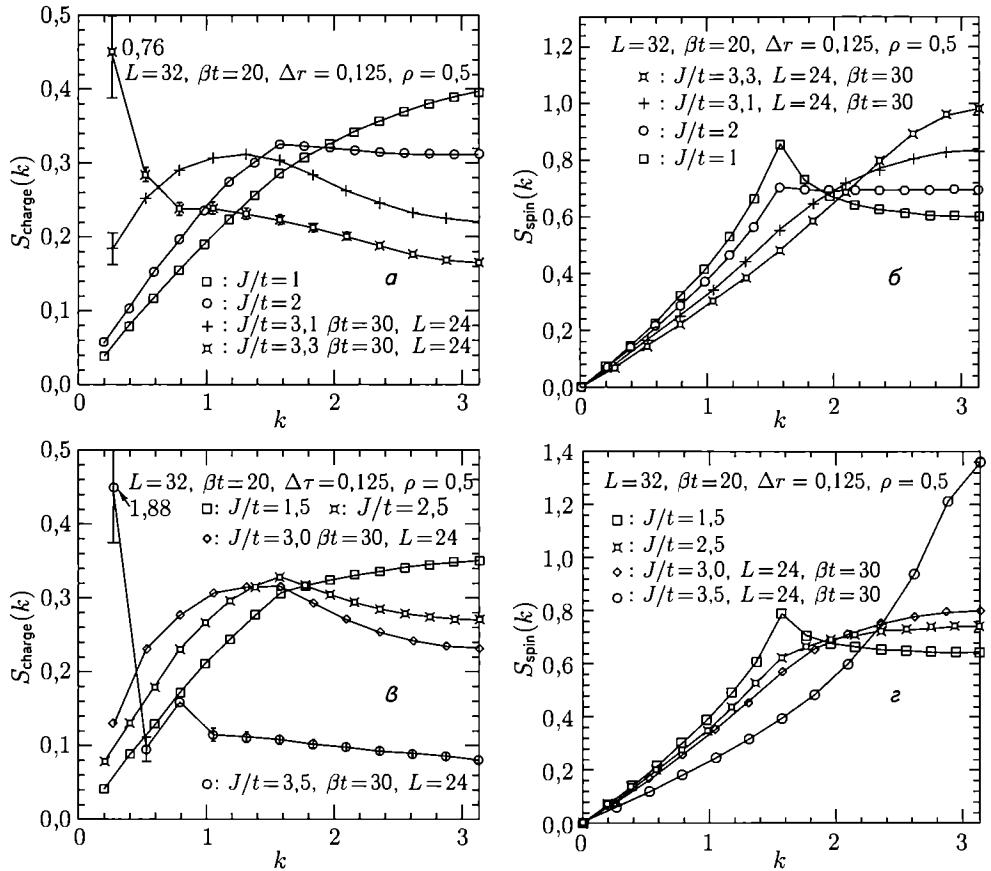


Рис. 11.27. Спиновая и зарядовая плотность для  $t$ - $J$ -модели из [115] для различных параметров модели

медных и кислородных узлах, кулоновского взаимодействия на узлах меди, узлах кислорода и между ними, была предложена модель Эмери [141]. Модель Эмери правильно описывает топологию плоскости  $\text{CuO}_2$ , т. е. учитывает, что ближайшими соседями каждого из атомов меди являются четыре атома кислорода и наоборот, а движение носителей с кислородных орбиталей на медные осуществляется на два ближайших медных узла.

Гамильтониан двумерной многозонной модели Эмери в дырочном представлении имеет следующий вид [141]:

$$H_E = -t \sum_{\langle ik \rangle, \sigma} (d_{i\sigma}^+ p_{k\sigma} + h.c.) + \epsilon \sum_{k,\sigma} n_{k\sigma} + U_d \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + U_p \sum_k n_{k\uparrow} n_{k\downarrow} + V \sum_{\langle ik \rangle, \sigma\sigma'} n_{i\sigma} n_{k\sigma'}, \quad (11.81)$$

где  $d_{i\sigma}^+$  и  $p_{k\sigma}^+$  — операторы рождения дырки в состояниях  $d_{x^2-y^2}$  и  $p_x, p_y$  соответственно;  $\langle ik \rangle$  означает суммирование по ближайшим соседям; индекс

$i$  относится к узлам меди, индекс  $k$  — к узлам кислорода;  $n_{i\sigma} = d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma}$ ,  $p_{k\sigma} = p_{k\sigma}^+$ ;  $t$  — матричный элемент перескоков «меди–кислород»;  $\varepsilon = \varepsilon_p - \varepsilon_d$  — разность энергий дырки на узлах кислорода и меди;  $U_d$ ,  $U_p$ ,  $V$  — энергии кулоновского отталкивания дырок на узлах меди, кислорода и между ними соответственно.

Вакуумом для гамильтониана (11.81) является электронная конфигурация  $\text{Cu } 3d^{10} \text{ O } 2p^6$  [141] (валентное состояние  $\text{Cu}^+ \text{O}^{2-}$ ). В недопированных соединениях  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  и  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  с  $\delta > 0,5$  на каждый атом меди в плоскости  $\text{CuO}_2$  приходится одна дырка (электронная конфигурация  $\text{Cu } 3d^9 \text{ O } 2p^6$ , валентное состояние  $\text{Cu}^{2+} \text{O}^{2-}$ , что обуславливает выбор  $\varepsilon > 0$  в (11.81)). Допиравание (например, частичная замена  $\text{La}^{3+}$  на  $\text{Sr}^{2+}$  в  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  или уменьшение дефицита кислорода  $\delta$  в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ) приводит к росту концентрации дырок в слоях  $\text{CuO}_2$ , которые занимают в соответствии с экспериментальными данными [142, 143] преимущественно кислородные орбитали (из-за большой величины  $U_d$ ). Другой тип допиравания реализуется в соединениях типа  $\text{Nd}_2\text{CuO}_4$  при частичном замещении  $\text{Nd}^{3+}$  на  $\text{Ce}^{4+}$  [144]: число дырок на медных орбиталях уменьшается, а кислородные орбитали остаются пустыми, что эквивалентно увеличению числа электронов в системе (электронное допиравание).

Учет антисимметрии волновых функций  $d_{x^2-y^2}$ - и  $p_{x,y}$ -орбиталей в гамильтониане (11.81) приводит к тому, что матричный элемент перескока «меди–кислород» меняет знак при движении носителя заряда в перпендикулярных направлениях по цепочкам  $-\text{Cu}—\text{O}—\text{Cu}—\text{O}—$  в плоскости  $\text{CuO}_2$ . Однако, используя известное унитарное преобразование (4.20), можно в соответствии с (11.81) привести параметр  $t$  к одному знаку.

Следует отметить, что в гамильтониане (11.81) не учтены перескоки между атомами кислорода в пределах одной ячейки: поскольку матричный элемент перескоков «кислород–кислород»  $t_{pp}$  существенно меньше, чем «меди–кислород» [54], то, по оценкам [54, 124, 140], учет  $t_{pp}$  приводит лишь к небольшим количественным изменениям результатов. Однако даже небольшая величина параметра  $t_{pp}$  может привести к особенностям в дисперсионных кривых, к возможности спаривания и, самое главное, к лучшему согласованию с экспериментом [140, 145–149]. Типичные значения  $t_{pp} = -0,1 \div -0,5t$  [21, 150], при этом для учета перескоков к гамильтониану (11.81) добавляется слагаемое

$$H_{pp} = t_{pp} \sum_{\langle ik \rangle, \sigma} (p_{i\sigma}^+ p_{k\sigma} + h.c.). \quad (11.82)$$

Значения параметров в гамильтониане (11.81) для ВТСП могут быть получены на основе вычислений зонной структуры из первых принципов [6, 144] и анализа фотоэмиссионных спектров [151] этих соединений. Согласно оценкам, характерные для ВТСП значения параметров равны:  $t = 1 \div 1,7$  эВ,  $U_d = 6 \div 10$  эВ,  $U_p = 0 \div 4$  эВ,  $\varepsilon = 1 \div 3$  эВ,  $V = 0 \div 4$  эВ. Такой разброс в значениях, с одной стороны, делает выбор параметров в (11.81) в значительной степени неопределенным, что осложняет задачу, а с другой — позволяет моделировать конкретные соединения путем соответствующего подбора параметров [21].

Даже в таком упрощенном виде (без учета перескоков на следующие за ближайшими узлы, прямых перескоков «кислород–кислород» и т. д.) гамильтониан (11.81) оказывается чрезвычайно сложным для теоретического анализа. Это связано, в первую очередь, с большой величиной  $U_d \gg t$ , что делает невозможным учет кулоновских корреляций по теории возмущений [152]. С другой стороны,  $U_d$  не настолько велико, чтобы использовать различные редуцированные гамильтонианы, полученные из (11.81) разложением по параметру  $t/U_d$ . Разложение по параметру  $t/\varepsilon$  [153, 154] также неоправданно, так как  $\varepsilon \sim t$ . Отсутствие точных решений модели Эмери и затруднения, возникающие при попытках ее упрощения, объясняют интерес к численному моделированию электронной структуры кластеров ВТСП, позволяющему получать в ряде случаев точные результаты.

Подчеркнем, что модель (11.81), (11.82) является обобщенной моделью Хаббарда, т. е. из нее в различных предельных случаях можно получить, например, однозонную модель Хаббарда (разложением по параметру  $t/\varepsilon$  с эффективным движением носителей по медной подрешетке) [153–155],  $t$ - $J$ -модель [156, 157],  $t$ - $t'$ -модель [158],  $t$ - $t'$ - $J$ -модель [159], а при половинном по меди заполнении и условии  $U_d \gg t$  — антиферромагнитный гамильтониан Гейзенберга [54].

Заметим также, что гамильтониан (11.81) коммутирует с операторами полного числа частиц и проекции полного спина на произвольно выбранную ось, поэтому модель (11.81) обычно решают для заданного числа частиц и проекции спина на ось  $z$ .

**11.1.7.2.2. Траекторные алгоритмы МК для плоскости CuO<sub>2</sub>.** Для исследования методами МК бесконечной плоскости CuO<sub>2</sub> выбирались конечные двумерные кластеры. Основное требование к кластеру — возможность реализации периодических граничных условий; симметрия кластера должна также отражать симметрию плоскости CuO<sub>2</sub>.

Каждый кластер удобно характеризовать базисными векторами  $r_1$  и  $r_2$  (рис. 11.28):

$$\begin{aligned} r_1 &= n_x a \mathbf{i} + n_y a \mathbf{j}, \\ r_2 &= -n_x a \mathbf{i} + n_y a \mathbf{j}, \end{aligned} \quad (11.83)$$

так что вся плоскость CuO<sub>2</sub> перекрывается кластерами без пропусков и наложений при трансляциях вида

$$\mathbf{r} = p \mathbf{r}_1 + q \mathbf{r}_2. \quad (11.84)$$

В (11.83) и (11.84)  $n_x$ ,  $n_y$ ,  $p$ ,  $q$  — целые числа;  $a$  — период решетки;  $\mathbf{i}$ ,  $\mathbf{j}$  — орты осей  $x$  и  $y$ .

Для численного расчета и исследования зависимости характеристик от размера системы выбирались все кластеры с  $N_a \leq 108$  и четным числом атомов меди  $N_{\text{Cu}}$ . Требование к четности числа  $N_{\text{Cu}}$  обусловлено тем, что для изучения переходов «металл–диэлектрик» и исследования спаривания носителей наиболее интересна ситуация вблизи половинного заполнения по меди ( $\langle N \rangle = N_{\text{Cu}}$ ), а при нечетных значениях  $N_{\text{Cu}}$  суммарная проекция спина  $\langle S^Z \rangle$  отлична от нуля, что ведет к усилению эффектов конечного размера. Если же  $N_{\text{Cu}}$  — четное число, то в недопированном состоянии  $\langle S^Z = 0 \rangle$ ,

как и в бесконечной плоскости  $\text{CuO}_2$ . Получившаяся последовательность из десяти кластеров с  $N_a = 12; 24; 30; 48; 54; 60; 78; 96; 102; 108$  дает возможность в полной мере изучить вопросы влияния размеров системы на электронные характеристики двумерной многозонной модели Эмери. Следует отметить выделенность кластеров с  $N_a = 12; 48; 108$ , связанную с тем, что орты элементарной ячейки этих кластеров образуют прямые углы с осями бесконечной решетки  $\text{CuO}_2$ . Орты остальных отмеченных кластеров образуют углы с осями, это так называемые *поворнутые* (*tilted*) кластеры. Из них наименьшим углом поворота  $\varphi$  обладает кластер с  $N_a = 78$  ( $\tan \varphi = 1/5$ ).

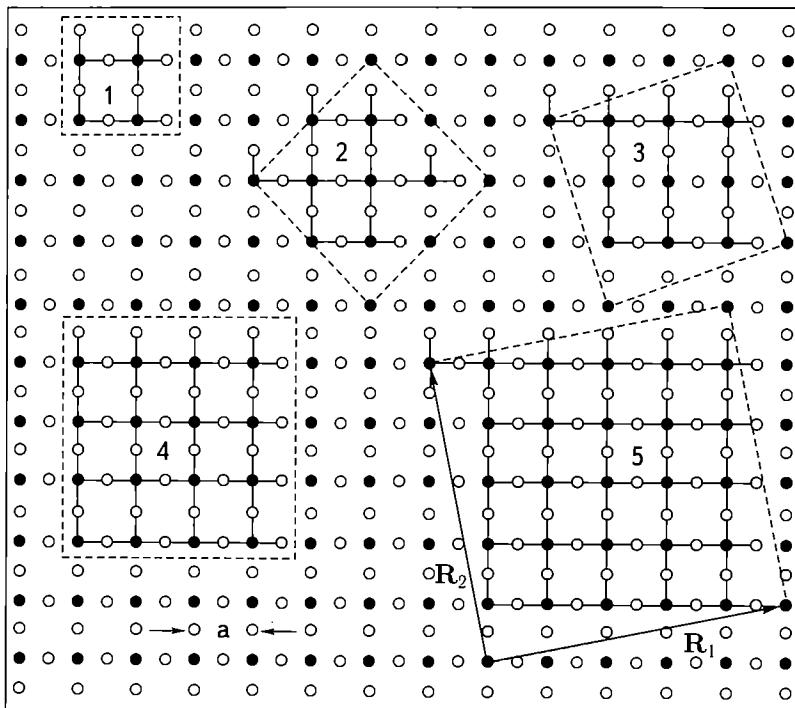


Рис. 11.28. Кластеры в плоскости  $\text{CuO}_2$

**Разбиение плоскости  $\text{CuO}_2$  на трехузельные ячейки.** Метод основан на разбиении трехмерной пространственно-временной сетки на трехузельные ячейки O–Cu–O [160], аналогичному представлению шахматной доски [97, 98, 116] для одномерной модели Хаббарда. При этом проблема знака, являющаяся препятствием для развития траекторных методов в двумерных фермионных системах, в данном алгоритме слабо влияет на сходимость из-за стремления среднего знака МК-конфигурации к постоянному значению. Для этого алгоритма не имеет существенного значения многозонность исследуемой модели, а расчет проводится, как и в любом траекторном методе, для канонического ансамбля с фиксированными значениями полного числа частиц  $\langle N \rangle$  и суммарной проекции спина  $\langle S^z \rangle$ .

Основная идея любого траекторного метода — преобразование  $d$ -мерной квантовой задачи в  $(d+1)$ -мерную классическую [98] с помощью разбиения гамильтониана на два слагаемых с различным типом связей:

$$H = H_1 + H_2; \quad H_1 = \sum_{\langle ij \rangle_1} H_{ij}, \quad H_2 = \sum_{\langle ij \rangle_2} H_{ij}. \quad (11.85)$$

Пример разбиения плоскости  $\text{CuO}_2$  на трехузельные ячейки показан на рис. 11.29. Связи  $\text{Cu}-\text{O}$ , относящиеся к типу 1, находятся справа и сверху от атомов меди, а связи, относящиеся к типу 2 — слева и снизу от них.

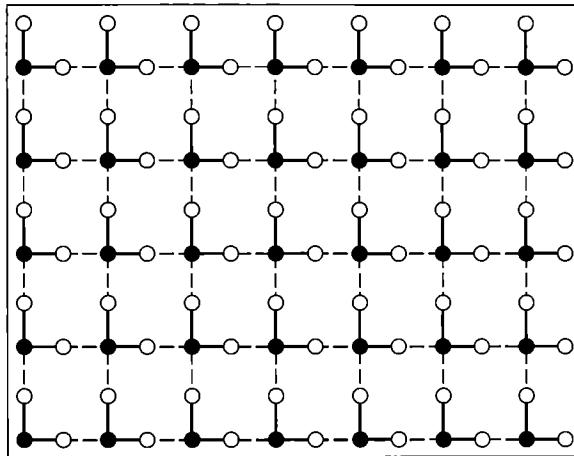


Рис. 11.29. Разбиение плоскости  $\text{CuO}_2$  на трехузельные ячейки

Разобьем интервал  $[0, \beta]$  на  $L$  частей величиной  $\Delta\tau = \beta/L$ . При  $L \rightarrow \infty$ ,  $\Delta\tau \rightarrow 0$  используем разложение Троттера [89], при этом поправки из-за некоммутативности операторов будут  $\sim (\Delta\tau)^2 t A$ , где  $A = \max(\varepsilon, U_d, U_p, V)$  (см. также [94]); в однозонной модели Хаббарда погрешность составляет  $\sim (\Delta\tau)^2 t U$  [98].

Для достижения погрешности результатов в несколько процентов обычно достаточно выполнения условия  $\Delta\tau \sqrt{tA} \leqslant 0,1$ .

Стандартным образом вставляя полную систему функций на каждом временном срезе, для статистической суммы имеем:

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \sum_{i_1, \dots, i_{2L}} \langle i_1 | e^{-\Delta\tau H_1} | i_2 \rangle \langle i_2 | e^{-\Delta\tau H_2} | i_3 \rangle \times \dots \times \langle i_{2L-1} | e^{-\Delta\tau H_1} | i_{2L} \rangle \langle i_{2L} | e^{-\Delta\tau H_1} | i_1 \rangle, \quad (11.86)$$

где

$$|i_m\rangle = \left| \begin{array}{cccc} n_{1m\uparrow} & n_{2m\uparrow} & \dots & n_{N_am\uparrow} \\ n_{1m\downarrow} & n_{2m\downarrow} & \dots & n_{N_am\downarrow} \end{array} \right\rangle; \quad (11.87)$$

$n_{ims}$  — числа заполнения узла  $i$  дырками со спином  $s$  в  $m$ -м срезе мнимого времени.

Выражение (11.86) удобно представить графически. Рассмотрим систему одинаковых двумерных кластеров CuO с количеством атомов  $N_a$ , расположенных один над другим по временной оси, причем число этих кластеров равно  $2L$  (рис. 11.30). Суммирование в (11.86) происходит по всем возможным замкнутым непересекающимся траекториям, причем переключения траекторий в полученной классической решетке возможны только по заштрихованным граням призм, опирающихся на ячейки O–Cu–O (см. рис. 11.30). Каждому узлу решетки соответствуют два числа заполнения  $n_{m\uparrow}$  и  $n_{m\downarrow}$ , равных 0 или 1, поэтому для каждой проекции спина существуют свои траектории, при этом траектории, относящиеся к разным проекциям, связаны друг с другом через матричные элементы оператора эволюции. Заметим, что каждое вертикальное сечение полученной решетки по линиям Cu–O и O–O является шахматной доской для соответствующей системы одномерных фермионов [98].

Эволюция мировых линий от одного временного среза к другому определяется матричными элементами оператора эволюции

$$U_{n,n+1} = \langle i_n | e^{-\Delta\tau H_{1,2}} | i_{n+1} \rangle. \quad (11.88)$$

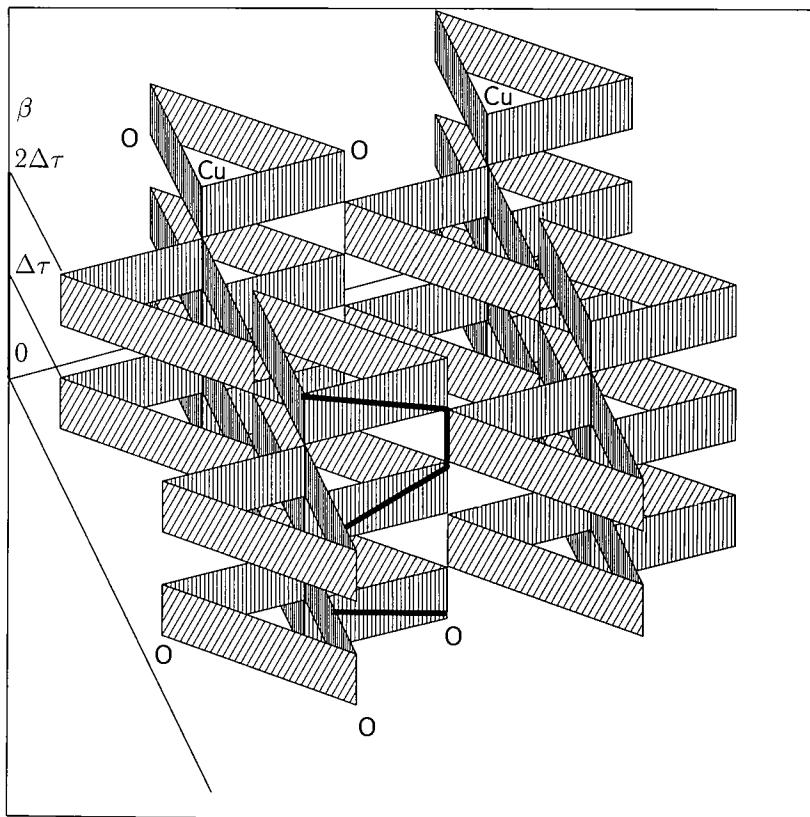


Рис. 11.30. Пространственно-временная сетка для траекторного алгоритма МК. Разбиение плоскости CuO<sub>2</sub> на трехузельные ячейки

Полное число состояний ячейки O–Cu–O равно 64, поэтому каждый оператор эволюции (11.88) представляет собой матрицу  $64 \times 64$ . Выражение (11.88) не допускает аналитического вычисления матричных элементов (в отличие от моделей бессpinовых фермионов [98] или редуцированной модели Хаббарда [114] в одномерной ситуации), численный расчет проводится по формуле:

$$U_{n,n+1} = \sum_{L=0}^{\infty} \frac{(-\Delta\tau)^L \langle i_n | (H_{1,2})^L | i_{n+1} \rangle}{L!} \quad (11.89)$$

с обрезанием суммы в (11.89) при достижении необходимой точности. Необходимо отметить, что выражение (11.89) дает ненулевую вероятность переключения траектории на диагонали O–O уже во втором порядке по  $\Delta\tau$ , т. е. появляется диагональный перескок (хотя в исходном гамильтониане (11.81) он отсутствует). Поэтому необходимо учесть движение дырок по граням O–O, так чтобы МК-переключения происходили по всем трем вертикальным граням призм (заштрихованы на рис. 11.30), опирающихся на ячейки O–Cu–O.

Генерация различных конфигураций траекторий осуществляется посредством алгоритма Метрополиса следующим образом: сканируется вся решетка размером  $2 \times (2L \times \sqrt{N_a} \times \sqrt{N_a})$  (множитель 2 возникает из-за учета проекции спина), причем на каждом узле делается попытка переключения траектории без ее разрыва и пересечения с другой траекторией в пределах заштрихованных граней призм. Вероятность элементарного переключения траектории определяется отношением произведения матричных элементов (11.88) до и после переключения, при этом затрагиваются (и требуют пересчета) состояния восьми призм (по четыре для каждой проекции спина, см. рис. 11.30), окружающих призму, в которой произошло локальное изменение траектории. Кроме того, при расчете физических величин может потребоваться информация о знаке матричного элемента (необязательно положительного из-за антикоммутативности фермиевских операторов), поэтому пересчету могут подвергнуться и состояния тех призм, узлы которых связаны изначальной нумерацией с узлами, затронутыми переходом.

Обозначим статистический вес  $k$ -й конфигурации:

$$W_k = U_{1,2}(k) U_{2,3}(k) \dots U_{2L,1}(k). \quad (11.90)$$

Пусть  $Q$  — оператор, диагональный в представлении чисел заполнения (например,  $N_{i\sigma} = d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma}$  — оператор числа частиц с проекцией спина  $\sigma$  на узле  $i$ ), тогда термодинамическое среднее от  $Q$  по  $M$  конфигурациям будет иметь вид

$$\langle Q \rangle = \sum_{k=1}^M Q_k P_k, \quad P_k = \frac{W_k}{\sum_{k=1}^M W_k}, \quad (11.91)$$

где  $Q_k$  — значение оператора для  $k$ -ой конфигурации,  $P_k$  — вероятность реализации этой конфигурации.

Для двумерных фермионных моделей статистический вес  $W_k$  не обязательно является положительным, и при расчете матричных элементов нужно следить за знаком волновых функций. Это приводит к необходимости при

каждом переключении траектории учитывать при расчете не только узлы решетки, являющиеся ближайшими к области переключения (и заполнения которых влияют на абсолютные значения матричных элементов), но и некоторые удаленные узлы, связанные с затронутыми в переключении узлами заданной исходной нумерацией. Это, во-первых, несколько увеличивает время расчета, и, во-вторых, приводит к большим статистическим ошибкам в (11.91) при понижении температуры. Для ускорения сходимости термодинамических средних при низких температурах можно использовать несколько модифицированное выражение для среднего от оператора, следуя методике работы [118]:

$$P_k = \frac{|W_k|}{\sum_{k=1}^M |W_k|}, \quad (11.92)$$

т. е. не учитывать знак статистического веса конфигурации. Это справедливо, если средний знак

$$\langle \text{sgn} \rangle = \frac{\sum_{k=1}^M (|W_k^+| - |W_k^-|)}{\sum_{k=1}^M (|W_k^+| + |W_k^-|)}, \quad (11.93)$$

где  $W_k^+$  ( $W_k^-$ ) — значения статистических весов конфигураций с положительным (отрицательным) весом, стремится к постоянному значению при  $\beta \rightarrow \infty$  и  $M \rightarrow \infty$  [118]. Дальнейшие расчеты подтверждают это предположение.

Если оператор  $Q$  недиагонален в представлении чисел заполнения (например, энергия  $E = -\partial \ln Z / \partial \beta$ ), то выражение (11.91) несколько усложняется, и необходимо рассчитывать матричные элементы вида

$$\frac{\langle i_n | H e^{-\Delta \tau H} | i_{n+1} \rangle}{U_{n,n+1}}. \quad (11.94)$$

Все вышесказанное относится к операторам, локально сохраняющим число частиц. Если же проводится расчет, например, функции распределения по импульсам

$$\langle n_\sigma(k) \rangle = \frac{1}{N_{\text{Cu}}} \sum_{lm} \langle a_{l\sigma}^+ a_{m\sigma} \rangle e^{ik(r_l - r_m)}, \quad (11.95)$$

то такой оператор разрывает фермионные мировые линии, т. е. не сохраняет число частиц. Здесь  $a_{i\sigma}^+ = d_{i\sigma}^+$ , если  $i$  — узел меди, и  $a_{i\sigma}^+ = p_{i\sigma}^+$ , если  $i$  — узел кислорода. Например, при расчете одновременной функции Грина  $G_\sigma(i-j) = \langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle$  с узлами  $i$  и  $j$ , не относящимися к одной ячейке O–Cu–O, приходится вводить дополнительные временные разрезы, что существенно ухудшает сходимость. В данном разделе при расчете  $\langle n_\sigma(k) \rangle$  по формуле (11.95) рассмотрено только локальное приближение, т. е. узлы  $i$  и  $j$  принадлежат одной ячейке O–Cu–O. В этом случае выражение (11.95) справедливо для больших импульсов ( $\sim \pi/a$ ), что, тем не менее, может быть достаточным для исследования области импульсов вблизи фермиевского скачка.

Для проверки алгоритма было проведено сравнение результатов расчета как с данными, полученными при точной диагонализации 12-узельного класте-

ра  $\text{Cu}_4\text{O}_8$ , так и с рассчитанными детерминантным и вариационным методами МК [94, 128, 161]. Результаты расчета энергии, чисел заполнения и некоторых корреляционных функций системы представлены в табл. 11.2.

Заметим, что кластер  $\text{Cu}_4\text{O}_8$  чрезвычайно мал для МК-алгоритма, хорошо работающего при наличии у системы достаточно большого числа степеней свободы. Тем не менее, как видно из табл. 11.2, результаты находятся в хорошем согласии с точным решением и асимптотически стремятся к нему при  $T \rightarrow 0$ , при этом чем больше число возможных состояний у системы, тем лучше сходимость (число состояний в кластере  $\text{Cu}_4\text{O}_8$  равно 144 при  $\langle N \rangle = 2$ ,  $\langle S^Z \rangle = 0$  и 48400 при  $\langle N \rangle = 2$ ,  $\langle S^Z \rangle = 0$ ). При сравнении с МК-расчетами, выполненными с помощью стандартных алгоритмов [128, 162], следует учесть, что в детерминантном методе МК используется большой канонический ансамбль, т. е. концентрация частиц не является фиксированной, а задается путем подбора соответствующего значения химического потенциала. Тем не менее, результаты практически совпадают в пределах ошибки. Следует отметить также совпадение результатов (в пределах указанных ошибок) с данными [94] и [163]. На рис. 11.31, *a* показана зависимость средней энергии системы, приходящейся на один узел решетки, от размера кластера при половинном заполнении ( $\langle N \rangle = N_{\text{Cu}}$ ). Видно, что начиная с размера  $N_a = 24$ , энергия практически не зависит от размера кластера, т. е. выходит на константу, равную значению средней энергии в бесконечной плоскости  $\text{CuO}_2$ . На рис. 11.31, *b* показана зависимость средней энергии системы, приходящейся на один узел решетки, от концентрации дырок. Она имеет универсальный характер.

Оптическая щель  $\Delta_{\text{opt}}$  может быть рассчитана по стандартной формуле [164]:

$$\Delta_{\text{opt}} = E(N_{\text{Cu}} + 1) + E(N_{\text{Cu}} - 1) - 2E(N_{\text{Cu}}) \quad (11.96)$$

для половинного по меди заполнения. Здесь  $E(N)$  — энергия системы с  $\langle N \rangle$  дырками. Зависимость  $\Delta_{\text{opt}}$  от размера кластера приведена на рис. 11.32. Видно, что значения оптической щели выходят на некоторые асимптотические значения.

Функция распределения носителей по импульсам  $n(k)$  (11.95) была рассчитана в локальном приближении, справедливом для больших значений импульса. Результаты приведены на рис. 11.33 для допированного состояния. Рисунок довольно наглядно демонстрирует сдвиг  $n(k)$  как в сторону больших энергий при дырочном допировании, так и в сторону меньших энергий при электронном допировании.

**Разбиение плоскости  $\text{CuO}_2$  на пятиузельные ячейки.** Рассмотрим еще один возможный вариант разбиения пространственно-временной сетки для моделирования модели Эмери (11.81). Разбиение, показанное на рис. 11.34, *a*, разрезает плоскость  $\text{CuO}_2$  на пятиузельные ячейки  $\text{CO}_4$ , при этом связи между ячейками реализуются через кислородные узлы. Такое разбиение, в отличие от разбиения на трехузельные ячейки, является пространственно изотропным, что является определенным преимуществом при изучении симметрийных свойств системы.

Аналогично предыдущему случаю, схема допускает наглядное представление в виде  $(2 + 1)$ -мерной шахматной доски (рис. 11.35). Полное число

Таблица 11.2. Результаты расчетов модели Эмери для 12-узельного кластера

Траекторный алгоритм МК	Метод точной диагонализации
$N_a = 12; \varepsilon = 1; U_d = 6; U_p = V = 0$	
$\langle N \rangle = 2, \langle S^Z \rangle = 0$	
$E = -3,56 \pm 0,03; T = 0,2500$	$E = -4,545512$
$E = -4,08 \pm 0,04; T = 0,0625$	
$\langle N \rangle = 3, \langle S^Z \rangle = 1/2$	
$E = -5,58 \pm 0,02; T = 0,1250$	$E = -5,863663$
$E = -5,75 \pm 0,03; T = 0,0625$	
$\langle N \rangle = 4, \langle S^Z \rangle = 0$	
$E = -6,71 \pm 0,04; T = 0,2500$	
$E = -7,12 \pm 0,06; T = 0,1250$	$E = -7,198059$
$E = -7,15 \pm 0,06; T = 0,0625$	
$\langle S_{\text{Cu}}S_{\text{Cu}} \rangle = 0,578 \pm 0,007; T = 0,2500$	$\langle S_{\text{Cu}}S_{\text{Cu}} \rangle = 0,546$
$\langle S_{\text{Cu}}S_{\text{Cu}} \rangle = 0,545 \pm 0,005; T = 0,1250$	
$\langle N_{\text{Cu}} \rangle = 0,600 \pm 0,002; T = 0,2500$	$\langle N_{\text{Cu}} \rangle = 0,569$
$\langle N_{\text{Cu}} \rangle = 0,574 \pm 0,002; T = 0,1250$	
$\langle N_{\text{O}} \rangle = 0,200 \pm 0,001; T = 0,2500$	$\langle N_{\text{O}} \rangle = 0,216$
$\langle N_{\text{O}} \rangle = 0,213 \pm 0,001; T = 0,1250$	
$\langle N \rangle = 5, \langle S^Z \rangle = 1/2$	
$E = -7,04 \pm 0,05; T = 0,2500$	$E = -7,795229$
$E = -7,70 \pm 0,09; T = 0,1250$	
$\langle S_{\text{Cu}}S_{\text{Cu}} \rangle = 0,602 \pm 0,002; T = 0,2500$	$\langle S_{\text{Cu}}S_{\text{Cu}} \rangle = 0,560$
$\langle S_{\text{Cu}}S_{\text{Cu}} \rangle = 0,577 \pm 0,002; T = 0,1250$	
$\langle N_{\text{Cu}} \rangle = 0,664 \pm 0,002; T = 0,2500$	$\langle N_{\text{Cu}} \rangle = 0,621$
$\langle N_{\text{Cu}} \rangle = 0,640 \pm 0,001; T = 0,1250$	
$\langle N_{\text{O}} \rangle = 0,293 \pm 0,001; T = 0,2500$	$\langle N_{\text{O}} \rangle = 0,315$
$\langle N_{\text{O}} \rangle = 0,305 \pm 0,001; T = 0,1250$	
$\langle N \rangle = 6, \langle S^Z \rangle = 0$	
$E = -7,59 \pm 0,08; T = 0,2500$	$E = -8,429312$
$E = -8,40 \pm 0,08; T = 0,1250$	

Продолжение табл. 11.2

Траекторный алгоритм МК	Стандартные алгоритмы МК из [128, 161]
$N_a = 48; U_d = 6; U_p = V = 0; \langle N \rangle = 16$	
$\langle S_{Cu}S_{Cu} \rangle = 0,536 \pm 0,008; T = 0,1250$	$\langle S_{Cu}S_{Cu} \rangle = 0,55 \pm 0,02; \varepsilon = 1$ [128]
$\langle N_{Cu} \rangle = 0,561 \pm 0,003; T = 0,1250$	$\langle N_{Cu} \rangle = 0,57 \pm 0,02; \varepsilon = 1$ [128]
$\langle N_{Cu} \rangle = 0,700 \pm 0,003; T = 0,15625$	$\langle N_{Cu} \rangle = 0,691 \pm 0,03; \varepsilon = 2$ [161]
$E = -20,58 \pm 0,22; T = 0,15625$	$E = -20,51 \pm 0,32; \varepsilon = 2$ [161]

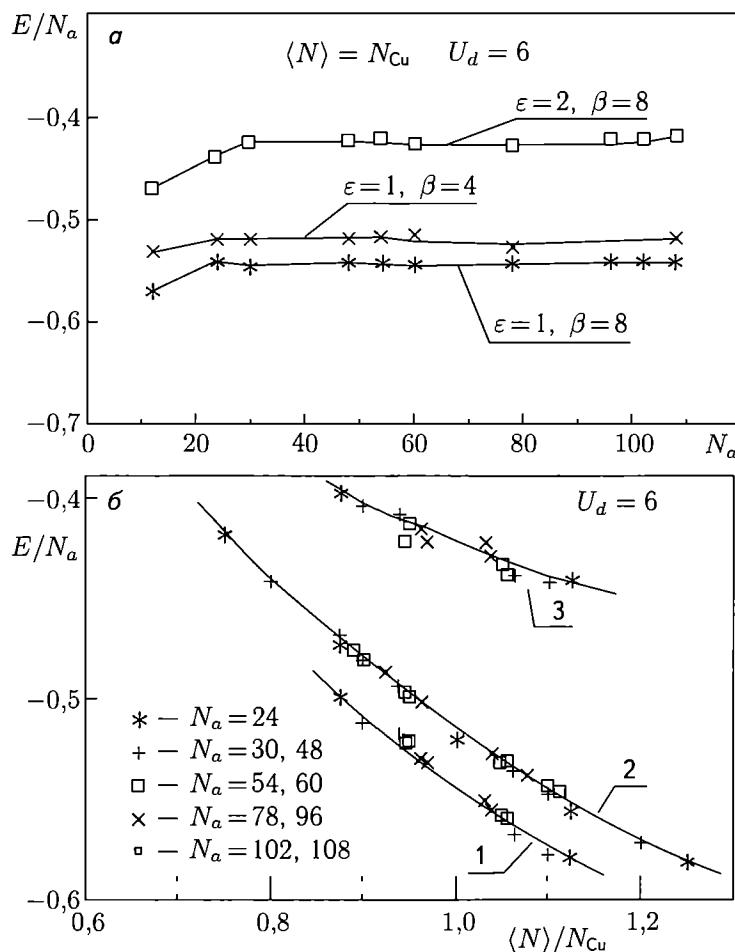


Рис. 11.31. Зависимости средней энергии системы от размера кластера (a) и концентрации дырок для различных кластеров CuO (b)

состояний каждой ячейки равно теперь 1024, и операторы эволюции (11.89) являются матрицами  $1024 \times 1024$ .

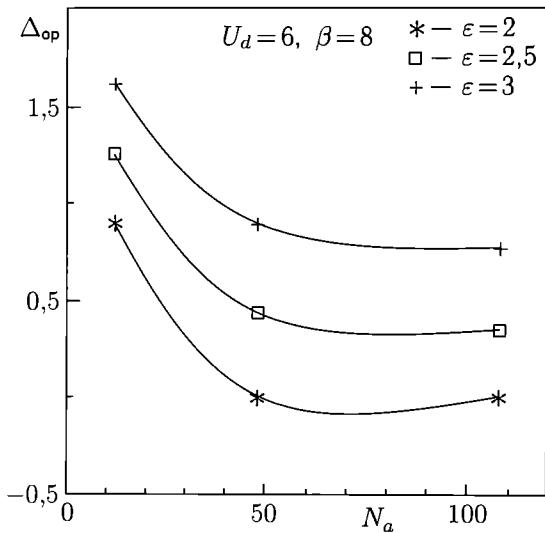
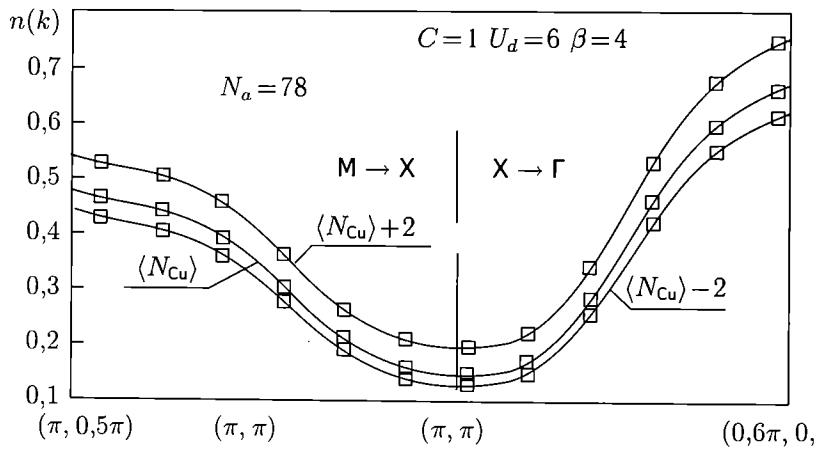


Рис. 11.32. Оптическая щель в зависимости от размера системы

Рис. 11.33. Функция распределения носителей по импульсам для кластера с  $N_a = 78$ 

Подробное описание данного варианта алгоритма, а также результатов, полученных с его помощью, можно найти в [165], здесь же кратко остановимся на некоторых особенностях реализации метода. Во-первых, существуют ненулевые вероятности переключения траекторий вдоль диагонали О–О, виртуального перескока О–О через медный узел, а также комбинированных перескоков вида  $c_{5\downarrow}^+ c_{1\uparrow} c_{5\downarrow}^+ c_{2\downarrow}$ ,  $c_{5\downarrow}^+ c_{1\uparrow} c_{4\uparrow}^+ c_{2\downarrow}$  и т. д. (цифрами здесь обозначены номера атомов в пятиузельной ячейке) уже во втором порядке по  $\Delta\tau$ . Все эти движения дырок необходимо включить в схему МК. Во-вторых, необходимо знать не только абсолютные значения матричных элементов операторов эволюции  $U_{n,n+1}$ , но и их знак в МК-конфигурации. Непосредственное перемножение матриц в (11.89), разложенных по пятиузельному базису, не содержит этой информации, так как нумерация узлов в изолированной ячейке

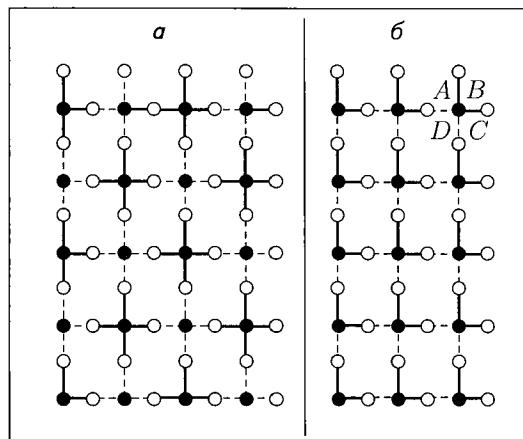


Рис. 11.34. Разбиение плоскости CuO<sub>2</sub> на пятиузельные (a) и трехузельные (b) ячейки

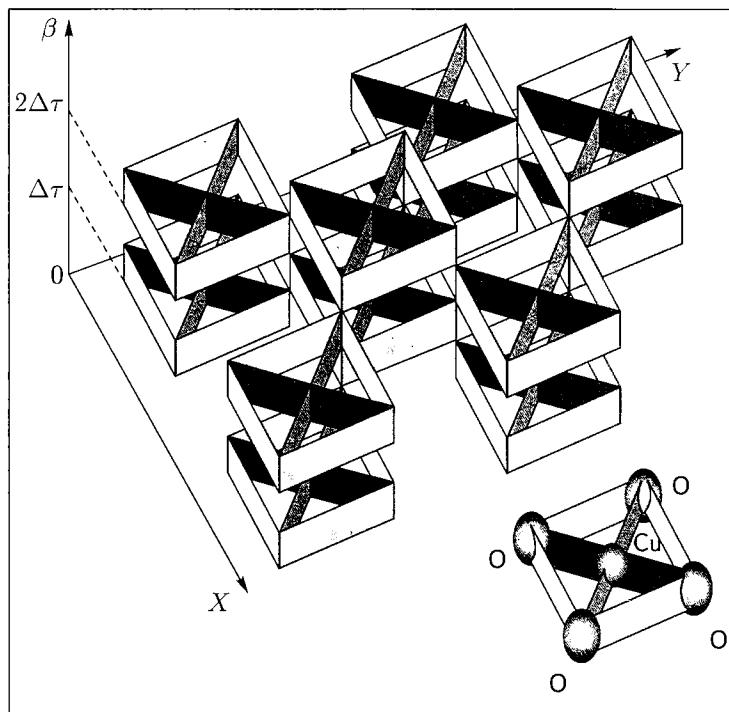


Рис. 11.35. Пространственно-временная сетка для траекторного алгоритма МК. Разбиение плоскости CuO<sub>2</sub> на пятиузельные ячейки

не совпадает с нумерацией в ячейках CuO<sub>4</sub> в исследуемой системе. Решить эту проблему можно, рассчитав точно (11.89), т. е. записав оператор эволюции в аналитической операторной форме, что само по себе является нетривиальной задачей (число неприводимых членов для модели Эмери быстро растет с ростом числа перемножений в (11.89) и достигает максимального числа 63 504).

С помощью данного алгоритма успешно рассчитывались нелокальные корреляционные функции в различных каналах спаривания [117, 165, 166].

## 11.2. Квантовый детерминантный метод МК

С помощью детерминантных методов МК успешно исследуют как одномерные, так и двух- и трехмерные фермионные системы [66, 167, 168]. В основе этих методов лежит преобразование статистики фермионных степеней свободы к статистике типа изинговских спинов, что упрощает МК-процедуру и позволяет обходить вопросы мерности системы [94]. Однако за такой переход приходится платить необходимостью проведения расчетов в рамках большого канонического ансамбля и существенным снижением скорости сходимости по сравнению с траекторными методами. В процессе МК-процедуры можно непосредственно рассчитывать функцию Грина [66, 93], что упрощает дальнейшие расчеты корреляционных функций [128] и позволяет найти зонную структуру [56–58] и распределение по импульсам элементарных возбуждений [59, 60]. Одним из недостатков детерминантных методов МК по сравнению с траекторными алгоритмами является возрастание числа спиновых переменных (переменных Хаббарда–Стратоновича), по которым проводится МК-процедура (т. е. возрастание размерности соответствующей классической задачи), с увеличением числа зон исследуемой модели, так как каждое парное взаимодействие при дискретном преобразовании Хаббарда–Стратоновича приводит к появлению новой спиновой переменной [94, 95].

Детерминантные алгоритмы используются также в различных модификациях. Например, в работе [66] предложена комбинация метода МК и преортогонализации Грама–Шмидта при низких температурах, что позволяет исследовать низкоэнергетические состояния. В [65] рассматривается комбинация МК-процесса и молекулярной динамики. В [169] предложено преобразование схемы МК-процедуры для анализа основного состояния фермионной системы с помощью проекционных операторов специального вида. Это позволило исследовать функцию распределения  $n(k)$  [60–62] и показать отсутствие фермиевского скачка для одномерной однозонной модели Хаббарда.

**11.2.1. Основные принципы детерминантного алгоритма.** Рассмотрим фермионную систему, описываемую гамильтонианом Хаббарда:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} (E_i - \mu) n_{i\sigma} + \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (11.97)$$

где  $a_{i\sigma}^+$  и  $a_{i\sigma}$  — операторы рождения и уничтожения частицы со спином  $\sigma$  на узле  $i$ ,  $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$  — оператор числа заполнения узла,  $t_{ij}$  — амплитуда перескока частицы между узлами  $i$  и  $j$ ,  $E_i$  — узельная энергия,  $U_i$  — амплитуда взаимодействия частиц с различным спином на узле  $i$ . Химический потенциал  $\mu$  введен для работы с переменным числом частиц, так как метод используется в условиях большого канонического ансамбля.

Как все дискретные методы, детерминантный алгоритм также опирается на разбиение Судзуки–Троттера — разбиение мнимого времени  $\beta = 1/T$ , на  $L \gg 1$  частей  $\Delta\tau = \beta/L$ :

$$\begin{aligned} Z = \text{Tr} (e^{-\beta H}) &= \text{Tr} \left( \prod_{k=1}^L e^{-\Delta\tau(H_0+H_1)} \right) \approx \\ &\approx \text{Tr} (e^{-\Delta\tau H_0} e^{-\Delta\tau H_1} \dots e^{-\Delta\tau H_0} e^{-\Delta\tau H_1}) \end{aligned} \quad (11.98)$$

Здесь разбиение гамильтониана на нулевую, затравочную часть  $H_0$  и возмущение  $H_1$  происходит обычным образом, так что к возмущению относится только парное взаимодействие:

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{i\sigma} E_i n_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} = \\ &= \sum_{ij\sigma} a_{i\sigma}^+ (t_{ij} + \delta_{ij} (E_i - \mu)) a_{j\sigma} = \sum_{ij\sigma} \theta_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}, \\ H_1 &= \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad \theta_{ij} = t_{ij} + \delta_{ij} (E_i - \mu). \end{aligned} \quad (11.99)$$

Напомним, что, строго говоря, (11.98) согласно операторному тождеству Хаусдорфа–Бейкера

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{[A,B]} \quad (11.100)$$

следует переписать как

$$Z = \text{Tr} \left( \prod_{k=1}^L e^{-\Delta\tau H_0} \prod_{k=1}^L e^{-\Delta\tau H_1} \prod_{k=1}^L e^{(\Delta\tau)^2 [H_0, H_1]} \right), \quad (11.101)$$

так что точность (11.98) порядка  $(\Delta\tau)^2$ .

Ключевым моментом всех преобразований является то обстоятельство, что экспоненту от парного взаимодействия можно трансформировать в сумму экспонент от одночастичных операторов с помощью одного из вариантов преобразования Хаббарда–Стратоновича [95] (см. приложение 1). Согласно этому преобразованию, для случая отталкивания ( $U > 0$ ) можно записать:

$$\begin{aligned} e^{-\Delta\tau U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}} &= A e^{B(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})} \sum_{S=\pm 1} e^{CS(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1)}, \\ A &= e^{\Delta\tau U_i / 2}, \quad B = -\frac{1}{2} \Delta\tau U_i, \quad C = \text{arch} \left( \frac{1}{2} e^{-\Delta\tau U_i / 2} \right). \end{aligned} \quad (11.102)$$

Для ситуации притяжения  $U < 0$  в возмущение удобно включить сдвиг чисел заполнения и рассматривать следующий вариант модели Хаббарда:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} (E_i - \mu) n_{i\sigma} + U \sum_i \left( n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left( n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right), \quad (11.103)$$

и экспоненту от возмущения представить следующим образом:

$$e^{-\Delta\tau U_i \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2}\right) \left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2}\right)} = D \sum_{S=\pm 1} e^{\Delta\tau \gamma S (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1)}, \quad (11.104)$$

$$D = \frac{1}{2} e^{\Delta\tau U_i / 4}, \quad \text{ch} \Delta\tau \gamma = e^{-\Delta\tau U_i / 2}.$$

Естественным образом возникает новая переменная  $S$ , по которой следует проводить суммирование. Теперь статистическая сумма в случае отталкивания имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \left( \prod_{k=1}^L \exp \left( -\Delta\tau \sum_{ij\sigma} \theta_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \right) \prod_{k=1}^L \prod_i \exp (-\Delta\tau U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}) \right) = \\ &= \text{Tr} \left( \prod_k \exp \left( -\Delta\tau \sum_{ij\sigma} \theta_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \right) \times \right. \\ &\quad \times \left. \prod_{ik} \left[ D \exp \left( -\frac{\Delta\tau U_i}{2} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \right) \right] \sum_{S=\pm 1} C S (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1) \right) = \\ &= \text{Tr} \left( D^{LN_a} \prod_k \left( \exp \left( -\Delta\tau \sum_{ij\sigma} \varepsilon_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \right) \times \right. \right. \\ &\quad \times \left. \left. \prod_i \sum_{S=\pm 1} \exp (C S (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1)) \right) \right), \\ \varepsilon_{ij} &= \delta_{ij} + \frac{1}{2} \Delta\tau U_i \delta_{ij} = \left( t_{ij} + \delta_{ij} \left( E_i - \mu + \frac{1}{2} \Delta\tau U_i \right) \right). \quad (11.105) \end{aligned}$$

Теперь необходимо поменять местами сумму и произведение в последней формуле, тогда суммирование будет не по одному индексу  $S$ , а по совокупности индексов  $\{S\}$ :

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \left( D^{LN_a} \prod_k \left( \sum_{\substack{S_i = \pm 1; \\ i = 1, \dots, N_a}} \exp \left( -\Delta\tau \sum_{ij\sigma} \varepsilon_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \right) \times \right. \right. \\ &\quad \times \left. \left. \exp \left( C \sum_i S_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1) \right) \right) \right) = \\ &= \text{Tr} \left( D^{LN_a} \prod_k \left( \sum_{\substack{S_i = \pm 1; \\ i = 1, \dots, N_a}} \exp \left( -\Delta\tau \sum_{ij\sigma} h_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \right) \exp \left( C \sum_i S_i \right) \right) \right). \end{aligned}$$

Тогда, обозначая

$$h_{ij}^k = \varepsilon_{ij} - \frac{CS_i}{\Delta\tau} \delta_{ij} = \left( t_{ij} + \delta_{ij} \left( E_i - \mu + \frac{1}{2} \Delta\tau U_i - \frac{CS_i^k}{\Delta\tau} \right) \right),$$

получаем

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \left( D^{LN_a} \sum_{\substack{S_i^k = \pm 1; \\ i = 1, \dots, N_a; \\ k = 1, \dots, L}} \exp \left( C \sum_{ik} S_i^k \right) \prod_k \exp \left( -\Delta\tau \sum_{ij\sigma} h_{ij}^k a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \right) \right) = \\ &= D^{LN_a} \sum_{\substack{S_i^k = \pm 1; \\ i = 1, \dots, N_a; \\ k = 1, \dots, L}} \exp \left( C \sum_{ik} S_i^k \right) \text{Tr} \left( \prod_k \exp \left( -\Delta\tau \sum_{ij\sigma} h_{ij}^k a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \right) \right). \end{aligned} \quad (11.106)$$

В случае притяжения, соответственно, имеем

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \left( \prod_k \sum_{\substack{S_i^k = \pm 1; \\ i = 1, \dots, N_a; \\ k = 1, \dots, L}} \exp \left( -\Delta\tau \sum_{ij\sigma} h_{ij}^k a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \right) \right) = \\ &= \sum_{\substack{S_i^k = \pm 1; \\ i = 1, \dots, N_a; \\ k = 1, \dots, L}} \text{Tr} \left( \prod_k \exp \left( -\Delta\tau \sum_{ij\sigma} h_{ij}^k a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \right) \right), \quad (11.107) \\ h_{ij}^k &= \delta_{ij} (E_i - \gamma S_i^k) + t_{ij}. \end{aligned}$$

В каждый момент времени  $\tau_k$  частицы описываются новым эффективным гамильтонианом, зависящим от спинового поля  $S_i^k$ , т.е. спиновое поле — новый базис, который заменяет исходный базис чисел заполнения.

Вернемся к случаю отталкивания, как наиболее физическому и часто рассматриваемому в реальных расчетах.

Для дальнейшего численного расчета необходимо представить операторы рождения и уничтожения в виде матриц в некотором удобном базисе. В приложении 2 доказывается теорема, согласно которой след экспоненты от билинейной формы одночастичных операторов представляется через определитель, зависящий от экспоненты матрицы, фигурирующей в билинейной форме, так что

$$\text{Tr} \prod_{k=1}^L \exp \left( \sum_{ij} -a_i^+ B_{ij}^k a_j \right) = \det \left( I + \prod_{k=1}^L e^{-B^k} \right), \quad (11.108)$$

где  $B_{ij}^k$  — матричные элементы матрицы  $B^k$ ,  $I$  — единичная квадратная матрица размера  $N_a$ . С учетом этого свойства, а также того, что операторы

с различными  $\sigma$  коммутируют, из (11.106) получаем:

$$\begin{aligned}
 Z = D^{LN_a} & \sum_{\substack{S_i^k = \pm 1; \\ i = 1, \dots, N_a; \\ k = 1, \dots, L}} \exp\left(C \sum_{ik} S_i^k\right) \text{Tr}\left(\prod_k \exp\left(-\Delta\tau \sum_{ij\sigma} h_{ij}^k a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}\right)\right) = \\
 & = D^{LN_a} \sum_{\substack{S_i^k = \pm 1; \\ i = 1, \dots, N_a; \\ k = 1, \dots, L}} \exp\left(C \sum_{ik} S_i^k\right) \times \\
 & \quad \times \text{Tr}\left(\prod_k \exp\left(-\Delta\tau \sum_{ij} h_{ij}^k a_{i\uparrow}^+ a_{j\uparrow}\right) \prod_k \exp\left(-\Delta\tau \sum_{ij} h_{ij}^k a_{i\downarrow}^+ a_{j\downarrow}\right)\right) = \\
 & = D^{LN_a} \sum_{\substack{S_i^k = \pm 1; \\ i = 1, \dots, N_a; \\ k = 1, \dots, L}} \exp\left(C \sum_{ik} S_i^k\right) \det(M_\uparrow) \det(M_\downarrow). \quad (11.109)
 \end{aligned}$$

где матрицы  $M$  имеют вид

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & E_{ij}^L \\ E_{ij}^1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{ij}^2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{ij}^3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & E_{ij}^{L-2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & & 0 & E_{ij}^{L-1} & 1 \end{pmatrix}, \quad E_{ij}^k = \exp(-h_{ij}^k). \quad (11.110)$$

Вместо фермионных степеней свободы теперь в формуле для статистической суммы фигурирует спиновое поле  $S_i^j$ , и суммирование в алгоритме Метрополиса происходит не по узельным состояниям, как в траекторных методах, а по всем значениям переменных  $S_i^j$ .

Проблемы знака в этом подходе избежать не всегда удается. Например, в случае  $U > 0$  различные конфигурации могут иметь разный знак. Исключительным является случай половинного заполнения, когда частиц со спином вверх столько же, сколько и со спином вниз. Применительно к выражению (11.109) это означает, что  $M_\uparrow = M_\downarrow$ , а элементы матрицы  $h$  не зависят от проекции спина  $\sigma$ , поэтому в данном случае

$$Z = D^{LN_a} \sum_{\substack{S_i^k = \pm 1; \\ i = 1, \dots, N_a; \\ k = 1, \dots, L}} \exp\left(C \sum_{ik} S_i^k\right) \det(M)^2. \quad (11.111)$$

Из (11.111) видно, что все слагаемые положительны, т. е. статистический вес всех конфигураций в этом случае положителен.

Можно показать, что в случае притяжения  $U < 0$  статистический вес конфигураций также положителен, а для статистической суммы имеем:

$$Z = \text{Tr} \left( \sum_{\substack{S_i^k = \pm 1; \\ i = 1, \dots, N_a; \\ k = 1, \dots, L}} e^{f(S)} \det \left( I + \prod_k \exp(-\Delta\tau h_{ij}^k) \right) \right), \quad (11.112)$$

так как

$$\text{Tr} \left( \prod_k e^{-h_{ij}^k a_i^+ a_j} \right) = \det \left( I + \prod_k e^{-h_{ij}^k} \right). \quad (11.113)$$

**11.2.2. Конкретная реализация метода.** Квантовый детерминантный метод МК принципиально отличается от траекторных (дискретных) алгоритмов тем, что он производит вычисления в большом каноническом ансамбле. Среднее число частиц в системе регулируется с помощью изменения химического потенциала  $\mu$ . Особенностью метода является возможность непосредственно в расчете получать мацубаровскую функцию Грина.

Однако скорость расчета в детерминантных методах пропорциональна кубу размера системы, в то время как в траекторных методах она с увеличением размера системы растет лишь линейно. Тем не менее, модифицируя алгоритм, можно ускорить его сходимость до пропорциональности квадрату размера системы. Покажем это на конкретной модели.

Рассмотрим модель Хаббарда в условиях большого канонического ансамбля:

$$H = -t \sum_{(ij)\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}). \quad (11.114)$$

Используя преобразование Троттера, запишем статистическую сумму в виде

$$\begin{aligned} Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) &= \text{Tr} \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau H} \cong \\ &\cong \text{Tr} \prod_{l=1}^L e^{-\Delta\tau H_0} \exp \left( -\Delta\tau \left( U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \right) \right), \end{aligned} \quad (11.115)$$

где  $H_0$  — кинетическая энергия. Ошибка, возникающая при переходе к последнему выражению в (11.115), будет порядка  $O((\Delta\tau)^2 t U)$ .

Используя описанное выше преобразование к представлению новых изинговских переменных, перепишем статистическую сумму, при этом используем следующий вариант преобразования Хаббарда–Стратоновича:

$$\begin{aligned} e^{-\Delta\tau U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}} &= \text{Tr}_\sigma \exp \left( \lambda \sigma ((n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) - \frac{\Delta\tau U}{2} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})) \right), \\ \lambda &= 2 \operatorname{arctg} \sqrt{\operatorname{th}(\Delta\tau U / 4)}, \quad \sigma = \pm 1. \end{aligned} \quad (11.116)$$

Получаем

$$\begin{aligned} Z = \text{Tr}_\sigma \text{Tr} \prod_l e^{-\Delta\tau H_0} \exp \left( \lambda\sigma ((n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) - \Delta\tau \left( \mu - \frac{U}{2} \right) (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})) \right) = \\ = \text{Tr}_\sigma \text{Tr} \left( \prod_l e^{-\Delta\tau H_{0\uparrow}} \exp \left( (\lambda\sigma - \Delta\tau \left( \mu - \frac{U}{2} \right)) n_{i\uparrow} \right) \right) \times \\ \times \left( \prod_k e^{-\Delta\tau H_{0\downarrow}} \exp \left( (-\lambda\sigma - \Delta\tau \left( \mu - \frac{U}{2} \right)) n_{i\downarrow} \right) \right). \quad (11.117) \end{aligned}$$

Введем обозначения:

$$\begin{aligned} B_l(\alpha) &= e^{-\Delta\tau K} e^{V^\alpha(l)}, \\ K_{ij} &= \begin{cases} -t, & \text{если узлы } i \text{ и } j\text{-соседние,} \\ 0, & \text{в противном случае;} \end{cases} \\ V_{ij}^\alpha(l) &= \delta_{ij} (\lambda\alpha\sigma_i(l) - \Delta\tau(\mu - U/2)), \end{aligned} \quad (11.118)$$

и введем операторы:

$$D_l(\alpha) = e^{-\Delta\tau a_i^+ K_{ij} a_j} e^{a_i^+ V_i^\alpha(l) a_i}, \quad (11.119)$$

тогда

$$Z = \text{Tr}_\sigma \text{Tr} \prod_{\alpha=\pm 1} \prod_{l=1}^L D_l(\alpha). \quad (11.120)$$

Учитывая, что в (11.120) входят только билинейные формы одночастичных операторов, используем расширенный вариант теоремы, доказанный в приложении 2. Тогда получим

$$Z = \text{Tr}_\sigma \prod_\alpha \det(I + B_L(\alpha) B_{L-1}(\alpha) \dots B_1(\alpha)) \equiv \text{Tr}_\sigma \det M_\uparrow \det M_\downarrow, \quad (11.121)$$

где  $M_\sigma$  — квадратная матрица размера  $LN_a$ :

$$M_\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & B_L^\sigma \\ -B_1^\sigma & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -B_2^\sigma & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & -B_{L-1}^\sigma & 1 \end{pmatrix}. \quad (11.122)$$

Можно показать, что при половинном заполнении зоны, когда  $\langle N_\uparrow \rangle = \langle N_\downarrow \rangle$ , выражение (11.121) положительно. Действительно, перейдем к дырочным операторам, согласно формуле

$$\begin{aligned} d_{i\sigma} &= (-1)^i a_{i\sigma}^+, \\ a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} &= 1 - d_{i\sigma}^+ d_{i\sigma}, \end{aligned} \quad (11.123)$$

тогда при половинном заполнении  $\mu = U/2$  и из (11.117) имеем

$$\det M_{\uparrow} = \text{Tr}_a \prod_{i=1}^L e^{-\Delta\tau H_{0\uparrow}} e^{\lambda\sigma a_{i\uparrow}^+ a_{i\downarrow}} = \text{Tr}_d \prod_{i=1}^L e^{-\Delta\tau H_{0\uparrow}} e^{-\lambda\sigma d_{i\uparrow}^+ d_{i\downarrow}} e^{\lambda\sigma_i(l)}, \quad (11.124)$$

откуда

$$\det M_{\uparrow} = e^{\lambda \sum_i \sigma_k(l)} \det M_{\downarrow}, \quad (11.125)$$

а значит, произведение определителей в (11.121) всегда положительно.

При неполовинном заполнении выражение (11.121) в общем случае может быть отрицательно, поэтому при моделировании МК в качестве веса конфигурации следует взять

$$P(\sigma) = |\det M_{\uparrow} \det M_{\downarrow}|. \quad (11.126)$$

Моделирование заключается в переключении изинговских переменных  $\sigma$  на узлах пространственно-временной сетки и расчете отношения нового и старого значения детерминантов  $R_{\sigma} = \frac{\det(M_{\sigma}^{\text{new}})}{\det(M_{\sigma}^{\text{old}})}$  (точнее, абсолютного значения этого отношения  $|R_{\sigma}|$ ). Так как матрицы (11.118) имеют линейный размер  $N_a$  — пространственный размер системы (*не важно, какой мерности*), то при расчете детерминантов времени, необходимое для расчета новой конфигурации,  $\sim L N_a^3$ . Соответственно, вероятность переключения траектории, например, в алгоритме тепловой ванны будем иметь вид

$$P = \frac{R_{\uparrow} R_{\downarrow}}{1 + R_{\uparrow} R_{\downarrow}}. \quad (11.127)$$

Теперь, для того чтобы возможно было при помощи алгоритма рассчитывать реальные физические величины, необходимо получить выражения для квантово-механических средних в новом изинговском представлении.

Достаточно просто показать [95], что

$$\langle (n_{i\uparrow}(\tau) - n_{i\downarrow}(\tau)) (n_{j\uparrow}(0) - n_{j\downarrow}(0)) \rangle = (1 - e^{-\Delta\tau U}) \langle \sigma_i(\tau) \sigma_j(0) \rangle. \quad (11.128)$$

Так же просто рассчитываются [170] магнитный структурный фактор

$$S(q) = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{iq(R_i - R_j)} \langle \sigma_x^i \sigma_x^j \rangle \quad (11.129)$$

и магнитная восприимчивость

$$\chi(q) = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{iq(R_i - R_j)} \int_0^{\beta} \langle \sigma_x^i(\tau) \sigma_x^j(0) \rangle d\tau. \quad (11.130)$$

Для одновременного коррелятора узельных операторов  $P_i$  и  $Q_j$  имеем:

$$\langle\langle P_i Q_j \rangle\rangle = \frac{\text{Tr}_\sigma \text{Tr} P_i Q_j \prod_{\alpha l} D_l(\alpha)}{Z} = \frac{\text{Tr}_\sigma \langle P_i Q_j \rangle \det M_1 \det M_L}{Z}, \quad (11.131)$$

$$\langle P_i Q_j \rangle = \frac{\text{Tr} P_i Q_j \prod_{\alpha l} D_l(\alpha)}{\det M_1 \det M_L}.$$

Используя соотношение (П.2.6) в приложении 2, преобразуем (11.131), например, для одновременной одночастичной функции Грина

$$\begin{aligned} \langle a_i a_j^+ \rangle &= \frac{\text{Tr} \left( a_i a_j^+ \prod_\nu e^{-a_\nu^+ l_\nu a_\nu} \right)}{\prod_\nu (1 + e^{-l_\nu})} = \sum_{\nu'} \langle \nu' | i \rangle \langle j | \nu' \rangle \frac{\text{Tr} \left( a_{\nu'} a_{\nu'}^+ \prod_\nu e^{-a_\nu^+ l_\nu a_\nu} \right)}{\prod_\nu (1 + e^{-l_\nu})} = \\ &= \sum_{\nu'} \langle \nu' | i \rangle \langle j | \nu' \rangle \frac{1}{1 + e^{-l_\nu}} = \left( \frac{1}{1 + B_L B_{L-1} \dots B_1} \right) ij. \end{aligned} \quad (11.132)$$

Аналогично,

$$\langle a_i^+ a_j \rangle = \left( \frac{B_L B_{L-1} \dots B_1}{1 + B_L B_{L-1} \dots B_1} \right) ji. \quad (11.133)$$

Для расчета зависящей от времени функции Грина

$$G(\tau) = \langle T [a(\tau) a^+(0)] \rangle, \quad (11.134)$$

где

$$a(\tau) = e^{H\tau} a e^{-H\tau},$$

имеем

$$\begin{aligned} \langle a_i(l_1) a_j^+(l_2) \rangle &= \frac{\text{Tr} D_L D_{L-1} \dots D_{l_1+1} a_i D_{l_1} \dots D_{l_2+1} a_j^+ D_{l_2} \dots D_1}{\text{Tr} D_L \dots D_1} = \\ &= \frac{\text{Tr} D_{l_2} \dots D_1 D_L \dots D_{l_2+1} \left[ (D_{l_1} D_{l_1-1} \dots D_{l_2+1})^{-1} a_i D_{l_1} \dots D_{l_2+1} \right] a_j^+}{\text{Tr} D_L \dots D_1}. \end{aligned} \quad (11.135)$$

Подставляя выражения для коэффициентов матрицы  $D$  из (11.119), получаем

$$(D_{l_1} D_{l_1-1} \dots D_{l_2+1})^{-1} a_i D_{l_1} \dots D_{l_2+1} = \sum_k (B_{l_1} B_{l_1-1} \dots B_{l_2+1})_{ik} a_k; \quad (11.136)$$

подставляя полученное выражение в (11.135), имеем

$$\langle a_i(l_1) a_j^+(l_2) \rangle = \sum_k (B_{l_1} B_{l_1-1} \dots B_{l_2+1})_{ik} \frac{\text{Tr} D_{l_2} \dots D_1 D_L \dots D_{l_2+1} a_k a_j^+}{\text{Tr} D_{l_2} \dots D_1 D_L \dots D_{l_2+1}}, \quad (11.137)$$

и с использованием (11.132) окончательно получаем

$$\langle a_i(l_1) a_j^+(l_2) \rangle = \left( B_{l_1} B_{l_1-1} \dots B_{l_2+1} \frac{1}{1 + B_{l_2} \dots B_1 B_L \dots B_{l_2+1}} \right)_{ij}. \quad (11.138)$$

Аналогично,

$$\langle a_i^+(l_1) a_j(l_2) \rangle = \left( \frac{1}{1 + B_{l_2} \dots B_{l_2+1}} B_{l_2} \dots B_{l_1+1} \right)_{ij}. \quad (11.139)$$

В принципе, из последних выражений можно получить любые корреляционные функции.

Для ускорения расчетов в [92, 93, 171, 172] была предложена модификация алгоритма, заключающаяся в схеме обновления конфигураций прямо через статистику температурной функции Грина. Рассмотрим статистическую сумму в виде (11.121):

$$Z = \sum_{S_{il}} \det M_\uparrow \det M_\downarrow, \quad M_\sigma = I + B_L^\sigma B_{L-1}^\sigma \dots B_1^\sigma. \quad (11.140)$$

Таким образом, при помощи обновления мгновенных конфигураций нужно получить семейство спиновых конфигураций  $\{S_{il}\}$ ,  $i = 1, \dots, N_a$ ,  $l = 1, \dots, L$ , распределенное с плотностью  $Z^{-1} \det M_\uparrow \det M_\downarrow$ .

Заметим, что определитель  $\det M_\sigma$  не меняется при циклической перестановке матриц  $B_l^\sigma$ , поэтому можно записать

$$\det M_\sigma = \det (I + B_l^\sigma \dots B_1^\sigma B_L^\sigma \dots B_{l+1}^\sigma) \equiv \det (I + A_\sigma(l)). \quad (11.141)$$

При обновлении спиновой конфигурации  $S_{il}$  либо с помощью алгоритма Метрополиса, либо с помощью алгоритма тепловой ванны, следует пересчитать детерминанты при элементарном переключении спина  $S_{il} \rightarrow -S_{il}$ . При таком переключении меняется величина  $A_\sigma(l)$  в (11.141):

$$A_\sigma(l) \rightarrow A_\sigma^{\text{new}}(l) = (I + \Delta_\sigma(i, l)) A_\sigma(l), \quad (11.142)$$

причем у матрицы  $\Delta_\sigma(i, l)$  всего один ненулевой элемент:

$$\Delta_\pm(i, l)_{jk} = \delta_{ij} \delta_{ki} \left( e^{\pm(V_l^\pm(-S_{il}) - V_l^\pm(S_{il}))} - 1 \right). \quad (11.143)$$

Отношение детерминантов до и после переворота спина будет

$$\begin{aligned} R_\sigma &= \frac{\det M_\sigma^{\text{new}}}{\det M_\sigma^{\text{old}}} = \det (I + G_\sigma(l) \Delta_\sigma(i, l) A_\sigma(l)) = \\ &= 1 + (1 - G_\sigma(l)_{ii}) \Delta_\sigma(i, l)_{ii}, \end{aligned} \quad (11.144)$$

где  $G_\sigma(l)$  — одновременная функция Грина частицы, движущейся в поле  $S_{il}$ ,

$$G_\sigma(l)_{ij} = \langle T(a_{i\sigma}(l) a_{j\sigma}^+(l)) \rangle = (I + A_\sigma(l))_{ij}^{-1}. \quad (11.145)$$

Таким образом, расчет детерминантного соотношения сводится к расчету эволюции одновременной функции Грина. Если известно ее исходное значение, и спин  $S_{il}$  переключен, то новое значение функции Грина будет

$$\begin{aligned} G_\sigma(l)^{\text{new}} &= G_\sigma(l) - G_\sigma(l) \Delta_\sigma(i, l) A_\sigma(l) G_\sigma(l)^{\text{new}} = \\ &= G_\sigma(l) - \frac{G_\sigma(l) \Delta_\sigma(i, l) [I - G_\sigma(l)]}{1 + (1 - G_\sigma(l)_{ii}) \Delta_\sigma(i, l)_{ii}}. \end{aligned} \quad (11.146)$$

Так как матрица  $\Delta_\sigma(i, l)$  имеет только один ненулевой элемент, то реального перемножения матриц в (11.146) не происходит, и время расчета обновления конфигурации будет  $\sim N_a^2$ , т. е. в  $N_a$  раз меньше, чем в стандартном пересчете детерминантов.

После того, как все спины на данном временном срезе  $l$  были испытаны на переключение, можно получить функцию Грина на следующем временном срезе:

$$G_\sigma(l+1) = B_{l+1}^\sigma G_\sigma(l) B_{l+1}^{\sigma-1}. \quad (11.147)$$

Так как матрица  $B_{l+1}^\sigma$  — редкая (см. (11.118)), то время такого пересчета также  $\sim N_a^2$ .

Практическая реализация такого пересчета сталкивается с нарастанием ошибок в процессе счета из-за постоянного пересчета матриц большого размера, поэтому рекомендуется периодически проводить расчет функции Грина «с нуля» по всей пространственно-временной решетке.

Близкий к изложенному выше методу обновления траекторий был продемонстрирован в [173] при расчете влияния магнитных примесей.

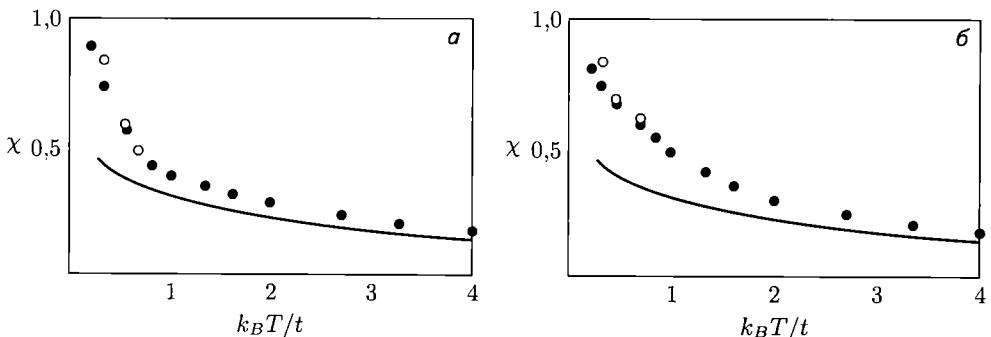


Рис. 11.36. Зависимость магнитной восприимчивости от температуры из [174], рассчитанная при помощи детерминантного алгоритма. Сплошные круги соответствуют результатам для системы  $4 \times 4$ , открытые — для системы  $6 \times 6$ . Сплошная линия — аналитическое решение для невзаимодействующей бесконечной системы

Таким образом, в каждый момент времени известна функция Грина и, соответственно, матрицы  $B_l^\sigma$ , что позволяет рассчитывать различные физические величины вида (11.128), (11.135), (11.139). Например, временная функция Грина (11.138) рассчитывается инверсией всего определителя  $M_\sigma$ , для ускорения этих вычислений также применяются различные модификации алгоритма [93, 172].

Приведем примеры расчета различных физических величин при помощи детерминантного метода.

На рис. 11.36 приведены данные из [174] расчета магнитной восприимчивости для квадратной решетки в модели Хаббарда с периодическими граничными условиями для половинного заполнения. Для рисунка 11.36,  $a$   $U=2$ ; для рисунка 11.36,  $b$   $U=4$ . На рис. 11.37 показаны результаты расчета магнитного структурного фактора из той же работы.

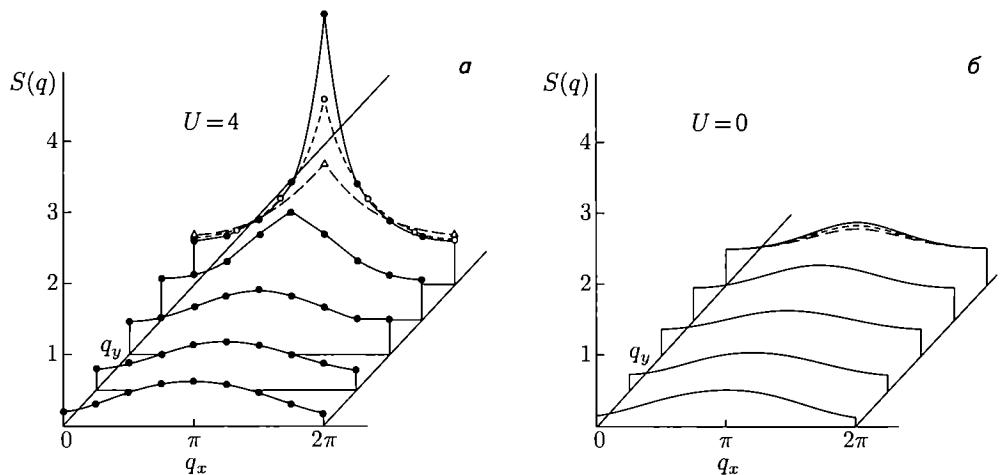


Рис. 11.37. Магнитный структурный фактор, рассчитанный в [174] при помощи детерминантного метода, для систем  $8 \times 8$  (сплошные круги),  $6 \times 6$  (открытые круги) и  $4 \times 4$  (треугольники) при  $\beta = 4$  (а, сплошные круги); для сравнения показан случай аналогичной невзаимодействующей системы  $U = 0$  (б)

На рис. 11.38 показаны данные по моделированию трехмерной решетки из [170] для системы из  $4^3$  узлов с периодическими граничными условиями. Видно качественное согласие с данными аналитических расчетов в модели хаотических фаз.

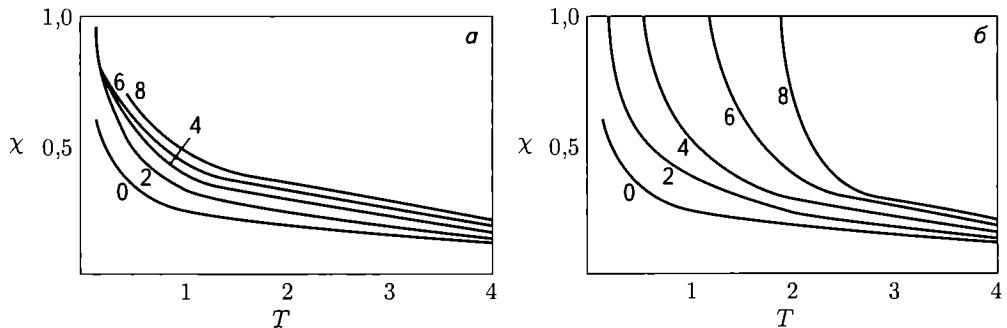


Рис. 11.38. Зависимость магнитной восприимчивости от температуры при  $q = 0$ , полученная в [170] для системы из  $4^3$  узлов с периодическими граничными условиями (а). Приведены данные для различных значений  $U$  (они отмечены на рисунке цифрами возле соответствующих кривых). Показаны результаты аналитических расчетов для этой же модели в приближении хаотических фаз (б)

Расчет недиагональной матрицы плотности:

$$\rho(i,j) = \langle a_i^\dagger a_j \rangle \quad (11.148)$$

и, соответственно, импульсного распределения:

$$\rho(k) = \sum_{ij} e^{ik(r_i - r_j)} \langle a_i^\dagger a_j \rangle \quad (11.149)$$

также возможен [62] с использованием алгоритма с некоторыми модификациями и проекционных операторов [169]), и представлен на рис. 11.39. Виден фермиевский скачок, ослабляющийся при увеличении силы взаимодействия  $U$ .

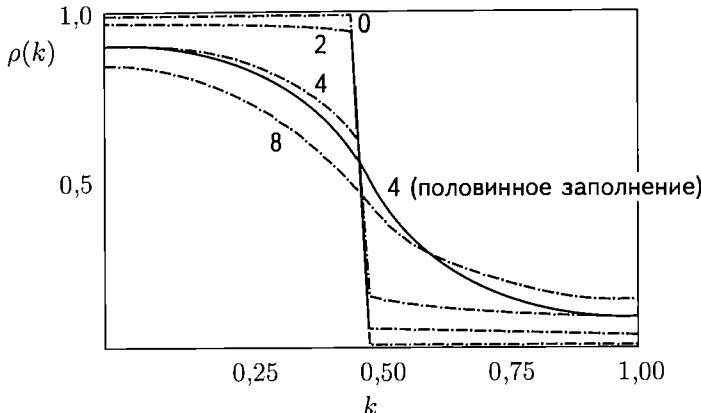


Рис. 11.39. Импульсное распределение из [62] в зависимости от силы взаимодействия  $U$  (отмечено цифрами вблизи соответствующих кривых) для одномерной системы из 32 узлов с периодическими граничными условиями; в системе 15 частиц со спином вверх и 15 частиц со спином вниз; случай половинного заполнения отмечен сплошной линией

Заметим в заключение раздела, что при помощи детерминантного метода моделировалась и трехзонная модель Эмери [126, 146, 161, 165, 166], рассмотренная ранее в разделе о траекторном алгоритме.

**11.2.3. Расчет плотности состояний с помощью детерминантного алгоритма.** Детерминантный алгоритм обладает важным преимуществом — он непосредственно вычисляет функцию Грина, напрямую связанную со спектральной плотностью состояний.

Расчеты зонной структуры в достаточно больших системах без каких-либо приближений и упрощений представляют несомненный интерес, поэтому перспективным методом получения плотности состояний является восстановление спектральной плотности из мацубаровской функции Грина, рассчитываемой детерминантным методом МК [56–58]. В этом случае можно исследовать достаточно большие системы (например, кластер  $8 \times 8$  [56] или  $12 \times 12$  [175] в модели Хаббарда) и получать дисперсионные зависимости [175, 176]. В этом разделе кратко рассмотрены методы, позволяющие получить плотность состояний из данных для функции Грина, полученных методом МК.

Спектральная плотность состояний  $A_\sigma(p, \omega)$  и полная плотность состояний

$$N(\omega) = \frac{1}{N} \sum_p A(p, \omega) \quad (11.150)$$

восстанавливаются из известного интегрального соотношения [56–58, 175, 176]:

$$G_\sigma(p, \tau) = - \int \frac{A_\sigma(p, \omega) e^{-\omega\tau}}{1 + e^{-\beta\omega}} d\omega, \quad (11.151)$$

где мацубаровская функция Грина  $G_\sigma(p, \tau)$  есть фурье-компоненты узельного нелокального коррелятора

$$G_\sigma(i, j, \tau) = \langle a_{i\sigma}(\tau) a_{j\sigma}^+(0) \rangle. \quad (11.152)$$

Функция Грина известна из расчетов МК, поэтому (11.151) является типичной некорректной задачей по Адамару, в которой необходимо найти ядро интегрального уравнения.

Для решения этой задачи создадим сначала дискретную сетку по времени, для удобства совпадающую с разбиением Троттера в методе МК. При помощи квантового детерминантного алгоритма МК можно вычислить величину (11.152), а затем рассчитать фурье-компоненту

$$G(p, \tau) \equiv - \langle T_\tau [a_p(\tau) a_p^+(0)] \rangle \quad (11.153)$$

для всех импульсов  $p$  дискретной сетки в обратном пространстве, соответствующем пространственной решетке задачи. В результате будут получены наборы значений  $G(p, \tau)$  в точках  $\tau_l = l\Delta\tau$ ,  $l = 0, \dots, L$ , а также статистические ошибки расчета каждой точки. Далее можно аппроксимировать зависимость полученной функции Грина от  $\tau$  функцией

$$\bar{G}(p, \tau) = - \sum_i \frac{a_i e^{-\tau\omega_i}}{1 + e^{-\beta\omega_i}}, \quad (11.154)$$

где  $\omega_i$  образуют четный набор частот  $\omega_i = -\Omega, -\Omega + \Delta\omega, \dots, \Omega$ ;  $a_i$  — коэффициенты, подлежащие определению. Спектральная плотность состояний аппроксимируется тогда функцией

$$\bar{A}(p, \omega) = \sum_i a_i \delta(\omega - \omega_i). \quad (11.155)$$

Фактически (11.154) есть система линейных уравнений на неизвестные амплитуды  $a_i$ . Существуют различные способы решения (11.154). В [57] предлагается метод минимизации некоторого неотрицательного функционала, отражающего отличие истинного решения  $G(p, \tau)$  от приближенного  $\bar{G}(p, \tau)$ , полученного методом МК:

$$\bar{S} = \sum_{l=0}^L \frac{1}{\sigma_l^2} (G(p, \tau_l) - \bar{G}(p, \tau_l))^2 + b \sum_i (a_i - a_{i+1})^2 + h \sum_i \theta(-a_i) a_i^2. \quad (11.156)$$

Здесь  $b$  — сглаживающий параметр,  $h$  — параметр обрезания, ограничивающий снизу спектр. Полагая амплитуды  $a_i$  неотрицательными и подбирая коэффициенты  $b$  и  $h$ , можно минимизировать (11.156) аналитически. В результате

задача преобразуется к системе уравнений

$$a = M^{-1}d,$$

$$M_{ij} = \sum_l \frac{1}{\sigma_l^2} f_{il} f_{jl} + 2b\delta_{ij} - b(\delta_{i,j+1} - \delta_{i,j-1}) + h\delta_{ij} \sum_i \theta(-a_i) a_i^2, \quad (11.157)$$

$$d_i = \sum_l \frac{1}{\sigma_l^2} f_{il} G(p, \tau_l), \quad f_{il} = \frac{e^{-\pi_l \omega_i}}{1 + e^{-\beta \omega_i}},$$

решаемой прямыми итерациями.

Результаты расчетов из [57] представлены на рис. 11.40. Видно, как с увеличением взаимодействия все более проявляются две хаббардовские подзоны, разделенные на  $U$ .

Если рассчитывать не полную плотность состояний, а спектральную  $A(p, \omega)$ , то можно рассчитать и распределение спектра квазичастиц  $\varepsilon(p)$ , отслеживая пики спектральной плотности по всей зоне Бриллюэна [175]. Это позволяет восстановить изоэнергетические поверхности, т. е. поверхности Ферми, и напрямую сравняться с экспериментами по фотоэмиссии с угловым разрешением (ARPES).

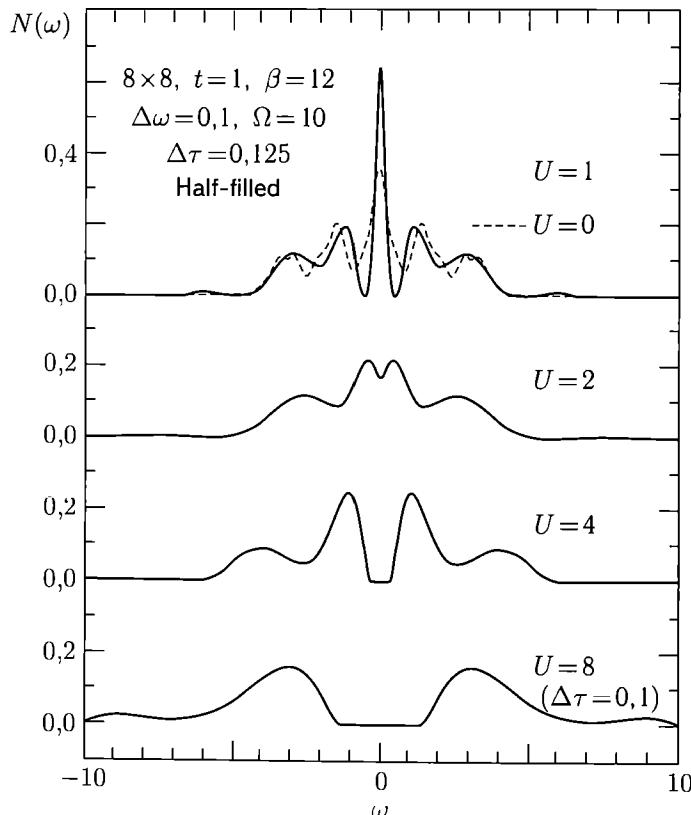


Рис. 11.40. Плотность состояний из [57] для двумерной модели Хаббарда (половинное заполнение, система  $8 \times 8$ ,  $\beta = 12$ ) при различных значениях взаимодействия  $U$

На рисунках 11.41 и 11.42 показаны результаты из [175] по восстановлению дисперсии квазичастиц в модели Хаббарда для плоской решетки.

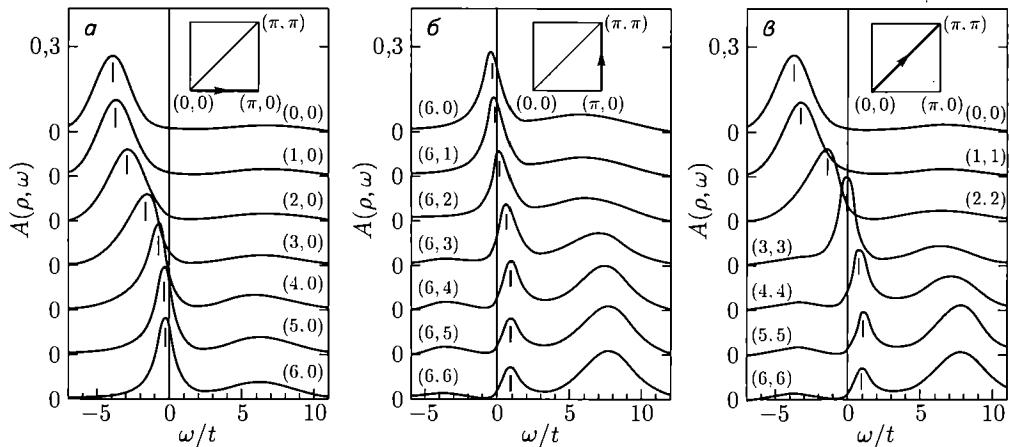


Рис. 11.41. Спектральная функция из [175] в зависимости от  $\omega$  для различных значений импульса (с интервалом  $\pi/6$ ). Система  $12 \times 12$ ,  $U = 8$ ,  $T = 0,5$

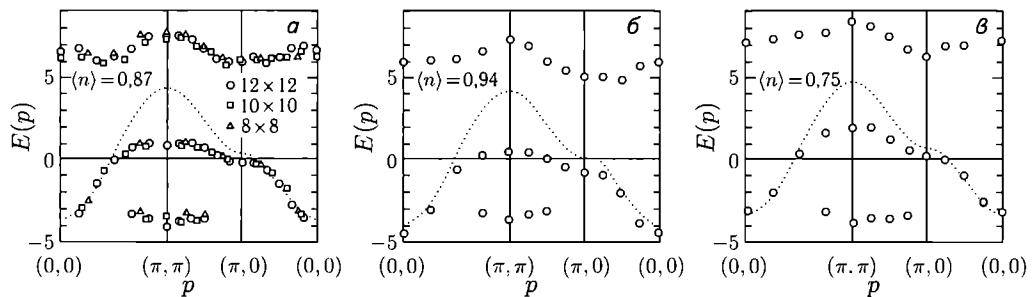


Рис. 11.42. Дисперсия, восстановленная из расчетов спектральной функции из [175]

**11.2.4. Методы восстановления плотности состояний с помощью процедуры Монте-Карло.** Рассмотрим здесь более совершенный метод восстановления плотности состояний и дисперсии возбуждений, предложенный в серии работ А. С. Мищенко с соавторами [78, 234–236], использующий стохастический подход на основе своеобразной процедуры Монте-Карло для моделей с электрон-фононным взаимодействием. Метод, основанный на математической схеме восстановления ядра интегрального уравнения (11.151), т. е. спектральной плотности состояний, является достаточно универсальным способом получения плотности состояний и спектра возбуждений для любых численных стохастических алгоритмов, позволяющих рассчитывать мацубаровскую функцию Грина, в том числе детерминантных и диаграммных, рассматриваемых далее.

**11.2.4.1. Общие принципы и общее описание метода.** Проблема восстановления положительно определенной спектральной плотности  $\rho(\omega)$  по из-

вестной функции Грина на мнимом времени  $G(\tau)$  является задачей о решении уравнения Фредгольма первого рода:

$$\int_0^\infty e^{-\tau\omega} \rho(\omega) d\omega = G(\tau), \quad (11.158)$$

где областью определения функций  $G(\tau)$  и  $\rho(\omega)$  является интервал  $[0, \infty]$ . Нормировка функции Грина  $G(0) = 1$  подразумевает дополнительное условие

$$\int_0^\infty \rho(\omega) d\omega = 1. \quad (11.159)$$

В реалистичной ситуации функция Грина известна на дискретном наборе времен  $\{\tau_i\}$ ,  $i = 1, \dots, N$ , с некоторой статистической ошибкой в каждой точке. Как хорошо известно, в этом случае задача (11.158) принадлежит к классу некорректно поставленных задач. Характерной особенностью некорректно поставленных задач является то, что решение уравнения (11.158) не является единственным даже при отсутствии статистических ошибок, так как существует бесконечное количество функций  $\tilde{\rho}(\omega)$ , которые удовлетворяют уравнению (11.158). Эта особенность является следствием того, что функция Грина задана на конечном количестве точек. С другой стороны, в случае конечных статистических ошибок можно столкнуться с ситуацией, когда решение уравнения (11.158) при условии (11.159) вообще не существует. Поэтому естественно сформулировать проблему как поиск приближенного решения  $\rho_{\min}(\omega)$ , которое воспроизводит  $G$  на конечном наборе времен с некоторым наименьшим отклонением  $D_{\min}$ . Определение меры отклонения зависит от модификации метода решения, а значение минимального отклонения  $D_{\min}$  определяется величиной статистических ошибок.

Существуют две фундаментальных трудности, которые характерны для спектрального анализа. Первая из них — пилообразная неустойчивость линейного уравнения Фредгольма первого рода: приближенное решение  $\tilde{\rho}(\omega)$  не воспроизводит истинного решения  $\rho(\omega)$  даже если  $\tilde{\rho}(\omega)$  воспроизводит функцию Грина:

$$\tilde{G}(\tau) = \int_0^\infty e^{-\tau\omega} \tilde{\rho}(\omega) d\omega \quad (11.160)$$

с любой наперед заданной точностью. Эта проблема обычно обходится при помощи метода регуляризации, который сглаживает пилообразный шум приближенного решения. Основная идея метода регуляризации состоит в том, что в уравнение (11.158) добавляются нелинейные функционалы решения  $\tilde{\rho}(\omega)$ , которые подавляют большие значения производных  $\tilde{\rho}(\omega)$  по  $\omega$  высоких порядков (этот метод уже рассматривался выше). Однако метод регуляризации имеет два существенных недостатка. Во-первых, подавление высоких производных не позволяет правильно восстановить спектральную плотность с острыми особенностями. Во-вторых, вследствие искажения исходного уравнения дополнительными нелинейными регуляризирующими членами, регуляри-

зированное решение воспроизводит функцию  $G(\tau)$  со сравнительно большим по сравнению с исходным уравнением отклонением  $D > D_{\min}$ . Следовательно, информация из наиболее представительного подмножества минимальных отклонений  $D \sim D_{\min}$  будет потеряна.

Вторая сложность, характерная для проблемы решения уравнения (11.158), состоит в том, что любое представление функции  $\tilde{\rho}(\omega)$  при помощи значений на наперед заданном дискретном наборе  $\{\rho(\omega_f)\}$ ,  $f = 1, \dots, M$ , является источником систематических ошибок, которые невозможно контролировать. Например, если истинное решение  $\rho(\omega)$  содержит острую особенность со значительным весом при некотором  $\omega^*$ , которое не совпадает ни с одним значением дискретного набора  $\{\omega_f\}$ , эта особенность не будет воспроизведена и, следовательно, остальная часть спектра может быть искажена до неузнаваемости. Следует заметить, что все существующие методы итераций, так же как и методы, основанные на решении системы нелинейных уравнений, используют наперед заданную дискретизацию пространства переменной  $\omega$ .

В этом разделе представлен метод решения уравнения (11.158), который обходит проблему искажения уравнения нелинейными членами и, следовательно, подвергает анализу наиболее представительный интервал малых отклонений. Более того, метод не содержит источников систематических ошибок, так как избегает дискретизации пространства переменной  $\omega$ . Идея метода состоит в следующем. При помощи стохастической процедуры генерируется достаточно большой набор  $M$  положительно определенных статистически независимых решений  $\{\tilde{\rho}_j(\omega)\}$ ,  $j = 1, \dots, M$ , меры отклонения которых близки к минимальной  $D_j \sim D_{\min}$ . Затем, используя линейность уравнения (11.158), окончательное решение выбирается в виде среднего

$$\rho(\omega) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \tilde{\rho}_j(\omega). \quad (11.161)$$

Причина такого выбора состоит в том, что хотя каждое частное решение  $\tilde{\rho}_j(\omega)$  содержит пилообразный шум, стохастический характер процедуры получения статистически независимых решений приводит к усреднению и сглаживанию пилообразного шума. Условие положительной определенности  $\tilde{\rho}_j(\omega) > 0$  и нормировка (11.159) существенно улучшают сходимость суммы (11.161).

Метод генерации частного решения состоит в оптимизации отклонения с мерой

$$D[\tilde{\rho}] = \int_0^{\tau_{\max}} |G(\tau) - \tilde{G}(\tau)| G^{-1}(\tau) d\tau. \quad (11.162)$$

Здесь  $\tau_{\max}$  — максимальное  $\tau$ , до которого известна функция  $G(\tau)$ . Весовая функция  $G^{-1}(\tau)$  используется для эффективного использования информации из всего диапазона  $[0, \tau_{\max}]$ , даже если функция  $G(\tau)$  падает в данном диапазоне на несколько порядков величины. Следует заметить, что использование весовой функции  $G^{-1}(\tau)$ , а не  $\tilde{G}^{-1}(\tau)$ , вызвано необходимостью сохранить линейность меры по приближенному решению и избежать нестабильностей обратной связи при генерации решений.

Предложенная процедура оптимизации не использует наперед заданной дискретизации пространства переменной  $\omega$ . Число параметров, используемых для параметризации спектральной плотности  $\tilde{\rho}(\omega)$ , изменяется в ходе оптимизационного процесса. Таким образом, в принципе, любая спектральная функция может быть параметризована с любой наперед заданной точностью. Процесс генерации частного решения представляет собой случайный выбор параметров начальной конфигурации и последующей оптимизации отклонения, в ходе которой меняются как значения, так и число параметров. Максимальное число параметров и число частных решений  $M$  ограничивается только памятью и быстродействием компьютера.

**11.2.4.2. Конфигурации и метод получения статистически независимого решения.** Решение  $\tilde{\rho}$  параметризуется в виде суммы

$$\tilde{\rho}(\omega) = \sum_{t=1}^K \chi_{\{P_t\}}(\omega) \quad (11.163)$$

прямоугольников

$$\{P_t\} = \{h_t, w_t, c_t\},$$

$$\chi_{\{P_t\}}(\omega) = \begin{cases} h_t, & \omega \in [c_t - w_t/2, c_t + w_t/2], \\ 0, & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (11.164)$$

определенных высотой  $h_t > 0$ , шириной  $w_t > 0$  и центром  $c_t > 0$ .

Конфигурация

$$\mathcal{C} = \{\{P_t\}, t = 1, \dots, K\}, \quad (11.165)$$

которая подчиняется условию

$$\sum_{t=1}^K h_t w_t = 1, \quad (11.166)$$

определяет в соответствии с уравнениями (11.160) и (11.163) функцию  $\tilde{G}(\tau)$  в точке мнимого времени  $\tau$ :

$$G_C(\tau) = \begin{cases} 1, & \tau = 0, \\ 2\tau^{-1} \sum_{t=1}^K h_t e^{-c_t \tau} \operatorname{sh}\left(\frac{w_t \tau}{2}\right), & \tau \neq 0. \end{cases} \quad (11.167)$$

Для того чтобы представить (11.162) в виде явной функции значений  $\tilde{G}$  и  $G$  на наборе времен  $\{\tau_i\}, i = 1, \dots, N$  (где функция  $G(\tau)$  известна), используется линейная интерполяция между ближайшими точками.

Отметим, что конкретный вид функции (11.164) не является принципиально важным для общей реализации метода, хотя простая форма аналитических выражений (11.166), (11.167) является важной для быстрой сходимости.

Процедура получения частного решения  $\tilde{\rho}_j(\omega)$  состоит из случайной генерации с помощью различных элементарных обновлений некоторой начальной конфигурации  $C_j^{\text{init}}$  до тех пор, пока отклонение не станет удовлетворять условию

$$D[C_j^{\text{fin}}] < D_u < D_{\min} \quad (11.168)$$

( $D_u$  — верхнее предельное отклонение) в конечной конфигурации  $C_j^{\text{fin}}$ .

**11.2.4.3. Общие свойства элементарных обновлений.** Под элементарным обновлением понимается случайно выбранное изменение конфигурации, которое принимается или отвергается в соответствии с определенными правилами. Существуют два класса элементарных обновлений. Обновления класса I не изменяют числа прямоугольников  $K$ , а изменяют только значения параметров из случайно выбранного набора  $\{P_t\}$ . Обновления класса II или добавляют новый прямоугольник со случайно выбранными параметрами  $\{h_{K+1}, w_{K+1}, c_{K+1}\}$ , или удаляют из конфигурации стохастическим образом выбранный прямоугольник  $t$ . Если предлагаемое изменение нарушает условие (11.167) (например, происходит обновление класса II или изменяются  $w_t$  или  $h_t$ ), то одновременно предпринимается необходимое изменение некоторых других параметров набора  $\{P_{t'}\}$ , которое сохраняет условие нормировки.

Обновления должны быть устроены так, чтобы сохранять параметры новой конфигурации в области определения конфигурации  $C$ . Формально, областью определения конфигурации (11.165) является  $\Omega_{h_t} = [0, \infty]$ ;  $\Omega_{c_t} = [0, \infty]$ ;  $\Omega_{w_t} = [0, 2c_t]$ ;  $\Omega_K = [1, \infty]$ . Однако для ускорения сходимости необходимо редуцировать область определения.

Так как не существует общего правила выбора редуцированной области определения, то простейшим подходом является следующий. Необходимо начинать с максимальной области определения и затем, после того, как найдено грубое приближенное решение, уменьшить область определения до разумных значений, диктуемых грубым приближенным решением. В частности, так как вероятность предложить изменение любого параметра конфигурации пропорциональна  $K^{-1}$ , то является естественным ограничить максимальное число прямоугольников  $\Omega_K \in [1, K_{\max}]$  некоторым достаточно большим числом  $K_{\max}$ . Для того, чтобы запретить появление прямоугольников с очень малым весом, вклад которых в  $G(\tau)$  меньше статистических ошибок функции  $G(\tau)$ , можно ограничить произведение  $h_t w_t$  условием  $h_t w_t \in [S_{\min}, 1]$ , где  $S_{\min} \ll K_{\max}^{-1}$ . Когда имеется предварительная информация о том, что подавляющий вклад в интегральный вес спектральной функции  $\rho(\omega)$  находится в диапазоне  $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$ , можно ограничить область определения параметра  $c_t$  интервалом  $\Omega_{c_t} = [\omega_{\min}, \omega_{\max}]$ . Затем, чтобы уменьшить фазовое пространство, можно выбрать  $\Omega_{h_t} = [h_{\min}, \infty]$ ,  $\Omega_{w_t} = [w_{\min} \min \{2(c_t - \omega_{\min}), 2(\omega_{\max} - c_t)\}]$ .

В то время как начальная конфигурация, тип обновления и параметр, который выбирается для изменения, определяются стохастически, изменение значений параметров, которые имеют отношение к обновлению, должны быть оптимизированы для максимально быстрого уменьшения меры отклонения  $D$ . Каждое элементарное обновление оптимизационной процедуры (даже обновление класса II) устроено как предложение изменить некоторый непрерывный параметр  $\xi$  при помощи случайной генерации  $\delta\xi$  таким образом, что новое значение тоже принадлежит области определения  $\Omega_\xi$ . Хотя предложения с маленькими значениями  $\delta\xi$  принимаются с более высокой вероятностью, важно в целях более быстрой сходимости иногда предлагать такие изменения  $\delta\xi$ , которые могут прощупать всю область определения  $\Omega_\xi$ . Для того, чтобы прощупать весь возможный диапазон  $\delta\xi \in [\delta\xi_{\min}, \delta\xi_{\max}]$ , величина  $\delta\xi$  генерируется с плотностью вероятности  $P \sim (\max(|\delta\xi_{\min}|, |\delta\xi_{\max}|) / |\delta\xi|)^\gamma$ , где  $\gamma \gg 1$ .

Вычисляя меры отклонений  $D(\xi)$ ,  $D(\xi + \delta\xi)$ ,  $D(\xi + \delta\xi/2)$  и находя минимум параболы, находим оптимальное значение изменения параметра:

$$\delta\xi_{opt} = -\frac{B}{2A}, \quad (11.169)$$

где

$$A = 2(D(\xi + \delta\xi) - 2D(\xi + \delta\xi/2) + D(\xi)) / (\delta\xi)^2, \quad (11.170)$$

и

$$B = (4D(\xi + \delta\xi/2) - D(\xi + \delta\xi) - 3D(\xi)) \delta\xi. \quad (11.171)$$

В случае  $A > 0$  и  $\xi_{opt} \in \Omega_\xi$  в качестве предложения для изменения параметра  $\delta\xi$  выбирается то из значений  $\delta\xi$ ,  $\delta\xi/2$  или  $\delta\xi_{opt}$ , для которого мера отклонения  $D(\xi + \delta\xi)$  является наименьшей. В противном случае, когда минимум параболы находится вне области определения  $\Omega_\xi$ , сравниваются только отклонения для  $\delta\xi$  и  $\delta\xi/2$ .

**11.2.4.4. Глобальные обновления.** Стратегия обновлений должна обеспечивать эффективную минимизацию меры отклонения вплоть до достижения выполнения критерия (11.168). Принятие только тех обновлений, которые приводят к уменьшению отклонения, является неэффективной стратегией, так как, в общем случае, существует огромное число локальных минимумов  $D_{loc}(\mathcal{C}) > D_u$ .

Для поиска глобального минимума необходимо, чтобы выполнялась некоторая последовательность  $T$  временных элементарных обновлений конфигурации  $\mathcal{C}(0)$ :

$$\mathcal{C}(0) \rightarrow \mathcal{C}(1) \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}(r) \rightarrow \mathcal{C}(r+1) \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{C}(T), \quad (11.172)$$

где предложение временно изменить конфигурацию  $\mathcal{C}(r) \rightarrow \mathcal{C}(r+1)$  принимается с вероятностью

$$P_{r \rightarrow r+1} = \begin{cases} 1, & D[\mathcal{C}(r+1)] < D[\mathcal{C}(r)], \\ f(D[\mathcal{C}(r)] / D[\mathcal{C}(r+1)]), & D[\mathcal{C}(r+1)] > D[\mathcal{C}(r)]. \end{cases} \quad (11.173)$$

Функция  $f$  удовлетворяет граничным условиям:  $f(0) = 0$  и  $f(1) = 1$ .

Затем из набора конфигураций  $\{\mathcal{C}(r)\}$  (11.172) выбирается конфигурация с минимальным отклонением и, если эта конфигурация отлична от  $\mathcal{C}(0)$ , то она объявляется результатом глобального обновления. В противном случае, глобальное обновление отвергается. Функция  $f$  выбирается в виде

$$f(x) = x^{1+d} \quad (d > 0), \quad (11.174)$$

что приводит к сравнительно высоким вероятностям принятия обновлений с малым увеличением мер отклонения и подавляет значительные увеличения отклонений. Эмпирически найдено, что значение параметра  $d$  принимается равным  $d = d_1 \sim 0$  в течение первых  $T_1$  шагов последовательности (11.172) (для того чтобы покинуть локальный минимум), и полагается равным  $d = d_2 \gg 1$  для последних  $T - T_1$  шагов (чтобы резко уменьшить меру отклонения). В описываемом здесь алгоритме значения  $T \in [1, T_{max}]$ ,  $T_1 \in [1, T]$ ,

$d_1 \in [1, d]$ ,  $d_2 \in [1, d_{\max}]$  стохастически выбираются для каждого глобального обновления.

**11.2.4.5. Окончательное решение и рафинирование.** После того как получен набор  $M$  конфигураций

$$\{C_j^{\text{fin}}, \quad j = 1, \dots, M\}, \quad (11.175)$$

которые удовлетворяют критерию (11.168), решение (11.161) получается суммированием прямоугольников (11.164), (11.175).

Помимо этого, можно применить более развитую процедуру, которая называется *рафинированием*. В ходе данной процедуры набор (11.175) используется в качестве набора  $M_{\text{ref}}$  новых статистически независимых конфигураций для дальнейшей оптимизации. Для этого начальная конфигурация генерируется как линейная комбинация случайно выбранных членов набора (11.175) со стохастически выбранными весовыми коэффициентами. Затем окончательное рафинированное решение представляется в виде среднего (11.161) от  $M_{\text{ref}}$  частных решений, являющихся результатом оптимизационной процедуры.

Главное преимущество этого подхода состоит в том, что стартовая конфигурация для процедуры оптимизации с самого начала удовлетворяет критерию (11.168) и, следовательно, наибольшее допустимое отклонение  $D_u$  может быть существенно уменьшено. Более того, так как линейная комбинация достаточно большого числа  $R$  случайно выбранных конфигураций  $\{C_{\eta}^{\text{fin}}, \eta = 1, \dots, R\}$  сглаживает пилообразный шум, мера отклонения суммарного спектра  $C_{\text{ref}}^{\text{fin}}$  обычно меньше, чем у каждого из слагаемых.

#### 11.2.4.6. Элементарные обновления класса I.

1. *Сдвиг прямоугольника.* Процедура изменяет положение центра  $c_t$  случайно выбранного прямоугольника  $t$ . Непрерывным параметром оптимизации (11.169)–(11.171) является центр прямоугольника  $\xi = c_t$ , который ограничен областью определения  $\Omega_{c_t} = \left[ \omega_{\min} + \frac{w_t}{2}, \omega_{\max} - \frac{w_t}{2} \right]$ .
2. *Изменение ширины без изменения веса.* Процедура изменяет ширину  $w_t$  случайно выбранного прямоугольника  $t$  без изменения его веса ( $h_t w_t = \text{const}$ ) и центра  $c_t$ . Непрерывным параметром оптимизации является  $\xi = w_t$ , который заключен в диапазоне  $\Omega_{w_t} = [\omega_{\min}, \min\{2(c_t - \omega_{\min}), 2(\omega_{\max} - c_t)\}]$ .
3. *Изменение веса двух прямоугольников.* Процедура изменяет высоты двух прямоугольников  $t$  и  $t^*$  (где прямоугольник  $t$  выбирается случайно, а прямоугольник  $t^*$  выбирается случайно или является ближайшим соседом прямоугольника  $t$ ) без изменения ширин обоих прямоугольников. Непрерывным параметром оптимизации является изменение высоты  $\xi = h_t$  прямоугольника  $t$ . Чтобы ограничить веса выбранных прямоугольников диапазоном  $[S_{\min}, 1]$  и сохранить нормировку суммарного веса (11.159), это обновление предлагает изменить:

$$\begin{aligned} h_t &\rightarrow h_t + \delta\xi, \\ h_{t^*} &\rightarrow h_{t^*} - \delta\xi \frac{w_{t^*}}{w_t}, \end{aligned} \quad (11.176)$$

где  $\delta\xi$  находится в интервале

$$\frac{S_{\min}}{w_t} - h_t < \delta\xi < \left( h_{t^*} - \frac{S_{\min}}{w_{t^*}} \right) \frac{w_t}{w_{t^*}}. \quad (11.177)$$

#### 11.2.4.7. Элементарные обновления класса II.

- Прибавление одного прямоугольника.* Чтобы добавить в конфигурацию новый прямоугольник, необходимо предложить некоторый новый набор  $\{P_{\text{new}}\} = \{h_{\text{new}}, w_{\text{new}}, c_{\text{new}}\}$  и уменьшить вес некоторого другого прямоугольника  $t$  (выбранного случайно или ближайшего), что необходимо для соблюдения условия нормировки (11.159). Уменьшение веса другого прямоугольника достигается за счет уменьшения его высоты  $h_t$ . Центр нового прямоугольника выбирается случайно в соответствии с распределением

$$c_{\text{new}} = \left( \omega_{\min} + \frac{w_{\min}}{2} \right) + (\omega_{\max} - \omega_{\min} - w_{\min}) r, \quad (11.178)$$

где  $r$  — равномерно распределенное на интервале  $[0, 1]$  число.

После того, как положение центра  $c_{\text{new}}$  определено, максимально возможная ширина нового прямоугольника определяется соотношением

$$w_{\text{new}}^{\max} = 2\min(\omega_{\max} - c_{\text{new}}, c_{\text{new}} - \omega_{\min}). \quad (11.179)$$

Непрерывный параметр оптимизации  $\delta\xi = h_{\text{new}}w_{\text{new}}$  генерируется в таких пределах, чтобы веса нового и старого прямоугольника были больше некоторого минимального значения  $S_{\min}$ :

$$\delta\xi = S_{\min} + r(h_t w_t - S_{\min}). \quad (11.180)$$

Затем значение высоты нового прямоугольника  $h_{\text{new}}$  для данного  $\delta\xi$  генерируется так, чтобы ширина нового прямоугольника была заключена в пределах  $[w_{\min}, w_{\text{new}}^{\max}]$ :

$$h_{\text{new}} = \frac{\delta\xi}{w_{\text{new}}^{\max}} + r \left( \frac{\delta\xi}{w_{\min}} - \frac{\delta\xi}{w_{\text{new}}^{\max}} \right). \quad (11.181)$$

- Удаление прямоугольника.* Чтобы удалить случайно выбранный прямоугольник  $t$ , увеличивается высота  $h_{t^*}$  какого-либо другого (случайно выбранного или ближайшего) прямоугольника  $t^*$ , а изменение удовлетворяет условию (11.159). Так как эта процедура не содержит непрерывного параметра оптимизации, удаление прямоугольника  $t$  объединяется с процедурой сдвига измененного прямоугольника  $t^*$ . Далее в качестве предлагаемого обновления выбираются параметры с наименьшей мерой отклонения.
- Расщепление прямоугольников.* Эта процедура обновления расщепляет какой-либо прямоугольник  $t$  на два с некоторыми высотами  $h_t$  и ширинами  $w_{\text{new}_1} = w_{\min} + r(w_t - w_{\min})$  и  $w_{\text{new}_2} = w_t - w_{\text{new}_1}$ . Так как удаление прямоугольника  $t$  и добавление двух новых прямоугольников не изменяет спектральную функцию, вводится новый непрерывный параметр оптимизации  $\delta\xi$ , который определяет сдвиг центра нового прямоугольника с меньшим весом. Второй прямоугольник сдвигается в противоположном направлении, чтобы сохранить центр тяжести двух прямоугольников. Об-

ласть определения параметра оптимизации с очевидностью следует из значений параметров новых прямоугольников.

4. **Объединение двух прямоугольников.** Эта процедура обновления объединяет два (случайно выбранных или ближайших) прямоугольника  $t$  и  $t^*$  в один новый прямоугольник с весом  $h_{\text{new}}w_{\text{new}} = h_t w_t + h_{t^*} w_{t^*}$  и шириной  $w_{\text{new}} = (w_t + w_{t^*})/2$ . Положение первоначального центра нового прямоугольника  $c_{\text{new}}$  соответствует центру тяжести прямоугольников  $t$  и  $t^*$ . Непрерывный параметр оптимизации вводится через процедуру сдвига нового прямоугольника.

**11.2.4.8. Тесты.** Чтобы проверить точность и изучить возможности метода, были проведены тесты на спектральных функциях, которые простираются

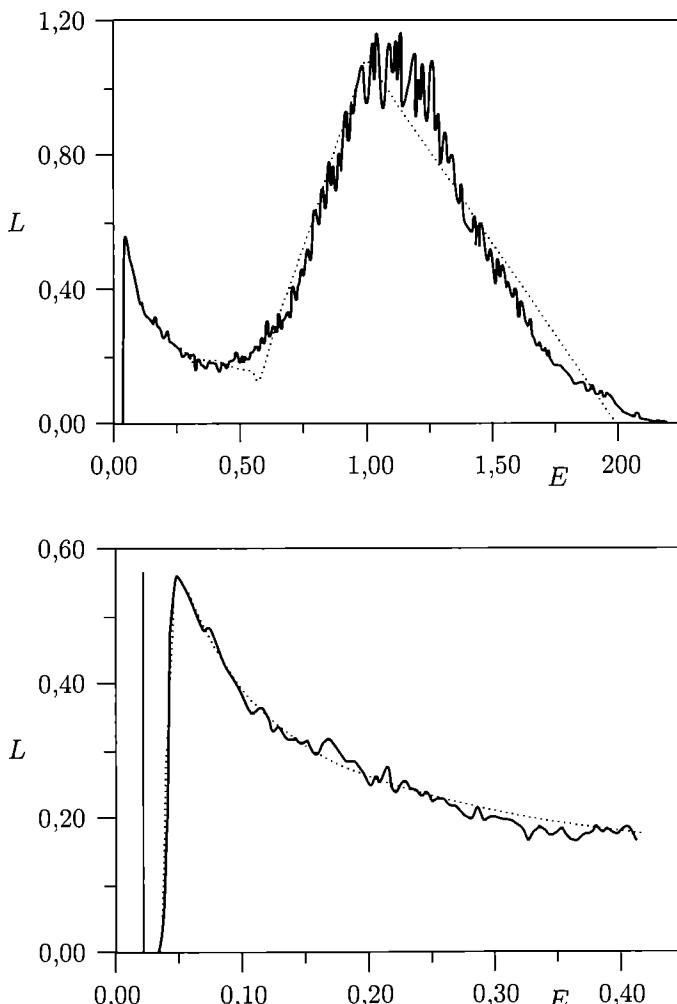


Рис. 11.43. Смоделированная спектральная плотность  $\rho$  (штриховая линия) и результат спектрального анализа  $L$  (сплошная линия). Положение дельта-функции показано только на нижней панели

в большом диапазоне частот и одновременно обладают тонкой структурой в области малых частот. Спектр для теста моделировался в виде суммы дельта-функции (с энергией  $\varepsilon_\delta = 0,03$  и весом  $Z_\delta = 0,07$ ) и непрерывной высокочастотной спектральной плотности, которая начинается с порога  $\varepsilon_{th} = 0,04$ . Пусть непрерывная спектральная часть моделируется достаточно реалистичной для физических моделей зависимостью

$$\rho_{con}(\omega) = \frac{Z_\delta \sqrt{\omega - \varepsilon_{th}}}{2\pi \sqrt{\varepsilon_{gap}} [(\omega - \varepsilon_{th}) + \varepsilon_{gap}]} \quad (11.182)$$

в диапазоне  $\omega \in [\varepsilon_{th}, 0,566]$ , где  $\varepsilon_{gap} = \varepsilon_{th} - \varepsilon_\delta$  является *микрощелью*, и треугольником на высоких частотах (штриховая линия на верхней панели рис. 11.43).

Функция Грина  $G(\tau)$  была рассчитана из модельной спектральной плотности в  $n_{max} = 300$  точках  $\tau_i = \tau_{max} i^2 / n_{max}$  в интервале мнимого време-

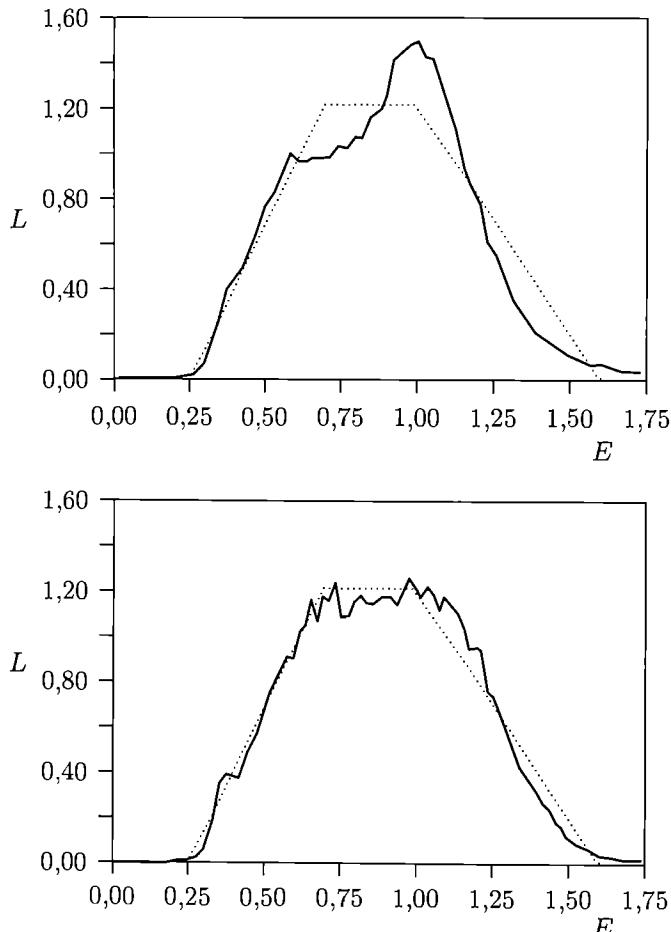


Рис. 11.44. Модельный спектр (штриховые линии) и результаты спектрального анализа (сплошные линии) для  $\eta = 10^{-2}$  (верхняя панель) и  $\eta = 10^{-3}$  (нижняя панель)

ни от нуля до  $\tau_{\max} = 1000$ . Восстановленная спектральным анализом плотность воспроизводит как общие черты высокочастотной части (верхняя панель на рис. 11.43), так и тонкую структуру на низких частотах (нижняя панель на рис. 11.43). Энергия и вес дельта-функции были восстановлены с относительной точностью  $10^{-4}$ . Конечное решение было получено усреднением (11.161)  $M = 1110$  частных решений.

Так как функция Грина, полученная методом Монте-Карло, содержит статистические ошибки в каждой точке, максимальное значение параметра статистической ошибки  $\eta$  ограничивает точность восстановления спектральной функции. Для изучения влияния некоррелированных статистических ошибок была проверена стабильность метода по отношению к стохастическому шуму

$$G(\tau_i) \rightarrow G(\tau_i)(1 + \eta r_i), \quad i = 1, \dots, n_{\max}, \quad (11.183)$$

который вводился при помощи генератора случайных чисел  $r_i \in [0, 1]$ .

Можно заключить, что метод восстанавливает общие черты спектральной функции (положение и ширину) даже для случая плохой статистики с  $\eta = 10^{-2}$  (верхняя панель на рис. 11.44), а точность  $\eta = 10^{-3}$  достаточна для восстановления формы (нижняя панель на рис. 11.44)).

### 11.3. Петлевые алгоритмы (Loop algorithms)

Рассмотренные выше дискретные траекторные квантовые алгоритмы МК обладают тремя существенными ограничениями, не позволяющими в полной мере эффективно рассчитывать термодинамические характеристики квантовых систем. Это, во-первых, *сохранение числа частиц* в процессе расчета — алгоритм работает в каноническом ансамбле, поэтому для получения информации о системе с переменным числом частиц (или, что то же самое, для включения в схему химического потенциала) необходимо проводить несколько расчетов с различным числом частиц, а затем объединять их, предварительно «довзвешивая» результаты друг относительно друга в соответствии с вкладом в статистическую сумму. Вторым ограничением является *неэргодичность локальной схемы обновления конфигураций*, т. е. невозможность достижения в процессе алгоритма *любой* возможной конфигурации, особенно проявляющаяся при понижении температуры. Неэргодичность связана с отсутствием в системе конфигураций с ненулевыми *winding numbers*, что приводит к невозможности рассчитывать коллективные свойства системы, например сверхтекучесть или сверхпроводимость, напрямую зависящих от этого параметра. И, наконец, третьим недостатком алгоритма является *локальность схемы расчета*, не позволяющая рассчитывать нелокальные корреляторы; для их расчета приходится вводить дополнительные временные срезы, допускающие разрывы траекторий, но резко ухудшающие сходимость метода.

Эти проблемы удалось решить, оставаясь в схеме шахматной доски, с помощью подходов к обновлению траекторий, а именно, с помощью новых *петлевых алгоритмов* [105, 106, 178].

Развитые для фермионной [106] и спиновой [105, 178] статистик петлевые алгоритмы позволили выйти за рамки традиционных возможностей траекторных методов, используя нелокальные изменения траекторий. В этом

разделе будут рассмотрены особенности наиболее наглядного фермионного варианта петлевого алгоритма (см. [106]), опирающегося на традиционную схему шахматной доски в фазовом пространстве.

Пусть на одномерной периодической цепочке атомов находятся носители заряда — фермионы, и система описывается следующей моделью Хаббарда:

$$H = \sum_i H_{i,i+1} = \sum_i (K_{i,i+1} + \frac{1}{2}(V_i + V_{i+1})), \quad (11.184)$$

где

$$K_{i,i+1} = -t \sum_{\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{i+1,\sigma}^- + a_{i+1,\sigma}^+ a_{i\sigma}^-), \quad (11.185)$$

$$V_i = \sum_{\sigma} \left[ \frac{1}{2} U \left( n_{i\sigma} - \frac{1}{2} \right) \left( n_{i,-\sigma} - \frac{1}{2} \right) - \mu \left( n_{i\sigma} - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (11.186)$$

Взаимодействующая, диагональная часть гамильтониана выбрана так, что при нулевом химическом потенциале  $\mu$  имеет место электрон-дырочная симметрия в модели. В этом случае реализуется половинное заполнение системы, когда число электронов со спином вверх совпадает с числом электронов со спином вниз, а суммарное число частиц равно числу узлов  $N$ .

Далее реализуется стандартная схема разложения Судзуки–Троттера:

$$Z = \sum_{s_1, \dots, s_{2L}} \langle s_1 | e^{-\Delta\tau H_2} | s_{2L} \rangle \dots \langle s_3 | e^{-\Delta\tau H_2} | s_2 \rangle \langle s_2 | e^{-\Delta\tau H_1} | s_1 \rangle \quad (11.187)$$

с разбиением на четные и нечетные связи, обозначенные индексами 1 и 2. Здесь  $\{s_i\} = s_1, \dots, s_{2L}$  — полный набор состояний;  $H = H_1 + H_2$ ;  $\beta = \Delta\tau L$ . Введем обозначение  $\mathcal{C} \equiv \{s_i\}$  для совокупности всех степеней свободы системы. Тогда вероятность распределения мгновенного состояния в конфигурационном пространстве имеет вид

$$P(\mathcal{C}) = \frac{\langle s_1 | e^{-\Delta\tau H_2} | s_{2L} \rangle \dots \langle s_3 | e^{-\Delta\tau H_2} | s_2 \rangle \langle s_2 | e^{-\Delta\tau H_1} | s_1 \rangle}{Z} \equiv \frac{W(\mathcal{C})}{Z}. \quad (11.188)$$

Вероятность перехода из конфигурации  $\mathcal{C}_0$  в конфигурацию  $\mathcal{C}'_0$  можно задать, например, при помощи алгоритма тепловой ванны:

$$R = \frac{P(\mathcal{C}'_0)}{P(\mathcal{C}_0) + P(\mathcal{C}'_0)} = \frac{W(\mathcal{C}'_0)}{W(\mathcal{C}_0) + W(\mathcal{C}'_0)}. \quad (11.189)$$

Полный набор волновых функций в представлении узельных чисел заполнения выглядит так:

$$|s\rangle = |n_{1\uparrow} n_{2\uparrow} \dots n_{N\uparrow}\rangle |n_{1\downarrow} n_{2\downarrow} \dots n_{N\downarrow}\rangle. \quad (11.190)$$

Далее фазовое пространство стандартно представляется в виде «шахматной доски». На рис. 11.45 показано графическое представление получающихся фазовых траекторий для одной проекции спина.

Изменение траекторий возможно только в заштрихованных квадратах, состояние которых определяется двухузельными операторами эволюции

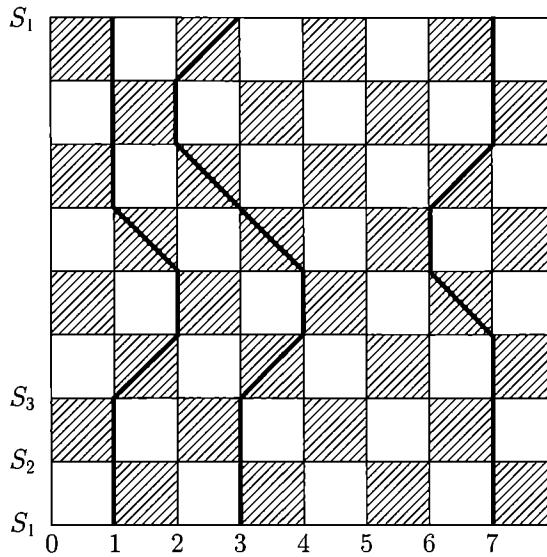


Рис. 11.45. Представление шахматной доски для одной проекции спина. Состояние  $|S_2\rangle$ , например, соответствует конфигурации  $|01010001\rangle$

$\langle n_{il} n_{i+1,l} | e^{-\Delta\tau H} | n_{i,l+1} n_{i+1,l+1} \rangle$ ,  $i = 1, \dots, N_a$ ,  $l = 1, \dots, L$ . В итоге выражение для статистической суммы можно представить следующим образом:

$$Z = \sum_{\{n_{il}^\sigma\}} \text{sgn}(\{n_{il}^\sigma\}) W(\{n_{il}^\sigma\}), \quad (11.191)$$

$$W(\{n_{il}^\sigma\}) = \prod_{l=1}^L \prod_{i=1}^{N/2} w \begin{pmatrix} n_{2i-1,2l}^\uparrow & n_{2i,2l}^\uparrow & | & n_{2i-1,2l}^\downarrow & n_{2i,2l}^\downarrow \\ n_{2i-1,2l-1}^\uparrow & n_{2i,2l-1}^\uparrow & | & n_{2i-1,2l-1}^\downarrow & n_{2i,2l-1}^\downarrow \end{pmatrix} \times \\ \times w \begin{pmatrix} n_{2i,2l+1}^\uparrow & n_{2i+1,2l+1}^\uparrow & | & n_{2i,2l+1}^\downarrow & n_{2i+1,2l+1}^\downarrow \\ n_{2i,2l}^\uparrow & n_{2i+1,2l}^\uparrow & | & n_{2i,2l}^\downarrow & n_{2i+1,2l}^\downarrow \end{pmatrix}. \quad (11.192)$$

Аргументы статистических весов в правой части (11.192) записаны с учетом схемы шахматной доски. Если теперь

$$e^{-\Delta\tau H_{i,i+1}} \approx e^{-\Delta\tau(V_i + V_{i+1})/4} e^{-\Delta\tau K_{i,i+1}} e^{-\Delta\tau(V_i + V_{i+1})/4}, \quad (11.193)$$

то статистические веса можно рассчитать аналитически:

$$w \begin{pmatrix} n_1^\uparrow & n_2^\uparrow & | & n_1^\downarrow & n_2^\downarrow \\ n_3^\uparrow & n_4^\uparrow & | & n_3^\downarrow & n_4^\downarrow \end{pmatrix} = \\ = u \begin{pmatrix} n_1^\uparrow & n_2^\uparrow \\ n_3^\uparrow & n_4^\uparrow \end{pmatrix} u \begin{pmatrix} n_1^\downarrow & n_2^\downarrow \\ n_3^\downarrow & n_4^\downarrow \end{pmatrix} v \begin{pmatrix} n_1^\uparrow & n_2^\uparrow & | & n_1^\downarrow & n_2^\downarrow \\ n_3^\uparrow & n_4^\uparrow & | & n_3^\downarrow & n_4^\downarrow \end{pmatrix}; \quad (11.194)$$

$$u \begin{pmatrix} n_1^\uparrow & n_2^\uparrow \\ n_3^\uparrow & n_4^\uparrow \end{pmatrix} = \delta_{n_1 n_2} \delta_{n_3 n_4} \delta_{n_1 n_3} + \operatorname{ch}(\Delta \tau t) \delta_{n_1, 1-n_2} \delta_{n_3, 1-n_4} \delta_{n_1 n_3} + \operatorname{sh}(\Delta \tau t) \delta_{n_1, 1-n_2} \delta_{n_3, 1-n_4} \delta_{n_1, 1-n_3}, \quad (11.195)$$

$$v \begin{pmatrix} n_1^\uparrow & n_2^\uparrow \\ n_3^\uparrow & n_4^\uparrow \end{pmatrix} \Big| \begin{pmatrix} n_1^\downarrow & n_2^\downarrow \\ n_3^\downarrow & n_4^\downarrow \end{pmatrix} = \prod_{i=1}^4 v_i(n_i^\uparrow, n_i^\downarrow), \quad (11.196)$$

$$v_i(n, n') = e^{-(\Delta \tau / 4) [U(n - \frac{1}{2}) (n' - \frac{1}{2}) - \mu(n + n' - 1)]}. \quad (11.197)$$

Алгоритм *loop-flip*, предложенный в работе [106], позволяет перейти от локальных изменений мгновенных конфигураций к глобальным. Из выражений (11.194)–(11.197) видно, что только шесть из всех  $2^4 = 16$  двухузельных матричных элементов — ненулевые; они показаны на рис. 11.46.

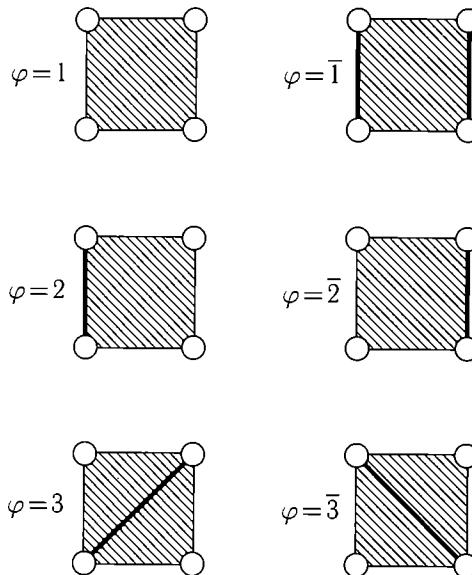


Рис. 11.46. Ненулевые матричные элементы в (11.194) — (11.197). Слева от каждого элемента показано его обозначение согласно работе [106]

Введем переменную  $\varphi_b \equiv (\varphi_b^\uparrow, \varphi_b^\downarrow)$ , при этом каждая из переменных  $\varphi_b^\uparrow$  и  $\varphi_b^\downarrow$  принимает шесть возможных значений, относящихся к состояниям ненулевых матричных элементов (эти значения показаны на рис. 11.46 и в (11.194)–(11.197)). Тогда статистический вес конфигурации можно переписать так:

$$W(C) = \prod_b w(\varphi_b), \quad (11.198)$$

$$w(\varphi_b) = u(\varphi_b^\downarrow) u(\varphi_b^\uparrow) v(\varphi_b^\downarrow, \varphi_b^\uparrow). \quad (11.199)$$

Следующий шаг очень важен, так как он вводит понятие *фиктивных* или *виртуальных* состояний в схеме МК. Предположим, что состояния,

показанные на рис. 11.46, можно перевести в некоторые виртуальные состояния  $\psi_b \equiv (\psi_b^\uparrow, \psi_b^\downarrow)$ . Пусть каждая из переменных  $\psi_b^\uparrow, \psi_b^\downarrow$  может принимать значения 1, 2, 3; состояния, соответствующие этим значениям, показаны на рис. 11.47. Введем также вероятности переходов из реальных состояний в виртуальные  $p(\psi_b | \varphi_b)$  с учетом детального баланса и нормировки:

$$\sum_{\psi_b} p(\psi_b | \varphi_b) = 1. \quad (11.200)$$

$\varphi_b$	$\psi_b$	1	2	3
1		0	$P_1$	$1 - P_1$
$\bar{1}$		0	$P_1$	$1 - P_1$
2		$1 - P_2$	0	$P_2$
$\bar{2}$		$1 - P_2$	0	$P_2$
3		$P_3$	$1 - P_3$	0
$\bar{3}$		$P_3$	$1 - P_3$	0

Рис. 11.47. Вероятности переходов между реальными и виртуальными состояниями (петлевые сегменты). Показаны индексы состояний  $b$

Новые веса МК-конфигураций с учетом виртуальных состояний можно записать следующим образом:

$$\tilde{w}_{\psi_b}(\varphi_b) = c_{\psi_b} w(\varphi_b) p(\psi_b | \varphi_b), \quad (11.201)$$

где  $c_{\psi_b}$  — нормировочная константа, определяемая с учетом (11.200). Именно эти статистические веса следует использовать теперь в процедуре МК. После определения  $\tilde{w}_{\psi_b}(\varphi_b)$  вероятности  $p(\psi_b | \varphi_b)$  рассчитываются из (11.200)

и (11.201). Чтобы показать это, перепишем (11.201) в виде

$$\tilde{w}_{\psi_b}(\varphi_b) = \tilde{u}_{\psi_b^\uparrow}(\varphi_b^\uparrow)\tilde{u}_{\psi_b^\downarrow}(\varphi_b^\downarrow)v(\varphi_b^\uparrow, \varphi_b^\downarrow), \quad (11.202)$$

при этом  $v(\varphi_b^\uparrow, \varphi_b^\downarrow)$  определяется аналогично (11.199), а

$$\tilde{u}_x(y) = \begin{cases} 0, & \text{если } x = y \text{ или } x = \bar{y}, \\ 1, & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (11.203)$$

Вероятности виртуальных переходов могут быть записаны в виде

$$p(\psi_b | \varphi_b) = p_p\left(\psi_b^\uparrow \mid \varphi_b^\downarrow\right)p_p\left(\psi_b^\downarrow \mid \varphi_b^\uparrow\right), \quad (11.204)$$

откуда для каждой проекции спина получим

$$\begin{aligned} p_p(2 | 1) &= 1 - p_p(3 | 1) = p_p(2 | \bar{1}) = 1 - p_p(3 | \bar{1}) = P_1; \\ p_p(3 | 2) &= 1 - p_p(1 | 2) = p_p(3 | \bar{2}) = 1 - p_p(1 | \bar{2}) = P_2; \\ p_p(1 | 3) &= 1 - p_p(2 | 3) = p_p(1 | \bar{3}) = 1 - p_p(2 | \bar{3}) = P_3; \end{aligned} \quad (11.205)$$

$$P_1 = \frac{1}{2}(1 - e^{-\Delta\tau t}); \quad P_2 = \frac{1 + e^{\Delta\tau t}}{1 + e^{2\Delta\tau t}}; \quad P_3 = \frac{1 - e^{\Delta\tau t}}{1 - e^{-2\Delta\tau t}}. \quad (11.206)$$

Петли, используемые в алгоритме для генерации новых конфигураций, конструируются следующим образом. Пусть, например, имеется конфигурация, показанная на рис. 11.48, а. Каждый из заштрихованных квадратов заменим одним из возможных виртуальных состояний в соответствии с рис. 11.47.

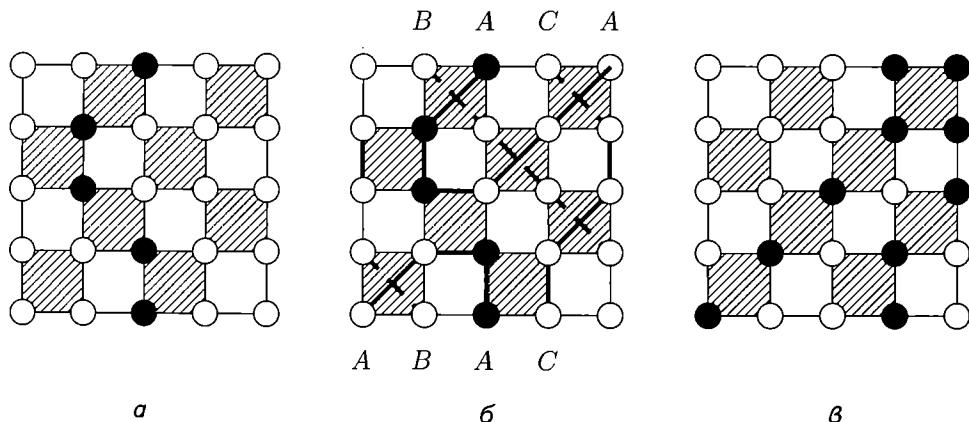


Рис. 11.48. Конструирование петель и обновление конфигурации;  $N = 2$ ,  $L = 4$

Один из возможных вариантов картины виртуальных состояний представлен на рис. 11.48, б. Видно, что на шахматной доске формируются пересекающиеся петли; некоторые из них опоясывают часть системы, а некоторые полностью перекрывают ее. Следующий шаг — переключение петель (*flip*), за-

ключающийся в замене электронов на дырки и, наоборот, по всему периметру петли. Вероятность переключения петель согласно (11.204)–(11.206) равна

$$R = \frac{1}{1 + e^{-\Delta\tau D}}, \quad (11.207)$$

где

$$D = \frac{U}{2} (2M - L) - \frac{\mu}{2} (2N - L). \quad (11.208)$$

Здесь  $N$  — полное число частиц в петле,  $M$  — число узлов в петле с заполнением 0 или 2,  $L$  — общая длина петли. Следует заметить, что переключение одной петли может повлечь изменение величины  $D$  для других петель, поэтому в алгоритме проводятся последовательные попытки переключения всех имеющихся петель. После переключения петли можно вернуться к стандартной реальной фазовой картине мировых линий (рис. 11.48,  $\beta$ ).

Переключением петель в системе можно менять как число частиц, так и winding numbers. Схема становится эргодической; скорость сходимости алгоритма резко возрастает по сравнению со стандартной схемой мировых линий за счет глобальных, а не локальных обновлений траекторий. За конечное число шагов с переключением петель в виртуальном представлении можно перейти от одной реальной фазовой конфигурации к любой другой, в том числе и с другим числом частиц, и с другим  $W$ .

Описанный вариант петлевого алгоритма имеет некоторое замедление сходимости при больших величинах параметра взаимодействия  $U$  и малых температурах. А именно, петлю для одной проекции спина трудно переключить из-за сильной связи с петлей, относящейся к другой проекции. Также возникают сложности при переходе в состояние с другим числом частиц, так как этот процесс подавляется членом с химическим потенциалом в гамильтониане. Для преодоления этих проблем и повышения сходимости в [106] предложен и другой, модифицированный петлевой алгоритм. Основным отличием его от предыдущей схемы является добавление наряду со старыми новых процессов обновления траекторий, в которых две петли, относящиеся к разным проекциям спина, но имеющие близкую форму, переключаются одновременно. В этом варианте все 36 возможных ненулевых матричных элементов для обеих проекций спина преобразуются в виртуальные (рис. 11.49). Правила следующие: при наложении заштрихованных квадратов со стандартными мировыми линиями от разных проекций при переходе в виртуальные состояния исключаются линии, соединяющие узлы с двойным заполнением. Также виртуальными линиями соединяются углы квадрата, в которых заканчивается только одна мировая линия (для одной проекции спина).

Особый случай — шесть последних состояний, показанных на рис. 11.49 внизу, для которых эти правила приводят к неоднозначности. В терминах  $(\psi_b^\uparrow, \psi_b^\downarrow)$  эти состояния соответствуют  $(2, \bar{2})$  и  $(\bar{2}, 2)$ . Каждое из них может быть представлено виртуальными состояниями, отмеченными на рис. 11.49 метками 1 и 2 (справа внизу). Определим их модифицированные веса равными:

$$\tilde{w}_1 [(2, \bar{2})] = \tilde{w}_1 [(\bar{2}, 2)] = \tilde{w}_2 [(2, \bar{2})] = \tilde{w}_2 [(\bar{2}, 2)] = 1. \quad (11.209)$$

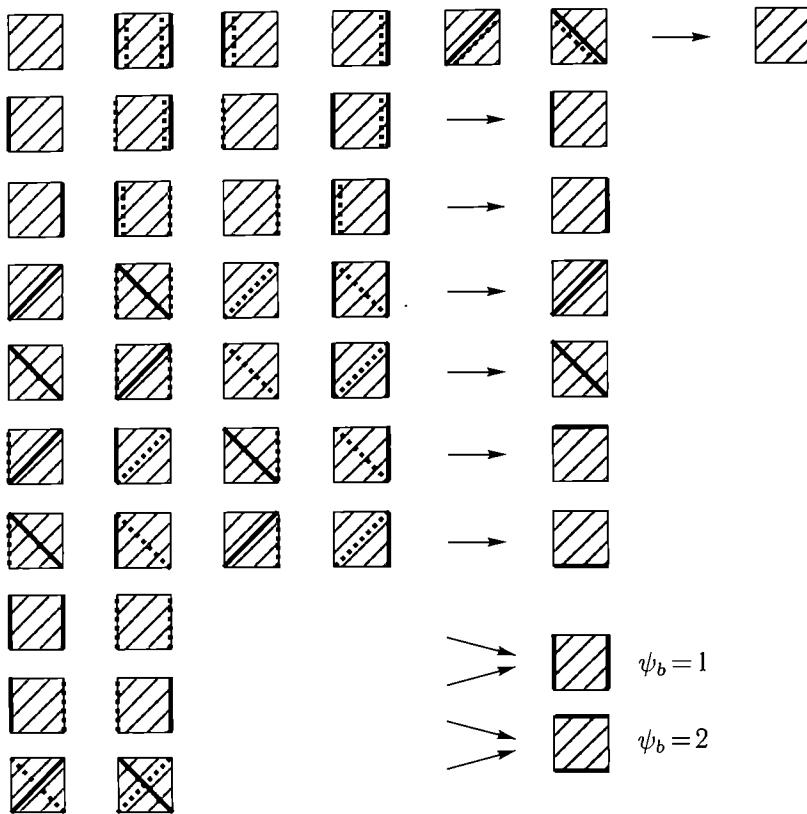


Рис. 11.49. Соответствие между реальными состояниями и петлевыми сегментами в модифицированном алгоритме. Сплошные линии в реальных состояниях соответствуют проекции спина вверх, штриховые — вниз

Все остальные веса  $\tilde{w}_i$  с взаимоисключающими внутренними индексами  $(1, \bar{1})$ ,  $(2, \bar{2})$ ,  $(3, \bar{3})$  и с индексом  $i$ , не равным 1 или 2, положим равными нулю. Остальные модифицированные веса процессов, показанных на рис. 11.49, положим равными 1.

Определив матрицу переходов из реальных в виртуальные состояния, можно реализовать модифицированный петлевой алгоритм.

Окончательно, вероятности для рассмотренных выше переходов:

$$p[1|(2, \bar{2})] = p[1|(\bar{2}, 2)] = 1 - \text{th}^2 \Delta \tau t, \quad (11.210)$$

$$p[2|(2, \bar{2})] = p[2|(\bar{2}, 2)] = \text{th}^2 \Delta \tau t. \quad (11.211)$$

Остальные вероятности равны либо единице, либо нулю, как описано выше.

Пример обновления траекторий в рамках описанной модификации петлевого алгоритма показан на рис. 11.50.

На практике комбинируют различные варианты локальных траекторных и петлевых алгоритмов для достижения эффективной сходимости.

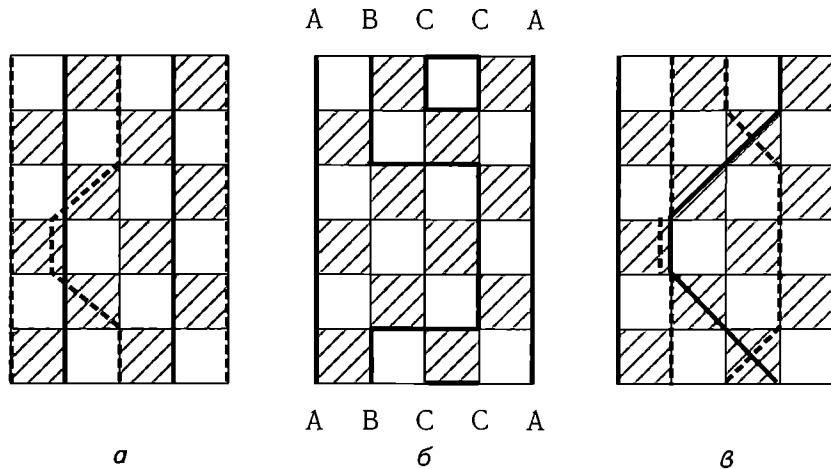
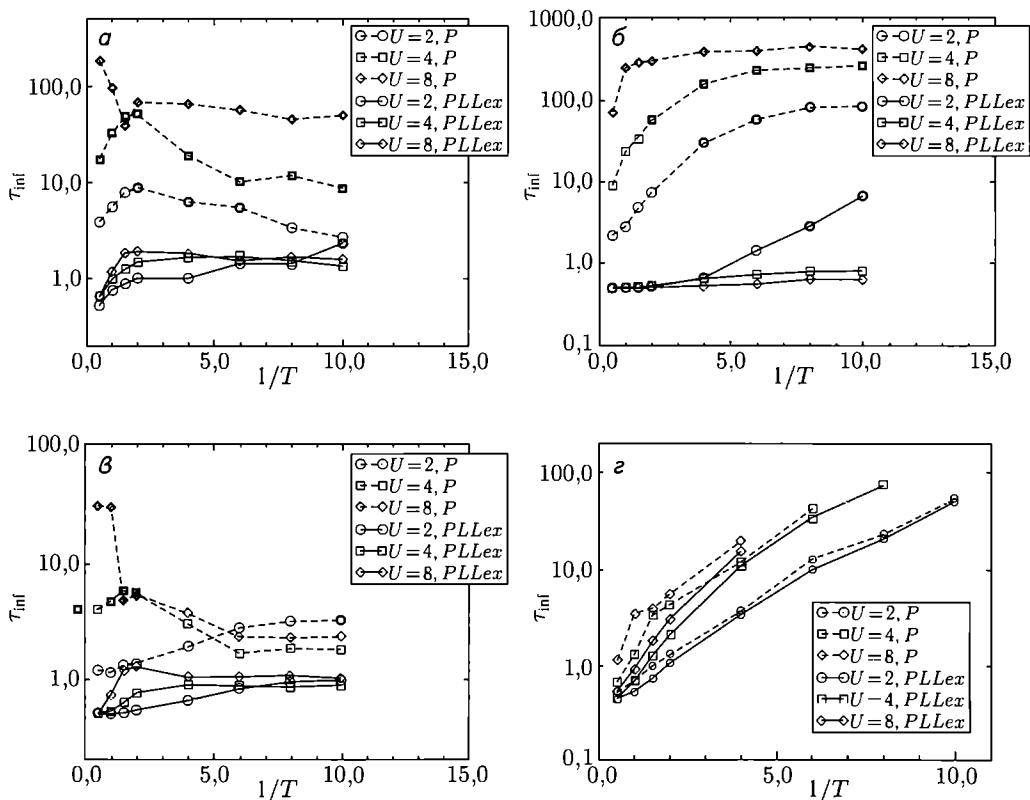

 Рис. 11.50. Пример обновления петель для  $N = 4$ ,  $L = 3$ 


Рис. 11.51. Автокорреляционные времена из [106] для энергии (а), волны спиновой плотности (б), волны зарядовой плотности (в) и числа частиц (г)

В заключение раздела, ниже представлены сравнительные данные по расчету автокорреляционного времени для различных физических характеристик системы (рис. 11.51). Рассчитывались энергия системы  $\langle H \rangle$ , число частиц

$$n = \frac{1}{\beta N} \int_0^\beta \sum_j \langle (n_{j\uparrow}(\tau) + n_{j\downarrow}(\tau)) \rangle d\tau, \quad (11.212)$$

а также корреляционная функция, отвечающая за волну спиновой плотности (SDW) и волну зарядовой плотности (CDW)

$$T\chi_\pm(q) = \frac{1}{\beta N} \int_0^\beta \sum_{jk} e^{iqk} \langle (n_{j+k,\uparrow}(\tau) \pm n_{j+k,\downarrow}(\tau)) (n_{j\uparrow}(0) \pm n_{j\downarrow}(0)) \rangle d\tau. \quad (11.213)$$

Сопоставлены обычный (P) локальный траекторный алгоритм и комбинированный петлевой (PLLex) алгоритмы. Видно, что эффективность комбинированного алгоритма примерно на порядок выше обычного траекторного метода для достаточно широкого интервала параметров модели.

#### 11.4. Метод континуального интегрирования (Path integral Monte Carlo)

В 1984 г. Ceperley и Pollock [179] предложили абсолютно новый подход к расчету квантовых систем — в рамках дискретного по мнимому времени метода МК было предложено напрямую суммировать диаграммы Фейнмана, т. е. интегралы по траекториям; в англоязычной литературе метод называется PIMC (Path integral Monte Carlo). С помощью этого алгоритма удалось смоделировать фазовый переход в сверхтекучее состояние в  ${}^4\text{He}$  [102, 103, 180], исследовать фазовые состояния пленки  ${}^4\text{He}$  [104, 181, 182], определить зависимость критической температуры в трехмерном бозе-газе как функцию взаимодействия [73], рассчитать фазовый переход гелия из жидкой в твердую fazu [179] и многое другое. Главное, что позволяет данный подход — возможность расчета систем с произвольным дальнодействующим парным потенциалом, что в обычных траекторных или детерминантных методах МК, рассмотренных выше для короткодействующего потенциала, приводит к проблеме знака и невозможности быстрого обновления конфигураций.

Основной идеей данного подхода является использование статистического оператора в диагональном по кинетической энергии представлении; члены гамильтониана, описывающие взаимодействие, раскладываются при этом в асимптотический ряд, который и суммируется. Удобный базис, в котором происходит расчет, — базис в представлении *матрицы плотности*, которая кратко рассматривалась ранее при обсуждении статистических свойств квантовых систем и выводе уравнения Лиувилля.

Для дальнейшего изложения необходимо подробнее рассмотреть основные свойства матрицы плотности, а также привести краткие сведения об интегралах по траекториям, следуя Фейнману [183, 184].

### 11.4.1. Матрица плотности и интегралы по траекториям.

**11.4.1.1. Определения и свойства.** Пусть система состоит из двух частей и описывается волновой функцией  $\psi(x, q)$ , зависящей от квантовых чисел одной части системы  $x$  и квантовых чисел другой части системы (термостата, большей части системы и т. п.)  $q$ . Неполное описание первой части системы заключается в интегрировании по термостату, и по определению *матрица плотности* имеет вид

$$\rho(x, x', \beta) = \int \psi^*(x, q) \psi(x', q) dq. \quad (11.214)$$

В частном случае узельного представления недиагональная матрица плотности может быть представлена в виде

$$\rho_{ij} = \langle a_i a_j^+ \rangle. \quad (11.215)$$

Любое среднее от оператора  $A$  рассчитывается с помощью матрицы плотности следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle A(x) \rangle &= \int \psi(x, q) A(x) \psi^*(x', q) |_{x=x'} dx dq = \\ &= \int A(x') dx \int \psi(x, q) \psi^*(x', q) |_{x=x'} dq = \int A(x') \rho(x, x') |_{x=x'} dq. \end{aligned} \quad (11.216)$$

В частности, если  $A$  — оператор координаты, то

$$\langle x \rangle = \int x \rho(x, x) dx; \quad (11.217)$$

для оператора импульса имеем

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \left\langle \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right\rangle = \left\langle \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x' - x) \right\rangle = \\ &= \int \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x' - x) \rho(x, x') dx dx' = \\ &= - \int \frac{\hbar}{i} \delta(x' - x) \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, x') dx dx' = - \frac{\hbar}{i} \int \left[ \frac{\partial}{\partial x} \rho(x, x') \right]_{x=x'} dx. \end{aligned} \quad (11.218)$$

Рассмотрим подробнее статистические свойства матрицы плотности.

Пусть система описывается полным набором состояний  $\varphi_n(x) \equiv |n\rangle$ , не обязательно заданных в собственно-энергетическом представлении. Определим оператор  $\rho$  в базисе  $\varphi_n$ :

$$\rho_{ii'} = \langle \varphi_{i'} | \rho | \varphi_i \rangle, \quad (11.219)$$

при этом оператор  $\rho$  действует только на переменные  $x$ , описывающие систему. Тогда для произвольного оператора  $A$ , отвечающего некоторой физической величине, с учетом свойства полноты

$$\sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = 1, \quad (11.220)$$

имеем

$$\begin{aligned} \langle \psi | A | \psi \rangle &= \sum_i \left\langle \varphi_i \left| A \sum_{i'} \right| \varphi_{i'} \right\rangle \langle \varphi_{i'} | \rho | \varphi_i \rangle = \\ &= \sum_i \langle \varphi_i | A \rho | \varphi_i \rangle = \text{Tr}(\rho A). \end{aligned} \quad (11.221)$$

Из (11.221) следует, что любое термодинамическое среднее может быть рассчитано через след произведения матрицы плотности и оператора, отвечающего измеряемой физической величине, что совпадает с (11.216).

Оператор  $\rho$  эрмитов, следовательно, он может быть диагонализован, при этом его собственные значения  $w_i$  будут действительны, а собственные векторы  $|i\rangle$  образуют полный ортонормированный набор:

$$\rho = \sum_i w_i |i\rangle \langle i|. \quad (11.222)$$

Если взять в качестве оператора  $A$  в (11.221) единичный оператор, то

$$\sum_i w_i = \text{Tr} \rho = \langle A \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1; \quad (11.223)$$

если положить  $A = |i'\rangle \langle i'|$ , то получим

$$\begin{aligned} w_{i'} &= \text{Tr}(\rho A) = \langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \\ &= \sum_j (\langle \psi | i' \rangle |j\rangle) (\langle j | i' | \psi \rangle) = \sum_j |\langle i' | \langle j | \psi \rangle|^2. \end{aligned} \quad (11.224)$$

Из (11.224) следует, что

$$w_i \geq 0, \quad \sum_i w_i = 1. \quad (11.225)$$

Таким образом, можно сделать следующее утверждение: любая система описывается матрицей плотности  $\rho = \sum_i w_i |i\rangle \langle i|$ , при этом:

- 1) векторы  $|i\rangle$  образуют полный ортонормированный набор;
  - 2)  $w_i \geq 0$ ;
  - 3)  $\sum_i w_i = 1$ ;
  - 4) среднее значение оператора  $A$  определяется по формуле  $\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A)$ .
- Преобразуем последнее выражение для среднего:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \text{Tr}(\rho A) = \sum_j \langle j | \rho A | j \rangle = \sum_{ij} w_i \langle j | i \rangle \langle i | A | j \rangle = \\ &= \sum_i w_i \langle i | A | i \rangle. \end{aligned} \quad (11.226)$$

Поскольку матричный элемент  $\langle i | A | i \rangle$  представляет собой среднее значение оператора  $A$  в состоянии  $|i\rangle$ , то величины  $w_i$  можно интерпретировать как вероятности того, что система находится в состоянии  $|i\rangle$ . Если все  $w_i$ , кроме

одного, равны нулю, то система находится в чистом состоянии, в противном случае она находится в смешанном состоянии. Если система находится в чистом состоянии  $|i_p\rangle$ , матрицу плотности можно представить в виде

$$\rho = |i_p\rangle \langle i_p|, \\ \rho_{ij} = \langle \varphi_i | \rho | \varphi_j \rangle = \langle \varphi_i | i_p \rangle \langle i_p | \varphi_j \rangle = \langle \varphi_i | i_p \rangle \langle \varphi_j | i_p \rangle^*. \quad (11.227)$$

В общем случае

$$\rho_{ij} = \sum_k w_k \langle \varphi_i | k \rangle \langle \varphi_j | k \rangle^*. \quad (11.228)$$

Если система может быть описана в координатном представлении, то

$$\rho(x', x) = \langle x' | \rho | x \rangle = \sum_i w_i \langle x' | i \rangle \langle i | x \rangle = \sum_i w_i i(x') i^*(x); \quad (11.229)$$

в частном случае координатного представления (11.229) примет вид

$$\rho(x', x) = i(x') i^*(x) \quad (11.230)$$

и, соответственно,

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A) = \int \langle x | \rho A | x \rangle dx. \quad (11.231)$$

Итак, матрица плотности может быть записана в виде

$$\rho = \sum_i w_i |i\rangle \langle i|, \quad (11.232)$$

если система с вероятностью  $w_i$  находится в состоянии  $|i\rangle$ . Если состояния  $|i\rangle$  зависят от времени, то

$$\rho(t) = \sum_i w_i |i(t)\rangle \langle i(t)|. \quad (11.233)$$

Если теперь  $|n\rangle$  — собственные функции гамильтониана, то  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$  и

$$|i(t)\rangle = \sum_n |n\rangle e^{-iE_n t} \langle n | i(0) \rangle \quad (11.234)$$

(для удобства здесь использована система единиц, в которой  $\hbar = 1$ ), или

$$|i(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |i(0)\rangle. \quad (11.235)$$

Подставив (11.235) в (11.233), получим

$$\rho(t) = e^{-i\hat{H}t} \rho(0) e^{i\hat{H}t}, \quad (11.236)$$

а проинтегрировав (11.236) по времени, получим уравнение Лиувилля:

$$\dot{\rho} = -i(H\rho - \rho H). \quad (11.237)$$

Вероятность нахождения системы в одном из собственных состояний гамильтониана  $|n\rangle$ :

$$w_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}, \quad (11.238)$$

поэтому

$$\rho = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} |n\rangle \langle n|. \quad (11.239)$$

Поскольку  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ , то (11.239) можно записать в виде

$$\rho = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta H} |n\rangle \langle n| = \frac{e^{-\beta H}}{Z}, \quad (11.240)$$

причем

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = \text{Tr}(e^{-\beta H}). \quad (11.241)$$

Из (11.221) и (11.241) следует, что, например, средняя энергия системы может быть вычислена по формуле:

$$\langle H \rangle = \frac{\text{Tr}(H e^{-\beta H})}{\text{Tr}(e^{-\beta H})}. \quad (11.242)$$

**11.4.1.2. Уравнение для матрицы плотности.** Рассмотрим теперь матрицу плотности как функцию параметра  $\beta$ :

$$\rho(\beta) = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr}(e^{-\beta H})}. \quad (11.243)$$

В энергетическом представлении матрицу плотности можно записать в виде

$$\rho_{ij} = \delta_{ij} e^{-\beta E_i}; \quad (11.244)$$

продифференцировав (11.244), получим

$$-\frac{\partial \rho_{ij}}{\partial \beta} = \delta_{ij} E_i e^{-\beta E_i} = E_i \rho_{ij}, \quad (11.245)$$

откуда следует, что матрица плотности удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$-\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = H \rho; \quad (11.246)$$

начальное условие для уравнения (11.246) имеет вид

$$\rho(0) = 1. \quad (11.247)$$

Уравнение (11.246) может быть записано в координатном представлении:

$$-\frac{\partial \rho(x, x'; \beta)}{\partial \beta} = H_x \rho(x, x'; \beta), \quad (11.248)$$

где индекс у гамильтониана указывает на то, что он действует только на переменную  $x$ . Соответственно, начальное условие примет вид

$$\rho(x, x'; 0) = \delta(x - x'). \quad (11.249)$$

**11.4.1.3. Матрица плотности для свободной частицы.** Гамильтониан свободной частицы имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right), \quad (11.250)$$

а дифференциальное уравнение согласно (11.248) запишется следующим образом:

$$-\frac{\partial \rho(x, x'; \beta)}{\partial \beta} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, x'; \beta). \quad (11.251)$$

Выражение (11.251) является уравнением диффузии, его решением является

$$\rho(x, x'; \beta) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta}} \exp\left(-\left(\frac{m}{2\hbar^2\beta}\right)(x - x')^2\right), \quad (11.252)$$

численный множитель в (11.252) выбран таким образом, чтобы выполнялось граничное условие (11.249).

Решение (11.252) называется *свободным пропагатором* частицы, описывающим движение частицы без внешних полей и взаимодействий. Более общий вид уравнения (11.252):

$$\rho(x, x'; \tau, \tau') = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2(\tau - \tau')}} \exp\left(-\left(\frac{m}{2\hbar^2(\tau - \tau')}\right)(x - x')^2\right). \quad (11.253)$$

Обозначим решение (11.253)  $\rho(x, x'; \tau, \tau') \equiv K(x - x', \tau - \tau')$ . Прямой подстановкой можно доказать следующее важное свойство свободного пропагатора для пространства любой мерности:

$$K(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1; \tau_3 - \tau_1) = \int K^*(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1; \tau_3 - \tau_1) K(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1; \tau_3 - \tau_1) d\mathbf{r}_2. \quad (11.254)$$

Это свойство означает, что две линии, показанные на рис. 11.52 и схематично отмечающие фазовую траекторию частицы в фазовом пространстве от точки  $\mathbf{r}_1$  в точку  $\mathbf{r}_3$  через точку  $\mathbf{r}_2$ , можно заменить одной линией, соединяющей начальную и конечную точки  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_3$ .

К этим линиям следует относиться условно, так как указанное свойство означает суммирование по *всем путям* (траекториям), соединяющим начальную и конечную точки, т. е. прямые линии на рисунке — условность, означающая *всю возможную совокупность топологически одинаковых путей* между конкретными точками фазового пространства.

**11.4.1.4. Интегралы по траекториям.** Как было показано, матрица плотности удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\partial \rho(\beta)}{\partial \beta} = H\rho(\beta), \quad (11.255)$$

формальное решение которого имеет вид

$$\rho(\beta) = \frac{e^{-\beta H}}{Z}, \quad (11.256)$$

где  $\beta = 1/T$ .

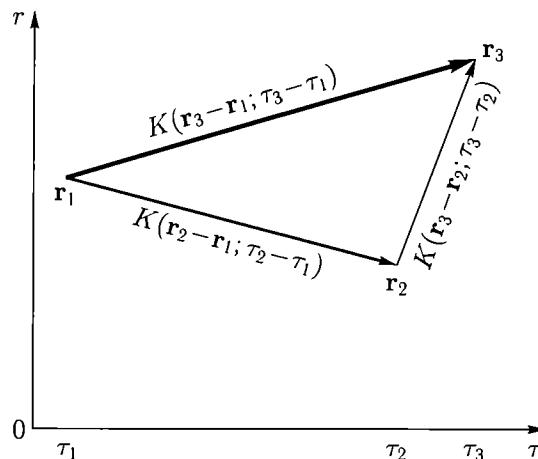


Рис. 11.52. Свойство свободного пропагатора

Разделим интервал  $\beta$  на  $n$  равных участков  $\Delta\tau = \beta/n$ , тогда матрица плотности примет вид

$$\rho(x, x'; \beta) = e^{-\Delta\tau H} e^{-\Delta\tau H} \dots e^{-\Delta\tau H} = \rho_{\Delta\tau} \rho_{\Delta\tau} \dots \rho_{\Delta\tau}. \quad (11.257)$$

В координатном представлении решение для матрицы плотности можно записать в интегральной форме:

$$\begin{aligned} \rho(x, x'; \beta) &= \\ &= \int \dots \int \rho(x, x_{n-1}; \Delta\tau) \rho(x_{n-1}, x_{n-2}; \Delta\tau) \dots \rho(x_1, x'; \Delta\tau) dx_1 \dots dx_{n-1}. \end{aligned} \quad (11.258)$$

Графическое представление на рис. 11.53 объясняет смысл выражения (11.258).

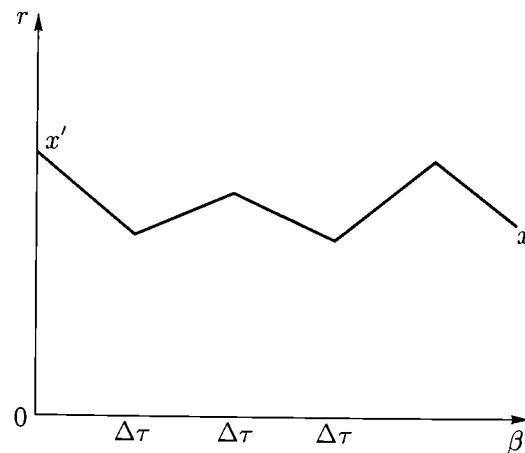


Рис. 11.53. Графическое представление выражения для матрицы плотности (11.258)

Частица движется от точки  $x'$  к точке  $x$ , проходя через последовательность промежуточных значений  $x_1, x_2, \dots, x_{n-1}$ , которые определяют траекторию. Полная амплитуда  $\rho(x, x'; \beta)$  вероятности того, что частица, начав двигаться из точки  $x'$ , закончит движение в точке  $x$ , определяется суммой (11.258) по всем возможным промежуточным значениям  $x_i$ . Когда длина участков  $\Delta\tau$  стремится к нулю, число интегрирований по промежуточным переменным возрастает до бесконечности, и выражение для матрицы плотности можно записать в следующем виде:

$$\rho(x, x'; \beta) = \int \dots \int \Phi(x(\Delta\tau)) Dx(\beta); \quad (11.259)$$

$$\Phi(x(\Delta\tau)) = \lim_{\substack{\Delta\tau \rightarrow 0 \\ n\Delta\tau = \beta}} \rho(x, x_{n-1}; \Delta\tau) \rho(x_{n-1}, x_{n-2}; \Delta\tau) \dots \rho(x_1, x'; \Delta\tau);$$

$$Dx(\beta) = \lim_{\substack{\Delta\tau \rightarrow 0 \\ n\Delta\tau = \beta}} dx_1 dx_2 \dots dx_{n-1}.$$

Выражение (11.259) — типичный *интеграл по траекториям*, при этом суммирование в нем происходит по всем возможным траекториям частиц. Заметим, что выражение (11.259) справедливо и для многочастичной системы, в этом случае расчет (11.259) эквивалентен определению статистической суммы.

В (11.259) необходимо определить подынтегральное выражение  $\Phi(x)$  — плотность распределения вероятности.

**11.4.1.5. Функция  $\Phi(x)$  для свободной частицы.** Матрица плотности для свободной частицы на отрезке  $\Delta\tau$  имеет вид

$$K(x - x', \Delta\tau) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\Delta\tau}} \exp\left(-\left(\frac{m}{2\hbar^2\Delta\tau}\right)(x - x')^2\right); \quad (11.260)$$

поэтому для полной матрицы плотности имеем

$$\begin{aligned} \rho(x, x'; \beta) = & \lim_{\substack{\Delta\tau \rightarrow 0 \\ n\Delta\tau = \beta}} \int \dots \int \exp\left[-\frac{m\Delta\tau}{2\hbar^2} \left( \left(\frac{x - x_{n-1}}{\Delta\tau}\right)^2 + \right.\right. \\ & \left.\left. + \left(\frac{x_{n-1} - x_{n-2}}{\Delta\tau}\right)^2 + \dots + \left(\frac{x_1 - x'}{\Delta\tau}\right)^2 \right)\right] \times \\ & \times \frac{dx_1}{\sqrt{2\pi\hbar^2/m}} \frac{dx_2}{\sqrt{2\pi\hbar^2/m}} \dots \frac{dx_{n-1}}{\sqrt{2\pi\hbar^2/m}}. \end{aligned} \quad (11.261)$$

Таким образом, для свободной частицы

$$\begin{aligned} \Phi(x) = & \lim_{\substack{\Delta\tau \rightarrow 0 \\ n\Delta\tau = \beta}} \exp\left[-\frac{m\Delta\tau}{2\hbar^2} \left( \left(\frac{x - x_{n-1}}{\Delta\tau}\right)^2 + \right.\right. \\ & \left.\left. + \left(\frac{x_{n-1} - x_{n-2}}{\Delta\tau}\right)^2 + \dots + \left(\frac{x_1 - x'}{\Delta\tau}\right)^2 \right)\right]. \end{aligned} \quad (11.262)$$

При уменьшении интервала интегрирования  $\Delta\tau$  разность  $\frac{x_k - x_{k-1}}{\Delta\tau}$  стремится к пределу

$$\frac{x_k - x_{k-1}}{\Delta\tau} \rightarrow \frac{dx(\tau)}{d\tau} \equiv \dot{x}(\tau), \quad (11.263)$$

и, следовательно,

$$\Phi(x) = \exp\left(-\frac{m}{2\hbar^2} \int_0^\beta (\dot{x}(\tau))^2 d\tau\right). \quad (11.264)$$

В (11.264) под знаком интеграла в экспоненте стоит вклад от кинетической энергии, имеющий вид квадрата производной по мнимому времени от координаты частицы.

**11.4.1.6. Функция  $\Phi(x)$  для частицы, находящейся во внешнем поле.** Гамильтониан частицы, находящейся во внешнем поле, имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) + V(x) = \frac{P^2}{2m} + V(x), \quad (11.265)$$

где  $P$  — оператор импульса. Представим матрицу плотности в виде

$$\rho = \rho_0 + \delta\rho, \quad (11.266)$$

где  $\rho_0$  — матрица плотности свободной частицы, а  $\delta\rho$  — поправка, связанная с внешним полем. Подставим (11.266) в уравнение для матрицы плотности (11.246):

$$-\frac{\partial(\rho_0 + \delta\rho)}{\partial\beta} = H(\rho_0 + \delta\rho), \quad (11.267)$$

откуда

$$-\frac{\partial\rho_0}{\partial\beta} - \frac{\partial\delta\rho}{\partial\beta} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \rho_0 + V(x) \rho_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \delta\rho + V(x) \delta\rho. \quad (11.268)$$

Считая  $\delta\rho$  линейной и медленной функцией потенциала, для первой поправки находим

$$\frac{\partial\delta\rho}{\partial\beta} = -V(x)\rho_0. \quad (11.269)$$

Если рассматриваемый промежуток времени  $\tau$  мал, то матрица плотности в этом промежутке удовлетворяет тому же уравнению:

$$\frac{\partial\delta\rho}{\partial\tau} = -V(x)\rho_0 \quad (11.270)$$

для потенциала  $V(x)$  любой величины.

Если считать потенциал  $V(x)$  приближенно постоянным на малом интервале  $\Delta\tau$ , то можно записать, что

$$\delta\rho = -V(x)\rho_0\Delta\tau. \quad (11.271)$$

Подставляем полученное выражение для  $\delta\rho$  в исходное выражение (11.266):

$$\begin{aligned} \rho(x, x'; \Delta\tau) &= \rho_0 - V(x)\rho_0\Delta\tau \cong \rho_0 e^{-V(x)\Delta\tau} = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2\Delta\tau}} \exp\left(-\left(\frac{m}{2\hbar^2\Delta\tau}\right)(x-x')^2 + V(x)\Delta\tau\right). \end{aligned} \quad (11.272)$$

Обобщим результат и получим выражение для полной матрицы плотности:

$$\begin{aligned} \rho(x, x'; \beta) &= \int \dots \int \exp\left[-\int_0^\beta \left(\frac{m}{2\hbar^2}\dot{x}^2 + V(x)\right) d\tau\right] \partial Dx; \\ \partial Dx &= dx_1 dx_2 \dots dx_n. \end{aligned} \quad (11.273)$$

Выражение (11.273) является представлением матрицы плотности в виде функционального интеграла или интеграла по траекториям в случае взаимодействия системы с внешним полем.

**11.4.1.7. Разложение матрицы плотности в ряд теории возмущений.**  
Разложим экспоненту в (11.273) в ряд по степеням интеграла от взаимодействия:

$$\begin{aligned} \rho(x, x'; \beta) &= \int \dots \int \exp\left[-\int_0^\beta \left(\frac{m}{2\hbar^2}\dot{x}^2\right) d\tau\right] \times \\ &\times \left[1 - \int_0^\beta V(x) d\tau + \frac{1}{2!} \left(\int_0^\beta V(x) d\tau\right)^2 - \frac{1}{3!} \left(\int_0^\beta V(x) d\tau\right)^3 + \dots\right] \partial Dx = \\ &= \rho_0 - \int_0^\beta \int \exp\left[-\int_0^\tau \left(\frac{m}{2\hbar^2}\dot{x}^2\right) d\tau\right] V(x) \exp\left[-\int_\tau^\beta \left(\frac{m}{2\hbar^2}\dot{x}^2\right) d\tau\right] d\tau dx + \dots \end{aligned} \quad (11.274)$$

Первый член разложения теории возмущений

$$\rho = \rho_0 - \int_0^\beta \int K(x-y, \tau_1) V(y) K(y-x, \beta-\tau_1) d\tau_1 dx \quad (11.275)$$

показан на рис. 11.54 в виде диаграммы (диаграммы Фейнмана).

Формально получается, что в точке  $(\tau_1; x(\tau_1))$  происходит взаимодействие частицы с внешним полем; эту точку фазового пространства называют *вершиной*, соответствующей взаимодействию.

Следующий член разложения соответствует диаграмме второго порядка (рис. 11.55):

$$\begin{aligned} \rho = \rho_0 - & \int_0^\beta \int K(x-y, \tau_1) V(y) K(y-x, \beta-\tau_1) d\tau_1 dy + \\ & + \frac{1}{2!} \int_0^\beta \int d\tau_1 d\tau_2 \int \int K(x-y, \tau_1) V(y) K(y-z, \tau_2-\tau_1) \times \\ & \times V(z) K(y-x, \beta-\tau_2) dy dz. \quad (11.276) \end{aligned}$$

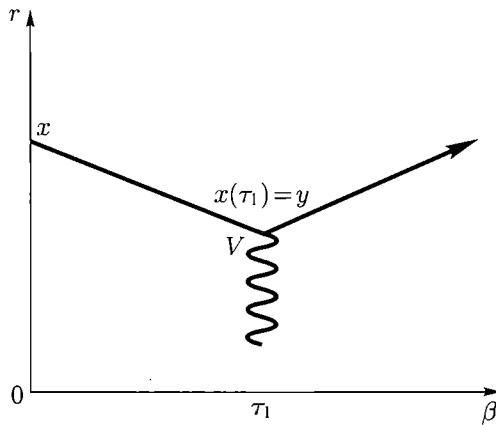


Рис. 11.54. Диаграмма Фейнмана для (11.275)

Здесь имеются уже две вершины взаимодействия. Полное суммирование всех диаграмм, если оно возможно, приводит к *точному расчету* матрицы плотности. Заметим, что из-за интегрирования по временным и пространственным переменным в разложении для матрицы плотности данные диаграммы подразумевают, что аналитический результат, соответствующий диаграммам, включает в себя сумму *всех возможных диаграмм, топологически совпадающих* с диаграммами, показанными на рисунке. Кроме того, по оси мнимого времени соблюдаются периодические граничные условия, т. е. левые и правые края диаграмм замкнуты, и полные траектории частиц — также замкнуты.

Если в многочастичной системе есть парное взаимодействие, т. е.

$$H = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right) + \sum_{ij} V(x_i, x_j), \quad (11.277)$$

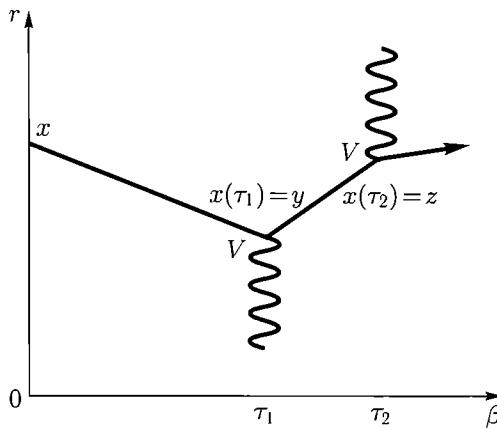


Рис. 11.55. Диаграмма Фейнмана второго порядка для (11.276)

то в этом случае выражение для матрицы плотности будет таким:

$$\rho(x, x'; \beta) = \int \dots \int \exp \left[ - \int_0^\beta \left( \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \dot{x}_i^2 + \sum_{ij} V(x_i, x_j) \right) d\tau \right] \partial Dx; \quad (11.278)$$

$$\partial Dx = \prod_i dx_1^i dx_2^i \dots dx_n^i,$$

где обобщенный дифференциал  $\partial Dx$  означает интегрирование по всей совокупности степеней свободы системы (по обобщенным координатам всех частиц), а  $x \equiv \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ .

Соответственно, разложение матрицы плотности в ряд теории возмущений проводится по совокупности траекторий отдельных частиц или групп частиц. При этом пропагатор двух невзаимодействующих частиц распадается на произведение:

$$\rho(x_1, x_2; \beta) = \int \dots \int \exp \left[ - \int_0^\beta \left( \frac{m}{2\hbar^2} \dot{x}_1^2 \right) d\tau \right] \exp \left[ - \int_\tau^\beta \left( \frac{m}{2\hbar^2} \dot{x}_2^2 \right) d\tau \right] \partial Dx; \quad (11.279)$$

$$\partial Dx = dx_1^1 dx_2^2.$$

Член второго порядка для парного взаимодействия двух частиц имеет следующий вид:

$$\frac{1}{2!} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \int \int \rho(x_1, y; \tau_1) V(y - z) \rho(y, x_2; \beta - \tau_1) \times$$

$$\times \rho(x_2, z; \tau_2) \rho(z, x_2; \beta - \tau_2) dy dz, \quad (11.280)$$

соответствующая диаграмма Фейнмана показана на рис. 11.56.

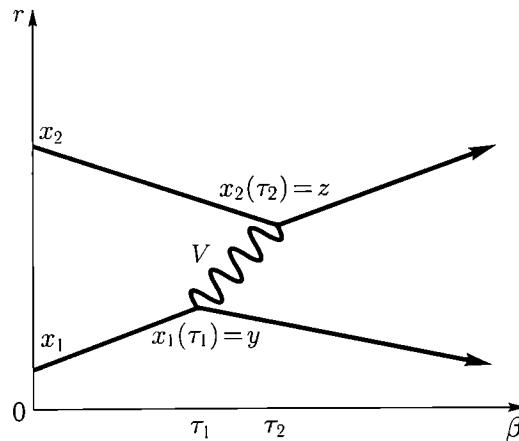


Рис. 11.56. Диаграмма Фейнмана для двухчастичного взаимодействия

Сведений о матрице плотности и интегралах по траекториям, представленных выше, вполне достаточно для изложения метода МК, предложенного Ceperley в [179].

**11.4.2. Формулировка алгоритма РIMC.** Рассмотрим многочастичную систему, описываемую гамильтонианом с парным взаимодействием в координатном представлении:

$$H = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right) + \sum_{i < j} U(x_i, x_j). \quad (11.281)$$

Как и в любом дискретном по мнимому времени методе, интервал по мнимому времени разбивается на большое число частей  $\Delta\tau = \beta/M$ ;  $M \gg 1$  [102, 103, 179]. Матрица плотности имеет вид

$$\rho(R, R'; \beta) = \int \rho(R, R_1; \Delta\tau) \rho(R_1, R_2; \Delta\tau) \times \dots \times \rho(R_{M-1}, R'; \Delta\tau) dR_1 \dots dR_{M-1}. \quad (11.282)$$

Здесь  $R$  — совокупность координат трехмерной системы из  $N$  частиц. При  $\Delta\tau \rightarrow 0$  наилучшей аппроксимацией матрицы плотности в каждом коротком интервале времени  $\Delta\tau$ , согласно рассмотренным выше свойствам, будет

$$\rho(R, R'; \Delta\tau) \approx \prod_{i=1}^N \rho_1(r_i, r'_i; \tau) \prod_{\substack{i, j = 1 \\ i < j}}^N \exp [-U(r_{ij}, r'_{ij}; \Delta\tau)], \quad (11.283)$$

где  $\rho_1$  — матрица плотности для свободной частицы:

$$\rho_1(r_i, r'_i; \tau) = \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2\Delta\tau} \right)^{3/2} \exp \left[ -\frac{(r_i - r'_i)^2}{2\hbar^2\Delta\tau/m} \right]. \quad (11.284)$$

Уравнение (11.283) тем точнее, чем меньше интервал  $\Delta\tau$ ; выражение для взаимодействия при этом рассчитывается конкретно для каждой задачи для

достижения большей точности [102, 179]. Например, в [179] рассматривается потенциал Леннарда–Джонса и различными методами точно решается двухчастичная задача для подстановки в (11.283), при этом достигается точность порядка  $(\Delta\tau)^3$ . В (11.283) можно также перейти к классическому пределу с точностью до  $(\Delta\tau)^2$ , заменив выражение в показателе экспоненты прямым произведением величины взаимодействия и временного интервала:

$$\exp [-U(r_{ij}, r'_{ij}; \Delta\tau)] \rightarrow \exp [-U(r_{ij}, r'_{ij})\Delta\tau]. \quad (11.285)$$

Если в задаче необходимо учитывать бозе- (ферми-) статистику частиц, то следует еще симметризовать (антисимметризовать) матрицу плотности по всем парным перестановкам координат частиц  $P$ :

$$\rho_P(R, R'; \beta) = \frac{1}{N!} \sum_P (\pm 1)^P \rho(R, PR'; \beta); \quad (11.286)$$

при этом верхний знак соответствует симметричной волновой функции в случае бозонной статистики, нижний — антисимметричной волновой функции для фермионов.

Исходная конфигурация формируется при помощи случайного расположения фиксированного числа частиц на всей пространственно-временной сетке, при этом частицы условно связываются линиями, обозначающими замкнутые траектории; для исходной конфигурации рассчитывается (11.282). Далее случайнм образом выбирается временной срез и делается попытка изменения положения частиц на этом срезе; новая конфигурация принимается или отвергается согласно алгоритму Метрополиса. После этого производится пересчет матрицы плотности. Интегрирование в (11.282) и означает перебор всех возможных конфигураций по всем временным срезам.

Однако при такой реализации алгоритма возникают определенные сложности. Выбирать абсолютно случайным образом пространственное расположение частиц неэффективно, наилучшая скорость сходимости достигается, если расположение частиц выбирать с плотностью вероятности, наиболее близкой к подынтегральной функции (11.283). Расчет (11.283) сам по себе достаточно сложен из-за присутствия множителей, связанных с взаимодействием и искажающих исходный гауссиан (11.284).

Для решения этой проблемы матрицу плотности можно представить следующим образом [179]:

$$\begin{aligned} \rho(R, R'; \beta) &= \\ &= \rho(R, R'; \beta) \left[ \frac{\rho(R, R_1; \tau) \rho(R_1, R'; \beta - \tau)}{\rho(R, R'; \beta)} \right] \left[ \frac{\rho(R_1, R_2; \tau) \rho(R_2, R'; \beta - 2\tau)}{\rho(R_1, R'; \beta - \tau)} \right] \times \dots \\ &\dots \times \left[ \frac{\rho(R_{M-2}, R_{M-1}; \tau) \rho(R_{M-1}, R'; \tau)}{\rho(R_{M-2}, R'; 2\tau)} \right]. \end{aligned} \quad (11.287)$$

Дроби в квадратных скобках — отношения произведения двух матриц плотности по интервалам  $\beta - n\tau$ ;  $n = 0; 1; \dots$ , с промежуточной точкой  $\tau, 2\tau, \dots$  и т. д. к матрице плотности по всему такому интервалу. Эти выражения —

готовые плотности вероятности, они могут быть использованы для выбора координат частиц  $R_1, R_2, \dots$  в соответствующих точках временной сетки.

Плотность вероятности

$$p(R_1) = \left[ \frac{\rho(R, R_1; \tau) \rho(R_1, R'; \beta - \tau)}{\rho(R, R'; \beta)} \right] \quad (11.288)$$

правильно нормирована:  $\int dR_1 p(R_1) = 1$ , что следует из свойств матрицы плотности.

Таким образом, новые координаты частиц генерируются с плотностью вероятности вида (11.283), (11.284). Расчет отношения нового и старого значений (11.288) дает вероятность перехода, которая взвешивается с помощью алгоритма Метрополиса. Обязательно следует формально соединять частицы на разных временных срезах после каждого обновления конфигурации, обозначая траектории. Через определенное время расчета следует делать попытки переключения пары траекторий (*пермутации*) (рис. 11.57) для моделирования симметрии (антисимметрии) частиц; эти процедуры также проводятся в рамках алгоритма Метрополиса.

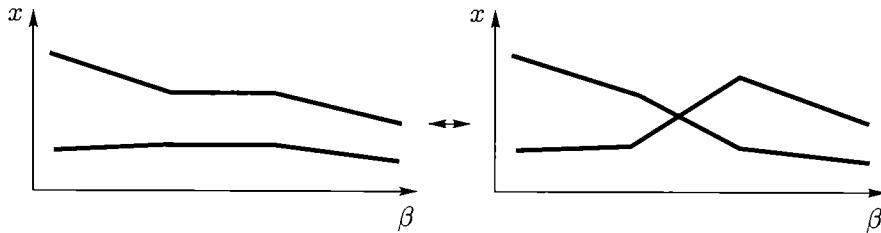


Рис. 11.57. Пермутации

**11.4.3. Расчет квантовых средних и некоторые результаты.** Кинетическая энергия может быть рассчитана следующим образом:

$$\langle K \rangle = \frac{-\hbar^2}{2m} \lim_{R \rightarrow R'} \frac{\int \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 \rho(R, R'; \beta) dR}{\int \rho(R, R'; \beta) dR}. \quad (11.289)$$

Средняя потенциальная энергия находится простым суммированием по временным срезам:

$$\langle U \rangle = \sum_{\tau} \sum_{i < j} U(x_i, x_j, \tau). \quad (11.290)$$

Любые корреляционные функции рассчитываются достаточно просто, так как в каждый момент времени известно расположение частиц. Например, в [179] для трехмерного  ${}^4\text{He}$  с потенциалом Леннарда–Джонса

$$V(r) = 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (11.291)$$

получена парная корреляционная функция  $g(r) = \langle \rho(r) \rho(0) \rangle$  (рис. 11.58) и проведено сравнение результатов для классического и квантового случаев (т. е. с учетом пермутации в алгоритме и без нее).

Сверхтекущая плотность  $\rho_S$  может быть рассчитана через числа *winding numbers* [103]:

$$\frac{\rho_S}{\rho} = \frac{m}{\hbar^2} \cdot \frac{\langle W \rangle^2 L^{2-d}}{\rho d \beta}, \quad (11.292)$$

где  $\rho$  — полная плотность,  $d$  — размерность задачи,  $L$  — линейный размер системы, а  $W$  в периодических условиях дается выражением

$$WL = \sum_{K=1}^M \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_i^{K+1} - \mathbf{r}_i^K). \quad (11.293)$$

Соответственно, для нормальной компоненты в трехмерной ситуации имеем

$$\frac{\rho_N}{\rho} = 1 - \frac{m \langle W_x \rangle^2 L^2}{\beta \hbar^2 N}, \quad (11.294)$$

$N$  — число частиц. Результаты расчета нормальной компоненты показаны на рис. 11.59 [103].

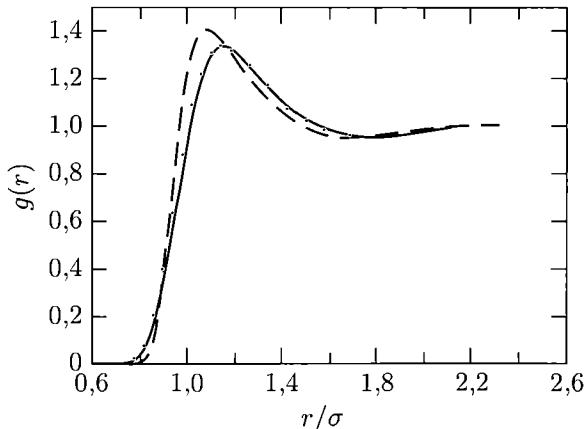


Рис. 11.58. Парная корреляционная функция из [179], рассчитанная с учетом пермутаций (сплошная линия) и без них (штриховая линия)

Видно, что экспериментальные данные неплохо совпадают с расчетными. Расчет проводился не с потенциалом Леннарда–Джонса, а со сложным потенциалом гелий–гелий, рассчитанным из эксперимента (см. [103]).

Заметим, что сходимость данного метода слабо чувствительна к виду парного потенциала. Метод континуального интегрирования использовался также для расчетов свободной энергии, импульсного распределения, т. е. фактически всех термодинамических характеристик, с его помощью исследовались критические параметры фазовых переходов [73, 102, 103, 179, 182]. Например, в [73] получены результаты для сдвига критической температуры в бозе-газе

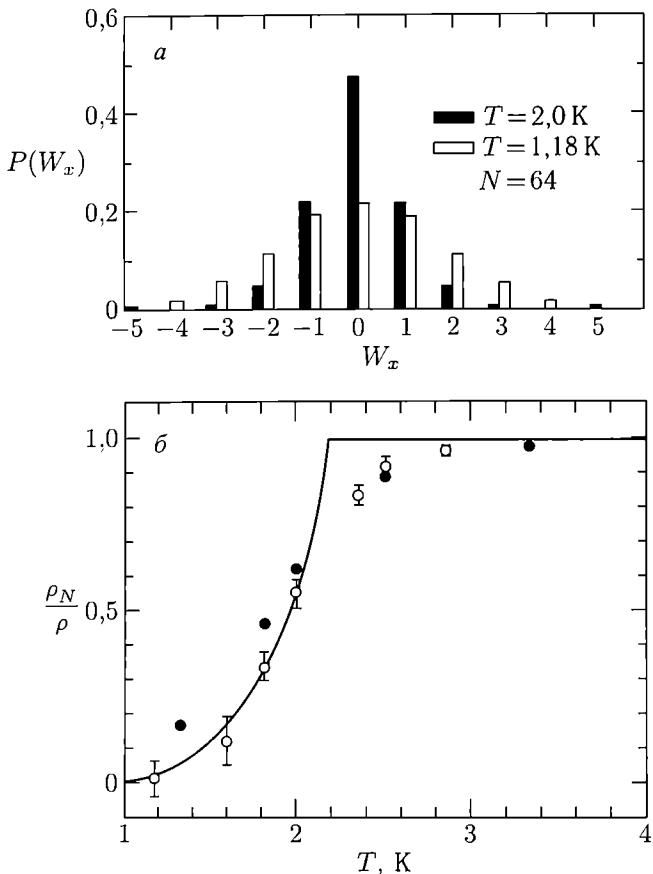


Рис. 11.59. Распределение значений *winding numbers* и зависимость нормальной компоненты плотности от температуры из [103] (точки). Сплошной линией показаны экспериментальные данные

в зависимости от величины взаимодействия, близкие к экспериментальным данным:

$$\frac{\Delta T_C}{T_0} = c_0(na^3)^\gamma; \quad c_0 = 0,34 \pm 0,06; \quad \gamma = 0,34 \pm 0,03, \quad (11.295)$$

где  $n$  — плотность системы,  $a$  — длина рассеяния, пропорциональная величине парного взаимодействия,  $T_0$  — критическая температура в отсутствие взаимодействия.

## Глава 12

# ТОЧНЫЕ КВАНТОВЫЕ АЛГОРИТМЫ С ОТСУТСТВИЕМ ОШИБКИ РАЗЛОЖЕНИЯ ТРОТТЕРА

Одной из главных проблем дискретных по мнимому времени квантовых методов МК, рассмотренных в предыдущих разделах, является погрешность троттеровского разложения по шкале мнимого времени порядка  $(\Delta\tau)^2 = (\beta/M)^2$ ;  $M \gg 1$ :

$$\begin{aligned} Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) &= \text{Tr}\left(\prod_{k=1}^M e^{-\Delta\tau(V+K)}\right) \approx \\ &\approx \text{Tr}(e^{-\Delta\tau V} e^{-\Delta\tau K} \dots e^{-\Delta\tau V} e^{-\Delta\tau K}) + O((\Delta\tau)^2), \end{aligned} \quad (12.1)$$

необходимого для преобразования  $d$ -мерной квантовой задачи в  $(d+1)$ -мерную классическую и для реализации численной схемы алгоритма. Точность разложения может быть и выше [90]:

$$e^{-\Delta\tau(V+K)} \approx e^{-\Delta\tau K/2} e^{-\Delta\tau V} e^{-\Delta\tau K/2} + O((\Delta\tau)^3), \quad (12.2)$$

но принципиально это не меняет ситуации.

Систематическая погрешность разложения приводит к невозможности расчетов при достаточно низких температурах; кроме того, проблема неэргодичности схем расчета траекторных методов, связанная с локальностью алгоритма шахматной доски и трудностями расчета *winding numbers*, функций Грина и других нелокальных корреляторов, а также с работой алгоритма при постоянном числе частиц, тоже ограничивает эффективность использования дискретных методов. В детерминантных алгоритмах проблемы связаны с большими временными затратами расчета элементарного шага МК, неэффективностью метода для больших систем и резким нарастанием ошибок при понижении температуры. Расчеты с помощью дискретных континуальных интегралов также имеют свои ограничения, связанные с трудностями обновления траекторий, необходимостью приближения экспоненты от взаимодействия и учета симметрии волновой функции с помощью «перепутывания» траекторий.

Существует еще одна проблема, связанная с дискретным разбиением временной шкалы. Если рассматривать систему, описываемую, например, моделью типа Хаббарда (или Бозе–Хаббарда) со стандартной кинетической частью

$$-t \sum_{ij} (a_i^+ a_j + h.c.)$$

в узельном представлении, то соответствующее амплитуде перескока  $t$  изменение траектории (его называют «кинк»), например в дискретном траекторном

алгоритме, происходит нечасто. В основном при моделировании МК встречаются прямые отрезки траекторий, а характерное расстояние по времени между изменениями (кинками) траекторий составляет  $\sim 1/t$  и не зависит от величины временного разбиения  $\Delta\tau$ , поэтому при малом  $\Delta\tau$  между кинками будет  $1/(t\Delta\tau) \gg 1$  интервалов временной сетки (рис. 12.1).

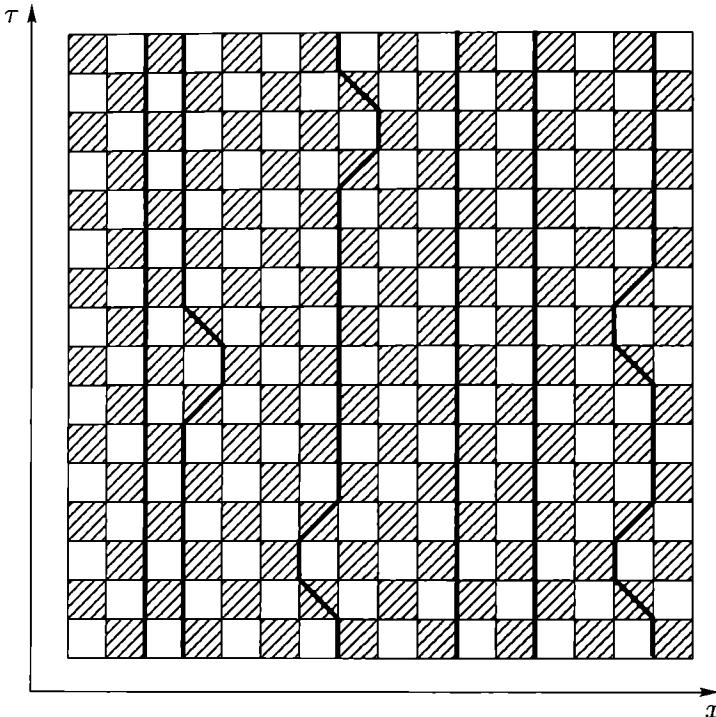


Рис. 12.1. При малом  $\Delta\tau$  в алгоритме шахматной доски кинки — относительно редкое явление

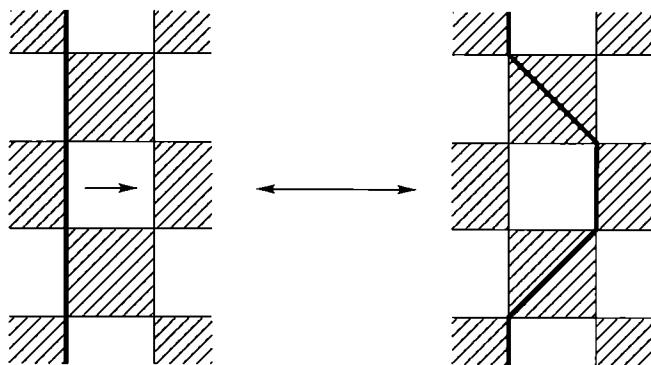
Действительно, если в процедуре МК делается попытка создать изменение траекторий, как на рис. 12.2, т. е. создать пару *king–antikink*, то вероятность этого будет мала:

$$\frac{W_{\text{new}}}{W_{\text{old}}} \propto (t\Delta\tau)^2, \quad (12.3)$$

и, скорее всего, новая конфигурации не реализуется.

Таким образом, стандартный дискретный алгоритм при уменьшении временной сетки становится все более неэффективным.

В связи с этим в последнее время появились новые квантовые методы МК в непрерывном времени [107–109, 185], свободные от ошибки разложения Судзуки–Троттера и позволяющие в эргодической схеме рассчитывать любые недиагональные средние. Они, по крайней мере, в  $1/(t\Delta\tau)^2$  быстрее дискретных алгоритмов, асимптотически точны, при этом описание системы, применяемое в этих алгоритмах, не избыточно, как при использовании временной сетки, так как фиксируется только конечное число точек фазового

Рис. 12.2. Прямая траектория и пара *kink–antikink*

пространства, где произошли изменения траекторий, которых существенно меньше, чем временных срезов (см. рис. 12.1).

Датой рождения квантовых методов МК, не основанных на разложении Троттера, можно считать 1962 г., когда Handscomb [186] предложил первый метод собственно квантового метода МК, основанный на разложении в ряд матрицы плотности, применимый исключительно к антиферромагнитной модели Гейзенберга для спина  $S = 1/2$ . Значительно позже, в 1991 г. Sandvik и Kurkijärvi [187] обобщили этот метод и для непрерывного мнимого времени для  $S \geq 1/2$ .

Общим в этом новом классе квантовых методов МК является представление о *расширенном фазовом пространстве*. Оказывается, эффективный перебор конфигураций можно реализовать, искусственно увеличив число состояний. Например, в петлевых алгоритмах [112, 113] это достигается построением в фазовом пространстве своеобразных петель, эффективно обновляющих конфигурации и реализующих глобальные изменения состояний. В траекторных алгоритмах [107, 109] это могут быть фиктивные или реальные разрывы траекторий, сканирующие фазовое пространство и порождающие новые конфигурации с различным числом оборотов траекторий (*winding numbers*) и также реализующих глобальные изменения состояния системы.

Такие изменения фазового пространства приводят к более эффективной сходимости методов и возможности рассчитывать как недиагональные средние, такие как температурная функция Грина, так и диагональные, такие как распределение плотности и др. В едином расчете можно получить как локальные, так и нелокальные корреляционные функции, суммировать конфигурации с различными *winding numbers* и числом частиц в эргодической численной схеме. Результаты показывают, что такие подходы более предпочтительны для моделирования фазовых переходов и позволяют определять с большой точностью критические параметры, в частности, критические индексы и сами точки фазовых переходов [52, 53], в то время как другие методы МК испытывают критическое замедление сходимости при работе в флукуационной области вблизи точек перехода [214].

## 12.1. Траекторный метод в непрерывном времени (Continuous Time World Line – CTWL)

В 1996 г. Прокофьев, Свишунов и Тупицын [107, 108] предложили новый квантовый метод МК — *траекторный метод в непрерывном времени* (английская аббревиатура — CTWL, Continuous Time World Line). Метод основывается на точном выражении для разбиения статистической суммы в представлении взаимодействия. Этот метод свободен от систематической ошибки, связанной с троттеровским разбиением мнимого времени, и может быть применен для исследования достаточно произвольных решеточных (и не только) моделей; возможны расчеты как в малом, так и большом каноническом ансамблях. CTWL-алгоритм можно также считать диаграммным методом МК, так как он напрямую суммирует ряды диаграмм для моделей в дискретном и непрерывном базисах.

Перед тем, как изложить основы метода, необходимо привести сведения о *представлении взаимодействия*, используемом в аналитических диаграммных методах.

### 12.1.1. Представление взаимодействия при конечных температурах.

Здесь рассмотрено представление взаимодействия, используемое в температурной технике; для более подробного знакомства с различными вариантами представления взаимодействия и диаграммной техники в квантовой теории систем многих частиц следует обратиться, например, к книге Абрикосова, Горькова и Дзялошинского [188].

Разобъем гамильтониан системы  $H$  на основную часть  $H_0$  и возмущение (член с взаимодействием)  $H_{\text{int}}$ ; это разбиение условно и диктуется только конкретной моделью и удобством работы с конкретными базисными функциями.

Введем матрицу  $\sigma(\tau)$ ;  $0 < \tau < \beta$  (матрица  $\sigma$  будет являться аналогом  $S$ -матрицы рассеяния в теории поля), определив ее соотношениями:

$$\begin{aligned} e^{-\tau H} &= e^{-\tau(H_0+H_{\text{int}})} = e^{-\tau H_0} \sigma(\tau), \\ e^{\tau H} &= \sigma^{-1}(\tau) e^{\tau H_0}. \end{aligned} \quad (12.4)$$

Матрицу  $\sigma$  называют *мацубаровским оператором эволюции* по аналогии с обычным, времененным описанием, так как он описывает изменение статистического оператора во «времени»  $\tau$  за счет действия возмущения.

Все операторы полей частиц в представлении взаимодействия имеют вид, схожий с гейзенберговским представлением операторов, но с заменой  $it \rightarrow \tau$ ;  $H \rightarrow H_0$ :

$$A(\tau) = e^{\tau H_0} A e^{-\tau H_0}, \quad A^+(\tau) = e^{\tau H_0} A^+ e^{-\tau H_0}. \quad (12.5)$$

Для гамильтониана и возмущения, соответственно, имеем:

$$H(\tau) = e^{\tau H_0} H e^{-\tau H_0}, \quad H_{\text{int}}(\tau) = e^{\tau H_0} H_{\text{int}} e^{-\tau H_0}. \quad (12.6)$$

Учитывая, что система находится в условиях большого канонического ансамбля с переменным числом частиц, в (12.6) подразумевается  $H_0 \Rightarrow H_0 - \mu N$ .

Оператор  $H_0$  и оператор числа частиц  $N$  не зависят от параметра  $\tau$ :

$$\begin{aligned} H_0(\tau) &= e^{\tau H_0} H_0 e^{-\tau H_0} = H_0, \\ N(\tau) &= e^{\tau H_0} N e^{-\tau H_0} \Rightarrow e^{\tau(H_0 - \mu N)} N e^{-\tau(H_0 - \mu N)} = N. \end{aligned} \quad (12.7)$$

Получим уравнение для матрицы  $\sigma(\tau)$ , продифференцировав первое равенство в (12.4):

$$-H e^{-\tau H} = e^{-\tau H_0} \frac{\partial \sigma(\tau)}{\partial \tau} - H_0 e^{-\tau H_0}, \quad (12.8)$$

откуда

$$\frac{\partial \sigma(\tau)}{\partial \tau} = -H_{\text{int}} \sigma(\tau). \quad (12.9)$$

Учитывая, что из определения следует, что  $\sigma(0) = 1$ , окончательно получаем:

$$\sigma(\tau) = T_\tau \exp \left( - \int_0^\tau H_{\text{int}}(\tau') d\tau' \right), \quad (12.10)$$

где символ  $T_\tau$  символизирует упорядочение переменных  $\tau$  по убыванию [188], т. е. все операторы должны быть расположены слева направо в порядке убывания  $\tau$ . Более строгое определение  $T_\tau$ -упорядочения для двух произвольных операторов:

$$T_\tau \{ A(\tau_1) B(\tau_2) \} = \begin{cases} A(\tau_1) B(\tau_2), & \tau_1 > \tau_2; \\ \pm B(\tau_2) A(\tau_1), & \tau_1 < \tau_2, \end{cases} \quad (12.11)$$

верхний знак соответствует бозевским операторам, нижний — фермиевским. Верхний знак также соответствует смешанному произведению ферми- и бозе-операторов.

Можно рассмотреть также функцию  $\sigma$  двух аргументов  $\tau_1$  и  $\tau_2$ :

$$\sigma(\tau_1, \tau_2) = T_\tau \exp \left[ - \int_{\tau_1}^{\tau_2} H_{\text{int}}(\tau') d\tau' \right], \quad \sigma(\tau, 0) = \sigma(\tau). \quad (12.12)$$

Она обладает очевидными свойствами:

$$\begin{aligned} \sigma(\tau_1, \tau_3) &= \sigma(\tau_1, \tau_2) \sigma(\tau_2, \tau_3), \quad \tau_1 > \tau_2 > \tau_3; \\ \sigma(\tau_1, \tau_2) &= \sigma(\tau_1) \sigma^{-1}(\tau_2). \end{aligned} \quad (12.13)$$

Статистическая сумма системы может быть записана с учетом матрицы по всему временному интервалу  $\sigma(\beta)$  следующим образом:

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} (e^{-\beta H}) = \text{Tr} (e^{-\tau H_0} \sigma(\beta)), \\ \sigma(\beta) &= T_\tau \exp \left( - \int_0^\beta H_{\text{int}}(\tau) d\tau \right). \end{aligned} \quad (12.14)$$

Получим также выражение для мацубаровской функции Грина в представлении взаимодействия [189]:

$$\begin{aligned}
 G_{\sigma_1\sigma_2}(i, j; \tau_1, \tau_2) &= e^{\beta F} \left\{ \begin{array}{l} -\text{Tr} [e^{-\beta H} e^{\tau_1 H} a_{i\sigma_1} e^{-\tau_1 H} e^{\tau_2 H} a_{j\sigma_2}^+ e^{-\tau_2 H}], \quad \tau_1 > \tau_2, \\ \mp \text{Tr} [e^{-\beta H} e^{\tau_2 H} a_{j\sigma_2}^+ e^{-\tau_2 H} e^{\tau_1 H} a_{i\sigma_1} e^{-\tau_1 H}], \quad \tau_1 < \tau_2; \end{array} \right. = \\
 &= e^{\beta F} \left\{ \begin{array}{l} -\text{Tr} [e^{-\beta H_0} \sigma(\beta) \sigma^{-1}(\tau_1) e^{\tau_1 H_0} a_{i\sigma_1} e^{-\tau_1 H_0} \sigma(\tau_1) \sigma^{-1}(\tau_2) e^{\tau_2 H_0} a_{j\sigma_2}^+ e^{-\tau_2 H_0} \sigma(\tau_2)], \\ \mp \text{Tr} [e^{-\beta H_0} \sigma(\beta) \sigma^{-1}(\tau_2) e^{\tau_2 H_0} a_{j\sigma_2}^+ e^{-\tau_2 H_0} \sigma(\tau_2) \sigma^{-1}(\tau_1) e^{\tau_1 H_0} a_{i\sigma_1} e^{-\tau_1 H_0} \sigma(\tau_1)] \end{array} \right. ; \\
 &= e^{\beta F} \left\{ \begin{array}{l} -\text{Tr} [e^{-\beta H_0} \sigma(\beta, \tau_1) e^{\tau_1 H_0} a_{i\sigma_1} e^{-\tau_1 H_0} \sigma(\tau_1, \tau_2) e^{\tau_2 H_0} a_{j\sigma_2}^+ e^{-\tau_2 H_0} \sigma(\tau_2)], \\ \mp \text{Tr} [e^{-\beta H_0} \sigma(\beta, \tau_2) e^{\tau_2 H_0} a_{j\sigma_2}^+ e^{-\tau_2 H_0} \sigma(\tau_2, \tau_1) e^{\tau_1 H_0} a_{i\sigma_1} e^{-\tau_1 H_0} \sigma(\tau_1)] \end{array} \right. ; \\
 &= e^{\beta F} \left\{ \begin{array}{l} -\text{Tr} [e^{-\beta H_0} \sigma(\beta, \tau_1) a_{i\sigma_1}(\tau_1) \sigma(\tau_1, \tau_2) a_{j\sigma_2}^+(\tau_1) \sigma(\tau_2)], \quad \tau_1 > \tau_2, \\ \mp \text{Tr} [e^{-\beta H_0} \sigma(\beta, \tau_2) a_{j\sigma_2}^+(\tau_1) \sigma(\tau_2, \tau_1) a_{i\sigma_1}(\tau_1) \sigma(\tau_1)], \quad \tau_1 < \tau_2, \end{array} \right. \quad (12.15)
 \end{aligned}$$

где

$$e^{\beta F} = \text{Tr} (e^{-\beta H}) = \text{Tr} (e^{-\beta H_0} \sigma(\beta)). \quad (12.16)$$

Учтем определение  $T_\tau$  в (12.11) и получим из (12.14) и (12.13), учитывая циклические перестановки под знаком следа

$$G_{\sigma_1\sigma_2}(i, j; \tau_1, \tau_2) = -e^{\beta F} \text{Tr} (e^{-\beta H_0} T_\tau \{ a_{i\sigma_1}(\tau_1) a_{j\sigma_2}^+(\tau_1) \sigma(\beta) \}). \quad (12.17)$$

Результат (12.17) справедлив для любого соотношения времен и для ферми-, и для бозе-статистики.

Окончательно,

$$\begin{aligned}
 G_{\sigma_1\sigma_2}(i, j; \tau_1, \tau_2) &= \frac{-\text{Tr} (e^{-\beta H_0} T_\tau \{ a_{i\sigma_1}(\tau_1) a_{j\sigma_2}^+(\tau_1) \sigma(\beta) \})}{\text{Tr} (e^{-\beta H_0} \sigma(\beta))} = \\
 &= -\frac{1}{Z} \text{Tr} (e^{-\beta H_0} T_\tau \{ a_{i\sigma_1}(\tau_1) a_{j\sigma_2}^+(\tau_1) \sigma(\beta) \}). \quad (12.18)
 \end{aligned}$$

Рассчитаем теперь ряд теории возмущений для статистической суммы. Для этого разложим экспоненту в (12.14) в ряд по степеням возмущения  $V \equiv H_{\text{int}}$ :

$$\begin{aligned}
 \sigma(\beta) &= 1 - \int_0^\beta V(\tau) d\tau + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau' \int_0^\beta (T_\tau \{ V(\tau') V(\tau'') \} - \dots) d\tau'' = \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta T_\tau \{ V(\tau_1) \dots V(\tau_n) \} d\tau_n. \quad (12.19)
 \end{aligned}$$

В последнем выражении можно исключить факториальные множители, переобозначив пределы интегрирования. Действительно, несложно показать (учи-

тывая временное упорядочение операторов в подынтегральном выражении), что

$$\begin{aligned} \frac{1}{2!} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 &= \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2; \\ \frac{1}{3!} \int_0^\beta \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 &= \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_3; \\ \frac{1}{n!} \int_0^\beta \int_0^\beta \cdots \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \cdots d\tau_n &= \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n. \end{aligned} \quad (12.20)$$

Заметим, что аргументы располагаются строго по убыванию, так что нет необходимости в обозначении  $T_\tau$ . Статистическая сумма тогда принимает удобный для дальнейшего изложения вид

$$Z = \text{Tr} \left( e^{-\beta H_0} \left[ 1 - \int_0^\beta V(\tau) d\tau + \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} \left( V(\tau_1) V(\tau_2) - \dots \right) d\tau_2 \right] \right). \quad (12.21)$$

Дискретный аналог формулы (12.21) имеет вид

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{\{n_1, n_2, \dots, n_N\}, \\ \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_N, \\ \tau_{N+1} \equiv \tau_1}} (-\Delta\tau)^N \prod_{k=0}^N \left( \langle n_k | V(\tau_k) | n_{k+1} \rangle e^{-(\tau_{k+1} - \tau_k) E_k} \right), \quad (12.22)$$

где  $V(\tau_k)$  обозначает отдельное слагаемое в возмущении  $V$  и по исторической традиции называется кинком, а шаг мнимого времени  $\Delta\tau$  устремлен к нулю. Вывод этого разложения приведен в приложении 4. Заметим, что соотношение (12.22) полностью совпадает с соответствующим разложением для траекторного дискретного метода, если при выводе принять в качестве  $H_0$  потенциальную энергию, а в качестве  $V$  — кинетическую.

**12.1.2. Общая формулировка CTWL-алгоритма.** Пусть  $H_0$  и  $V$  описывают, соответственно, диагональную и недиагональную части гамильтониана в представлении, отвечающем полному набору  $|n\rangle$  собственных функций  $H_0$ , так что  $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$ . Без потери общности можно полагать, что недиагональная часть может быть записана в виде суммы элементарных членов  $Q$ , при этом из-за полноты набора  $|n\rangle$  действие  $Q$  должно переводить одну собственную функцию в другую, но из этого же набора:

$$\begin{aligned} V &= \sum_s Q_s, \\ Q_s |n\rangle &= -q_{mn}(s) |m\rangle, \end{aligned} \quad (12.23)$$

где  $q_{mn}(s)$  — соответствующий матричный элемент перехода из  $|n\rangle$  в  $|m\rangle$ , зависящий от  $Q_s$ . Знак минус в (12.23) выбран для удобства дальнейшего рассмотрения.

Запишем разложение оператора эволюции  $\sigma$  в статистической сумме  $Z = \text{Tr} (e^{-\beta H_0} \sigma(\beta))$  в базисе  $|n\rangle$  с учетом (12.23):

$$\begin{aligned}\sigma_{nm} &= \delta_{nm} + \sum_s \int_0^\beta q_{nm}(s) e^{\tau E_{nm}} d\tau + \dots + \\ &+ \sum_{s_1, \dots, s_k} \int_0^\beta d\tau_k \dots \int_0^{\tau_2} (q_{np}(s_p) e^{\tau_k E_{np}} \dots q_{lm}(s_1) e^{\tau_1 E_{lm}}) d\tau_1 + \dots;\end{aligned}\quad (12.24)$$

где  $E_{lm} = E_l - E_m$ . Знак «минус» в разложении (12.21) сократился с минусом перед матричным элементом (12.23). При расчете (12.24) между каждыми недиагональными операторами сначала были вставлены полные наборы состояний  $\sum_l |l\rangle \langle l|$ , но фактически суммирование по этим промежуточным полным наборам исчезло, так как действие операторов  $\langle p | Q_s | l \rangle$  однозначно определяет переход между функциями  $|p\rangle$  и  $|l\rangle$ . Поэтому степени свободы в каждой сумме определяются теперь наборами  $s_1, \dots, s_k$ , связанными с действием конечного числа недиагональных операторов сортов  $s_1, \dots, s_k$ . Теперь не совокупность состояний  $|n_j\rangle$  составляет мгновенную конфигурацию МК, а совокупность кинков  $q_{lp}(s)$  для каждого члена суммы (12.24) с соответствующими энергиями переходов  $E_{lp}$  и временными интервалами  $\tau_s$ . Схематично это можно продемонстрировать в виде траекторий, сходных с видом конфигураций в дискретном траекторном методе. Например, для члена суммы (12.24)

$$\sum_{s_1, s_2, s_3} \int_0^\beta d\tau_3 \int_0^{\tau_3} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} (q_{np}(s_1) e^{\tau_1 E_{np}} q_{pl}(s_2) e^{\tau_2 E_{pl}} q_{lm}(s_3) e^{\tau_3 E_{lm}}) d\tau_1$$

соответствующая схема показана на рис. 12.3.

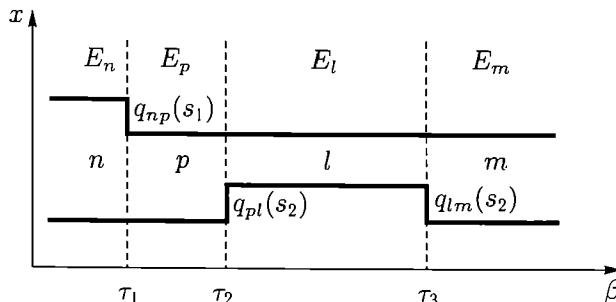


Рис. 12.3. Конфигурация, соответствующая одному из слагаемых в разложении (12.24)

Если ограничиться взаимодействием конечного радиуса действия, то это эквивалентно тому, что для каждого оператора  $Q_{s_1}$  имеется лишь конечное число членов суммы  $Q_{s_2}$ , не коммутирующих с ним:

$$[Q_{s_1}, Q_{s_2}] \neq 0.$$

Это означает относительную локальность каждого кинка, т. е. возможность создавать и уничтожать его независимо от хронологии его с другими (коммутирующими) кинками. Фактически главный элемент конфигурации — кинк сорта  $s$  и его параметры — матричный элемент  $q_{lp}(s)$ , диагональная энергия переходов  $E_{lp}$  и его положение на временной шкале  $\tau_s$  (рис. 12.4).

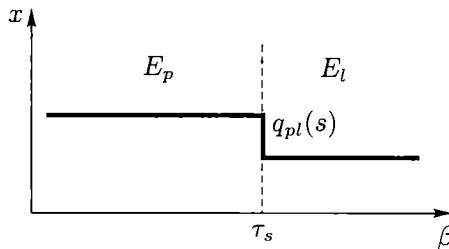


Рис. 12.4. Кинк и его параметры

Для задания мгновенной фазовой конфигурации в соответствии с (12.24) с учетом хронологического порядка всех некоммутирующих операторов достаточно определить для каждого кинка ближайшие к нему по времени кинки, с которыми он не может быть переставлен местами (например, из-за парного взаимодействия). Полагая для простоты все матричные элементы положительными и действительными, можно сформировать стохастический процесс, который будет перебирать конфигурации. Фактически CTWL-метод МК производит полное суммирование фейнмановских диаграмм, а потому, как уже упоминалось, он также называется *диаграммным методом*.

Далее для наглядности изложения рассмотрим особенности алгоритма на конкретном примере дискретной модели.

**12.1.3. CTWL-алгоритм для дискретного базиса. Статистика Ферми и Бозе.** Здесь будет детально рассмотрен CTWL-метод [107, 108] на примере систем, описываемых гамильтонианом вида

$$H = - \sum_{ij} t_{ij} (a_i^+ a_j + h.c.) + \sum_i \Delta_i n_i + \sum_{ij} V_{ij} n_i n_j. \quad (12.25)$$

Вообще говоря, амплитуды перескоков  $t_{ij}$ , узельные энергии  $\Delta_i$  и амплитуды парного взаимодействия  $V_{ij}$  могут быть любыми.

Будем одновременно обсуждать как ферми-, так и бозе-статистику в модели (12.25), для случая Ферми игнорируя спиновую степень свободы. Для простоты изложения положим сначала  $V_{ij} = 0$ , обобщения на случай ненулевого межчастичного взаимодействия будут рассматриваться в процессе изложения по мере необходимости.

Удобным базисом для узельной модели является представление чисел заполнения, так что за возмущение выбирается недиагональная в этом базисе

кинетическая энергия, и тогда кинком является перескок частицы между узлами (рис. 12.5).

Вид	Множитель
	$\sqrt{n_i(n_j + 1)} t_{ij} e^{\tau(\Delta_i - \Delta_j)} d\tau$

Рис. 12.5. Перескок частицы между узлами  $i$  и  $j$  и множитель, вносимый этим процессом в статистический вес конфигурации

Множитель, вносимый при этом в статистический вес конфигурации и показанный на рис. 12.5 — стандартный матричный элемент, рассчитанный в числах заполнения с учетом экспоненты от разницы энергии  $e^{\tau(\Delta_i - \Delta_j)}$  согласно (12.24). Особенности реализации соответствующих соотношений для фермионного знака, выведенные при рассмотрении дискретного траекторного алгоритма ранее, будут рассмотрены ниже в отдельном разделе.

Каждый кинк вносит в статистический вес малый множитель порядка  $dt \rightarrow 0$ , но это не препятствует вычислениям, потому что, как будет показано далее, взвешивается *не отдельная конфигурация, а их совокупность* в некотором интервале. Малость статистического веса в точности компенсируется большим количеством возможных топологически равных конфигураций, отличающихся только расположением времен на шкале мнимого времени.

Типичная система траекторий частиц показана на рис. 12.6. Случай на рис. 12.6, *a* соответствует фермионной статистике, на рис. 12.6, *b* — бозонной.

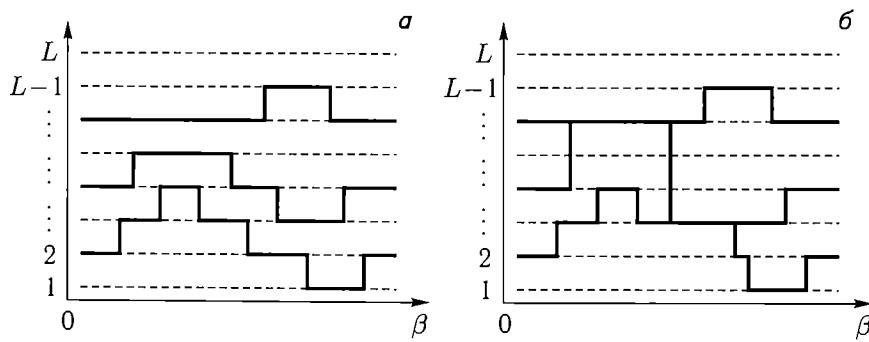


Рис. 12.6. Пример системы траекторий в алгоритме непрерывного времени

Разная толщина горизонтальных участков обозначает различие в числах заполнения. Обозначим полное число горизонтальных участков через  $J$ , приблизительно оно будет равно числу перескоков, а так как последнее зависит от величины возмущения, то среднее число перескоков можно оценить как  $O(\beta L z |t|)$ , где  $L$  — размер системы,  $z$  — число соседей, на которые возможен перескок. Теперь информацию о траекториях можно хранить гораздо более

экономным способом по сравнению с дискретным траекторным методом: хранятся лишь сведения о длине, положении горизонтальных участков, их числе заполнения и кинке, завершающем горизонтальный участок, а также сведения о ближайших к выбранному кинку других кинков, с которыми он не может поменяться по шкале времени, не меняя топологии конфигурации (такие кинки называются *ассоциативными соседями*).

В такой системе простейшим способом изменения конфигурации является так называемая процедура *kink-antikink*: на прямом участке траектории вводится перескок на другой узел и обратно (рис. 12.7).

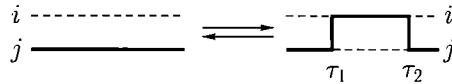


Рис. 12.7. Процедура *kink-antikink*

Заметим, что этот тип изменения траектории и является единственным для дискретного траекторного алгоритма. Однако с помощью этой процедуры невозможно изменить winding numbers траектории частицы. Поэтому, стартовав с конфигурации с каким-либо заданным числом оборотов, система все время будет оставаться с этим же числом. С другой стороны, вклад в статистическую сумму дают конфигурации со всеми winding numbers, и потому такой набор процедур нельзя считать полным, а алгоритм — эргодическим. Помимо процедуры *kink-antikink* требуются глобальные обновления системы, изменяющие числа оборотов траекторий.

Помимо winding numbers в системе остается фиксированным и полное число частиц. Но проводить вычисления более удобно в большом каноническом ансамбле, т. е. с нефиксированным числом частиц. В этом случае схема становится более эффективной для обновления траекторий, что значительно экономит вычислительное время, и вычисления идут гораздо стабильнее. Для того чтобы схема могла работать с переменным числом частиц, в гамильтониан можно ввести *фиктивное слагаемое* амплитуды  $\eta$ :

$$\Delta H = \eta \sum_i (a_i^+ + a_i); \quad (12.26)$$

кроме того, для перехода в большой канонический ансамбль в гамильтониан необходимо добавить слагаемое с химическим потенциалом. Итоговый гамильтониан примет вид

$$H = \eta \sum_i (a_i^+ + a_i) - \sum_{ij} t_{ij} (a_i^+ a_j + h.c.) + \sum_i (\Delta_i - \mu) n_i. \quad (12.27)$$

Фиктивному слагаемому (12.26) в гамильтониане соответствуют кинки, создающие разрывы траекторий (рис. 12.8).

Фиктивное слагаемое такого вида можно ввести из следующих соображений. Рассмотрим мацубаровскую функцию Грина в представлении взаимодействия:

$$G(i, j; \tau_1, \tau_2) = -\frac{1}{Z} \text{Tr} (e^{-\beta H_0} T \{ a_i(\tau_1) a_j^+(\tau_2) \sigma(\beta) \}). \quad (12.28)$$

Вид	Множитель
$i \xrightarrow[\tau]{} n_i \quad n_{i-1}$	$-\sqrt{n_i} \eta e^{\tau(\Delta_i - \mu)} d\tau$
$i \xleftarrow[\tau]{} n_i \quad n_{i+1}$	$-\sqrt{n_i + 1} \eta e^{-\tau(\Delta_i - \mu)} d\tau$

Рис. 12.8. Кинки, соответствующие фиктивному слагаемому (12.26)

Фактически, различие в расчете функции Грина по сравнению с расчетом статистической суммы — в наличии двух добавочных кинков, соответствующих операторам  $a_i(\tau_1)$  и  $a_j^+(\tau_2)$ , уничтожающим или рождающим частицу (и ее траекторию).

По-другому, можно ввести точечный источник (внешнее поле) в действие:

$$\int_0^\beta V(\tau) d\tau \Rightarrow \int_0^\beta V(\tau) d\tau + \sum_{ij} \int_0^\beta [\eta_i^*(\tau) a_i(\tau) + \eta_j(\tau) a_j^+(\tau)] d\tau \quad (12.29)$$

и определить функцию Грина как вариацию статистической суммы (математическое определение функции Грина как функции точечного источника):

$$G(i, j; \tau_1, \tau_2) = -\frac{1}{Z} \frac{\delta^2 Z}{\delta \eta_i(\tau_1) \delta \eta_j^*(\tau_2)} \Big|_{\eta_i, \eta_j \rightarrow 0}, \quad (12.30)$$

что приводит к фиктивному слагаемому (12.26).

Теперь множество вариантов конфигураций с замкнутыми траекториями оказалось дополненным фиктивными конфигурациями траекторий с разрывами. Примеры конфигураций мировых линий с разрывами показаны на рис. 12.9. Случай на рис. 12.9, а соответствует фермионной статистике, на рис. 12.9, б — бозонной.

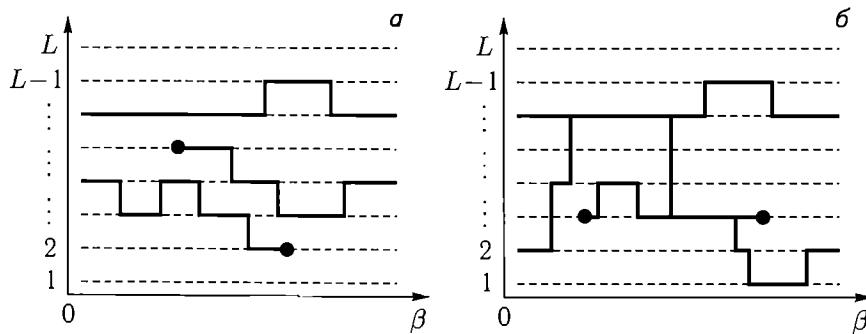


Рис. 12.9. Пример системы траекторий с фиктивными слагаемыми

Разрывы, перемещаясь по системе, могут встречаться и взаимно уничтожаться на любом узле, изменяя полное число частиц в системе и числа оборотов траекторий. Способы рождения, передвижения и уничтожения раз-

рывов обсуждаются ниже. Разомкнутые траектории с разрывами называются *червями* (*worms*), а сам алгоритм называется *червячным алгоритмом* (*worm algorithm*).

Такие фиктивные (виртуальные) состояния с присутствием червей чрезвычайно ускоряют сходимость. Концы (хвосты) траекторий как бы сканируют фазовое пространство, эффективно его обновляя, периодически замыкаясь в реальные состояния с замкнутыми траекториями. Относительно нечастое появление во время расчета замкнутых конфигураций все же достаточно для эффективного расчета; кроме того, частоту появления реальных состояний можно регулировать величиной  $\eta$ .

Действительно, квантово-механические средние от физических величин по-прежнему вычисляются по состояниям без разрывов. Фиктивные состояния также несут физическую информацию, так как согласно (12.28), (12.30) отражают статистику мацубаровской функции Грина. В статистический вес конфигурации без разрывов множитель  $\eta$  не входит, а потому соотношения между статистическими весами состояний без червей остаются неизменными. Следовательно, значение  $\eta$  можно выбирать произвольно, исходя из соображений удобства и скорости расчета. Также можно наложить запрет на появление второго червя, тогда вероятность замыкания двух концов червя будет порядка  $1/(\beta\tau L)^2$ , и для эффективной работы алгоритма следует выбирать  $\eta \sim 1/\beta\tau L$ . Такое ограничение обычно допустимо, исключения составляют только некоторые специфические случаи. Например, в спиновой системе по-перечное магнитное поле вносит в гамильтониан такое же слагаемое с одиночными операторами рождения и уничтожения (12.26), но уже не фиктивное, а реальное, поэтому в такой системе нельзя накладывать ограничения на количество червей.

Таким образом, главные процессы обновления траекторий, формирующие статистику, — процедуры изменения состояний разрывов траекторий (червей). Рассмотрим их подробнее. Для рождения и уничтожения червей используется пара процессов *creation-annihilation*: на пустом участке появляется участок с увеличенным числом частиц, или, наоборот, в траектории появляется разрыв (рис. 12.10).

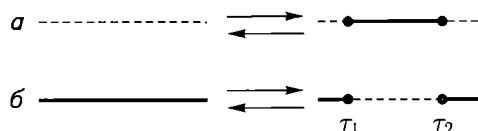


Рис. 12.10. Пара процессов *creation-annihilation*: *а* — с увеличением, *б* — с уменьшением числа частиц

Для изменения количества кинков используются процессы *jump-antijump* (хвост червя перебрасывается на другой узел) и *reconnection-antireconnection* — то же, что и *jump-antijump*, но в дырочном представлении (рис. 12.11).

Для эффективного перемещения хвостов червя по системе необходимо ввести процедуру сдвига хвоста по времени — *shift* (рис. 12.12).

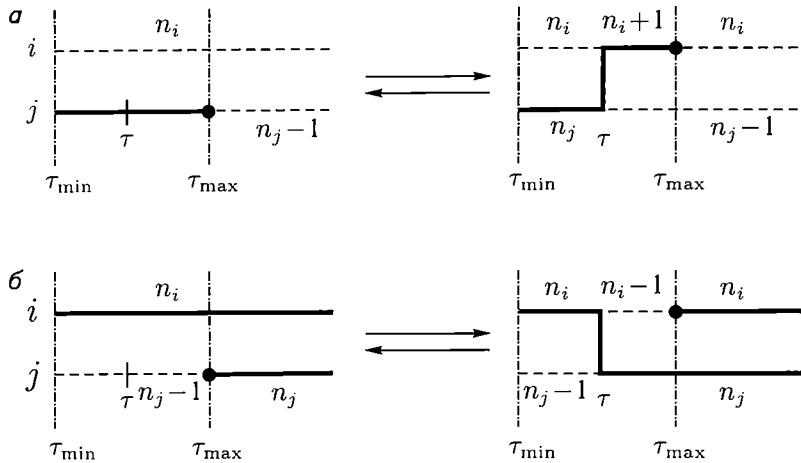


Рис. 12.11. Процедуры обновления конфигураций *jump-antijump* (а) и *reconnection-antireconnection* (б). Показаны процедуры для одного из хвостов. Аналогичные процедуры применяются для другого хвоста.  $\tau_{\max}$  совпадает по времени с хвостом червя,  $\tau_{\min}$  ограничено слева временем ближайшего кинка на узлах  $i$  и  $j$

Все вышеперечисленные процедуры изменения конфигураций относятся только к окрестностям хвостов червя; для ускорения изменений можно ввести также и процедуру сдвига кинка по времени (рис. 12.13).

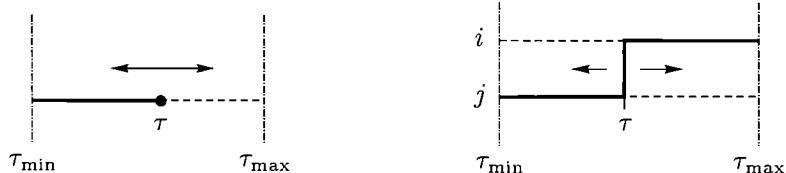


Рис. 12.12. Процедура *shift* сдвига хвоста червя;  $\tau_{\min}$  и  $\tau_{\max}$  ограничены временами ближайших кинков

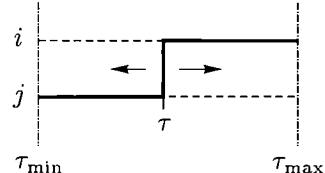


Рис. 12.13. Процедура *shift* сдвига кинка;  $\tau_{\min}$  и  $\tau_{\max}$  ограничены временами ближайших кинков на узлах  $i$  и  $j$

Рассмотрим более подробно каждую из этих процедур.

**1. Процедура creation-annihilation.** Рассмотрим вариант с увеличением числа заполнения  $n_i \rightarrow n_i + 1$  на временном интервале  $(\tau_1, \tau_2)$  (см. рис. 12.10, а). Если статистический вес старой конфигурации обозначить  $W^{(\text{old})}$ , то статистический вес новой конфигурации

$$W^{(\text{new})} = W^{(\text{old})} (-\eta_i d\tau \sqrt{n_i + 1})^2 e^{-(\tau_2 - \tau_1)(\Delta_i - \mu)}. \quad (12.31)$$

Уравнение детального баланса для этой пары процессов имеет вид

$$W^{(\text{old})} P_{\rightarrow p \rightarrow} = W^{(\text{new})} P_{\leftarrow p \leftarrow}, \quad (12.32)$$

где  $p$  — вероятность реализации процедуры,  $P$  — вероятность вызова процедуры в алгоритме.

Место действия прямой процедуры выбирается случайно в одном из  $J$  горизонтальных участков в системе мировых линий, поэтому вероятность  $P_{\rightarrow}$  вызова прямой процедуры равна  $1/J$ . Обратная же процедура сразу обращается к участку между двумя хвостами (так как он единственен в данном алгоритме), и поэтому  $P_{\leftarrow} = 1$ , при этом обратная процедура не реализуется, если между хвостами нет прямолинейного участка в данный момент.

Согласно алгоритму Метрополиса

$$\frac{p_{\rightarrow}}{p_{\leftarrow}} = \begin{cases} W_c, & W_c < 1, \\ 1, & W_c \geqslant 1, \end{cases} \quad (12.33)$$

где

$$W_c = \frac{W^{(\text{new})}}{W^{(\text{old})}} \frac{P_{\rightarrow}}{P_{\leftarrow}} = J(-\eta_i d\tau \sqrt{n_i + 1})^2 e^{-(\tau_2 - \tau_1)(\Delta_i - \mu)}.$$

Выражение (12.33) приводит к неэффективной реализации процедуры, так как

$$\frac{p_{\rightarrow}}{p_{\leftarrow}} \sim (d\tau)^2 \rightarrow 0. \quad (12.34)$$

Чтобы решить эту проблему, нужно сравнивать не две конкретные конфигурации (одна с новым червем, а другая — с его отсутствием на выбранном горизонтальном участке) а *классы* конфигураций. Сравним конфигурацию без червя с совокупностью конфигураций, для которых рожденный червь расположен не конкретно при  $\tau_1$  и  $\tau_2$ , а в интервале

$$\tau_{\min} \leqslant \tau_1 \leqslant \tau_2 \leqslant \tau_{\max}.$$

Временное «окно»  $\tau_{\min} \div \tau_{\max}$  для этого класса выбирается в пределах горизонтального участка; оно может быть и меньше из-за возможного наличия ассоциативных кинков, связанных с дальнодействием (рис. 12.14):

Суммарный статистический вес  $W_{\text{new}}^{\int}$  такого класса траекторий (по сравнению с ситуацией без червя) имеет согласно разложению (12.24) следующий вид:

$$\frac{W_{\text{new}}^{\int}}{W_{\text{old}}^{\int}} = \eta_i^2 (n_i + 1) \int_{\tau_{\min}}^{\tau_{\max}} d\tau_2 \int_{\tau_{\max}}^{\tau_{\max} - \tau_2} e^{(\tau_2 - \tau_1)(\Delta_i - \mu)} d\tau_1, \quad (12.35)$$

тогда вероятность перехода в (12.33) будет

$$\begin{aligned} \frac{p_{\rightarrow}}{p_{\leftarrow}} &= \frac{W_{\text{new}}^{\int}}{W_{\text{old}}^{\int}} \frac{P_{\rightarrow}}{P_{\leftarrow}} = J \eta_i^2 (n_i + 1) Z_2(\tau_{\max} - \tau_{\min}, \Delta_i - \mu), \\ Z_2(\tau, Q) &= \frac{e^{\tau Q} - \tau Q - 1}{Q^2}. \end{aligned} \quad (12.36)$$

Видно, что квадрат малости по мнимому времени  $(d\tau)^2$  отсутствует, и вероятности принять или отвергнуть новую конфигурацию оказываются порядка единицы.

Если согласно (12.33) новый класс конфигураций принят, т. е. на следующем шаге МК произойдет изменение конфигурации, то внутри класса возможных новых конфигураций необходимо выбрать конкретную конфигурацию

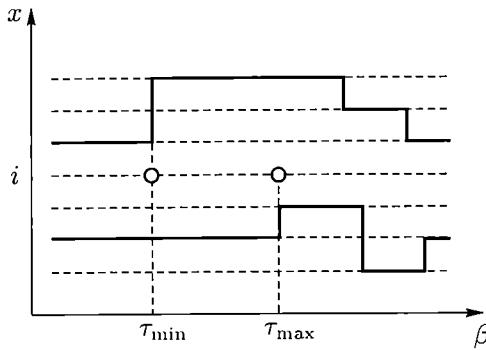


Рис. 12.14. Временное окно на узле  $i$  может быть ограничено из-за присутствия ассоциативных кинков

с определенными  $\tau_1$  и  $\tau_2$ . Плотность распределения вероятности выбора  $\tau_1$  и  $\tau_2$  — подынтегральная функция

$$W_{\rightarrow}(\tau_1, \tau_2) = \frac{e^{(\tau_2 - \tau_1)(\Delta_i - \mu)}}{Z_2(\tau_{\max} - \tau_{\min}, \Delta_i - \mu)}, \quad (12.37)$$

где  $Z_2$  (см. (12.36)) выбирается из условия нормировки полной вероятности:

$$1 = \int_{\tau_{\min}}^{\tau_{\max}} d\tau_2 \int_{\tau_{\max}}^{\tau_{\max} - \tau_2} W_{\rightarrow}(\tau_1, \tau_2) d\tau_1. \quad (12.38)$$

В случае рождения червя в дырочном заполнении (см. рис. 12.11, б) единственное отличие будет в том, что в формулах перед  $(\Delta_i - \mu)$  везде появится знак минус. Формулы для определения  $Z_2$ ,  $\tau_1$  и  $\tau_2$  и их вывод приведены в приложении 5.

В принципе, рассмотренную процедуру можно трактовать и по-другому, как будто в ней происходит сравнение не с классом траекторий, а все-таки с мгновенной конфигурацией с заданными  $\tau_1$  и  $\tau_2$ , но тогда следует в уравнение баланса явно вставить нормированную плотность вероятности выбора этой конкретной конфигурации:

$$W^{(\text{old})} P_{\rightarrow} p_{\rightarrow} W_{\rightarrow}(\tau_1, \tau_2) = W^{(\text{new})} P_{\leftarrow} p_{\leftarrow}, \quad (12.39)$$

что немедленно приводит к соотношениям (12.33), (12.36).

Если необходимо реализовать обратную процедуру исчезновения (*annihilation*) прямого куска траектории с заполнением  $(n_i + 1) \rightarrow n_i$  от  $\tau_1$  до  $\tau_2$ , то согласно детальному балансу ее вероятность будет обратна вероятности прямой процедуры:

$$\frac{p_{\leftarrow}}{p_{\rightarrow}} = \begin{cases} W_a, & W_a < 1, \\ 1, & W_a \geq 1, \end{cases} \quad (12.40)$$

где

$$W_a = \frac{W^{(\text{old})}}{W^{(\text{new})}} \frac{P_{\rightarrow}}{P_{\leftarrow}} = \frac{1}{(J - 2)(\eta_i \sqrt{n_i + 1})^2 Z_2(\tau_{\max} - \tau_{\min}, \Delta_i - \mu)}.$$

Очевидно, что в этом случае отсутствует выбор  $\tau_1$  и  $\tau_2$ , так как эти точки уже имеются. Множитель  $(J - 2)$  в знаменателе учитывает уменьшение количества прямых кусков траекторий после реализации процедуры.

Процедуры рождения и уничтожения пары кинк-антикинк с изменением чисел заполнения  $n_i \leftrightarrow n_i - 1$ ;  $n_j \leftrightarrow n_j + 1$  на участке от  $\tau_1$  до  $\tau_2$  (рис. 12.15) почти совпадают с процедурой *creation-annihilation*, поэтому не будем их обсуждать отдельно, а остановимся только на отличиях.

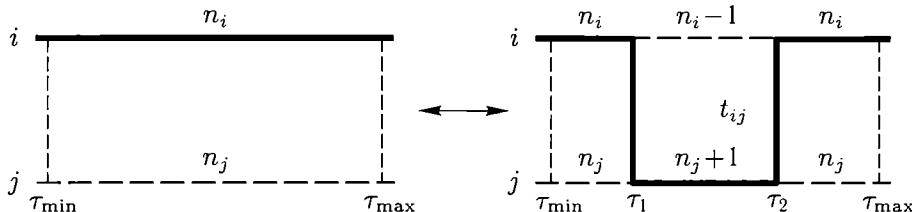


Рис. 12.15. Процедуры рождения и уничтожения пары кинк-антикинк

В соответствии с действиями операторов в выражении для вероятностей следует произвести замену

$$\eta^2 \left( \sqrt{n_i + 1} \right)^2 \rightarrow t_{ij}^2 n_i (n_j + 1). \quad (12.41)$$

Кроме того, несколько иными будут вероятности вызова процедур. Если прямая процедура реализуется аналогичным образом — через обращение к диагональному участку среди  $J$  имеющихся, то вероятность вызова прямой процедуры будет  $P_{\rightarrow} = 1/J$  (при этом проверяется наличие на соседнем узле диагонального участка если его нет процедура отвергается). Обратная процедура может реализоваться на любом диагональном участке, если он оканчивается слева и справа одинаковым кинком с прыжком на один и тот же соседний узел при условии, что между этими кинками на обоих узлах — только прямые траектории, поэтому вероятность  $P_{\leftarrow} = 1/J$  рассчитывается так же. Следует учесть только, что после прямой (обратной) процедуры число горизонтальных участков изменяется и становится равным  $J + 4$  или  $J - 4$  соответственно. Итоговые выражения для вероятностей такие:

$$\frac{p_{\rightarrow}}{p_{\leftarrow}} = \begin{cases} W_c = \frac{W^{(\text{new})}}{W^{(\text{old})}} \frac{P_{\rightarrow}}{P_{\leftarrow}} = \\ = \frac{J}{J+4} t_{ij}^2 n_i (n_j + 1) Z_2(\tau_{\max} - \tau_{\min}, \Delta_j - \Delta_i), & W_c < 1, \\ 1, & W_c \geq 1. \end{cases} \quad (12.42)$$

$$\frac{p_{\leftarrow}}{p_{\rightarrow}} = \begin{cases} W_a = \frac{W^{(\text{old})}}{W^{(\text{new})}} \frac{P_{\leftarrow}}{P_{\rightarrow}} = \\ = \frac{J-4}{J} \frac{1}{t_{ij}^2 n_i (n_j + 1) Z_2(\tau_{\max} - \tau_{\min}, \Delta_j - \Delta_i)}, & W_a < 1, \\ 1, & W_a \geq 1. \end{cases}$$

Химический потенциал исчезает из выражения для вероятностей, что отражает факт сохранения числа частиц в процедуре *kink-antikink*.

Заметим, что эта процедура — дополнительная, ее по частям полностью реализует процедура *jutpr-antijutpr*.

2. Процедура *jutpr-antijutpr*. Это процесс переброса хвоста траектории на другой пространственный узел. Рассмотрим вариант процесса с участием правого хвоста (см. рис. 12.11, *a*)). Будем полагать, что меняется только пространственное расположение хвоста, а временная переменная остается та же. Сам прыжок (кинк) траектории может произойти в любом месте  $\tau$  во временном окне  $\tau_{\min} \leq \tau \leq \tau_{\max}$ .

Сначала сравним веса мгновенных одиночных конфигураций с «прямым» хвостом и с «изогнутым», переброшенным на соседний узел:

$$\begin{aligned} W^{(\text{old})} &\sim (-d\tau \eta_i \sqrt{n_i}) e^{-(\tau_{\max} - \tau_{\min})(\Delta_i - \mu)}, \\ W^{(\text{new})} &\sim (-d\tau \eta_j \sqrt{n_j + 1}) \left( d\tau t_{ij} \sqrt{n_i(n_j + 1)} \right) \times \\ &\quad \times e^{-(\tau_{\max} - \tau_{\min})(\Delta_i - \mu)} e^{-(\tau - \tau_{\min})(\Delta_j - \mu)}, \end{aligned} \quad (12.43)$$

где  $W^{(\text{old})}$  — статистический вес конфигурации с «прямым» хвостом траектории,  $W^{(\text{new})}$  — статистический вес конфигурации с «изогнутым» червем. Тогда их отношение

$$\frac{W^{(\text{new})}}{W^{(\text{old})}} = d\tau t_{ij} \frac{\eta_j}{\eta_i} (n_j + 1) e^{(\tau - \tau_{\min})(\Delta_j - \Delta_i)}. \quad (12.44)$$

Соотношение (12.44) неэффективно, так как отношение статистических весов порядка  $d\tau$ . Опять рассмотрим класс траекторий, топологически совпадающих с «изогнутой» траекторией, у которых прыжок червя (кинк) не фиксирован при заданном  $\tau$ , а находится в интервале  $\tau_{\min} \leq \tau \leq \tau_{\max}$ . Сравним исходную траекторию с прямым хвостом с этим классом траекторий. Временное окно  $\tau_{\min} \div \tau_{\max}$  выберем согласно рис. 12.11, *a*. Обозначим  $Q \equiv \Delta_j - \Delta_i$ , тогда для интегральных вероятностей имеем

$$\begin{aligned} \frac{W_{\text{new}}^{\int}}{W_{\text{old}}^{\int}} &= t_{ij} \frac{\eta_j}{\eta_i} (n_j + 1) \int_{\tau_{\min}}^{\tau_{\max}} d\tau_2 \int_{\tau_{\max}}^{\tau_{\max} - \tau_2} e^{(\tau_2 - \tau_1)Q} d\tau_1 = \\ &= t_{ij} \frac{\eta_j}{\eta_i} (n_j + 1) Z_1(\tau_{\max} - \tau_{\min}, Q), \end{aligned} \quad (12.45)$$

и малость  $d\tau$  исчезает. Интеграл  $Z_1$  в (12.45) равен

$$Z_1(\tau, Q) = \frac{e^{\tau Q} - 1}{Q}. \quad (12.46)$$

Вернемся к мгновенным конфигурациям и попробуем вывести (12.45) по-другому, без интегральных вероятностей. Плотность вероятности выбора конкретной конфигурации типа *jutpr* (см. рис. 12.11) с прыжком в точке  $\tau$  равна нормированной подынтегральной функции в (12.45):

$$W_{\rightarrow}(\tau) = \frac{e^{(\tau - \tau_{\min})Q}}{Z_1(\tau_{\max} - \tau_{\min}, Q)}; \quad (12.47)$$

соответствующее уравнение баланса имеет вид

$$W^{(\text{old})} P_{\rightarrow} p_{\rightarrow} W_{\rightarrow}(\tau) = W^{(\text{new})} P_{\leftarrow} p_{\leftarrow}. \quad (12.48)$$

Вероятность  $P_{\rightarrow}$  выбрать именно узел  $j$  пропорциональна  $1/z$ , где  $z$  — число соседей, не обязательно ближайших, на которые возможен перескок с узла  $i$ , в то время как обратный процесс может произойти единственным способом. Выбора правого (левого) хвоста в данном случае нет, поэтому, учитывая также (12.44), для процедуры *jutpr* получаем

$$\frac{p_{\rightarrow}}{p_{\leftarrow}} = \begin{cases} W_{\text{jump}}, & W_{\text{jump}} < 1, \\ 1, & W_{\text{jump}} \geq 1, \end{cases} \quad (12.49)$$

где

$$W_{\text{jump}} = z \frac{W^{(\text{new})}}{W^{(\text{old})}} W_{\rightarrow}(\tau) = z t_{ij} \frac{\eta_j}{\eta_i} (n_j + 1) Z_1(\tau_{\max} - \tau_{\min}, Q),$$

что с учетом вероятности обращения  $1/z$  совпадает с интегральным вариантом (12.45). Формулы для выбора конкретного значения  $\tau$  согласно плотности вероятности (12.47) приведены в приложении 5.

Вероятность обратного процесса *antijutpr* получаем из (12.49) с учетом детального баланса (12.48):

$$\frac{p_{\leftarrow}}{p_{\rightarrow}} = \begin{cases} W_{\text{antijump}}, & W_{\text{antijump}} < 1, \\ 1, & W_{\text{antijump}} \geq 1, \end{cases} \quad (12.50)$$

где

$$W_{\text{antijump}} = \frac{W^{(\text{old})}}{z W^{(\text{new})} W_{\rightarrow}(\tau)} = \frac{\eta_i}{z \eta_j t_{ij} (n_j + 1) Z_1(\tau_{\max} - \tau_{\min}, Q)},$$

Процедура *reconnection-antireconnection* для левого хвоста идентична процедуре *jutpr-antijutpr* для правого хвоста (см. рис. 12.11, б) с той лишь разницей, что множитель  $Q$  изменит знак. Формулы для другого хвоста отличаются от приведенных только переопределением  $\tau_{\min}$  и  $\tau_{\max}$ .

**3.** Сдвиг (*shift*) хвоста червя. Процесс сдвига не нуждается в обратном процессе, потому что сам себе служит обратным процессом. Выведем баланс для сдвига правого хвоста из  $\tau$  в  $\tau_2 \neq \tau$  (см. рис. 12.12):

$$\begin{aligned} W^{(\text{old})} &\sim (-\eta_i d\tau) e^{-(\tau - \tau_{\min})(\Delta_i - \mu)}, \\ W^{(\text{new})} &\sim (-\eta_i d\tau) e^{-(\tau_2 - \tau_{\min})(\Delta_i - \mu)}. \end{aligned} \quad (12.51)$$

Обозначим  $\mu - \Delta_i \equiv Q$  и выберем в качестве плотности вероятности  $W(\tau) = \frac{1}{Z_1} e^{-(\tau - \tau_{\min})Q}$ , тогда вероятность перехода к новой конфигурации  $R \equiv \frac{p_{\rightarrow}}{p_{\leftarrow}} = 1$ , т. е. процесс сдвига происходит безусловно. Останется только согласовать  $W(\tau)$  выбрать конкретное значение  $\tau$ .

**4.** Сдвиг (*shift*) перескока. Теперь  $Q \equiv \Delta_j - \Delta_i$ ; вероятность выбрать новый момент мнимого времени для перескока равна

$$W(\tau) = \frac{1}{Z_1(\tau_{\max} - \tau_{\min}, Q)} e^{(\tau - \tau_{\min})Q}. \quad (12.52)$$

Как и сдвиг хвоста, сдвиг перескока происходит безусловно.

Таким образом, в алгоритме все процедуры разделяются на два класса — имеющие дело с одной неизвестной точкой во времени  $\tau$  (*jump, reconnection, shift*) и с двумя —  $\tau_1$  и  $\tau_2$  (*creation-annihilation, kink-antikink*), и описываются в рамках единой схемы и одинаковыми формулами.

Итоговая схема алгоритма такова (рис. 12.16).

1. Формируется начальная конфигурация — это могут быть, например, прямые замкнутые линии без перескоков. Можно взять в качестве начального состояния вообще пустое пространство с отсутствием частиц или любую другую допустимую конфигурацию.
2. Случайным образом выбирается тип процедуры.
3. Выбирается место действия процедуры и границы  $\tau_{\min}$  и  $\tau_{\max}$ .
4. Рассчитываются значения  $Q$  (множителя при  $\tau$  в экспоненте) нормировочного множителя  $Z$  и  $R \equiv \frac{p_{\rightarrow}}{p_{\leftarrow}}$ .
5. В зависимости от  $R$  процесс случайным образом принимается или отвергается.
6. Для некоторых процессов определяются  $\tau$  или  $\tau_1$  и  $\tau_2$ . Все необходимые формулы для определения  $Z$  и  $\tau$  приведены в приложении 5.
7. Рассчитываются и суммируются необходимые средние от физических величин. Затем процесс повторяется, начиная с п. 2 алгоритма.
8. Все погрешности величин рассчитываются в соответствии с автокорреляционным анализом, обсуждаем в гл. 10.

Иногда при выполнении этой схемы оказывается невозможным выполнить процедуру по изменению конфигурации — например, при попытке превысить максимально разрешенное число заполнения, или из-за бессмыслиности сдвига кинка на нулевое время, или при попытке рождения нового червя при его присутствии в конфигурации. В этой ситуации не стоит опасаться прекратить выполнение этой процедуры — нарушения баланса не будет, так как обратный процесс не произойдет по той же причине.

Все преобразования происходят в относительном времени, поэтому процедуры, перешагивающие за границу  $\tau = \beta$  или  $\tau = 0$ , выделять в отдельный сорт не нужно.

Учет парного взаимодействия  $V_{ij}$  в этой схеме можно производить двумя способами. Один способ — рассматривать парное взаимодействие как возмущение, тогда в схеме появляются так называемые *диагональные кинки* (рис. 12.17).

Для рождения, уничтожения и движения диагональных кинков вводятся несложные дополнительные процедуры, так что этот вариант весьма прост для реализации. Но он не всегда подходит, в частности при положительных  $V_{ij}$  (т. е. при отталкивающем взаимодействии) появляется проблема знака, которая при низких температурах делает расчеты невозможными. Другой способ — считать энергию парного взаимодействия добавкой в узельные энергии, при этом она будет зависеть от  $\tau$  и положения остальных траекторий. Алгоритм усложняется и расчет может значительно замедлиться, но все же этот вариант предпочтительнее первого способа.

Существует тонкость в применении процедуры *creation-annihilation*: в ситуации, показанной на рис. 12.18, червя можно уничтожить двумя способами —

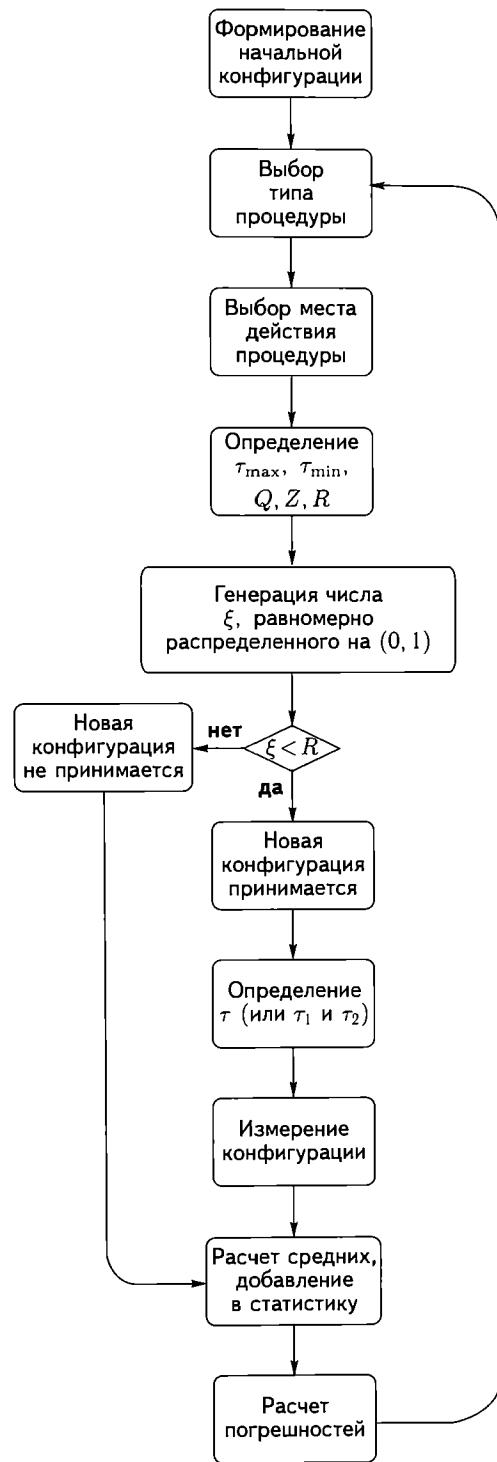


Рис. 12.16. Схема CTWL-алгоритма

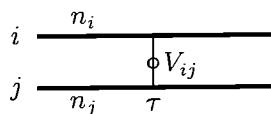


Рис. 12.17. Диагональные кинки, появляющиеся при учете парного взаимодействия в качестве возмущения

или получить замкнутую петлю без частиц (случай *a*), или же петлю с частицей (случай *b*); в случае *b* к тому же непросто выделить окно  $(\tau_{\min}, \tau_{\max})$ .

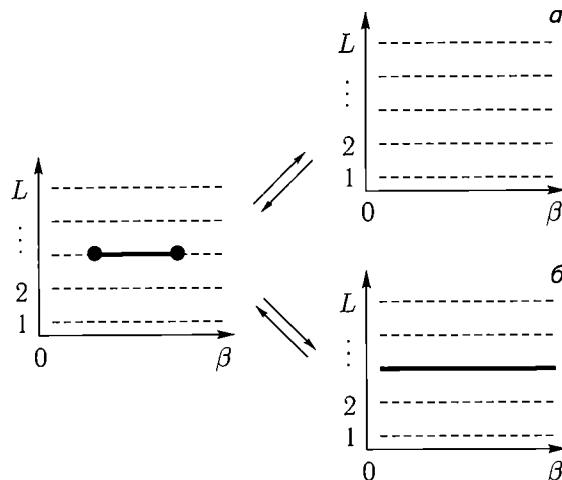


Рис. 12.18. Два возможных варианта (*a* и *b*) уничтожения червя в конфигурации, показанной слева

Выражения для  $Z$  и  $\tau$  для случая *b* должны отличаться от тех, что приведены в приложении 5, которые выведены для случая незамкнутого интервала  $(\tau_{\min}, \tau_{\max})$ . Поэтому для простоты и унификации алгоритма накладывается требование (помимо выбора в этом случае  $\tau_{\min} = 0$ ,  $\tau_{\max} = \beta$ ): уничтожение червя может быть выполнено, только если он не пересекает границ, т. е. точек  $\tau = 0$  и  $\tau = \beta$ . При этом требовании вторая пара процессов, показанная на рис. 12.18, произойти не сможет.

Информацию о траекториях, необходимую для организации работы алгоритма МК, можно хранить гораздо более экономным по сравнению с дискретным траекторным методом способом: следует хранить лишь сведения о длине и положении горизонтальных участков, их числе заполнения и кинках, завершающих каждый горизонтальный участок, а также сведения об их ассоциативных соседях. В приложении 6 предлагается алгоритм рождения и уничтожения имен (номеров) диагональных участков.

**12.1.4. Расчет средних и некоторые результаты расчета методом СТWL.** Итак, реализовав процедуру перебора конфигураций, можно рассчитывать квантово-механические средние. Для этого следует дождаться замыкания червя, и только в этом случае собирать информацию.

Среднее значение оператора  $A$  рассчитывается следующим образом:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n \langle n | Ae^{-\beta H} | n \rangle}{\sum_n \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle} = \frac{\sum_{MC} \langle n_1 | A | n_1 \rangle \operatorname{sgn} W}{\sum_{MC} \operatorname{sgn} W}. \quad (12.53)$$

В частности, среднее значение оператора возмущения  $V$  (в нашем случае это кинетическая энергия  $K$ ) принимает очень простой вид

$$\langle K \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\sum_{MC} N_{\text{kink}} \operatorname{sgn} W}{\sum_{MC} \operatorname{sgn} W}, \quad (12.54)$$

где  $N_{\text{kink}}$  — число кинков в системе. Покажем это (везде в формулах  $\Delta\tau \rightarrow 0$ ):

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= \frac{\sum_{N, n_1, \dots, n_N} \langle n_1 | V e^{\cdots (-\Delta\tau V)} | n_2 \rangle \dots \langle n_N | e^{\cdots (-\Delta\tau V)} | n_1 \rangle}{\sum_{N, n_1, \dots, n_N} \langle n_1 | e^{\cdots (-\Delta\tau V)} | n_2 \rangle \dots \langle n_N | e^{\cdots (-\Delta\tau V)} | n_1 \rangle} = \\ &= \frac{\frac{1}{\Delta\tau} \sum_{N, n_1, \dots, n_N} \langle n_0 | (-\Delta\tau V) | n_1 \rangle \langle n_1 | e^{\cdots (-\Delta\tau V)} | n_2 \rangle \dots \langle n_N | e^{\cdots (-\Delta\tau V)} | n_0 \rangle}{\sum_{N, n_1, \dots, n_N} \langle n_1 | e^{\cdots (-\Delta\tau V)} | n_2 \rangle \dots \langle n_N | e^{\cdots (-\Delta\tau V)} | n_1 \rangle} = \\ &= \frac{-\frac{1}{\Delta\tau} \sum_{N=0}^{\infty} W_{N+1}}{\sum_{N=0}^{\infty} W_N} \Big|_{\tau_0=0}. \end{aligned} \quad (12.55)$$

Так как статистические веса записаны в относительном времени, при сдвиге времени статистические веса не меняются, а требование  $\tau_0 = 0$  в числителе будет выполнено  $N + 1$  раз из  $M = \beta/\Delta\tau$  различных вариантов с идентичными весами:

$$\langle V \rangle = \frac{-\frac{1}{\Delta\tau} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{N+1}{M} W_{N+1}}{\sum_{N=0}^{\infty} W_N}. \quad (12.56)$$

Выполнив сдвиг  $N + 1 \rightarrow N$ , получаем формулу (12.54).

Диагональные средние, например число частиц, потенциальная энергия, рассчитываются легко. Для этого следует на каждом диагональном участке траекторий  $J$  длиной  $\tau_J$  рассчитать произведение значения соответствующего оператора на этом участке на длину этого участка, и затем усреднить резуль-

тат по всей конфигурации:

$$\langle N \rangle = \left\langle \frac{1}{\beta} \sum_J n(\tau_J) \tau_J \right\rangle, \quad \langle V \rangle = \left\langle \frac{1}{\beta} \sum_J V(\tau_J) \tau_J \right\rangle. \quad (12.57)$$

Например, в [17] методом CTWL была рассчитана энергия для одномерной редуцированной модели Бозе–Хаббарда и получены химические потенциалы, соответствующие изменению числа частиц в системе на единицу:

$$\mu_{\pm} = \mp (E_N - E_{N \pm 1}), \quad (12.58)$$

что позволило рассчитать щель в спектре возбуждений  $\Delta = \mu_+ - \mu_-$  и получить границы мотовской несверхтекучей области как для случая притяжения  $U < 0$ , так и для отталкивания  $U > 0$  (рис. 12.19).

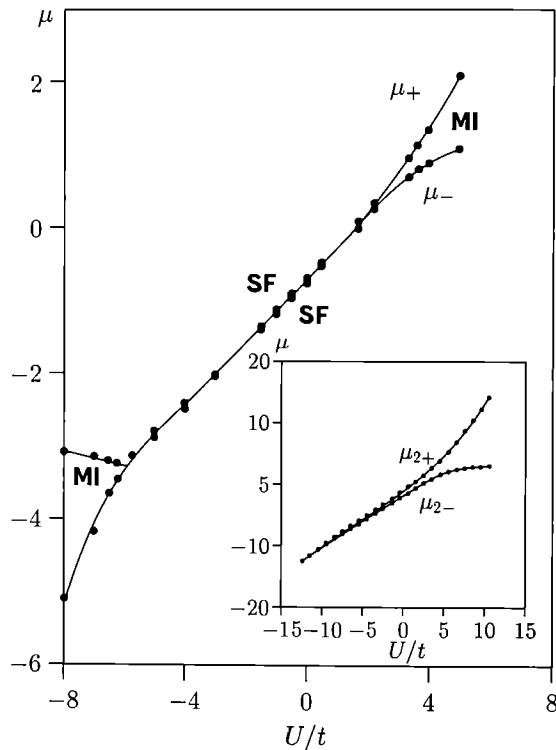


Рис. 12.19. Фазовая диаграмма редуцированной одномерной модели Бозе–Хаббарда из [17] для 50 узлов и 50 частиц; SF обозначает область сверхтекучей фазы, MI — область мотовского изолятора

Особый случай — расчет таких недиагональных средних, как матрица плотности, мацубаровская функция Грина. В этом случае следует производить сбор статистики по фиктивным состояниям, так как они и являются статистикой для функции Грина. Простой сбор гистограммы по взаимному пространственно-временному положению двух хвостов червя (см. (12.28)), (12.30)) и приводит к расчету температурной функции Грина:

$$G_{\sigma_1 \sigma_2}(i, j; \tau) = -\text{Tr} (a_{i\sigma_1}(\tau) a_{j\sigma_2}^+(0)), \quad 0 < \tau < \beta. \quad (12.59)$$

и ее предельного случая при равных временах — матрицы плотности

$$\langle a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} \rangle = G_{\sigma\sigma}(i, j; \tau) \Big|_{\tau \rightarrow -0}; \quad (12.60)$$

нормировать ее несложно на предельный случай

$$G_{\sigma_1\sigma_2}(i, j; \tau) \Big|_{i=j; \sigma_1=\sigma_2=\sigma; \tau \rightarrow -0} = \langle n_{i\sigma} \rangle, \quad (12.61)$$

который рассчитывается отдельно по формулам диагонального среднего (12.57).

Например, в [70] для двумерной модели Бозе–Хаббарда и системы из  $L \times L = 80^2$  узлов были получены корреляционные функции для исследования квазиконденсации (рис. 12.20). Сплошными линиями на рисунках 12.20, *в* и 12.20, *г* показано решение, полученное из приближения спектра моделью Боголюбова.

В работе [78] были рассчитаны функция Грина и плотность состояний для двумерной *t-J*-модели для системы из  $16 \times 16$  и  $32 \times 32$  узлов (рис. 12.21).

Для расчета таких коллективных свойств системы, как сверхтекучая плотность  $\rho_S$ , используется статистика *winding numbers*. Известно, что сверхтекучая плотность пропорциональна среднему от квадрата пространственного *winding number* по заданному направлению  $\chi$  (см. [79]):

$$\rho_S \sim \langle W_\chi^2 \rangle; \quad (12.62)$$

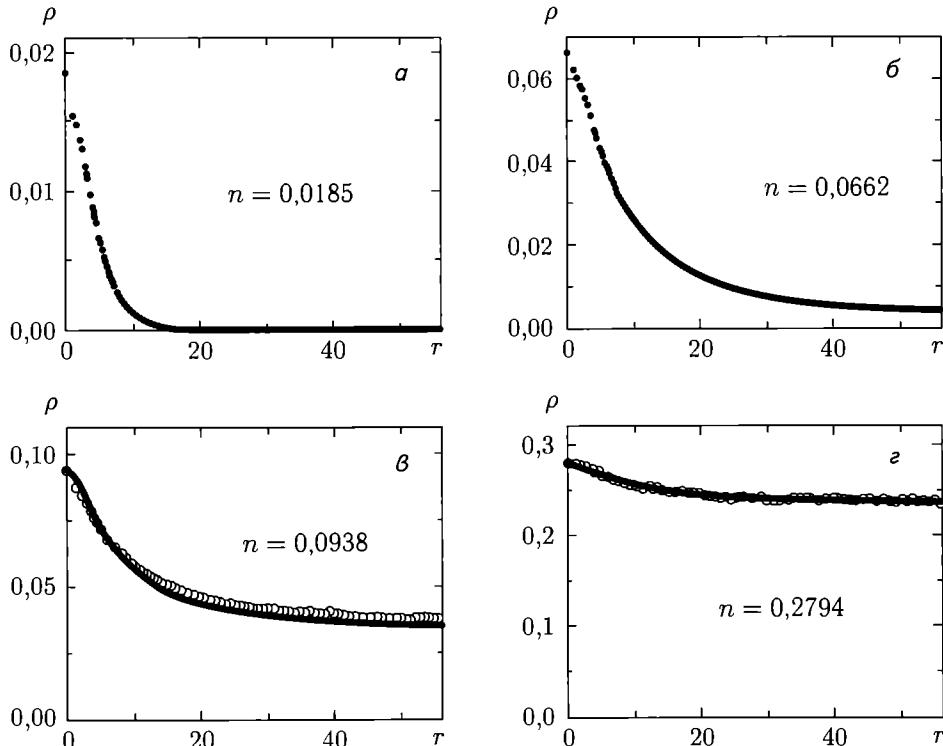


Рис. 12.20. Эволюция одночастичной матрицы плотности в зависимости от плотности системы из [70];  $U = 1,0$ ,  $T = 0,2$

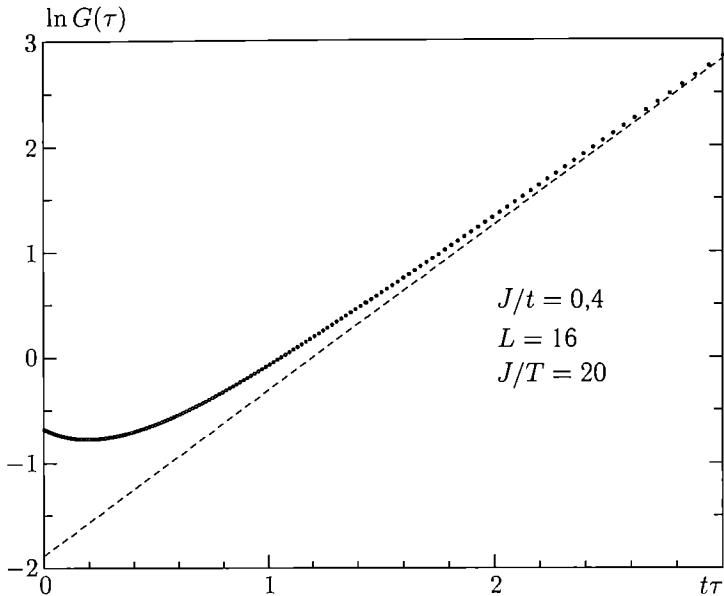


Рис. 12.21. Функция Грина для двумерной  $t$ - $J$ -модели из [78]. Штриховой линией показана полуаналитическая асимптотика, полученная из спектральной функции (рис. 12.22)

сама статистика *winding numbers* легко рассчитывается по мгновенной конфигурации с фиксацией всех изменений траекторий в заданном направлении.

Статистика *winding numbers* тесно связана с градиентно-инвариантной фазой  $\varphi$ , и различные корреляционные функции подчиняются распределению [79]

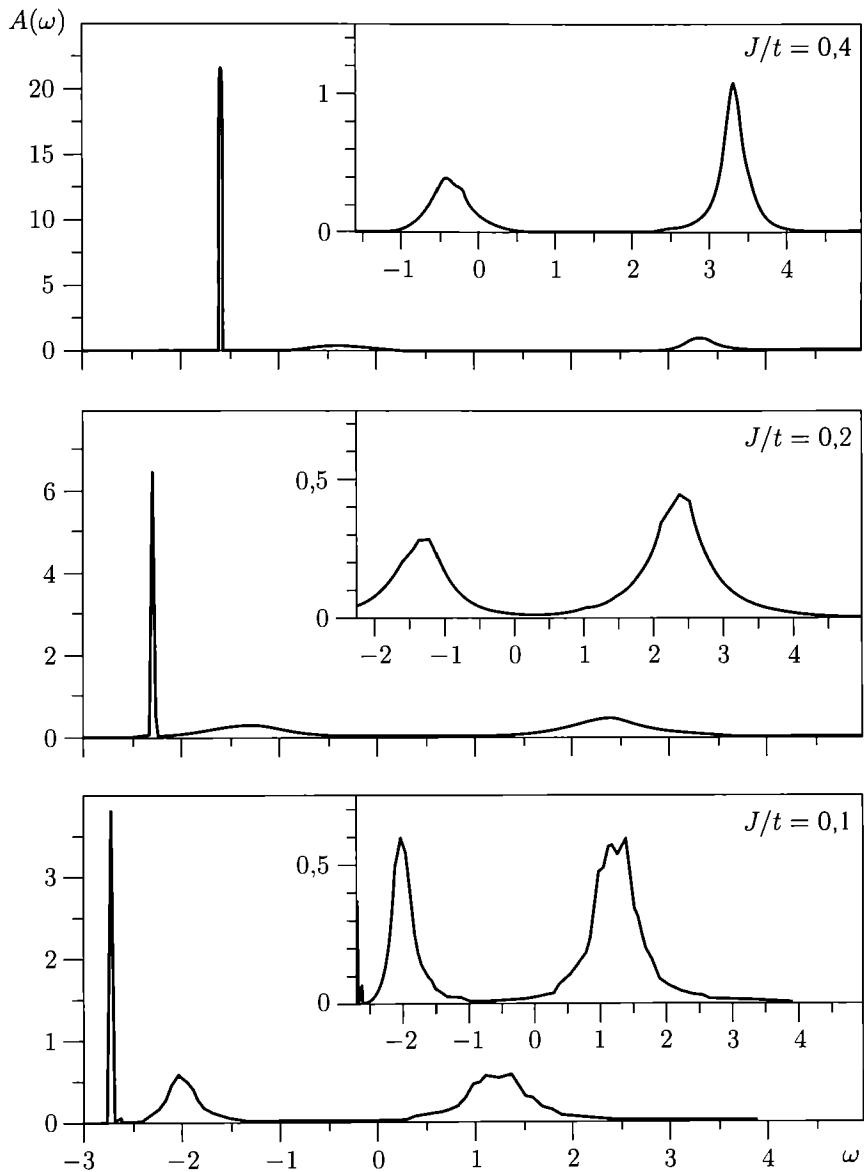
$$\rho \sim \langle \dots e^{iW\varphi} \rangle. \quad (12.63)$$

Пользуясь (12.63), в [17] рассчитан отклик тока на градиентно-инвариантную фазу, анализ которой может свидетельствовать в рассматриваемой в [17] редуцированной модели Бозе–Хаббарда о фазовом переходе в двухчастичное состояние с притяжением между частицами (рис. 12.23).

В заключение заметим, что существуют различные модификации метода CTWL, в частности даже для континуальных моделей типа модели Рашибы–Пекара [78, 84, 191] для проблемы полярона Фрелиха с гамильтонианом

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_{ph} + H_{e-ph}, \\ H_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}, \\ H_{ph} &= \sum_{\mathbf{q}} \omega_q b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} = \omega_0 \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}}, \\ H_{e-ph} &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} V(\mathbf{q}) (b_{\mathbf{q}}^+ - b_{-\mathbf{q}}) a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (12.64)$$

где  $a_{\mathbf{k}}$ ,  $b_{\mathbf{q}}$  — операторы уничтожения частиц и фононов в импульсном представлении, соответственно. Удается точно рассчитать функцию Грина и восстановить спектральную плотность состояний для полярной моды, близкую к аналитическим выводам Фейнмана (рис. 12.24).


 Рис. 12.22. Спектральная функция для двумерной  $t$ - $J$ -модели из [78]; система  $16 \times 16$ 

Проблема экситона [79] исследовалась для достаточно сложной модели:

$$\begin{aligned}
 H &= H_0 + H_{e-ph}, \\
 H_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_c(\mathbf{k}) e_{\mathbf{k}}^+ e_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_v(\mathbf{k}) h_{\mathbf{k}}^+ h_{\mathbf{k}}, \\
 H_{e-ph} &= -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \mathcal{U}(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') e_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}^+ h_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^+ h_{\mathbf{p}-\mathbf{k}'} e_{\mathbf{p}+\mathbf{k}'},
 \end{aligned} \tag{12.65}$$

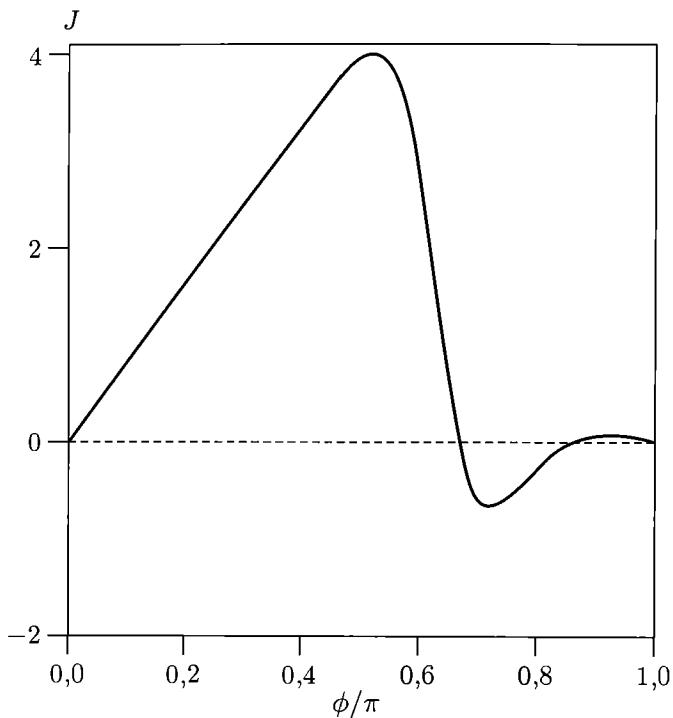


Рис. 12.23. Отклик тока на градиентно-инвариантную фазу в редуцированной модели Бозе–Хаббарда из [17]

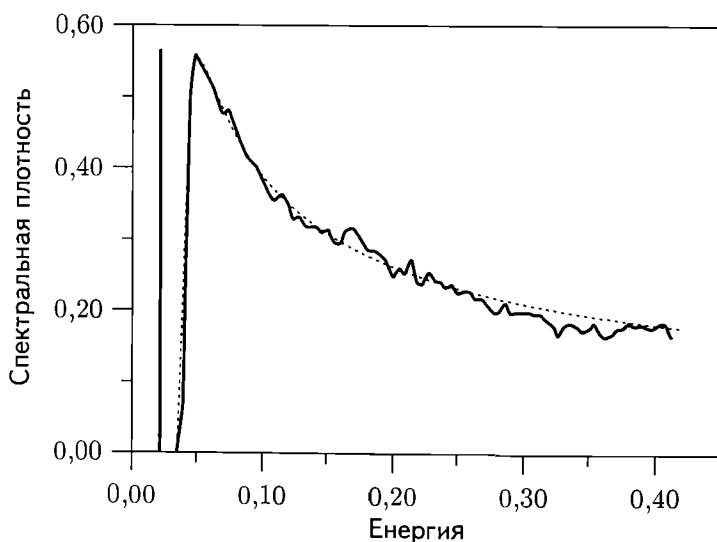


Рис. 12.24. Спектральная плотность состояний из [78]. Пунктирной линией показано аналитическое решение, сплошной — результат спектрального анализа

где  $e_k$  ( $h_k$ ) — оператор уничтожения электрона (дырки),  $\varepsilon_c(k)$  ( $\varepsilon_v(k)$ ) — закон дисперсии для зоны проводимости (валентной зоны),  $N$  — число узлов решетки,  $\mathcal{U}(p, k, k')$  — потенциал взаимодействия (притяжение).

Методом CTWL и расчетом функции Грина в этой модели удается получить распределение плотности заряда экситонных возбуждений по импульсам [79] (рис. 12.25). Здесь рассмотрен случай предела Ваннье широкой ширины зоны  $E_{c,v} \gg E_g$ ; и дно зоны проводимости  $E_c$  и верх валентной зоны  $E_v$  отсчитываются в единицах ширины запрещенной зоны  $E_g$ .

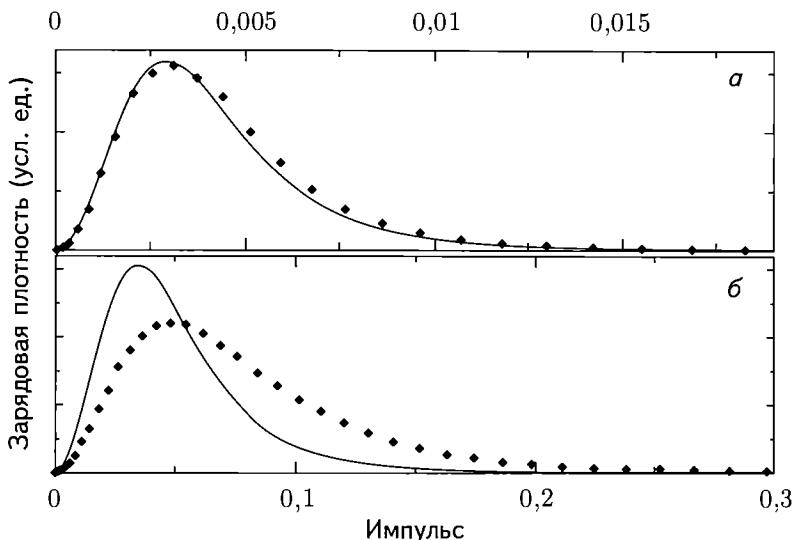


Рис. 12.25. Зависимость зарядовой плотности от импульса из [79]. Сплошной линией показано решение модели Ваннье

**12.1.5. Алгоритм CTWL для спиновой статистики.** Метод CTWL, рассмотренный ранее, обсуждался только для бозонных и фермионных степеней свободы, однако он легко обобщается и для спиновых моделей. Если алгоритм сформулирован в узельном базисе, то для расчета спиновых систем, как отмечалось в разделе о дискретных алгоритмах МК, удобно перейти к неотрицательным числам заполнения — к фиктивным бозонам (или псевдобозонам) по правилу  $n_b = S + S^Z$ , где  $S$  — максимальная проекция спина на ось  $z$  на узле. Тогда состоянию с минимальной проекцией спина ставится в соответствие нулевое заполнение и т. д. Например, для  $S = 1$  имеем:

$$|S^Z = -1\rangle \rightarrow |n_b = 0\rangle, \quad |S^Z = 0\rangle \rightarrow |n_b = 1\rangle, \quad |S^Z = 1\rangle \rightarrow |n_b = 2\rangle. \quad (12.66)$$

Таким образом, число степеней свободы для  $S = 1/2$  совпадает с их количеством в модели *hard-core*-бозонов, а для  $S = 1$  — с редуцированной бозонной моделью. Весь алгоритм расчета совпадает со схемой CTWL для бозонов с максимальным заполнением  $n_{\max} = 2S$ , разница будет лишь в других матричных элементах соответствующих операторов.

Например, в [69] методом CTWL исследованы спиновые цепочки для модели Гейзенберга с  $S = 1/2$  и  $S = 1$  и рассчитана функция Грина:

$$G(r, \tau) = -T_\tau \langle S^-(0, 0) S^+(r, \tau) \rangle, \quad S^\pm = S^x \pm iS^y. \quad (12.67)$$

Аппроксимируя ее поведение для  $S = 1$  вблизи щели Холдейна зависимостью

$$G(p, \tau) \sim e^{-E(p)\tau}, \quad (12.68)$$

можно рассчитать магнитный спектр:

$$E(p) = -\frac{\ln [G(p, \tau)/G(p, \tau_0)]}{\tau - \tau_0} \quad (12.69)$$

и показать его «релятивистский» вид

$$E(p) = \sqrt{\Delta^2 + c^2 p^2}, \quad (12.70)$$

где щель Холдейна  $\Delta = 0,4105$ , а  $c = 2,48$ . Результаты расчетов представлены на рис. 12.26. В работе [69] впервые удалось определить щель Холдейна с такой точностью.

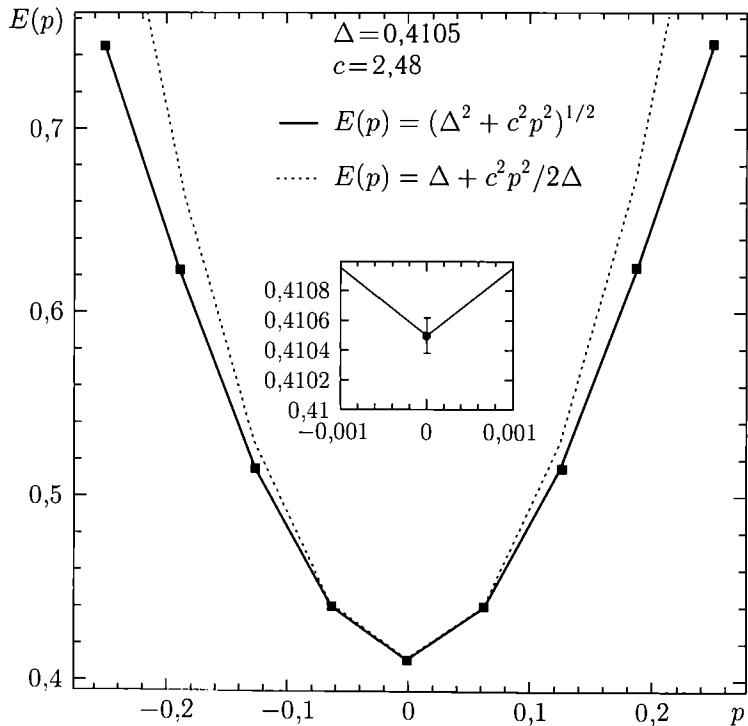


Рис. 12.26. Магнитный спектр из [69] для одномерной цепочки длиной  $L=100$  с  $S=1$

Также впервые стало возможным получить кривую намагничивания как функцию магнитного поля в широком диапазоне параметров и при очень низких температурах (рисунки 12.27, 12.28).

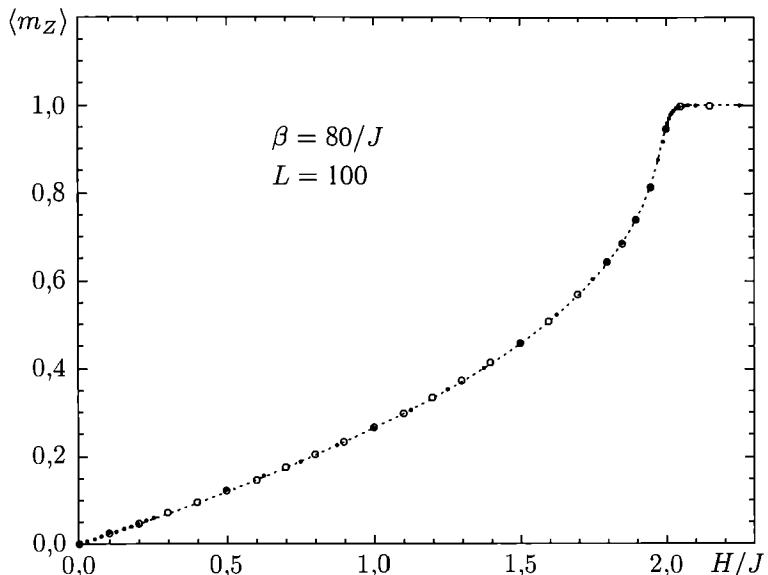


Рис. 12.27. Кривая намагничивания из [69] для одномерной цепочки длиной  $L = 100$  с  $S = 1/2$

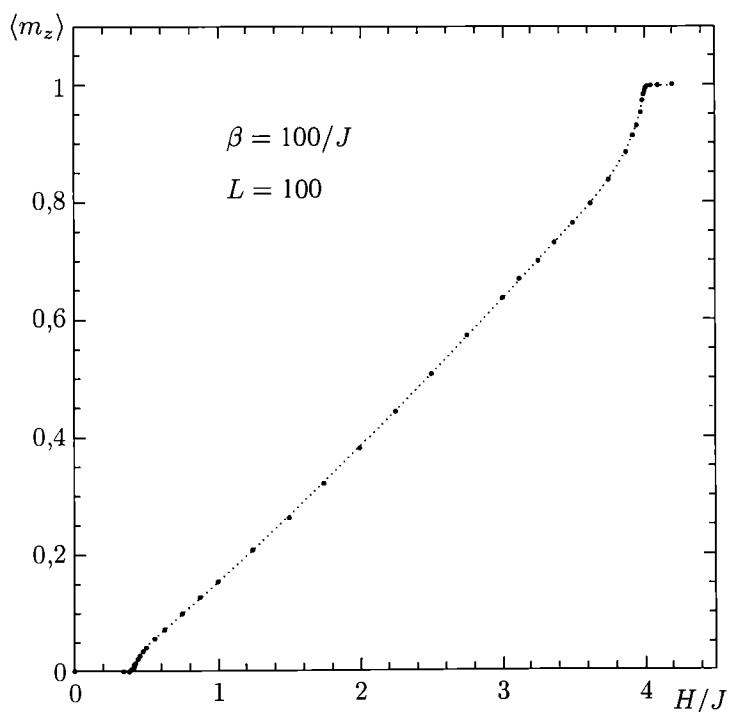


Рис. 12.28. Кривая намагничивания из [69] для одномерной цепочки длиной  $L = 100$  с  $S = 1$

**12.1.6. Проблема знака в алгоритме CTWL. Особенности непрерывного времени и *winding numbers*.** Здесь обсуждается проблема фермионного знака, возникающая в процессе расчета методом CTWL фермионной системы из-за антисимметрии волновой функции. Одновременно будет получен метод расчета *winding numbers* в процессе МК-симуляции.

Связь фермионного знака и чисел *winding numbers* уже была получена при анализе дискретного траекторного квантового метода МК, и она полностью отражает топологию мировых линий. Напомним, что знак конфигурации определяется выражением

$$\text{sgn} = (-1)^{\sum_k (W_k - 1) + \sum_{\text{worm}} W_{\text{worm}} + \sum_{A < B} f_{AB}}, \quad (12.71)$$

где  $W_k$  — *winding numbers* по замкнутым петлям (траекториям),  $W_{\text{worm}}$  — по разомкнутым червям,  $f_{AB}$  — индекс взаимного пересечения пары червей  $A$  и  $B$  ( $f_{AB} = 0; 1$ ).

Пусть алгоритм стартует с исходного состояния с замкнутыми прямыми линиями, для которых суммарный *winding numbers*  $W = 0$ ,  $\text{sgn} = 1$ .

Рассмотрим изменение этих величин в процессе реализации различных процедур метода CTWL.

1. Процедура *creation-annihilation*. Если в системе уже есть другие разрывы траекторий (другие черви), при рождении или уничтожении червя фермионный знак меняется или остается прежним в зависимости от параметров  $f_{AB}$ , т. е. зависит от взаимного расположения хвостов. В случае, когда других червей нет, фермионный знак при рождении и уничтожении червя не меняется. Число *winding numbers* также не меняется.
2. Процедура *jump-reconnection*. В случае *jump* фермионный знак остается прежним. Напротив, в процедуре *reconnection* он меняется — в тепло червя встраивается участок, бывший ранее замкнутой траекторией, и поэтому показатель минус единицы изменяется на  $\pm 1$  в соответствии с выбранным пространственным направлением прыжка. Соответственно, меняется и *winding numbers*. Если в системе присутствует несколько червей, фермионный знак также меняется в этих процедурах согласно формуле (12.71).
3. Процедуры *kink-antikink*, *shift*. При реализации этих процедур в отсутствие других червей не меняется ни знак, ни *winding numbers*. Если присутствуют другие черви, то следует учитывать фактор  $f_{AB}$ , и знак в соответствии с (12.71) меняется, а *winding numbers* — нет.

Таким образом, в процессе расчета постоянно пересчитываются *winding numbers* и знак конфигурации, что удобно для суммирования средних и расчета недиагональных характеристик, зависящих от статистики *winding numbers*.

**12.1.7. Алгоритмы на основе CTWL.** Метод CTWL за прошедшие 10 лет постоянно совершенствовался и модифицировался как для дискретного, так и для непрерывного базисов, как для бозе-, так и для ферми-статистики (см. [17, 69, 72, 77–81, 84, 85, 107, 108, 192]). Рассмотрим две его модификации.

**12.1.7.1. Импульсный алгоритм.** Главная проблема квантовых методов МК — проблема знака, возникающая как из-за антисимметрии в случае фермионов, так и из-за положительных членов в кинетической энергии (например, с прыжком далее чем на соседний узел). Эта проблема может возникнуть и из-за знака потенциальной части взаимодействия, если необходимо разложение по взаимодействию в статистической сумме.

Один из методов преодоления этих проблем — переход в новый удобный базис, в котором проблема знака ослаблена.

Представленный в данном разделе метод СТВЛ в *импульсном представлении* рассмотрим согласно работе [77].

Возьмем гамильтониан типа Хаббарда в импульсном представлении:

$$H = H_0 + V = \sum_p \varepsilon_p a_p^+ a_p + \sum_{p,q,r,s} U_{pqrs} a_p^+ a_q^+ a_r a_s. \quad (12.72)$$

Без ограничения общности положим в (12.72)  $U_{pqrs} = U_{q-r} \delta_{p+q,r+s}$ , т. е. учтем закон сохранения импульса.

В качестве возмущения в алгоритме берется второе слагаемое в (12.72), по нему же происходит разложение в статистической сумме:

$$Z = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{\{n_1, \dots, n_m\}} \int_0^{\beta} (-d\tau_{m-1}) \int_0^{\tau_{m-1}} (-d\tau_{m-2}) \times \dots \times \\ \times \int_0^{\tau_1} (-d\tau_0) e^{-\beta E_0} \prod_{j=1}^m e^{-\tau_j E_{j-1}} \langle n_{j-1} | V | n_j \rangle e^{\tau_j E_j}, \quad (12.73)$$

где  $H_0 |n_j\rangle = E_j |n_j\rangle$ ,  $|n_j\rangle$  — числа заполнения в импульсном представлении,  $\tau_m = \tau_0 + \beta$ ;  $n_m \equiv n_0$ .

Разложение порождает кинки различных видов, они представлены на рис. 12.29.

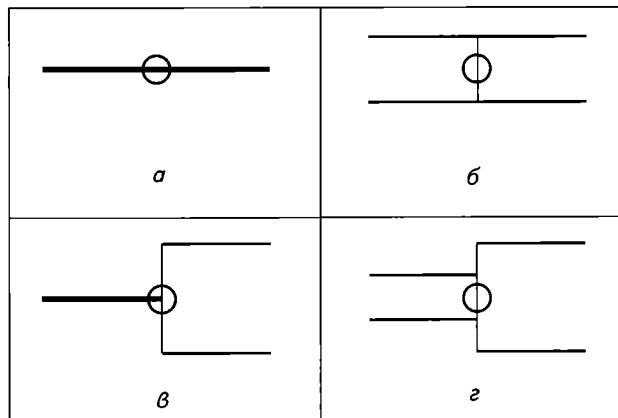


Рис. 12.29. Кинки (обозначены кружками), порождаемые двухчастичным взаимодействием: а, б — диагональные; в, г — недиагональные

Множитель, соответствующий конкретному кинку и входящий в вес конфигурации помимо экспоненциального множителя, определяется суммой соответствующих комбинаций  $U_{pqrs} \sqrt{n_p n_q n_r n_s}$  для всех неэквивалентных перестановок импульсов  $p, q, r, s$ . Например, в случае  $U_{pqrs} = U_0 \delta_{p+q,r+s}$  случаям, показанным на рис. 12.29,  $a, b$ , соответствуют множители  $-\Delta\tau U_0 n_q (n_q - 1)$  и  $-4\Delta\tau U_0 n_p n_q$  соответственно. Пример мгновенной конфигурации приведен на рис. 12.30.

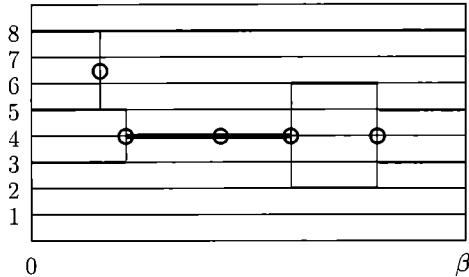


Рис. 12.30. Пример мгновенной конфигурации со всеми типами кинков, показанными на рис. 12.29. По вертикальной оси отложены разрешенные импульсы системы

Важно отметить, что при взаимодействии частиц в точке  $U_{pqrs} = U_0 \delta_{p+q,r+s}$  (что в узельном представлении соответствует  $U_0 n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ ), и диагональная часть взаимодействия дает всего лишь сдвиг энергии, что позволяет упростить алгоритм, исключив из него диагональные кинки (случаи на рис. 12.29,  $a, b$ ).

Особенности расчета фермионного знака в импульсном алгоритме подробно изложены в работе [77].

На рис. 12.31 схематично показаны примеры процедур, используемых для изменения конфигураций мировых линий.

Важно, что все процессы, показанные на рис. 12.31, локально сохраняют импульс, и, следовательно, неспособны изменить полный импульс  $K$ -системы. Моделирование в секторе фазового пространства с фиксированным  $K$  сокращает время вычислений энергетических уровней, характеризующихся определенным импульсом, однако для расчета таких величин, как функция Грина, полный импульс системы не должен быть постоянным. Для того, чтобы полный импульс в системе мог принимать произвольные возможные значения, в гамильтониан вводится фиктивное слагаемое

$$\eta \sum_{\substack{pqrs, \\ p + q = r + s}} a_p^+ a_q^+ a_r a_s,$$

порождающее в системе соответствующие кинки. Статистика, как и в обычном алгоритме CTWL, собирается в отсутствие этих кинков, а величина  $\eta$  выбирается из соображений эффективности. Подробное описание процедур обновления конфигураций можно найти в работе [193].

Результаты расчетов импульсным алгоритмом, приведенные в [77], свидетельствуют об ослаблении проблемы знака. Сравнение эффективности импульсного алгоритма по сравнению с обычным алгоритмом CTWL в узельной схеме для фермионной модели Хаббарда показано на рис. 12.32.

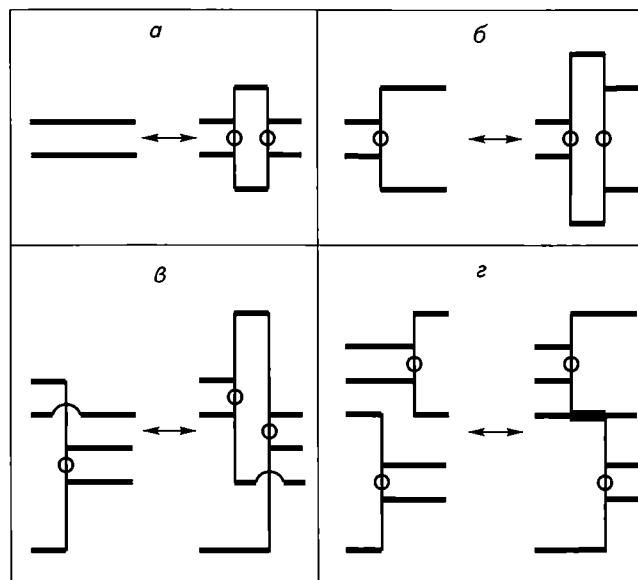


Рис. 12.31. Процедуры изменения недиагональных кинков: создание-уничтожение пары кинков (*a*); превращение одного кинка в два (*b*); перепутывание кинка и прямого участка траектории (*c*); сдвиг кинка через соседний (*d*)

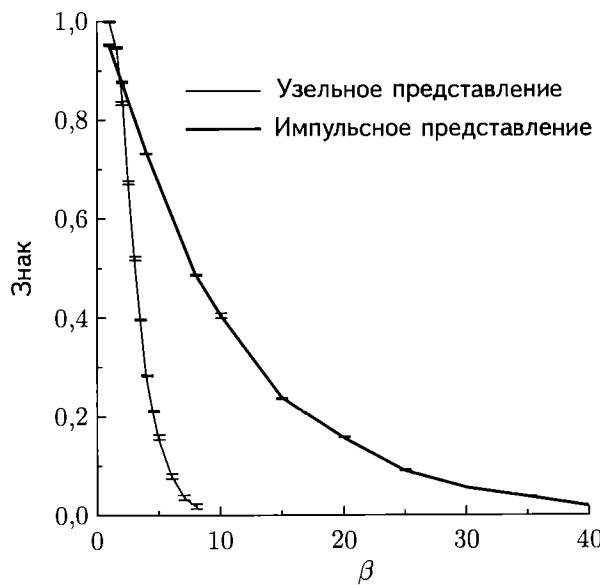


Рис. 12.32. Зависимость среднего знака от температуры при расчете одномерной модели Хаббарда в узельном и импульсном представлении

График, показанный на рис. 12.32, достаточно легко объяснить. В отсутствие взаимодействия при моделировании ферми-системы в импульсном базисе в модели (12.72) фермионная проблема знака полностью отсутствует, так как гамильтониан в этом случае диагонален. В то же время в узельном

базисе гамильтониан имеет вид

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (12.74)$$

и проблема знака имеет место. При включении взаимодействия при  $U/t \ll 1$  возмущение будет  $\sim (U/t)^2$ , что также сильно ослабляет проблему знака в импульсном варианте.

Импульсный алгоритм также с успехом применялся для моделирования системы одномерных вращающихся атомов с притяжением, описывающей бозе-конденсат атомов  $^7\text{Li}$  в магнитооптической ловушке [77]:

$$H = \hbar \omega_c \sum_k \left( k - \frac{\omega}{2\omega_c} \right)^2 n_k + \frac{g}{2} \sum_{klq} a_k^+ a_l^+ a_{l-q} a_{k+q}, \quad (12.75)$$

где  $\omega$  — угловая скорость вращения ловушки,  $\omega_c = \hbar/2MR^2$  — критическая угловая скорость вращения,  $g = \frac{2a\hbar^2}{MRS} < 0$  — эффективная амплитуда взаимодействия атомов,  $a$  — длина  $s$ -волнового рассеяния,  $M$  — масса атома,  $S = \pi r^2$  — площадь поперечного сечения системы. Гамильтониан (12.75) аналогичен гамильтониану (12.72).

Удаётся промоделировать основное состояние такой системы и получить квантование вращательного момента системы в соответствии с эффектом Хесса–Фербенка (рисунки 12.33, 12.34).

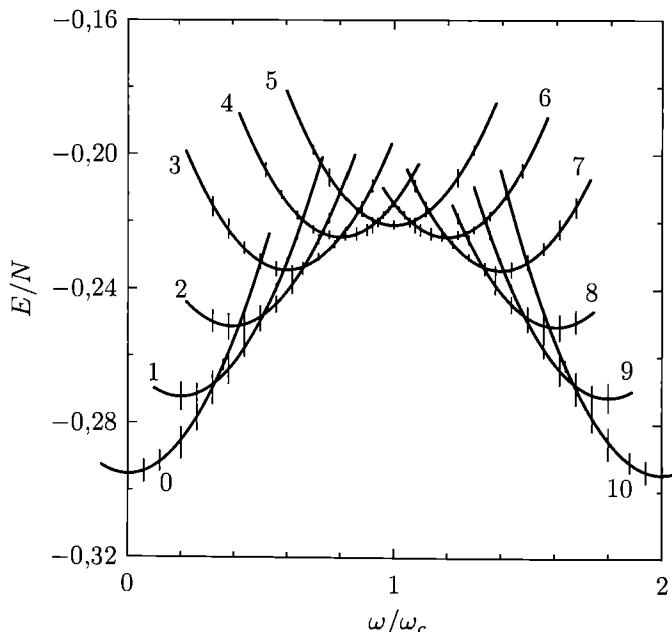


Рис. 12.33. Энергия основного состояния для системы из десяти частиц при различных моментах вращения (показаны числа у кривых)

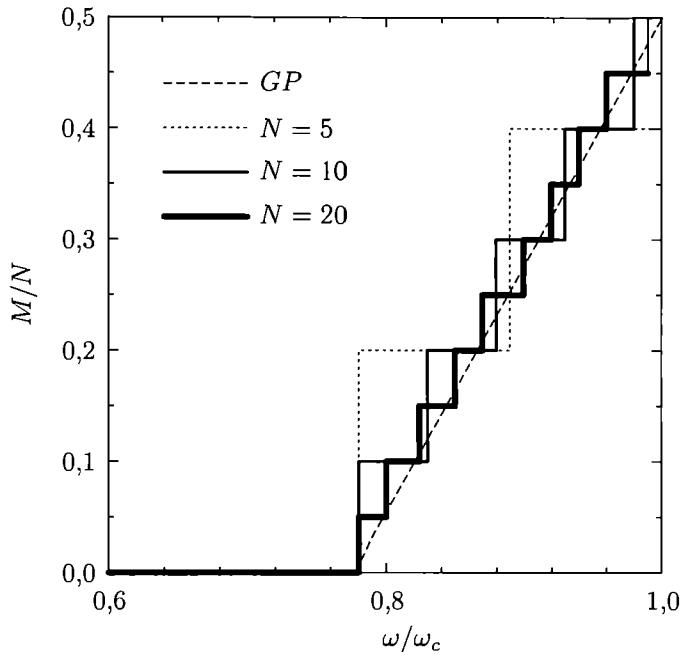


Рис. 12.34. Зависимость вращательного момента системы в основном состоянии от скорости вращения для системы из 5, 10 и 20 частиц. Наклонным пунктиром показана макроскопическая зависимость

**12.1.7.2. Обобщенный алгоритм CTWL.** В последнее время в экспериментальных исследованиях рассматриваются все более сложные системы с сильным межчастичным взаимодействием и смешанной статистикой [74] — достаточно упомянуть бозонные оптические решетки, реализующиеся в магнитных ловушках при сверхнизких температурах. Как известно [75, 76], статистическое описание таких систем адекватно модели решеточных бозонов с ненулевым спином. Соответствующий гамильтониан является гамильтонианом модели Бозе–Хаббарда для бозонов со спином  $S = 1$  [75]:

$$H = -l \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\alpha} (a_{i\alpha}^+ a_{j\alpha} + a_{j\alpha}^+ a_{i\alpha}) - \sum_i \mu_i n_i + \frac{U_0}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) + \frac{U_2}{2} \sum_i (\mathbf{S}_i^2 - 2n_i), \quad (12.76)$$

где  $n_i \equiv \sum_{\alpha} n_{i\alpha}$  — оператор полного числа частиц на узле  $i$ ;  $\alpha = 0, \pm 1$  — проекция спина бозона;  $\mathbf{S}_i$  — оператор полного спина на узле  $i$ . Последнее слагаемое в (12.76) можно переписать в следующем виде:

$$\mathbf{S}_i^2 - 2n_i = 2n_{i1}n_{i0} + 2n_{i0}n_{i,-1} - 2n_{i1}n_{i,-1} - n_{i1} - n_{i,-1} + n_{i1}^2 + n_{i,-1}^2 + 2a_{i1}^+ a_{i,-1}^+ a_{i0} a_{i0} + 2a_{i0}^+ a_{i0}^+ a_{i1} a_{i,-1}. \quad (12.77)$$

Часто можно пренебречь дополнительными степенями свободы и ограничиться только нулевой проекцией спина, учитывая, что, например, для атомов  $^{23}\text{Na}$  соотношение констант взаимодействия в гамильтониане (12.76)  $\frac{U_2}{U_0} = 0,04$  [194]. Однако учет ненулевого спина приводит к более богатой фазовой картине: при определенных параметрах в системе существует ферромагнитное состояние, и имеет место фазовый переход первого рода [195, 196], при этом аналитическое описание (12.76) с учетом слагаемого с  $U_2$  возможно только в приближении среднего поля.

Другой пример — точный учет электрон-фононного взаимодействия, например в модели Холстейна–Хаббарда [82] с одной оптической модой  $\Omega$ :

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \Omega \sum_i n_{ib} - \alpha \sum_{\langle ij \rangle \sigma} n_{i\sigma} (b_j^+ + b_j) - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}, \quad (12.78)$$

где  $a$  — электронные операторы,  $b$  — фононные операторы,  $n_{ib} = b_i^+ b_i$ ,  $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$ ,  $\alpha$  — константа электрон-фононного взаимодействия,  $t$ ,  $U$  — параметры Хаббарда. Даже упрощенная модель с одноузельным электрон-фононным взаимодействием  $-\alpha \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} (b_i^+ + b_i)$  не имеет корректных аналитических приближенных решений. Имеющиеся численные подходы для этой модели очень приближенно учитывают колебания решетки [197, 198], часто используют известные канонические преобразования [199], упрощающие в ряде случаев задачу.

Для модели (12.78) ситуация усложняется также из-за антисимметрии электронной волновой функции, что приводит к проблеме знака в численной процедуре МК и невозможности корректного расчета. Эту проблему можно было бы ослабить, если перейти к импульсному базису, как отмечалось в предыдущем разделе, в котором упрощенная модель в одномерном случае имеет следующий вид:

$$H = -2t \sum_{q\sigma} \cos \frac{2\pi q}{m} a_{q\sigma}^+ a_{q\sigma} - \mu \sum_{q\sigma} n_{q\sigma} + \Omega \sum_q b_q^+ b_q + \frac{U}{m} \sum_{qq'q''} a_{q'1}^+ a_{q'+q,\uparrow} a_{q',1}^+ a_{q'-q,\downarrow} - \frac{\alpha}{\sqrt{m}} \sum_{qq'\sigma} \left( a_{q'\sigma}^+ a_{q'+q,\sigma} b_q^+ + a_{q'\sigma}^+ a_{q'-q,\sigma} b_q \right), \quad (12.79)$$

$m$  — число узлов. Ослабление проблемы знака в импульсном базисе связано с распределением состояний по одиночественным энергиям  $\varepsilon_q = -2t \cos(2\pi q/m)$ , и, соответственно, их своеобразной предварительной «сортировкой» по статистическим весам в процедуре МК.

Можно еще упомянуть спин-фононные модели, тоже интенсивно исследуемые в последнее время [83], а также модели типа Рашибы–Пекара [84] для системы экситон-поляронов.

Таким образом, для расчета таких моделей со смешанной статистикой и сильным взаимодействием необходим достаточно гибкий метод стохастического моделирования, позволяющий работать с произвольным дискретным базисом (узельным, импульсным или другим), а также с произвольного вида диагональными и недиагональными слагаемыми в гамильтониане.

Основные принципы, заложенные в работе [107] и рассмотренные выше, а также развитые на конкретных моделях в ряде последующих работ [17, 69, 72, 77–81, 85, 108, 192], не всегда позволяют решить проблемы конкретной реализации общей схемы [107, 108]. В этом разделе рассмотрен метод квантового алгоритма МК, основанный на СТWL-алгоритме [107, 108], позволяющий рассчитывать произвольный гамильтониан общего вида и работать в различных базисных состояниях. При этом схема из [107] существенно обобщена, введены дополнительные процедуры обновления фазовых состояний, существенно расширено понятие «дискретный базис».

**12.1.7.2.1. Формулировка метода для произвольного дискретного базиса.** Разобьем гамильтониан  $H$  рассматриваемой физической системы в представлении взаимодействия на основную (затравочную) часть  $H_0$  и возмущение  $V$ . Как и в стандартном методе СТWL, в зависимости от конкретного гамильтониана  $H$  выбирается возмущение  $V$  и набор процедур, обеспечивающий полный перебор всех возможных мгновенных конфигураций.

Рассмотрим оператор энергии физической системы достаточно общего вида:

$$H = \sum_{\langle kln_1n_2n_3n_4 \rangle} t_{kl}^{n_1n_2n_3n_4} (A_k^{n_1n_2} A_l^{n_3n_4} + h.c.) + \sum_{\langle kln_1n_2 \rangle} U_{kl}^{n_1n_2} M_{kl}^{n_1n_2} + \\ + \sum_{\langle kn_1n_2 \rangle} B_k^{n_1n_2} (A_k^{n_1n_2} + h.c.) + \sum_{\langle kn \rangle} C_k^n N_k^n + \\ + \sum_{\langle kln_1n_2n_3 \rangle} D_{kl}^{n_1n_2n_3} N_l^{n_3} (A_k^{n_1n_2} + h.c.), \quad (12.80)$$

где  $k, l$  — нумерация «узлов» дискретного базиса;  $n_1, n_2, \dots$  — состояния, реализуемые на конкретном узле;  $A_k^{n_1n_2}$  — операторы перехода узла  $k$  из состояния  $n_1$  в состояние  $n_2$ ;  $N_k^n, M_{kl}^{n_1n_2}$  — диагональные операторы (в данном представлении). Все параметры гамильтониана, характеризующие, соответственно, амплитуды переходов  $t$ , диагональные межчастичные взаимодействия  $U$  и отклик на внешние поперечные ( $B$ ,  $D$ ) и продольные ( $C$ ) поля, могут быть уникальны для каждого состояния и узла, а также могут включать в себя рассчитанные заранее матричные коэффициенты. Таким образом, предполагается, что эти коэффициенты уже учитывают все особенности статистики (бозе, ферми, спиновой), в частности учитывают множители вида  $\sqrt{n}$  (для бозе-статистики),  $\sqrt{(S + S^Z)(S - S^Z + 1)}$  (для спиновых операторов), или  $(-1)^{\sum n_k}$  (для фермионов). Соответственно, действия операторов на базисные функции приводят либо к переходу в новые состояния для недиагональных

для данного представления операторов, либо оставляют их без изменения в случае диагональных операторов:

$$\begin{aligned} A_k^{n_1 n_2} | \dots n_1^k \dots \rangle &= | \dots n_2^k \dots \rangle, \\ N_k^{n_1} | \dots n_1^k \dots \rangle &= | \dots n_1^k \dots \rangle, \\ M_{kl}^{n_1 n_2} | \dots n_1^k \dots n_2^l \dots \rangle &= | \dots n_1^k \dots n_2^l \dots \rangle. \end{aligned} \quad (12.81)$$

Под состояниями узла  $n^k$  понимаются также и частично диагонализованные (аналитически или численно) состояния, так что каждый узел модели (12.80) исходно мог быть составлен из нескольких узлов первичной модели, но после диагонализации таких первичных кластеров в гамильтониан в новом представлении идет информация только об энергиях диагонализованных состояний и матричных элементах переходов между ними и между соседними кластерами. Это позволяет, во-первых, ослабить проблему знака (если она имеется), так как первичная диагонализация отсортирует состояния по энергии, и, во-вторых, не учитывать высокозэнергетические состояния, заведомо не дающие вклад в статистику. «Обрезание» высокозэнергетических состояний аналогично методу пространственной ренормализационной группы.

Исходя из вышесказанного, процедуре МК может в общем случае предшествовать точная диагонализация исходных частей системы (по состояниям конкретных узлов или групп узлов) и построение гамильтониана (12.80). Переход в новый базис может быть точным, если учитываются все исходные состояния системы, или приближенным, если происходит ограничение на число состояний получившегося узла, в этом случае гамильтониан (12.80) будет эффективным гамильтонианом.

Формулировка модели (12.80) с конкретным описанием одночастичных и двухчастичных слагаемых, которые наиболее часто встречаются в физических системах, представляется наиболее удобной и позволяет сразу использовать метод для конкретных примеров физических систем, что будет показано в следующих разделах. Для реализации разложения (12.21) исходный (нулевой) гамильтониан и возмущение выбираются естественным образом:

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\langle kln_1 n_2 \rangle} U_{kl}^{n_1 n_2} N_k^{n_1} N_l^{n_2} + \sum_{\langle kn \rangle} C_k^n N_k^n, \\ V &= \sum_{\langle kln_1 n_2 n_3 n_4 \rangle} t_{kl}^{n_1 n_2 n_3 n_4} (A_k^{n_1 n_2} A_l^{n_3 n_4} + h.c.) + \\ &+ \sum_{\langle kn_1 n_2 \rangle} B_k^{n_1 n_2} (A_k^{n_1 n_2} + h.c.) + \sum_{\langle kln_1 n_2 n_3 \rangle} D_{kl}^{n_1 n_2 n_3} N_l^{n_3} (A_k^{n_1 n_2} + h.c.), \end{aligned} \quad (12.82)$$

так что возмущение включает все недиагональные слагаемые, а диагональная часть учитывается при изменении энергии в экспонентах разложения (12.21).

**12.1.7.2.2. Процедуры обновления мгновенных конфигураций в фазовом пространстве.** Здесь будут описаны все процедуры обновления траекторий, которые необходимы для эргодичности численной схемы.

Напомним, что основная идея CTWL-алгоритма [107, 108] заключается в том, чтобы совокупность состояний, содержащих замкнутые траектории

в фазовом пространстве, дополнить фиктивными состояниями, включающими разрывы траекторий. В узельной схеме это эквивалентно добавлению к гамильтониану фиктивных слагаемых вида

$$\sum_i (b_i^+ + b_i^-). \quad (12.83)$$

В представленном здесь методе также имеют место и фиктивные разрывы траекторий. Однако благодаря наличию во многих моделях явных слагаемых типа (12.83), например слагаемых, описывающих взаимодействие системы с внешними поперечными полями:

$$\sum_{\langle kn_1 n_2 \rangle} B_k^{n_1 n_2} (A_k^{n_1 n_2} + h.c.) + \sum_{\langle kln_1 n_2 n_3 \rangle} D_{kl}^{n_1 n_2 n_3} N_l^{n_3} (A_k^{n_1 n_2} + h.c.), \quad (12.84)$$

часто нет необходимости добавлять фиктивные члены в оператор энергии, и все конфигурации являются реальными физическими, дающими вклад в статистическую сумму. В этом случае в схеме возможны состояния с *любым количеством разрывов*, и их количество диктуется величинами взаимодействий  $B, D$ . Заметим, что в случае отсутствия слагаемых типа (12.84) в гамильтониане их все равно необходимо включить в качестве фиктивных для обновления конфигураций с переходами  $n_1 \leftrightarrow n_2$ , присутствующих в первом недиагональном слагаемом в (12.82), при этом накладывается ограничение на количество фиктивных червей. Окончательно в схеме возможны как *реальные*, так и *фиктивные* черви, при этом все они обновляются по единой схеме Метрополиса.

Для реализации алгоритма используются специальные процедуры обновления состояний в фазовом пространстве, аналоги процедур *kink-antikink*, *move*, *jump*, *reconnection*, *creation-annihilation* в алгоритме CTWL, на рисунках 12.35–12.38 схематично представлены эти модифицированные процедуры.

На рис. 12.35 показана процедура *move* — движения либо кинка, связывающего два узла, необязательно соседних (рис. 12.35, а), либо разрыва траектории — червя (рис. 12.35, б). Перемещение кинка возможно необяза-

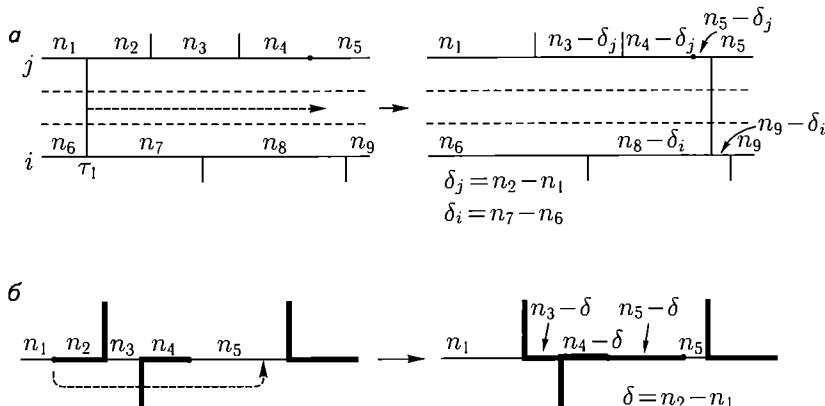


Рис. 12.35. Процедура *move* для кинка, связывающего два узла  $i$  и  $j$  (а); процедура *move* для движения червя (б)

тельно с фиксированными изменениями чисел заполнения  $\delta_i, \delta_j$ , как показано на рисунке, возможен вариант с вероятностным выбором типа кинка в каждом интервале по временной переменной  $\tau$ . Это одна из важнейших процедур для эффективного обновления конфигураций: из-за большого разнообразия в общем случае типов кинков необходимы их постоянные перестановки по шкале мнимого времени.

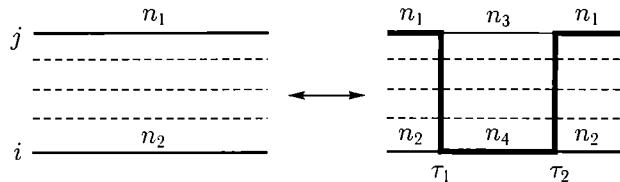


Рис. 12.36. Процедура *kink-antikink*, изменяющая состояние без разрыва траекторий

На рис. 12.36 показана модифицированная процедура *kink-antikink* (и обратная к ней), на рис. 12.37 — процедура *jump-antijump*, автоматически

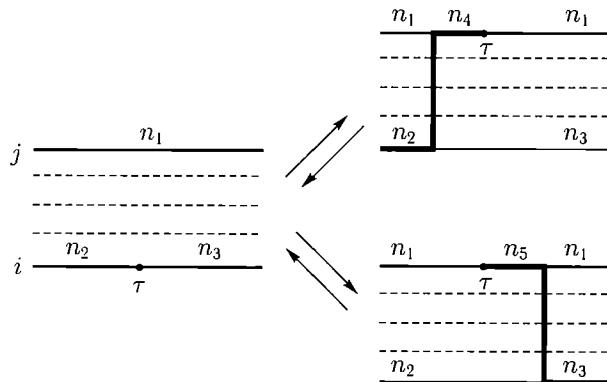


Рис. 12.37. Процедура *jump-antijump*. Эта же процедура может быть и процедурой *reconnection-antireconnection*, отличающейся от первой только заменой «дырка — частица»

включающая в себя в данном алгоритме и процедуру *reconnection-antireconnection* [107], на рис. 12.38 — аналог процедуры *creation-annihilation*. Общее замечание по этим процедурам: для чисел заполнения в этом методе нет понятий «частица» и «дырка», что было существенно при реализации CTWL-алгоритма для узельных моделей типа Хаббарда. Тем не менее, в данном подходе все процедуры условно можно разделить на два класса: «электронноподобные» и «дыроочноподобные» (например, с  $n_1 > n_3$  и с  $n_1 < n_3$  для процедуры *kink-antikink* на рис. 12.36), что облегчает составление корректных соотношений детального баланса.



Рис. 12.38. Процедура *creation-annihilation*. Понятие «частица» («дырка») здесь является условным обозначением ситуации  $n_1 < n_2$  ( $n_1 > n_2$ )

Кроме того, необходимы также дополнительные процедуры, учитывающие возможность различных способов изменения узельных состояний. Эти процедуры показаны на рис. 12.39; в частном случае  $n_3 = n_1 + 1 = n_2 + 2$  на языке узельного базиса их можно интерпретировать как переходы состояний:

$$\begin{aligned} a(\tau_1) \dots (a^+(\tau_2))^2 &\leftrightarrow a^+(\tau_1) \dots, \\ (\tau_1) \dots (a^+(\tau_2))^2 &\leftrightarrow a(\tau_2) \dots, \end{aligned} \quad (12.85)$$

при этом меняются количество и сорта обрывов траекторий. Пример мгновенной конфигурации системы с несколькими разрывами траекторий для 12-узельного кластера в процессе счета представлен на рис. 12.40.

Расчет соответствующих вероятностей переходов между состояниями выполняется по принципам, изложенным в п. 12.1.2 с учетом уравнений детального баланса, вероятностей обращений к процедурам и других необходимых атрибутов стохастической схемы для корректной реализации алгоритма Метрополиса, поэтому остановимся только на особенностях расчета применительно для данного алгоритма. Заметим, что для учета слагаемых вида

$$\sum_{\langle k l n_1 n_2 n_3 \rangle} D_{kl}^{n_1 n_2 n_3} N_l^{n_3} (A_k^{n_1 n_2} + h.c.) \quad (12.86)$$

необходимо при любом движении или изменении червя  $A_k^{n_1 n_2}$  учитывать взаимодействие  $D_{kl}^{n_1 n_2 n_3}$  с узлом  $l$  в зависимости от состояния узла  $n_3$ . Таким образом, во всех процедурах, связанных с разрывами траекторий, следует учитывать такое взаимодействие (т. е. все разрывы траекторий все время находятся в постоянно меняющемся поле взаимодействия  $D_{kl}^{n_1 n_2 n_3}$ ) и пересчитывать амплитуды червей  $A_k^{n_1 n_2}$  старого и нового состояний с учетом параметра  $D$ . Далее точно рассчитываются все изменения энергий в соответствии с выражением  $H_0$  (12.82) независимо от дальнодействия взаимодействий. Для этого вероятности переходов обобщаются на случай кусочно-непрерывного действия, порожденного потенциалом взаимодействия с другими узлами, на фоне которого происходят все изменения состояний на выбранных узлах.

За счет изменения конфигурации появляется приращение энергии  $\delta E(\tau)$  — кусочная функция мнимого времени  $\tau$ , определяемая всеми диагональными взаимодействиями  $H_0$  (рис. 12.41). С учетом этого в процедуре *kink-antikink*

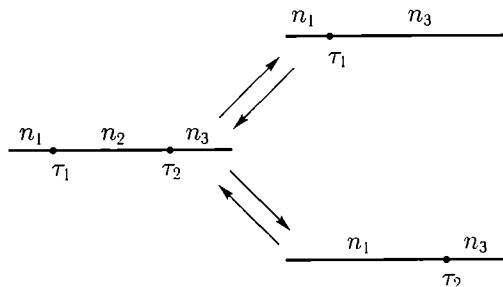


Рис. 12.39. Дополнительные процедуры, приводящие к изменению чисел и сортов разрывов

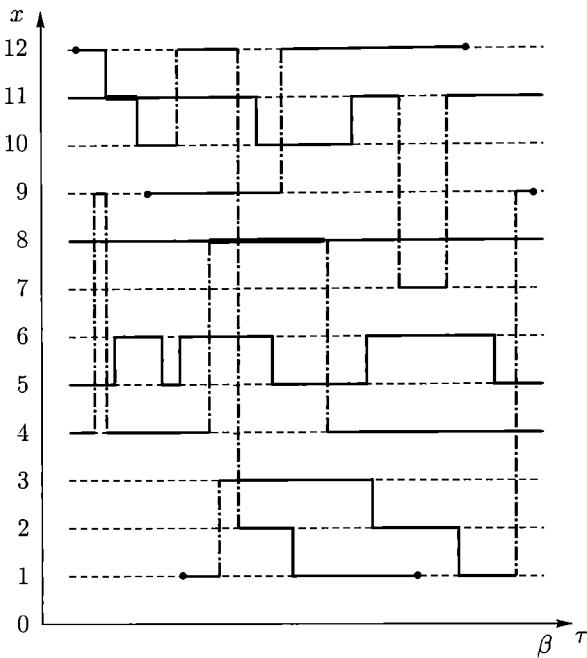


Рис. 12.40. Типичная мгновенная конфигурация в фазовом пространстве при моделировании обобщенным методом МК для 12-узельного кластера. Занятые состояния отмечены черными линиями. Вертикальные линии — переходы между состояниями — кинки. Точками показаны обрывы траекторий, отвечающие слагаемым типа  $A_i^{n_1 n_2}$ ,  $A_j^{+n_1 n_2}$  в гамильтониане

(рис. 12.41, а), как и в *creation-annihilation*, отношение статистических весов нового и старого состояний имеет вид

$$\begin{aligned} \left[ \frac{W_{\text{new}}}{W_{\text{old}}} \right]_{i,j} &= \begin{cases} Q_1(\tau_i) Q_1(\tau_j) \exp \left[ - \int_{\tau_{i+1}}^{\tau_{j-1}} \delta E(\tau) \right] \prod_{k=i}^j \delta V_k, & i \neq j, \\ Q_2(\tau_i) \delta V_i, & i = j; \end{cases} \\ \delta V_k &= \frac{V_k^{\text{new}}}{V_k^{\text{old}}}; \\ Q_1(\tau_i) &= \int_{\tau_i}^{\tau_{i+1}} \exp [-\delta E(\tau') (\tau - \tau')] d\tau', \\ Q_2(\tau_i) &= \int_{\tau_i}^{\tau_{i+1}} d\tau' \int_{\tau_i}^{\tau'} \exp [-\delta E(\tau') (\tau' - \tau'')] d\tau'', \end{aligned} \quad (12.87)$$

а в процедуре *jump* (рис. 12.41, б):

$$\left[ \frac{W_{\text{new}}}{W_{\text{old}}} \right]_i = Q_1(\tau_i) \exp \left[ - \int_{\tau_{i+1}}^{\tau_N} \delta E(\tau) d\tau \right] \prod_{k=i}^N \delta V_k, \quad (12.88)$$

где  $V_k$  — матричный элемент недиагонального взаимодействия (12.82), меняющего базисную функцию при мнимом времени  $\tau_k$ . В частности, в произведение  $\prod_{k=i}^j \delta V_k$  входят и множители от появившихся дополнительных кинков или червей (см. рис. 12.41):

$$\begin{aligned} (t_{ij}^{n_1 n_2 n_3 n_4})^2 & \text{ для процедуры } kink\text{-}antikink, \\ t_{ij}^{n_1 n_2 n_3 n_4} B_j^{n_3 n_2} & \text{ для процедуры } jump. \end{aligned} \quad (12.89)$$

Соответственно, процедура выбора конкретных значений  $\tau'$ ,  $\tau''$  (см. рис. 12.41) состоит из трех этапов.

1. С учетом детального баланса оценивается суммарная статистическая вероятность появления в интервале  $\tau_0 - \tau_N$  нового состояния вида, показанного на рис. 12.41:

$$\begin{aligned} \left[ \frac{W_{\text{new}}}{W_{\text{old}}} \right]_{kink\text{-}antikink} &= \sum_{i,j} \left[ \frac{W_{\text{new}}}{W_{\text{old}}} \right]_{i,j}, \\ \left[ \frac{W_{\text{new}}}{W_{\text{old}}} \right]_{jump} &= \sum_i \left[ \frac{W_{\text{new}}}{W_{\text{old}}} \right]_i. \end{aligned} \quad (12.90)$$

2. Если возможно появление такого состояния, то взвешивается относительная вероятность реализации кинков уже в конкретных интервалах  $\tau_{j+1} - \tau_j$ ,  $\tau_{i+1} - \tau_i$ , т. е. взвешиваются между собой слагаемые в суммах (12.89).
3. Внутри интервалов  $\tau_{j+1} - \tau_j$ ,  $\tau_{i+1} - \tau_i$  происходит выбор конкретных значений  $\tau'$ ,  $\tau''$  согласно распределениям вероятностей — подынтегральным функциям в выражениях  $Q_{1,2}(\tau)$ .

**12.1.7.2.3. Расчет модели Холстейна–Хаббарда.** Далее в этом и следующих разделах представлены примеры применения обобщенного алгоритма CTWL для расчета небольших физических систем. Выбор малых кластеров продиктован необходимостью точной проверки результатов МК с помощью метода точной диагонализации гамильтоновой матрицы.

Обобщенный алгоритм был протестирован на модели Холстейна–Хаббарда (12.78) для четырех узлов в периодических условиях. Для конкретной реализации использовались как узельное представление (12.78), так и импульсное (12.79). Покажем, как одну и ту же задачу можно представить для схемы (12.80) в существенно различном виде.

Узельная кодировка является, в общем, стандартной для таких моделей. Отметим только, что имеют место три типа узлов — два типа электронных (для каждой проекции спина) с заполнением  $n = 0; 1$ , и бозонные с заполнением  $n_b = 0; 1; \dots; N_{\max}$  (в рассматриваемом случае  $N_{\max} = 4$ ). Таким образом, имеем 12-узельный кластер из различного типа узлов.

Кодировка состояний в импульсном базисе показана на рис. 12.42. Шестнадцать возможных электронных состояний (для одной проекции спина) представлены как «числа заполнения»  $n$  от 0 до 15 и помещены на один «электронный узел», а фононы остаются в стандартном узельном представлении (на че-

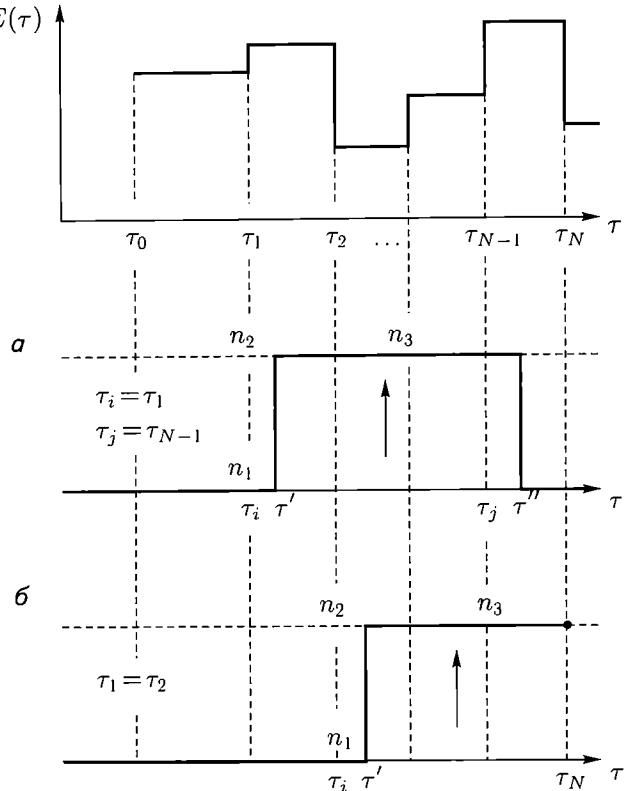


Рис. 12.41. Процедуры *kink-antikink* (а) и *jump* (б), реализующиеся на фоне кусочной функции  $\delta E(\tau)$  — приращения энергии от диагональных слагаемых за счет изменения состояния

тырех узлах), причем разрешенные состояния фононов  $n_b = 0; 1; \dots; 4$ . Таким образом, для метода МК имеем шесть эффективных узлов: два электронных с 16 состояниями для каждого спина, и четыре бозонных, каждый с пятью возможными состояниями. Удобство представления электронных состояний одним эффективным узлом состоит в том, что все матричные элементы в (12.79) с учетом антисимметрии заранее рассчитываются и закладываются в схему МК. Если исходно в (12.79) присутствуют четырехфермионные слагаемые, связанные с четырьмя различными импульсами, то в конечном выражении (12.80) получаются только члены гамильтонiana, связывающие либо два эффективных электронных узла, либо один электронный узел и один бозонный, что укладывается в схему процедур обновления конфигураций, приведенных в предыдущем разделе. Более того, можно и в узельной схеме объединять фермионы в эффективные узлы, существенно упрощая моделирование.

На рис. 12.43 представлены данные из [190] для числа фононов как функции константы электрон-фононного взаимодействия (данные совпадают в обеих кодировках), при этом число электронов выдерживалось равным половинному заполнению по узлам. Результаты свидетельствуют о возрастании количества фононов с ростом взаимодействия, как и предполагают теорети-

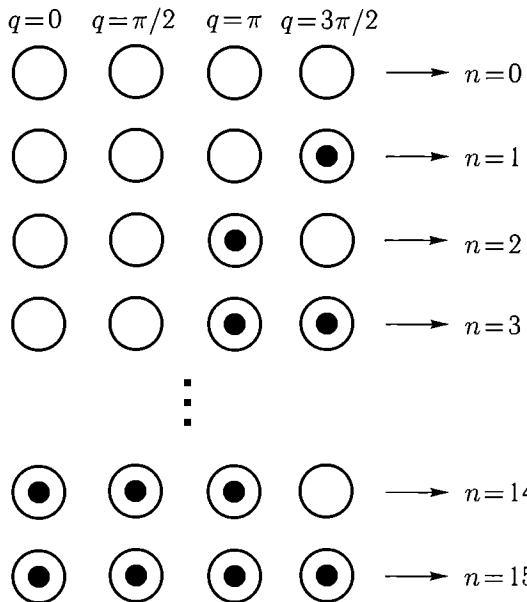


Рис. 12.42. Кодировка импульсов для одной проекции спина электронов в модели Холстейна–Хаббарда

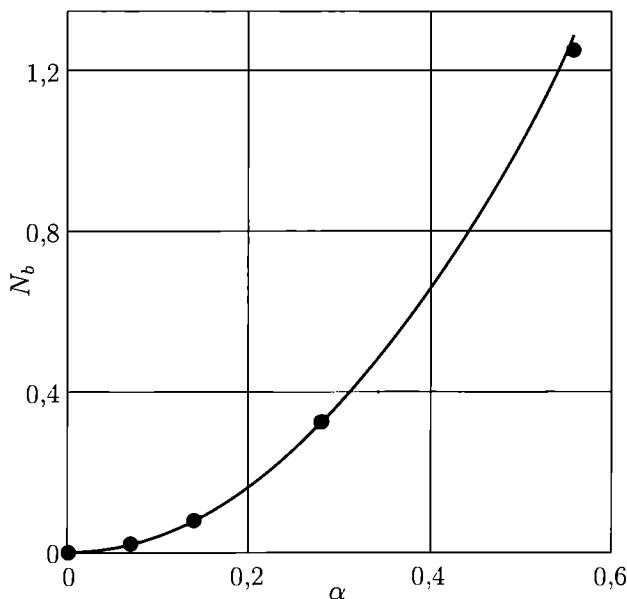


Рис. 12.43. Расчет обобщенным методом МК числа фононов  $N_b$  в зависимости от величины электрон-фононного параметра  $\alpha$  в модели Холстейна–Хаббарда (сплошные круги). Число узлов  $N_a = 4$ , периодическая одномерная цепочка. Параметры модели:  $t = 1,4$ ,  $U = 0,5$ ,  $\Omega = 1$ ,  $\mu = 0,5$ ,  $\beta = 10$ . Сплошной линией показаны данные метода точной диагонализации, данные взяты из [190]

ческие оценки. Сравнение с данными точной диагонализации свидетельствует о полном соответствии результатов расчета МК и точных данных.

Конечно, проблема знака, типичная для фермионов, имеет место и здесь. Однако в импульсном базисе состояния уже первично отсортированы по диагональным энергиям вида  $\sum_q \varepsilon_q a_q^+ a_q$ , что существенно ослабляет проблему.

Кроме того, при практически половинном заполнении на узле (для фермионов), из-за симметрии частица-дырка проблема знака также ослаблена.

**12.1.7.2.4. Расчет модели Бозе–Хаббарда.** С помощью обобщенного метода исследовалась также модель  $S = 1$  бозонов (12.76) — наиболее адекватная модель для бозе-газа в магнитооптических ловушках при сверхнизкой температуре.

Способы кодирования состояний проиллюстрированы на рис. 12.44. Заметим, что самая проблемная часть гамильтониана (12.76) — слагаемые вида  $a_1^+ a_{-1}^+ a_0 a_0$  (см. (12.77)), так как они связывают три проекции спина, т. е. три узла, если бы отдельно учитывалась каждая проекция. Объединяя состояния с двумя (или со всеми тремя) проекциями спина в состояния одного эффективного узла (см. рис. 12.44), схему МК можно упростить, что позволяет рассчитать характеристики системы бозонов  $S = 1$ . Такое представление соответствует предложенной выше схеме обновления конфигураций. Существенно, что для одной и той же модели можно использовать различные кодировки, исходя из удобства расчетов.

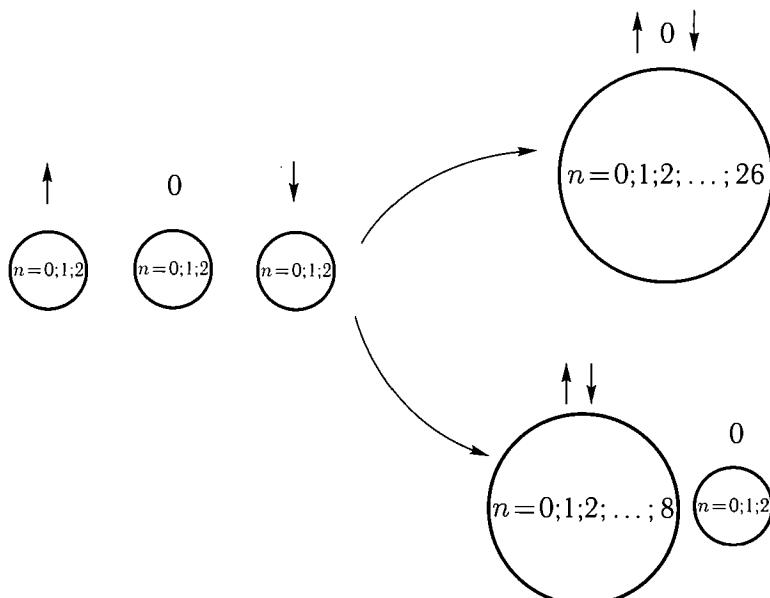


Рис. 12.44. Два типа кодировки на узле для модели  $S = 1$  бозонов при  $N_{\max} = 2$ :  
1) объединение всех проекций в один эффективный узел с числом состояний 27;  
2) представление в виде двух узлов — с ненулевыми и нулевой проекциями спина, с числом состояний 9 и 3 соответственно

Данные для энергии и числа бозонов показаны на рис. 12.45 [190]. Они также были протестированы методом точной диагонализации. Для расчета максимальные числа заполнения бозонов были существенно ограничены ( $n_b = 0; 1; 2$ ), что диктовалось возможностями метода МТД. Заметим, что для корректной проверки необходимо, чтобы все три проекции спинов бозонов в МК-расчете имели те же числа заполнения, что и при расчете методом МТД. Меняя химические потенциалы, можно достичь совпадения чисел бозонов в методах МК и МТД и показать, что совпадают в пределах погрешности и энергии системы, рассчитанные этими методами.

Числа бозонов для различных проекций спина (см. рис. 12.45) как функции параметра взаимодействия испытывают излом при  $U \sim 4$ , так что в этой точке происходит резкое перераспределение бозонной плотности между нулевой проекцией спина и ненулевыми компонентами.

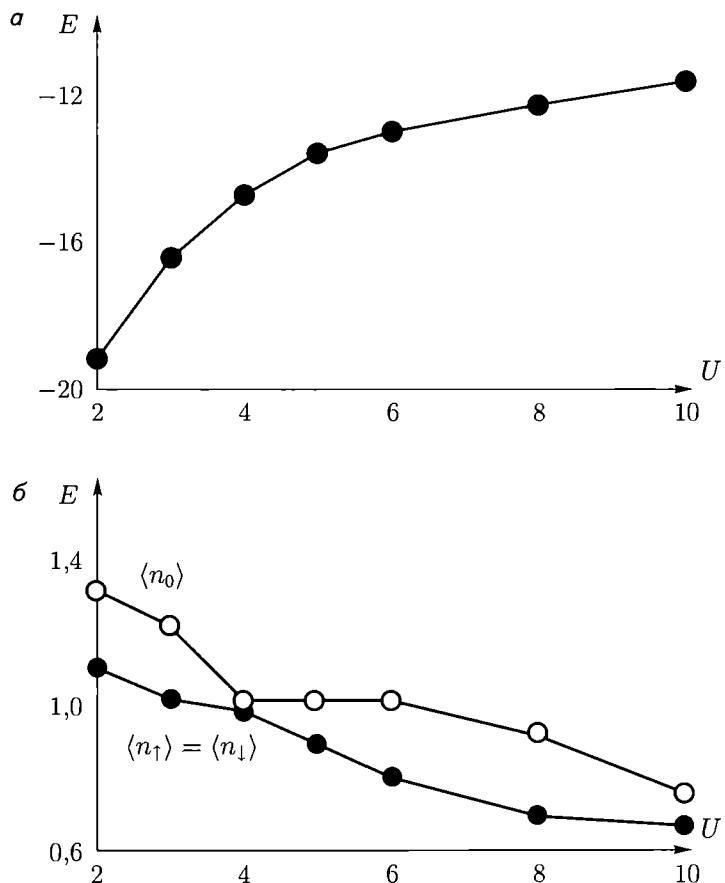


Рис. 12.45. Расчет обобщенным методом МК  $S = 1$  бозонной модели на трех узлах. Максимальное заполнение узла  $N_{\max} = 2$  (три состояния на узле для одной проекции спина). Параметры модели:  $t = 1$ ,  $\mu = 0,5$ ,  $U_2 = -0,5$ ,  $\beta = 10$ . Проведена перекодировка состояний со спинами  $\pm 1$ , так что в расчете фигурирует эффективный узел с числом состояний  $3 \times 3 = 9$ ; *a* — энергия системы как функция взаимодействия  $U$ , *b* — средние числа заполнения для различных проекций спина. Данные из [190]

## 12.2. Континуальное интегрирование в непрерывном времени

Одним из наиболее эффективных алгоритмов для расчета систем с достаточно произвольным потенциалом парного взаимодействия — квантовый алгоритм МК в терминах континуальных интегралов, PIMC (*Path Integral Monte Carlo*) [102, 103, 179], который применялся для моделирования свойств  $^4\text{He}$  и других бозонных систем [73, 102–104, 179–182]. PIMC относится к дискретным по мнимому времени квантовым методам МК и имеет ограничения, связанные с трудностями обновления траекторий, необходимостью использования приближений при расчете экспоненты от взаимодействия. Все эти ограничения приводят к возможности расчета лишь сравнительно небольших систем ( $\lesssim 100$  частиц [102, 103]).

Появление непрерывных по времени алгоритмов, свободных от ошибки разложения Судзуки–Троттера, стимулировало развитие новых подходов и в PIMC-схемах. В работе [85] был предложен вариант PIMC в непрерывном времени, включающий в себя все преимущества дискретного подхода Cerperley [102, 179] и эффективность червячного алгоритма CTWL. Этот алгоритм, а также его несколько иной вариант, напрямую суммирующий ряды разложения матрицы плотности, рассматриваются далее.

### 12.2.1. Алгоритм PIMC-WA.

**12.2.1.1. Формулировка алгоритма.** Следуя работе [85], рассмотрим представленный авторами алгоритм *PIMC-WA* (*Path Integral Monte Carlo Worm Algorithm*).

Рассмотрим  $d$ -мерную задачу в кубе  $V = L^d$  с периодическими граничными условиями. Число частиц  $N$  массой  $m$  в системе меняется в соответствии с условиями большого канонического ансамбля, и гамильтониан системы имеет вид

$$H = -\lambda \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i < j} v(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|), \quad (12.91)$$

где  $\lambda = \hbar^2/2m$ ,  $v(r)$  — потенциал парного взаимодействия. Степенями свободы системы являются положения всех частиц в пространстве:  $R \equiv (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ .

Напомним, что основная идея рассмотренных выше квантовых алгоритмов МК — сочетание конфигурационного пространства замкнутых мировых линий (назовем его согласно [85] *Z-сектором*), необходимого для расчета термодинамических величин (энергии, пространственного распределения частиц и др.), и конфигурационного пространства с двумя разомкнутыми мировыми линиями (*G-сектор*), необходимого для расчета функции Грина и других временных и недиагональных корреляционных функций. Рассмотрим эти два подпространства в постановке модели (12.91).

*Z-сектор* состоит из совокупности замкнутых мировых линий частиц в фазовом пространстве (координата)  $\otimes$  (мнимое время). Если шкалу мнимого времени сделать дискретной с малым шагом  $\varepsilon = \beta/P$ ,  $P \rightarrow \infty$ , то такую совокупность можно описать как  $X \equiv (R_0, R_1, R_2, \dots, R_P)$ ,  $R_P \equiv R_0$  (исключая

пока перестановки координат частиц за счет тождественности), а статистическую сумму представить следующим образом:

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} e^{-\beta K} \approx \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta \mu N} \int A(X, \varepsilon) e^{-U(X)} dX, \\ K &= H - \mu N; \quad dX = dR_0 dR_1 \dots dR_{P-1}, \\ A(X, \varepsilon) &= \prod_{j=0}^{P-1} \rho_F(R_j, R_{j+1}, \varepsilon), \end{aligned} \quad (12.92)$$

$\rho_F$  есть произведение пропагаторов свободных частиц:

$$\rho_F(R_j, R_{j+1}, \varepsilon) = \prod_{i=1}^N \rho_0(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}_{ij+1}, \varepsilon), \quad (12.93)$$

при этом

$$\rho_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \varepsilon) = (4\pi\lambda\varepsilon)^{-d/2} \exp\left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{4\lambda\varepsilon}\right). \quad (12.94)$$

Решение (12.92) — типичный континуальный интеграл по фазовому пространству системы. Функция  $U(X)$  в (12.92) должна включать в себя корреляции в координатном пространстве и мнимом времени, возникающие из-за взаимодействия частиц, и выбирается так, чтобы в пределе  $\varepsilon \rightarrow 0$  распределение дискретных траекторий  $X$  асимптотически приближалось к правильному континуальному пределу. Одним из простейших вариантов выбора функции  $U(X)$  является

$$\begin{aligned} U &= \sum_{j=0}^{P-1} \sum_{\langle a_j b_j \rangle} u(\mathbf{r}_{a_j} - \mathbf{r}_{b_j}), \\ u(r) &= v(r)\varepsilon. \end{aligned} \quad (12.95)$$

Символами  $a_j$  и  $b_j$  в (12.95) отмечены точки — координаты частиц на временном срезе  $j$ , а  $\langle a_j b_j \rangle$  обозначает все пары точек на временном срезе  $j$ . Соответственно,

$$e^{-U} = \prod_j \prod_{\langle a_j b_j \rangle} e^{-u(v\mathbf{r}_{a_j} - \mathbf{r}_{b_j})}. \quad (12.96)$$

Описание временной шкалы — дискретное, как у Сеперли, но для достаточно малого шага  $\varepsilon \rightarrow 0$  точность алгоритма приближается к точности алгоритма с непрерывной шкалой мнимого времени, практически отсутствуют ошибки разбиения. При этом наличие в алгоритме недиагональных конфигураций (червей) реализует в данном подходе все возможности метода CTWL, но в континуальном по координате базисе.

Статистический вес конфигурации  $W(X) \equiv A(X, \varepsilon) e^{-U(X)}$ , а сама конфигурация может быть описана как  $N$  замкнутых мировых линий на дискретном интервале мнимого времени  $[0, \beta]$ . Каждая мировая линия представляет собой совокупность из  $P$  точек на временных срезах  $j = 0, \dots, P - 1$ ; точки на соседних временных срезах соединены между собой линиями. В пределе

$\varepsilon \rightarrow 0$  точки и линии сливаются в непрерывную траекторию. Будем обозначать положение  $i$ -й частицы на  $j$ -м временном срезе в фазовом пространстве как  $r_{ij}$ . Мировые линии могут обходить временной цилиндр  $\beta$  несколько раз, прежде чем замкнуться, при этом в конфигурации будут присутствовать ненулевые *winding numbers*.

$G$ -сектор фазового пространства используется при расчете одночастичной мацубаровской функции Грина

$$G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau) = \langle T \{ \psi(\mathbf{r}_1, \tau) \psi^+(\mathbf{r}_2, 0) \} \rangle \equiv \frac{g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau)}{Z}, \quad (12.97)$$

где  $\psi(\mathbf{r}_1, \tau)$  — полевые операторы, а угловые скобки означают термодинамическое усреднение.

Структура недиагональных конфигураций для расчета  $g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau)$  похожа на структуру диагональных конфигураций для расчета, например, статистической суммы  $Z$ , разница лишь в том, что в недиагональных конфигурациях присутствует червь (*worm*) — разорванная траектория, начало и конец которой соответствуют операторам рождения и уничтожения. Соответственно, точки  $(\mathbf{r}_{\mathcal{J}}, \tau_{\mathcal{J}})$  и  $(\mathbf{r}_{\mathcal{M}}, \tau_{\mathcal{M}})$ , определяющие статистику функции  $g(\mathbf{r}_{\mathcal{J}}, \mathbf{r}_{\mathcal{M}}, \tau_{\mathcal{J}} - \tau_{\mathcal{M}})$ , являются «головой» и «хвостом» червя. Такое описание соответствует варианту конфигурационного пространства алгоритма CTWL, но в непрерывном базисе.

Формально полное конфигурационное пространство алгоритма включает в себя как  $Z$ -сектор, так и  $G$ -сектор, а совокупность всех конфигураций соответствует обобщенной статистической сумме

$$Z_W = Z + Z', \quad (12.98)$$

где

$$Z' = C \sum_{j_{\mathcal{J}}, j_{\mathcal{M}}} \int d\mathbf{r}_{\mathcal{J}} d\mathbf{r}_{\mathcal{M}} g(\mathbf{r}_{\mathcal{J}}, \mathbf{r}_{\mathcal{M}}, \varepsilon(j_{\mathcal{J}} - j_{\mathcal{M}})). \quad (12.99)$$

Постоянная  $C$  легко определяется из условия нормировки в пределе  $\mathbf{r}_{\mathcal{J}} \rightarrow \mathbf{r}_{\mathcal{M}}$ ,  $\tau_{\mathcal{J}} \rightarrow \tau_{\mathcal{M}}$ , а в процессе вычислений собирается гистограмма для статистики функции Грина.

Для удобства в [85] при расчете физических величин предлагается ввести индекс, фиксирующий мгновенное состояние системы в секторах фазового пространства:

$$\delta^{(Z)} = \begin{cases} 1, & \text{если система в секторе } Z, \\ 0, & \text{если система в секторе } G, \end{cases} \quad (12.100)$$

$$\delta^{(G)} = \begin{cases} 0, & \text{если система в секторе } Z, \\ 1, & \text{если система в секторе } G. \end{cases} \quad (12.101)$$

Тогда очевидны следующие выражения для средних:

$$\langle \delta^{(Z)} \rangle_{MC} = \frac{Z}{Z_W}, \quad (12.102)$$

$$\langle \delta^{(G)} \rangle_{MC} = \frac{C_P}{Z_W} \sum_{j=0}^{P-1} \int g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \varepsilon j) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (12.103)$$

В частности,

$$\frac{\langle \delta^{(G)} \rangle_{MC}}{\langle \delta^{(Z)} \rangle_{MC}} = CP \sum_{j=0}^{P-1} \int G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \varepsilon j) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (12.104)$$

Оценка для функции Грина  $g(\mathbf{r}, \tau)$ ,  $\tau = \varepsilon j$ , имеет вид

$$\left\langle \delta^{(G)} \delta_{j, (j_J - j_M)} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_J) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_M) \right\rangle_{MC} = \frac{CP}{Z_W} g(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \varepsilon j). \quad (12.105)$$

**12.2.1.2. Процедуры обновления траекторий.** В работе [85] предлагаются для обновления траекторий набор элементарных процедур. Все они похожи на процедуры алгоритма CTWL и связаны с движением червя.

Итак, рассмотрим точки, образующие мировые линии в фазовом пространстве, каждая из которых связана со своими двумя соседями по мировой линии на  $\beta$ -цилиндре, как показано на рис. 12.46.

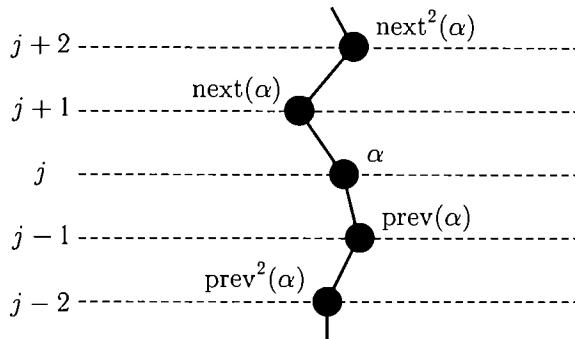


Рис. 12.46. Точки на мировых линиях и их соседи

Все точки в алгоритме пронумерованы. Для данной точки  $\alpha$  можно определить ее соседей по мировой линии — соответственно, точку  $\text{next}(\alpha)$ , находящуюся на следующем временном срезе, и точку  $\text{prev}(\alpha)$ , расположенную на предыдущем временном срезе. Удобно также ввести две функции,  $\text{next}$  и  $\text{prev}$ , сдвигающие точку на один шаг по времени (на величину  $\varepsilon$ ) вперед или назад соответственно. Операция  $\sigma = \text{next}^m(\alpha)$  означает, что точка  $\sigma$  является результатом  $m$ -кратного применения функции  $\text{next}$  к точке  $\alpha$ ; соответственно,  $\alpha = \text{prev}^m(\sigma)$ .

Для практической реализации алгоритма удобно весь конфигурационный объем системы разбить на мелкие части при помощи введения дискретного шага по времени ( $j = 0, 1, 2, \dots, (P - 1)$ ) и дискретного радиус-вектора  $\vec{R}$ . Каждая часть полного конфигурационного пространства  $\Omega$  (назовем ее элементарным фазовым объемом) содержит информацию о числе точек, находящихся в ней, и связях между ними.

Заметим, что практическая реализация алгоритма может быть и иной, определяемой удобством программирования.

1. Процедура рождения куска траектории (open). Эта процедура реализуется только в том случае, если все остальные траектории замкнуты. Она заключается в случайном выборе точки  $\alpha$ , а затем в выборе числа точек

$M$ , которые необходимо уничтожить. Число  $M$  случайно выбирается из фиксированного интервала  $[1, \bar{M}]$ ,  $\bar{M} < P$ , который фиксирован в процессе всего расчета. Затем  $M - 1$  точек, соответствующих операциям  $\text{next}(\alpha)$ ,  $\text{next}^2(\alpha)$ , ...,  $\text{next}^{(M-1)}(\alpha)$ , уничтожаются, при этом образуется червь с началом в точке  $\mathcal{J} \equiv \alpha$  и концом в точке  $\mathcal{M} \equiv \text{next}^M(\alpha)$ .

Согласно алгоритму Метрополиса, вероятность этого события

$$P_{\text{open}} = \min \left\{ 1, \frac{C\bar{M}N_p e^{\Delta U - \mu M\varepsilon}}{\rho_0(\mathbf{r}_\alpha, \mathbf{r}_\sigma, M\varepsilon)} \right\}, \quad (12.106)$$

где  $\Delta U = U(X) - U(X^*)$  — разница в значениях функции  $U$  в начальной  $X$  и предполагаемой новой  $X^*$  конфигурациях;  $N_p$  — полное число точек в начальной диагональной конфигурации, равное произведению числа частиц на число временных срезов,  $N_p = NP$ . В случае  $M = 1$  никакие точки не уничтожаются, только связь между точками  $\alpha$  и  $\sigma$  исчезает.

2. Процедура *уничтожения* куска траектории (*close*). Эта процедура является обратной к процедуре рождения и реализуется, соответственно, для недиагональной конфигурации (конфигурации  $G$ -сектора) при наличии червя.

Будем полагать, что отсчет идет в положительном по времени направлении от начала червя  $\mathcal{J}$  до конца  $\mathcal{M}$  (с учетом периодичности на  $\beta$ -цилиндре). Пусть расстояние  $M$  во временных срезах от начала до конца червя  $0 < M \leq \bar{M}$ , в противном случае процедура не реализуется. При  $M > 1$  выбираются  $M - 1$  новых точек  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{M-1}$  на соответствующих временных срезах между концами червя; выбор каждой пространственной точки  $\mathbf{r}_\nu$  происходит в соответствии с плотностью вероятности, равной свободному пропагатору  $\rho_0(\mathbf{r}_{\nu-1}, \mathbf{r}_\nu, \varepsilon)$  при условии уже выбранной точки  $\mathbf{r}_{\nu-1}$ , так что для всей траектории имеем произведение последовательных свободных пропагаторов  $\prod_{\nu=1}^M \rho_0(\mathbf{r}_{\nu-1}, \mathbf{r}_\nu, \varepsilon)$ , при этом  $\mathbf{r}_0 \equiv \mathbf{r}_\mathcal{J}$ ,  $\mathbf{r}_M \equiv \mathbf{r}_\mathcal{M}$ . Выбор случайных точек производится в соответствии с гауссовым распределением (см. п. 10.1.2).

Полная вероятность реализации процедуры *close*, согласно алгоритму Метрополиса равна

$$P_{\text{close}} = \min \left\{ 1, \frac{\rho_0(\mathbf{r}_\mathcal{J}, \mathbf{r}_M, M\varepsilon) e^{\Delta U + \mu M\varepsilon}}{C\bar{M}N_p} \right\}, \quad (12.107)$$

где  $N_p$  — число точек в конечной диагональной конфигурации.

3. Процедура *insert*. Эта процедура является альтернативой процедуре *open*, она также позволяет появиться червю в конфигурации. Различие состоит в том, что червь появляется как новый отрезок мировой линии среди уже имеющихся, а не за счет уничтожения части имеющейся линии. Исходная ситуация — диагональная, с замкнутыми траекториями. Выбирается длина червя  $M$  в единицах временных срезов,  $1 < M \leq \bar{M}$ , а положение конца червя  $\mathcal{M}$  выбирается случайным образом. Остальные точки червя генерируются с плотностью вероятности, соответствую-

щей произведению  $M$  свободных пропагаторов. Вероятность реализации этой процедуры

$$P_{\text{insert}} = \min \left\{ 1, C V P \bar{M} e^{\Delta U + \mu M \varepsilon} \right\}, \quad (12.108)$$

где  $V$  — полный объем системы в единицах  $\Omega$ .

4. Процедура *remove*. Эта процедура является альтернативой процедуре *close* и приводит к уничтожению червя длиной  $M$  ( $1 \leq M \leq \bar{M}$ ), расположенного между точками  $\mathcal{J}$  и  $\mathcal{M}$ . Вероятность реализации процедуры *remove*

$$P_{\text{remove}} = \min \left\{ 1, e^{\Delta U - \mu M \varepsilon} / C V P \bar{M} \right\}. \quad (12.109)$$

Неопределенную константу  $C$  в (12.106) — (12.109) предлагается выбрать в виде

$$C = \frac{C_0}{V P \bar{M}}, \quad C_0 \sim O(1), \quad (12.110)$$

так что все процедуры *open*, *close*, *insert*, *remove* имеют близкие значения вероятностей для эффективного обновления конфигураций.

5. Процедура *advance*. Эта процедура отвечает передвижению начала червя  $\mathcal{J}$  вперед по времени на случайное число срезов  $M$  (и рождение соответствующего числа точек). Эта процедура похожа на процедуру *insert*, ее вероятность

$$P_{\text{advance}} = \min \left\{ 1, e^{\Delta U + \mu M \varepsilon} \right\}. \quad (12.111)$$

6. Процедура *recede*. Эта процедура приводит к передвижению начала червя  $\mathcal{J}$  на случайное число срезов  $M$  назад по времени и уничтожению  $M$  точек червя,  $1 \leq M \leq \bar{M}$ . Вероятность этой процедуры

$$P_{\text{recede}} = \min \left\{ 1, e^{\Delta U - \mu M \varepsilon} \right\}. \quad (12.112)$$

7. Процедура *swap*. Эта важная процедура описывает переключение траекторий, связанное с тождественностью частиц. Процедура *swap* реализуется только в недиагональной конфигурации и показана на рис. 12.47. Пусть начало червя  $\mathcal{J}$  находится на временном срезе  $j$  и относится к элементарному фазовому объему  $(\vec{R}_{\mathcal{J}}, j)$ . С учетом  $\beta$ -периодичности найдем временной срез  $(j + \bar{M})$  и все точки, расположенные на этом срезе и связанные траекториями с точками в элементарном объеме  $(\vec{R}_{\mathcal{J}}, j)$  или в ближайших таких элементарных объемах — соседях по временному срезу  $j$ . Сформируем список  $\mathcal{L}_{\mathcal{J}}$  всех таких точек на срезе  $(j + \bar{M})$  и из этого списка случайно выберем точку  $\alpha$  (рис. 12.47) с вероятностью

$$P_{\alpha} = \frac{\rho_0(\mathbf{r}_{\mathcal{J}}, \mathbf{r}_{\alpha}, \bar{M} \varepsilon)}{\Sigma_{\mathcal{J}}}; \quad (12.113)$$

$$\Sigma_{\mathcal{J}} = \sum_{\sigma \in \mathcal{L}_{\mathcal{J}}} \rho_0(\mathbf{r}_{\mathcal{J}}, \mathbf{r}_{\sigma}, \bar{M} \varepsilon). \quad (12.114)$$

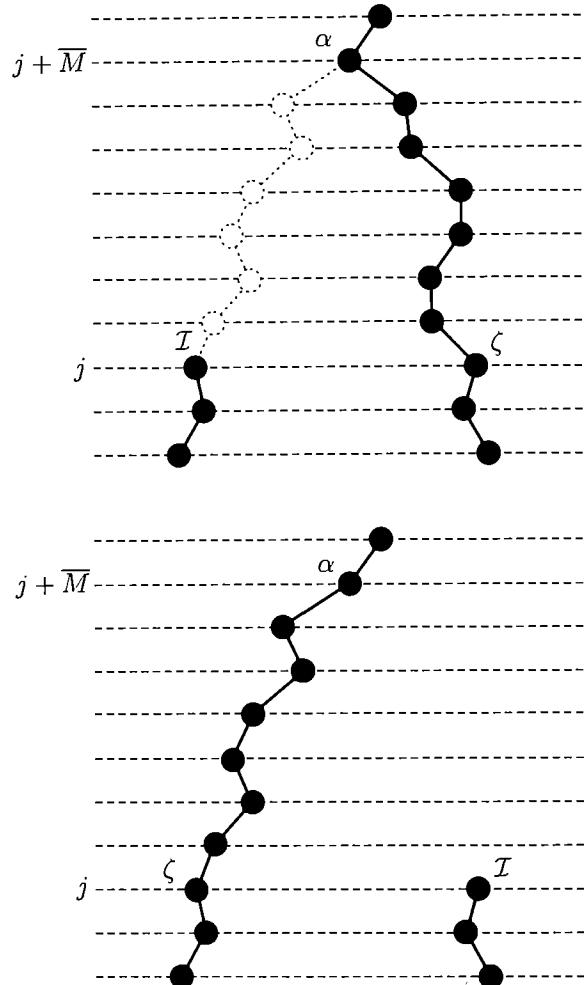


Рис. 12.47. Процедура *swap*: внизу — исходная конфигурация, вверху — конфигурация после выполнения процедуры

Если получилось так, что какая-либо из точек  $\alpha$ ,  $\text{prev}(\alpha)$ ,  $\text{prev}^2(\alpha), \dots, \text{prev}^M(\alpha)$  совпадает с концом червя  $M$ , то процедура не реализуется.

Рассмотрим точку  $\zeta = \text{prev}^M(\alpha)$  и соответствующий элементарный объем  $(\vec{\mathcal{R}}_\zeta, j)$ . Если пространственное расположение точки  $\alpha$  совпадает с пространственным расположением  $(\vec{\mathcal{R}}_\zeta, j)$  или его ближайшими соседями по срезу  $j$ , то процедура не реализуется.

Далее сформируем второй список  $\mathcal{L}_\zeta$  точек, содержащихся в элементарном объеме  $(\vec{\mathcal{R}}_\zeta, j + M)$  или его ближайших соседях по временному срезу. После этого на временных срезах между точками  $\mathcal{I}$  и  $\alpha$  генерируется последовательность пространственных точек  $r_1, r_2, \dots, r_{M-1}$ ,

соответствующих функциям  $\text{prev}(\alpha)$ ,  $\text{prev}^2(\alpha), \dots$ ,  $\text{prev}^{(\bar{M}-1)}(\alpha)$  аналогично процедуре *close*.

Таким образом, происходит переключение (*reconnection*) куска траектории — часть траектории между точками  $\zeta$  и  $\alpha$  стирается, а между точками  $\mathcal{J}$  и  $\alpha$  появляется. Вероятность реализации этой процедуры

$$P_{\text{swap}} = \min \left\{ 1, e^{\Delta U \frac{\Sigma_{\mathcal{J}}}{\Sigma_{\zeta}}} \right\}, \quad (12.115)$$

$\Sigma_{\zeta}$  определяется аналогично (12.114) с использованием списка  $\mathcal{L}_{\zeta}$ .

Такое переключение траекторий обеспечивает учет тождественности частиц при моделировании квантовых бозе-систем (например, при исследовании жидкой и твердой фаз квантового ансамбля  ${}^4\text{He}$ ).

**12.2.1.3. Процедуры обновления траекторий. Расчет физических величин.** Выражения для всех величин, рассчитываемых в  $Z$ -секторе, полностью эквивалентны физическим средним для обычного PIMC-алгоритма. Описание процедуры расчета диагональных физических величин в данном алгоритме подробно описано в [85]. Рассмотрим здесь метод расчета мацу-баровской функции Грина

$$\bar{G}(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{V} \int G(\mathbf{r} + \bar{\mathbf{r}}', \bar{\tau}', \tau) d\bar{\mathbf{r}}', \quad (12.116)$$

усредненной по пространственным трансляциям. Без потери общности можно формально один из концов червя поместить на нулевой срез по времени, например, положив  $j_{\mathcal{M}} = 0$ , и собирать статистику для другого конца  $\mathcal{J}$ :

$$g(\mathbf{r}_{\mathcal{J}}, j_{\mathcal{J}}) = \sum_{\xi} \mathcal{D}_{\xi}(\mathbf{r}_{\mathcal{J}}, j_{\mathcal{J}}), \quad (12.117)$$

где  $\mathcal{D}_{\xi}(\mathbf{r}_{\mathcal{J}}, j_{\mathcal{J}})$  — вклад от мгновенной конфигурации  $\xi$  (исключая замкнутые). Для того, чтобы набирать статистику точно при заданных  $j_{\mathcal{J}}$  и  $\mathbf{r}_{\mathcal{J}}$ , можно использовать процедуру *перевзвешивания* (см. [200], а также п. 12.9): если имеется некоторая конфигурация  $\mathcal{D}_{\xi_0}(\mathbf{r}_0, j_0)$ , то ее можно пересчитать («*upgrade*») в конфигурацию  $\mathcal{D}_{\xi}(\mathbf{r}, j)$ ,  $j > j_0$ , добавив к концу червя  $\mathcal{J}$  кусок траектории длиной  $M = j - j_0$  аналогично процедуре *advance*, тогда

$$\mathcal{D}_{\xi}(\mathbf{r}, j) = \mathcal{D}_{\xi_0}(\mathbf{r}_0, j_0) R_{j_0 j}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}), \quad j_0 < j, \quad (12.118)$$

$$R_{j_0 j}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}) = e^{\Delta U + \mu M \epsilon} \prod_{\nu=1}^M \rho_0(\mathbf{r}_{\nu-1}, \mathbf{r}_{\nu}, \epsilon), \quad (12.119)$$

где  $\xi = (\xi_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{M-1})$ ,  $\mathbf{r}_M \equiv \mathbf{r}$ ,  $\Delta U = U_{\xi_0} - U_{\xi}$ ,  $U_{\xi_0}$  и  $U_{\xi}$  отвечают конфигурациям  $\mathcal{D}_{\xi_0}$  и  $\mathcal{D}_{\xi}$ , соответственно. Таким образом, имеем

$$\begin{aligned} g(\mathbf{r}, \epsilon j) &= \sum_{\xi_0} \int \mathcal{D}_{\xi_0}(\mathbf{r}_0, j_0) R_{j_0 j}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}) d\mathbf{r}_0 \dots d\mathbf{r}_{M-1} = \\ &= \frac{1}{M} \sum_{\xi_0, j_0} \int \mathcal{D}_{\xi_0}(\mathbf{r}_0, j_0) R_{j_0 j}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}) \delta_{j_0 j}^{(M)} d\mathbf{r}_0 \dots d\mathbf{r}_{M-1}, \end{aligned} \quad (12.120)$$

где

$$\delta_{j_0 j}^{(\bar{M})} = \begin{cases} 1, & \text{если } j_0 \in [j - \bar{M}, j - 1], \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (12.121)$$

Фактически, можно получить точный результат для необходимого временного среза  $j$  из имеющегося в мгновенной конфигурации среза  $j_0 \in [j - \bar{M}, j - 1]$ , не дожидаясь совпадения (или почти совпадения)  $j$  и  $j_0$ , что является маловероятным событием и приводит к росту погрешностей и неэффективному набору статистики.

В работе [85] предложены также более эффективные методы сбора информации; их изложение выходит за рамки книги.

**12.2.1.4. Результаты расчетов методом PIMC-WA. Жидкие и твердые фазы гелия. Сверхтекучесть, supersolid, дефекты в твердом гелии, кристаллические гранулы  $^4\text{He}$ .** Ниже для иллюстрации представлены некоторые результаты по большим системам, описывающим двумерный и трехмерный  $^4\text{He}$ . На рис. 12.48 показан расчет сверхтекучей компоненты в двумерном  $^4\text{He}$  для различного размера системы. Видно, что представленный метод позволяет рассчитать достаточно макроскопическую систему из 2500 атомов, так что результаты фактически совпадают с термодинамическим пределом.

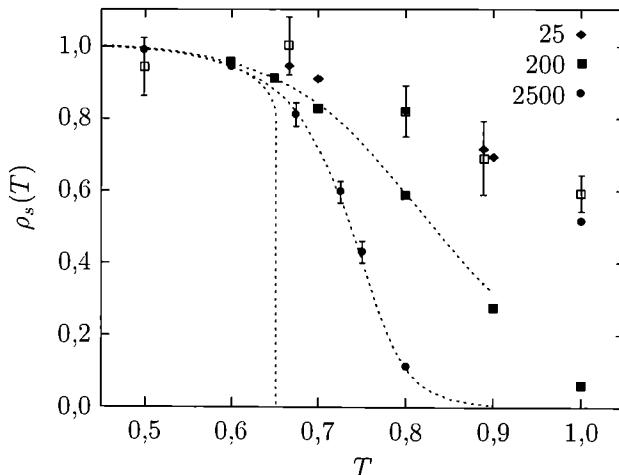


Рис. 12.48. Сверхтекучая плотность в зависимости от температуры из [85] для двумерной системы  $^4\text{He}$  с различным числом атомов

На рис. 12.49 продемонстрирован скачок функции Грина в точке  $\tau = 0$ , получить который практически невозможно при использовании других методов.

На рис. 12.50 показан МК-расчет одночастичной матрицы плотности для взаимодействующего  $^4\text{He}$ . Результаты фактически совпадают с формулой Боголюбова для асимптотического поведения одночастичной матрицы плотности в сверхтекучей жидкости на больших расстояниях:

$$n(r) = n_0 \exp \left( \frac{T}{8\pi\lambda n \rho_s r} \right). \quad (12.122)$$

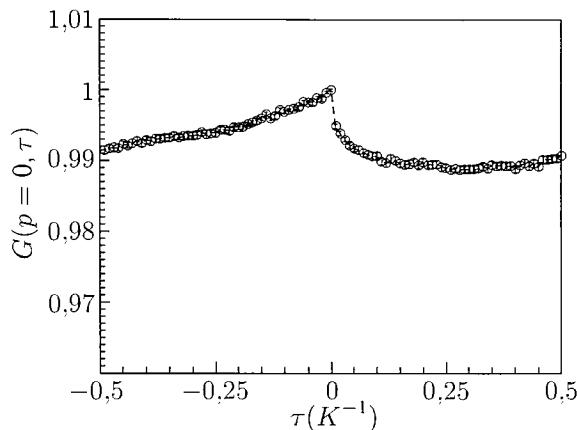


Рис. 12.49. Функция Грина из [85] для трехмерной системы из 1000 атомов при температуре  $T = 1$  К

Таким образом, в представленных результатах продемонстрирована возможность метода, с легкостью рассчитывающего бозе-систему из нескольких тысяч частиц при низких температурах, и показана возможность скейлинга данных по недиагональным физическим величинам к термодинамическому пределу. Показано совпадение данных МК с асимптотами решения Боголюбова.

В работах [237, 238] методом PIMC-WA были получен целый спектр данных по твердой фазе  $^4\text{He}$  и смеси твердой и жидкой фаз. В [237] показано, что границы гранул кристаллического гелия являются сверхтекучими при низких температурах.

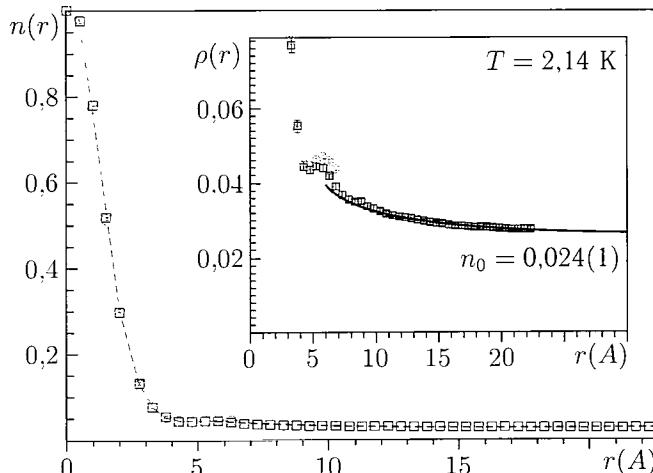


Рис. 12.50. Одночастичная матрица плотности из [85] для системы из 64 (сплошные квадраты) и 2048 (открытые квадраты) атомов

Для того чтобы проверить, разрушается ли граница зерна, когда происходит контакт с жидкостью, было выполнено прямое моделирование двух кри-

сталлитов в контакте с жидкостью, схематично представленных на рис. 12.51. Схема моделирования, показанная в деталях на рис. 12.52, состоит из двух усеченных пирамид твердой фазы со случайной ориентацией кристаллитов, остальная часть объема заполнена жидкостью.

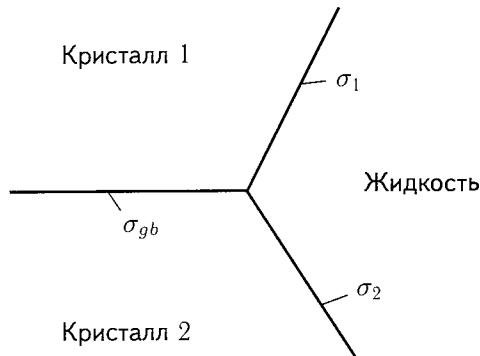


Рис. 12.51. Схематичное изображение равновесной конфигурации двух кристаллитов в контакте с жидкостью

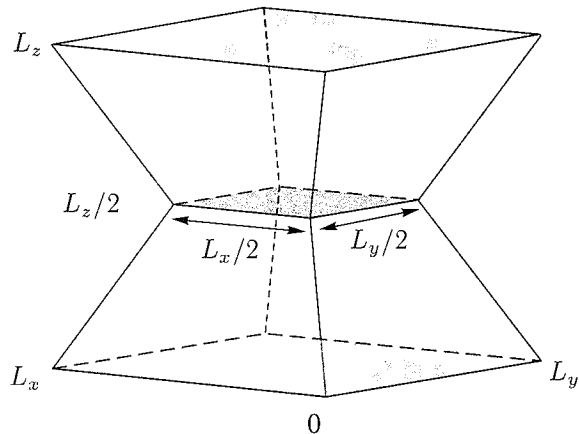


Рис. 12.52. Исходная система для моделирования границы зерна в контакте с жидкостью. Две усеченные пирамиды поставлены одна на другую вершинами. Базовая плоскость у обеих пирамид — квадрат с размером  $L_x \times L_y = L \times L$  с  $L = 24$ . Верхняя и нижняя пирамиды имеют различные случайным образом смоделированные кристаллические ориентации, высота обеих пирамид  $L_z = L/2$ . Верхняя часть усеченных пирамид — квадраты исходного размера  $L/2 \times L/2$ , они формируют границу зерна между этими двумя кристаллитами. Жидкость заполняет объем вне кристаллитов. Используются периодические граничные условия в направлениях  $x$  и  $y$ , в то время как атомы в плоскостях  $z = 0$  и  $z = L$  закреплены

Так как цель этой части моделирования состоит в том, чтобы изучить стабильность границы зерна, можно работать при относительно высокой температуре,  $T = 0,8$  K, что значительно упрощает работу алгоритма: размер конфигурации по шкале минимого времени уменьшается, и релаксационные процессы на границе жидкость — твердое тело и твердое тело — твердое

тело численно облегчаются при моделировании Монте-Карло. Моделирование выполнено в большом каноническом ансамбле, с химическим потенциалом, фиксированным в точке сосуществования фаз. Равновесное число атомов в системе было рассчитано и равно 13660. Для стабилизации твердой фазы в системе атомы в твердом состоянии около основания пирамид фиксируются, т. е. они не участвуют в обновлениях Монте-Карло.

На рис. 12.53 показана область конденсации системы. Видно, что граница зерен между двумя кристаллитами — квантовая область шириной около 3 единиц (см. также рис. 12.55), она не исчезает во время всего процесса моделирования. Система эволюционирует к состоянию, в котором жидкая и твердая фаза сосуществуют. По сравнению с начальной конфигурацией формы кристаллитов (включая углы) заметно изменились. Это не удивительно, так как оптимальная форма взаимодействия между кристаллом и жидкостью зависит от ориентации осей кристаллитов по отношению к поверхности, граничащей с жидкостью.

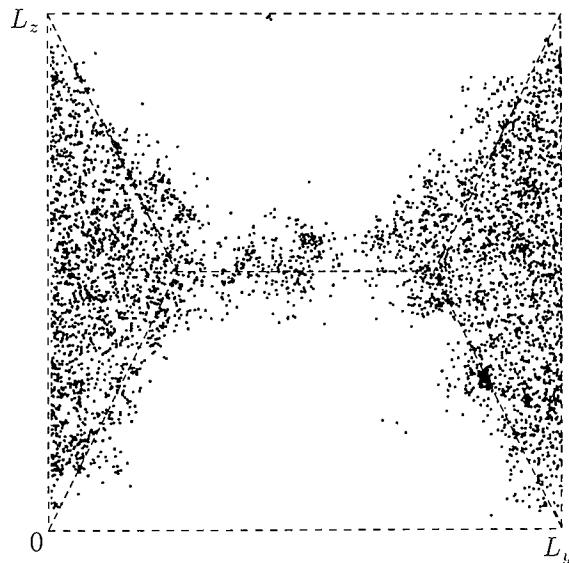


Рис. 12.53. Распределение конденсированной области системы с двумя пирамидами. Рисунок соответствует (чем гуще точки, тем больше значение) волновой функции конденсированной фазы в слое  $x \in [0,4L, 0,6L]$  с усреднением по толщине. Начальное распределение отмечено штриховыми линиями

Установив стабильность и сверхтекучесть на границе зерен в исследуемой системе, можно провести более систематическое изучение свойств границ зерен. Моделирование границы зерна между двумя усеченными пирамидами с длиной основания  $L = 24$  является очень трудоемким вычислением, так как требует учесть 13660 атомов. Сокращение размера пирамид не является оптимальным выбором, так как типичный размер сверхтекучей границы зерна, оцененный по рис. 12.53 (см. также рис. 12.55), составляет порядка 3. Следовательно, в системе с двумя пирамидами линейных размеров, существенно меньших чем  $L = 20 - 30$ , граница зерна будет плохо определена, и система

не будет находиться в метастабильном (двуухфазном) состоянии. Например, в системе с  $L = 12$  было обнаружено, что граница зерна и два кристаллита (кроме фиксированных атомов) тают.

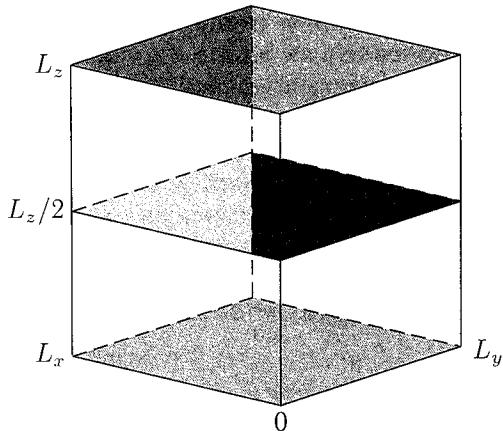


Рис. 12.54. Схематическое изображение исходной системы двух кубических кристаллитов с различными случайными ориентациями, помещенных друг на друга. Базовая плоскость обоих кубов является квадратом с размером  $L_x \times L_y = L \times L$ ,  $L = 12$ . Высота обоих кубов  $L_z/2 = 7$ , в результате границы зерен расположены в плоскостях  $z = 0$  и  $z = L_z/2$ . Движение через  $xx$ -границу подавляется, так как все атомы на расстояниях, меньших 0,75 от плоскостей  $y = 0$  и  $y = L_y$ , закреплены. Это гарантирует, что любой сверхтекущий отклик в направлении  $x$  будет реализовываться только благодаря сверхтекучести двух горизонтальных границ зерна. Дополнительные границы зерен появляются из-за периодических граничных условий для каждого кристаллита при  $x = 0$  и  $x = L_x$ , но они не влияют на сверхтекущий отклик в направлении  $x$ .

Для изучения свойств границ зерна использовалась геометрия, показанная на рис. 12.54, состоящая из двух одинакового размера кубов, размещенных друг над другом.

Важным результатом расчетов является то, что не все границы зерен в кристалле  $^4\text{He}$  являются сверхтекучими. Границы зерен, обладающие дополнительной симметрией, такой как дефекты упаковки, а также границы зерен, находящихся друг к другу под определенными углами, подобно показанным на рис. 12.56, являются изоляторами.

Ключевой проблемой является изучение сверхтекучести межзеренной границы. Результаты типичного моделирования для параметров  $T = 0,25$  К;  $N = 2000$  (число частиц);  $n = 0,0287 \text{ \AA}^{-3}$  (плотность), показаны на рис. 12.55. Распределение сверхтекучего потока (рассчитанное из усреднения статистики *winding numbers*) отчетливо показывает сверхтекущие свойства вдоль направления  $x$ . Так как рассматривается достаточно большая система, можно утверждать, что наблюдаемый сверхтекущий сигнал отражает макроскопическую сверхтекучесть на границе зерна и не является артефактом, например, из-за близости сверхтекущего водораздела — перекрытия границы рассматриваемого зерна и добавочной границей, вызванной периодическими граничными условиями в плоскости  $x = 0$  ( $x = L$ ).

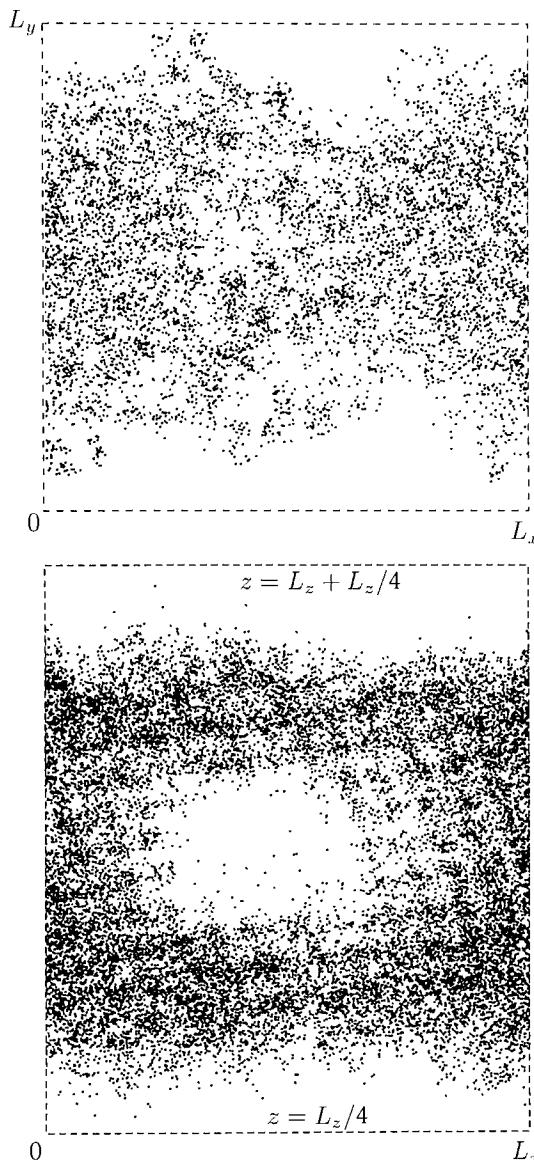


Рис. 12.55. Фазово-когерентные свойства (карта *winding numbers*) границ зерна в системе  ${}^4\text{He}$ , показанной на рис. 12.54. Верхний рисунок: проекция на плоскость  $xy$  данных для верхней половины системы, содержащей одну из двух границ зерна. Нижний рисунок (сдвигка по оси  $z$ ): проекция данных на плоскость  $xz$ .

Интересно отметить, что плотность в непосредственной близости от сверхтекущих границ гранул близка к кристаллической; это говорит о том, что сверхтекущий поток вдоль границ гранул не является заполненной жидкостью трещиной.

На основе большого числа симуляций, схожих с представленной на рис. 12.55, и выполненных при различных давлениях, температуре и ориента-

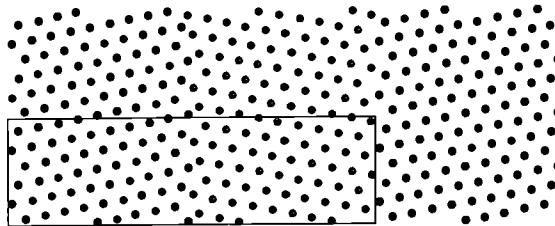


Рис. 12.56. Базовая плоскость изолирующей межзеренной границы между двумя кристаллитами, которые отличаются только поворотом вокруг оси, перпендикулярной базовой плоскости. Вне обведенного прямоугольника показано периодическое продолжение системы. Даже для этого небольшого размера системы ясно, что граница зерна не сверхтекучка. Уменьшение угла между этими двумя кристаллитами усиливает изолирующий характер. Так как граница зерна является изолятором, и может быть рассмотрена как разреженная стенка краевых дислокаций, можно заключить, что краевые дислокации вдоль оси с также являются изоляторами

ции осей кристаллита, можно заключить, что общие границы зерен являются сверхтекучей жидкостью с типичными (не зависящими от ориентации) температурами перехода, равными приблизительно 0,5 К. Ширина области сверхтекучих границ зерна составляет порядка 3 единиц. Можно предположить, что максимально возможная  $T_c$  для границы зерна должна быть, по крайней мере, меньшей, чем температура перехода сжатой давлением жидкости той же плотности, что и кристалл. Моделируя сверхтекучие свойства жидкости под давлением, можно найти температуру перехода при плотности  $n = 0,0287 \text{ \AA}^{-3}$ , равную 1,5(1) К. Это значение можно взять как верхний предел  $T_c$  границы зерна при давлении тающей смеси.

Чтобы проверить надежность полученных данных, тот же самый расчет при таких же низких температурах был повторен с заменой гелия на молекулярный параводород. В этом случае отдельные частицы имеют массу в половину массы атома гелия, в то время как потенциал взаимодействия приблизительно в 3 раза больше. Никаких доказательств сверхтекучести не наблюдалось в этом случае в согласии с экспериментальными результатами [239].

Суммируя данные о сверхтекучести границ зерен, можно сказать, что моделирование методом PIMC-WA границы зерна  $^4\text{He}$  в контакте с жидкостью при условиях существования фаз приводит к выводу, что такая система термодинамически устойчива относительно разделения на два кристаллита с трещиной между ними. Это теоретическое описание соответствует эксперименту Sasaki и др. [240] о наблюдении общих сверхтекучих границ зерен. Границы зерна с более высокой симметрией являются изоляторами. С другой стороны, границы зерен достаточно произвольной формы являются сверхтекучей жидкостью с типичными температурами перехода порядка 0,5 К.

Также на основе алгоритма PIMC-WA интересные данные о сжимаемости, сверхтекучих свойствах, а также по миграции вакансий и дислокаций в твердом гелии получены в работе [238].

Особенно интересен вопрос о сверхтекучих свойствах в твердой фазе гелия, так называемом сверхтвердом состоянии (англ. *supersolid*). Впервые микроскопический механизм сверхтекучего состояния твердой фазы был

предложен в работах [241] и [242], который основывался на том, что разреженный газ вакансий понижает энергию кристаллического гелия из-за квантово-механической делокализации вакансий. При низкой температуре вакансии испытывают бозе-эйнштейновскую конденсацию и переходят в состояние *supersolid*.

Что касается эксперимента то в [243] наблюдали неожиданное снижение периода осцилляции крутильного маятника в гелии при низких температурах. Так как период пропорционален среднему от квадрата момента инерции, причина сдвига периода связывалась с отделением *supersolid* от вращающегося массива твердого  $^4\text{He}$ .

С точки зрения эксперимента, никакого протекания массы сквозь твердую фазу до недавнего времени не было обнаружено. Можно только предположить, что суперпоток проявляется в особенностях поведения кривой плавления и считать, что он реализуется благодаря каналам жидкости, формирующихся на стенках сосуда вдоль линий контакта с границей зерна.

В рамках алгоритма PIMC-WA с помощью фейнмановской формулировки квантовой механики через интегралы по траекториям в четырехмерном пространстве координата — мнимое время можно поставить в соответствие систему фейнмановских мировых линий и точную топографию состояний  $^4\text{He}$  и рассчитать их численно. Энергетическую щель для вакансии и промежуточные возбужденные состояния можно тогда получить из экспоненциального спада в мнимом времени одночастичной функции Грина системы [244].

После того, как попытки обнаружить *supersolid* в  $^4\text{He}$  экспериментально потерпели неудачу, было предположено, что метастабильная сверхтекучесть твердого состояния может сформироваться в кристаллах, испытывающих декомпрессию ниже их плотности плавления  $n_m = 0,0287 \text{ \AA}^{-3}$  (для сравнения, плотность замерзания равна  $n_f = 0,0261 \text{ \AA}^{-3}$ ). Эту идею оказалось невозможно реализовать экспериментально, и теперь можно понять, почему это неверно, из данных численного расчета МК. На рис. 12.57 показана зависимость от плотности вакационной и междуузельной щелей. Данные экстраполируются к низким плотностям  $n < n_m$  с использованием практически линейной зависимости плотности. Метастабильные гексагональные кристаллы остаются изоляторами вплоть до значения плотности жидкой фазы. Маловероятно, что твердая структура будет долгое время существовать при плотностях, равных плотности жидкости, а фаза *supersolid* образуется при плотности  $n_c = 0,0025 \text{ \AA}^{-3}$ . Гидростатическое сжатие, необходимое для достижения такой плотности, составляет около  $\left(\frac{n_m}{n_c} - 1\right)^{1/3} \approx 13,5 \%$ . Если учесть сжимаемость твердого состояния при таянии [245], то можно оценить, что необходимо приложить давление около 25 бар.

Метастабильность супертвердой фазы зависит от знака эффективного взаимодействия между вакансиями. Газ вакансий с притяжением коллапсирует к более низкой по плотности жидкой фазе. Чтобы определить знак и силу взаимодействия между вакансиями, нужно знать их массу  $m^*$  и парную корреляционную функцию  $\nu(r)$ . В идеальном газе  $\nu(r)$  возрастает на коротких длинах в 2 раза относительно значения на пределе бесконечного расстояния. Соответственно, для отталкивающих (притягивающих) взаимодействий  $\nu(r)$

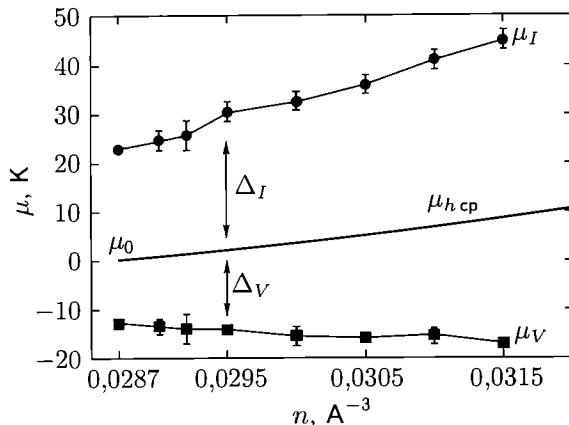


Рис. 12.57. Экстраполяция вакансационной ( $\Delta_V$ ) и междоузельной ( $\Delta_I$ ) энергетических щелей показывает, что плотность, соответствующая закрытию щели, есть плотность жидкой фазы. Данные, отмеченные точками — функция плотности для идеальной гексагональной решетки — взяты из [244];  $\mu_V$  и  $\mu_I$  обозначают пороговый химический потенциал для допирования системы вакансиями и междоузлями соответственно

подавляется (возрастает) относительно поведения в идеальном газе. Если притягивающее взаимодействие настолько велико, что вакансии фактически формируют связанное состояние, тогда  $\nu(r)$  растет экспоненциально, и пространственный спад корреляционной функции может быть использован для определения энергии связи из соотношения  $\nu(r) \propto \exp(-2\sqrt{m^*E_b}r)$ .

На рис. 12.58 показаны данные для дисперсионного соотношения для вакансии. Из сравнения с приближением сильной связи получены значения амплитуд туннелирования  $t_z = 0,45(5)\text{К}$  и  $t_\perp = 0,50(5)\text{К}$ , эффективных масс  $m_z^* = 0,45(5)$  и  $m_\perp^* = 0,42(5)$  в единицах чистой массы  ${}^4\text{He}$ . Эффективная масса оказалась равной приблизительно половине массы атома  ${}^4\text{He}$  и почти изотропной.

На рис. 12.59 показана функция корреляции между вакансиями, экспоненциально затухающая с расстоянием. Это доказывает, что взаимодействие между вакансиями является притягивающим и достаточно большим, чтобы сформировать связанное состояние. Из экспоненциальной аппроксимации можно оценить энергию связи  $E_b = 1,4(5)\text{ К}$ . Таким образом, можно заключить, что гексагональная структура кинетически нестабильна при  $n = n_c$  относительно коллапса в жидкое состояние, а *supersolid* в декомпрессионном кристалле невозможен в однородном случае.

В последнее время наблюдается накопление экспериментальных данных по достаточно неожиданным свойствам твердого  ${}^4\text{He}$  при низкой температуре, включая массовый суперпоток через кристалл. Наблюдаемая зависимость от начальной стадии изготовления образца, условий роста, отжига и охлажддающих процедур указывают на важность дефектов структуры для понимания квантовой природы твердого состояния. Кроме описанных выше свойств, в [238] была исследована сверхтекучесть вдоль границ дефектов кристаллической структуры, были определены критические значения напряжения, которое может дестабилизировать структуру гексагонального  ${}^4\text{He}$ , закрывая

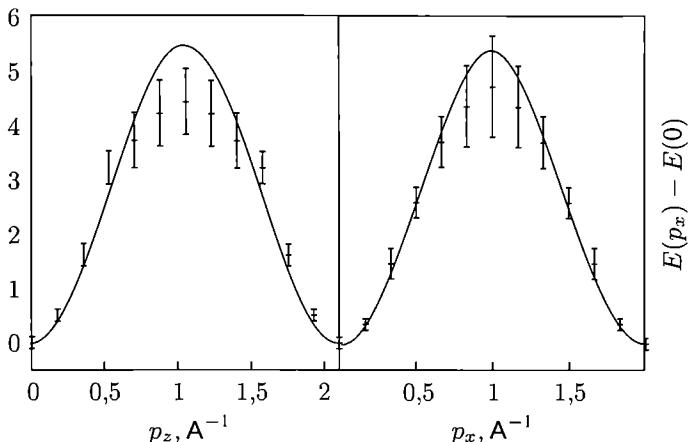


Рис. 12.58. Дисперсионное соотношение для вакансии в низшей зоне вдоль главных кристаллографических направлений решетки  $p_z$  и  $p_x$  для системы  $12 \times 12 \times 12$  частиц при плотности  $n = 0,0292 \text{ \AA}^{-3}$  и температуре  $T = 0,2 \text{ К}$ . Для гексагональной решетки с двумя атомами в элементарной ячейке имеются две амплитуды перескока, одна в базовой плоскости ( $t_{\perp}$ ) и другая ( $t_z$ ) вдоль направления ГА. При низких температурах метод Монте Карло вычисляет только самую низкознергетичную ветвь дисперсионного соотношения

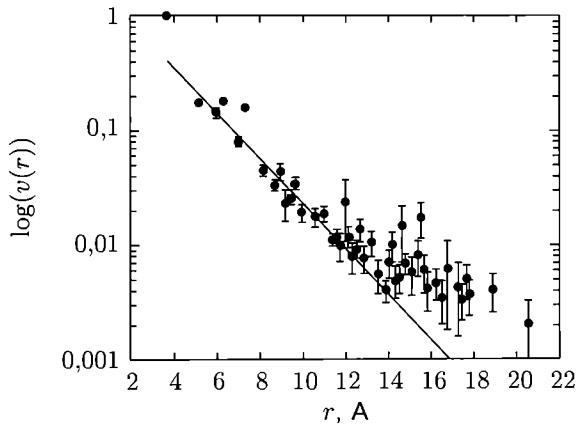


Рис. 12.59. Вероятность обнаружения двух вакансий на расстоянии  $r$  друг от друга. Начальный спад фитирован показательной функцией  $v(r) \propto \exp(-2\sqrt{m^*E_b}r)$  с  $E_b = 1,4 (5) \text{ К}$ . Моделирование выполнено для гексагонального кристалла с решеткой  $6 \times 6 \times 6$  и 214 атомами при плотности  $n = 0,0292 \text{ \AA}^{-3}$  и температуре  $T = 0,5 \text{ К}$ . На больших расстояниях вероятность  $v(r)$  выходит на плато из-за конечных температурных эффектов.

щель состояния изолятора, и найдено, что эти пороговые значения достаточно малы и могут быть превышены в корах дислокаций и границах зерен.

**12.2.2. Алгоритм РIMC-WA. Прямое суммирование диаграмм в континуальном представлении.** Представим схему несколько иного непрерывного по времени варианта алгоритма Сеперли [102, 103, 179], напрямую суммирующего ряды разложения матрицы плотности в представлении взаимодействия.

Рассмотрим для простоты случай системы бозе-частиц во внешнем поле в отсутствие межчастичного взаимодействия:

$$H = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \right) + \sum_i V(x_i). \quad (12.123)$$

Обезразмерим задачу: все расстояния будем измерять в боровских радиусах  $a_B$ , а энергию и температуру — в ридбергах:

$$x \equiv xa_B, \quad E \equiv \frac{E}{Ry}, \quad \beta \equiv \beta R, \quad a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad R = \frac{e^2}{2a_B}. \quad (12.124)$$

Обозначим свободный пропагатор как  $K(\mathbf{r}, \tau)$ , который в безразмерном виде представим следующим образом:

$$K(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau}} e^{-\mathbf{r}^2/4\tau}. \quad (12.125)$$

Напомним его основное свойство:

$$\int K(r_3 - r_2, \tau_3 - \tau_2) K(r_2 - r_1, \tau_2 - \tau_1) dr_2 = K(r_3 - r_1, \tau_3 - \tau_1). \quad (12.126)$$

**12.2.2.1. Диаграммы разложения матрицы плотности в ряд теории возмущений по степеням взаимодействия.** Будем считать шкалу мнимого времени и координатное пространство непрерывными и рассмотрим уже обсуждаемое ранее разложение матрицы плотности:

$$\begin{aligned} \rho(x, x', \beta) &= \int \dots \int \exp \left[ - \int_0^\beta \left( \frac{\dot{x}^2}{2} \right) d\tau \right] \times \\ &\times \left[ 1 - \int_0^\beta V(x) d\tau + \frac{1}{2!} \left( \int_0^\beta V(x) d\tau \right)^2 - \frac{1}{3!} \left( \int_0^\beta V(x) d\tau \right)^3 + \dots \right] \partial D = \\ &= \rho_0 - \int_0^\beta \int \exp \left[ \left[ - \int_0^\tau \left( \frac{\dot{x}^2}{2} \right) d\tau \right] V(x) \exp \left[ - \int_\tau^\beta d\tau \left( \frac{\dot{x}^2}{2} \right) \right] \right] d\tau dx + \dots = \\ &= \rho_0 - \int_0^\beta \int \int K(x - y, \tau_1) V(y) K(y - x, \beta - \tau_1) d\tau_1 dy + \\ &+ \frac{1}{2!} \int_0^\beta \int \int d\tau_1 d\tau_2 \int \int K(x - y, \tau_1) V(y) K(y - z, \tau_2 - \tau_1) \times \\ &\times V(z) K(z - x, \beta - \tau_2) dy dz + \dots = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \rho_0 + \int_0^\beta \int K(x-y, \tau_1) V(y) K(y-x, \beta-\tau_1) d\tau_1 dy + \\
 &+ \int_0^\beta d\tau_2 \int dy \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \int V(z) K(y-z, \tau_2-\tau_1) V(y) K(z-y, \tau_1) dz + \dots \quad (12.127)
 \end{aligned}$$

Данное разложение является асимптотически точным выражением.

Дальше это разложение удобно рассматривать в виде следующих диаграмм. Каждый член разложения представляет собой петлю (кольцо), на которое нанизано некоторое количество узлов, соответствующее степени взаимодействия в аналитическом выражении. Петля символизирует шкалу мнимого времени длиной  $\beta = 1/T$ . Каждый узел на кольце характеризуется временем и координатой.

Нулевой член разложения  $\rho_0$  является константой и представляет собой просто замкнутое кольцо без узлов (рис. 12.60). Первый член разложения, пропорциональный первой степени взаимодействия ( $\sim \int_0^\beta V(x) d\tau$ ), будет соответствовать одному узлу (на языке диаграмм Фейнмана этот узел называется *вершиной*) на кольце (рис. 12.61); второй член ( $\sim \frac{1}{2!} \left( \int_0^\beta V(x) d\tau \right)^2$ ) — двум узлам (рис. 12.62) и т. д.

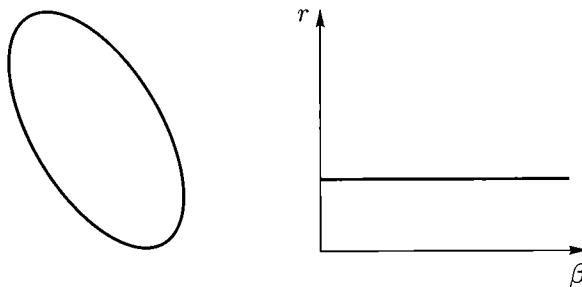


Рис. 12.60. Нулевой член разложения матрицы плотности

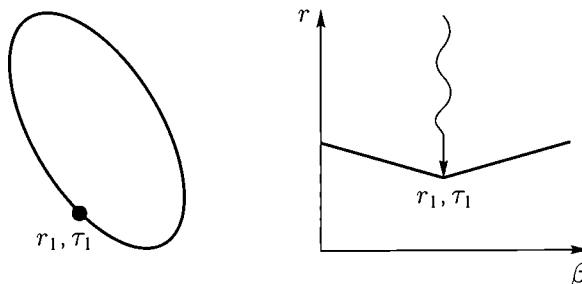


Рис. 12.61. Первый член разложения матрицы плотности

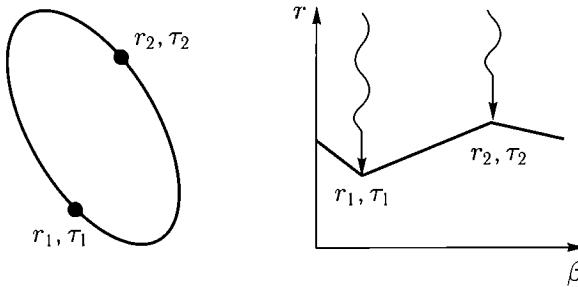


Рис. 12.62. Второй член разложения матрицы плотности

Фактически из (12.127) следует, что частица движется по траектории (кольцу) свободно (с пропагатором  $K$ ) от одного «узла» взаимодействия до другого. Для удобства вычислений положим далее

$$-V(x) > 0. \quad (12.128)$$

**12.2.2.2. Процедуры МК для обновления диаграмм.** Рассмотрим простейший вариант алгоритма: будем полагать число частиц постоянным, а все траектории — замкнутыми. В принципе, обобщение на случай недиагональных конфигураций также возможно.

Обновление траекторий в простейшем варианте алгоритма сводится к процедуре рождения и уничтожения узлов. В качестве начальной конфигурации можно выбрать совокупность петель с произвольным числом узлов, каждая петля будет соответствовать траектории частицы.

Рассмотрим ситуацию, когда одна из петель имеет два узла  $(r_1, \tau_1)$  и  $(r_3, \tau_3)$  (рис. 12.63). Можно показать, что вероятность  $W_{2 \rightarrow 3}$  перехода в новое состояние с дополнительным узлом  $(r_2, \tau_2)$  между исходными двумя будет равна

$$W_{2 \rightarrow 3} = \frac{\rho_3}{\rho_2} = \frac{\int_{\tau_1}^{\tau_3} d\tau_2 \int V(r_2) K(r_2 - r_1, \tau_2 - \tau_1) K(r_3 - r_2, \tau_3 - \tau_2) dr_2}{K(r_3 - r_1, \tau_3 - \tau_1)}. \quad (12.129)$$

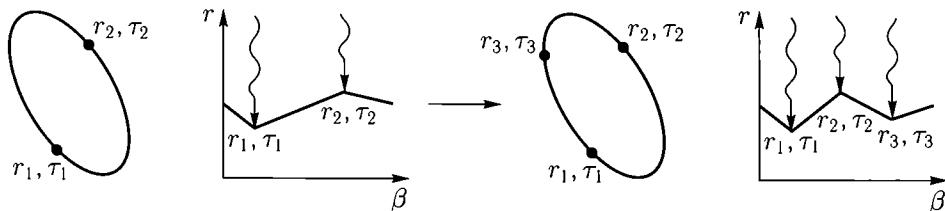


Рис. 12.63. Переход из конфигурации с двумя узлами в конфигурацию с тремя узлами

Выражение для вероятности рождения дополнительного узла (12.129) не меняется при любом исходном числе узлов на петле.

Согласно алгоритму Метрополиса, вероятности прямой и обратной процедур при изменении полного числа узлов  $n$  для всех петель на  $n \pm 1$  равна

$$\begin{aligned} P_{n \rightarrow n+1} &= \min \left( 1, \frac{n\rho_{n+1}}{(n+1)\rho_n} \right), \\ P_{n \rightarrow n-1} &= \min \left( 1, \frac{(n-1)\rho_{n-1}}{n\rho_n} \right). \end{aligned} \quad (12.130)$$

В выражениях (12.130) учтены вероятности обращения к узлам для сохранения детального баланса.

Если согласно (12.130) реализуется процедура появления нового узла, то координаты нового узла  $(r_2, \tau_2)$  при фиксированных точках  $(r_1, \tau_1)$  и  $(r_3, \tau_3)$  выбираются согласно плотности вероятности

$$P(r_2, \tau_2) = \frac{V(r_2)K(r_2 - r_1, \tau_2 - \tau_1)K(r_3 - r_2, \tau_3 - \tau_2)}{K(r_3 - r_1, \tau_3 - \tau_1)}. \quad (12.131)$$

Алгоритм допускает учет статистики частиц. Предположим, что система состоит из четырех бозе-частиц. Без учета тождественности частиц система представляла бы собой четыре кольца, вложенные друг в друга (рис. 12.64). При учете тождественности частиц появляется ненулевая вероятность возникновения в системе колец, связанных друг с другом (рис. 12.65). Эта ситуация эквивалентна появлению ненулевых winding numbers в системе. Учет тождественности частиц приводит к тому, что теплоемкость системы из четырех невзаимодействующих бозе-частиц падает в четыре раза по сравнению с теплоемкостью четырех свободных классических частиц, что полностью подтверждается расчетами.

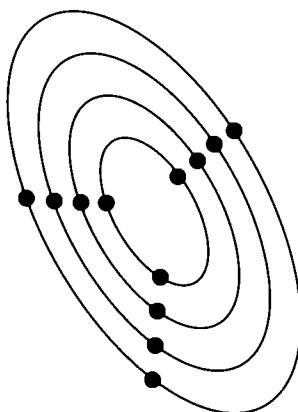


Рис. 12.64. Система из четырех частиц без учета тождественности

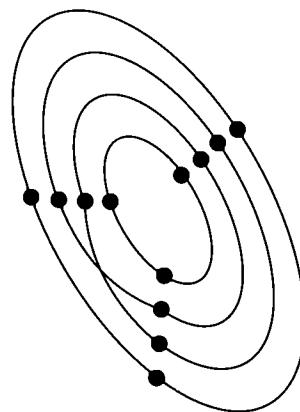


Рис. 12.65. Система из четырех частиц с учетом тождественности. В системе могут появляться связи между кольцами

**12.2.2.3. Расчет физических величин.** Полная кинетическая энергия системы (в безразмерном виде) рассчитывается по формуле

$$K = \sum_{i,j} \frac{1}{4} \frac{(r_i - r_j)^2}{(\tau_i - \tau_j)^2}, \quad (12.132)$$

как сумма по всем свободным пропагаторам (линиям) в конфигурации.

Потенциальная энергия системы:

$$U = -\frac{n}{\beta}, \quad (12.133)$$

где  $n$  — сумма всех узлов в конфигурации.

В табл. 12.1 показаны результаты тестовых расчетов алгоритма для электрона в трехмерном кулоновском потенциале и потенциале трехмерного осциллятора в сравнении с точными значениями.

Таблица 12.1. Результаты тестовых расчетов для алгоритма прямого суммирования диаграмм

Потенциал	Значение	Кинетическая энергия $Ry$	Потенциальная энергия $Ry$
Кулоновский	Точное	1	-2
	Расчетное	$0,998 \pm 0,027$	$-1,987 \pm 0,026$
Осцилляторный	Точное	1,5	1,5
	Расчетное	$1,495 \pm 0,004$	$1,502 \pm 0,001$

## 12.3. Детерминантный метод для фермионов в непрерывном времени

Для фермионной статистики практически только детерминантный подход [212] позволяет получать данные для недиагональных корреляторов и функции Грина, в рамках траекторных алгоритмов эта задача существенно сложнее из-за проблемы знака, возникающей из-за антисимметрии волновой функции. Представляется перспективным развить алгоритм, обладающий возможностями детерминантного подхода, в условиях непрерывной шкалы мнимого времени без погрешности разложения Троттера.

Такой подход, он называется также *CT-QMC* (*Continuous Time QMC*), был реализован в работах Рубцова и соавторов (см., например, [86, 201, 202]).

Метод CT-QMC способен работать с непрерывным мнимым временем. Сложность вычислений в зависимости от количества частиц растет как  $N^2$  (аналогично оптимизированному варианту дискретного детерминантного метода), при этом не нужно перебирать дополнительные спиновые переменные, так как отсутствует преобразование Стратоновича. Для борьбы с проблемой знака используется сдвиг по взаимодействию. Метод позволяет работать практически с любым типом взаимодействия, включая нелокальное (возникающее,

например в моделях, описывающих диссипацию при помощи запаздывающего потенциала).

Метод CT-QMC представляется наиболее эффективным для моделирования ферми-систем и действительно демонстрирует возможность значительно ослабить проблему знака. Заметим, что близкий по сути подход для фермионной системы с притяжением был представлен также в [203].

**12.3.1. Описание метода.** Рассмотрим фермионный гамильтониан достаточно общего вида

$$H = H_0 + V, \quad H_0 = \sum_{ii'ss'} t_{ii'ss'} a_{i's}^+ a_{is};$$

$$V = \sum_{\substack{i_1 i_2 i'_1 i'_2, \\ s_1 s_2 s'_1 s'_2 \\ s_1 s_2 s'_1 s'_2}} w_{i_1 i_2 i'_1 i'_2} a_{i'_1 s'_1}^+ a_{i_1 s_1} a_{i'_2 s'_2}^+ a_{i_2 s_2}, \quad (12.134)$$

где  $i, s$  — координаты и проекции спинов, соответственно, причем координата может быть и непрерывной. Статистическая сумма системы при этом имеет вид

$$Z = \text{Tr } Te^{-S},$$

$$S = \int \int t_{rr'} a_{r'}^+ a_r dr dr' + \int \int \int \int w_{r_1 r_2 r'_1 r'_2} a_{r'_1}^+ a_{r_1} a_{r'_2}^+ a_{r_2} dr_1 dr'_1 dr_2 dr'_2, \quad (12.135)$$

где степени свободы  $r = \{\tau, s, i\}$  представляют собой совокупность мнимого времени, координаты и проекции спина;  $T$  — оператор упорядочения по временной шкале. Очевидно тогда, что

$$\int dr \equiv \sum_i \sum_s \int_0^\beta d\tau.$$

Гамильтониан системы, и, соответственно, действие (12.135) можно разделить на невзаимодействующую часть  $S_0$  и взаимодействие  $W$ :

$$S = S_0 + W,$$

$$S_0 = \int \int t_{rr'} a_{r'}^+ a_r dr dr',$$

$$W = \int \int \int \int w_{r_1 r_2 r'_1 r'_2} a_{r'_1}^+ a_{r_1} a_{r'_2}^+ a_{r_2} dr_1 dr'_1 dr_2 dr'_2. \quad (12.136)$$

Далее используется представление взаимодействия для разложения статистического оператора по взаимодействию  $W$ . Оно представимо в виде выражения: [86, 201]

$$Z = \sum_{k=0}^{\infty} \int dr_1 \int dr'_1 \dots \int dr_{2k} \int \Omega_k(r_1, r'_1, \dots, r_{2k}, r'_{2k}) dr'_{2k}, \quad (12.137)$$

$$\Omega_k = Z_0 \frac{(-1)^k}{k!} w_{r_1 r_2 r'_1 r'_2} \dots w_{r_{2k-1} r_{2k} r'_{2k-1} r'_{2k}} D_{r_1 r_2 \dots r_{2k} r'_1 r'_2 \dots r'_{2k}},$$

где

$$D_{r_1 \dots r_{2k} r'_1 \dots r'_{2k}} = \left\langle T a_{r'_1}^+ a_{r_1} \dots a_{r'_{2k}}^+ a_{r_{2k}} \right\rangle, \quad (12.138)$$

$$Z_0 = \text{Tr } Te^{-S_0};$$

$r_i$  задает совокупность координат частицы  $i$  до изменения состояния;  $r'_i$  — после изменения состояния под действием в общем случае недиагонального взаимодействия  $w$  (этот процесс назовем перескоком, или *кинком*, как в методе CTWL). Индекс  $k$  означает степень возмущения (степень диаграммы).

Для расчета статистической суммы требуется перебрать координаты и времена кинков. Так как слагаемое  $H_0$  (соответствующее действию  $S_0$ ) является одиночастичной билинейной формой по операторам рождения и уничтожения, к формуле (12.138) для  $D$  применима теорема Вика [174, 204, 205], расщепляющая произведение операторов на сумму произведений одиночастичных сомножителей, представимых в виде детерминантов в базисе чисел заполнения. Например, для четырехфермионного случая [174]:

$$\langle a_{i_1}^+ a_{i_2} a_{i_3}^+ a_{i_4} \rangle = \langle a_{i_1}^+ a_{i_2} \rangle \langle a_{i_3}^+ a_{i_4} \rangle + \langle a_{i_1}^+ a_{i_4} \rangle \langle a_{i_2}^+ a_{i_3} \rangle. \quad (12.139)$$

Доказательство (12.139) в общем случае дано в приложении 7 [204], конечное соотношение выражается через определитель от одиночастичных операторов. В итоге  $D_{r_1 \dots r_{2k} r'_1 \dots r'_{2k}}$  является детерминантом размерности  $2k \times 2k$ :

$$D_{r_1 \dots r_{2k} r'_1 \dots r'_{2k}} = \det \left( g_{r_i r'_j} \right), \quad i, j = 1, \dots, 2k, \quad (12.140)$$

где матрица  $g$  составлена из невозмущенных функций Грина

$$g_{rr'} = \langle T a_{r'}^+ a_r \rangle. \quad (12.141)$$

Сразу отметим, что для борьбы с проблемой знака член гамильтониана, описывающий взаимодействие, берется со сдвигом операторов в модифицированном виде:

$$w_{r_1 r_2 r'_1 r'_2} a_{r'_1}^+ a_{r_1} a_{r'_2}^+ a_{r_2} \Rightarrow w_{r_1 r_2 r'_1 r'_2} \left( a_{r'_1}^+ a_{r_1} - \alpha_{r_1 r'_1} \right) \left( a_{r'_2}^+ a_{r_2} - \alpha_{r_2 r'_2} \right), \quad (12.142)$$

где значения  $\alpha$  зависят от типа взаимодействия. В этом случае формулы (12.138) и (12.140) принимают следующий вид:

$$D_{r_1 \dots r_{2k} r'_1 \dots r'_{2k}} = \left\langle T \left( a_{r'_1}^+ a_{r_1} - \alpha_{r_1 r'_1} \right) \dots \left( a_{r'_{2k}}^+ a_{r_{2k}} - \alpha_{r_{2k} r'_{2k}} \right) \right\rangle, \quad (12.143)$$

$$D_{r_1 \dots r_{2k} r'_1 \dots r'_{2k}} = \det \left( g_{r_i r'_j} - \delta(i-j) \alpha_{r_i r'_j} \right), \quad (12.144)$$

и все определители положительные.

**12.3.2. Обновление конфигураций.** В процессе реализации МК-симуляции постоянно меняется степень разложения  $k$ , флюкутируя около среднего значения  $\bar{k} \sim \langle W \rangle$  (по оценке [86]). Для обновления конфигураций разработаны прямые и обратные процедуры, так называемые процедуры  $k \pm 1$  и  $k \pm 2$ , которые добавляют или убирают один или два кинка (степени взаимодействия

в разложении (12.137)) в конфигурации. На рис. 12.66 условно показаны эти процессы.

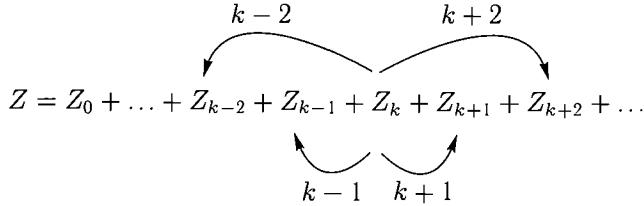


Рис. 12.66. Процедуры  $k \pm 1$  и  $k \pm 2$

Отношение вероятности принять новую конфигурацию к вероятности отвергнуть новую конфигурацию с учетом процесса обращения к кинку ( $p_a = 1/k$ ) задается отношением

$$\frac{p_{K' \rightarrow K}}{p_{K \rightarrow K'}} = \left| \frac{\Omega_K}{\Omega_{K'}} \right| (k+1) p(r_{2k+1}, r'_{2k+1}, r_{2k+2}, r'_{2k+2}), \quad (12.145)$$

где  $p(r_{2k+1}, r'_{2k+1}, r_{2k+2}, r'_{2k+2})$  — вероятность выбрать координаты нового кинка в точках  $r_{2k+1}, r'_{2k+1}, r_{2k+2}, r'_{2k+2}$ . В принципе, эту вероятность можно выбрать любой, вплоть до постоянной величины, отвечающей равномерному распределению. Для большей эффективности алгоритма можно отразить вклад амплитуд взаимодействия в разложении, и выбрать

$$p = \frac{w_{r_{2k+1} r_{2k+2} r'_{2k+1} r'_{2k+2}}}{\|w\|}; \quad (12.146)$$

$$\|w\| = \int \int \int |w_{rr'R'}| dr dR dr' dR',$$

тогда в (12.145) остаются только определители  $D$ , и окончательно вероятность в алгоритме Метрополиса имеет вид

$$P_{K \rightarrow K'} = \min \left( 1, \frac{\|w\|}{k+1} \left| \frac{D_{r_1 \dots r_{2k+2} r'_1 \dots r'_{2k+2}}}{D_{r_1 \dots r_{2k} r'_1 \dots r'_{2k}}} \right| \right). \quad (12.147)$$

Обратная процедура  $P_{K' \rightarrow K}$ , соответственно, будет использовать инверсию соотношения (12.147).

При добавлении одного кинка матрица изменяет размер:  $k \times k \Rightarrow (k+1) \times (k+1)$ . Быстрый расчет определителя за  $k^2$  операций возможен при помощи стандартного численного алгоритма Шермана–Морриса, подробно описанного в работах [86] и [206].

**12.3.3. Сдвиг взаимодействия для уменьшения проблемы знака.** Если гамильтониан сохраняет полный спин в системе, то определитель  $D$  факторизуется в виде

$$D = D_\uparrow D_\downarrow, \quad (12.148)$$

где  $D_\sigma$  задается функциями Грина (12.144) для спина  $\sigma$ . Далее, если взаимодействие имеет вид  $Un_\uparrow n_\downarrow$ , как в модели Хаббарда, то константу сдвига следует выбрать в виде

$$\alpha_{ist\tau js'\tau'} = \alpha_s \delta_{\tau\tau'} \delta_{ij} \delta_{ss'}, \quad (12.149)$$

и для случая притяжения можно взять

$$\alpha_\uparrow = \alpha_\downarrow = \alpha, \quad (12.150)$$

где  $\alpha$  вещественно. Тогда

$$g_{\downarrow\downarrow} = g_{\uparrow\uparrow} \quad (12.151)$$

и

$$D_\uparrow = D_\downarrow. \quad (12.152)$$

В таком случае вес любой конфигурации будет положителен при любом  $\alpha$ . Конкретное значение  $\alpha$  выбирается, исходя из минимизации определителя (а тем самым средней силы взаимодействия и среднего количества кинков при моделировании, что позволяет улучшить время сходимости). В работе [86] рекомендуется значение

$$\alpha_\uparrow = \alpha_\downarrow \approx 0.5. \quad (12.153)$$

В случае отталкивающего взаимодействия преобразуем частицы в дырки для одной из проекций спина. Тогда получается

$$\alpha_\uparrow = 1 - \alpha_\downarrow = \alpha; \quad (12.154)$$

в работе [86] рекомендуются значения:

$$\begin{aligned} \alpha_\uparrow &= 1 + \delta, \\ \alpha_\downarrow &= -\delta, \\ \delta &\ll 1. \end{aligned} \quad (12.155)$$

На рис. 12.67 представлены результаты тестирования алгоритма. Отметим, что проблема знака при этом снимается не полностью, а только подавляется.

Расчет функции Грина также производится по формуле (12.140):

$$\begin{aligned} G_{rr'} &\equiv \frac{1}{Z} \langle T a_r^+ a_r e^{-W} \rangle = \\ &= \sum_k \int dr_1 \int dr'_1 \dots \int g_{rr'}(r_1, r'_1, \dots, r'_{2k}) \Omega_k(r_1, r'_1, \dots, r'_{2k}) dr'_{2k}, \end{aligned} \quad (12.156)$$

где

$$\begin{aligned} g_{rr'}(r_1, r'_1, \dots, r'_{2k}) &= \\ &= \frac{1}{D_{r_1 \dots r_{2k} r'_1 \dots r'_{2k}}} \left\langle T a_{r'}^+ a_r \left( a_{r'_1}^+ a_{r_1} - \alpha_{r_1 r'_1} \right) \times \dots \times \left( a_{r'_{2k}}^+ a_{r_{2k}} - \alpha_{r_{2k} r'_{2k}} \right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (12.157)$$

На рис. 12.68 показаны некоторые результаты для функции Грина из [86].

Полученные функции Грина можно использовать для восстановления плотности состояний, как рассматривалось ранее для дискретного варианта; ре-

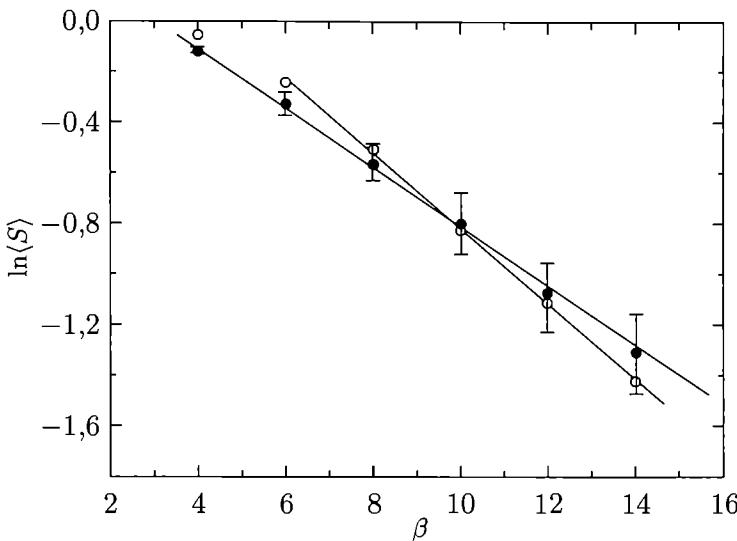


Рис. 12.67. Зависимость среднего знака от температуры из [86] для двумерной модели Хаббарда  $2 \times 2$  с тремя электронами в системе. Параметры модели:  $U = 4$ ,  $t = 1$ . Сплошными символами показаны результаты, полученные при помощи метода CT-QMC; открытыми — при помощи квантового алгоритма МК из работы [95]. Метод CT-QMC становится более эффективным при понижении температуры

зультаты расчета показаны на рис. 12.69. Полученная точность оказывается достаточной для определения спектральных функций (см. [207]).

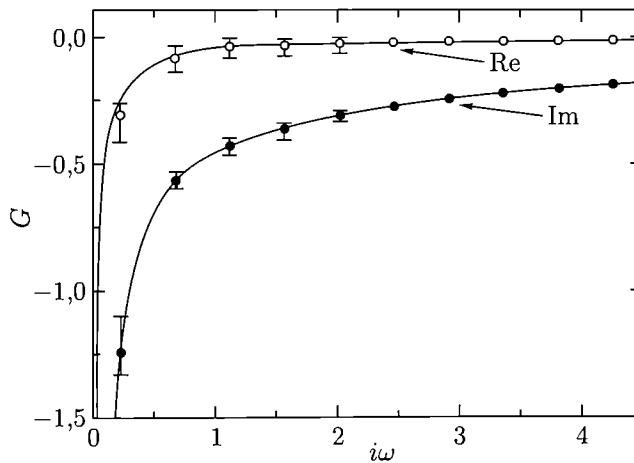


Рис. 12.68. Действительная и мнимая части функции Грина из [86] для двумерной модели Хаббарда  $2 \times 2$  с тремя электронами в системе (круги). Параметры модели:  $U = 4$ ,  $t = 1$ ,  $\beta = 14$ . Линиями обозначено решение, полученное методом точной диагонализации

В заключение заметим, что существует детерминантная схема в непрерывном времени, использующая вариант преобразования Хаббарда–Стратоновича [208].

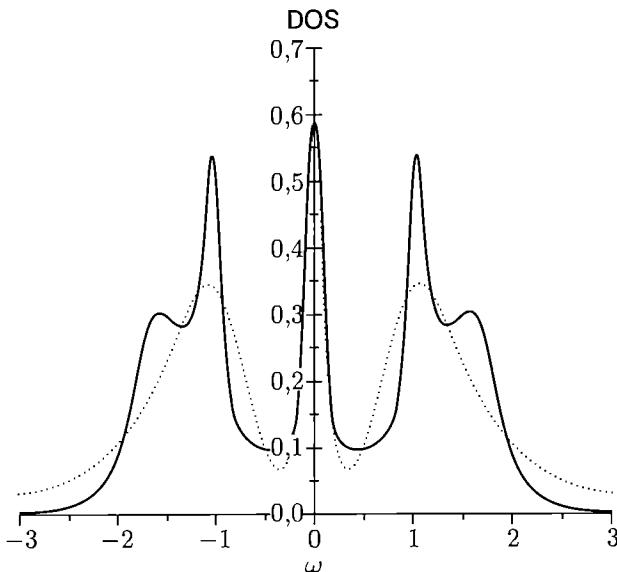


Рис. 12.69. Восстановленная плотность состояний для модели Хаббарда на решетке Бете из [208] (сплошная линия). Точками показан результат, полученный методом максимальной энтропии

## 12.4. Редуцированный детерминантный метод для фермионов

Рассмотрим еще один вариант детерминантного алгоритма в непрерывном времени, представленного в работе [81] в применении к фермионной модели Хаббарда в рамках простой схемы диаграммного метода Монте-Карло, суммирующего фейнмановские диаграммы для фермионных пропагаторов аналогично схеме, изложенной в п. 12.3 [207, 246].

Как и в схеме из [207, 246], в данном подходе вес диаграммы есть квадрат детерминанта, состоящего из фермионных пропагаторов при конечной температуре. Будет показано, как можно рассчитать отношение детерминантов для локальных обновлений, используя редуцированные матрицы, и продемонстрировано преимущество предложенной схемы.

**12.4.1. Модель и метод.** Рассмотрим фермионную модель на решетке, описываемую гамильтонианом Хаббарда  $H = H_0 + H_1$ :

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma}, \\ H_1 &= U \sum_x n_{x\uparrow} n_{x\downarrow}, \end{aligned} \tag{12.158}$$

где  $c_{\mathbf{x}\sigma}^+$  — оператор рождения фермиона,  $n_{\mathbf{x}\sigma} = c_{\mathbf{x}\sigma}^+ c_{\mathbf{x}\sigma}$ ,  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  — спиновый индекс,  $\mathbf{x}$  пробегает  $L^D$  точек простой кубической решетки,  $\mathbf{k}$  пробегает по соответствующей зоне Бриллюэна,  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{\alpha=1}^D \cos(k_{\alpha}a)$  — закон дисперсии в модели сильной связи,  $\mu$  — химический потенциал. Для определенности

и проведения числовых тестов, рассмотрим двумерную ( $D = 2$ ) пространственную решетку с периодическими граничными условиями. Будем отсчитывать энергию и линейные масштабы в единицах амплитуды перескока  $t$  и постоянной решетки  $a$  соответственно.

Следуя работам [207, 246], запишем статистический оператор в представлении взаимодействия:

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} T_\tau \exp \left\{ - \int_0^\beta H_1(\tau) d\tau \right\}, \quad (12.159)$$

где  $H_1(\tau) = e^{H_0\tau} H_1 e^{-H_0\tau}$ ,  $T_\tau$  — оператор упорядочения по времени. Разлагая (12.159) по степеням  $H_1$ , имеем

$$\begin{aligned} Z = \sum_{p=0}^{\infty} (-U)^p & \sum_{x_1 \dots x_p} \int_{\tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_p < \beta} \left( \prod_{i=1}^p d\tau_i \right) \times \\ & \times \text{Tr} \left[ e^{-\beta H_0} \prod_{i=1}^p c_\uparrow^+ (x_i \tau_i) c_\uparrow (x_i \tau_i) c_\downarrow^+ (x_i \tau_i) c_\downarrow (x_i \tau_i) \right]. \end{aligned} \quad (12.160)$$

Это разложение статистической суммы приводит к стандартным феймановским диаграммам. Графически каждый член разложения является совокупностью вершин с четырьмя связями-линиями: двумя входящими для двух проекций спина, вверх и вниз, и двумя выходящими также для двух проекций спина, которые соединяют между собой вершины. Каждая линия отождествляется с фермионным пропагатором в мнимом времени  $G_\sigma(x_i - x_j, \tau_i - \tau_j; \mu, \beta) = \text{Tr} [T_\tau e^{-\beta H_0} c_\sigma(x_i \tau_i) c_\sigma^+(x_j \tau_j)]$ .

Прямое суммирование диаграмм с помощью процедуры Монте-Карло невозможно из-за проблемы знака. Однако, если для данной конфигурации  $p$  вершин  $S_p = \{(x_j, \tau_j), j = 1, \dots, p\}$  просуммировать по всем  $(p!)^2$  способам соединения их пропагаторами, то результат может быть записан как произведение двух детерминантов, одного для спина вверх и другого для спина вниз (см., например, [204]). Дифференциальные веса вершинных конфигураций (или вершинных диаграмм) тогда будут равны

$$d\mathcal{P}(S_p) = (-U)^p \det \mathbf{A}^\uparrow(S_p) \det \mathbf{A}^\downarrow(S_p) \prod_{i=1}^p d\tau_i, \quad (12.161)$$

где  $\mathbf{A}^\sigma(S_p)$  — матрицы размера  $p \times p$  с элементами  $A_{ij}^\sigma = G_\sigma(x_i - x_j, \tau_i - \tau_j)$ . Для равного числа частиц со спином вверх и спином вниз  $\det \mathbf{A}^\uparrow \det \mathbf{A}^\downarrow = (\det \mathbf{A})^2$ , и при отрицательном  $U$  вес вершинной диаграммы всегда положителен (при половинном заполнении  $n_\uparrow + n_\downarrow = 1$ , знак  $U$  можно изменить, переходя в дырочное представление для одной из проекций спина, и таким образом эту схему можно также использовать и в модели Хаббарда, описывающей случай отталкивания).

Расчет с помощью метода Монте-Карло в конфигурационном пространстве  $(p, S_p)$  может быть выполнен в рамках стандартной детерминантной схемы

Монте-Карло (см., например, [191, 246]), использующей только одну пару дополнительных обновлений  $\mathcal{D}$  и  $\mathcal{C}$ : в случае  $\mathcal{D}$  случайным образом выбирается одна из вершин и делается попытка удалить ее из конфигурации; в случае  $\mathcal{C}$  делается попытка вставить дополнительную вершину в некоторую случайно выбранную точку пространственно-временного ящика  $\beta \times L^D$ . Эти обновления уменьшают или увеличивают ранг матрицы  $\mathbf{A}$  на единицу. Отношение вероятностей принятия обновлений  $\mathcal{D}$  или  $\mathcal{C}$  тогда выражается через отношение двух детерминантов

$$R_p = \frac{\det \mathbf{A}(\mathcal{S}_{p+1})}{\det \mathbf{A}(\mathcal{S}_p)}, \quad (12.162)$$

где  $\mathcal{S}_{p+1} = \{\mathcal{S}_p, (\mathbf{x}_{p+1}, \tau_{p+1})\}$  (спиновый индекс опущен для краткости).

Узкое место этой простой схемы — в проблеме оценки  $R_p$ , когда  $p$  макроскопически велико. Типичное число вершин определяется числом частиц, силой взаимодействия, и значением обратной температуры,  $p \propto N\beta U$ . Идея редуцированной детерминантной схемы состоит в том, чтобы вычислить  $R_p$  намного быстрее (но, может быть, за счет точности), используя следующую догадку, имеющую скорее физическую, чем математическую аргументацию. Конфигурация вершин представляет собой последовательность виртуальных столкновений частицы в многочастичной системе, и вероятно, что локальные изменения в ее структуре зависят только от ближайшего окружения непосредственно вблизи области изменения в конфигурации за счет конкретного обновления. (Отметим, что идея использовать локальную природу фермион-бозонного взаимодействия применялась в [247], но не была обобщена на фермионный детерминант). Количественно определим норму  $\|\dots\|$ , или расстояние между вершинами в пространство–время (некоторые примеры выборов обсуждены ниже), и сконструируем усеченную (редуцированную) вершинную диаграмму  $\mathcal{S}_p^{(l)}$  такую, что все точки в  $\mathcal{S}_p^{(l)}$  удовлетворяют неравенству

$$\|(\mathbf{x}_j, \tau_j) - (\mathbf{x}_{p+1}, \tau_{p+1})\| \leq l. \quad (12.163)$$

Соответственно,  $\mathcal{S}_{p+1}^{(l)} = \{\mathcal{S}_p^{(l)}, (\mathbf{x}_{p+1}, \tau_{p+1})\}$ . Теперь можно использовать усеченную конфигурацию, чтобы приближенно вычислить отношение (12.162):

$$R_p^{(l)} = \frac{\det \mathbf{A}(\mathcal{S}_{p+1}^{(l)})}{\det \mathbf{A}(\mathcal{S}_p^{(l)})}. \quad (12.164)$$

Очевидно, что при  $l \rightarrow L$  восстанавливается точное отношение. Предположим, что  $R_p^{(l)}$  быстро сходится к  $R_p$ , и существует характерная длина (длина залечивания) в пространстве  $(\mathbf{x}, \tau)$ , характеризующая эту сходимость. В этом случае  $l$  можно рассматривать как микроскопический (не зависящий от размера системы) параметр, контролирующий точность и эффективность моделирования.

Надлежащий выбор нормы  $\|\dots\|$  зависит от параметров системы. В сильнокоррелированом случае естественный масштаб расстояния и времени определяется импульсом Ферми  $k_F$  и энергией Ферми  $\varepsilon_F$ . Тогда единственным

вариантом будет

$$\|(\mathbf{x}, \tau) - (\mathbf{x}', \tau')\| = \sqrt{k_F^2(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 + \varepsilon_F^2(\tau - \tau')^2}. \quad (12.165)$$

Геометрическим результатом ввода такой меры будет ряд вершин  $S_p^{(l)}$  в эллипсоиде пространство–время с центром в  $(\mathbf{x}_{p+1}, \tau_{p+1})$ . Для достаточно плотных систем мера  $\|(\mathbf{x}, \tau) - (\mathbf{x}', \tau')\| = \max\{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, |\tau - \tau'|\}$  также подходит, и представленные ниже данные для большой системы были получены с использованием этой меры. При температурах, сопоставимых  $\varepsilon_F$ , можно сосчитать все вершины в  $\tau$ -направлении и просто записать  $\|(\mathbf{x}, \tau) - (\mathbf{x}', \tau')\|_{cyl} = k_F |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$ . Соответствующая геометрическая фигура есть  $\beta$ -цилиндр. Точно так же в небольших системах можно рассмотреть редуцирование конфигураций только в направлении шкалы времени.

**12.4.2. Численные результаты.** Тесты для редуцированного детерминантного метода были проведены для модели Хаббарда с притяжением  $U = -4$ , параметрами  $\mu = -2$ ,  $\beta = 10$  и периодическими граничными условиями. Сначала моделировался малый кластер  $L^2 = 4^2$ , энергия основного состояния которого (из 10 частиц) была известна из данных метода точной диагонализации [248]. Так как пространственный размер кластера мал, редуцирование вершинных конфигураций проводилось только вдоль шкалы мнимого времени.

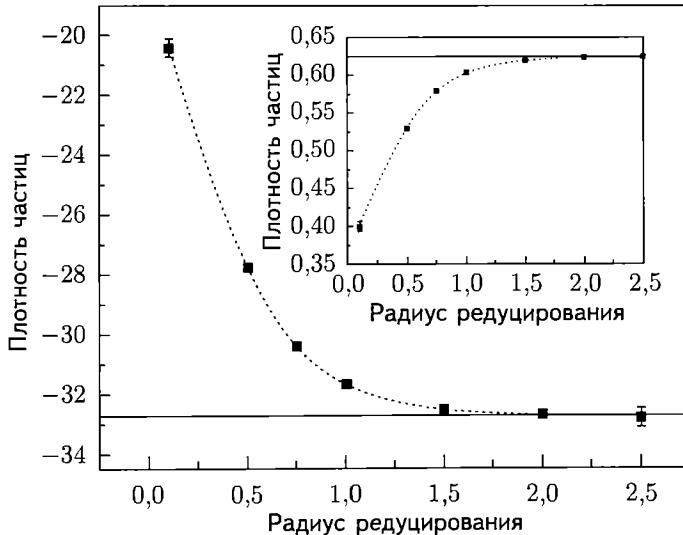


Рис. 12.70. Зависимость энергии и плотности частиц от степени редуцирования мнимого времени для модели Хаббарда для  $L = 4$ . Точки представляют данные Монте-Карло, сплошные линии — точные результаты диагонализации для 10 частиц (согласно [248]).

На рис. 12.70 показано, как результат для энергии сходится к точному значению. Подчеркнем, что на всех стадиях моделирования Монте-Карло не используется полный детерминант конфигурации, ранг которого приблизительно в 2,5 раза больше, чем типичные значения  $p$  для радиуса редуцирования 2.

На рис. 12.71 представлены данные для большой системы  $L^2 = 100^2$  с использованием редуцирования детерминанта и в пространстве, и во временном направлении согласно (12.165). Замечательно, что сходимость достигается примерно при тех же значениях радиуса редуцирования, как и для малой системы, что доказывает, что компьютерная трудоемкость элементарного обновления не является характеристикой, зависящей от степени масштабирования к макроскопическому пределу. Полезно рассмотреть, как сходимость данных для энергии коррелирует с типичными погрешностями, получающимися из-за приблизительного вычисления  $R_p$ . На рис. 12.72 показаны примеры зависимости величины  $R_p$  от радиуса редуцирования для случайно выбранных МК-конфигураций. Видно, что весьма большие сначала флуктуации в  $R_p$  статистически усредняются в конечном результате для энергии. На этот момент неизвестно ни о каком другом методе, позволяющем моделировать фермионные системы сопоставимого размера.

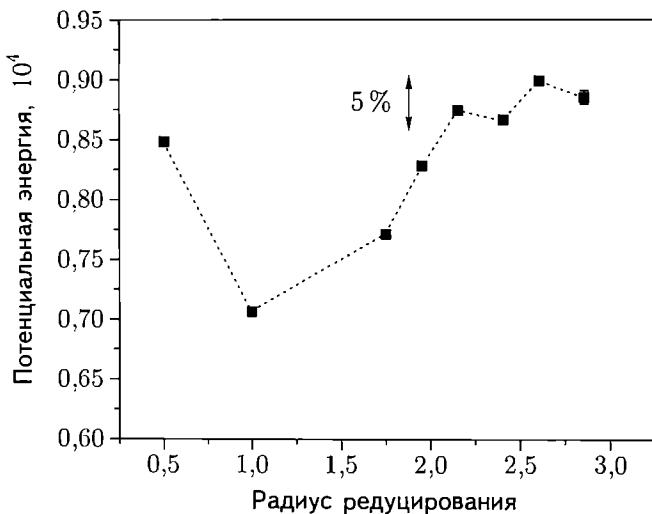


Рис. 12.71. Зависимость потенциальной энергии от радиуса редуцирования для модели Хаббарда для  $L = 100$

Кроме того, что данным методом можно точно воспроизвести тестовые данные по модели Хаббарда, следует отметить, что использование усеченных детерминантов для случайно отобранный вершинной конфигурации ускоряет вычисление  $R_p$ .

Отметим также, что представленный здесь метод был существенно обобщен позже в работе [249]. Одним из интересных результатов по применению данного подхода является анализ критической температуры с учетом кроссовера между режимом спаривания БКШ и Бозе–Эйнштейновской конденсации [250], который может быть реализован в двухкомпонентных ферми-системах, исследуемых в ультрахолодных газах щелочных металлах в магнитооптических ловушках.

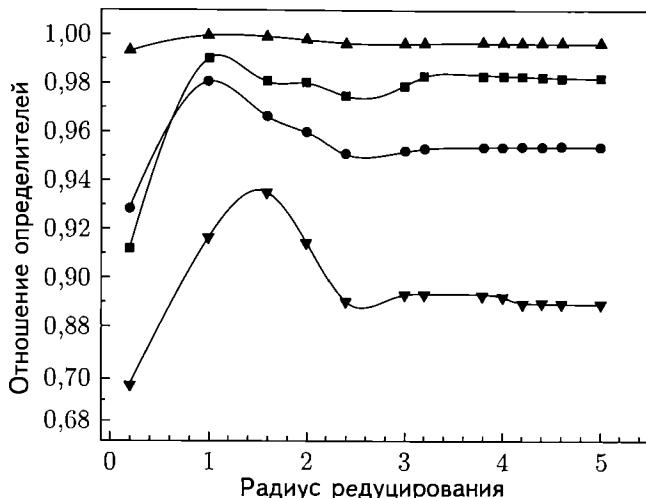


Рис. 12.72. Отношение определителей  $R_p^{(l)}$  как функция  $l$  для случайно отобранных МК-конфигураций для системы с  $L = 100$

## 12.5. Диаграммные методы Монте-Карло

Рассмотрим квантовые алгоритмы Монте-Карло, основанные на прямом численном асимптотическом суммировании разложения температурной (макубаровской) функции Грина во взаимодействующей системе с непрерывной шкалой мнимого времени. Эти алгоритмы очень удобны для спектральных задач, для расчета плотности состояний и дисперсии возбуждений. Будем придерживаться методов и подходов, развитых в работах [78, 79, 84, 191, 197, 234–236, 251] и существенно обобщенных в работах [252–254].

Представленные методы близки к рассмотренным ранее в этой книге траекторным методам в непрерывном времени, которые также можно называть диаграммными алгоритмами Монте-Карло. Однако именно к обсуждаемым ниже алгоритмам более подходит название «диаграммные», так как в них реализуется численное суммирование диаграмм, фигурирующих в стандартной диаграммной технике, описанной в известной книге Абрикосова, Горькова и Дзялошинского [188].

Диаграммный метод Монте-Карло (ДМК) будет рассмотрен на примере нескольких важных спектральных задач: оптический спектр полярона Фрелиха, классический экситон, диэлектрический экситон Рашибы–Пекара, спектр дырки в  $t$ - $J$ -модели, взаимодействующей с оптическими фононами.

**12.5.1. Введение.** Почему важны такие численные методы при исследовании сложных квантовых взаимодействующих систем? Дело в том, что задача исследования возбужденных состояний одной или нескольких частиц, которые сильно взаимодействуют с макроскопической системой, является одной из самых трудных задач теоретической физики. Первоначально задача о сильном взаимодействии частиц со средой возникла как проблема поляронов [255]. Однако, в зависимости от того, какой смысл вложен в понятия частица, среда

и взаимодействие, концепция поляронов описывает свойства широкого спектра разнообразных физических явлений [256]. В то время как для исследования основного, низшего по энергии, состояния уже существует огромное число теоретических методов, как аналитических (вариационный, теории возмущений и разложения по параметру сильной связи), так и численных (различные модификации метода ренормализационной группы), экспериментальная информация об основном состоянии носит косвенный, опосредованный характер. С другой стороны, прямую экспериментальную информацию о свойствах возбужденных состояний легко получить при измерении, например, оптической проводимости или спектров фотоэмиссии с угловым разрешением [257].

Таким образом, в теоретической спектроскопии систем, в которых существует сильное, или промежуточное по силе связи, взаимодействие частиц со средой, сложилась ситуация, когда достаточно надежное теоретическое описание возбужденных состояний имелось только в режиме слабой и сильной связи. С другой стороны, бурное развитие экспериментальных методов привело к открытию целого класса систем, которые впоследствии были названы сильнокоррелированными [258]. Хотя конкретные классы сильнокоррелированных систем (системы с нестабильной валентностью на основе лантаноидов [259], системы с колossalным магнетосопротивлением на основе марганца [258], квазидисперсионные Паерлсовские проводники на основе молибдена [260], высокотемпературные сверхпроводники на основе меди [261] и т. д.) имеют совершенно различные химические структуры и физические свойства, их объединяют три общих свойства. Во-первых, предложенная Л. Д. Ландау концепция квазичастиц, явившаяся в течение многих лет основным инструментом теоретической физики, в этих системах не работает. Причиной этого является значительное взаимодействие затравочных частиц, которое делает бессмысленным само понятие квазичастицы. Во-вторых, глобальные физические свойства сильнокоррелированных систем чрезвычайно чувствительны к ничтожным изменениям внешних условий, таких как давление, температура, освещенность поверхности и т. д. Это свойство неопровергнуто указывает на тот факт, что взаимодействия, определяющие фазовое состояние системы, являются промежуточными по силе связи, т. е. система находится так близко к точке раздела режимов слабой и сильной связи, что ничтожное изменение внешних условий или химического состава может глобально изменить ситуацию.

Таким образом, в то время как эксперимент (рассеяние нейтронов, оптическая спектроскопия, фотоэмиссия с угловым разрешением) сильнокоррелированных систем позволяет увидеть все больше и больше тонких деталей спектров, теоретическая физика не могла предоставить ни одного не содержащего приближений метода расчета спектров систем с промежуточной силой взаимодействия с макроскопической средой.

**12.5.2. Диаграммный метод Монте-Карло. Полярон Фрелиха.** Дальнейшее описание метода предполагает знание (или хотя бы представление) о диаграммной технике температурных (мацубаровских) функций Грина, детально представленной, например, в работах [38] и [188]. Спектральные свойства двухвременных функций Грина достаточно детально рассмотрены

в известных обзорах [232, 262]. Некоторые детали техники диаграммных разложений, необходимых для изложения, представлены ниже.

**12.5.2.1. Формулировка модели.** Наиболее популярная модель полярона описывается гамильтонианом Фрелиха, в котором электрон взаимодействует с бездисперсными оптическими фононами вследствие диэлектрической поляризации среды (постоянная Планка и масса электрона в этом разделе положены равными единице):

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph}, \quad (12.166)$$

$$H_e = \sum_k \frac{k^2}{2} a_k^+ a_k, \quad (12.167)$$

$$H_{ph} = \sum_q \omega_q b_q^+ b_q, \quad (12.168)$$

$$H_{e-ph} = \sum_{k,q} V(q) (b_q^+ - b_{-q}) a_{k-q}^+ a_k, \quad (12.169)$$

$$V(q) = i \left( 2\sqrt{2} \alpha \pi \right)^{1/2} \frac{1}{q}. \quad (12.170)$$

В уравнениях (12.166)–(12.170)  $a_k$  и  $b_q$  — операторы уничтожения электрона с импульсом  $k$  и фонона с импульсом  $q$ ;  $\alpha$  — безразмерная константа взаимодействия. Частота фононов  $\omega_q \equiv \omega_0$  не зависит от импульса  $q$  и положена в дальнейшем равной единице. Здесь для определенности рассматривается трехмерный случай, хотя предлагаемый метод может быть использован для любой размерности.

Далее предлагается схема генерации диаграмм Фейнмана для получения полной информации о структуре основного состояния систем со щелью в спектре элементарных возбуждений. Эта схема более общая, чем развитая ранее в работе [191]. Для этого в одном едином процессе ДМК генерируется  $N$ -фононный набор функций Грина (с  $2N$  внешними фононными пропагаторами) вместе с обычными (0-фононными) функциями Грина. Эта процедура позволяет получить прямой метод для расчета характеристик волновой функции и разработать эффективные эстиматоры для энергии, эффективной массы,  $Z$ -фактора, групповой скорости, распределения по импульсам в поляронном облаке и т. д. Кроме того, используется метод спектрального анализа, позволяющий извлечь функцию Лемана на действительных частотах из функции Грина на мнимом времени, представленный в п. 11.2.4. Этот метод дает наиболее полную информацию о спектре возбужденных состояний и позволяет исследовать системы, у которых нет щели в спектре элементарных возбуждений.

**12.5.2.2. Функции Грина и диаграммы.** Стандартная функция Грина полярона с импульсом  $k$  в представлении мнимого времени  $\tau$  имеет вид

$$G(k, \tau) = \langle \text{vac} | a_k(\tau) a_k^+(0) | \text{vac} \rangle, \quad \tau \geq 0, \quad (12.171)$$

где

$$a_{\mathbf{k}}(\tau) = e^{H\tau} a_{\mathbf{k}} e^{-H\tau}, \quad (12.172)$$

и символом  $|\text{vac}\rangle$  обозначено вакуумное состояние.

Физическая информация, которая содержится в функции Грина  $G(\mathbf{k}, \tau)$ , может быть извлечена из разложения

$$G(\mathbf{k}, \tau) = \sum_{\nu} |\langle \nu | a_{\mathbf{k}}^+ | \text{vac} \rangle|^2 e^{-(E_{\nu}(\mathbf{k}) - E_0)\tau}, \quad (12.173)$$

где  $\{|\nu\rangle\}$  — полный набор собственных состояний гамильтониана  $H$  в секторе данного импульса  $\mathbf{k}$ , т. е.

$$\begin{aligned} H |\nu(\mathbf{k})\rangle &= E_{\nu}(\mathbf{k}) |\nu(\mathbf{k})\rangle, \\ H |\text{vac}\rangle &= E_0 |\text{vac}\rangle. \end{aligned} \quad (12.174)$$

Так как в данной модели можно принять  $E_0 = 0$ , это значение в дальнейших выражениях опущено. Переписывая (12.163) в виде

$$G(\mathbf{k}, \tau) = \int_0^{\infty} L_{\mathbf{k}}(\omega) e^{-\omega\tau} d\omega; \quad (12.175)$$

$$L_{\mathbf{k}}(\omega) = \sum_{\nu} \delta(\omega - E_{\nu}(\mathbf{k})) |\langle \nu | a_{\mathbf{k}}^+ | \text{vac} \rangle|^2, \quad (12.176)$$

можно определить спектральную функцию  $L_{\mathbf{k}}(\omega)$ , которая имеет полюса (острые пики) на частотах, соответствующих стабильным (метастабильным) квазичастичным состояниям. Следовательно, если при данном импульсе  $k$  существует стабильное состояние полярона с энергией  $E(k)$ , спектральная функция имеет вид

$$L_{\mathbf{k}}(\omega) = Z^{(\mathbf{k})} \delta(\omega - E_{\nu}(\mathbf{k})) + \dots, \quad (12.177)$$

где

$$Z^{(\mathbf{k})} = |\langle \text{polaron}(\mathbf{k}) | \text{free electron}(\mathbf{k}) \rangle|^2. \quad (12.178)$$

Более того, если полярное состояние является основным, его энергия и  $Z$ -фактор «проектируются» асимптотическим поведением функции Грина на больших мнимых временах:

$$G(\mathbf{k}, \tau \gg \omega_0^{-1}) \rightarrow Z^{(\mathbf{k})} e^{-E(\mathbf{k})\tau}. \quad (12.179)$$

Вместе со стандартными функциями Грина полярона (12.171) имеет смысл ввести  $N$ -фононную функцию Грина:

$$G_N(\mathbf{k}, \tau; \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) =$$

$$= \left\langle \text{vac} | b_{\mathbf{q}_N}(\tau) \dots b_{\mathbf{q}_1}(\tau) a_{\mathbf{p}}(\tau) a_{\mathbf{p}}^+(0) b_{\mathbf{q}_1}^+(0) \dots b_{\mathbf{q}_N}^+(0) | \text{vac} \right\rangle, \quad (12.180)$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{k} - \sum_{j=1}^N \mathbf{q}_j.$$

Соотношения (12.173)–(12.179) легко обобщаются на случай  $N$ -фононной функции Грина. В частности,  $N$ -фононный  $Z$ -фактор стабильного (основного) состояния полярона с импульсом  $\mathbf{k}$

$$\begin{aligned} Z_N^{(\mathbf{k})}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) &= \\ &= |\langle \text{polaron}(\mathbf{k}) | \text{free electron}(\mathbf{p}) + \text{free phonons}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) \rangle|^2 \quad (12.181) \end{aligned}$$

(импульс  $(\mathbf{p})$  определен как в (12.180)) связан с  $N$ -фононной функцией Грина следующим образом:

$$G_N(\mathbf{k}, \tau \gg \omega_0^{-1}; \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) \rightarrow Z_N^{(\mathbf{k})}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) e^{-E(\mathbf{k})\tau}. \quad (12.182)$$

Процедура генерации функции Грина использует стандартное диаграммное разложение — технику Мацубары при нулевой температуре  $T = 0$ . Диаграммы (рисунки 12.73 и 12.74) построены из следующих элементов:

- 1) свободный электронный пропагатор (сплошная линия)

$$G^{(0)}(\mathbf{p}, \tau_2 - \tau_1) = \exp \left[ -\frac{p^2}{2} (\tau_2 - \tau_1) \right]; \quad (12.183)$$

- 2) фононный пропагатор (штриховая линия)

$$D(\mathbf{q}, \tau_2 - \tau_1) = \exp[-\omega_q(\tau_2 - \tau_1)]; \quad (12.184)$$

- 3) фактор  $V(\mathbf{q})$  приписан фононному пропагатору (с импульсом  $\mathbf{q}$ ) и двум соседним электронным пропагаторам.

Внешние линии диаграмм возникают из операторов, стоящих в уравнениях (12.171), (12.180) с соответствующими импульсами. Импульсы внутренних линий произвольны, и их значения ограничиваются только законом сохранения импульса в каждой вершине. Чтобы соблюсти закон сохранения импульса, импульс фона на считается произвольным и однозначно определяет импульс электронного пропагатора. Времена, приписанные концам линий, подчиняются правилу хронологизации: время левого конца соответствуют нулю, времена правого конца диаграммы —  $\tau$ , а времена вершин увеличиваются вдоль глобальной электронной линии от нуля до  $\tau$ . Каждая диаграмма подразумевает интегрирование по всем внутренним параметрам в пределах их области определения.

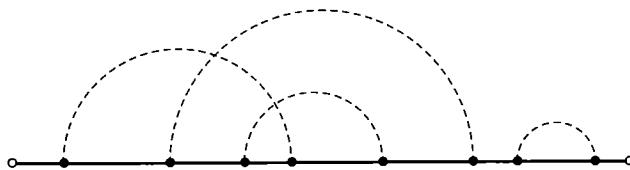


Рис. 12.73: 0-фононная диаграмма

После формулировки правил построения диаграмм полезно определить неприводимую  $N$ -фононную функцию Грина  $\tilde{G}_N$ , которая состоит только из неприводимых диаграмм (неприводимыми диаграммами называются такие диаграммы, которые не содержат не связанных с электронной линией

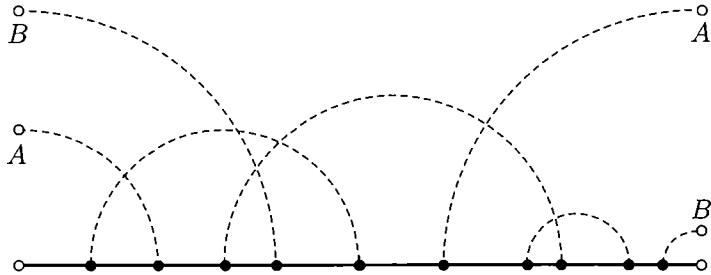


Рис. 12.74: 2-фононная диаграмма. В диаграммах  $N$ -фононных функций Грина фононные линии, которые не связаны с концами пропагатора квазичастицы (эти пропагаторы возникают вследствие фононных операторов в определении (12.180)) функции  $G_N$ ) всегда появляются парами (метки А и В), обе линии в паре имеют один и тот же импульс

фононных пропагаторов). Из этого определения ясно, что приводимая часть  $N$ -фононной функции Грина  $G_N - \tilde{G}_N$  является суммой произведений неприводимых функций  $\tilde{G}_{N'}$ ,  $N' < N$ , и свободных фононных пропагаторов. Следовательно, приводимая часть не дает вклада в асимптотическое поведение функции Грина  $G_N$  на больших мнимых временах (вследствие возникающих из-за несвязанных фононных пропагаторов дополнительных факторов  $e^{-\omega_0\tau}$ ), и, в частности, выражение (12.182) также справедливо и для неприводимой функции Грина  $\tilde{G}_N$ .

Полезно рассмотреть следующую функцию:

$$P(\mathbf{k}, \tau) = G(\mathbf{k}, \tau) + \sum_{N=1}^{\infty} \tilde{G}_N(\mathbf{k}, \tau; \mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_N. \quad (12.185)$$

(Заметим, что если  $\tilde{G}_N \rightarrow G_N$ , это выражение будет сингулярно при  $\tau \rightarrow 0$  вследствие расходимости интегралов по внутренним параметрам несвязанных фононных пропагаторов.) Функция  $P$  может быть получена алгоритмом ДМК и в соответствии с соотношениями (12.179) и (12.182) удовлетворяет соотношению

$$P(\mathbf{k}, \tau \gg \omega_0^{-1}) \rightarrow e^{-E(\mathbf{k})\tau}. \quad (12.186)$$

Для вывода вышеприведенного тождества было использовано свойство полноты:

$$Z_0^{(\mathbf{k})} + \sum_{N=1}^{\infty} \int Z_N^{(\mathbf{k})} (d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_N) d\mathbf{q}_1 \dots d\mathbf{q}_N = 1. \quad (12.187)$$

Уравнения (12.186) и (12.187) предполагают, что уровень основного состояния невырожден. В противном случае, в правой части должны быть учтены факторы вырождения.

**12.5.2.3. Диаграммный метод Монте-Карло.** В первых работах по методу ДМК [182, 263] была разработана методика суммирования сходящихся (и в общем случае, произвольных) диаграммных рядов без систематических ошибок. В этом разделе приведено качественное описание методики расчета рядов для введенных выше функций Грина (детальное описание приводится

в приложении 8) и выведен ряд эстиматоров, которые позволяют получить практически исчерпывающую информацию об основном состоянии полярона и значительно увеличивают эффективность процесса.

Общая стратегия вычисления диаграммного ряда выглядит следующим образом. Предположим, что мы интересуемся функцией  $Q(\{y\})$ , которая зависит от набора параметров  $\{y\}$  и которая представлена в виде суммы интегралов с увеличивающимся до бесконечности числом параметров интегрирования:

$$Q(\{y\}) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{\xi_m} \int \mathcal{D}_m(\xi_m, \{y\}, x_1, \dots, x_m) dx_1 \dots dx_m. \quad (12.188)$$

Здесь  $\xi_m$  — индексы разных членов/диаграмм одного и того же порядка  $m$ . Член с  $m = 0$  понимается как определенная функция набора  $\{y\}$ . Как внешние  $\{y\}$ , так и внутренние  $\{x_i\}$ , параметры могут быть как непрерывными, так и дискретными. В последнем случае интегралы понимаются в смысле сумм. ДМК — это процесс, основанный на принципе Метрополиса [44], который перебирает различные диаграммы в пространстве параметров  $(\{y\}, m, \xi_m, \{x\}_m)$  и собирает статистику набора параметров  $Q(\{y\})$  таким образом, что окончательный результат сходится к точному ответу. Существенным моментом является то, что размерность интегралов в разложении (12.188) меняется.

Суммирование разложения  $Q(\{y\})$  — это процесс стохастической генерации диаграмм, описываемых функциями  $\mathcal{D}_m$  (12.188). Процесс ДМК состоит из ряда элементарных обновлений (изменений), которые можно разделить на два класса: (I) — обновления, которые не изменяют типа диаграммы (изменяют значения аргументов функции  $\mathcal{D}_m$ , но не саму функцию); (II) — обновления, которые изменяют порядок диаграммы. Набор элементарных обновлений зависит от задачи, и единственными требованиями являются эргодичность (для любых двух диаграмм требуется конечное число обновлений, необходимых для перехода от одной диаграммы к другой) и детальный баланс (то есть диаграммы вносят вклад в статистику в соответствии с отношением их  $\mathcal{D}$ -функций). В приложении 8 описан набор обновлений, которые являются эффективными для задачи о поляроне Фрелиха. Однако существует огромная свобода в конструировании их различных модификаций и нет сомнения, что для любой конкретной задачи они могут быть улучшены.

Хотя функция Грина содержит, хотя и в неявном виде, полную информацию о спектре полярона, и метод сбора статистики в гистограмму очевиден, полезно ввести некоторые прямые эстиматоры для различных физических характеристик. Более того, можно вывести эстиматор для самой функции Грина, который ликвидирует проблему систематических ошибок, возникающих вследствие конечного размера ячеек гистограммы.

**12.5.2.3.1. Эстиматоры для эффективной массы, групповой скорости и энергии.** Рассмотрим группу эстиматоров, которые построены в соответствии со следующим стандартным правилом метода Монте-Карло. Представим, что имеется некая величина  $A$ , которая определяется следующим

диаграммным разложением:

$$A = \sum_{\nu} \mathcal{D}_{\nu}^{(A)}, \quad (12.189)$$

где  $\mathcal{D}_{\nu}^{(A)}$  — диаграммы для  $A$ , которые параметризуются обобщенным индексом  $\nu$ , а суммирование по  $\nu$  понимается как суммирование по дискретным и интегрирование по непрерывным параметрам. Далее предположим, что все функции  $\mathcal{D}_{\nu}^{(A)}$  являются положительно определенными, и имеется процесс ДМК, который генерирует  $\nu$  в соответствии с плотностью вероятности, задаваемой функцией  $\mathcal{D}_{\nu}^{(A)}$ . Если некоторая величина  $B$  определена через (похожее) диаграммное разложение

$$B = \sum_{\nu} \mathcal{D}_{\nu}^{(B)}, \quad (12.190)$$

то эстиматор для отношения  $B/A$  дается выражением

$$\frac{B}{A} = \frac{\sum_{MC_A\{\nu\}} Q_{\nu}}{\sum_{MC_A\{\nu\}} 1}, \quad (12.191)$$

$$Q_{\nu} = \frac{\mathcal{D}_{\nu}^{(B)}}{\mathcal{D}_{\nu}^{(A)}}. \quad (12.192)$$

Здесь обозначение  $MC_A\{\nu\}$  означает, что набор параметров  $\{\nu\}$  генерируется в ходе процедуры ДМК. В общем случае величины  $A$  и  $B$  в уравнении (12.191) являются, соответственно, статистической суммой и наблюдаемой величиной. Однако это правило может быть использовано в несколько другом контексте. Например, в нашем случае  $A$  и  $B$  могут соответствовать одной и той же функции Грина, но при разных значениях внешних параметров (скажем, импульсам или константам связи). Таким образом, можно получить результаты для нескольких значений внешних параметров в ходе одного процесса ДМК, выполненного для одного фиксированного набора параметров. Можно также в явном виде вычислять производные по внешним параметрам. Для этого необходимо аналитически вычислить соответствующий предел для обеих сторон уравнения (12.191).

Рассмотрим сначала эстиматоры для эффективной массы  $m^*$  и групповой скорости  $v(\mathbf{k}) = \partial E(\mathbf{k}) / \partial \mathbf{k}$ . Заметим (при  $\tau \rightarrow \infty$ ,  $\lambda \rightarrow 0$ ), что

$$\frac{P(\mathbf{k} + \lambda \mathbf{e}, \tau)}{P(\mathbf{k}, \tau)} \rightarrow \begin{cases} \exp(-\lambda^2 \tau / 2m^*), & k = 0, \\ \exp(-\lambda^2 e v(\mathbf{k}) \tau), & k \neq 0, \end{cases} \quad (12.193)$$

где  $e$  — единичный вектор. Рассматривая знаменатель и числитель левой части уравнения (12.193) как  $A$  и  $B$ , соответственно, можно использовать уравнения (12.191) и (12.192), где функция  $Q$  дается выражением

$$Q = \prod_j \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[ (\mathbf{p}_j + \lambda \mathbf{e})^2 - \mathbf{p}_j^2 \right] (\Delta \tau)_j \right\}. \quad (12.194)$$

Здесь  $j$  нумерует свободные электронные пропагаторы данной диаграммы для  $P(\mathbf{k}, \tau)$ ,  $\mathbf{p}_j$  — импульс, соответствующий пропагатору  $j$ , а  $(\Delta\tau)_j$  — длина этого пропагатора.

Формула (12.194) следует из того обстоятельства, что разложение для  $P(\mathbf{k} + \lambda e, \tau)$  может быть получено из разложения для  $P(\mathbf{k}, \tau)$  при добавлении импульса  $\lambda e$  ко всем свободным электронным пропагаторам. В пределе  $\lambda \rightarrow 0$  можно разложить (12.194) по степеням  $\lambda$ :

$$Q = 1 - \lambda \tau \bar{\mathbf{p}} - \frac{\lambda^2}{2} \tau + \frac{\lambda^2}{2} \tau^2 (\mathbf{e} \bar{\mathbf{p}})^2 + \mathcal{O}(\lambda^3), \quad (12.195)$$

где  $\bar{\mathbf{p}}$  — средний импульс электрона для данной диаграммы,

$$\bar{\mathbf{p}} = \frac{1}{\tau} \sum_j \mathbf{p}_j (\Delta\tau)_j. \quad (12.196)$$

Сравнивая выражение (12.195) с соответствующим разложением правой части выражения (12.193), получаем следующие эстиматоры:

$$\langle \bar{\mathbf{p}} \rangle_{MC} \rightarrow \mathbf{v}(\mathbf{k}) \quad (\tau \rightarrow \infty); \quad (12.197)$$

$$1 - \frac{\tau}{3} \left\langle (\bar{\mathbf{p}})^2 \right\rangle_{MC} \rightarrow \frac{1}{m^*} \quad (\tau \rightarrow \infty), \quad (12.198)$$

где  $\langle \dots \rangle_{MC}$  означает усреднение по процессу LVR в соответствии с формулой (12.193).

Трактовка времени функции Грина  $\tau$  в качестве внешнего параметра диаграмм требует особой осторожности. Проблема состоит в том, что соотношения (12.191) и (12.192) подразумевают, что внутренние параметры диаграмм  $D_\nu^{(A)}$  и  $D_\nu^{(B)}$  имеют одну и ту же область определения, так как в противном случае отношение (12.192) не является правильным. С другой стороны, область определения внутренних времен прямым образом зависит от внешнего времени  $\tau$ . Чтобы обойти эту проблему, можно ввести скалированные внутренние времена при помощи простого соотношения  $\tau_i = \tau \tilde{\tau}_i$ , где  $\tau$  — внешнее время (длина диаграммы);  $\tau_i$  — внутренняя переменная времени (временная позиция электронфононной вершины); а  $\tilde{\tau}_i \in [0, 1]$  — соответствующая скалированная временная переменная, область определения которой не зависит от внешнего времени  $\tau$ .

После этого легко получить эстиматор полярной энергии. Для этого необходимо начать с соотношения

$$\frac{P(\mathbf{k}, (1 + \lambda)\tau)}{P(\mathbf{k}, \tau)} \rightarrow e^{-\lambda E(\mathbf{k})\tau} \quad (\tau \rightarrow \infty) \quad (12.199)$$

и делать преобразования в полной аналогии с уравнениями (12.193)–(12.198). В этом случае для функции  $Q$  можно получить соотношение

$$Q = (1 + \lambda)^N \left( \prod_j \exp \left\{ -\lambda \frac{p_j^2}{2} (\Delta\tau)_j \right\} \right) \left( \prod_s \exp \left\{ -\lambda \omega_0 (\Delta\tau)_s \right\} \right), \quad (12.200)$$

где индексы  $j$  и  $s$  обозначают, соответственно, электронные и фононные пропагаторы, а  $N$  — число интегрирований по мнимому времени (или чис-

ло вершин взаимодействия) в данной диаграмме. Затем в пределе  $\lambda \rightarrow 0$  необходимо разложить правые части соотношений (12.199) и (12.200) до пропорциональных  $\lambda$  членов. Наконец, использование формул (12.191) и (12.192) приводит к выражению для эстиматора

$$\frac{1}{\tau} \left\langle \sum_j \frac{p_j^2}{2} (\Delta\tau)_j + \sum_s \omega_0 (\Delta\tau)_s - N \right\rangle_{MC} \rightarrow E(\mathbf{k}) \quad (\tau \rightarrow \infty). \quad (12.201)$$

**12.5.2.3.2. Перевзвешивание.** В данном подходе может быть применена методика перевзвешивания [211, 264], которая позволяет использовать статистику, генерируемую для некоторого данного набора внешних параметров  $\xi$ , для расчета наблюдаемых величин при другом наборе внешних параметров  $\xi'$ . В методе ДМК перевзвешивание основано на соотношении

$$\sum_{MC\{\nu\}_{|\xi'}} Q_\nu(\xi') = \sum_{MC\{\nu\}_{|\xi}} \frac{\mathcal{D}_\nu(\xi')}{\mathcal{D}_\nu(\xi)} Q_\nu(\xi), \quad (12.202)$$

где  $Q_\nu$  — величина, которая определяется при сборе статистики Монте-Карло. Соотношение (12.202) следует из того факта, что статистика Монте-Карло для набора  $\xi'$  содержит те же самые (в смысле структуры и значений внутренних параметров) диаграммы, что и статистика для набора величин  $\xi$ . Различие состоит только в разной вероятности генерации диаграммы с набором  $\xi$  по сравнению с набором  $\xi'$ . Это различие может быть учтено аналитически при помощи соответствующего отношения, выражение для которого дает формула (12.202).

В рассматриваемом случае типичными внешними параметрами являются константа взаимодействия и импульс полярона:  $\xi = (\alpha, \mathbf{k})$ . Соответствующее отношение диаграмм дается выражением

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{D}_\nu(\alpha', \mathbf{k}')}{\mathcal{D}_\nu(\alpha, \mathbf{k})} &= \left( \frac{\alpha'}{\alpha} \right)^{N/2} \prod_j e^{-[(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2 + 2\mathbf{p}_j(\mathbf{k}' - \mathbf{k})](\Delta\tau)_j/2} = \\ &= \left( \frac{\alpha'}{\alpha} \right)^{N/2} e^{-[(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2/2 + \bar{\mathbf{p}}(\mathbf{k}' - \mathbf{k})]\tau}. \end{aligned} \quad (12.203)$$

Это выражение позволяет получать физические результаты при разных значениях  $\alpha'$  и  $\mathbf{k}'$  без дополнительных затрат времени процессора при выполнении ДМК при одном данном значении параметров  $\alpha$  и  $\mathbf{k}$ .

Заметим также, что пример использования методики перевзвешивания для классической модели приведен в конце книги.

**12.5.2.3.3. Точный эстиматор для функции Грина.** Расчет функции Грина с использованием гистограммы является простым и естественным подходом. Однако этот подход содержит недостаток, связанный с конечной шириной ячейки гистограммы. Всегда существует противоречие между подавлением систематической ошибки посредством уменьшения ширины ячейки и увеличением статистической точности, что, наоборот, требует увеличения размера

ячейки. Эта проблема может быть решена при помощи точного эстиматора для функции Грина, вывод которого представлен ниже.

Пусть дана некоторая функция  $A(\xi_0)$  набора внешних параметров  $\xi_0$ , которая определяется (положительно определенным) диаграммным разложением

$$A(\xi_0) = \sum_{\nu} \mathcal{D}_{\nu}(\xi_0) \equiv \int \sum_{\nu} \mathcal{D}_{\nu}(\xi) \delta(\xi - \xi_0) d\xi, \quad (12.204)$$

(здесь рассматривается общий случай, когда не предполагается, что область определения  $\nu$  не зависит от  $\xi$ ), и есть процесс ДМК, который генерирует конфигурации  $\{\nu, \xi\}$  с плотностью вероятности, пропорциональной  $\mathcal{D}_{\nu}(\xi)$ . Требуется построить эстиматор  $a_{\xi_0}$ , усреднение которого в процессе ДМК даст (с точностью до глобальной нормировки) функцию  $A(\xi_0)$ . Представим функцию  $a_{\xi_0}$  в следующем виде:

$$a_{\xi_0}(\nu, \xi) = \begin{cases} q(\nu) \mathcal{D}_{\nu}(\xi_0) / \mathcal{D}_{\nu}(\xi), & \text{если } \xi \in \Gamma_0 \text{ и } \mathcal{D}_{\nu}(\xi) \neq 0, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (12.205)$$

Здесь  $\Gamma_0$  — некоторая конечная область определения в пространстве переменных  $\xi$ , которая включает точку  $\xi_0$ , а  $q(\nu)$  — некоторая функция, которая будет определена ниже. (Предполагается, в соответствии с процедурой ДМК, что  $\mathcal{D}_{\nu}(\xi) \equiv 0$ , если  $\xi$  находится вне области определения соответствующей диаграммы.) Из уравнения (12.205) следует, что

$$\langle a_{\xi_0} \rangle_{MC} \equiv C \sum_{\nu} \int a_{\xi_0}(\nu, \xi) \mathcal{D}_{\nu}(\xi) d\xi = C \sum_{\nu} q(\nu) \mathcal{D}_{\nu}(\xi_0) \int_{\substack{\xi \in \Gamma_0 \\ \mathcal{D}_{\nu}(\xi) \neq 0}} d\xi \quad (12.206)$$

где

$$C^{-1} = \sum_{\nu} \int \mathcal{D}_{\nu}(\xi) d\xi. \quad (12.207)$$

Является нормирующим фактором для распределения случайных пар переменных  $(\nu, \xi)$ , которое определено разложением (12.204). Из выражения (12.206) видно, что, выбирая

$$q^{-1}(\nu) = \int_{\substack{\xi \in \Gamma_0 \\ \mathcal{D}_{\nu}(\xi) \neq 0}} d\xi \quad (12.208)$$

(заметим, что в соответствии с (12.205) определение  $q(\nu)$  имеет смысл, только если  $\mathcal{D}_{\nu}(\xi) \neq 0$ , и вследствие этого  $q^{-1}(\nu) \neq 0$ , так как, по крайней мере, небольшая окрестность точки  $\xi_0$  должна давать вклад в интеграл), имеем

$$\langle a_{\xi_0} \rangle_{MC} = CA(\xi_0). \quad (12.209)$$

Конкретную форму эстиматора для функции Грина легко получить, со-поставляя  $\xi$  с  $\tau$  и замечая, что отношение диаграмм в выражении (12.205)

дается в этом случае равенством (12.200). Так как область определения любой диаграммы по отношению к  $\tau$  не зависит от структуры диаграммы ( $\tau \in [0, \infty]$ ), фактор  $q$  в выражении (12.205) просто пропорционален обратному размеру интервала  $\Gamma_0$ . Выбор интервала  $\Gamma_0$  для каждого конкретного значения  $\tau_0$  произволен и является делом вкуса и удобства.

**12.5.2.3.4. Улучшенный эстиматор для статистики фононов.** Сбор статистики для фононного облака может быть существенно улучшен при помощи описанного в данном разделе приема.

Для начала отметим, что в пределе  $\tau \rightarrow \infty$ , что соответствует режиму, отвечающему основному состоянию, набор всех  $N$ -фононных диаграмм обладает некоторой симметрией. Чтобы выявить эту симметрию, преобразуем диаграммы к круговому представлению по правилам, которые проиллюстрированы на рис. 12.75.

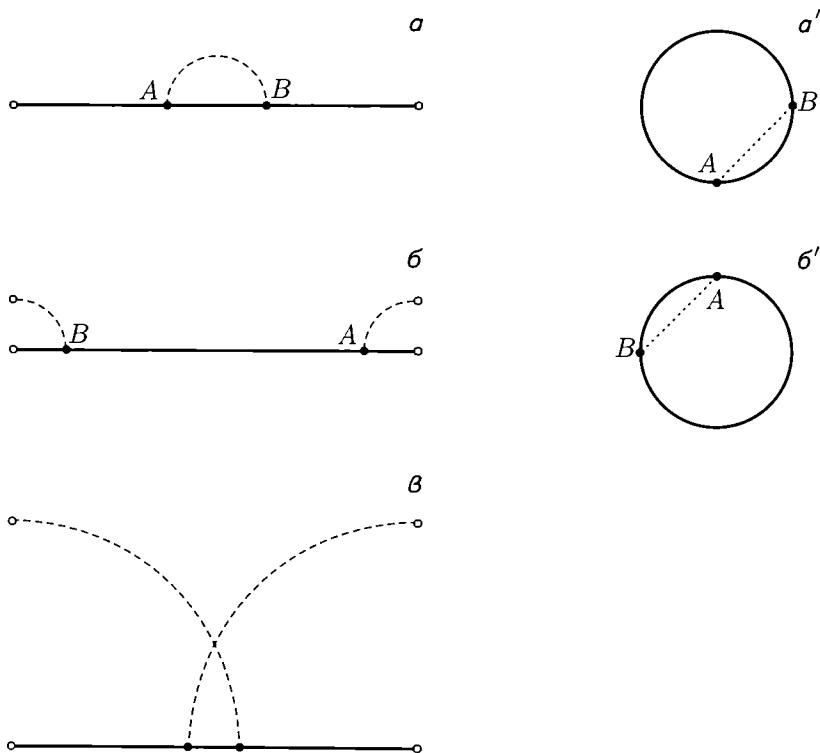


Рис. 12.75. Соответствие между стандартным и круговым представлением диаграмм

Трансформация производится посредством «склеивания» внешних концов электронной линии и «склеиванием» концов пар (соответствующих друг другу) внешних фононных линий. Легко проверить, что эта процедура не противоречит определению пропагаторов (12.183) и (12.184). В пределе больших мнимых времен  $\tau$ , которые необходимы для выделения свойств основного состояния, вероятность найти фононный пропагатор с длиной более  $\tau/2$  пренебрежимо мала. Поэтому можно пренебречь ориентацией и понимать длину фононного

пропагатора как длину меньшей из арок между его концами. С той же самой точностью, в пределе  $\tau \rightarrow \infty$ , можно пренебречь такими парами фононных линий как изображенные на рис. 12.75, *в*, — эти пары не вписываются однозначно в круговое представление. Следует отметить, что круговые диаграммы естественным образом появляются в технике на конечных температурах (см., например, [265]), где длина окружности  $\tau$  имеет смысл обратной температуры.

В круговом представлении симметрия, необходимая для построения улучшенных эстиматоров, очевидна. Действительно, циркулярная диаграмма представляет собой весь класс обычных диаграмм вследствие независимости циркулярной диаграммы от точки, которая соответствует концам обычной диаграммы. Таким образом, генерируя определенную обычную диаграмму и сопоставляя ее с соответствующей циркулярной диаграммой, можно эффективно генерировать и включать в статистику весь класс диаграмм.

На практике процедура построена следующим образом. Пусть индекс  $i = 1, \dots, N_e$  обозначает электронные пропагаторы циркулярной диаграммы. Таким образом, диаграмма разбивается на  $N_e$  кусков, каждый из которых имеет длину во времени  $\Delta\tau_i$ ,  $\sum_{i=1}^{N_e} \Delta\tau_i = \tau$ . Когда циркулярная диаграмма разрезана где-нибудь в интервале  $\Delta\tau_i$ , получается вклад в  $\tilde{G}_{N_i}(k, \tau; q_1^{(i)}, \dots, q_{N_i}^{(i)})$ , где  $N_i$  — число фононных пропагаторов, которые разрезаны вместе с электронным пропагатором на этом интервале; набор  $\{q_i\}$  — импульсы фононных пропагаторов. Таким образом, эстиматор для интегрального  $N$ -фононного  $Z$ -фактора выглядит следующим образом:

$$Z_N^{(k)} \equiv \int \dots \int \prod_{j=1}^N Z_N^{(k)}(q_1, \dots, q_N) dq_j = \left\langle \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\Delta\tau_i}{\tau} \delta_{N_i, N} \right\rangle_{MC}, \quad (12.210)$$

где вследствие инвариантности циркулярного представления по отношению к мнимому времени каждый интервал вносит вклад в статистику в соответствии с его длительностью во времени. Однофононная функция распределения в многообразии  $N$ -фононных состояний дается следующим выражением:

$$\begin{aligned} F_N^{(k)}(q) &\equiv \int \dots \int \prod_{j=2}^N Z_N^{(k)}(q, q_2, \dots, q_N) dq_j \equiv \\ &\equiv \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \int \dots \int \prod_{j \neq l}^N Z_N^{(k)}(q_1, \dots, q_l = q, \dots, q_N) dq_j = \\ &= \left\langle \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\Delta\tau_i}{\tau} \delta_{N_i, N} \frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{N_i} \delta(q_j - q) \right\rangle_{MC} \end{aligned} \quad (12.211)$$

Очевидно, что

$$Z_N^{(k)} = \int F_N^{(k)}(q) dq. \quad (12.212)$$

Суммируя по всем  $N$ , получим однофононную функцию распределения

$$F^{(k)}(q) = \sum_{N=1}^{\infty} F_N^{(k)}(q). \quad (12.213)$$

**12.5.2.3.5. Сравнение диаграммного метода Монте-Карло и других численных подходов к проблеме полярона.** В последние годы был разработан ряд эффективных и достаточно точных методов для решения задачи полярона. Однако, как показывает приведенный в данном разделе анализ, ни один из них не может конкурировать с методом ДМК, по крайней мере, для трехмерного полярона Фрелиха.

Среди различных численных методов можно выделить простой и эффективный метод, основанный на точной диагонализации, который позволяет достигать высокой и хорошо контролируемой точности в одномерной задаче полярона Холстейна [266]. Однако так как вариационный базис метода построен в прямом пространстве, этот метод испытывает трудности с дальнодействующим взаимодействием и с решетками большей размерности ввиду драматического увеличения минимального вариационного пространства.

Элегантная версия метода Монте-Карло для вычисления интеграла по траекториям, которая свободна от систематических ошибок, была предложена в работах [267, 268]. Следует отметить, что в рамках этого метода (в случае дискретного гильбертова пространства) разложение интеграла по траекториям является сумой интегралов конечной размерности и математически эквивалентно диаграммному разложению. Предложенная в работах [267, 268] схема в явном виде опирается на дискретность гильбертова пространства и, следовательно, неприменима к использованию в модели Фрелиха. С другой стороны, метод ДМК может быть применен без изменения стратегии и к модели Холстейна. Более того, метод интегралов по траекториям интегрирует все фононные степени свободы с самого начала, и изучение распределения квантовых состояний в многофононном облаке невозможно.

Следует отметить, что метод ДМК не требует большой памяти компьютера для вычислений. Порядок самой большой диаграммы, с которым приходилось иметь дело при расчетах в модели полярона Фрелиха, не превышал  $10^4$ .

**12.5.2.4. Численные результаты.** В этом разделе представлены результаты для полярной энергии, эффективной массы,  $Z$ -фактора и структуры полярного облака до значений константы связи  $\alpha = 20$ .

**12.5.2.4.1. Энергия основного состояния и эффективная масса.** На рис. 12.76 представлены результаты для энергии дна полярной зоны  $E_0$  как функции  $\alpha$  в широком диапазоне констант связи.

Для всех значений  $\alpha$  энергии рассчитаны с относительной точностью выше чем  $10^{-3}$  (и более чем  $10^{-4}$  для  $\alpha < 3$ ). Данные сравниваются с результатами вариационного анализа, проведенного Фейнманом [269]. Это сравнение демонстрирует точность Фейнмановского подхода к расчету энергии полярона. Следовательно, простая интерполяция между результатом второго порядка теории возмущений  $E_0 = -\alpha - 1,26 \left(\frac{\alpha}{10}\right)^2$  и вариационной оценкой Фейнмана

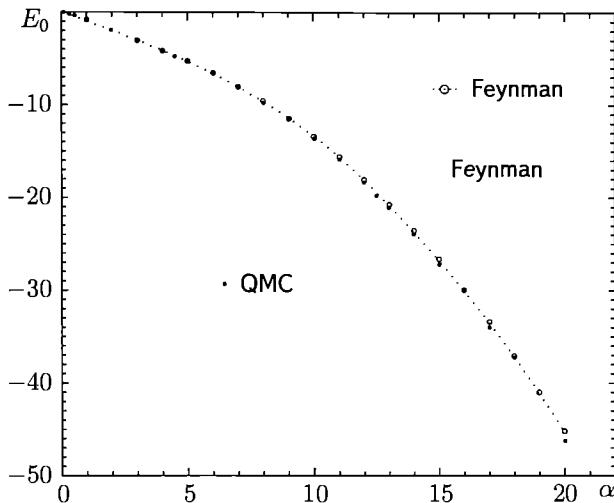


Рис. 12.76. Дно полярной зоны  $E_0$  как функция  $\alpha$ . Статистические ошибки значительно меньше размера точек; Feynman: результаты вариационного анализа, проведенного Фейнманом [269], QMC: результаты, полученные методом ДМК

для сильной связи  $E_0 = -\frac{\alpha^2}{3\pi} - 2,83$  дает вполне удовлетворительное описание энергии дна зоны  $E_0(\alpha)$ .

На рис. 12.77 представлены данные для эффективной массы  $m^*$ . При  $\alpha \leq 9$  статистика собиралась при целых значениях  $\alpha$  (при помощи описанной

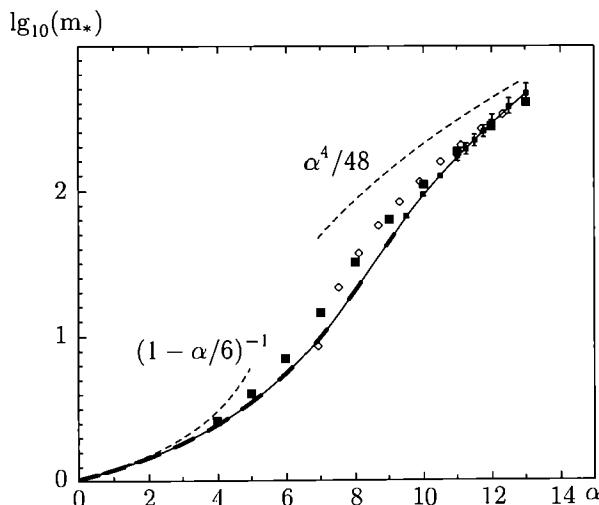


Рис. 12.77. Эффективная масса как функция константы связи. Результаты ДМК (кружки, интерполированные сплошной линией; статистические ошибки указаны, но для  $\alpha < 9$  они меньше размера точки и меньше, чем  $10^{-3}m^*$  для  $\alpha < 6$ ) сравниваются с результатами теории возмущений и сильной связи (штриховые линии), приближением Фейнмана (квадраты) и результатами вариационного анализа Феранчука с соавторами (ромбы)

в предыдущем разделе процедуры перевзвешивания) и распространялась на конечные интервалы констант связи (см. рис. 12.77). Для  $\alpha > 9$  процедура перевзвешивания оказалась неэффективной.

Сравнение данных для эффективной массы  $m^*$  с аналитическими результатами для слабой и сильной связи позволяет определить область применимости этих формул. При малых  $\alpha$  формула  $m^* = \left(1 - \frac{\alpha}{6}\right)^{-1}$ , которая совпадает с разложением теории возмущений второго порядка [270, 271], работает хорошо вплоть до  $\alpha \approx 2$ . В отличие от случая  $E_0$ , в котором аналитическое выражение сильной связи хорошо описывало энергию, аналитическое выражение для массы в пределе сильной связи [272]  $m^* = \alpha^4/48$  существенно переоценивает эффективную массу во всем диапазоне физически интересных констант связи  $\alpha$ . Вариационная техника Фейнмана работает лучше, но все же существенно отклоняется от точного решения (вплоть до 50 %) в области констант связи  $5 < \alpha < 10$ .

**12.5.2.4.2. Структура поляронного облака.** В этом разделе представлены результаты для электронного  $Z$ -фактора для  $k=0$  как функции константы связи в области малых и промежуточных параметров связи  $\alpha$  (для  $\alpha > 10$  электронный вес полярона в основном состоянии становится пренебрежимо мал) и для  $\alpha=1$  как функции импульса вплоть до точки окончания спектра. Также изучено, как зависят от константы связи  $\alpha$  распределение фононов в основном состоянии  $Z_N^{(0)}$  и среднее число фононов в основном состоянии  $\bar{N} = \sum_{N=1}^{\infty} N Z_N^{(0)}$ .

Результат теории возмущений для малых  $\alpha$  и  $k=0$  имеет вид

$$F_l^{(0)}(\mathbf{q}) = \frac{\sqrt{2}\alpha}{4\pi^2} \frac{\sin \theta}{(q^2/2 + 1)^2} dq d\theta d\varphi, \\ Z_0^{(0)} = \alpha/2. \quad (12.214)$$

Получено, что при  $\alpha < 1$  результаты теории возмущений (12.214) описывают точные данные с высокой степенью точности: см. также рис. 12.78 и рис. 12.80.

Данные, приведенные на рис. 12.78, указывают на то, что результаты теории возмущений неприменимы уже при  $\alpha > 1$ , так как при этих значениях константы связи  $Z$ -фактор затравочного электронного состояния уже не является основным вкладом в волновую функцию полярона. Например,  $Z_0^{(0)}(\alpha = 3) < 0.2$ ;  $Z$ -фактор основного электронного состояния очень быстро уменьшается при  $\alpha > 3$  (зависимость  $Z_0^{(0)}(\alpha)$  быстрее экспоненциальной) и становится  $< 10^{-5}$  для  $\alpha \geq 10$ . Попытки подогнать данные конкретной функцией не производилось, так как в интервале  $3 < \alpha < 10$  полярное состояние плавно перстраивается между двумя качественно различными режимами слабой и сильной связи.

На рис. 12.79 показано распределение многофононных состояний в полярном облаке при  $k=0$ . Видно, как распределение плавно эволюционирует от случая, описываемого теорией возмущений при слабой связи, к режиму

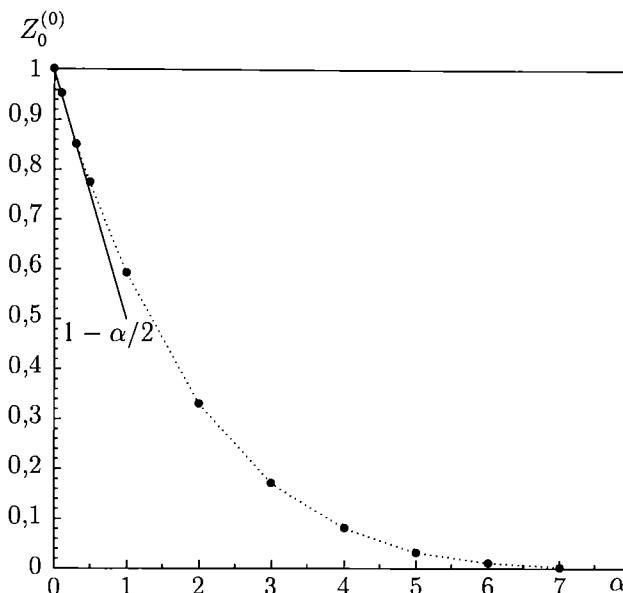


Рис. 12.78. Электронный  $Z_0^{(0)}$ -фактор основного состояния как функция константы взаимодействия: сплошные кружки — данные ДМК (вследствие использования улучшенного эстиматора  $Z_0^{(0)}$  получен с точностью, превышающей  $10^{-4}$  в абсолютных единицах); сплошная линия — результат теории возмущений (12.214)

сильной связи. Для  $\alpha > 10$  данные могут быть подогнаны распределением Гаусса, но при меньших значениях  $\alpha$  распределение несимметрично: оно затухает быстрее для  $N > \bar{N}$ , чем для  $N < \bar{N}$ . Заметим, что даже для  $\alpha = 17$  распределение по числу фононов в поляронном облаке имеет достаточно большую ширину. Это означает, что даже при достаточно сильной связи поляронное облако представляет собой суперпозицию состояний с различными  $N$ . Это свойство не может быть учтено в вариационной  $\Psi^4$ -теории сильной связи и, по-видимому, объясняет существенное отклонение данных ДМК для эффективной массы от результата, полученного в теории сильной связи.

Полученные методом ДМК данные по электронному  $Z$ -фактору  $Z_0^{(0)}$  и функции распределения числа фононов  $Z_N^{(0)}$  плавно изменяются по  $\alpha$  во всем диапазоне констант связи. Следовательно, формирование состояния сильной связи происходит плавно, что доказывает отсутствие явления автолокализации в модели Фрелиха.

**12.5.2.5. Спектральный анализ.** Спектральная функция  $L_k(\omega)$  (12.176) содержит важную информацию о системе, так как она имеет полюса (острые пики) на частотах, которые соответствуют стабильным (метастабильным) квазичастичным состояниям системы. Более того, так как вероятность эмиссии электрона с импульсом  $k$  из полярного состояния в состояние свободного электрона пропорционально спектральной функции, она может быть измерена в экспериментах по фотозмиссии с угловым разрешением.

Несмотря на множество различных подходов к проблеме полярона, информация о возбужденных состояниях полярона ограничена попытками оце-

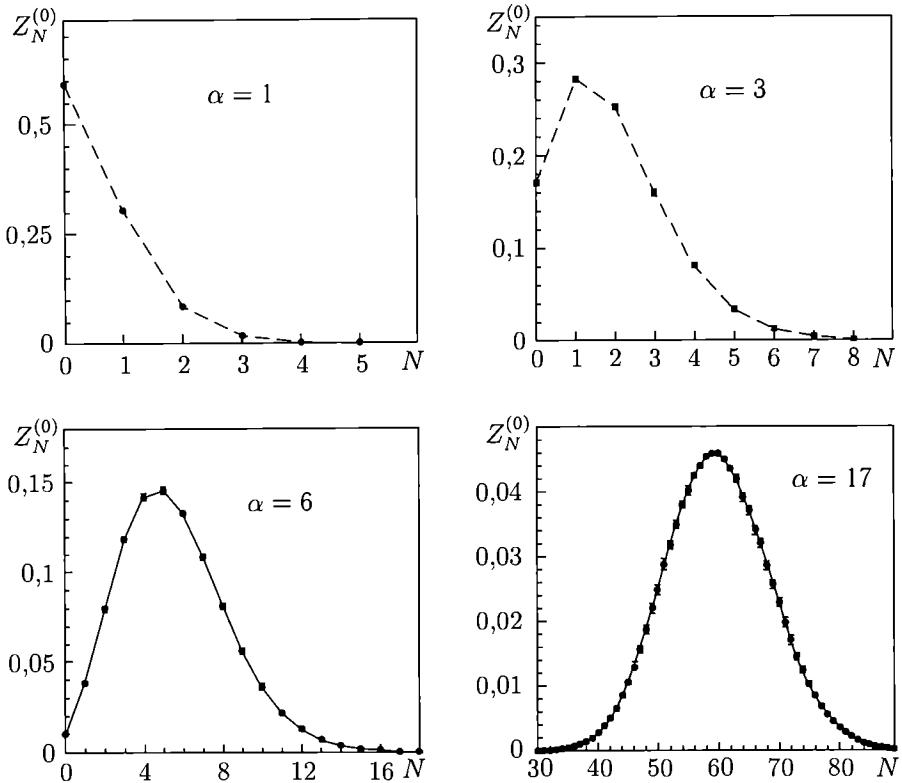


Рис. 12.79. Парциальные вклады  $N$ -фононных состояний в основное состояние полярона для различных значений  $\alpha$ . Статистические погрешности, если не указаны, то меньше размеров точек

нить спектральную плотность или по теории возмущений, или вариационными расчетами в пределе сильной связи. Так как изучение асимптотического поведения функции Грина и техника эстиматоров дают информацию только о свойствах основного состояния, значение методики получения спектральной плотности для изучения возбужденных состояний трудно переоценить.

Спектральная плотность была недавно рассчитана для модели Холстейна [273] и обобщенной модели Холстейна [274]. Первый подход основан на приближении бесконечной размерности, а второй результат был получен для конечного кластера. Ни один из этих методов нельзя применить для задачи о трехмерном полароне Фрелиха.

Проблема обращения уравнения (12.174) относится к классу некорректно поставленных задач. При неполной и шумной информации о  $G(\mathbf{k}, \tau)$  существует бесконечное количество решений и, следовательно, необходимо выбрать решение, которое является наилучшим в соответствии с неким избранным критерием. *Метод максимальной энтропии* (ММЭ) ищет наиболее вероятное решение для данной информации, содержащейся в  $G(\mathbf{k}, \tau)$  [275, 276]. Этот метод предлагает разумную стратегию и методику регуляризации, которая подавляет пилообразную неустойчивость. Тем не менее, две черты этого метода

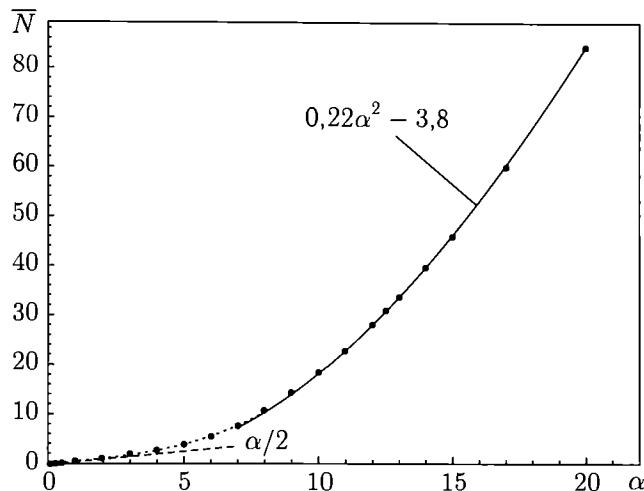


Рис. 12.80. Среднее число фононов в основном состоянии полярона как функция  $\alpha$ . Сплошные кружки — данные ДМК (относительная точность выше  $10^{-3}$ ); штриховая линия — результат теории возмущений (12.214); сплошная линия — параболическая подгонка для режима сильной связи

не дают возможности использовать его для спектрального анализа квазичастичного спектра (преимущества и недостатки ММЭ обсуждаются в [276]): 1) предварительное разбиение энергетического пространства, которое является катастрофическим, если спектральная функция содержит как острые ( $\delta$ -функционные) пики, так и гладкие части с острыми краями; 2) функция априорной вероятности предполагается гауссовой, хотя закон Гаусса может плохо отображать истинное распределение [276]. Кроме того, применяемая для подавления пилообразной неустойчивости регуляризация подавляет не только саму неустойчивость, но и разрушает информацию об острых пиках и краях спектрального распределения. Представленный в разделе 11.2.4 метод стохастической оптимизации (МСО) восстанавливает одинаково хорошо как плавные, так и  $\delta$ -функционные особенности спектральной функции. Окончательный ответ получается как среднее большого числа представительных решений. Каждое представительное решение получается в ходе решения линейного, не искаженного регуляризующими членами, уравнения Фредгольма, и обладает пилообразной неустойчивостью. Однако процедура получения каждого представительного решения стартует со случайно выбранных начальных условий и, как следствие, пилообразная неустойчивость усредняется при суммировании стохастически независимых решений. Наиболее важной чертой метода является то, что метод избегает как искажения интегрального уравнения нелинейными регуляризирующими членами, так и заранее выбранной дискретизации и  $\omega$ -пространства действительных частот.

Для проведения совместной проверки диаграммного метода Монте-Карло и нового метода спектрального анализа, ниже сравниваются спектральные плотности, полученные в теории возмущений и новыми численными методами. Аналитическое выражение для высокогенергетической части ( $\omega > 0$ ) может быть получено для произвольного потенциала взаимодействия  $V(|q|)$ , который

зависит от модуля фононного импульса  $|q|$ . Для нулевого импульса полярона  $k = 0$  минимая часть линейной по  $\alpha$  собственно энергетической части  $\Sigma(0, \omega > 0)$  имеет вид

$$\text{Im } \Sigma(0, \omega) = -\frac{1}{\sqrt{2}\pi} \sqrt{\omega - 1} \left| V\left(\sqrt{2(\omega - 1)}\right) \right|^2 \theta(\omega - 1). \quad (12.215)$$

Затем, учитывая только линейные по взаимодействию члены и используя соотношение  $L_0(\omega) = -\text{Im } G_{k=0}(\omega)/\pi$ , получаем

$$L_0(\omega > 0) = \frac{1}{\sqrt{2}\pi^2} \frac{\sqrt{\omega - 1}}{\omega^2} \left| V\left(\sqrt{2(\omega - 1)}\right) \right|^2 \theta(\omega - 1). \quad (12.216)$$

Выражение для низкоэнергетической части спектра ( $\omega < 0$ ) зависит от вида потенциала взаимодействия; рассмотрим результат теории возмущений для короткодействующего взаимодействия

$$V(|q|) = i \left(2\sqrt{2}\alpha\pi\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{q^2 + \varkappa^2}}, \quad (12.217)$$

которое сводится к взаимодействию модели Фрелиха при  $\varkappa \rightarrow 0$ . Низкоэнергетическая часть является  $\delta$ -функционным пиком

$$L_0(\omega < 0) = \frac{\alpha}{\left(\varkappa + \sqrt{2}\right)^2} \delta\left(\omega + \alpha \frac{\sqrt{2}}{\varkappa + \sqrt{2}}\right). \quad (12.218)$$

Сравнение численных результатов для низкоэнергетической части спектра полярона Фрелиха ( $\varkappa = 0$ ) для  $\alpha = 0,05$  и уравнения (12.218) демонстрирует полное согласие с точностью порядка  $10^{-4}$  для энергии и  $Z$ -фактора полярона. Однако численные результаты для высокоэнергетической части существенно отличаются от аналитической кривой (верхняя часть рис. 12.81). Это неудивительно, так как выражение теории возмущений расходится при  $\omega \rightarrow \omega_0$  и, следовательно, теория возмущений не работает. Чтобы проверить случай, где теория возмущений очевидностью применима, рассмотрен случай конечного  $\varkappa = 1$ . Для этого случая получено полное согласие как для низкочастотной, так и для высокочастотной частей спектральной функции  $L(\omega)$  (нижняя часть рис. 12.81). Следует заметить, что высокочастотная часть  $L(\omega)$  успешно восстановлена разработанным методом несмотря на то, что ее интегральный вес не превышает  $10^{-2}$  для  $\alpha = 0,05$ .

**12.5.3. Обобщение диаграммного метода Монте-Карло на задачи о возбуждениях бозонного типа.** Рассмотрим обобщение техники диаграммного метода Монте-Карло и спектрального анализа методом стохастической оптимизации на различные системы одной или нескольких частиц в поле различных бозонных возбуждений. Разработанный метод применяется для точного численного решения задачи об оптическом спектре полярона Фрелиха, к задаче о классическом экситоне, задаче о диэлектрическом экситоне Рашбы–Пекара, задаче о дырке в  $t$ - $J$ -модели, которая взаимодействует с оптическими фононами.

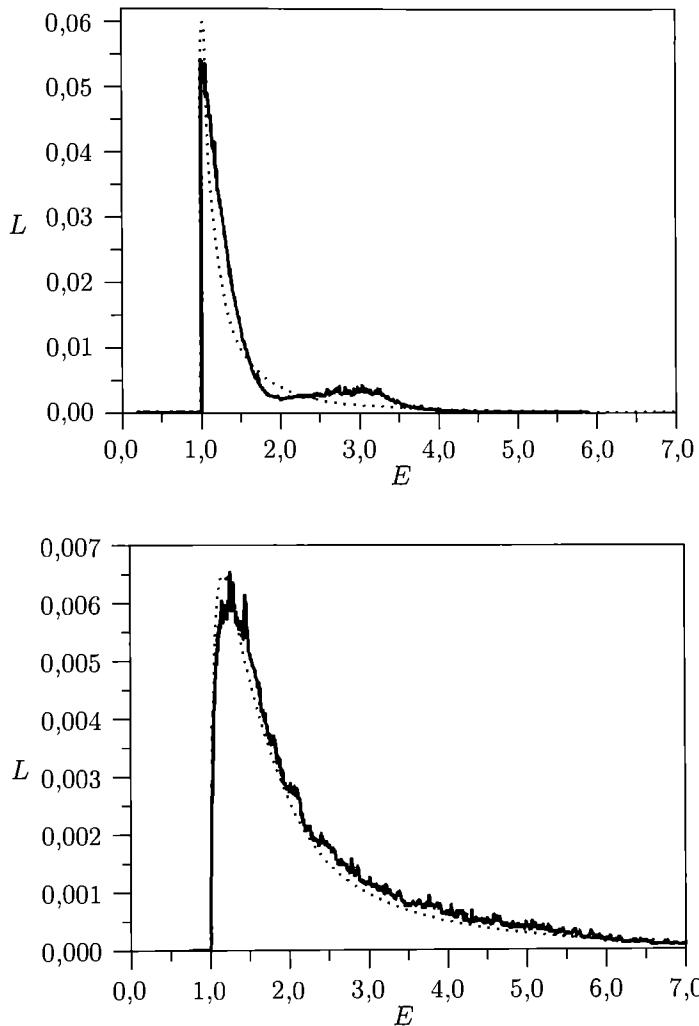


Рис. 12.81. Сравнение численных результатов (сплошные линии) и результатов теории возмущений (штриховые линии) для спектральной плотности модели Фрелиха для  $\alpha = 0,05$  (верхняя часть) и короткодействующего взаимодействия при  $\alpha = 0,05$  и  $\kappa = 1$  (нижняя часть)

Простейший гамильтониан экситона состоит из вкладов валентной зоны и зоны проводимости  $H_0$  и взаимодействия  $H_{e-h}$ :

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_c(\mathbf{k}) e_{\mathbf{k}}^+ e_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_v(\mathbf{k}) h_{\mathbf{k}}^+ h_{\mathbf{k}}, \quad (12.219)$$

$$H_{e-h} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \mathcal{U}(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') e_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}^+ h_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^+ h_{\mathbf{p}-\mathbf{k}'} e_{\mathbf{p}+\mathbf{k}'}. \quad (12.220)$$

Здесь  $e_{\mathbf{k}}$  ( $h_{\mathbf{k}}$ ) — оператор уничтожения электрона (дырки);  $\varepsilon_c(\mathbf{k})$  ( $\varepsilon_v(\mathbf{k})$ ) — закон дисперсии зоны проводимости (валентной зоны);  $N$  — число узлов решетки;  $\mathcal{U}(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{k}')$  — притягивающий потенциал взаимодействия.

Экситон в твердом теле не является изолированным возбуждением вследствие существенного взаимодействия

$$H_{e-ph} = i \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^+ - b_{-\mathbf{q}}) \times \\ \times \left[ \gamma_{ee}(\mathbf{q}) e_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ e_{\mathbf{k}} + \gamma_{hh}(\mathbf{q}) h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ h_{\mathbf{k}} + \gamma_{eh}(\mathbf{q}) h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ e_{\mathbf{k}} \right] + h.c. \quad (12.221)$$

с бозонным фононным полем

$$H_{ph} = \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}}. \quad (12.222)$$

Для точного решения задачи необходимо вычислить двухчастичную функцию Грина с суммарным импульсом  $2\mathbf{p}$  в представлении мнимого времени

$$G_p^{kk'}(\tau) = \langle 0 | e_{\mathbf{p}+\mathbf{k}'}(\tau) h_{\mathbf{p}-\mathbf{k}'}(\tau) h_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^+ e_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}^+ | 0 \rangle, \quad (12.223)$$

(вакуумное состояние  $|0\rangle$  соответствует пустой зоне проводимости и заполненной валентной зоне, а временные зависимости операторов определены стандартным образом:  $h_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}(\tau) = e^{H\tau} h_{\mathbf{p}-\mathbf{k}} e^{-H\tau}$ ,  $\tau > 0$ ) и сделать аналитическое продолжение на вещественные частоты.

В предыдущем разделе описана техника ДМК в применении к задаче полярона Фрелиха [78, 191, 234]. В принципе, практически без изменений, эта техника может быть использована в задаче, где квазичастичный гамильтониан  $H_0$  представлен одной квазичастицей с произвольной дисперсией  $\varepsilon(\mathbf{k})$ ,

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}}, \quad (12.224)$$

а гамильтониан имеет произвольную зависимость константы связи  $\gamma(\mathbf{q})$  от волнового вектора [84]:

$$H_{e-ph} = i \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \gamma(\mathbf{q}) (b_{\mathbf{q}}^+ - b_{-\mathbf{q}}) c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ c_{\mathbf{k}} + h.c. \quad (12.225)$$

Как и для полярона Фрелиха, диаграммное разложение функции Грина  $G_p(\tau) = \langle 0 | c_p(\tau) c_p^+ | 0 \rangle$  ( $\tau > 0$ ) в представлении взаимодействия представляется в виде бесконечного ряда многомерных интегралов (12.188) [78, 191, 234]. Затем применяется метод ДМК, описанный выше. Следует заметить, что благодаря простой структуре диаграмм (рис. 12.82, a), все топологическое разнообразие диаграмм может быть просуммировано при помощи только двух обновлений: вставки и удаления фононного пропагатора. Ниже приведено качественное описание обобщения этой техники на суммирование диаграммных рядов с более сложной топологией. В первом случае рассмотрен взаимодействующий с фононами экситон, который может быть аппроксимирован несколькими нижними электронными состояниями. Во втором случае рассмотрена двухчастичная экситонная задача.

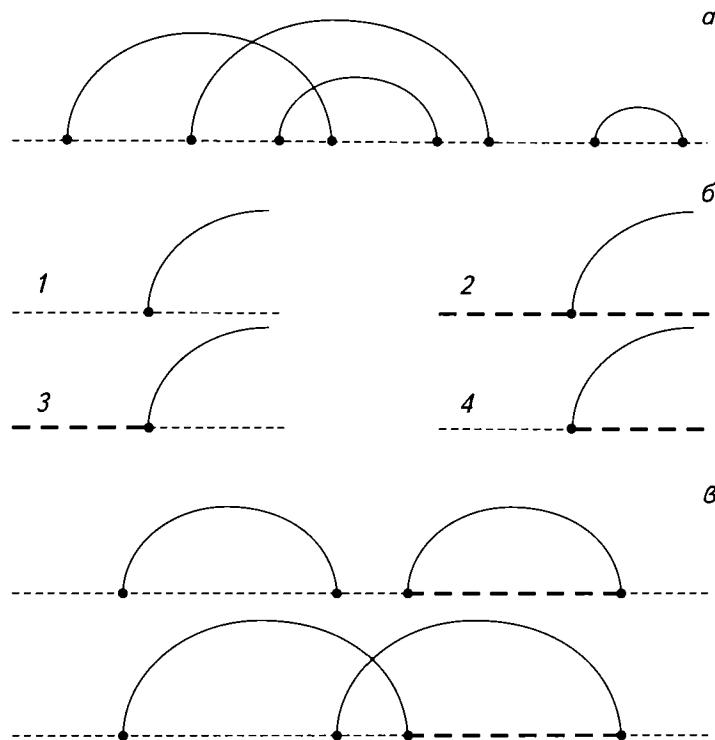


Рис. 12.82. Диаграммы Фейнмана. Сплошные линии соответствуют фононным пропагаторам  $D_{\mathbf{q}}(\tau' - \tau'') = \exp[-\omega_{\mathbf{q}}(\tau' - \tau'')]$ ; (а) типичная диаграмма для задачи (12.225). Штриховые линии соответствуют затравочным пропагаторам квазичастиц  $G_{\mathbf{k}}^{(0)}(\tau' - \tau'') = \exp[-\varepsilon(\mathbf{k})(\tau' - \tau'')]$ ; (б) типы вершин, в которых рождаются фононы, для задачи (12.226) — (12.228). Толстые и тонкие штриховые линии соответствуют затравочным пропагаторам квазичастичных состояний  $G_{i,\mathbf{k}}^{(0)}(\tau'' - \tau') = \exp[-\varepsilon_i(\mathbf{k})(\tau'' - \tau')]$  с «цветами»  $i=1$  и  $i=2$ ; (в) пример обновления переключения

Первый случай представляет собой приближенное описание экситона в поле фононов, что является разумным подходом к проблеме экситона с переносом заряда в одномерных соединениях [251]. В этом случае можно рассмотреть модель, в которой внутренняя структура экситона моделируется двумя низколежащими энергетическими уровнями

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i=1}^2 \varepsilon_i(\mathbf{k}) c_{i,\mathbf{k}}^+ c_{i,\mathbf{k}}, \quad (12.226)$$

а гамильтониан взаимодействия

$$H_{e-ph} = i \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{i,j=1}^2 \gamma_{ij}(\mathbf{q}) (b_{\mathbf{q}}^+ - b_{-\mathbf{q}}) c_{i,\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ c_{j,\mathbf{k}} + h.c. \quad (12.227)$$

соответствует диагональному и недиагональному рассеянию квазичастицы в двухуровневой системе, сопровождающемуся испусканием и поглощением

фононов. В этом случае необходимо рассчитать набор двух функций Грина [251]:

$$G_p^{ii}(\tau) = \langle 0 | c_{i,k}(\tau) c_{i,k}^+ | 0 \rangle, \quad i = 1, 2. \quad (12.228)$$

Для гамильтониана (12.226), (12.227) топология диаграммного разложения становится громоздкой. В отличие от простой топологической структуры диаграмм (рис. 12.82, *a*) задачи (12.225) существует четыре неэквивалентные топологии вершин, в которых рождается фонон. Возможные типы вершин обозначены как 1, 2, 3, и 4 на рис. 12.82, *b*. Комбинируя эти вершины с четырьмя сопряженными вершинами  $\bar{1}$ ,  $\bar{2}$ ,  $\bar{3}$ , и  $\bar{4}$  (сопряжение вершин определено как процедура обращения во времени направления фононных пропагаторов), получаем 16 топологически неэквивалентных классов диаграмм. Эти диаграммы могут быть поделены на три основных класса: диагональный класс ( $\bar{1}\bar{1}$ ,  $\bar{2}\bar{2}$ ,  $\bar{1}\bar{2}$ ,  $\bar{2}\bar{1}$ ), который содержит только диагональные вершины взаимодействия; недиагональный класс ( $\bar{3}\bar{3}$ ,  $\bar{4}\bar{4}$ ,  $\bar{3}\bar{4}$ ,  $\bar{4}\bar{3}$ ), который содержит только недиагональные вершины; и смешанный класс, который содержит остальные 8 типов диаграмм, где присутствуют и диагональные, и недиагональные вершины.

Рассматривая структуру диаграмм, можно заметить, что обновления, использованные в задаче (12.225), покрывают только диагональный класс и не обеспечивают эргодичности процесса. Однако чтобы покрыть и недиагональный класс, достаточно ввести обновления, которые, в дополнение к изменению импульса электронных пропагаторов под фононной аркой, меняют «цвет» электронных пропагаторов (и изменяют тип констант взаимодействия соответствующим образом) на противоположный. Эта схема покрывает и смешанный класс, если добавить процессы переключения (рис. 12.82, *b*). И, наконец, обновление, которое изменяет «цвета» квазичастичных пропагаторов (и изменяет типы констант взаимодействия соответствующим образом) во всей диаграмме, делает схему полностью эргодичной, так как обеспечивает переключения между функциями Грина  $G_p^{11}(\tau)$  и  $G_p^{22}(\tau)$  [251].

ДМК может быть обобщен и на случай двухчастичной проблемы экситона в приближении статической экранировки [79]. В случае если взаимодействие дырки и электрона с фононами отсутствует, можно трактовать гамильтониан  $H_0$  (12.219) как невозмущенный и считать  $H_{e-h}$  (12.220) взаимодействием. В этом случае  $G_p^{kk'}(\tau)$  (12.223) может быть записана в виде суммы лестничных диаграмм (рис. 12.83, *a*): пары горизонтальных линий представляют собой пропагатор электрон-дырочной пары,

$$G_p^{(0)}(\mathbf{k}, \tau'' - \tau') = \exp[-\varepsilon(\mathbf{k})(\tau'' - \tau')], \quad (12.229)$$

где  $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_c(\mathbf{p} + \mathbf{k}) - \varepsilon_v(\mathbf{p} - \mathbf{k})$  — энергия пары, а пунктирные линии — потенциал взаимодействия  $\mathcal{U}$ . Благодаря простой топологии диаграмм эта схема [78, 191, 234] суммирования разложения (12.225) может быть использована для расчета двухчастичной функции Грина (12.223) для реалистичных моделей, в которых зонные энергии и кулоновское взаимодействие определено из реалистичной зонной структуры [79].

Взаимодействие с фононами (12.221) не приводит к существенному усложнению диаграммного разложения (рис. 12.83, *b*) и может быть легко добавлено в рассмотренный выше алгоритм, если диаграммное разложение

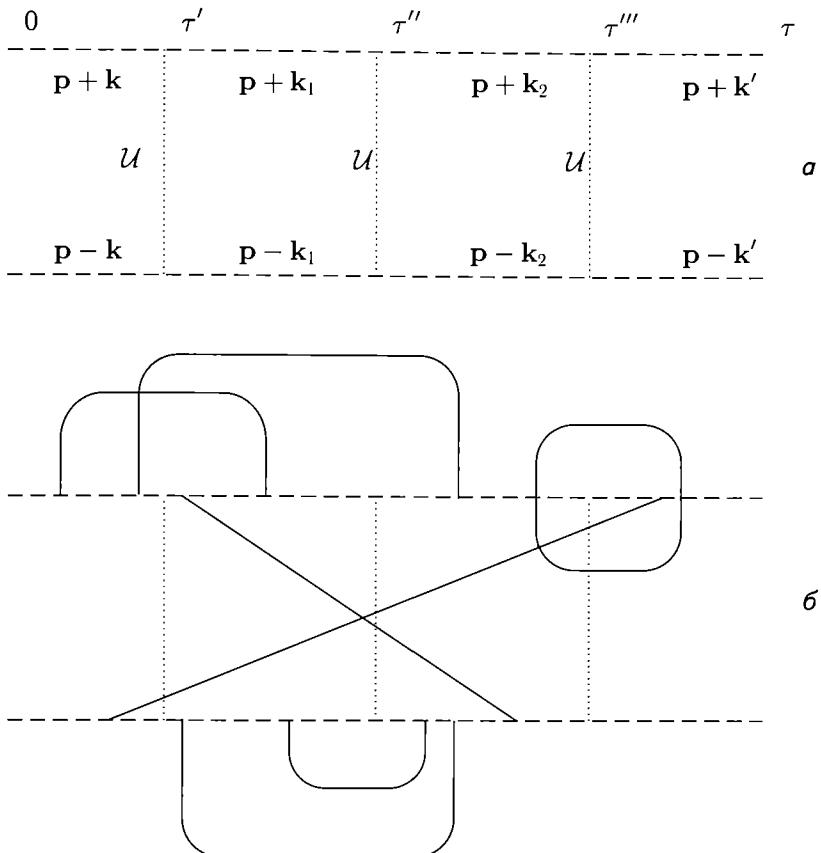


Рис. 12.83. Типичная диаграмма, дающая вклад в разложение  $G_p^{kk'}(\tau)$  в случаях, когда взаимодействие с фононами: а) отсутствует; б) имеется. Штриховые линии соответствуют затравочным функциям Грина электрона и дыркам, а пунктирные линии обозначают кулоновские вершины

останется знакопредetermined. В отличие от задачи полярона, где знакопостоянность разложения обеспечивается топологией диаграмм, в задаче об экситон-поляроне присутствует кулоновское взаимодействие, которое изменяет импульс электрона и дырки. Следовательно, знакопостоянство зависит от вида взаимодействия с фононами.

**12.5.4. Оптическая проводимость полярона Фрелиха.** В данном разделе представлен метод ДМК для вычисления оптической проводимости поляронов, и проведено вычисление для модели Фрелиха в слабом, промежуточном, и сильном режимах связи. В общем случае гамильтониан полярона представляется в виде формул (12.222), (12.224), и (12.225). Наиболее популярными являются следующие две модели. Модель полярона Холстейна характеризуется законом дисперсии квазичастицы  $\epsilon(\mathbf{k}) = 2t \sum_{i=x,y,z} \cos(k_i)$

с амплитудой перескока  $t$ , бездисперсными оптическими фононами  $\omega_q = \omega_0$  и короткодействующим взаимодействием  $V_H(\mathbf{q}) = \gamma$ . Континуальный полярон

Фрелиха характеризуется параболическим законом дисперсии  $\varepsilon(\mathbf{k}) = k^2/2m$ , бездисперсным оптическим фононом  $\omega_q = \omega_0$  и дальнодействующим взаимодействием  $V_F(\mathbf{q}) = i\omega_0(2\sqrt{2}\pi\alpha\sqrt{m\omega_0})^{1/2}/q$  (энергии обычно измеряются в единицах  $\omega_0$ , а длины — в единицах  $1/\sqrt{m\omega_0}$ ).

Теоретические результаты по оптической проводимости полярона содержат массу противоречий даже в режиме сильной связи [277–281]. Истинная форма кривой оптической проводимости полярона Фрелиха до сих пор неизвестна и, следовательно, важное звено, связывающее теорию и эксперимент, отсутствует.

В данном разделе для решения поставленной задачи обобщается метод ДМК: генерируются диаграммы, соответствующие разложению Фейнмана для статистической суммы, проводится вычисление коррелятора ток–ток на мнимом времени, при помощи метода стохастической оптимизации (МСО) делается аналитическое продолжение коррелятора ток–ток на действительные частоты и определяется спектр оптического поглощения. Предложенная методика не содержит приближений и систематических ошибок и пригодна в случае произвольного закона дисперсии частицы, дисперсии фонона и произвольного закона взаимодействия.

Для модели полярона Фрелиха получено, что существующие аналитические методы существенно недооценивают многофононный распад, который уширяет разные пики РВС до такой степени, что их вклады в оптическую проводимость перекрываются. Вместо узких пиков наблюдается один широкий максимум и плечо.

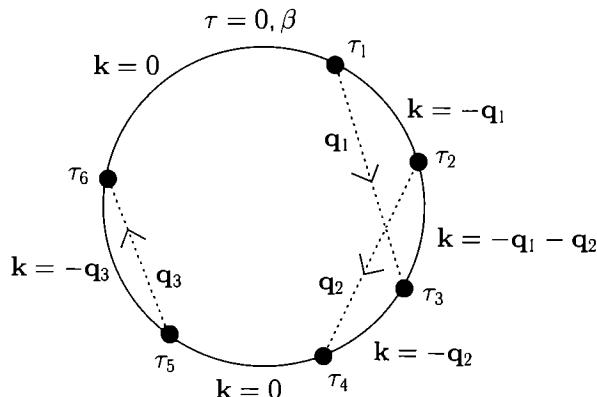


Рис. 12.84. Типичная диаграмма для статистической суммы полярона. Сплошная (пунктирная) линия соответствует пропагатору свободной частицы (фононному пропагатору). В общем случае в разложении статистической суммы присутствуют пропагаторы свободных частиц, которые сопровождаются несколькими фононными пропагаторами

Действительная часть оптической проводимости  $\sigma_{\alpha\beta}(\omega)$  явным образом связана с коррелятором ток–ток на мнимом времени  $\langle j_\beta(\tau)j_\delta(0) \rangle$ :

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{\pi}{\omega} \langle j_\beta j_\delta \rangle_\omega, \quad (12.230)$$

где (при нулевой температуре  $\beta = 1/T \rightarrow \infty$ )

$$\langle j_\beta(\tau)j_\delta(0) \rangle = \int_0^{+\infty} e^{-\omega\tau} \langle j_\beta j_\delta \rangle_\omega d\omega. \quad (12.231)$$

Решение интегрального уравнения (12.231) проводится методом стохастической оптимизации.

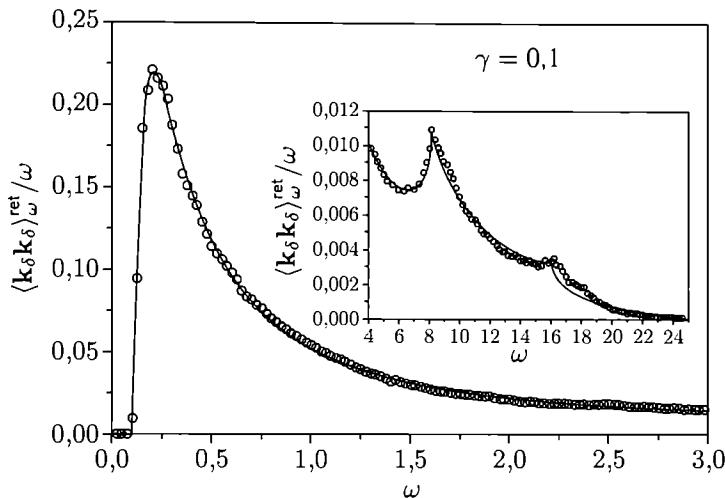


Рис. 12.85. Низкоэнергетическая часть перенормированного спектра коррелятора «импульс-импульс» для полярона Холстейна (кружки) в сравнении с результатом теории возмущений (линии). Высокоэнергетическая часть изображена на врезке.

Значение  $\sum_{\delta=x,y,z} \langle k_\delta(\tau=0)k_\delta(0) \rangle$  нормировано на единицу

Диагональный в импульсном представлении коррелятор  $\langle k_\beta(\tau)k_\delta(0) \rangle$  имеет прямой эстиматор и может быть получен при генерации статистики диаграмм Фейнмана для статистической суммы

$$Z = \text{Tr} \left\{ c^{-\beta H} \right\} \equiv \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} T_r \exp \left[ - \int_0^\beta H_{e-ph}(\tau) d\tau \right] \right\}, \quad (12.232)$$

(см. рис. 12.84). Каждая диаграмма, полученная при генерации разложения  $\tau$ -упорядоченной экспоненты, вносит в коррелятор следующий вклад:

$$\beta^{-1} \int_0^\beta k_\beta(\tau' + \tau) k_\delta(\tau') d\tau'. \quad (12.233)$$

Здесь  $k(\tau')$  — ступенчатая функция на диаграммном круге. Все вычисления сделаны для конечного, но очень большого  $\beta\omega > 100$ , что позволяет считать, что экспоненциально малые поправки на конечную температуру пренебрежимо малы.

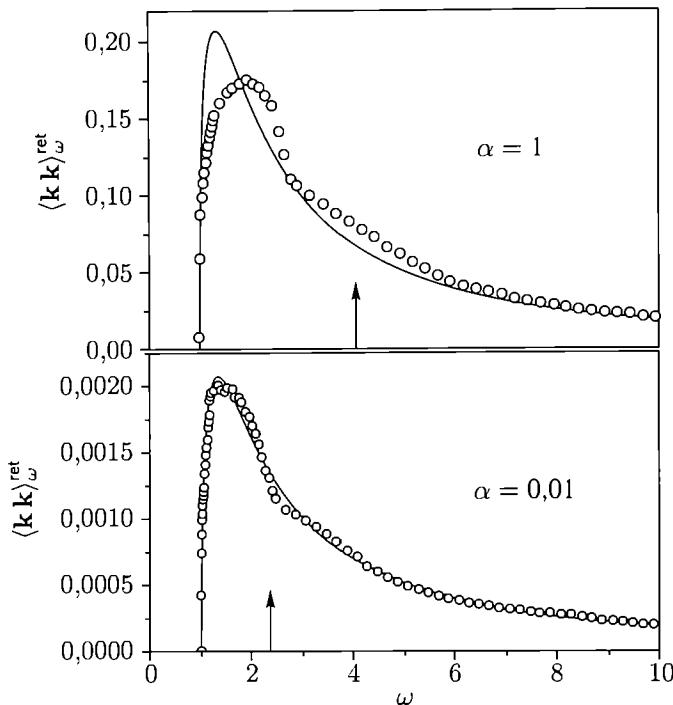


Рис. 12.86. Сравнение между рассчитанным в технике ДМК коррелятора «ток–ток» (кружки) и результаты теории возмущений (линии) для модели Фрелиха. Стрелками обозначены положения аномалий, которые наблюдались в функции Лемана

Для того чтобы проверить степень достоверности и эффективность метода, был сделан расчет для трехмерного полярона Холстейна в режиме слабой связи ( $t = 2$ ,  $\omega_0 = 0,1$ ,  $\gamma = 0,1$ ). Для проверки рассчитан спектр коррелятора импульс–импульс (а не спектр коррелятора ток–ток, что необходимо для вычисления оптической проводимости), так как спектр этого коррелятора обладает, в отличии от коррелятора ток–ток, резкими особенностями, которые связаны с сингулярностями Ван Хова. Результаты ДМК сравниваются на рис. 12.85 с результатом теории возмущений

$$\sigma_{\alpha\alpha}(\omega) = \sigma(\omega) = \frac{\gamma^2}{8\pi^2\omega} \int_{BZ} q_\alpha^2 \delta(\omega - \omega_0 - \varepsilon(\mathbf{q})) d^3q. \quad (12.234)$$

В вышеприведенной формуле интеграл берется по зоне Бриллюэна. Отметим, что проведенный тест находится в прекрасном согласии с теорией возмущений: воспроизводится не только низкоэнергетическая часть, но и резкие пики в области высоких частот.

В отличие от случая полярона Холстейна, для полярона Фрелиха результат ДМК не согласуется с теорией возмущений даже для очень маленькой константы связи  $\alpha = 0,01$  (см. рис. 12.86). Это отклонение возникает благодаря сингулярной  $1/q$ -зависимости константы связи. Следует отметить, что положения аномалий в оптической проводимости  $\sigma(\omega)$  и функции Лемана

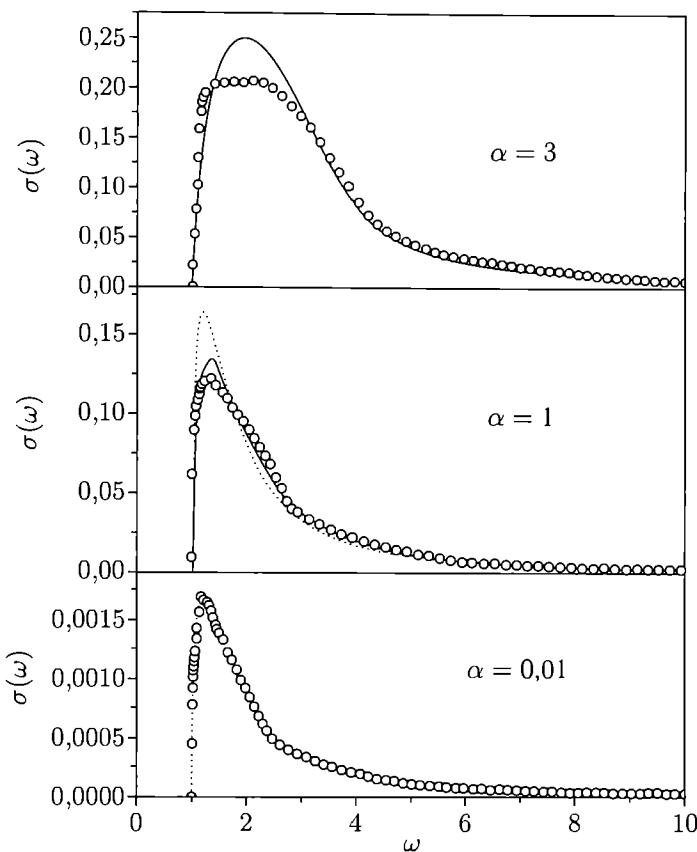


Рис. 12.87. Оптическая проводимость полярона Фрелиха в режиме слабой связи, полученная методом ДМК (открытые кружки) в сравнении с результатом теории возмущений второго порядка (пунктир), и результаты расчетов методом ДСГ [280] (сплошные линии)

$L(\omega)$  коррелируют. Отклонение теории возмущений от точного результата для функции Лемана  $L(\omega)$  можно объяснить корневой расходимостью результата теории возмущений  $L(\omega) \sim 1/\sqrt{\omega - \omega_0}$  возле порога. Подобный аргумент, однако, не может быть применен к оптической проводимости, которая стремится к нулю на пороге поглощения  $\sigma(\omega) \sim \sqrt{\omega - \omega_0}/\omega^3$ . Следовательно, аномалии в спектрах характеристик возбужденных состояний следует приписать особой структуре возбужденных состояний, которая не описывается в рамках теории возмущений, в моделях с дальнодействующим потенциалом взаимодействия. Если не считать слабой аномалии при  $\omega \sim 3$ , спектр оптической проводимости находится в хорошем согласии с теорией возмущений второго порядка при  $\alpha = 0,01$  (см. рис. 12.87).

В режиме промежуточной связи  $3 < \alpha < 7$  можно заметить (рис. 12.88), что положение максимума спектра действительно следует предсказаниям подхода ДСГ [280], а также других работ [277–279], которые поддерживают концепцию РВС. Кроме того, низкочастотное поведение оптической проводимости в подходе ДСГ также согласуется с результатами ДМК.

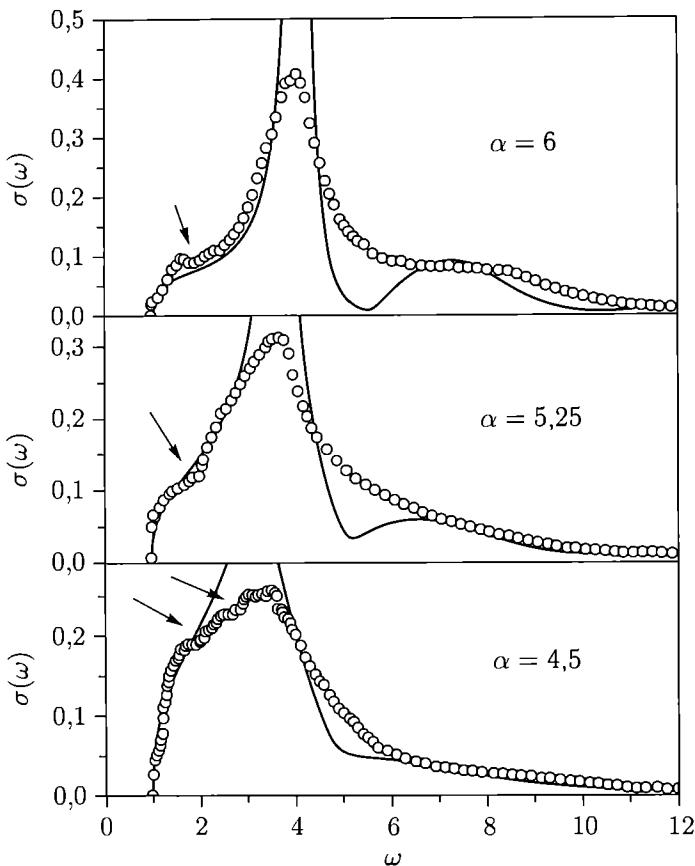


Рис. 12.88. Оптическая проводимость в режиме промежуточной связи (открытые кружки) в сравнении с результатами подхода ДСГ (сплошные линии). Стрелки указывают на аномалии в спектре поглощения, которые возникают на двух- и трехфононных порогах

**12.5.5. Полярон в модели Рашибы–Пекара.** В этом разделе при помощи метода ДМК рассмотрена типичная модель полярона, взаимодействующего с бездисперсными оптическими фононами. Для этой модели можно математически строго определить явление автолокализации и количественно проанализировать основные черты этого явления. Ниже показано, как различные свойства полярона (энергия, эффективная масса, закон дисперсии и структура поляронного облака) изменяются при переходе от слабой связи к сильной. Данные получены точным методом ДМК и свободны от приближений.

Гамильтониан изучаемой системы имеет стандартный вид (12.222), (12.224) и (12.225). Дисперсия трехмерной континуальной модели имеет вид  $\varepsilon(k) = k^2/2m$ , оптические фононы бездисперсны,  $\omega_q = \omega_0$ , а  $\gamma(q)$  — константа взаимодействия.

Отметим, что аналитическое продолжение методом стохастической оптимизации является единственным возможным методом, так как в проблеме автолокализации ожидается, что функция Лемана (12.176) может содержать

несколько острых  $\delta$ -функциональных пиков в щели под некогерентным континуумом. Отделяя стабильные квазичастичные состояния (пронумерованные индексом  $i$ ) от континуума, можно переписать уравнение (12.176) в виде

$$L^{(k)}(\omega) = \sum_i Z_i^{(k)}(0) \delta\left(\omega - E_i^{(k)}\right) + \int_{\omega_c} s^{(k)}(\omega) d\omega, \quad (12.235)$$

где  $Z_i^{(k)}(0)$  и  $E_i^{(k)}$  —  $Z$ -факторы и энергии стабильных состояний, а порог континуума расположен на энергии  $\omega_c = E_0^{(k=0)} + \omega_0$ . Любое состояние, энергия которого выше порога  $E > \omega_c$ , является нестабильным по отношению к одиночному ( $n = 1$ ) или многофононному ( $n > 1$ ) процессу эмиссии  $E \rightarrow E_i^{(p)} + n\omega_0$ , где импульс  $p$  ограничен только законом сохранения энергии, так как фонон не имеет дисперсии.

Строго говоря, под автолокализацией понимается существование некоторой области в пространстве параметров гамильтонiana  $H$ , в которой наблюдается существование двух и более стабильных состояний полярона, существенно различающихся степенью поляризации решетки. Это определение подразумевает три критических константы связи:

$$\alpha_{c1}(k) < \alpha_c(k) < \alpha_{c2}(k). \quad (12.236)$$

Точка автолокализации  $\alpha_c$  понимается как точка, в которой система избежала пересечения уровней за счет гибридизационного отталкивания. В этой точке основное состояние полярона является гибридом состояний с существенно различным искажением решетки. Критические точки  $\alpha_{c1}$  и  $\alpha_{c2}$  соответствуют появлению и исчезновению дополнительных стабильных состояний соответственно. (По определению, разница энергий между основным и первым возбужденным стабильным состоянием  $\Delta E^{(k)}(\alpha)$ , которая минимальна при  $\alpha_c(k)$ , должна быть меньше, чем  $\omega_c - E_0^{(k)}$ ). Определение введенных выше критических констант не противоречит ранее используемым определениям и имеет то преимущество, что является однозначным и строгим даже в том случае, когда минимальная щель  $\Delta E^{(k)}(\alpha_c(k))$  не является малой. При взаимодействии с акустическим фононами возбужденные состояния полярона имеют конечные времена жизни. Однако когда энергетическая щель между основным и возбужденным состояниями становится малой, время жизни стремится к бесконечности ввиду стремления к нулю вероятности испускания длинноволнового фона.

Типичной системой, которая в соответствии с критериями существования барьера [282] демонстрирует явление автолокализации, является модель Рашибы–Пекара [283]. В этой модели экситон Ванье в основном  $1s$ -состоянии взаимодействует с оптическими фононами через электростатический потенциал [282]:

$$\gamma(q) = V(q) \left\{ \frac{1}{\left(1 + (\xi_e a_B q)^2\right)^2} - \frac{1}{\left(1 + (\xi_h a_B q)^2\right)^2} \right\}, \quad (12.237)$$

где  $V(\mathbf{q})$  — стандартное взаимодействие Фрелиха (12.170)

$$V(\mathbf{q}) = i \left( 2\sqrt{2} \alpha \pi \right)^{1/2} q^{-1}. \quad (12.238)$$

Здесь  $a_B$  — боровский радиус;  $\xi_{e,h} = m_{e,h} / [2(m_e + m_h)]$ ;  $m_e$  ( $m_h$ ) — масса электрона (дырки). В дальнейшем рассмотрены свойства системы при параметрах, соответствующих кривой 2 в работе [283], которые, как показано в [283], приводят к автолокализации в рамках приближения сильной связи. Если положить равными единице полную массу экситона  $m = m_e + m_h$ , частоту фона  $\omega_0$ , заряд электрона и постоянную Планка, то значение массы электрона получится равным  $m_e = 0,065$ . Боровский радиус может быть использован для изменения степени адиабатичности модели. Ниже будет детально изучен «почти адиабатический случай» с  $U_B/\omega_0 = 2$  (что имеет место при  $a_B = 0,467$ ), и описаны особенности «неадиабатической» ситуации с  $U_B/\omega_0 = 0,5$  ( $a_B = 0,934$ ). Критические константы связи, определенные в рамках приближения сильной связи [283], равны соответственно  $\alpha_c^{ad} \approx 14,3$  и  $\alpha_c^{ad} \approx 7,2$ .

На рис. 12.89 показано, как свойства основного состояния ( $\mathbf{k} = 0$ ) зависят от константы связи. Энергия основного состояния, эффективная масса  $m^*$  и среднее число фононов в поляроном облаке

$$\langle N \rangle = \left\langle \mathbf{k} = 0 \left| \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} \right| \mathbf{k} = 0 \right\rangle, \quad (12.239)$$

демонстрируют драматические изменения свойств системы в окрестности точки  $\alpha_c \approx 18,35$ . В этой точке производная энергии по константе связи имеет пик,  $\langle N \rangle$  и  $m^*$  резко, почти что ступенчатым образом, возрастают. Например, в узкой области констант связи между  $\alpha \approx 17,5$  и  $\alpha \approx 19$  эффективная масса возрастает на два порядка величины. Важным фактом является то, что в точке  $\alpha_c$  приближение сильной связи все еще не является хорошим приближением (пунктирная линия на верхнем графике рис. 12.89). Более того, критическая константа приближения сильной связи  $\alpha_c^{sc} \sim 21$  [284] существенно отличается от полученного в точном решении значения  $\alpha_c \approx 18,35$ . Для «неадиабатического» случая поведение свойств основного состояния качественно то же самое, а количественные отклонения от приближения сильной связи больше.

Также изучена эволюция фононного облака в области перехода автолокализации. Парциальные веса  $n$ -фононных вкладов в основное состояние полярона  $Z_0^{(k)}(n)$  являются вероятностями найти в облаке  $n$  фононов, а среднее число фононов, определенное ранее, есть ни что иное как  $\langle N \rangle = \sum_N n Z(n)$ .

Рисунок 12.90 показывает распределение  $Z_0^{(k=0)}(n)$  при  $\alpha = 18$  (ниже точки перехода),  $\alpha = \alpha_c = 18,35$  и  $\alpha = 19$  (локализованное состояние). Видно, что распределение при  $\alpha_c$  имеет два пика и является промежуточным между двумя предельными случаями. Однако в «неадиабатическом» случае двухпиковая структура в  $Z(n)$  отсутствует. Следовательно, особое поведение, представленное на рис. 12.89 — общая черта явления автолокализации, в то время как

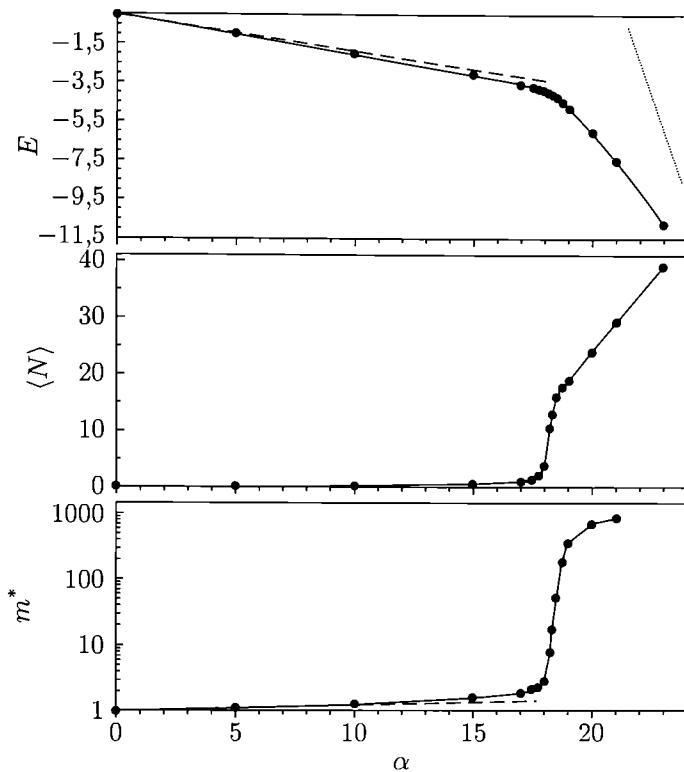


Рис. 12.89. Энергия основного состояния, среднее число фононов и эффективная масса как функции константы связи  $\alpha$  (соединенные сплошной линией точки). Относительные статистические ошибки меньше  $10^{-3}$  и  $10^{-2}$  для энергии и  $\langle N \rangle$  соответственно. Относительные статистические ошибки для эффективной массы порядка  $10^{-2}$  для  $\alpha < 18,5$  и около  $5 \times 10^{-2}$  для больших констант связи. Штриховые линии показывают результаты теории возмущений, пунктирная линия соответствует режиму сильной связи

двуухпиковая структура распределения по числам фононов специфична для адиабатического предела.

**12.5.6. Задача об экситоне.** Самый простой гамильтониан экситона [285, 286] состоит из вкладов валентной зоны и зоны проводимости  $H_0$  и взаимодействия  $H_{e-h}$ :

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_c(\mathbf{k}) e_{\mathbf{k}}^+ e_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_v(\mathbf{k}) h_{\mathbf{k}}^+ h_{\mathbf{k}}; \quad (12.240)$$

$$H_{e-h} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \mathcal{U}(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') e_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}^+ h_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}^+ h_{\mathbf{p}-\mathbf{k}'} e_{\mathbf{p}+\mathbf{k}'}. \quad (12.241)$$

Здесь  $e_{\mathbf{k}}$  ( $h_{\mathbf{k}}$ ) — оператор уничтожения электрона (дырки);  $\varepsilon_c(\mathbf{k})$  ( $\varepsilon_v(\mathbf{k})$ ) — закон дисперсии зоны проводимости (валентной зоны);  $N$  — число узлов решетки;  $\mathcal{U}(\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{k}')$  — притягивающий потенциал взаимодействия.

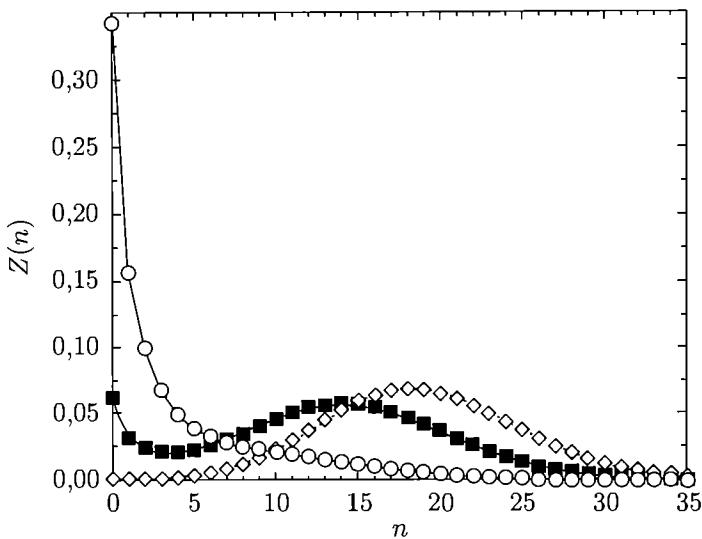


Рис. 12.90. Парциальные веса  $n$ -фононных состояний основного состояния полярона ( $k = 0$ ) при  $\alpha = 18$  (кружки),  $\alpha = 18,35$  (квадраты) и  $\alpha = 19$  (ромбы). Статистические ошибки порядка  $3 \times 10^{-3}$  и меньше размеров символов

Наиболее развитым до настоящего времени являлся метод численного решения уравнения Бете–Солпитера [287–289]. Однако уравнение в рамках этого метода решается на конечной сетке точек, что является источником систематических ошибок. В результате этого метод иногда неприменим даже в классическом режиме Ванье [289]. Таким образом, не существовало метода, который был способен точно решать задачу экситона во всем диапазоне от режима Френкеля до режима Ванье.

В этом разделе описывается метод ДМК, который позволяет получить свойства основного состояния модели экситона (12.240)–(12.241) без систематических ошибок для произвольных дисперсий зоны проводимости  $\varepsilon_c(\mathbf{k})$  и валентной зоны  $\varepsilon_v(\mathbf{k})$ . Метод может быть использован для произвольного притягивающего потенциала  $U(p, \mathbf{k}, \mathbf{k}')$  (если  $U(p, \mathbf{k}, \mathbf{k}')$  не является положительно определенным, то метод не работает ввиду проблемы знака). Показано, как проблема экситона трактуется в рамках общего метода ДМК [78, 191, 251], который может суммировать положительно определенные ряды диаграмм Фейнмана для двухчастичной Мацубаровской функции Грина  $G$  в случае экситона. Затем обсуждаются различные эстиматоры для проблемы экситона. Метод применяется к модели сильной связи, в рамках которой исследуются условия применимости приближений Френкеля и Ванье. Для этого выбрана простая кубическая трехмерная решетка с законами дисперсии для валентной зоны и зоны проводимости в виде

$$\varepsilon_{c,v}(\mathbf{k}) = \tilde{E}_{c,v} \pm \frac{E_{c,v}}{6} \sum_{\alpha} (1 - \cos k_{\alpha}), \quad (12.242)$$

а притягивающий потенциал представлен в виде стандартной суммы  $U(p, \mathbf{k}, \mathbf{k}') = V_0 - W(2p) + U(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$  внутриузельного  $V_0$ , дипольного  $W(2p)$

и монопольного  $U(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$  членов [285]. В зависимости от выбора параметров этого потенциала можно покрыть весь диапазон от режима Ванье до Френкеля и решить фундаментальную проблему о пределах применимости этих режимов. Следует заметить, что такой выбор сделан только для простоты. Для реальных систем техника ДМК идентична и параметры гамильтонiana (12.240), (12.241) можно получать методами из работ [287–289].

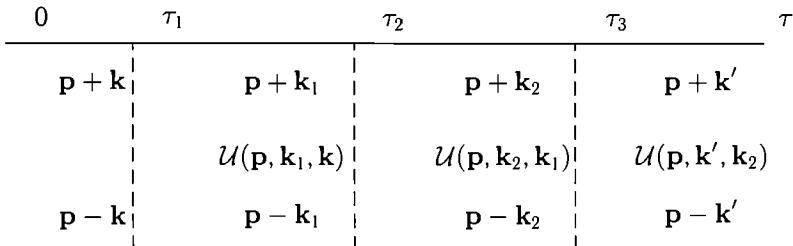


Рис. 12.91. Типичная диаграмма, вносящая вклад в разложение  $G_p^{kk'}(\tau)$

Двухчастичная функция Грина с полным импульсом  $2\mathbf{p}$  на мнимом времени определена выражением

$$G_p^{kk'}(\tau) = \left\langle 0 \left| e_{p+k'}(\tau) h_{p-k'}(\tau) h_{p-k}^+ e_{p+k}^+ \right| 0 \right\rangle, \quad (12.243)$$

где вакуум  $|0\rangle$  соответствует пустой зоне проводимости и заполненной валентной зоне, а  $h_{p-k}(\tau) = e^{H\tau} h_{p-k} e^{-H\tau}$ ,  $\tau > 0$ . В представлении взаимодействия  $G$  может быть представлена в виде суммы лестничных диаграмм Фейнмана (рис. 12.91): пары горизонтальных линий представляют собой propagator свободной электрон-дырочной пары

$$G_p^{(0)}(\mathbf{k}, \tau_2 - \tau_1) = \exp(-\varepsilon(\mathbf{k})(\tau_2 - \tau_1)), \quad (12.244)$$

где  $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_c(\mathbf{p} + \mathbf{k}) - \varepsilon_v(\mathbf{p} - \mathbf{k})$  — энергия пары, а штриховые линии представляют потенциал взаимодействия.

Формально диаграммное разложение для  $G$  имеет форму суммы многомерных интегралов

$$G_p^{kk'}(\tau) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{\xi_m} \int F_p^{kk'}(\tau; \xi_m; x_1, \dots, x_m) dx_1 \dots dx_m, \quad (12.245)$$

где  $x_1, \dots, x_m$  — внутренние переменные (времена и импульсы,  $x_i = (\tau_i, \mathbf{k}_i)$ ), суммирование по  $\xi_m$  перебирает разные диаграммы порядка  $m$ , а «вес»  $F$  дается произведением электрон-дырочных propagаторов и вершин взаимодействия. В ходе генерации диаграмм применяются стандартные обновления ДМК, которые либо изменяют число вершин взаимодействия, либо изменяют внутренние и внешние параметры диаграммы без изменения ее порядка.

Ниже приведен вывод формул для извлечения информации об основном состоянии системы из асимптотического поведения  $G(\tau \rightarrow \infty)$ . Собственное

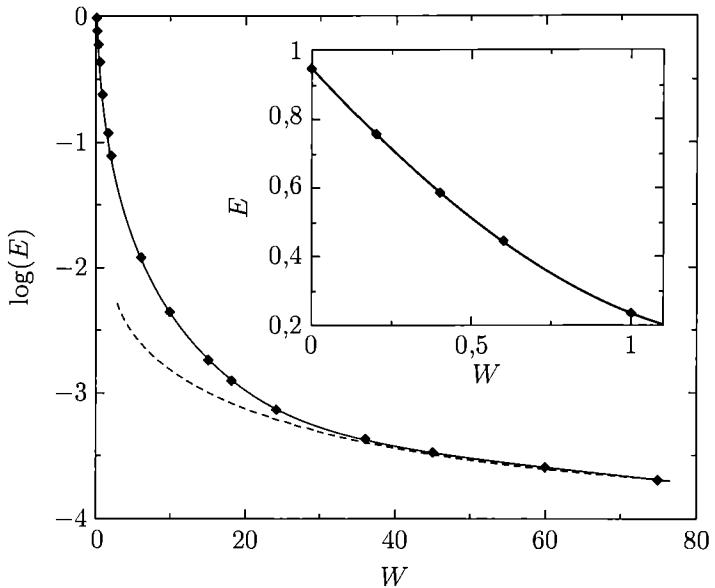


Рис. 12.92. Зависимость энергии связи экситона от ширины зон  $E_c = E_v$ . Статистические ошибки в относительных единицах меньше, чем  $5 \times 10^{-3}$ . Штриховая линия соответствует приближению Ванье. Сплошная линия — кубический сплайн, производные которого фиксированы на правом и левом конце пределом Ванье и теории возмущений, соответственно. Врезка — начальная часть графика

состояние  $|\nu; p\rangle$  с энергией  $E_\nu$  может быть записано в виде

$$|\nu; p\rangle \equiv \sum_k \xi_{pk}(\nu) e_{p+k}^+ h_{p-k}^+ |0\rangle. \quad (12.246)$$

где амплитуды  $\xi_{pk}(\nu) = \langle \nu; p | e_{p+k}^+ h_{p-k}^+ | 0 \rangle$  описывают волновую функцию внутреннего движения в экситоне. При помощи собственных состояний можно записать

$$G_p^{k=k'}(\tau) = \sum_\nu |\xi_{pk}(\nu)|^2 e^{-E_\nu \tau}, \quad (12.247)$$

и если  $\tau$  много больше чем обратная разница энергий между основным и первым возбужденным состоянием, функция Грина проектируется на основное состояние

$$G_p^{k=k'}(\tau \rightarrow \infty) = |\xi_{pk}(g.s.)|^2 e^{-E_{g.s.} \tau}. \quad (12.248)$$

Благодаря условию нормировки  $\sum_k |\xi_{pk}(\nu)|^2 \equiv 1$  асимптотическое поведение суммы  $\tilde{G}_p = \sum_k G_p^{k=k'}$  является особенно простым:  $\tilde{G}_p \rightarrow e^{-E_{g.s.} \tau}$ . Это асимптотическое поведение позволяет получить значения энергии и амплитуд при фиксированном  $\tau$  (достаточно большом, чтобы сделать соответствующую систематическую ошибку пренебрежимо малой), используя технику эстиматоров. После дифференцирования функции  $\tilde{G}(\tau)$  по  $\tau$  получается следующее

выражение (см. [78]):

$$E_{g.s.} = \frac{1}{\tau} \left\langle \sum_{j=1}^{m+1} \varepsilon^j(k) \Delta \tau_j - m \right\rangle_{MC}, \quad (12.249)$$

где  $\langle \dots \rangle_{MC}$  — усреднение по процессу ДМК,  $m$  — порядок диаграммы,  $\varepsilon^j(k)$  и  $\Delta \tau_j$  — энергия электрон-дырочной пары и длительность  $j$ -го пропагатора соответственно. Работа с функцией  $\tilde{G}$  вносит следующую формальную проблему. Диаграммы нулевого и первого порядка (по отношению к вершине  $U(p, k, k' = k)$ ) содержат макроскопически большой множитель  $N$ . Однако, если интересоваться только свойствами основного состояния, эти диаграммы могут быть опущены, так как они не вносят вклада в пределе  $\tau \rightarrow \infty$ . По определению, в пределе  $\tau \rightarrow \infty$  имеет место равенство  $G_p^{k=k'} / \tilde{G}_p = |\xi_{pk}(g.s.)|^2$ , т. е. распределение по квазимпульсу  $k$ , которое связано с волновой функцией внутреннего движения, может быть получено при генерации функции  $G_p^{k=k'}$  при условии  $k = k'$ . Этот набор диаграмм соответствует циркулярному представлению и, следовательно, позволяет применить технику улучшенных эстиматоров (см. п. 12.5.2.3 и [78]). Волновая функция связанного состояния может быть выбрана действительной и, следовательно, при помощи преобразования Фурье можно получить величину  $|g.s.\rangle$  в прямом пространстве. Если величина  $|\xi_{pk}(g.s.)|^2$  не имеет точек, в которых меняется знак, амплитуды  $\xi_{pk}(g.s.)$  могут быть выбраны положительными. Так как  $G_p^{kk'}(\tau)$  получается из суммы положительно определенных диаграмм, то величина  $\xi_{pk}(g.s.)$  знака не меняет.

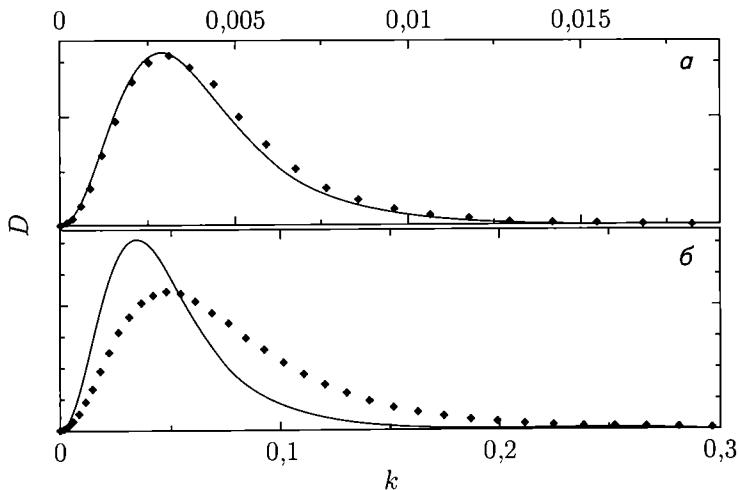


Рис. 12.93. Зависимость плотности заряда  $D$  от импульса  $E_c = E_v = 60$  (а) и  $E_c = E_v = 10$  (б). Сплошные линии — результат модели Ванье. Статистические ошибки порядка  $10^{-4}$

Чтобы проследить переход от режима Ванье к режиму Френкеля, ниже приведены результаты для экситона с нулевым импульсом  $p = 0$  в простой

кубической трехмерной решетке с зонной дисперсией (12.242). Выбор параметров взаимодействия был мотивирован возможностью покрыть все режимы от режима Френкеля до режима Ванье при помощи изменения отношения ширин зоны и щели. Таким образом, расчеты были проведены при  $\tilde{E}_v = 0$ ,  $E_g \equiv \tilde{E}_c = 1$ ,  $W(2p = 0) = -0,168$ ,  $V_0 = 0,778$ . Значения члена  $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \sum_{\lambda \neq 0} \exp(iqr_{\lambda}) / R_{\lambda} \epsilon(r_{\lambda})$  рассчитывалось при  $\epsilon(r) = 10$  (заряд

электрона положен равным единице) при помощи обобщенного метода Эвальда [290]. Для этих параметров энергия связи в пределе Френкеля  $E_{FL}$  ( $E_{c,v} \ll E_g$ ) меньше ширины щели,  $E_{FL} = V_0 - W(2p = 0) + \sum_q U(q) = 0,946$ ,

что обеспечивает стабильность экситона для всех значений  $E_{c,v}$ . В пределе Ванье, когда ширина зоны велика,  $E_{c,v} \gg E_g$ , энергия связи приближается к асимптотике  $3/(2\epsilon^2 E_c)$  (при  $E_v = E_c$ ). Естественно, параметры удовлетворяют условию, что  $\mathcal{U}(p, k, k')$  — положительно определенная функция. Результаты для энергии связи и волновой функции показаны на рисунках 12.92–12.94. Следует заметить, что метод работает одинаково хорошо во всех режимах: статистические ошибки много меньше размера символа во всех точках. Для больших значений  $\frac{E_c}{E_g} > 30$  энергия связи находится в прекрасном согласии с результатом Ванье (см. рис. 12.92). Кроме того, плотность вероятности внутреннего движения в обратном и прямом пространстве соответствует водородоподобному результату (см. рис. 12.93, a и рис. 12.94, a).

### 12.5.7. Дырка с электрон-фононным взаимодействием в $t$ - $J$ -модели.

В последнее время возобновился интерес к роли электрон-фононного взаимодействия в купратах. Сильное электрон-фононное взаимодействие необходимо для объяснения перенормировки и формы линии фононов [291, 292]; больший изотопический эффект в температуре сверхпроводящего перехода  $T_c$  (в недодопированных образцах) и в сверхтекучей плотности при оптимальном допировании подразумевают важную роль электрон-фононного взаимодействия [293].

В рамках метода ДМК можно точно провести как полное, так и ограниченное суммирование диаграмм Фейнмана. Здесь рассматривается двумерная модель Холстейна. В этой модели дырка перемещается с амплитудой  $t$  (в дальнейшем  $t$  положено равным единице) и взаимодействует с бездисперсными (частота  $\Omega = \text{const}$ ) оптическими фононами посредством короткодействующего взаимодействия

$$H_{e-ph} = \Omega \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + \frac{1}{N} \gamma \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (h_{\mathbf{k}}^+ h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} b_{\mathbf{k}} + h.c.). \quad (12.250)$$

Далее представлены результаты изучения методом ДМК одной дырки, взаимодействующей с бездисперсными оптическими фононами. Показано, что благодаря замедлению дырки облаком флюктуирующих спинов, дырка в  $t$ - $J$ -модели подвергается более сильному влиянию электрон-фононного взаимодействия и, следовательно, переходит в режим сильной связи при меньших константах связи с фононами. Этот результат опровергает наивные ожидания, что малый  $Z$ -фактор квазичастицы уменьшает влияние электрон-фононного

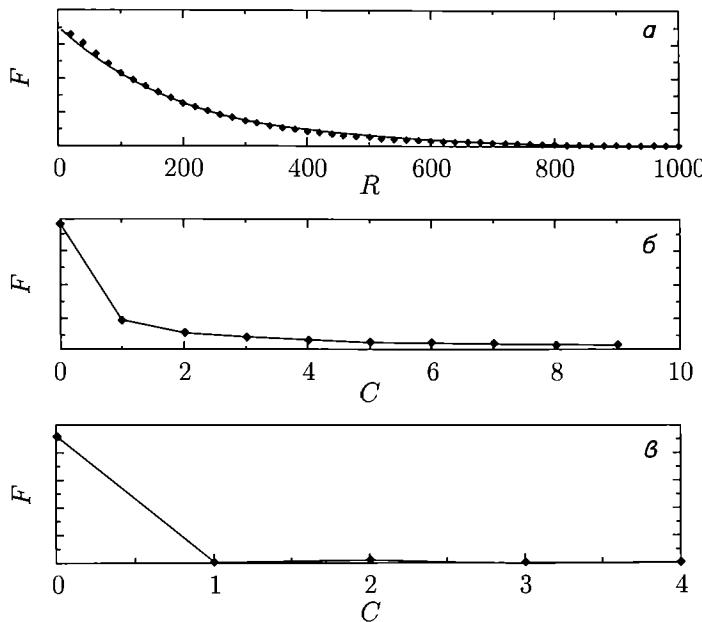


Рис. 12.94. Волновая функция внутреннего движения в прямом пространстве: режим Ванье  $E_c = E_v = 60$  (а); режим промежуточного радиуса  $E_c = E_v = 10$  (б); режим Френкеля  $E_c = E_v = 0,4$  (в). Хотя волновая функция в режиме Ванье почти сферически симметрична, симметрия в промежуточном режиме и режиме Френкеля определяется решеткой, поэтому в этом случае естественной абсциссой является номер координационной сферы. Сплошная линия на панели (а) — результат модели Ванье, на остальных панелях — просто для соединения точек. Статистические ошибки порядка  $10^{-4}$

взаимодействия. Кроме того, получено, что переход в режим сильной связи происходит при константах связи, которые типичны для высокотемпературных сверхпроводников.

В стандартном спин-волновом приближении в импульсном представлении [294] бездисперсная дырка  $\varepsilon_0 = \text{const}$  движется в магнонной бане:

$$H_{t-J}^0 = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_0 h_{\mathbf{k}}^+ h_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} \quad (12.251)$$

с дисперсией магнонов

$$\omega_{\mathbf{k}} = 2J \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}, \quad (12.252)$$

где

$$\gamma_{\mathbf{k}} = (\cos k_x + \cos k_y)/2. \quad (12.253)$$

Дырка рассеивается магнонами

$$H_{t-J}^{h-m} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} M_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (h_{\mathbf{k}}^+ h_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k}} + h.c.) \quad (12.254)$$

с вершиной рассеяния

$$M_{k,q} = 4t(u_q\gamma_{k-q} + v_q\gamma_k), \quad (12.255)$$

где

$$\begin{aligned} u_k &= \sqrt{(1 + \nu_k)/2\nu_k}, \\ v_k &= -\text{sign}(\gamma_k)\sqrt{(1 - \nu_k)/2\nu_k}, \end{aligned} \quad (12.256)$$

и

$$\nu_k = \sqrt{1 - \gamma_k^2}. \quad (12.257)$$

Фононная частота положена равной  $\Omega = 0,1$ , что соответствует экспериментальному значению: значение  $t$  изменяется в высокотемпературных сверхпроводниках в диапазоне  $t \approx 0,3\text{--}0,43$  эВ [295, 296], а энергия фононов, которые взаимодействуют с дыркой, меньше чем 55–80 мэВ [257]. Приведенные ниже результаты практически не изменяются, если использовать другие значения  $\Omega/t$  в рамках общепринятого для описания купратов [291] диапазона 0,1–0,2. Диаграммы генерируются методом ДМК в импульсном представлении для бесконечной системы при нулевой температуре. Затем функция Лемана получается методом стохастической оптимизации. В разложении пренебрегается диаграммами, в которых присутствует пересечение магнонов и фононов (чтобы избежать проблемы знака, возникающей вследствие зависимости вершины  $M_{k,q}$  от импульсов), но учитываются диаграммы с взаимным пересечением фононных пропагаторов (см. рис. 12.95). Сравнение данных ДМК с результатами работ [294] показывает, что поправки на конечность системы слабо влияют на энергию и  $Z$ -фактор низшего пика: относительное отклонение от результатов ДМК в макроскопической системе не превышают  $10^{-2}$ .

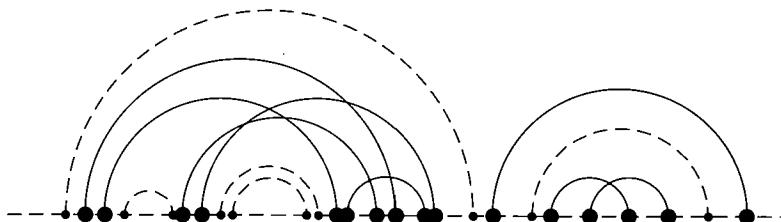


Рис. 12.95. Типичная диаграмма, вносящая вклад в функцию Грина: сплошные (штриховые) арки представляют собой фононные (магнонные) пропагаторы

На рис. 12.96 представлены результаты для функции Лемана в основном состоянии. Три низкочастотных пика при  $g = 0$  являются резонансами линейного потенциала (рис. 12.96, *a*), так как их энергии, как получено в результате расчетов в интервале  $0,1 < J < 0,4$ , удовлетворяют закону  $a + b_i(J/t)^{2/3}$  ( $a = -3,13$ ;  $b_{1,2,3} = 4,89/2,09/1,63$ ) [297]. На нижней части рис. 12.96 показаны типичные функции Лемана в режиме слабой (рис. 12.96, *б*), промежуточной (рис. 12.96, *в*) и сильной связи (рис. 12.96, *г*) по взаимодействию с фононами. При увеличении  $g$  все три пика наблюдаются вплоть до значений  $g = 0,21$  (рис. 12.96, *б* и рис. 12.96, *в*), а пик с наибольшей энергией уширяется и исчезает при более высоких константах связи (рис. 12.96, *г*).

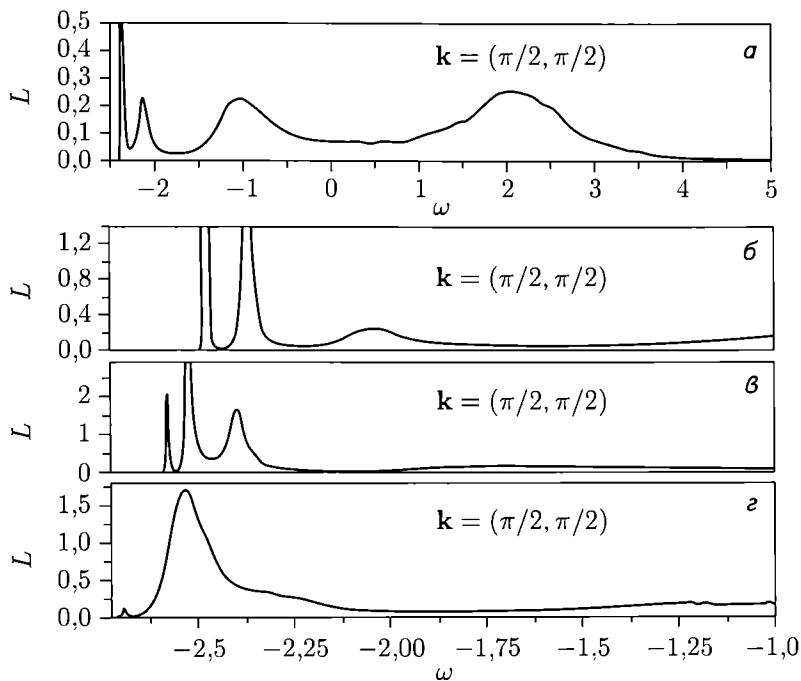


Рис. 12.96. Функция Лемана дырки при  $J/t = 0,3$ :  $g = 0$  (а); низкочастотная часть для  $g = 0,1445$  ( $\gamma = 0,34$ ) (б);  $g = 0,2$  ( $\gamma = 0,2$ ) (в);  $g = 0,231125$  ( $\gamma = 0,43$ ) (г)

## 12.6. Обобщенный диаграммный метод Монте-Карло

В этом разделе рассматривается еще один диаграммный метод Монте-Карло, позволяющий решить важную проблему резонансного взаимодействия фермиона, взаимодействующего с остальными фермионами с другой проекцией спина.

**12.6.1. Введение.** В настоящее время не существует общего аналитического или численного метода для исследования квазичастичных свойств произвольной сильнокоррелированной системы. Аналитические решения обычно (за немногими исключениями [298]) основаны на поправках теории возмущений [270, 299] или вариационном подходе [271]. Существуют также численные схемы, но все они имеют ограничения, связанные либо с размерами системы, либо с ее размерностью, либо с учетом взаимодействия или влияния окружения. Метод точной диагонализации и вариационный метод в подпространстве низкоэнергетических состояний [266, 274], как правило, ограничены одномерными моделями с короткодействующим потенциалом взаимодействия. Алгоритмы, работающие в непрерывном времени [267], применимы для решеточных моделей с линейным взаимодействием между частицами и бозонным окружением, но не могут быть обобщены на случай фермионного окружения, взаимодействия с переменным знаком (как в  $t$ - $J$ -модели), они также неприменимы для моделей в непрерывном пространстве.

В этом разделе представлен метод Монте-Карло, моделирующий серии фейнмановских диаграмм для расчета собственно энергетических диаграмм. Диаграммный метод Монте-Карло, рассмотренный выше, применялся для исследования электрон-фононных поляронов [78, 191]. Особенностью диаграммного метода Монте-Карло является интерпретация суммы всех фейнмановских диаграмм как процедуры усреднения по ансамблю в соответствующем конфигурационном пространстве. Существенным обстоятельством для успешной работы метода является сходимость и положительная определенность последовательностей диаграмм для функции Грина. Хотя конфигурационное пространство диаграмм для поляронов в ферми-системах является более сложным, подобная техника работы с соответствующим конфигурационным пространством может быть использована и в этом случае. Главной отличительной особенностью является знакопеременность и расходимость (по крайней мере, в случае сильного взаимодействия) рядов для ферми-систем. Прямое суммирование всех фейнмановских диаграмм, дающих вклад в статистику функции Грина, в этом случае невозможно, и необходимо разработать дополнительные методы для: 1) сокращения числа диаграмм путем вычисления собственно энергетических диаграмм, а не функции Грина; 2) применения техники «ужирнения» линии в уравнении Дайсона, что позволяет провести самосогласованное суммирование бесконечных геометрических рядов, что еще больше сокращает число собственно энергетических диаграмм; 3) если необходимо, экстраполяции результатов, полученных диаграммным методом Монте-Карло, на диаграммы бесконечного порядка для расходящихся рядов. Метод, представленный в этом разделе, лишен всех вышеупомянутых ограничений, с его помощью могут быть получены разумные результаты даже для знакопеременных рядов.

В качестве практического применения метода рассмотрим задачу о частице, взаимодействующей с идеальным морем Ферми посредством короткодействующего потенциала с расходящейся длиной  $s$ -рассеяния. Эта задача является ключевой для понимания фазовой диаграммы газа Ферми с разбалансом заселенностей [300, 301]. В частности, для конструирования функционала энергии, описывающего разреженные растворы фермионов со спином вниз, резонансно взаимодействующих с большим числом фермионов со спином вверх, необходимо точно знать квазичастичные параметры фермионов со спином вниз, так как они определяют коэффициенты в разложении энергии по степеням концентрации фермионов со спином вниз  $n_{\downarrow}$ : линейное слагаемое определяется полярной энергией, а слагаемое, пропорциональное  $n_{\downarrow}^{5/3}$ , определяется массой полярона [301].

Типичный гамильтониан, который будет рассматриваться в этом разделе, выглядит следующим образом:

$$H = H_F - \frac{\Delta_R}{2m} + \int V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}') d\mathbf{r}, \quad (12.258)$$

где  $H_F$  — гамильтониан идеального ферми-газа со спином вверх с плотностью  $n$  и импульсом Ферми  $k_F$ ,  $\mathbf{r}$  — координата частицы,  $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  — потенциал взаимодействия конечного радиуса  $r_0$  между частицей и ферми-газом со

спином вверх. Выражение (12.258) будем в дальнейшем называть проблемой ферми-полярона. Существуют две особенности физики кроссовера БКШ — БЭК в сильно несбалансированном режиме: во-первых, частица и ферми-газ имеют одну и ту же массу  $m$  (далее будем использовать систему единиц, в которой  $m = 1/2$  и  $k_F = 1$ ); во-вторых, в так называемом резонансном пределе нулевого радиуса, когда  $r_0 \rightarrow 0$ , длина  $s$ -рассеяния  $a$  остается конечной, т. е.  $k_F a$  остается фиксированным при при  $k_F r_0 \rightarrow 0$ . В этом пределе природа потенциала взаимодействия несущественна, и такие же результаты будут получены, например, для нейтронного вещества или атомов цезия. Заметим, что метод, рассматриваемый здесь для численного решения проблемы резонансного ферми-полярона, является абсолютно общим и может быть использован для произвольной модели, описываемой уравнением (12.258).

Оказывается, что структура фазовой диаграммы очень чувствительна к параметрам полярона. Если состояние с разреженным газом фермионов со спином вниз является стабильным при всех значениях  $k_F a$ , тогда решение одночастичной задачи позволит исследовать фазовую диаграмму в непосредственной близости от мультикритической точки [302], в которой соприкасаются фазы. В этой точке фермион со спином вниз образует связанное состояние с фермионом со спином вверх, в результате чего получается бозе-частица («молекула») с суммарным нулевым спином, и статистика квазичастиц меняется радикальным образом. Мультикритическая точка, однако, может быть термодинамически нестабильной, если эффективная длина рассеяния между такими составными бозонами и фермионами со спином вверх достаточно велика, что подтверждают результаты работ [303, 304], основанных на методе Монте-Карло с «фиксированной вершиной» (*fixed node*). Разделение фаз было обнаружено также в вычислениях, основанных на среднеполевом и близким к резонансу подходах (в обоих случаях и при нулевой, и при конечной температуре) [304–307], хотя и с большими количественными отклонениями от результатов метода Монте-Карло с фиксированной вершиной [303]. Экспериментальные результаты, приведенные в [308], находятся в хорошем согласии с предсказаниями, сделанными в [303], в то время как результаты из [309] такого согласия не обнаруживают. Причина различий в результатах экспериментов в [308] и [309] в настоящий момент не ясна. Приводимые ниже результаты находятся в прекрасном согласии с [303].

**12.6.2. Конфигурационное пространство собственно энергетических диаграмм.** Как было отмечено выше, если взаимодействие между фермионами со спинами вниз и вверх достаточно сильное, они образуют составной бозон или молекулярное состояние. В дальнейшем в этом разделе термин «полярон» будет использоваться в узком смысле, т. е. только для несвязанных возбуждений фермионов со спином вниз. Для описания составного бозона будет использоваться термин «молекула». Так как целью является расчет свойств частицы при произвольной силе взаимодействия, необходимо рассмотреть одно- и двухчастичные каналы на равных основаниях. Далее в разделе используются стандартные правила для собственно энергетических диаграмм для обоих каналов с учетом специфики работы в представлении мнимого времени.

**12.6.2.1. Поляронный канал.** Напомним определение одночастичной функции Грина (см., например, [37]):

$$G(\tau, \mathbf{r}) = -\langle T_\tau \psi(\tau, \mathbf{r}) \bar{\psi}(0) \rangle, \quad (12.259)$$

и ее импульсного представления

$$G(\xi, \mathbf{p}) = \int e^{i(\xi\tau - \mathbf{p}\mathbf{r})} G(\tau, \mathbf{r}) d\mathbf{r} d\tau. \quad (12.260)$$

Здесь  $\psi(\tau, \mathbf{r})$  — фермионный оператор уничтожения в точке  $(\tau, \mathbf{r})$ . Для идеального ферми-газа со спином вверх при  $T = 0$  имеем

$$G_\uparrow(\xi, \mathbf{p}) = \frac{1}{i\xi - p^2/2m + \varepsilon_F}. \quad (12.261)$$

Вакуумная функция Грина для полярона со спином вниз задается выражением

$$G_\downarrow^{(0)}(\tau, \mathbf{p}, \mu) = -\theta(\tau) e^{-\left(\frac{p^2}{2m} - \mu\right)\tau}, \quad (12.262)$$

где  $\theta$  — ступенчатая функция,  $\mu$  — свободный параметр. Из уравнения Дайсона для полярона (см. рис. 12.97) находим

$$G_\downarrow(\xi, \mathbf{p}, \mu) = \frac{1}{i\xi - \frac{p^2}{2m} + \mu - \Sigma(\xi, \mathbf{p}, \mu)}, \quad (12.263)$$

где собственно энергетическая диаграмма  $\Sigma$  дается суммой всех неприводимых диаграмм (т.е. диаграмм, которые не могут быть отсоединены разрезанием по линии  $G_\downarrow^{(0)}$ ), взятых с отрицательным знаком. Принимая во внимание, что в  $\tau$ -представлении и  $G_\downarrow$ , и  $\Sigma$  зависят от  $\mu$  только через экспоненциальные факторы  $\exp(\mu\tau)$ , имеем  $G_\downarrow(\xi, \mathbf{p}, \mu) \equiv G_\downarrow(\xi - i\mu, \mathbf{p})$  и  $\Sigma(\xi, \mathbf{p}, \mu) \equiv \Sigma(\xi - i\mu, \mathbf{p})$ :

$$\overline{-G} = \overline{-G^{(0)}} + \overline{-G^{(0)}} \text{---} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \text{---} \text{---}$$

Рис. 12.97. Уравнение Дайсона для одночастичной функции Грина

Если полярон является хорошо определенной квазичастицей, то его энергия  $E(\mathbf{p})$  и  $Z$ -фактор  $Z(\mathbf{p})$  могут быть получены из асимптотики

$$G_\downarrow(\tau, \mathbf{p}, \mu) \rightarrow -Z e^{-(E-\mu)\tau}, \quad \tau \rightarrow \infty. \quad (12.264)$$

Из этого асимптотического поведения с неизбежностью следует, что функция  $G_\downarrow(\xi - i\mu, \mathbf{p})$  имеет полюс

$$G_\downarrow(\xi - i\mu, \mathbf{p}) = \frac{Z(\mathbf{p})}{i\xi + \mu - E(\mathbf{p})} + \text{regular part.} \quad (12.265)$$

Далее, полагая  $\mu = E(\mathbf{p})$  в (12.265) и подставляя результат в (12.263), получаем

$$\frac{i\xi}{Z} = i\xi - \frac{p^2}{2m} + E - \Sigma(0, \mathbf{p}, E) + i\xi A(\mathbf{p}, E), \quad (12.266)$$

где (используем свойство  $\frac{\partial \Sigma}{\partial \xi} = \frac{i\partial \Sigma}{\partial \mu}$ )

$$A(\mathbf{p}, E) = -\frac{\partial \Sigma(0, \mathbf{p}, \mu)}{\partial \mu} \Big|_{\mu=E}. \quad (12.267)$$

Отсюда можно получить два важных соотношения (см. также [37]):

$$E = \frac{p^2}{2m} + \Sigma(0, \mathbf{p}, E), \quad (12.268)$$

$$Z = \frac{1}{1 + A(\mathbf{p}, E)}. \quad (12.269)$$

Уравнение (12.268) позволяет определить  $E$ , если известно  $\Sigma(\tau, \mathbf{p}, \mu)$ . Все что нужно сделать — это рассчитать значение  $\Sigma$  при нулевой частоте и  $\mu = E$ ,

$$E = \frac{p^2}{2m} + \int_0^\infty \Sigma(\tau, \mathbf{p}, \mu) e^{(E-\mu)\tau} d\tau. \quad (12.270)$$

После того как  $E$  найдено,  $Z$ -фактор вычисляется из (12.269) с использованием уравнения

$$A(\mathbf{p}, E) = - \int_0^\infty \tau \Sigma(\tau, \mathbf{p}, \mu) e^{(E-\mu)\tau} d\tau. \quad (12.271)$$

Заметим также, что зависимость от  $\mu$  выпадает из обоих уравнений (12.270) и (12.271).

**12.6.2.2. Молекулярный канал.** В этом случае рассмотрим двухчастичный пропагатор

$$K(\tau, \mathbf{p}) = \langle T_\tau \Phi_p(\tau) \Phi_p^+(0) \rangle, \quad (12.272)$$

где

$$\Phi_p = \int \varphi_q \psi_\uparrow(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \psi_\downarrow(\mathbf{q}) \frac{d\mathbf{q}}{2\pi}, \quad (12.273)$$

и  $\varphi_q$  — парная волновая функция в импульсном представлении, определяющая относительное расстояние между двумя частицами. Если имеется связанное состояние (молекула), то

$$K(\tau, \mathbf{p}, \mu) \rightarrow -Z_{\text{mol}} e^{-(E_{\text{mol}} - \mu)\tau}, \quad \tau \rightarrow \infty, \quad (12.274)$$

и парный пропагатор в частотном представлении имеет полюс:

$$K(\xi - i\mu, \mathbf{p}) = \frac{Z_{\text{mol}}(\mathbf{p})}{i\xi + \mu - E_{\text{mol}}(\mathbf{p})} + \text{regular part.} \quad (12.275)$$

Рассмотрим другую функцию, которая также имеет такой же молекулярный полюс, но обладает более простой диаграммной структурой. Особенностью предела резонансного нулевого радиуса является то, что сумма всех лестничных диаграмм потенциала взаимодействия  $V(r)$  должна рассматриваться как отдельная диаграмма. Обозначим эту сумму через  $\Gamma(\tau, \mathbf{p})$  и будем рассматривать ее как чистый парный пропагатор. Подобный подход может быть применен и в общем случае с заменой явного потенциала взаимодействия

матрицей рассеяния  $T$ , но в резонансно-нулевом пределе нет альтернативных подходов, позволяющих избежать ультрафиолетовой расходимости. Сумма лестничных диаграмм точно учитывает физику в ультрафиолетовом пределе и позволяет выразить  $\Gamma(\tau, p)$  в терминах длины  $s$ -рассеяния  $a$ . Лестничная структура диаграмм, заключенных в  $\Gamma(\tau, p)$ , также объясняет смысл учета  $\Gamma$  как парного пропагатора (изображаемого двойной линией, см. рис. 12.98). Точное выражение для  $\Gamma$  сразу следует из геометрической последовательности:

$$-\Gamma = -V + (-V)^2 \Pi + \dots, \quad (12.276)$$

где поляризационный оператор

$$\Pi(\eta, p) = \int_{q > k_F} \frac{\frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}}{\frac{q^2}{2m} + \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{q})^2}{2m} - \eta}, \quad (12.277)$$

и  $\eta = \omega + \varepsilon_F + \mu$ . Используя подходящую ультрафиолетовую регуляризацию, выражения (12.276) и (12.277) можно записать в универсальной форме с зависимостью только от длины  $s$ -рассеяния:

$$\Gamma^{-1}(\eta, p) = \frac{m}{4\pi a} - \frac{m}{8\pi} \sqrt{p^2 - 4m\eta} - \bar{\Pi}(\eta, p), \quad (12.278)$$

$$\bar{\Pi}(\eta, p) = \int_{q \leq k_F} \frac{\frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3}}{\frac{q^2}{2m} + \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{q})^2}{2m} - \eta}. \quad (12.279)$$

Для конечной плотности фермионов со спином вверх обобщение уравнения (12.278) на мнимое время может быть сделано численно. Один из вариантов состоит в применении обратного преобразования Лапласа. Для решения этой задачи можно применить обобщенный диаграммный метод Монте-Карло [310]. Двумерная функция  $\Gamma(\tau, p)$  табулируется до моделирования полярона.

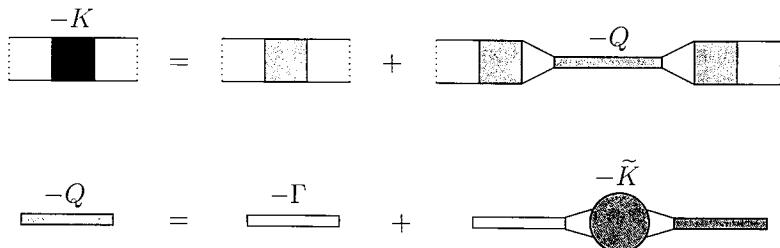


Рис. 12.98. Определение функций  $Q$  и  $\tilde{K}$  в двухчастичном канале

На рис. 12.98 дано определение функции  $Q$ , которая может рассматриваться какrenomаллизованный парный пропагатор, связанный с  $\Gamma$  уравнением Дайсона. В верхней части рис. 12.98 показана диаграммная структура для  $K$ , пунктирные линии на которой обозначают внешние функции  $\varphi_q$ ; серые квадраты представляют собой суммы всех  $\Gamma$ -неприводимых диаграмм. Под  $\Gamma$ -неприводимыми диаграммами понимаются диаграммы, которые не могут быть отделены разрезом через одиночную  $\Gamma$ -линию. Все  $\Gamma$ -неприводимые ди-

грамммы собраны в функции  $Q$ , показанной в нижней части рис. 12.98. Серый круг имеет почти ту же структуру, что и серый квадрат (член нулевого порядка имеется в квадрате, но его нет в круге): так как  $\Gamma$  определена как сумма лестничных диаграмм, все члены, включающие в себя лестничноподобные структуры, основанные на свободных одночастичных пропагаторах, должны быть исключены из  $Q$  и  $K$ . После замены  $G_{\downarrow} \rightarrow Q; G_{\downarrow}^{(0)} \rightarrow \Gamma; \Sigma \rightarrow \tilde{K}$  видна прямая аналогия между одно- и двухчастичными пропагаторами.

Аналогия может быть продолжена, если заметить, что структура диаграмм на рис. 12.98 подразумевает, что  $Q$  имеет те же полюсы, что и  $K$ , и разные квазичастичные  $Z$ -факторы. Таким образом, если у молекулы имеется хорошо определенное возбуждение, можно ожидать, что

$$Q(\xi - i\mu, \mathbf{p}) = \frac{\tilde{Z}_{\text{mol}}(\mathbf{p})}{i\xi + \mu - E_{\text{mol}}(\mathbf{p})} + \text{regular part.} \quad (12.280)$$

Уравнение (12.280) объясняет удобство ввода функции  $Q$ : теперь уравнения (12.269)–(12.273) сразу обобщаются на случай молекулы (с переобозначениями, указанными выше).

**12.6.2.3. Worm-алгоритм для фейнмановских диаграмм.** В этом разделе описывается, как конфигурационное пространство фейнмановских диаграмм для  $\Sigma$  и  $\tilde{K}$  может быть параметризовано и обновляться с использованием схемы диаграммного метода Монте-Карло. Алгоритм, описанный ниже, учитывает полярный и молекулярный каналы единым образом. Это достигается вводом вспомогательных диаграмм, содержащих два «обрывка» (*loose*), называемых «червяками» (*worms*). Этот метод доказал свою эффективность в сокращении автокорреляционного времени процедуры Монте-Карло, когда вычисления проходят в конфигурационном пространстве со сложной топологией [52, 108].

**12.6.2.3.1. Циклические диаграммы.** Несмотря на то, что метод работает в представлении мнимого времени при  $T = 0$ , когда  $\tau \in [0, \infty]$ , удобно не фиксировать начало отсчета времени и рассматривать диаграммы на кольце мнимого времени. Основой каждой циклической диаграммы являются структурные линии, показанные на рис. 12.99 и состоящие из периодической цепочки с элементами  $G_{\downarrow}^{(0)}(\tau_a)\Gamma(\tau_b)G_{\downarrow}^{(0)}(\tau_c)\Gamma(\tau_d)G_{\downarrow}^{(0)}(\tau_e)\Gamma(\tau_f)\dots$  (все времена положительны). «Направления» пропагаторов не указаны явно, так как они однозначно определяются общим направлением всех структурных линий, которое можно определить, без потери общности, направлением справа налево. Тогда левый (свободный) конец любой  $\Gamma$ -линии со спином вверх будет выходящим, а правый конец — входящим. Физическая диаграмма получается попарной заменой свободных концов со спином вверх пропагаторами  $G_{\uparrow}$ .

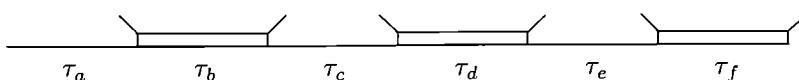


Рис. 12.99. Структурные линии циклических диаграмм

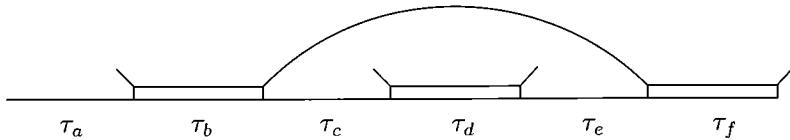


Рис. 12.100. Соединение «вперед». Дуга соответствует  $-G_1^{(0)}(\tau = \tau_c + \tau_d + \tau_e)$

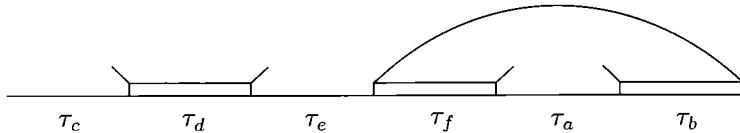


Рис. 12.101. Соединение «назад». Пара концов  $\Gamma$  соединена (см. 12.100), но в противоположном направлении; дуга соответствует  $-G_1^{(0)}(\tau = -\tau_f - \tau_a - \tau_b)$

Существуют два направления соединения входящих и выходящих линий: 1) вперед, т. е. в направлении всех структурных линий; 2) назад, т. е. в противоположном направлении. На рисунках 12.100 и рис. 12.101 показаны результаты соединения с положительными и отрицательными временами. Они представляют собой возбуждения частиц (дырок) в фермионном окружении. Важно подчеркнуть, что в циклических диаграммах единственным временным параметром является положительная длина  $G_1^{(0)}$  и  $\Gamma$ . Здесь нет абсолютного времени, и поэтому все моменты времени эквивалентны.

**12.6.2.3.2. Worms.** Для того чтобы реализовать единую схему Монте-Карло для одно- и двухчастичного каналов, дополним пространство физических диаграмм диаграммами со специальными концами, *worms*. Обозначим их через  $\mathcal{J}$  и  $\mathcal{M}$  (для входящих и выходящих концов со спином вверх, соответственно, см. рис. 12.102). Вся схема обновлений основана на операциях с  $\mathcal{J}$  и  $\mathcal{M}$ . Как станет ясно из дальнейшего, диаграмма первого порядка с *worm*, изображенная на рис. 12.103, является важной для нормировки результатов Монте-Карло. Ее вес состоит из двух факторов:  $G_1^{(0)}(\tau_a)$  и  $\Gamma(\tau_b)$ .

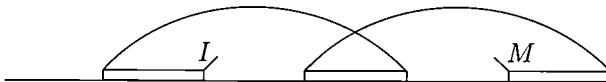


Рис. 12.102. Диаграмма с двумя *worms*  $\mathcal{J}$  и  $\mathcal{M}$

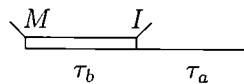


Рис. 12.103. «Нормирующая» диаграмма. Это простейшая диаграмма с *worm*; ее вес равен произведению  $G_1^{(0)}(\tau_a)$  и  $\Gamma(\tau_b)$

**12.6.2.3.3. Параметризация диаграмм** Вне зависимости от порядка диаграмм и их топологии, будем рассматривать временные интервалы  $\Gamma$  и  $G_1^{(0)}$  и импульсы пропагаторов со спином вверх как независимые переменные. Импульсы  $\Gamma$  и  $G_1^{(0)}$  однозначно определяются тогда из закона сохранения

импульса, в то время как временной интервал пропагатора со спином вверх определяется суммированием всех временных интервалов  $\Gamma$  и  $G_{\downarrow}^{(0)}$ , содержащихся в этом пропагаторе. Технически удобно работать в частично-дырочном представлении, в котором пропагаторы со спином вверх в прямом направлении понимаются как дырочные пропагаторы в обратном направлении с противоположным импульсом. Это достигается путем ввода неотрицательной функции

$$\tilde{G}(\tau, p) = \begin{cases} -G_{\uparrow}(\tau, p), & p \geq p_F, \\ G_{\uparrow}(-\tau, p), & p < p_F, \end{cases} \quad (12.281)$$

для всех линий со спином вверх (общий фермионный знак диаграммы определяется независимо по стандартным диаграммным правилам). Все импульсы, связанные с линиями со спином вверх, понимаются как импульсы, отвечающие пропагаторам  $\tilde{G}$ , т. е. являются либо импульсами частиц (для прямых пропагаторов; являются ненулевыми только при  $p \geq p_F$ ), либо импульсами дырок (для обратных пропагаторов; являются ненулевыми только при  $p < p_F$ ). Явная формула для  $\tilde{G}$  имеет вид

$$\tilde{G}(\tau, p) = \theta(\tau) e^{-\left|\frac{p^2}{2m} - \varepsilon_F\right| \tau}. \quad (12.282)$$

Чтобы упростить далее описание обновлений, будем называть пропагаторы  $\Gamma$  и  $G_{\downarrow}^{(0)}$  *жирными линиями* или *BBL* (*backbone lines* — *BBLs*) и обозначать их как  $D$ . Диаграммы порядка  $N$  определяются общим количеством пропагаторов со спином вниз. Используем также специальные обозначения, чтобы характеризовать топологию диаграмм. Для каждой BBL определим число перекрытий  $N_c$ , равное общему количеству линий  $\tilde{G}$ , перекрывающих данную BBL. Жирную линию с  $N_c = 0$  будем полагать неперекрытой. Наконец, физические диаграммы — т. е. диаграммы, в которых отсутствуют концы (*worms*), разделим на сектора полярона (0) и молекулы (1); сектор диаграммы определяется разницей между числом частичных и дырочных пропагаторов со спином вверх, перекрывающих любую из линий  $G_{\downarrow}^{(0)}$  (тот же самый результат можно получить, анализируя пропагаторы, перекрывающие линии  $\Gamma$  после добавления единицы в число частиц со спином вверх, участвующих в лестничных диаграммах).

**12.6.2.3.4. Обновления.** Циклическая структура диаграмм в комбинации с возможностью рассмотрения нефизических диаграмм позволяет построить очень простой эргодический набор обновлений. Минимальный набор состоит из двух дополняющих друг друга пар: *вставка* (*insert*)/*удаление* (*delete*) и *размыкание* (*open*)/*замыкание* (*close*), и одного самосогласованного обновления *переключение* (*reconnect*). Рассмотрим самую простую реализацию обновлений, при этом стандартные способы упрощения и оптимизации схемы не будем оговаривать особо (в частности, будем использовать схему обновления, которая формально может предложить изменение, приводящее к запрещенной конфигурации; такие предложения в данной схеме отклоняются, как будто они приводят к нулевому весу конфигурации).

*Вставка.*

Это обновление применяется только к физическим (без *worms*) диаграммам; оно отклоняется, если схема обращается к диаграмме с *worm*. Сначала рассмотрим сектор полярона. Выберем случайно один из пропагаторов  $G_{\downarrow}^{(0)}$ ; если он перекрыт, то обновление автоматически отклоняется. Если выбранный пропагатор не перекрыт, введем пару новых пропагаторов,  $\Gamma(\tau_1, p)$  и  $G_{\downarrow}^{(0)}(\tau_2, p)$  справа по шкале времени после выбранного. Предполагается, что новый пропагатор  $\Gamma(\tau_1, p)$  содержит  $\mathcal{J}$  и  $\mathcal{M}$  на концах. Черви (*worms*) радикально упрощают упорядочение диаграмм, ускоряя обновление, так как благодаря законам сохранения импульс новой BBL равен полному импульсу диаграммы  $p$ . Времена  $\tau_1$  и  $\tau_2$  получаются из нормированных распределений вероятности  $W_{\Gamma}(\tau_1)$  и  $W_{\downarrow}(\tau_2)$ . Отметим, что  $W_{\Gamma}(\tau_1)$  и  $W_{\downarrow}(\tau_2)$  могут зависеть от  $p$  как от параметра. Весовое отношение для этого обновления

$$P_{ins} = NC_{N+1} \frac{\Gamma(\tau_1, p) G_{\downarrow}^{(0)}(\tau_2, p)}{W_{\Gamma}(\tau_1) W_{\downarrow}(\tau_2)}, \quad (12.283)$$

где  $C_N$  — искусственный фактор взвешивания, приписанный всем диаграммам порядка  $N$  с червем (его можно использовать в целях оптимизации и сделать также зависящим от  $p$ ). Функции  $W$  можно выбрать естественным образом, сделав их пропорциональными BBL, т. е.

$$\begin{aligned} W_{\Gamma}(\tau) &= \frac{\Gamma(\tau, p)}{\int \Gamma(\tau', p) d\tau'}; \\ W_{\downarrow}(\tau) &= \frac{G_{\downarrow}^{(0)}(\tau, p)}{\int G_{\downarrow}^{(0)}(\tau', p) d\tau'}. \end{aligned} \quad (12.284)$$

Тогда, чтобы иметь весовое отношение порядка единицы и не зависящее от  $p$ , выберем

$$\begin{aligned} C_N &= \frac{1}{N\Lambda}, \\ \Lambda &= \int \Gamma(\tau_1, p) d\tau_1 \int G_{\downarrow}^{(0)}(\tau_2, p) d\tau_2. \end{aligned} \quad (12.285)$$

Далее будем полагать этот выбор функций  $W$  и  $C_N$  «оптимальным» несмотря на то, что эта возможность — не обязательно лучшая для данной схемы. Для оптимального выбора

$$P_{ins} = \frac{N}{N+1}. \quad (12.286)$$

В молекулярном секторе, по существу, нужно повторить все шаги с незначительными модификациями. Теперь выбираемым пропагатором является  $\Gamma$  (и здесь обновление отклоняется, если выбранный пропагатор перекрыт). Тогда пара новых пропагаторов  $G_{\downarrow}^{(0)}(\tau_1, p)$  и  $\Gamma(\tau_2, p)$  вставляется перед выбранным неперекрытым пропагатором. Новый пропагатор  $\Gamma(\tau_2, p)$  наследует

выходящую линию со спином вверх, которая ранее была связана с выбранным  $\Gamma$ ; последний получает вместо этого конец червя  $\mathcal{M}$ , в то время как конец  $\mathcal{J}$  присоединяется к новому  $\Gamma$ . Весовое отношение идентично (12.283) (для оптимального выбора это  $N/(N+1)$ ). Секторы полярона и молекулы взаимно исключают друг друга из-за закона сохранения частиц; таким образом, только один тип обновления *вставка* применим к данной диаграмме.

#### Уничтожение.

Это обновление преобразовывает диаграммы с червем в физические, уменьшая порядок диаграммы. Оно применяется только к диаграммам порядка  $N > 1$  с червями, разделенными одной неперекрытой BBL, иначе обновление отклоняется. Если черви отделены неперекрытой BBL, то ее соседи слева и справа также не перекрыты, и обновление, противоположное вставке, также возможно. В процедуре уничтожения из диаграммы удаляются две последовательных BBL и worms. Вероятность принятия этого обновления обратна (12.283):

$$P_{del} = \frac{1}{(N-1)C_N} \cdot \frac{W_\Gamma(\tau_1)W_\downarrow(\tau_2)}{\Gamma(\tau_1, \mathbf{p}) G_\downarrow^{(0)}(\tau_2, \mathbf{p})}. \quad (12.287)$$

Из (12.284) и (12.285) получаем

$$P_{del} = \frac{1}{(N-1)} \quad (\text{для оптимального выбора}). \quad (12.288)$$

#### Замыкание.

Обновление применяется только к диаграммам с червями и состоит в том, чтобы соединить  $\mathcal{J}$  и  $\mathcal{M}$  с линией  $G(\tau, \mathbf{q})$  и убрать червей из диаграммы. Величина импульса  $\mathbf{q}$  находится из распределения вероятности  $W_\uparrow(\mathbf{q})$ , а временной интервал  $\tau$  между  $\mathcal{J}$  и  $\mathcal{M}$  перекрывается новым пропагатором. Имеется два способа соединения  $\mathcal{J}$  и  $\mathcal{M}$ : вперед и назад. Неопределенность автоматически снимается абсолютным значением импульса  $\mathbf{q}$ : если  $q \geq p_F$  ( $q < p_F$ ), то пропагатор по определению перемещается вперед (назад). При реализации процедуры сначала выбирается направление (с равными вероятностями), а затем конструируется переменная импульса  $\mathbf{q}$ , соответственно, либо  $q \geq p_F$ , либо  $q < p_F$ . Весовое отношение для этого обновления

$$P_{cl} = \frac{2}{(2\pi)^3 N C_N} \frac{\tilde{G}(\tau, \mathbf{q})}{W_\uparrow(\mathbf{q})} \prod_\nu \frac{D_\nu(\tau_\nu, \mathbf{p}'_\nu)}{D_\nu(\tau_\nu, \mathbf{p}_\nu)}, \quad (12.289)$$

где индекс  $\nu$  нумерует все BBL, которые будут перекрыты новым пропагатором (очевидно, что  $\tau = \sum_\nu \tau_\nu$ ). Штрихи отмечают новые значения соответствующих импульсов:

$$p'_\nu = p_\nu - \mathbf{q}. \quad (12.290)$$

Как обычно, функция распределения  $W_{\uparrow}(\mathbf{q})$  может зависеть от  $\tau$  и направления пропагатора. Естественным выбором для этой функции будет

$$W_{\uparrow}(\mathbf{q}) = \frac{\tilde{G}_{\uparrow}(\tau, \mathbf{q})}{\Omega(\tau)}, \quad (12.291)$$

$$\Omega(\tau) = \begin{cases} \int_{q \geq p_F} \tilde{G}_{\uparrow}(\tau, \mathbf{q}) d\mathbf{q} & (\text{вперед}), \\ \int_{q < p_F} \tilde{G}_{\uparrow}(\tau, \mathbf{q}) d\mathbf{q} & (\text{назад}), \end{cases} \quad (12.292)$$

приводящий к оптимальному весовому отношению

$$P_{cl} = \frac{2\Lambda\Omega(\tau)}{(2\pi)^3} \prod_{\nu} \frac{D_{\nu}(\tau_{\nu}, \mathbf{p}'_{\nu})}{D_{\nu}(\tau_{\nu}, \mathbf{p}_{\nu})}. \quad (12.293)$$

В этом разделе рассматриваются диаграммы, основанные на чистых пропагаторах. Чтобы избежать двойного подсчета, нужно исключить все случаи, которые могут быть сведены к лестничным диаграммам, уже суммированным в пропагаторах  $\Gamma$ . Если  $\mathcal{J}$  и  $\mathcal{M}$  находятся на соседней BBL, попытка соединить их с пропагатором частицы со спином вверх отклоняется. Это правило следует каждый раз проверять, чтобы ограничить все физические диаграммы диаграммами из поляронного или молекулярного секторов; таким образом, секторы, отличные от 0 и 1, не реализуются.

### Размыкание.

Это обновление применяется только к физическим диаграммам и предлагает создать червя, случайно выбирая и удаляя один из пропагаторов со спином вверх. Весовое отношение дается инверсией (12.289) и (12.293):

$$P_{op} = \frac{(2\pi)^3 N C_N}{2} \frac{W_{\uparrow}(\mathbf{q})}{\tilde{G}_{\uparrow}(\tau, \mathbf{q})} \prod_{\nu} \frac{D_{\nu}(\tau_{\nu}, \mathbf{p}'_{\nu})}{D_{\nu}(\tau_{\nu}, \mathbf{p}_{\nu})}, \quad (12.294)$$

где индекс  $\nu$  нумерует все BBL, перекрытые пропагатором;  $\tau = \sum_{\nu} \tau_{\nu}$ ;  $\mathbf{q}$  — импульс выбранного пропагатора со спином вверх. Штрихи указывают новые значения импульсов BBL:

$$\mathbf{p}'_{\nu} = \mathbf{p}_{\nu} + \mathbf{q}. \quad (12.295)$$

В оптимальном варианте имеем

$$P_{op} = \frac{(2\pi)^3}{2\Lambda\Omega(\tau)} \prod_{\nu} \frac{D_{\nu}(\tau_{\nu}, \mathbf{p}'_{\nu})}{D_{\nu}(\tau_{\nu}, \mathbf{p}_{\nu})}. \quad (12.296)$$

### Переключение.

Цель этого обновления — изменить топологию диаграмм с червем. Состоит оно в том, чтобы случайно выбрать один из пропагаторов  $\tilde{G}$  и обменять его исходящий конец с  $\mathcal{M}$ ; импульс пропагатора остается тем же самым, и только

его временная переменная меняется с  $\tau_0$  до  $\tau'_0$ . Весовое отношение дается выражением

$$P_{rec} = \frac{\tilde{G}(\tau'_0, q)}{\tilde{G}(\tau_0, q)} \prod_{\nu} \frac{D_{\nu}(\tau_{\nu}, p'_{\nu})}{D_{\nu}(\tau_{\nu}, p_{\nu})}. \quad (12.297)$$

Индекс  $\nu$  нумерует все BBL, которые изменяют свои импульсы (и числа перекрытий  $N_c$ ) в результате обновления. Топологически имеются две различных ситуации (два дополняющих (комплементарных) друг друга обновления): (i)  $\mathcal{M}$  перекрыт рассматриваемым пропагатором и (ii)  $\mathcal{M}$  не перекрыт пропагатором. Соответственно, новые значения переменных диаграммы вычисляются как

$$(\tau'_0, p'_{\nu}) = \begin{cases} (\tau_0 - \tau, p_{\nu} + q) & (1), \\ (\tau_0 + \tau, p_{\nu} - q) & (2), \end{cases} \quad (12.298)$$

где  $\tau = \sum_{\nu} \tau_{\nu}$ .

Приведенный набор обновлений является эргодическим. Конечно, можно добавлять дополнительные обновления, которые могут улучшить работу алгоритма с помощью более эффективного осуществления выборки переменных и топологии диаграммы. Сверхполные наборы обновлений также полезны для значимых тестов детального баланса. Вариантов различных обновлений бесконечно много; приведем еще два обновления, которые могут быть использованы.

#### *Временной сдвиг.*

Предлагаются новые временные переменные  $\tau_{\nu} \rightarrow \tau'_{\nu}$  для всех неперекрытых BBL (отмеченные здесь индексом  $\nu$ ). Весовая вероятность обновления равна

$$P_{sh} = \prod_{\nu} \frac{W_{\nu}(\tau_{\nu}, p) D_{\nu}(\tau'_{\nu}, p)}{W_{\nu}(\tau'_{\nu}, p) D_{\nu}(\tau_{\nu}, p)}. \quad (12.299)$$

Все неперекрытые пропагаторы имеют один и тот же импульс  $p$ . Если реализуется оптимальный выбор  $W_{\nu}(\tau_{\nu}, p) \propto D_{\nu}(\tau_{\nu}, p)$ , то весовое отношение равно единице.

#### *Изменение направления.*

В этом случае предлагается случайно выбрать один из пропагаторов  $\tilde{G}$  и изменить его направление на противоположное. Одновременно изменяется импульс выбранного пропагатора (что приводит к изменению импульсов всех BBL, которые он перекрывает или перекроет в результате обновления). Обозначим выбранный пропагатор  $\tilde{G}(\tau, q)$ , новый пропагатор  $\tilde{G}(\tau', q')$ ; при этом  $\tau = \sum_{\nu} \tau_{\nu}$  и  $\tau' = \sum_{\lambda} \tau_{\lambda}$ ; индекс  $\nu$  нумерует все BBL, перекрытые пропагатором  $\tilde{G}_1(\tau, q)$ ; индекс  $\lambda$  нумерует все BBL, которые будут перекрыты пропагатором  $\tilde{G}_1(\tau', q')$ . Положим, что  $q'$  вычисляется из распределения  $W_1$ , введенного выше. В этом случае весовое отношение имеет вид

$$P_{rdr} = \frac{W_1(\tau, q) \tilde{G}(\tau', q')}{W_1(\tau', q') \tilde{G}(\tau, q)} \left[ \prod_{\nu} \frac{D_{\nu}(\tau_{\nu}, p'_{\nu})}{D_{\nu}(\tau_{\nu}, p_{\nu})} \right] \left[ \prod_{\lambda} \frac{D_{\lambda}(\tau_{\lambda}, p'_{\lambda})}{D_{\lambda}(\tau_{\lambda}, p_{\lambda})} \right], \quad (12.300)$$

$$\begin{aligned} p_{\nu} &= p'_{\nu} + q, \\ p_{\lambda} &= p'_{\lambda} - q'. \end{aligned} \quad (12.301)$$

Для оптимального выбора  $W_\uparrow$  (см. (12.291))

$$\frac{W_\uparrow(\tau, \mathbf{q})\tilde{G}(\tau', \mathbf{q}')}{W_\uparrow(\tau', \mathbf{q}')\tilde{G}(\tau, \mathbf{q})} \rightarrow \frac{\Omega(\tau')}{\Omega(\tau)}. \quad (12.302)$$

*Знак диаграммы.*

Знак диаграммы с червями в общем случае произволен, так как такая диаграмма не является физической. Но неопределенность в знаке можно снять, предполагая, что  $\mathcal{M}$  всегда соединяется с  $\mathcal{J}$  в обратном направлении вспомогательным единичным пропагатором. Тогда, чтобы удовлетворить правилам схемы, будем изменять знак конфигурации каждый раз, когда любое из следующих обновлений принято: (i) переключение; (ii) размыкание/замыкание для пропагаторов со спином вверх в прямом направлении; (iii) вставка/уничтожение в секторе молекулы; (iv) изменение направления. Для обновлений размыкание/замыкание для пропагаторов со спином вверх в обратном направлении знак остается тем же самым, потому что в этом случае знак, получающийся из изменения числа замкнутых петель со спином вверх, компенсируется знаком в (12.281); то же самое верно для обновлений вставка/удаление в секторе полярона (из-за выбора знака вспомогательного пропагатора). По точно такой же причине знак компенсируется во время обновления изменение направления, несмотря на то, что это обновление сохраняет число петель.

**12.6.2.3.5. Эстиматоры.** Только физические диаграммы с одним неперекрытым пропагатором  $G_\downarrow^{(0)}$  дают вклад в энергию полярона. Обозначим их диаграммами  $\Sigma\Gamma$ . Пример такой диаграммы показан на рис. 12.104. (В зависимости от ограничений, введенных для конфигурационного пространства (легко осуществимых в произвольной схеме), физические диаграммы с более чем одним неперекрытым пропагатором  $G_\downarrow^{(0)}$  либо фильтруются по времени, когда делается вклад в гистограмму энергии, либо не реализуются вообще.) Эти диаграммы факторизуются в произведение  $G_\downarrow^{(0)}$  и некоторого диаграммного вклада в собственно энергетическую часть  $\Sigma$ . Выгода циклического представления состоит в том, что неперекрытый пропагатор может быть реализован в любом месте на жирной линии. Из-за наличия такой факторизации легко написать МК-эстиматор для интеграла (чтобы упростить выкладки, опустим несущественный для обсуждения импульс  $\mathbf{p}$ ),

$$I = \int_0^\infty f(\tau) \Sigma(\tau) d\tau, \quad (12.303)$$

где  $f(\tau)$  — некоторая функция (см., например, (12.270) и (12.271)). Действительно, рассмотрим эстиматор

$$\mathcal{E}_I = \delta_{G\Sigma} f(\tau), \quad (12.304)$$

который суммирует все диаграммы  $\Sigma\Gamma$  с дополнительным весом  $f(\tau)$ . Здесь  $\delta_{G\Sigma}$  равно единице для каждой диаграммы  $\Sigma\Gamma$  и нулю в противном случае;

$\tau$  — полная длина на временной шкале  $\Sigma$ -части диаграммы  $\Sigma\Gamma$ . Среднее этого эстиматора есть

$$\langle \mathcal{E}_I \rangle_{MC} \propto \int_0^\infty G_{\downarrow}^{(0)}(\tau') d\tau' \int_0^\infty f(\tau) \Sigma(\tau) d\tau. \quad (12.305)$$

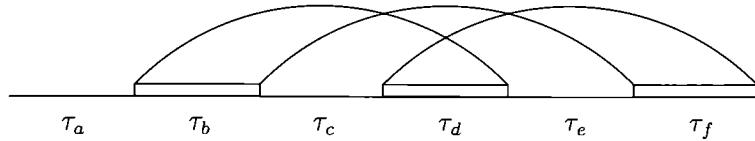


Рис. 12.104. Диаграмма  $G\Sigma$ , дающая вклад в собственную энергию полярона. Диаграмма факторизуется в произведение  $G_{\downarrow}^{(0)}$  и  $\Sigma(\tau = \tau_b + \tau_c + \tau_d + \tau_e + \tau_f)$

Аналогично, в рамках той же схемы соберем статистику всех «нормированных» диаграмм (см. рис. 12.103), используя эстиматор  $\delta_{norm}$  для диаграмм первого порядка с червем:

$$\langle \delta_{norm} \rangle_{MC} \propto C_1 \int_0^\infty G_{\downarrow}^{(0)}(\tau') d\tau' \int_0^\infty \Gamma(\tau) d\tau. \quad (12.306)$$

Коэффициент пропорциональности в (12.305) и (12.306) сокращается в отношении этих двух средних, в итоге получаем

$$I = C_1 \frac{\langle \mathcal{E}_I \rangle_{MC}}{\langle \delta_{norm} \rangle_{MC}} \int_0^\infty \Gamma(\tau) d\tau. \quad (12.307)$$

В частности, для оптимального выбора  $C_N$  имеем

$$I = \frac{\langle \mathcal{E}_I \rangle_{MC}}{\langle \delta_{norm} \rangle_{MC}} \left[ \int_0^\infty G_{\downarrow}^{(0)}(\tau) d\tau \right]^{-1} \quad (12.308)$$

Интегралы по мнимому времени от произведения  $\Sigma(\tau)$  и экспонент (см. (12.270) и (12.271)) — все что необходимо для определения энергии полярона и  $Z$ -фактора. Для применения схемы, описываемой далее, к методике BBL, необходимо ввести зависимость собственно энергетической части от времени и импульса. Это достигается выделением конкретных вкладов диаграмм  $G\Sigma$ . Например,

$$\mathcal{E}_{\Sigma,i} = \delta_{G\Sigma} \delta_{\tau \in bin_i} \quad (12.309)$$

будет эстиматором, суммирующим вклады с  $\tau$  в пределах ячейки  $i$  мнимого времени шириной  $\Delta\tau_i$  с центром в точке  $\tau_i$ . Используя линейную связь между  $I$  и  $\Sigma(\tau)$  можно записать (для оптимального выбора)

$$\Sigma(\tau_i) = \frac{\langle \mathcal{E}_{\Sigma,i} \rangle_{MC}}{\langle \delta_{norm} \rangle_{MC}} \left[ \Delta\tau_i \int_0^\infty G_{\downarrow}^{(0)}(\tau) d\tau \right]^{-1} \quad (12.310)$$

В полной аналогии со случаем полярона рассмотрим диаграммы  $\Gamma\tilde{K}$ , которые содержат один, и только один, неперекрытый пропагатор  $\Gamma$  (см. рис. 12.105), и используем их, чтобы собрать статистику для собственно энергетической части молекулы. Вплоть до прямого переобозначения  $G_{\downarrow}^{(0)} \leftrightarrow \Gamma$ ;  $\Sigma \leftrightarrow \tilde{K}$  все соотношения этого раздела остаются справедливыми.

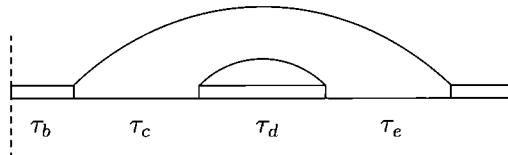


Рис. 12.105. Диаграмма  $\Gamma\tilde{K}$ , дающая вклад в собственную энергию молекулы. Диаграмма факторизуется в произведение  $\Gamma(\tau_b)$  и  $\tilde{K}(\tau = \tau_c + \tau_d + \tau_e)$ . Вертикальные штриховые линии разрезают (для большей наглядности) одну и ту же линию  $\Gamma(\tau_b)$

**12.6.2.4. Расчет Т-матрицы  $\Gamma(\tau, p)$  при помощи обобщенного диаграммного метода Монте-Карло.** Несмотря на относительно простую форму уравнений (12.278) и (12.279) табулирование двумерной функции  $\Gamma(\tau, p)$  с высокой точностью, используя обратное преобразование Лапласа для  $\Gamma(\omega, p)$ , оказывается трудоемкой задачей. Используем альтернативный подход, основанный на технике обобщенного диаграммного метода Монте Карло, развитой в [310]. Основной момент состоит в том, что Т-матрица  $\Gamma(\tau, p)$  может быть диаграммно связана со своей вакуумной копией  $\Gamma_0(\tau, p)$  (см. рис. 12.106), а последняя может быть записана аналитически:

$$\Gamma_0(\tau, p) = \frac{4\pi}{m^{\frac{3}{2}}} e^{\left(\epsilon_F + \mu - \frac{p^2}{4m}\right)\tau} g_{\mp}(\tau), \quad (12.311)$$

где

$$g_{\mp}(\tau) = -\frac{1}{\sqrt{\pi\tau}} \pm \sqrt{E} e^{E\tau} \text{errf}(\pm\sqrt{E\tau}) \quad (12.312)$$

для отрицательной и (или) положительной длины рассеяния;  $E = 1/ma^2$ ; errf( $x$ ) — интеграл ошибок. (Энергия Ферми и химический потенциал в (12.311) появляются из-за глобального изменения энергии, необходимого для согласования с уравнением Дайсона, показанным на рис. 12.106.)



Рис. 12.106. Диаграммное уравнение для Т-матрицы  $\Gamma(\tau, p)$ . Дуга представляет собой вакуумный пропагатор со спином вверх с ограничением  $q < k_F$  на импульс. Уравнение описывает корректировку вакуумного результата  $\Gamma_0$  путем вычитания вкладов от фермионов со спином вверх и импульсами  $q < k_F$

С явным выражением для произведения двух вакуумных пропагаторов отношение, показанное на рис. 12.106, представляется в виде (аргумент им-

пульса  $\Gamma(\tau, p)$  не указан для удобства)

$$-\Gamma(\tau, p) = -\Gamma_0(\tau) + \int_0^\tau ds \int_s^\tau \Gamma_0(s) \Gamma(\tau - s') ds' \times \\ \times \int_{q < k_F} (-e^{-[(p-q)^2 + q^2](s' - s)/2m}) \frac{dq}{(2\pi)^3}. \quad (12.313)$$

Уравнение (12.313) является одним из самых простых примеров задач, решаемых при помощи обобщенного диаграммного метода Монте-Карло. В работе [310] подробно описан алгоритм решения таких уравнений; здесь же остановимся только на некоторых деталях. Разумно стартовать с хорошей исходной функции для того, чтобы получить результаты высокой точности за небольшое время симуляции. Для достижения этой цели используем следующую процедуру. Начнем моделирование, ограничивая мнимое время, чтобы оно было меньше чем  $\tau_{ax}$ , при этом выберем  $\tau_{max}$  относительно малым. Когда результат станет достаточно точен, экстраполируем его к более длительным временам, увеличим  $\tau_{max}$  и запустим моделирование с экстраполированной функцией  $\Gamma_{ext}$  в качестве начальной, т. е. заменим  $\Gamma$  в (12.313) на  $\Gamma = \Gamma_{ext} + \delta\Gamma$  и решим уравнение относительно для  $\delta\Gamma$ . В случае необходимости эта процедура повторяется несколько раз.

**12.6.2.5. Результаты моделирования и некоторые особенности сходимости.** Почти все результаты в этом разделе были получены моделированием диаграмм, сконструированных из чистых одно- и двухчастичных пропагаторов  $G_{\downarrow}^{(0)}$  и  $\Gamma$ . Заметим, что соответствующие ряды, вероятно, будут расходящимися. Это, однако, не означает, что вся идея вычислить вклады от диаграмм все более и более высокого порядка и экстраполировать результаты к бесконечному порядку бесполезна и плохо определена. Напротив, давно установлено, что соответствующие методы пересummирования (перенормировки) позволяют надежно определять функцию, соответствующую расходящемуся ряду. Кроме того, результаты всех методов пересummирования, если они применимы, должны согласовываться друг с другом на заключительном этапе. Возможность пересummирования значительно увеличивает эффективность технологии диаграммного метода МК, который рассматривается здесь.

Для резонансного полярона Ферми так называемый метод суммирования Cesaro-Riesz решает проблему сходимости. Вообще, для любой интересуемой физической величины (в нашем случае — энергии полярона и молекулы) можно сконструировать парциальные суммы

$$\Sigma(N_*) = \sum_{N=1}^{N_*} D_N F_N^{(N_*)}, \quad (12.314)$$

определенные как суммы всех членов вплоть до порядка  $N_*$  с членом  $N$ -го порядка, умноженным на фактор  $F_N^{(N_*)}$ . В пределе больших  $N_*$  и  $N \ll N_*$  факторы умножения  $F$  приближаются к единице, в то время как для  $N \rightarrow N_*$  они подавляют вклады более высокого порядка таким образом, что  $\Sigma(N_*)$

имеет хорошо определенный предел при  $N_* \rightarrow \infty$ . Есть бесконечно много способов сконструировать факторы умножения, удовлетворяющие этим условиям. Это немедленно приводит к важной проверке на непротиворечивость: конечные результаты не должны зависеть от выбора  $F$ . В методе суммирования Cesaro-Riesz имеем

$$F_N^{(N_*)} = \left[ \frac{N_* - N + 1}{N_*} \right]^\delta. \quad (12.315)$$

Здесь  $\delta > 0$  — произвольный параметр ( $\delta = 1$  соответствует методу Cesaro). Свобода в выборе значения  $\delta$  может использоваться, чтобы оптимизировать сходимость  $\Sigma(N_*)$ .

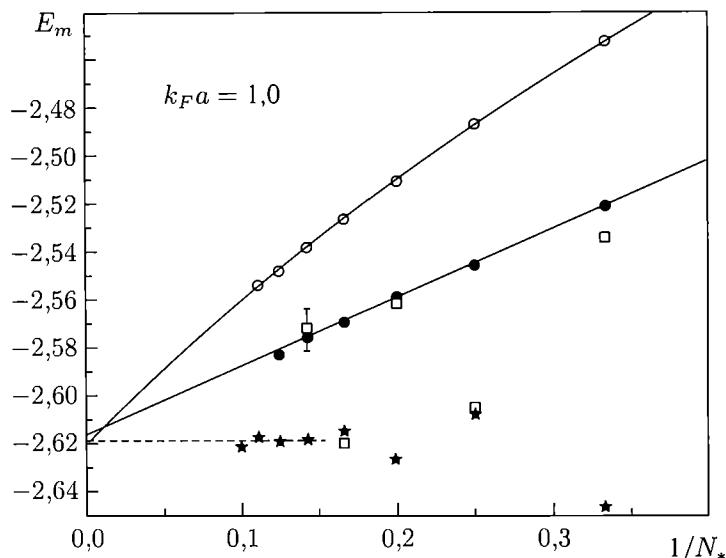


Рис. 12.107. Энергия молекулы (при  $k_F a = 1$ ) как функция максимального порядка диаграммы  $N_*$  для различных методов суммирования: Cesaro (открытые квадраты); Riesz  $\delta = 2$  (сплошные круги, аппроксимированные параболой  $y = -2,6164 + 0,2801x + 0,0163x^2$ ); Riesz  $\delta = 4$  (открытые круги, аппроксимированные параболой  $y = -2,6190 + 0,6163x - 0,3515x^2$ ); уравнение (12.316) (звездочки, аппроксимированные горизонтальной штриховой линией)

Далее для ряда, ограниченного порядком  $N_*$ , определим энергию полярона и молекулы и рассмотрим ее зависимость от  $N_*$  при  $N_* \rightarrow \infty$ . На рис. 12.107 показаны результаты для энергии молекулы при  $k_F a = 1$ . Без пересуммирующих факторов данные флюктуируют так сильно, что любая экстраполяция к диаграмме бесконечного порядка невозможна; это можно рассматривать как признак расходимости исходных разложений. Колебания остаются существенными для  $\delta = 1$ , но сильно подавляются для больших значений. Гладкость кривой для большого  $\delta = 4$  возрастает за счет увеличения изгиба кривой, что позволяет провести разумную экстраполяцию в пределе  $1/N_* \rightarrow 0$ , более уязвимом для систематических ошибок. Фактор  $F_N^{(N_*)}$ , при-

водящий к более быстрой сходимости, строится эмпирически (см. рис. 12.107):

$$F_N^{(N_*)} = C^{(N_*)} \sum_{m=N}^{N_*} \exp \left[ -\frac{(N_* + 1)^2}{m(N_* - m + 1)} \right], \quad (12.316)$$

где  $C^{(N_*)}$  выбрано так, что  $F_1^{(N_*)} = 1$ . Самый важный вывод, который можно сделать из рис. 12.107, — то, что в данном случае ряды разложения подходят для методов пересуммирования, и результат экстраполяции не зависит от метода пересуммирования. Небольшие расхождения в окончательном результате из-за различных методов пересуммирования и экстраполяции будем считать систематическими ошибками; пример показан на рис. 12.108.

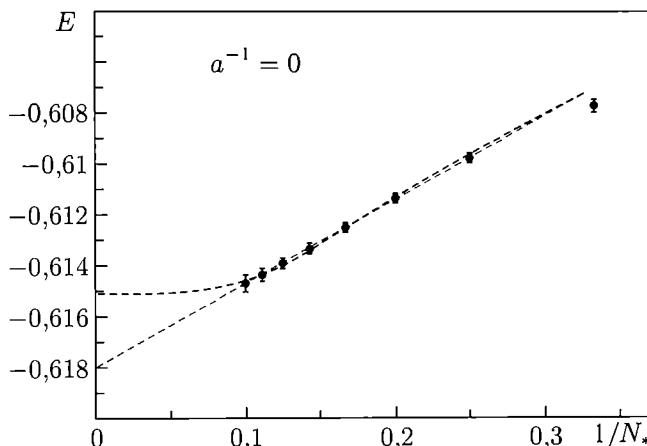


Рис. 12.108. Энергия полярона в точке  $a^{-1} = 0$  как функция максимального порядка диаграммы  $N_*$ . Зависимость получена с использованием (12.316). Данные аппроксимированы линейной и экспоненциальной функциями для оценки систематических ошибок, возникающих при процедуре экстраполяции

Кроме проверок на согласованность экстраполяционных подходов, важно сравнить численные результаты с аналитическими предсказаниями для предела сильной связи  $k_F a \rightarrow 0$ . В этом пределе энергия молекулы дается выражением

$$E_m = -\frac{1}{ma^2} - \varepsilon_F + \frac{2\pi\tilde{a}}{(2/3)m} n_\uparrow \quad (k_F a \rightarrow 0), \quad (12.317)$$

где первый член — энергия связи молекулы в вакууме; второй член описывает конечный химический потенциал фермионов со спином вверх; последний член появляется из-за взаимодействия между сложной молекулой с газом Ферми. Длина  $s$ -рассеяния молекулы и фермиона  $\tilde{a} \approx 1.18a$  [311] получена из невозмущенного решения задачи трех тел. Сопоставление с (12.317) дает разумную проверку всей числовой процедуры осуществления выборки асимптотического диаграммного ряда. Полученные в этом разделе данные находятся в прекрасном согласии с результатом  $\tilde{a} \approx 1.18a$  в пределах статистической погрешности порядка 5 %, см. нижнюю часть рис. 12.109.

Примечательно, что  $E_m$  из (12.317) очень точно воспроизводится вплоть до точки пересечения. Этот факт может быть использован для решения другой важной физической задачи — аппроксимации функционала плотности энергии сверхтекущей поляризованной фазы в разреженном молекулярном газе с сильным разбалансом для  $k_F a < 1$ , когда он состоит из разреженного молекулярного газа, взаимодействующего с фермионами со спином вверх [303]:

$$E = \frac{3}{5} \varepsilon_F n_{\uparrow} - \left[ \frac{1}{ma^2} - \frac{2\pi\tilde{a}}{(2/3)m} n_{\uparrow} \right] n_{\downarrow} + \frac{\pi a_{MM}}{m} n_{\downarrow}^2, \quad (12.318)$$

где  $n_{\uparrow}$ ,  $n_{\downarrow}$  — плотности неспаренных фермионов со спином вверх и молекул; и  $a_{MM} \approx 0,6a$  — длина рассеяния между молекулами [312]. В этом приближении найдено, что система претерпевает фазовое разделение при  $k_F a > 0,56$  [303].

Разделение фаз объясняет одну из интенсивно исследуемых точек кроссовера между поляронным и молекулярным режимами в захваченном в ловушке разбалансированном газе Ферми. На рис. 12.109 представлены поляронная и молекулярная энергии в области  $k_F a \sim 1$ , где природа квазичастичного состояния меняется. Точка пересечения находится при  $(k_F a)_c = 1,11(2)$ . В целом, обе кривые находятся в превосходном согласии с данными вариационного метода Монте-Карло [301, 303].

Пересечение кривых зависимостей полярона и молекулы может быть определено очень точно, потому что оба решения описывают хорошо обусловленные квазичастицы в точке пересечения. Это происходит из-за того, что в матричные элементы, связывающие две ветви возбуждений, вовлечены по крайней мере четыре частицы, и их резонансный фазовый объем равен нулю при  $(k_F a)_c$ . Действительно, законы сохранения энергии, импульса, и числа частиц (для каждой проекции спина) приводят к тому, что полярон может распасться только в молекулу, две дырки и одну частицу со спином вверх (молекула, соответственно, распадается в полярон, две частицы со спином вверх и одну дырку). Для этого процесса объем фазы конечного состояния становится пренебрежимо мал по сравнению с различием энергии  $|E_p - E_m|$  около точки пересечения.

Данные для эффективной массы представлены на рис. 12.110. В точке пересечения  $(k_F a)_c$  кривая эффективной массы имеет разрыв, как и ожидалось для точного кроссовера между двумя решениями.

**12.6.3. Заключение.** Проблему знака в моделировании методом Монте-Карло можно понимать в широком смысле — это, прежде всего, проблема получения малых погрешностей для параметров системы, что может позволить надежную экстраполяцию результатов к термодинамическому пределу. Большинство схем МК основано на моделировании систем конечного размера (линейного размера  $L$ ) с объемом конфигурационного пространства, растущим по экспоненте и/или факториально от  $L^3$  и обратной температуры  $1/T$  (для квантовых моделей). Так как погрешности растут с объемом конфигурационного пространства, их становится невозможно контролировать, так что необходимую экстраполяцию к термодинамическому пределу не всегда можно реализовать.

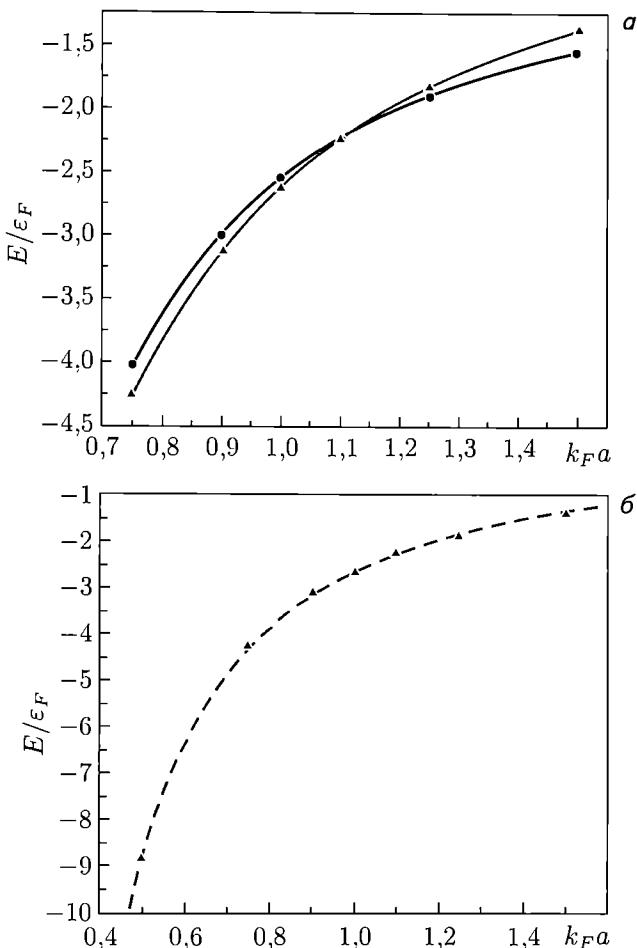


Рис. 12.109. Энергии полярона (сплошные круги) и молекулы (треугольники) в единицах  $\varepsilon_F$  как функции  $k_Fa$ . Штриховая линия на нижней панели соответствует уравнению (12.317)

Вычислительная сложность алгоритмов МК для ряда диаграмм с переменным знаком также растет экспоненциально и/или факториально с порядком диаграммы, и итоговые результаты должны экстраполироваться к пределу  $N_* \rightarrow \infty$ . В этом смысле алгоритм не решает проблему знака, но предлагает лучший путь для того, чтобы справиться с ней. Одно важное различие между объемом конфигурационного пространства для систем конечного размера и связанными феймановскими диаграммами состоит в том, что использование последних приводит к термодинамическому пределу непосредственно. Кроме того, те же самые диаграммы описывают системы различных размерностей и разных температур. Список преимуществ не заканчивается на этом, потому что можно использовать все известные аналитические методы, чтобы уменьшить размер конфигурационного пространства, и таким образом получить существенное преимущество для приемлемого решения проблемы знака.

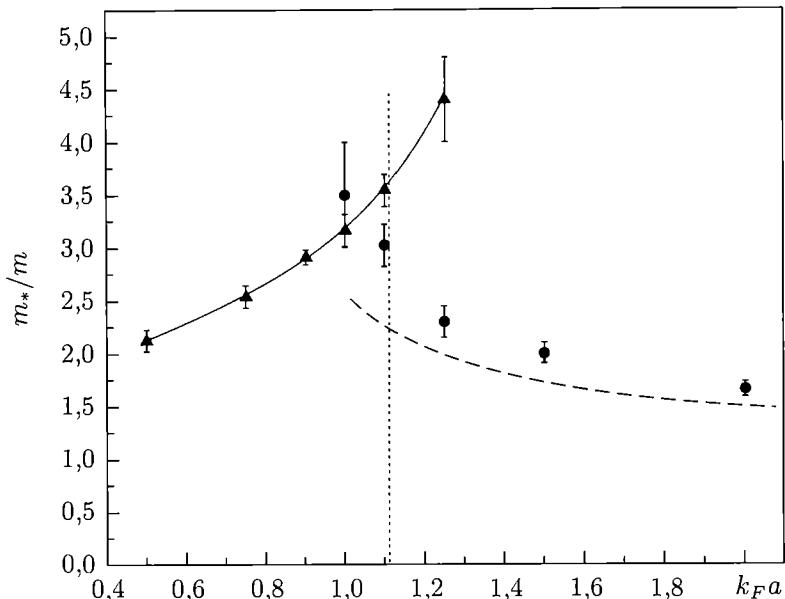


Рис. 12.110. Эффективная масса полярона (круги) и молекулы (треугольники) как функции  $k_Fa$ . Вертикальная линия соответствует значению  $(k_Fa)_c = 1,11$ . Штриховая линия соответствует вкладу первой диаграммы

Моделируя собственно энергетическую часть вместо функции Грина, размер конфигурационного пространства можно уменьшить до неприводимых графов. Используя лестничные диаграммы, можно преобразовать стандартную теорию возмущения в затравочном потенциале  $V$  в разложение по степеням  $\Gamma$ . Наконец, вся схема является самосогласованной при записи диаграмм в терминах точных функций  $G$  и  $Q$ . Так как самосогласованный расчет для бесконечной суммы диаграмм формирует геометрический ряд, конфигурационное пространство для BBL-диаграмм уменьшается еще больше. И окончательно, наличие сходящегося ряда не является требованием, потому что методы пересуммирования хорошо определены математически, и их работа гарантируется теоремами, основанными на свойствах аналитических функций.

## 12.7. Методы высокотемпературного разложения

В 1962 г. Handscomb [186] предложил квантовый метод МК, основанный на прямом разложении в ряд Тейлора гиббсовской экспоненты  $\exp(-\beta H)$  по степеням  $\beta$  в статистической сумме, при помощи которого была рассчитана антиферромагнитная модель Гейзенберга для  $S = 1/2$ . Тем самым был предложен первый вариант нового квантового метода МК, который сейчас называется *SSE-алгоритмом (Stochastic Series Expansion)* — метод высокотемпературного разложения, без погрешностей разложения Судзуки–Троттера. Его также можно отнести к квантовым методам МК в непрерывном времени, тем более что более поздние обобщения метода, рассмотренные в следующих разделах

(петлевой вариант SSE), используют дополнительную степень свободы, также рассматриваемую как временную переменную  $\tau$  ( $0 < \tau < \beta$ ).

Близкий, по сути, подход с разложением гиббсовской экспоненты уже рассматривался для классических моделей и подробно обсуждался в рамках модели Изинга (диаграммный метод МК).

Далее при описании метода SSE будем следовать работе [187], в которой Sandvik и Kurkijärvi детально представили этот метод для спиновых моделей с  $S \geq 1/2$ .

**12.7.1. Общая формулировка SSE-алгоритма.** Как и при описании метода CTWL, рассмотрим оператор энергии общего вида, состоящий из суммы членов:

$$H = \sum_{i=1}^M H_i, \quad (12.319)$$

которые в общем случае не коммутируют, так что для некоторых  $i$  и  $j$

$$[H_i, H_j] \neq 0. \quad (12.320)$$

Разложим экспоненту в выражении для статистической суммы в ряд [186, 187], так что

$$Z = \text{Tr} (e^{-\beta H}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{C_n\}} \frac{(-\beta)^n}{n!} \text{Tr} \left( \prod_{j=1}^n H_{l_j} \right), \quad (12.321)$$

где  $\{C_n\}$  означает суммирование по всей совокупности индексов  $(l_1, l_2, \dots, l_n)$ , нумерующих операторы в произведении в фигурных скобках, при этом  $1 \leq l_j \leq M$ ,  $M$  — полное число операторов в (12.321). Соответственно, среднее от любого оператора  $A$

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} (A e^{-\beta H}) \quad (12.322)$$

можно выразить через разложение (12.321) следующим образом:

$$\langle A \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{C_n\}} A(C_n) W(C_n), \quad (12.323)$$

$$W(C_n) = \frac{1}{Z} \frac{(-\beta)^n}{n!} \text{Tr} \left( \prod_{j=1}^n H_{l_j} \right), \quad (12.324)$$

$$A(C_n) = \begin{cases} \frac{\text{Tr} \left( A \prod_{j=1}^n H_{l_j} \right)}{\text{Tr} \left( \prod_{j=1}^n H_{l_j} \right)}, & \text{если } W(C_n) \neq 0, \\ 0, & \text{если } W(C_n) = 0. \end{cases} \quad (12.325)$$

Последняя формула (12.325) подчеркивает условие, что знаменатель и числитель только одновременно обращаются в нуль для определенности выражения.

Фактически роль «статистического веса» в таком представлении теперь играет  $W(C_n)$ , роль степеней свободы —  $C_n$ , а оператор  $A$  в новом представлении запишется как  $A(C_n)$ , так что

$$\langle A \rangle = \langle A(C_n) \rangle_W. \quad (12.326)$$

Угловые скобки в (12.326) означают усреднение с весом  $W(C_n)$ . В случае наличия отрицательных  $W(C_n)$  равенство (12.326) стандартно переписывается следующим образом:

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \text{sgn}[W(C_n)] A(C_n) \rangle_{|W|}}{\langle \text{sgn}[W(C_n)] \rangle_{|W|}}. \quad (12.327)$$

Для дальнейшей детализации алгоритма выберем базисные состояния  $\mathcal{B}_\alpha = \{|\alpha\rangle\}$  так, что действие любого слагаемого в гамильтониане (12.319) переводит одну функцию этого набора в другую также из этого набора:

$$H_i |\alpha\rangle \propto |\alpha'\rangle, \quad |\alpha\rangle, |\alpha'\rangle \in \mathcal{B}_\alpha. \quad (12.328)$$

При моделировании МК главный вклад в среднее (12.323)–(12.325) будут давать операторные строки длиной (количеством операторов), флюктуирующей около некоторой средней длины, зависящей от параметров гамильтониана и температуры расчета. Очевидно, что максимальные длины будут маловероятны из-за факториального веса в (12.323)–(12.325), поэтому в моделировании достаточно ограничиться некоторой длиной  $L$ , достаточно большой, чтобы статистика практически целиком включала распределение по длинам.

В базисе  $\mathcal{B}_\alpha$  среднее (12.323)–(12.325) с учетом вышесказанного представляется в виде

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} \sum_{n=0}^L \sum_{\{C_n\}} \frac{(-\beta)^n}{n!} \left\langle \alpha \left| A \prod_{j=1}^n H_{l_j} \right| \alpha \right\rangle. \quad (12.329)$$

Выражение (12.329) представляет собой сумму операторных строк, состоящих из произведений операторов с различным их количеством (длиной строки)  $n$ :  $0 \leq n \leq L$ .

Для упрощения алгоритма удобно сделать все члены суммы в (12.329) одинаковой длины  $L$ , искусственно добавив необходимое количество  $(L - n)$  единичных операторов  $I$  в каждую операторную строку  $n < L$ . Ввиду того, что распределение единичных операторов в операторной строке не меняет результата, в (12.329) удобно учесть сразу все возможные расстановки единичных операторов, число этих расстановок будет равно  $C_L^n$ . Тогда (12.329) можно переписать следующим образом:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} \sum_{\{C_L\}} \frac{(-\beta)^{n(C_L)} [L - n(C_L)]!}{L!} \left\langle \alpha \left| A \prod_{j=1}^L H_{l_j} \right| \alpha \right\rangle, \quad (12.330)$$

где  $n(C_L)$  есть число неединичных операторов в последовательности операторной строки  $C_L$ . Таким образом, в базисе  $\mathcal{B}_\alpha$  среднее от оператора  $A$  имеет вид

$$\langle A \rangle = \sum_{\alpha} \sum_{C_L} A(\alpha, C_L) W(\alpha, C_L) \quad (12.331)$$

с весовым множителем

$$W(\alpha, C_L) = \frac{1}{Z} \frac{(-\beta)^{n(C_L)} [L - n(C_L)]!}{L!} \left\langle \alpha \left| A \prod_{j=1}^L H_{l_j} \right| \alpha \right\rangle, \quad (12.332)$$

а сам оператор в данном представлении имеет вид

$$A(\alpha, C_L) = \frac{\left\langle \alpha \left| A \prod_{j=1}^L H_{l_j} \right| \alpha \right\rangle}{\left\langle \alpha \left| \prod_{j=1}^L H_{l_j} \right| \alpha \right\rangle}. \quad (12.333)$$

Определим операторы  $H'_i$ , дополнительные к операторам  $H_i$ , в соответствии с условием

$$\langle \alpha' | H'_i | \alpha \rangle = \begin{cases} 1, & \text{если } \langle \alpha' | H_i | \alpha \rangle \neq 0, \\ 0, & \text{если } \langle \alpha' | H_i | \alpha \rangle = 0, \end{cases} \quad |\alpha\rangle, |\alpha'\rangle \in \mathcal{B}_\alpha; \quad (12.334)$$

таким образом, действие этих операторов на базисный вектор будет равно либо нулю, либо этому же базисному вектору. Тогда для операторной строки можно записать следующее:

$$\sum_{\alpha} \left\langle \alpha \left| H_{l_L} \dots H_{l_2} H_{l_1} \right| \alpha \right\rangle = \sum_{\alpha} \left\langle \alpha \left| H'^{+}_{l_1} H_{l_1} H_{l_L} \dots H_{l_2} H'^{-}_{l_1} \right| \alpha \right\rangle. \quad (12.335)$$

Определим смещенное на один индекс состояние  $|\alpha(1)\rangle = H'^{-}_{l_1} |\alpha\rangle$ , также входящее в базис, тогда

$$\sum_{\alpha} \left\langle \alpha \left| H_{l_L} \dots H_{l_2} H_{l_1} \right| \alpha \right\rangle = \sum_{\alpha} \left\langle \alpha(1) \left| H_{l_1} H_{l_L} \dots H_{l_2} \right| \alpha(1) \right\rangle. \quad (12.336)$$

Очевидно, что статистические веса от такой циклической перестановки не меняются:

$$W(\alpha, C_L) = W(\alpha(1), C_L(1)), \quad (12.337)$$

где  $C_L(1)$  означает последовательность индексов, циклически сдвинутых на единицу относительно исходной последовательности  $C_L$ . Обобщим (12.337) на любую циклическую перестановку:

$$W(\alpha, C_L) = W(\alpha(p), C_L(p)). \quad (12.338)$$

Здесь смещенное состояние  $\alpha(p)$  получается после  $p$ -кратного действия оператора  $H'_i$ :

$$|\alpha(p)\rangle = \prod_{j=1}^p H_{l_j} |\alpha\rangle, \quad (12.339)$$

а  $C_L(p)$  означает последовательность  $p$  раз циклически сдвинутых индексов  $l_{p+1}, l_{p+2}, \dots, l_L, l_1, \dots, l_p$ . Смещенные состояния по перестановкам удовлетворяют граничным условиям  $|\alpha(L)\rangle = |\alpha(0)\rangle = |\alpha\rangle$ . Несмотря на то, что все комбинации  $[\alpha(p), C_L(p)]$ ,  $P = 0, \dots, L-1$  имеют одинаковый вес, величины

$A [\alpha(p), C_L(p)]$  могут различаться для разных  $p$ . Для учета этого следует суммировать результат по всем перестановкам:

$$\frac{1}{L} \sum_{p=0}^{L-1} A [\alpha(p), C_L(p)].$$

Окончательно, определим конфигурационное пространство  $\{\mathcal{C}\}$ , каждое состояние которого определяется совокупностью циклически связанных состояний  $|\alpha(0)\rangle, \dots, |\alpha(L-1)\rangle$  с граничными условиями  $|\alpha(L)\rangle = |\alpha(0)\rangle$ , а также последовательностью индексов  $C_L = (l_1, l_2, \dots, l_L)$ , нумерующих действия операторов  $H'_{l_p} |\alpha(p-1)\rangle = |\alpha(p)\rangle$ . Схематично это конфигурационное пространство показано на рис. 12.111.

Вес каждой конфигурации согласно (12.332) будет

$$W(\mathcal{C}) = \frac{1}{Z} \exp \left( f(\mathcal{C}) + \sum_{p=1}^L g_p(\mathcal{C}) \right), \quad (12.340)$$

$$f(\mathcal{C}) = \ln \left( \frac{\beta^{n(C_L)} [L - n(C_L)]!}{L!} \right), \quad (12.341)$$

$$g_p(\mathcal{C}) = \ln (|\langle \alpha(p) | H_{l_p} | \alpha(p-1) \rangle|), \quad p = 1, \dots, L. \quad (12.342)$$

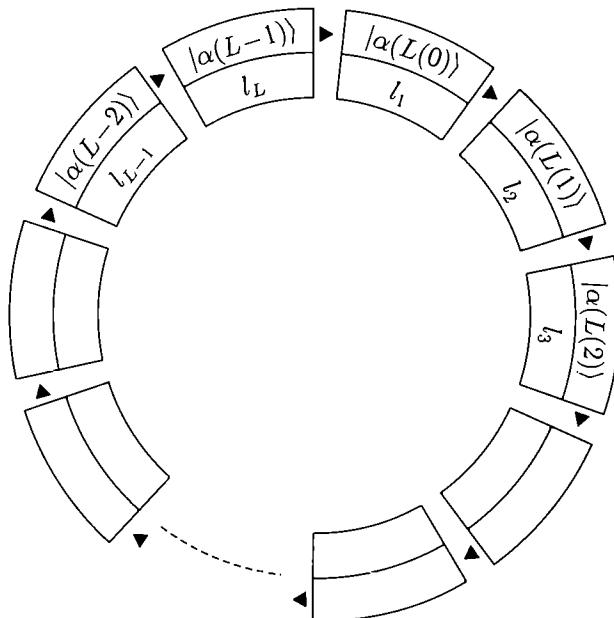


Рис. 12.111. Конфигурационное пространство  $\{\mathcal{C}\}$

**12.7.2. Расчет квантовомеханических средних.** Получим выражения для расчета физических величин и конкретизируем процедуру МК. Среднее

от любого оператора получается как среднее от функции  $A(\mathcal{C})$  с весовой функцией (12.340):

$$\langle A \rangle = \langle A(\mathcal{C}) \rangle_W, \quad (12.343)$$

необходимо только конкретизировать  $A(\mathcal{C})$  для конкретных физических величин.

Рассмотрим оператор  $A$ , диагональный в базисе  $\mathcal{B}_\alpha$ , тогда

$$A(\mathcal{C}) = \frac{1}{L} \sum_{p=0}^{L-1} \langle \alpha(p) | A | \alpha(p) \rangle. \quad (12.344)$$

Для конкретности рассмотрим спиновую модель Гейзенберга, и получим выражение для спин-спиновой корреляционной функции. Имеем

$$G(i, j) = \langle S_i^Z S_j^Z \rangle = \left\langle \frac{1}{L} \sum_{p=0}^{L-1} S_i(p) S_j(p) \right\rangle_W, \quad (12.345)$$

где  $S_j(p) = \langle \alpha(p) | S_j^Z | \alpha(p) \rangle$  — матричный элемент оператора  $z$ -проекции спина  $S_j^Z$ .

Выражение (12.345) можно переписать более конкретно, учитывая обрезание всех сумм до величины  $L$ :

$$\begin{aligned} G(i, j) &= \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} \sum_{\{C_L\}} \sum_{p=0}^L \frac{\beta(-\beta)^{n(C_L)} [L - n(C_L)]!}{(L+1)!} \times \\ &\quad \times S_i(0) S_j(p) \left\langle \alpha \left| \prod_{k=0}^L H_{l_k} \right| \alpha \right\rangle. \end{aligned} \quad (12.346)$$

Как сумма по конфигурационному пространству, последнее соотношение имеет вид

$$G(i, j) = \sum_{\{C\}} \sum_{p=0}^L \frac{\beta}{L+1} S_i(0) S_j(p) W(\mathcal{C}). \quad (12.347)$$

Далее, воспользовавшись циклическими перестановками внутри операторных строк, находим

$$G(i, j) = \sum_{\{C_L\}} \sum_{p=0}^L \sum_{m=0}^{L-1} \frac{\beta}{L(L+1)} S_i(m) S_j(m+p) W(\mathcal{C}). \quad (12.348)$$

Окончательно, учитывая граничные условия  $S_j(L) = S_j(0)$ , получаем

$$G(i, j) = \left\langle \frac{\beta}{L(L+1)} \left[ \left( \sum_{p=0}^{L-1} S_i(p) \right) \left( \sum_{p=0}^{L-1} S_j(p) \right) + \sum_{p=0}^{L-1} S_i(p) S_j(p) \right] \right\rangle_W \quad (12.349)$$

Соотношения для среднего значения энергии и теплоемкости системы

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z, \quad \langle C \rangle = \beta^2 \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z \quad (12.350)$$

могут быть получены прямым дифференцированием статистической суммы в представлении (12.331)–(12.332):

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= -\frac{1}{\beta} \langle n(C_L) \rangle_W, \\ \langle C \rangle &= \langle n^2(C_L) \rangle_W - \langle n(C_L) \rangle_W^2 - \langle n(C_L) \rangle_W. \end{aligned} \quad (12.351)$$

Таким образом, для расчета средней энергии и теплоемкости системы необходимо просто собирать статистику по неединичным операторам в конфигурациях — операторных строках.

Сам процесс перебора состояний заключается либо в локальных изменениях состояний в операторных строках, либо в изменении последовательности индексов, нумерующих действия операторов сдвига. Детали процесса перебора будут рассмотрены в следующем разделе, а здесь сформулируем алгоритм Метрополиса в применении к представлению  $\{\mathcal{C}\}$ .

Пусть алгоритм стартует со случайной конфигурации  $\mathcal{C}$ , обладающей статистическим весом  $W(\mathcal{C})$  вида (12.340). Детальный баланс перехода системы в новую конфигурацию  $\mathcal{C}'$ дается выражением

$$W(\mathcal{C}) \cdot P(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = W(\mathcal{C}') \cdot P(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}), \quad (12.352)$$

где  $P(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$  — вероятность перехода системы из конфигурации  $\mathcal{C}$  в конфигурацию  $\mathcal{C}'$ . Если обозначить через  $\Delta$  изменение конфигурации, необходимое для перевода конфигурации  $\mathcal{C}$  в конфигурацию  $\mathcal{C}'$ , и, соответственно,  $-\Delta$  — обратное изменение, тогда

$$\begin{aligned} \mathcal{C} &\xrightarrow{\Delta} \mathcal{C}'; \\ \mathcal{C}' &\xleftarrow{-\Delta} \mathcal{C}, \end{aligned} \quad (12.353)$$

то вероятность перехода можно переписать через произведение вероятностей:

$$P(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = P_c(\mathcal{C}, \Delta) P_a(\mathcal{C}, \mathcal{C}'), \quad (12.354)$$

где  $P_c(\mathcal{C}, \Delta)$  — вероятность того, что в конфигурации произойдут изменение  $\Delta$ ;  $P_a(\mathcal{C}, \mathcal{C}')$  — вероятность принять новую конфигурацию  $\mathcal{C}'$ . Предположим, что  $P_c(\mathcal{C}, \Delta)$  симметрично в прямую и обратную стороны (что, как правило, выполняется):

$$P_c(\mathcal{C}, \Delta) = P_c(\mathcal{C}', -\Delta), \quad (12.355)$$

тогда согласно алгоритму Метрополиса получаем, что

$$P_a(\mathcal{C}, \mathcal{C}') = \begin{cases} \frac{W(\mathcal{C}')}{W(\mathcal{C})}, & \text{если } W(\mathcal{C}') < W(\mathcal{C}), \\ 1, & \text{если } W(\mathcal{C}') \geq W(\mathcal{C}). \end{cases} \quad (12.356)$$

Рассмотрим в общем виде выражения для изменения конфигураций. Каждая конфигурация определяется циклически связанными состояниями  $|\alpha(0)\rangle, \dots, |\alpha(L-1)\rangle$  и последовательностью индексов  $C_L$ . Соответственно, в схеме могут быть два типа изменений конфигураций. Первый тип изменений — глобальные изменения, когда последовательность  $C_L$  не меняется, а состояния изменяются. Пусть, например, рассматривается спиновая система, и матричные элементы  $S_j(p)$  (12.345) зависят от циклических перестановок состояний  $p = 0, \dots, L-1$ . Произведем изменение всех состояний на узлах, не меняя при этом индексы:

$$S'_j(p) = S_j(p) + \Delta_j, \quad p = 0, \dots, L-1, \quad (12.357)$$

при этом  $S'_j(p)$  и  $\Delta_j$  находятся в диапазоне  $-S, -S+1, \dots, S$ . Тогда с учетом (12.340) получаем

$$\frac{W(\mathcal{C}')}{W(\mathcal{C})} = \exp \left( \sum_{p=1}^L [g_p(\mathcal{C}') - g_p(\mathcal{C})] \right). \quad (12.358)$$

Второй тип изменения — изменения индексов — локальная процедура. Пусть в ограниченном диапазоне  $[p_1, p_2]$  (с учетом периодичности) значения индексов меняются на новые, тогда согласно (12.340) имеем

$$\begin{aligned} \frac{W(\mathcal{C}')}{W(\mathcal{C})} &= \\ &= \begin{cases} \exp \left( f(\mathcal{C}') - f(\mathcal{C}) + \sum_{p=p_1}^{p_2} (g_p(\mathcal{C}') - g_p(\mathcal{C})) \right), & p_2 > p_1; \\ \exp \left( f(\mathcal{C}') - f(\mathcal{C}) + \sum_{p=p_1}^L (g_p(\mathcal{C}') - g_p(\mathcal{C})) + \sum_{p=1}^{p_2} (g_p(\mathcal{C}') - g_p(\mathcal{C})) \right), & p_2 \leq p_1. \end{cases} \end{aligned} \quad (12.359)$$

**12.7.2.1. Применение SSE-алгоритма для гейзенберговского антиферромагнетика.** Рассмотрим модель Гейзенберга для дискретной системы с числом узлов  $N$ , и выберем в качестве базиса  $B_\alpha$  базис собственных функций оператора  $S_j^Z$ ,  $j = 1, \dots, N$ :

$$|\alpha\rangle = |S_1, S_2, \dots, S_N\rangle, \quad (12.360)$$

где  $S_j$  — собственные числа оператора  $S_j^Z$ .

Для того чтобы удовлетворить условию (12.328), необходимо гейзенберговский гамильтониан

$$H = J \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} \quad (12.361)$$

записать в несколько ином виде. Сначала преобразуем (12.361) в терминах операторов  $S_j^Z$ ,  $S_j^+$  и  $S_j^-$ :

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \left[ S_i^Z S_j^Z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right]. \quad (12.362)$$

Далее разобьем гамильтониан на функциональные части:

$$H = \sum_{b=1}^N \sum_{t=1}^3 H_{tb}, \quad (12.363)$$

$$H_{1b} = JS_b^Z S_{b+1}^Z, \quad H_{2b} = \frac{J}{2} S_b^+ S_{b+1}^-, \quad H_{3b} = \frac{J}{2} S_b^- S_{b+1}^+.$$

Без потери общности изложения рассмотрим одномерный случай, антиферромагнитное состояние  $J > 0$  и периодические граничные условия, так что  $S_{N+1} = S_1$ .

Сделаем также сдвиг энергии, при котором

$$H = \sum_{b=1}^N \sum_{t=1}^3 H_{tb} \Rightarrow H = \sum_{b=1}^N \sum_{t=1}^3 H_{tb} - Nc, \quad (12.364)$$

где  $c$  — константа, это обеспечит положительность всех статистических весов.

Гамильтониан, записанный в виде (12.363), удовлетворяет условию (12.328), так как

$$\begin{aligned} H_{1b} &= | \dots, S_b, S_{b+1}, \dots \rangle = h_1(S_b, S_{b+1}) | \dots, S_b, S_{b+1}, \dots \rangle, \\ H_{2b} &= | \dots, S_b, S_{b+1}, \dots \rangle = h_2(S_b, S_{b+1}) | \dots, S_b + 1, S_{b+1} - 1, \dots \rangle, \end{aligned} \quad (12.365)$$

$$H_{3b} = | \dots, S_b, S_{b+1}, \dots \rangle = h_3(S_b, S_{b+1}) | \dots, S_b - 1, S_{b+1} + 1, \dots \rangle,$$

$$h_1(S_a, S_b) = JS_a S_b + c,$$

$$h_2(S_a, S_b) = \frac{J}{2} \sqrt{[S(S+1) - S_a(S_a+1)][S(S+1) - S_b(S_b+1)]}, \quad (12.366)$$

$$h_3(S_a, S_b) = h_2(S_b, S_a).$$

Обозначим через  $H'_{tb}$  операторы, дополнительные к операторам  $H_{tb}$  и определенные согласно (12.334), при этом  $H'_{00} = H_{00}$  — единичные операторы, тогда  $C_L$  удобно представить в виде последовательности индексных пар  $\binom{t_1}{b_1}, \binom{t_2}{b_2}, \dots, \binom{t_L}{b_L}$ , где  $t_i = 1; 2; 3$  и  $b_i = 1; 2; \dots; N$  или  $t_i = b_i = 0$ . Число индексных пар, не равных  $\binom{0}{0}$  (такие пары соответствуют единичным операторам), обозначим  $n(C_L)$ . Соответственно, конфигурационное пространство  $\{\mathcal{C}\}$  означает совокупность последовательностей таких индексных пар, относящихся к операторной строке, и спиновых состояний  $|\alpha(0)\rangle, \dots, |\alpha(L-1)\rangle$ , удовлетворяющих условию  $H'_{t_p b_p} |\alpha(p-1)\rangle = |\alpha(p)\rangle$  и

граничным условиям  $|\alpha(L)\rangle = |\alpha(0)\rangle$ . Окончательно вес конфигурации записывается в виде

$$W(\mathcal{C}) = \frac{1}{Z} \frac{(-\beta)^{n(C_L)}}{L!} \left\langle \alpha(0) \left| \prod_{i=1}^L H_{t_i b_i} \right| \alpha(0) \right\rangle. \quad (12.367)$$

Операторные строки содержат одинаковое количество повышающих и понижающих  $z$ -проекцию спина операторов. По смыслу членов гамильтониана (12.363) пара индексов  $\binom{2}{b}$  отмечает связь из узла  $b$  в  $b+1$  (соответствует оператору  $S_b^+ S_{b+1}^-$ ), а индексы  $\binom{3}{b}$  — связь из  $b+1$  в  $b$  ( $S_b^- S_{b+1}^+$ ). Связи формируются всей последовательностью индексов, так что образуются своеобразные петли (рис. 12.112), при этом каждый узел имеет одинаковое число входящих и выходящих связей. В итоге число операторов  $H_{2b}$  и  $H_{3b}$  четно.

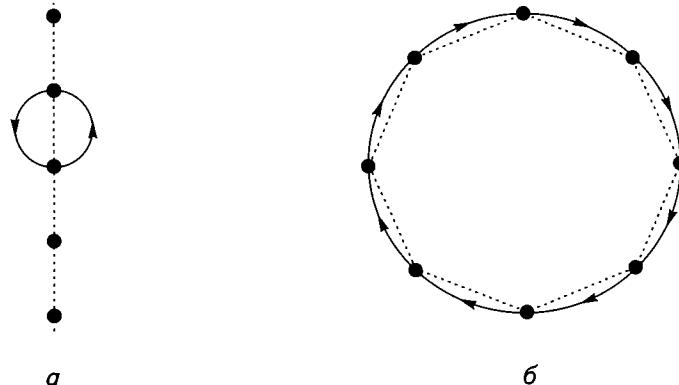


Рис. 12.112. «Элементарные петли», из которых могут быть построены все петли для одномерной решетки: *а* — для открытых граничных условий; *б* — для периодических граничных условий

Если выбрать постоянную  $c$  в (12.364) из условия

$$JS^2 + c < 0, \quad (12.368)$$

то все статистические веса будут положительными. Функция  $g_p$  в (12.342) тогда имеет вид

$$g_p(\mathcal{C}) = \begin{cases} 0, & \text{если } t_p = 0, \\ \ln (-h_1(S_{b_p}(p-1), S_{b_p+1}(p-1))), & \text{если } t_p = 1, \\ \ln (h_{t_p}(S_{b_p}(p-1), S_{b_p+1}(p-1))), & \text{если } t_p = 2; 3. \end{cases} \quad (12.369)$$

Моделирование МК будет состоять в локальных и глобальных изменениях конфигураций, как обсуждалось ранее. Глобальные изменения в соответствии с (12.196) будут состоять в переключении какого-либо спина  $j$  и изменении соответствующих матричных элементов. Определим все связанные с этим

переключением индексные пары  $\begin{pmatrix} t_{p_j} \\ b_{p_j} \end{pmatrix}$  как  $\{p_j\}$ , тогда отношение статистических весов новой и старой конфигураций можно записать в виде

$$\frac{W(\mathcal{C}')}{W(\mathcal{C})} = \exp \left( \sum_{p \in \{p_j\}} [g_p(\mathcal{C}') - g_p(\mathcal{C})] \right). \quad (12.370)$$

Локальные изменения будут заключаться в изменениях индексов без переключения спинов. Первый тип локальных изменений состоит в замене одной случайно выбранной пары  $p$  из набора  $\left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} 1 \\ N \end{pmatrix} \right\}$  на другую пару из этого же набора. Отношение весов новой и старой конфигураций будет

$$\frac{W(\mathcal{C}')}{W(\mathcal{C})} = \exp (f(\mathcal{C}') - f(\mathcal{C}) + g_p(\mathcal{C}') - g_p(\mathcal{C})). \quad (12.371)$$

Более подробно, для выполнения детального баланса вероятность перехода  $P \left[ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}_p \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ b \end{pmatrix}_p \right]$  должна удовлетворять следующему соотношению:

$$\frac{P \left[ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}_p \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ b \end{pmatrix}_p \right]}{P \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ b \end{pmatrix}_p \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}_p \right]} = \frac{W(\alpha, S_{n+1})}{W(\alpha, S_n)} p \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ b \end{pmatrix}_p \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}_p \right], \quad (12.372)$$

где  $W(\alpha, S_n)$  — статистический вес конфигурации с  $n$  ненулевыми операторами в выбранной строке. Если связь выбирается случайно из  $N$  всех связей, то из (12.372) получаем [209]:

$$\begin{aligned} P \left[ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}_p \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ b \end{pmatrix}_p \right] &= \frac{N\beta J}{2(L-n)}, \\ P \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ b \end{pmatrix}_p \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}_p \right] &= \frac{2(L-n+1)}{N\beta J}. \end{aligned} \quad (12.373)$$

Второй тип локальных изменений заключается во взаимных изменениях случайно выбранных двух пар индексов  $p_1$  и  $p_2$ . Ниже в фигурных скобках указаны пары, которые можно взаимно менять друг на друга:

$$\begin{aligned} &\left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ m \end{pmatrix}, \right. \\ &\quad \left. \begin{pmatrix} 1 \\ m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ n \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 2 \\ m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ m \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 3 \\ m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ m \end{pmatrix} \right\}, \\ &\left\{ \begin{pmatrix} 2 \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ b \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 2 \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ m \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ b \end{pmatrix} \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \begin{pmatrix} 3 \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ b \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 3 \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ m \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ b \end{pmatrix} \right\}, \\
 & \left\{ \begin{pmatrix} 2 \\ a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ b \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 3 \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ a \end{pmatrix} \right\}, \quad a \neq b, \\
 & \left\{ \begin{pmatrix} 2 \\ a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ b \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 2 \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ a \end{pmatrix} \right\}, \\
 & \left\{ \begin{pmatrix} 3 \\ a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ b \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 3 \\ b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ a \end{pmatrix} \right\},
 \end{aligned} \tag{12.374}$$

где  $m, n = 1, \dots, N$ . Отношение статистических весов, соответственно, будет

$$\frac{W(\mathcal{C}')}{W(\mathcal{C})} = \exp(f(\mathcal{C}') - f(\mathcal{C}) + g_{p_1}(\mathcal{C}') - g_{p_1}(\mathcal{C}) + g_{p_2}(\mathcal{C}') - g_{p_2}(\mathcal{C})). \tag{12.375}$$

В работах [187, 209] применяются также дополнительные процедуры глобальных переключений по всей системе, не рассмотренные здесь. Представленные процедуры достаточно для обеспечения эргодичности схемы. В общем случае локальные и глобальные процедуры подбираются для каждой конкретной модели [112, 210] для наибольшей эффективности алгоритма. Например, в [113] введены специальные операторно-петлевые обновления для ускорения сходимости.

**12.7.2.2. Результаты расчетов.** В работе [187] были проведены расчеты диагональных средних для одномерного антиферромагнетика, в частности была рассчитана фурье-компоненты магнитного структурного фактора

$$\begin{aligned}
 S(q) &= \frac{1}{N} \sum_{kl} e^{i(k-l)} C(k, l), \\
 C(k, l) &= \frac{3}{S(S+1)} \langle S_k^Z S_l^Z \rangle.
 \end{aligned} \tag{12.376}$$

Результаты расчетов показаны на рис. 12.113 и сопоставлены с результатами точной диагонализации.

Получены данные и для достаточно макроскопических систем с  $N = 64$  (рисунках 12.114, 12.115) для энергии системы и восприимчивости

$$\chi(q) = \frac{3}{S(S+1)} \frac{1}{N} \sum_{kl} e^{i(k-l)} G(k, l). \tag{12.377}$$

В работе [209] методом SSE рассчитан двумерный ферромагнетик с  $S = 1/2$ . Была проведена модификация алгоритма, что позволило учесть внешнее магнитное поле и рассчитать намагниченность системы (рис. 12.116).

В работах [112, 210] было проведено обобщение SSE-алгоритма в представлении взаимодействия, что позволило явно ввести в схему переменную

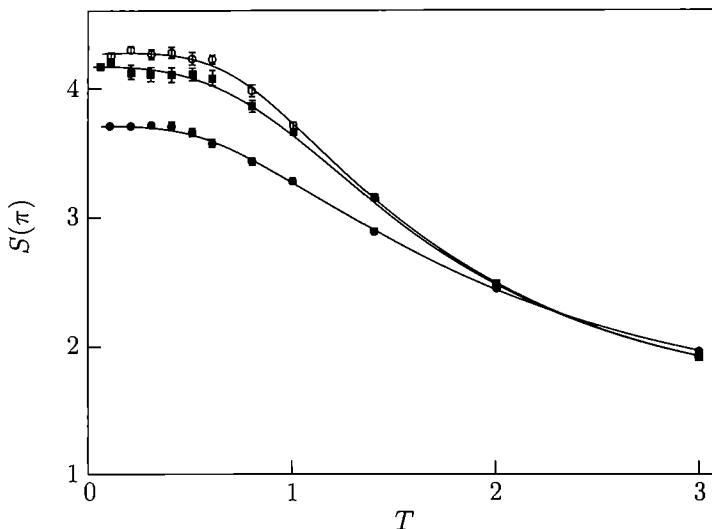


Рис. 12.113. Магнитный структурный фактор из [187] для систем  $S = 1/2$ ,  $N = 10$  (сплошные круги);  $S = 1$ ,  $N = 8$  (открытые круги);  $S = 3/2$ ,  $N = 6$  (квадраты). Линиями показано соответствующее точное решение

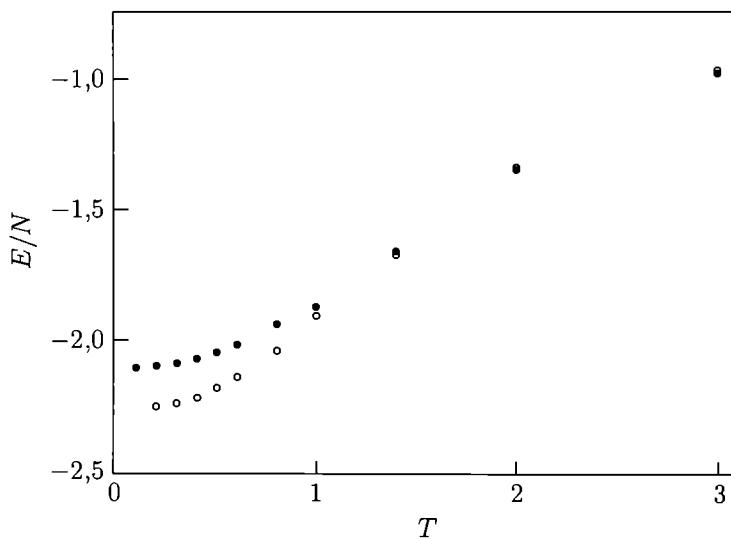


Рис. 12.114. Энергия гейзенберговского антиферромагнетика в зависимости от температуры (данные из [187]);  $N = 64$ ,  $S = 1$  (сплошные круги);  $N = 64$ ,  $S = 3/2$  (открытые круги)

т шкалы мнимого времени и рассчитать такие недиагональные средние, как функция Грина, спиновый ток

$$j_s = \frac{i}{2} \sum_{\langle ij \rangle_x} (S_i^+ S_j^- - S_i^- S_j^+) \quad (12.378)$$

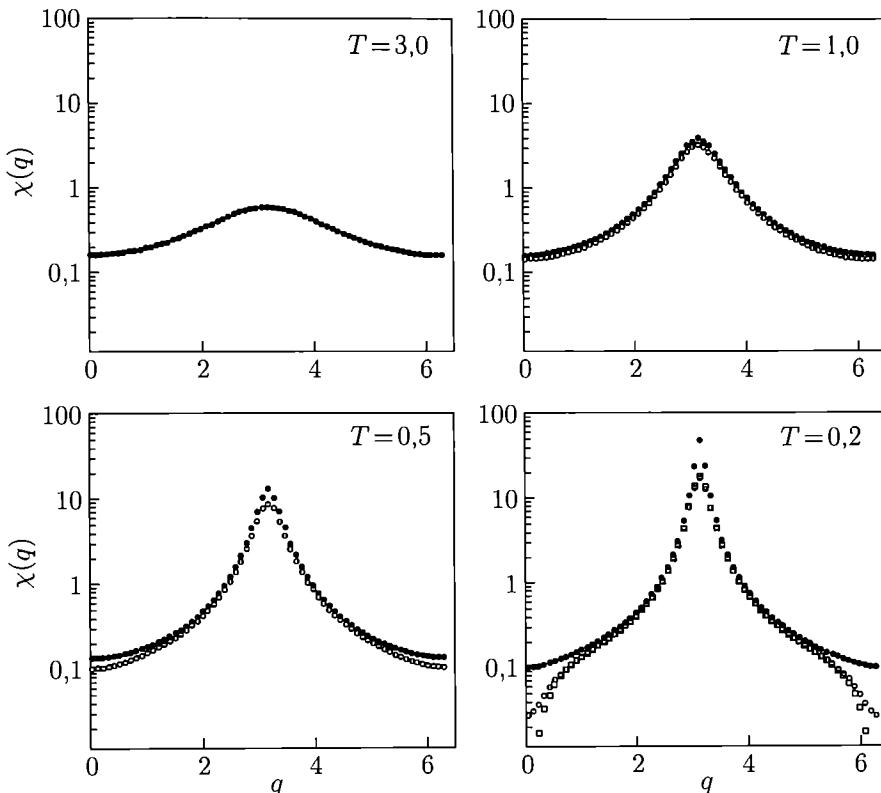


Рис. 12.115. Восприимчивость гейзенберговского антиферромагнетика для различных температур (данные из [187]);  $N = 64$ ,  $S = 1$  (открытые круги);  $N = 64$ ,  $S = 3/2$  (сплошные круги)

и коррелятор «ток–ток»

$$\Lambda_s(\omega_m) = \frac{1}{L^2} \int_0^\beta e^{-i\omega_m \tau} \langle j_s(\tau) j_s(0) \rangle d\tau, \quad \omega_m = 2\pi m T. \quad (12.379)$$

На рис. 12.117 показаны результаты из [210] для двумерных  $L \times L$  систем ( $L \leq 16$ ).

## 12.8. Высокотемпературное разложение и петлевые алгоритмы

Метод SSE не лишен недостатков. Во-первых, при низких температурах он испытывает критическое замедление, т. е. вблизи точек фазовых переходов сходимость резко замедляется. Во-вторых, существуют определенные трудности при расчете недиагональных средних, особенно средних, зависящих от мнимого времени  $\tau$ , таких, как функция Грина и др.; сложно также рассчитывать коллективные отклики, *winding numbers* из-за отсутствия фиктивных состояний и т. д. Кроме того, метод SSE детально разработан для спиновых

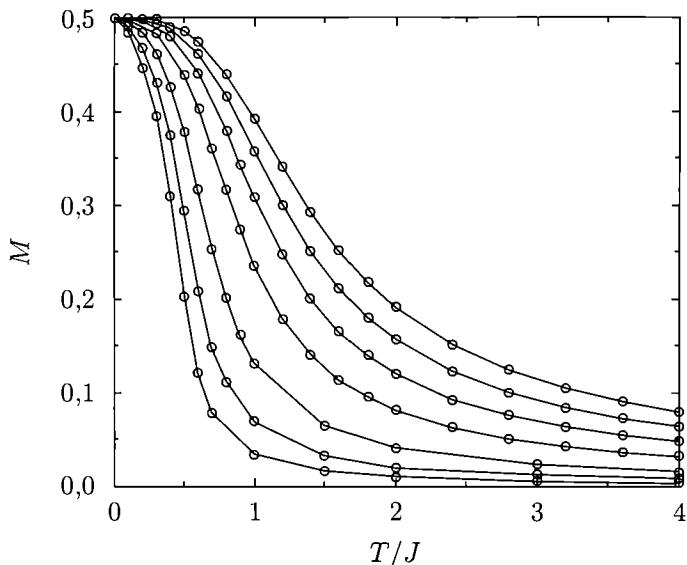


Рис. 12.116. Намагниченность двумерного ферромагнетика с  $S = 1/2$  для различных значений внешнего поля от 0 до 1 в единицах  $J$  (данные из [209]). Система  $32 \times 32$

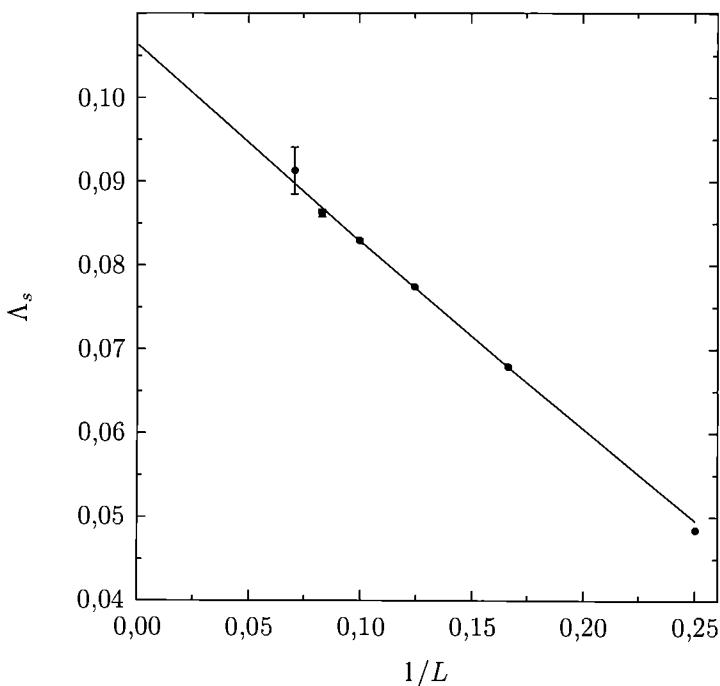


Рис. 12.117. Коррелятор «ток–ток» для двумерной модели Гейзенберга в зависимости от размера системы. Данные из [210]

моделей, а его обобщение для бозе-статистики весьма затруднено из-за большого количества степеней свободы на узле.

Все это явилось причиной появления различных комбинаций SSE-алгоритма и петлевых методов [109, 111, 113]. В этом разделе будут рассмотрены две такие комбинации: SSE-алгоритм с операторными петлями [113] и SSE-алгоритм с прямыми петлями [109].

**12.8.1. Формулировка SSE-алгоритма для XXZ-модели.** Рассмотрим достаточно популярную XXZ-модель Гейзенберга с  $S = 1/2$  и осевой анизотропией  $\Delta$  при наличии внешнего магнитного поля:

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^X S_j^X + S_i^Y S_j^Y + \Delta S_i^Z S_j^Z) - h \sum_i S_i^Z. \quad (12.380)$$

Воспроизведем схему SSE применительно к гамильтониану (12.380) и введем в схему *операторные петли*.

Выберем в качестве базиса собственные функции оператора  $S^Z$ :

$$|S_1^Z, S_2^Z, \dots, S_N^Z\rangle, \quad (12.381)$$

где  $N$  — число узлов в системе, и запишем гамильтониан как сумму по связям  $H_b$ , нумеруемым индексом  $b$  и соединяющим пары узлов  $i(b), j(b)$ :

$$H = -J \sum_{b=1}^{N_b} H_b \quad (J > 0). \quad (12.382)$$

Число связей  $N_b = dN$  для  $d$ -мерной кубической решётки. Разобьем также операторы  $H_b$  на диагональную  $H_{1b}$  и недиагональную  $H_{2b}$  части:

$$H_b = H_{1b} - H_{2b}, \quad (12.383)$$

$$H_{1b} = C - \Delta S_{i(b)}^Z S_{j(b)}^Z + h_b (S_{i(b)}^Z + S_{j(b)}^Z), \quad (12.384)$$

$$H_{2b} = \frac{1}{2} (S_{i(b)}^+ S_{j(b)}^- + S_{i(b)}^- S_{j(b)}^+),$$

$$h_b \equiv \frac{h}{2dJ}. \quad (12.385)$$

Таким образом, узельные характеристики (поле  $h$ ) также оказались разнесены по конкретным связям  $b$ . Константу  $C$  нужно выбрать так, чтобы матричные элементы диагональной части гамильтониана были положительны; это условие выполняется при  $C \geq \frac{\Delta}{4} + h_b$ , поэтому выберем

$$\begin{aligned} C &= C_0 + \varepsilon, \\ C_0 &= \frac{\Delta}{4} + h_b, \end{aligned} \quad (12.386)$$

где  $\varepsilon \geq 0$  — достаточно малая постоянная.

Далее, согласно SSE-алгоритму при разложении статистической суммы в виде

$$Z = \text{Tr} (e^{-\beta H}) = \sum_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle \alpha | H^n | \alpha \rangle, \quad (12.387)$$

где  $\beta \equiv J/T$ , операторные строки в (12.387) зависят от последовательности пар индексов

$$S_n = [a_1, b_1], [a_2, b_2], \dots, [a_n, b_n], \quad (12.388)$$

где  $a_i, i = 1; 2$ , означает тип оператора (единица соответствует диагональному оператору, двойка — недиагональному), а  $b_i = 1, \dots, N_b$  означает номер связи. Соответственно,

$$Z = \sum_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{S_n} (-1)^{n_2} \frac{\beta^n}{n!} \left\langle \alpha \left| \prod_{i=1}^n H_{a_i, b_i} \right| \alpha \right\rangle, \quad (12.389)$$

$n_2$  есть полное число изменяющих спин на узле операторов  $[2, b]$  в  $S_n$ .

Определим согласно схеме SSE последовательность состояний, производных от исходного состояния  $|\alpha\rangle$ , получающихся при последовательном  $p$ -кратном действии на него операторов  $H_{a_i, b_i}$ :

$$|\alpha(p)\rangle \sim \prod_{i=1}^p H_{a_i, b_i} |\alpha\rangle \quad (12.390)$$

с граничными условиями  $|\alpha(n)\rangle = |\alpha(0)\rangle$ . Тогда совокупность состояний (12.390) и пар индексов (12.388) ( $\alpha, S_n$ ) определяет конфигурационное пространство для моделирования МК. Так же, как и в обычной схеме SSE, ограничим длину строк достаточно большим числом  $M$ , добавив в каждую строку  $(M - n)$  единичных операторов  $H_{00} \equiv 1$ , расставив их всеми возможными способами (что приведет к появлению в формуле множителя  $(C_N^n)^{-1}$ ). Статистическая сумма тогда принимает стандартный для SSE-схемы вид:

$$Z = \sum_{\alpha} \sum_{S_M} \frac{\beta^n (M - n)!}{M!} \left\langle \alpha \left| \prod_{i=1}^n H_{a_i, b_i} \right| \alpha \right\rangle. \quad (12.391)$$

Для среднего числа ненулевых операторов в строке  $n$  (т. е. операторов, не равных единичным,  $[a_i, b_i] \neq [0, 0]$ ) существует следующее соотношение [187]:

$$\langle n \rangle = \beta N_b |E_b|, \quad (12.392)$$

где  $E_b$  — средняя энергия, приходящаяся на одну связь  $b$ .

**12.8.2. SSE с операторно-петлевыми обновлениями.** Рассмотрим процедуры обновления конфигураций, используемые в алгоритме МК. Пусть начальной конфигурацией является нулевая:  $[0, 0]_1, \dots, [0, 0]_M$ .

1. Первая процедура — изменение нулевой пары индексов на индексы, соответствующие единичному диагональному оператору:  $[0, 0]_p \leftrightarrow [1, b]_p$ , которая меняет степень  $n$  строки на единицу,  $n \rightarrow n \pm 1$ . Соответствующие вероятности переходов согласно схеме Метрополиса равны:

$$P([0, 0]_p \leftrightarrow [1, b]_p) = \frac{N_b \beta \langle \alpha(p) | H_{1,b} | \alpha(p) \rangle}{M - n}, \quad (12.393)$$

$$P([1, b]_p \leftrightarrow [0, 0]_p) = \frac{M - n + 1}{N_b \beta \langle \alpha(p) | H_{1,b} | \alpha(p) \rangle}. \quad (12.394)$$

Попытки таких диагональных обновлений проводятся для всех  $p = 1, \dots, M$ , состояния  $|\alpha(p)\rangle$  при этом не меняются.

2. Вторая процедура — «*операторная петля*» — состоит из последовательности переходов  $[1, b]_p \leftrightarrow [2, b]_p$  и связана с изменением  $z$ -проекции спина (для  $S = 1/2$ , таким образом, это будет просто переключение спина  $\uparrow \leftrightarrow \downarrow$ ); степень  $n$  при этом не меняется. Эта процедура является альтернативным подходом для локальных процедур, рассмотренных в обычной схеме SSE, при этом алгоритм может включать как процедуры из обычной схемы SSE, так и эту процедуру. Будем называть все стандартные процедуры SSE, рассмотренные в п. 12.6, *тепловыми* в отличие от *операторно-петлевых*, рассматриваемых здесь. Для удобства на время исключим из рассмотрения единичные операторы  $[0, 0]$ , оставив в строке только операторы  $[1, b]$  и  $[2, b]$ . Пусть индекс  $p$  теперь нумерует состояния в такой сокращенной строке. Выделим в любом смещенном состоянии  $|\alpha(p)\rangle$  из (12.390) двухспиновые состояния, относящиеся к паре  $b$ :

$$|\alpha_{b_p}(p)\rangle = \left| S_{i(b_p)}^Z(p), S_{j(b_p)}^Z(p) \right\rangle. \quad (12.395)$$

Вес этих состояний

$$W(\alpha, S_n) = \frac{\beta^n}{n!} \prod_{p=1}^n \langle \alpha_{b_p}(p) | H_{b_p} | \alpha_{b_p}(p-1) \rangle. \quad (12.396)$$

Можно перечислить и рассчитать все ненулевые двухспиновые матричные элементы в (12.396):

$$\begin{aligned} \langle \downarrow\downarrow | H_b | \downarrow\downarrow \rangle &= \varepsilon, \\ \langle \downarrow\uparrow | H_b | \downarrow\uparrow \rangle &= \langle \uparrow\downarrow | H_b | \uparrow\downarrow \rangle = \frac{\Delta}{2} + h_b + \varepsilon, \\ \langle \uparrow\downarrow | H_b | \downarrow\uparrow \rangle &= \langle \downarrow\uparrow | H_b | \uparrow\downarrow \rangle = 1/2, \\ \langle \uparrow\uparrow | H_b | \uparrow\uparrow \rangle &= \varepsilon + 2h_b. \end{aligned} \quad (12.397)$$

Сейчас удобно ввести графическое представление, своеобразные диаграммы для SSE-алгоритма. Произведение матричных элементов в (12.396) можно представить как совокупность  $n$  вершин. Вершина состоит из обкладок двухспиновых состояний и оператора между ними (как в (12.397)). Каждое из двухспиновых состояний отметим кружком, при этом открытый кружок будет соответствовать спину  $\downarrow$ , а сплошной — спину  $\uparrow$ . Для  $p$ -смещенного состояния пару  $S_i^Z(p-1), S_j^Z(p-1)$  (правая обкладка вершины) рисуем внизу, над ней — левую обкладку  $S_i^Z(p), S_j^Z(p)$ , а между ними горизонтальной линией обозначаем действие оператора  $H_{b_p}$ , формирующего связь между узлами (рис. 12.118).



Рис. 12.118. Шесть различных вершин, отвечающих матричным элементам (12.397)

В [109] четыре кружка — спиновых состояния — называют *legs*, будем называть их также *хвостами*; четыре кружка, соединенные линией (действием оператора  $H_b$ ), называются *вершинами* (*vertex*). Из вершин можно составить фазовую конфигурацию системы. Вертикально друг над другом располагаются вершины для одной пары узлов в направлении смещения (изменения индекса  $p$ ), в горизонтальном направлении — пространственные узлы и связи между ними. По вертикали соблюдаются периодические граничные условия, по горизонтали — периодические или открытые в зависимости от модели. Примеры возможных фазовых конфигураций показаны на рис. 12.119.

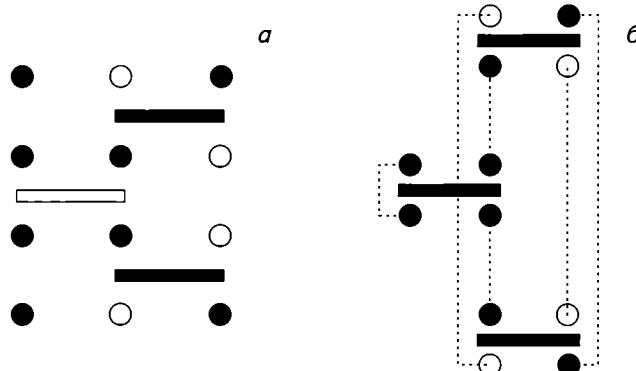


Рис. 12.119. Возможные фазовые конфигурации

На рис. 12.119, *б* штрихами отмечены связи, проходящие через единичные операторы (*bidirectional links*), и не отмечены промежуточные состояния на их пути (которые сейчас не рассматриваются). Таким образом, случай на рис. 12.119, *а* представляет собой полную фазовую картину, а случай на рис. 12.119, *б* — сокращенное описание с исключением единичных состояний.

Для конструирования петли выберем случайным образом один из  $4^p$  хвостов, принадлежащих какой-либо вершине (как на рис. 12.119, *б*). Пусть, например, это будет левый нижний хвост в вершине. Этот хвост назовем *входом* (*entrance leg*). Случайным образом выберем в этой же вершине дугой хвост (*выход*, *exit leg*), который может совпадать с входом, и одновременно переключим состояния во входе и выходе. На рис. 12.120 приведены все варианты таких переключений, причем результат переключения указан сразу под исходной ситуацией. Знаком « $\times$ » отмечены запрещенные переключения.

Несложно рассчитать матричные элементы (12.397) до и после переключения:

$$W \begin{pmatrix} f_3, f_4 \\ f_1, f_2 \end{pmatrix} (p) = \langle f_3 S_i^Z(p), f_4 S_j^Z(p) \mid H_b \mid f_1 S_i^Z(p-1), f_2 S_j^Z(p-1) \rangle, \quad (12.398)$$

где  $f_i = -1$ , если спин в хвосте  $i$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) меняется;  $f_i = +1$ , если спин не меняется.

Если вход и выход соответствуют разным узлам (процедуры *switch-and-reverse* и *switch-and-continue* на рис. 12.120), изменение соответствует смене типа операторов с диагонального на недиагональный, и наоборот.

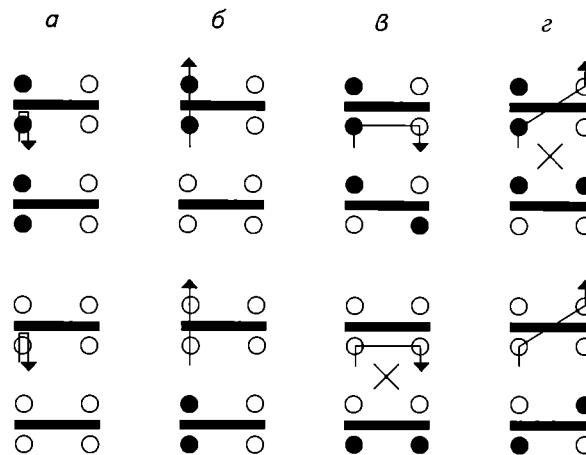


Рис. 12.120. Все возможные переключения состояний в вершинах. Вход находится в левом нижнем хвосте. Сверху показано исходное состояние, снизу — конечное. Крестами показаны запрещенные переходы. *а* — процедура *bounce*; *б* — *continue-straight*; *в* — *switch-and-reverse*; *г* — *switch-and-continue*

Построим теперь петлю. Для этого выход на текущей вершине соединим с входом на соседней вершине, в которой опять выберем выход, и т. д. Петля замыкается, если попадает в исходную вершину и исходный выход, при этом состояния в начале и конце петли должны совпасть. Новая конфигурация возникает при переключении всех состояний вдоль петли. Одна и та же конфигурация может быть получена разными способами. Примеры петель показаны на рис. 12.121.

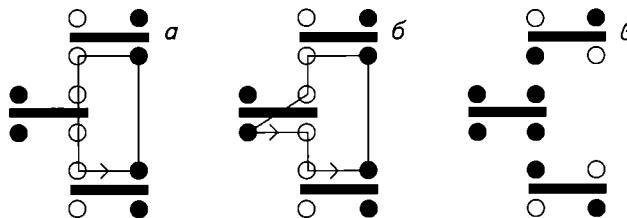


Рис. 12.121. Два разных способа формирования петель с одинаковой конфигурацией

Заметим, что описанная процедура близка к петлям, конструируемым в петлевых дискретных алгоритмах, рассмотренных ранее.

Остановимся на некоторых особенностях процедур переключения состояний, показанных на рис. 12.120. Одна из двух процедур переключения сорта *switch-and-reverse* (см. рис. 12.120, *в*), а также одна из двух процедур сорта *switch-and-continue* (см. рис. 12.120, *г*) запрещены, так как соответствующий недиагональный матричный элемент равен нулю. Напротив, на рис. 12.120, *а* процедуры сорта *bounce* всегда разрешены, так как спин в этом случае переключается дважды, и состояние не меняется. Процедура сорта *continue-straight* (см. рис. 12.120, *б*) разрешена постольку, поскольку малая константа в (12.386)  $\varepsilon > 0$ .

Может также оказаться, что на спин в состоянии  $|\alpha\rangle$  не действует никакой оператор из совокупности  $C_n$ , тогда он не может быть переключен в составе какой-либо петли. Такие «свободные» спины можно переключать с вероятностью  $1/2$ , что не меняет статистического веса конфигурации.

Заметим, что размерность пространства, в котором находятся операторные петли в схеме SSE, равна  $d + 1$ , как и во всех других рассмотренных квантовых алгоритмах МК. Таким образом, вертикальная ось смещений состояний в операторной строке — ось переменной  $p$  — здесь является аналогом шкалы мнимого времени.

Для того, чтобы в алгоритме не возникали слишком длинные петли (что может произойти при низкой температуре расчета или вблизи критических точек модели), замедляющие обновление конфигураций, в алгоритме предусматривается ограничение на длину петель, например, величиной в  $100 \langle n \rangle$  вершин. Это ограничение практически не дает систематической ошибки и не позволяет процессу МК останавливаться.

Конкретизируем теперь правила расчета вероятностей переключений в петлях согласно детальному балансу. Вероятность выбора выхода при заданном входе на этой же вершине пропорциональна соответствующему матричному элементу (12.398). Например, вероятность того, что выход находится на хвосте 2 при условии, что вход находится на хвосте 1, с учетом нормировки равна

$$P_{2,1} = \frac{W\left(\begin{smallmatrix} ++ \\ -- \end{smallmatrix}\right)}{W\left(\begin{smallmatrix} ++ \\ ++ \end{smallmatrix}\right) + W\left(\begin{smallmatrix} ++ \\ -+ \end{smallmatrix}\right) + W\left(\begin{smallmatrix} -+ \\ -+ \end{smallmatrix}\right) + W\left(\begin{smallmatrix} -+ \\ +- \end{smallmatrix}\right)}, \quad (12.399)$$

где  $\pm$  означает  $\pm 1$ , а  $W$  определяется выражением (12.398).

Рассмотрим для наглядности рис. 12.122. На рис. 12.122, *a1* стрелка указывает начало конструирования петли. Вход и следующий выход выбираются в соответствии с вероятностью (12.399). После переключения состояний получаем новую конфигурацию (варианты возможных конфигураций показаны на рис. 12.122, *a2–a4*). Для случая, показанного на рис. 12.122, *a3*, имеем

$$P_{2,1} = \frac{\langle \uparrow\downarrow | H_b | \downarrow\uparrow \rangle}{\langle \downarrow\uparrow | H_b | \downarrow\uparrow \rangle + \langle \uparrow\downarrow | H_b | \downarrow\uparrow \rangle + \langle \uparrow\uparrow | H_b | \uparrow\downarrow \rangle}. \quad (12.400)$$

В случае на рис. 12.122, *a3* вход и выход находятся на одном и том же узле. Это сорт переключений *bounce*, когда конфигурация не изменяется, и поэтому такие переключения снижают эффективность алгоритма. В случаях на рис. 12.122, *a3*, *a4* состояние вершины меняется, и появляются две связи, соединяющие соседние хвосты с различными спиновыми состояниями и узлами. Это разрывы связей (отмечены горизонтальными короткими чертами), эти конфигурации не дадут вклада в статистику, пока не замкнутся в полные петли.

Разрывы связей — такие же разрывы, какие обсуждались в червячном алгоритме CTWL. Они также создают виртуальные конфигурации, и только при их исчезновении появляются реальные конфигурации, дающие вклад в статистику при расчете физических величин. Существует два подхода к описанию этих разрывов. Первый из них описан ранее с вероятностями вида (12.399) и (12.400), дополняющими вероятности реальных конфигураций, при

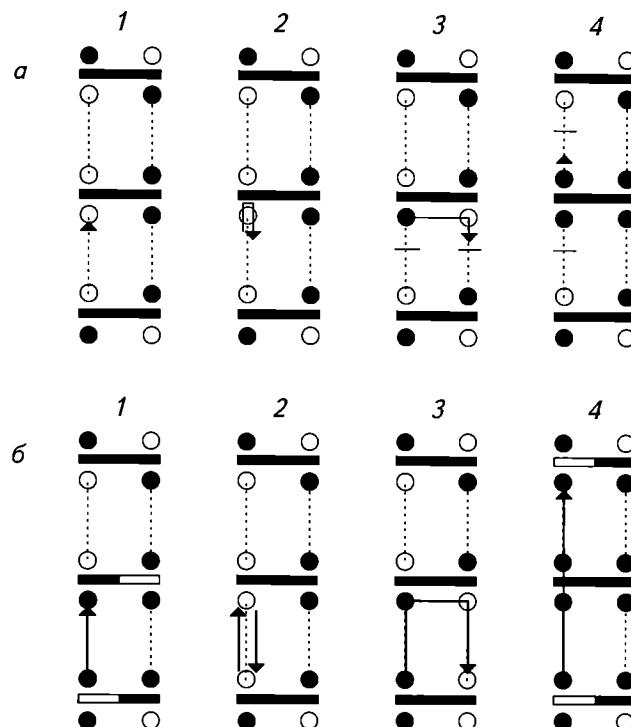


Рис. 12.122. Два способа формирования виртуальных состояний при конструировании петель

этом вероятности вида (12.400) находятся в схеме теплового баланса SSE, когда используются статистические веса реальных состояний. При замыкании петель можно использовать обычный вариант SSE, описанный в предыдущем разделе. При создании петель можно для эффективности вводить также новые вероятности, не совпадающие с (12.399), (12.400), но удовлетворяющие детальному балансу. Второй подход состоит в том, что можно считать, что на концах разрывов действуют операторы переключения единичного спина (*ladder operators*)  $S^+$  и  $S^-$ , приводящие к замыканию и размыканию петель и эффективному обновлению траекторий. Иллюстрация этого подхода показана на рис. 12.122, б. Вероятности таких процессов следует просто встраивать в общую схему SSE, а не описывать отдельно. Это фактически вариант CTWL, но в SSE-схеме.

Обе схемы эквивалентны. Однако вариант с фиктивными разрывами, не привязанными к действию каких-либо операторов на концах разрывов, более гибкий и позволяет расширить соотношения детального баланса, что будет показано далее.

**12.8.3. SSE с прямыми петлями.** Покажем в данном разделе, что уравнения детального баланса можно дополнить, включив в нее петли, которые не могут появиться при помощи обсужденных выше процедур обновлений. Схема балансных уравнений имеет неограниченное число решений, что дает дополнительные степени свободы и позволяет исключать такие неэффективные

процессы, как *bounce* (кроме особых случаев изотропных XY- и гейзенберговской моделей [109]). Решение балансных уравнений позволяет конструировать петли с вероятностью, не обязательно совпадающей с вероятностью конструирования такой же петли, но с противоположным направлением обхода — *прямые петли*.

Рассмотрим уравнение детального баланса:

$$P(s \rightarrow s') W(s) = P(s' \rightarrow s) W(s'), \quad (12.401)$$

где  $s$  означает конфигурацию с весом  $W(s)$ , который в SSE-схеме выражается через произведение весов вершин (12.396), а  $P(s \rightarrow s')$  — вероятность перехода из конфигурации  $s$  в конфигурацию  $s'$ . Заметим, что хотя весовые функции определяются гамильтонианом, вероятности переходов задаются в алгоритме.

Переходы с построением петель достаточно просто описать следующим образом, учитывая процедуры предыдущего раздела. На первом этапе выбирается один из  $4n$  хвостов конфигурации. Этот хвост считается входом и началом петли. Далее в соответствии с (12.398) выбирается выход для данной вершины, и спины на обоих хвостах переворачиваются в соответствии с весами матричных элементов. Более того, можно жестко задать правило изменения состояния выхода в зависимости от состояния входа и параметров вершины (это правило, разумеется, должно удовлетворять уравнению детального баланса). Далее выбирается следующий вход, и петля строится дальше, пока не достигнет начала петли. Схематично можно записать:

$$P(s \rightarrow s') = \sum P(e_0) P(s, e_0 \rightarrow s_1, e_1) \times P(s_1, e_1 \rightarrow s_2, e_2) \times \dots \times P(s_{n-1}, e_{n-1} \rightarrow s', e_0), \quad (12.402)$$

где  $P(e_0)$  — вероятность выбора хвоста  $e_0$  и соответствующей вершины;  $P(s_i, e_i \rightarrow s_{i+1}, e_{i+1})$  — вероятность того, что в конфигурации  $s_i$  с входом  $e_i$  выход будет в точке  $x_i$ , которая связана со следующим входом  $e_{i+1}$ , что приводит к новой конфигурации  $s_{i+1}$ . Промежуточная конфигурация  $s_i$  относится к расширенному фазовому пространству, включающему конфигурации с двумя разрывами связей.

Следующая задача — определить вероятности переходов в (12.402), действующих в расширенном пространстве. Уравнение, обратное к (12.402), переводящее  $s'$  в  $s$ , имеет вид

$$P(s' \rightarrow s) = \sum P(e_0) P(s', e_0 \rightarrow s_{n-1}, e_{n-1}) \times \dots \times P(s_2, e_2 \rightarrow s_1, e_1) \times P(s_1, e_1 \rightarrow s, e_0). \quad (12.403)$$

Выражения (12.402) и (12.403) не всегда совпадают. Подставив уравнения (12.403), (12.402) в уравнение детального баланса (12.401), находим, что оно выполняется, если выбрать

$$W(s_i) P(s_i, e_i \rightarrow s_{i+1}, e_{i+1}) = W(s_{i+1}) P(s_{i+1}, e_{i+1} \rightarrow s_i, e_i). \quad (12.404)$$

Таким образом, в уравнении детального баланса можно объединить реальные и промежуточные (их можно назвать виртуальными) состояния.

Так как каждое изменение вида ( $s_i, e_i \rightarrow s_{i+1}, e_{i+1}$ ) относится к конкретной вершине, а веса соответствующих конфигураций пропорциональны произведению вкладов от вершин (12.396), то в уравнении баланса (12.404) остается только вклад от этой конкретной вершины, а вклады остальных вершин сокращаются. Введем обозначение:

$$W_s P(s, e \rightarrow s', x) \equiv W(s, e, x), \quad (12.405)$$

где  $W_s$  — матричный элемент, относящийся только к одной вершине;  $s$  — индекс этой вершины;  $e$  — вход;  $x$  — выход. Тогда (12.404) можно переписать следующим образом:

$$W(s, l_1, l_2) = W(s', l_2, l_1). \quad (12.406)$$

Выражение (12.406) справедливо для всех видов вершин и всех типов входов и выходов. Получим уравнение для нормировки всех вероятностей перехода, суммируя по всем хвостам в вершине:

$$\sum_x P(s, e \rightarrow s_x, x) = 1. \quad (12.407)$$

Выражение (12.407) является условием эргодичности схемы. Обозначение  $s_x$  подчеркивает, что результирующая спиновая конфигурация зависит от выхода  $x$  и его состояния.

Через обозначения (12.405) выражение (12.407) принимает вид

$$\sum_x W(s, e, x) = W_s. \quad (12.408)$$

Формула (12.408) также справедлива для всех вершин и хвостов.

Фактически уравнения (12.408) с условием (12.406) определяют соотношения для прямых петель, которые далее будут рассмотрены для конкретной модели.

**12.8.4. Метод SSE с прямыми петлями для XXZ-модели.** Покажем, как работают соотношения для детального баланса в XXZ-модели, уже рассмотренной в SSE-схеме с операторными петлями.

Заметим, что согласно рис. 12.120, из четырех возможных выходов реализуются только три, так как для одного перехода матричный элемент равен нулю. Это связано с сохранением в рамках данной модели суммарной намагниченности в системе. Фактически на рис. 12.120 уже показаны возможные сегменты прямых петель. Чтобы удовлетворить соотношениям (12.406), следует еще добавить процесс, в котором два хвоста, относящиеся к сегменту петли, могли при переключении менять направление обхода сегмента петли. Этот процесс называется *reverse*, он показан на рис. 12.123.

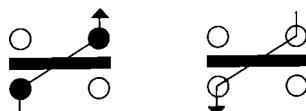


Рис. 12.123. Процесс *reverse*

Комбинируя этот процесс с процессами, показанными на рис. 12.120, получим все возможные сегменты прямых петель. При этом уравнение (12.408) связывает вершины с различными выходами, но с одними и теми же входом и спиновой конфигурацией. Это диктует условия, согласно которым не все конфигурации переходят в любые другие, а все возможные переходы оказываются сгруппированы в восемь классов, не пересекающихся друг с другом, половина из которых представлена на рис. 12.124. Оставшиеся классы могут быть получены из показанных заменой всех спинов на обратные с сохранением направлений всех стрелок.

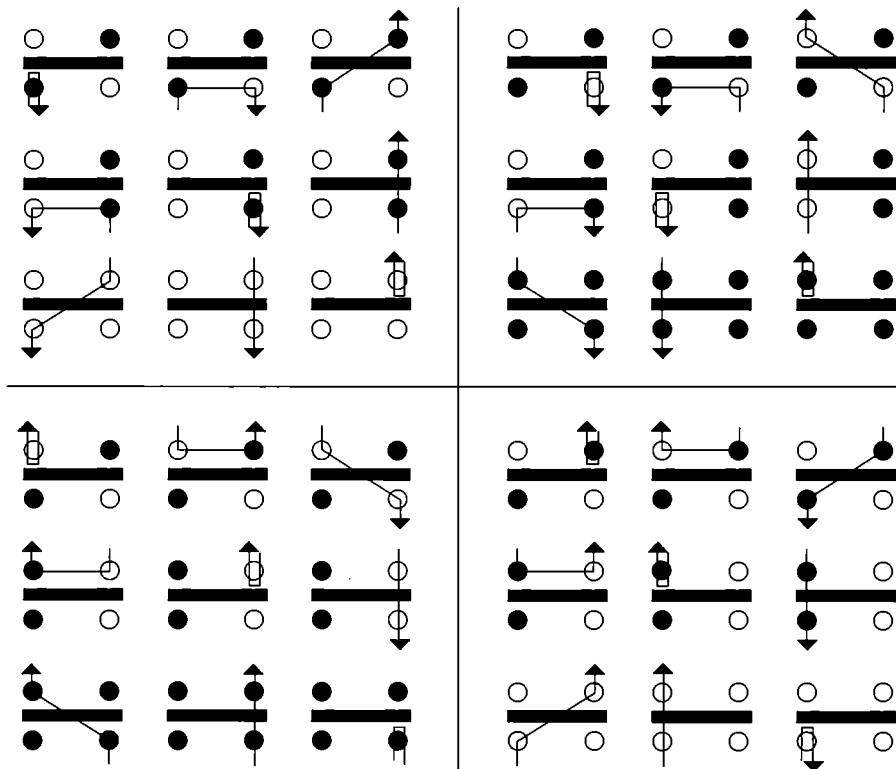


Рис. 12.124. Половина всех возможных переходов при обновлении конфигураций. Оставшиеся переходы получаются из показанных заменой всех спинов на обратные

На рис. 12.124 в рядах перебраны все три возможных входа для заданной вершины. Например, рассмотрим левый ряд в левом верхнем квадранте. В верхней вершине вход — левый нижний хвост, в средней — правый нижний, и в нижней — правый верхний, т. е. перебраны все возможные варианты. В следующих рядах перебраны и все возможные выходы.

Составим теперь балансные соотношения. В соответствии с (12.408), сумма весов всех конфигураций, которые могут быть достигнуты при заданном входе без изменения спиновой конфигурации, должна быть равна полному весу вершины, т. е. матричному элементу. Например, для левого верхнего

квадранта имеем:

$$\begin{aligned} W_1 &= b_1 + a + b, \\ W_2 &= a + b_2 + c, \\ W_3 &= b + c + b_3, \end{aligned} \quad (12.409)$$

где

$$\begin{aligned} W_1 &= \langle \uparrow\downarrow | H_b | \downarrow\uparrow \rangle = \langle \downarrow\uparrow | H_b | \uparrow\downarrow \rangle = 1/2, \\ W_2 &= \langle \downarrow\uparrow | H_b | \downarrow\uparrow \rangle = \langle \uparrow\downarrow | H_b | \uparrow\downarrow \rangle = \Delta/2 + h_b + \varepsilon, \\ W_3 &= \langle \downarrow\downarrow | H_b | \downarrow\downarrow \rangle = \varepsilon. \end{aligned} \quad (12.410)$$

Слева в (12.409) — полные веса вершин, справа — требующие определения веса сегментов прямых петель. При выводе взято во внимание также условие (12.406), учитывающее, что парное (с инверсией направления) переключение спинов в сегменте не меняет вес. Заметим, что вес двух конфигураций, показанных на рис. 12.123, отмечен как  $b$ ; а веса всех конфигураций типа *bounce* — как  $b_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ .

Учтем также, что представленные на рис. 12.124 конфигурации не независимы, так как между квадрантами есть симметрия. Например, уравнения левого верхнего квадранта совпадут с уравнениями квадранта, инверсного по заполнению правому верхнему квадранту и с тем же направлением обхода петель. Также учтем симметрию относительно инверсии по вертикальной оси (оси мнимого времени). Это приводит к совпадению уравнений левого верхнего квадранта с уравнениями правого нижнего. В итоге остаются независимыми только уравнения левого нижнего квадранта:

$$\begin{aligned} W_1 &= b'_1 + a' + b', \\ W_2 &= a' + b'_2 + c', \end{aligned} \quad (12.411)$$

$$\begin{aligned} W_3 &= b' + c' + b'_3, \\ W_4 &= \langle \uparrow\uparrow | H_b | \uparrow\uparrow \rangle = \varepsilon + 2h_b. \end{aligned} \quad (12.412)$$

Заметим, что в отсутствие внешнего поля уравнения (12.411) и (12.409) эквивалентны.

При решении уравнений (12.411), (12.409) обратим внимание на то, что в каждом соотношении шесть неизвестных в трех уравнениях с дополнительными условиями неотрицательности решений. Таким образом, есть возможность подобрать решения, наиболее эффективные для процесса МК.

Один из способов такого подбора заключается в выборе в качестве решения матричных элементов вершин (12.399), (12.400) (будем называть это решением А):

$$\begin{aligned} a &= \frac{W_1 W_2}{W_1 + W_2 + W_3}, & b &= \frac{W_1 W_3}{W_1 + W_2 + W_3}, \\ c &= \frac{W_2 W_3}{W_1 + W_2 + W_3}, & b_i &= \frac{W_i^2}{W_1 + W_2 + W_3}, \end{aligned} \quad (12.413)$$

как в методе SSE с петлевыми обновлениями. Такое же решение для (12.411) отличается от приведенного заменой  $W_3 \rightarrow W_4$ . Фактически схема не от-

личается от обычного петлевого метода SSE. Слишком большой вес неэффективных процессов *bounce*, особенно при уменьшении магнитного поля и анизотропии, делает решение (12.413) и всю новую схему неэффективными, поэтому далее предлагается другое решение (12.413) — решение В.

Решение (12.413) можно выразить через неизвестные веса  $b_i$  процессов *bounce* и матричные элементы (12.410):

$$\begin{aligned} a &= \frac{1 + \Delta}{4} + \frac{h_b}{2} + \frac{-b_1 - b_2 + b_3}{2}, \\ b &= \frac{1 - \Delta}{4} - \frac{h_b}{2} + \frac{-b_1 + b_2 - b_3}{2}, \\ c &= \frac{1 - \Delta}{4} + \frac{h_b}{2} + \varepsilon + \frac{b_1 - b_2 - b_3}{2}, \\ a' &= \frac{1 + \Delta}{4} - \frac{h_b}{2} + \frac{-b'_1 - b'_2 + b'_3}{2}, \\ b' &= \frac{1 - \Delta}{4} + \frac{h_b}{2} + \frac{-b'_1 + b'_2 - b'_3}{2}, \\ c' &= \frac{\Delta - 1}{4} + \frac{3h_b}{2} + \varepsilon + \frac{b'_1 - b'_2 - b'_3}{2}, \end{aligned} \tag{12.414}$$

а затем попробовать минимизировать веса неэффективных процессов  $b_1, \dots, b'_3$ . Исследуя свойства XXZ-модели, авторы [109] подобрали значения этих величин в различных областях параметров (рис. 12.125).

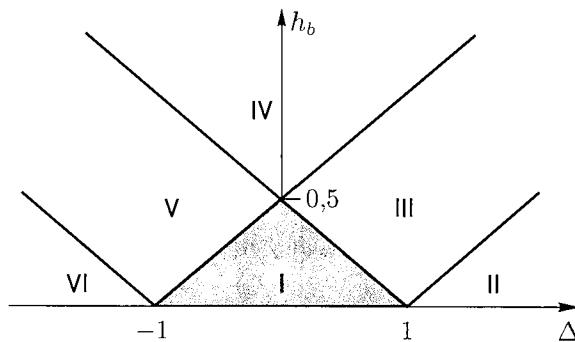


Рис. 12.125. Алгоритмическая фазовая диаграмма. Показаны области, где веса различных процедур *bounce* являются ненулевыми

Это решение более эффективное — скорость сходимости алгоритма возрастает почти на порядок при использовании решения *B* по сравнению с решением *A* (рис. 12.126).

Этот пример показывает, что для каждой модели нужно подбирать решение балансных уравнений для увеличения эффективности схемы.

Далее не будем подробно излагать детали SSE-схемы с прямыми петлями, для ознакомления с данным методом можно обратиться к достаточно подробной работе [109], где изложен весь алгоритм метода с практическими рекомендациями *вплоть до написания компьютерного кода*.

Остановимся на некоторых результатах расчетов, полученных при помощи SSE-алгоритма с прямыми петлями.

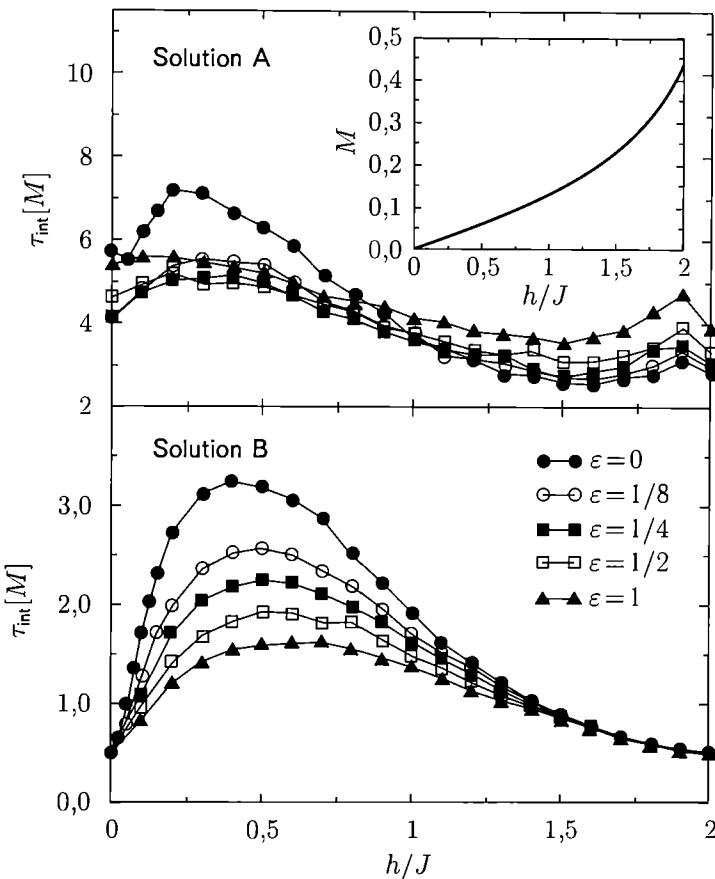


Рис. 12.126. Значения автокорреляционных времен в зависимости от силы внешнего поля для гейзенберговской цепочки с  $N = 64$  и  $\beta = 16$ . Показаны результаты МК-симуляции с использованием решений *A* и *B*

SSE-алгоритм с прямыми петлями позволяет опускаться до очень низких температур, что проиллюстрировано на рис. 12.127.

Прямые петли с разрывами позволяют получать информацию о недиагональных средних и коллективном отклике системы. Включение в схему вертикальной оси — аналога шкалы мнимого времени — позволяет рассчитывать временные средние (с учетом варианта описания в представлении взаимодействия [112, 210]).

В заключение отметим, что можно обобщить схему, приведенную здесь, и на случай  $S > 1/2$ , а также на бозе-системы: в [111] разработаны эффективные варианты SSE с прямыми петлями для таких систем, предлагаются более эффективные решения балансных уравнений, практически исключающие из схемы неэффективные процедуры *bounce* и слабо чувствительные к особенностям модели.

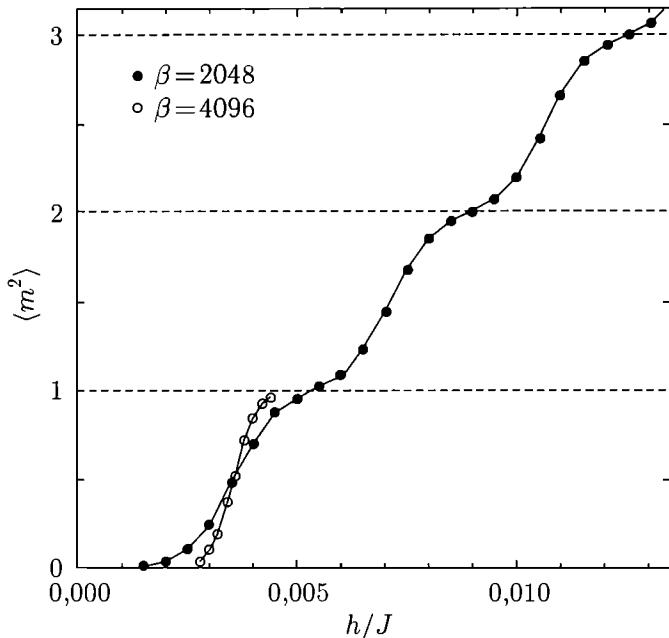


Рис. 12.127. Намагниченность системы в зависимости от внешнего поля для двумерной модели Гейзенберга;  $L = 64$ . Данные из [109]

## 12.9. Процедуры перевзвешивания (Reweighting)

В заключение рассмотрим полезную процедуру, которая с успехом используется как в классических, так и в квантовых методах МК — *метод перевзвешивания (reweighting)*, предложенный в 1988–1989 гг. Ferrenberg и Swendsen в [200, 211].

Рассмотрим для простоты спиновую модель, описываемую следующим гамильтонианом:

$$-\beta H = K \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i = KS + hM, \quad (12.415)$$

где  $K$  — безразмерная константа ( $K = J/kT$ );  $h$  — внешнее магнитное поле (также в единицах  $kT$ );  $\beta = 1/kT$ .

Очевидно, что гиббсовское распределение величин  $S$  и  $M$  задается следующим выражением:

$$P_{(K,h)}(S, M) = \frac{1}{Z(K, h)} N(S, M) e^{KS+hM}, \quad (12.416)$$

где  $N(S, M)$  — число конфигураций, относящихся к точке  $(S, M)$  фазового пространства;  $Z(K, h)$  — статистическая сумма, определяемая выражением

$$Z(K, h) = \sum_{S,M} N(S, M) e^{KS+hM}. \quad (12.417)$$

Гистограмма для величин  $S, M$ , которую можно собрать в процессе МК-симуляции, пропорциональна вероятности  $P_{(K,h)}(S, M)$ . Эту гистограмму можно использовать для расчета при других параметрах модели. Распределение при новых параметрах  $(K', h')$  может быть выражено через распределение при данных  $(K, h)$  (перевзвешено) следующим образом:

$$P_{(K',h')}(S, M) = \frac{P_{(K,h)}(S, M) e^{(K'-K)S+(h'-h)M}}{\sum_{S,M} P_{(K,h)}(S, M) e^{(K'-K)S+(h'-h)M}}. \quad (12.418)$$

Так как  $K'$  и  $h'$  непрерывны, можно получить данные при любых значениях, не проводя заново процедуру МК.

На рис. 12.128 представлен расчет двумерной моделью Изинга (12.415) с использованием процедуры перевзвешивания.

Видно, что одного МК-расчета достаточно для восстановления всей температурной зависимости. Совпадение с теорией великолепное: значение критической температуры совпадает с теоретическим с точностью 0,04 %, а высота максимума — с точностью 0,2 %.

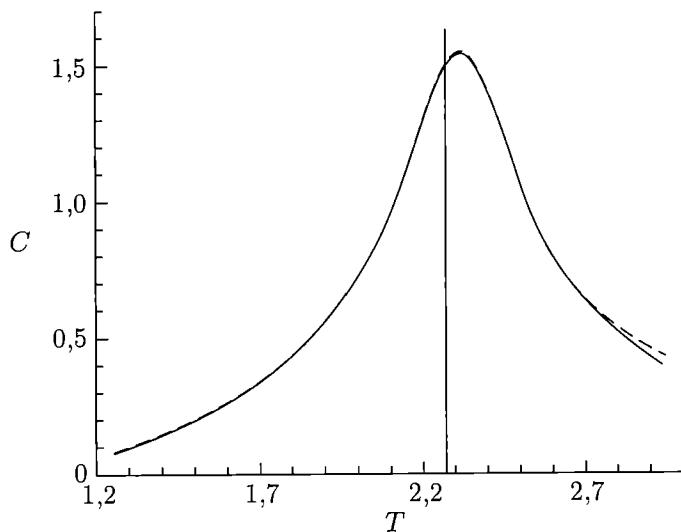


Рис. 12.128. График теплоемкости как функция температуры для двумерной системы  $16 \times 16$ , описываемой моделью Изинга в отсутствие внешнего поля. Пунктирной линией отмечено точное решение из [213]; сплошной линией — результат, полученный применением процедуры перевзвешивания к единственному расчету при  $T = T_c$  (показано вертикальной линией)

Заметим, что процедура перевзвешивания с успехом используется для точного пересчета функции Грина, как обсуждалось в разделе о континуальном квантовом методе МК в непрерывном времени, при исследовании поляронных и экситонных моделей [78, 79] и др.

## **Заключение**

Развитие нанотехнологий, физики сложных мезоскопических систем, обладающих сильным взаимодействием, невозможность аналитического описания систем приводят к необходимости использования современных численных квантовых алгоритмов.

В книге был представлен далеко не полный обзор методов точной диагонализации гамильтоновой матрицы, классических и квантовых алгоритмов МК, используемых для изучения самых разнообразных систем. По мере возможности в книге кратко представлялись эти системы и адекватные физические модели для их описания:nanoструктуры — квантовые ямы, квантовые точки; высокотемпературные сверхпроводники; сверхтекущий гелий; бозе-газ атомарных щелочных металлов в магнитооптических ловушках; различные спиновые системы — наномагниты, спиновые лестницы, цепочки и т. д. Соответственно, рассматривались модели всех трех основных квантовых статистик — ферми, бозе и спиновой. Это модели Хаббарда, Бозе–Хаббарда, Гейзенберга и Изинга, континуальные модели с взаимодействием для  ${}^4\text{He}$ , модели сверхпроводящих плоскостей для высокотемпературных сверхпроводников и др. Сами методы расчета развивались из-за необходимости исследования таких систем. Из-за ограниченности объема в книгу не вошли *Вариационные методы МК, методы молекулярной динамики, реверсивные алгоритмы МК, методы ренормализационной группы* и многое другое. Современная вычислительная физика — динамично развивающаяся область, и все многообразие численных методов и подходов невозможно отразить в одной книге. Были показаны методы получения количественной и качественной информации при численном моделировании, что часто невозможно при аналитическом исследовании, обсуждены тонкости численного представления физической информации, приемы работы с матрицами, с вероятностными характеристиками и др.

Авторы выражают благодарность коллегам, совместно с которыми были проведены многие исследования, результаты которых отражены в книге: *Свистунову Б. В., Прокофьеву Н. В., Тупицыну И. С., Мищенко А. С., Оленову Л. А., Подливаеву А. И., Рудневу И. А., Зюбину М. В.* Авторы признательны Мищенко А. С. за предоставленные материалы по методу восстановления плотности состояний и диаграммному методу МК; *Свистунову Б. В.* за материалы по обобщенному диаграммному методу МК и редуцированному детерминантному методу, а также за критическое чтение рукописи; *Карцеву П. Ф.* за дискуссии и помочь в написании разделов о детерминантных квантовых методах МК и за предоставленные материалы по импульльному траекторному алгоритму, по траекторному алгоритму СТWL и по проблеме знака в МК.

## Приложение 1

### ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ХАББАРДА–СТРАТОНОВИЧА

Рассмотрим сначала упрощенный подход к данной проблеме, сразу приводящий к практическим результатам. Покажем, как можно представить экспоненту от двухчастичного оператора через сумму экспонент от одиночастичных операторов (в данном случае оператора числа частиц), чтобы преобразовать взаимодействующую часть гамильтониана. Рассмотрим два взаимодействующих бесспиновых фермиона на соседних узлах  $i, j$ . Экспоненту от парного взаимодействия  $e^{\alpha n_i n_j}$  удобно заменить на  $e^{\alpha(n_i - \frac{1}{2})(n_j - \frac{1}{2})}$ , что можно сделать соответствующим сдвигом химического потенциала в гамильтониане. Покажем, что справедливо

$$e^{\alpha(n_i - \frac{1}{2})(n_j - \frac{1}{2})} = A \sum_{S=\pm 1} e^{\gamma S(n_i + n_j - 1)}, \quad (\text{П.1.1})$$

где  $A$  и  $\gamma$  — некоторые коэффициенты, определяемые с помощью полного перебора состояний (табл. П.1.1.).

**Таблица П.1.1.** Значения коэффициентов для преобразования Хаббарда–Стратоновича

$n_i$	$n_j$	$e^{\alpha(n_i - \frac{1}{2})(n_j - \frac{1}{2})}$	$A \sum_{S=\pm 1} e^{\gamma S(n_i + n_j - 1)}$
0	0	$e^{\alpha/4}$	$2A \operatorname{ch}\gamma$
0	1	$e^{-\alpha/4}$	$2A$
1	0	$e^{-\alpha/4}$	$2A$
1	1	$e^{\alpha/4}$	$2A \operatorname{ch}\gamma$

Из табл. 1 находим:

$$A = \frac{1}{2} e^{-\alpha/4}, \quad \operatorname{ch}\gamma = e^{\alpha/2}. \quad (\text{П.1.2})$$

Другой вариант преобразования Хаббарда–Стратоновича состоит в использовании в одиночастичной экспоненте не суммы, а разности  $n_1$  и  $n_2$ :

$$e^{\alpha(n_i - \frac{1}{2})(n_j - \frac{1}{2})} = A \sum_{S=\pm 1} e^{\gamma S(n_i - n_j)}. \quad (\text{П.1.3})$$

Из выражения (П.1.1) несложно получить и такой вариант преобразования Хаббарда–Стратоновича:

$$e^{-\Delta\tau U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}} = A e^{B(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})} \sum_{S=\pm 1} e^{CS(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1)}, \quad (\text{П.1.4})$$

где  $A = e^{\Delta\tau U/2}$ ,  $B = -\frac{1}{2}\Delta\tau U$ ,  $C = \operatorname{arch}\left(\frac{1}{2}e^{-\Delta\tau U/2}\right)$ .

Теперь рассмотрим преобразование Хаббарда–Стратоновича с более общих квантово-механических позиций, следуя [95].

Преобразование Хаббарда–Стратоновича основывается на тождестве [177]:

$$e^{A^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-\frac{1}{2}x^2 - xA} dx, \quad (\text{П.1.5})$$

где  $A$  — некоторый оператор. Это преобразование переводит систему взаимодействующих фермионов в невзаимодействующие частицы, связанные флюктуирующими внешним полем.

В случае стандартного хаббардовского взаимодействия

$$H_1 = Un_{\uparrow}n_{\downarrow} \quad (\text{П.1.6})$$

можно записать следующие варианты *точного* преобразования (П.1.6), пользуясь простым перебором состояний двухузельной задачи со спином, аналогично приведенной ранее табл. 1:

$$n_{\uparrow}n_{\downarrow} = -\frac{1}{2}(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})^2 + \frac{1}{2}(n_{\uparrow} + n_{\downarrow}), \quad (\text{П.1.7})$$

$$n_{\uparrow}n_{\downarrow} = +\frac{1}{2}(n_{\uparrow} + n_{\downarrow})^2 - \frac{1}{2}(n_{\uparrow} + n_{\downarrow}), \quad (\text{П.1.8})$$

$$n_{\uparrow}n_{\downarrow} = \frac{1}{4}(n_{\uparrow} + n_{\downarrow})^2 - \frac{1}{4}(n_{\uparrow} - n_{\downarrow})^2. \quad (\text{П.1.9})$$

В (П.1.7) и (П.1.8) введено по одному вспомогательному «внешнему» полю (флюктуации  $(n_{\uparrow} \pm n_{\downarrow})^2$ ), в то время как в (П.1.9) — два различных поля.

Рассмотрим статистическую сумму с учетом разбиения гамильтониана на затравочную энергию  $H_0$  и возмущение  $H_1$ :

$$Z = \operatorname{Tr} e^{-\beta(H_0 + H_1)} \cong \operatorname{Tr} \prod_{i=1}^L e^{-\Delta\tau H_0} e^{-\Delta\tau H_1} \quad (\text{П.1.10})$$

с точностью  $O((\Delta\tau)^2[H_0, H_1])$ . В пределе  $\Delta\tau \rightarrow 0$  статистическая сумма представима в виде функционального интеграла

$$Z = \operatorname{Tr} T_{\tau} \exp \left( - \int_0^{\beta} \left( H_{0\tau} + H_{1\tau} \right) d\tau \right), \quad (\text{П.1.11})$$

где индекс  $\tau$  отмечает упорядоченность операторов по шкале мнимого времени. Учитывая вид возмущения (П.1.6) и соотношения (П.1.5), (П.1.7)–(П.1.9),

выражение (П.1.11) можно преобразовать. Например, учитывая (П.1.7), получаем соотношение

$$Z \propto \int Dx(\tau) \exp\left(-\int_0^\beta x^2(\tau) d\tau\right) \text{Tr } T_\tau \times \\ \times \exp\left(-\int_0^\beta \left(H_{0\tau} + \sqrt{U}x(\tau)(n_{\tau\uparrow} - n_{\tau\downarrow})\right) + \frac{U}{2}(n_{\tau\uparrow} + n_{\tau\downarrow}) d\tau\right), \quad (\text{П.1.12})$$

описывающее систему невзаимодействующих частиц, движущихся в флюктуирующем действительном поле  $x(\tau)$ , взаимодействующем с  $z$ -компонентой спинов частиц.

Переходя назад в дискретное по мнимому времени описание (П.1.10) и вводя изинговскую переменную  $S$ , получаем следующие соотношения:

$$e^{-\Delta\tau U n_\uparrow n_\downarrow} = \frac{1}{2} \text{Tr}_S e^{2aS(n_\uparrow - n_\downarrow) - \frac{1}{2}\Delta\tau U(n_\uparrow + n_\downarrow)}; \\ e^{-\Delta\tau U n_\uparrow n_\downarrow} = \frac{1}{2} \text{Tr}_S e^{2bS(n_\uparrow + n_\downarrow - 1) - \frac{1}{2}\Delta\tau U(n_\uparrow + n_\downarrow - 1)}, \quad (\text{П.1.13})$$

где

$$\text{th}^2 a = \text{th}\left(\frac{\Delta\tau U}{4}\right), \quad \text{th}^2 b = -\text{th}\left(\frac{\Delta\tau U}{4}\right). \quad (\text{П.1.14})$$

Соотношения (П.1.13) совпадают с соответствующими выражениями (П.1.1), (П.1.2) после некоторых переобозначений.

Чтобы при извлечении корней при расчете (П.1.5) не возникало мнимых величин, для случая отталкивания ( $U > 0$ ) следует пользоваться первым выражением из (П.1.13), а второе использовать для случая притяжения ( $U < 0$ ). Например, можно получить выражение для статистической суммы в следующем виде:

$$Z = \text{Tr}_{S(\tau)} \text{Tr} \left( T_\tau \exp\left(-\sum_\tau \Delta\tau \left[H_{0\tau} + \lambda S(\tau)(n_{\uparrow\tau} - n_{\downarrow\tau}) - \frac{1}{2}U(n_{\uparrow\tau} + n_{\downarrow\tau})\right]\right)\right); \\ \lambda = \frac{2}{\Delta\tau} \text{arcth} \sqrt{\text{th}\left(\frac{\Delta\tau U}{4}\right)}. \quad (\text{П.1.15})$$

Можно также использовать соотношение (П.1.9) с двумя флюктуационными полями и получить

$$e^{-\Delta\tau U n_\uparrow n_\downarrow} = \frac{1}{4} \text{Tr}_{S_1 S_2} e^{2c_1 S_1(n_\uparrow - n_\downarrow) + 2ic_2 S_2(n_\uparrow + n_\downarrow - 1) - \frac{1}{2}\Delta\tau U(n_\uparrow + n_\downarrow - \frac{1}{2})}; \quad (\text{П.1.16})$$

$$\text{th}^2 c_1 = \text{th}^2 c_2 = \text{th}\left(\frac{\Delta\tau U}{8}\right). \quad (\text{П.1.17})$$

## Приложение 2

### ТЕОРЕМА О СЛЕДЕ ЭКСПОНЕНТЫ БИЛИНЕЙНОЙ ФОРМЫ ОДНОЧАСТИЧНЫХ ОПЕРАТОРОВ

Докажем, что

$$\mathrm{Tr} e^{-a_i^+ A_{ij} a_j} e^{-a_i^+ B_{ij} a_j} = \det(1 + e^{-A} e^{-B}), \quad (\text{П.2.1})$$

где  $A$  и  $B$  — заданные матрицы, а по повторяющимся индексам подразумевается суммирование.

Докажем сначала тождество

$$e^{-a_i^+ A_{ij} a_j} e^{-a_i^+ B_{ij} a_j} = e^{-\sum_\nu a_\nu^+ l_\nu a_\nu}, \quad (\text{П.2.2})$$

где  $\lambda_\nu = e^{-l_\nu}$  — собственные числа матрицы  $e^{-A} e^{-B}$ ; (П.2.1) сразу следует из (П.2.2), так как

$$\mathrm{Tr} \left( e^{-\sum_\nu a_\nu^+ l_\nu a_\nu} \right) = \mathrm{Tr} \prod_\nu e^{-a_\nu^+ l_\nu a_\nu} = \prod_\nu (1 + e^{-l_\nu}) = \det(1 + e^{-A} e^{-B}). \quad (\text{П.2.3})$$

Для доказательства (П.2.2) рассмотрим одночастичное состояние

$$|\varphi\rangle = \sum_j q_j a_j^+ |0\rangle, \quad (\text{П.2.4})$$

где  $q_j$  — некоторые числа. Пусть  $|\mu\rangle$  — базис, в котором матрица  $B$  диагональна, т. е.

$$B = \sum_\mu |\mu\rangle b_\mu \langle \mu|. \quad (\text{П.2.5})$$

Определим новые координаты

$$a_\mu = \sum_j \langle \mu | j \rangle a_j, \quad a_\mu^+ = \sum_j \langle j | \mu \rangle a_j^+, \quad (\text{П.2.6})$$

и, соответственно,

$$a_j = \sum_\mu \langle j | \mu \rangle a_\mu, \quad a_j^+ = \sum_\mu \langle \mu | j \rangle a_\mu^+.$$

Используя свойства фермионных операторов, можно записать

$$e^{-a_i^+ B_{ij} a_j} = e^{-a_i^+ b_\mu a_\mu} = \prod_\mu [1 + (e^{-b_\mu} - 1) a_\mu^+ a_\mu]. \quad (\text{П.2.7})$$

С учетом (П.2.4) и антисимметрических соотношений находим

$$e^{-a_i^+ B_{ij} a_j} |\varphi\rangle = \sum_j q'_j a_j^+ |0\rangle, \quad q'_j = \sum_j (e^{-B})_{ij} q_j. \quad (\text{П.2.8})$$

Аналогично,

$$e^{-a_i^+ A_{ij} a_j} e^{-a_i^+ B_{ij} a_j} |\varphi\rangle = \sum_j q''_j a_j^+ |0\rangle, \quad q''_j = \sum_j (e^{-A} e^{-B})_{ij} q_j. \quad (\text{П.2.9})$$

Выражение (П.2.9) справедливо для любого базиса, в частности для базиса, в котором матрица  $e^{-A} e^{-B}$  диагональна. Если теперь  $|\varphi\rangle$  — собственное состояние  $e^{-A} e^{-B}$ ,

$$|\varphi\rangle = a_\nu^+ |0\rangle,$$

то

$$e^{-a_i^+ A_{ij} a_j} e^{-a_i^+ B_{ij} a_j} |\varphi\rangle = (e^{-A} e^{-B})_{\nu\nu} a_\nu^+ |0\rangle = e^{-l_\nu} a_\nu^+ |0\rangle,$$

и (П.2.2) доказано для случая одной частицы.

Рассмотрим теперь двухчастичное состояние

$$|\varphi\rangle = a_{\mu_1}^+ a_{\mu_2}^+ |0\rangle, \quad (\text{П.2.10})$$

тогда

$$\begin{aligned} e^{-a_i^+ B_{ij} a_j} |\varphi\rangle &= \prod_\mu [1 + (e^{-b_\mu} - 1) a_\mu^+ a_\mu] a_{\mu_1}^+ a_{\mu_2}^+ |0\rangle = \\ &= e^{-B_{\mu_1}} e^{-B_{\mu_2}} a_{\mu_1}^+ a_{\mu_2}^+ |0\rangle. \end{aligned} \quad (\text{П.2.11})$$

Доказательство (П.2.2) следует с очевидностью при  $\mu_1 \neq \mu_2$ ; если же  $\mu_1 = \mu_2$ , обе стороны (П.2.11) тождественно обращаются в нуль из-за принципа Паули.

### Приложение 3

## ИНТЕГРАЛЬНОЕ СООТНОШЕНИЕ МЕЖДУ СПЕКТРАЛЬНОЙ ПЛОТНОСТЬЮ И ТЕМПЕРАТУРНОЙ ФУНКЦИЕЙ ГРИНА

Докажем важное для расчета плотности состояний и дисперсии квазичастиц интегральное соотношение. Для этого рассмотрим спектральные свойства температурной функции Грина (впервые такое представление функций Грина ввел Мацувара [231]):

$$G_\sigma(i, j, \tau) = -\langle T_\tau c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^+(0) \rangle \quad (\text{П.3.1})$$

и ее фурье-компоненты

$$G_\sigma(p, \tau) = -\langle T_\tau c_{p\sigma}(\tau) c_{p\sigma}^+(0) \rangle \quad (\text{П.3.2})$$

Согласно [188, 232], между функцией Грина и спектральной плотностью  $A_\sigma(p, \omega)$ , суммирование которой приводит к полной плотности одночастичных состояний

$$N(\omega) = \sum_{p\sigma} A_\sigma(p, \omega), \quad (\text{П.3.3})$$

имеет место интегральное соотношение:

$$G_\sigma(p, \tau) = - \int \frac{A_\sigma(p, \omega) e^{-\omega\tau}}{1 + e^{-\omega\beta}} d\omega. \quad (\text{П.3.4})$$

Докажем его как для случая бозе-частиц, так и для фермионной статистики.

Рассмотрим вначале *наиболее общие свойства температурных функций Грина*. Эти сведения понадобятся далее для описания современных методов Монте-Карло в непрерывном времени.

Перепишем определение температурной функции Грина (П.3.1) в более общем виде и проиллюстрируем более детально действие временной переменной [188]:

$$G_{\sigma_1\sigma_2}(i, j, \tau) = \begin{cases} -\text{Tr}[c_{i\sigma_1}(\tau) c_{j\sigma_2}^+(0)], & 0 < \tau < \beta, \\ \mp \text{Tr}[c_{j\sigma_2}^+(0) c_{i\sigma_1}(\tau)], & \beta < \tau < 0. \end{cases} \quad (\text{П.3.5})$$

Верхний индекс в (П.3.5) относится к бозе-статистике, нижний — к ферми-статистике;  $c(\tau) = e^{H\tau} c e^{-H\tau}$ ; под усреднением ( $\text{Tr} \equiv \langle \dots \rangle$ ) понимается усреднение по ансамблю Гиббса.

Еще более общий вид (П.3.5) с произвольным отсчетом времени выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} G_{\sigma_1\sigma_2}(i, j, \tau_1, \tau_2) &= \begin{cases} -\langle c_{i\sigma_1}(\tau_1) c_{j\sigma_2}^+(\tau_2) \rangle, & \tau_1 > \tau_2, \\ \mp \langle c_{j\sigma_2}^+(\tau_2) c_{i\sigma_1}(\tau_1) \rangle, & \tau_2 > \tau_1 \end{cases} = \\ &= \begin{cases} -\text{Tr}[e^{\beta(F-H)} e^{H(\tau_1-\tau_2)} c_{i\sigma_1} e^{-H(\tau_1-\tau_2)} c_{j\sigma_2}^+(0)], & \tau_1 > \tau_2, \\ \mp \text{Tr}[e^{\beta(F-H)} e^{H(\tau_2-\tau_1)} c_{j\sigma_2}^+ e^{-H(\tau_2-\tau_1)} c_{i\sigma_1}(\tau)], & \tau_2 > \tau_1. \end{cases} \quad (\text{П.3.6}) \end{aligned}$$

Здесь  $F$  — термодинамический потенциал в переменных  $T, V, \mu$ :

$$dF = -S dT - P dV - N d\mu. \quad (\text{П.3.7})$$

Таким образом, расчет проводится в большом каноническом ансамбле, что подразумевает во всех выражениях переменное число частиц:

$$H \implies H - \mu N. \quad (\text{П.3.8})$$

Функция Грина (П.3.6) зависит только от разности  $\tau = \tau_1 - \tau_2$ . Если система однородна и изолирована, то (П.3.6) зависит также только от разности координат  $r_i - r_j$ ;  $G(\tau)$  является разрывной функцией переменной  $\tau$  и испытывает скачок в точке  $\tau = 0$ . Рассчитаем величину скачка непосредственно из выражения (П.3.6):

$$\begin{aligned} \Delta G &= G_{\sigma_1 \sigma_2}(i, j, \tau) - G_{\sigma_1 \sigma_2}(i, j, -\tau) \Big|_{\tau \rightarrow 0} = \\ &= -\text{Tr} \left[ e^{\beta(F-H)} (c_{i\sigma_1} c_{j\sigma_2}^+ \mp c_{j\sigma_2}^+ c_{i\sigma_1}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{П.3.9})$$

Из последнего соотношения, пользуясь правилами коммутации (антикоммутации), находим

$$\Delta G = -\delta_{ij} \delta_{\sigma_1 \sigma_2}. \quad (\text{П.3.10})$$

Величина скачка для бозе- и ферми-статистики оказывается одинаковой.

Температурная (мацубаровская) функция Грина, в принципе, определяет всю термодинамику системы. Например, полное число частиц выражается как функция химического потенциала и температуры, от которого зависит функция Грина:

$$N = \sum_{j\sigma} c_{j\sigma}^+ c_{j\sigma} = \pm \sum_{j\sigma} G_{\sigma\sigma}(j, j, \tau, \tau + 0). \quad (\text{П.3.11})$$

Фактически любую термодинамическую величину или корреляционную функцию можно выразить через саму функцию Грина, ее интеграл, производную или предел (см. подробнее [38, 188, 232]).

В отсутствие взаимодействия можно получить явный вид функции Грина [188], учитывая разложение по плоским волнам операторов:

$$c_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{p_1} c_{p_1} e^{ip_1 r_j}, \quad (\text{П.3.12})$$

$$c_{j\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{p_2} c_{p_2}^+ e^{-ip_2 r_j}. \quad (\text{П.3.13})$$

В результате

$$\begin{aligned} G_{\sigma_1 \sigma_2}^0(i, j, \tau > 0) &= \\ &= -\frac{1}{\sqrt{N_a}} \sum_{p_1 p_2} e^{i(p_1 r_i - p_2 r_j)} \text{Tr} \left[ e^{\beta(F_0 - H_0)} e^{\tau H_0} c_{p_1 \sigma_1} e^{-\tau H_0} c_{p_2 \sigma_2}^+ \right]. \end{aligned} \quad (\text{П.3.14})$$

Учитывая вид гамильтониана свободных частиц в импульсном представлении,

$$H_0 = \sum_{p\sigma} (\varepsilon_0(p) - \mu) c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma}, \quad (\text{П.3.15})$$

где  $\varepsilon_0(p)$  — дисперсия частиц, зависящая от вида модели, можно рассчитать действие операторов:

$$\begin{aligned} e^{\tau H_0} a_{p\sigma} e^{-\tau H_0} &= a_{p\sigma} e^{-\tau(\varepsilon_0(p)-\mu)}, \\ e^{\tau H_0} a_{p\sigma}^+ e^{-\tau H_0} &= a_{p\sigma}^+ e^{\tau(\varepsilon_0(p)-\mu)}. \end{aligned} \quad (\text{П.3.16})$$

Окончательно, после простых преобразований находим

$$G_{\sigma_1\sigma_2}^0(i, j, \tau > 0) = -\frac{\delta_{\sigma_1\sigma_2}}{\sqrt{N_a}} \sum_p e^{ip(r_i-r_j)-\tau(\varepsilon_0(p)-\mu)} (1 \mp \langle a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} \rangle), \quad (\text{П.3.17})$$

т. е. функция Грина свободных частиц выражается через интегралы от чисел заполнения

$$n_{p\sigma} = \langle a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_0(p)-\mu)} \pm 1}. \quad (\text{П.3.18})$$

Соответственно, аналогично получаем

$$G_{\sigma_1\sigma_2}^0(i, j, \tau < 0) = \pm \frac{\delta_{\sigma_1\sigma_2}}{\sqrt{N_a}} \sum_p e^{ip(r_i-r_j)-\tau(\varepsilon_0(p)-\mu)} n_{p\sigma}. \quad (\text{П.3.19})$$

Под знаком суммирования в (П.3.18),(П.3.19) стоят фурье-компоненты функции Грина, уже напрямую связанные с числами заполнения:

$$\begin{aligned} G_{\sigma_1\sigma_2}^0(p, \tau > 0) &= -\delta_{\sigma_1\sigma_2} e^{-\tau(\varepsilon_0(p)-\mu)} (1 \mp n_{p\sigma}), \\ G_{\sigma_1\sigma_2}^0(p, \tau < 0) &= \pm \delta_{\sigma_1\sigma_2} e^{-\tau(\varepsilon_0(p)-\mu)} n_{p\sigma}. \end{aligned} \quad (\text{П.3.20})$$

Еще одно важное свойство функции Грина для произвольной взаимодействующей системы относительно временной переменной докажем, применив циклическую перестановку операторов под знаком следа в (П.3.6) для случая  $\tau < 0$ :

$$\begin{aligned} G_{\sigma_1\sigma_2}(i, j, \tau < 0) &= \mp \text{Tr} \left( e^{\beta(F-H)} e^{-H\tau} c_{j\sigma_2}^+ e^{H\tau} c_{i\sigma_1} \right) = \\ &= \mp \text{Tr} \left( e^{\beta F} e^{H\tau} c_{i\sigma_1} e^{-H(\tau+\beta)} c_{j\sigma_2}^+ \right) = \\ &= \mp \text{Tr} \left( e^{\beta(F-H)} e^{H(\tau+\beta)} c_{i\sigma_1} e^{-H(\tau+\beta)} c_{j\sigma_2}^+ \right). \end{aligned} \quad (\text{П.3.21})$$

Сравнивая последнее выражение с определением (П.3.6), получаем

$$G(\tau + \beta) = \pm G(\tau), \quad -\beta < \tau < 0. \quad (\text{П.3.22})$$

Таким образом, зная функцию Грина в интервале  $0 < \tau < \beta$ , пользуясь (П.3.22), находим ее при отрицательных временных аргументах.

Разложим выражение (П.3.6) в базисе собственных функций гамильтониана  $H |n\rangle = E_n |n\rangle$ , тогда с учетом тождества  $\sum_m |m\rangle \langle m| \equiv 1$  получаем:

$$G_{\sigma_1\sigma_2}(i, j, \tau) = \begin{cases} - \sum_{mn} \rho_n^N e^{\omega_{nm}^+ \tau} \langle n | c_{i\sigma_1} | m \rangle \langle m | c_{j\sigma_2}^+ | n \rangle, & \tau > 0, \\ \mp \sum_{mn} \rho_n^N e^{\omega_{nm}^- \tau} \langle n | c_{j\sigma_2}^+ | m \rangle \langle m | c_{i\sigma_1} | n \rangle, & \tau < 0, \end{cases}$$

$$\omega_{nm}^\pm = E_n^N - E_m^{N\pm 1} \pm \mu_\pm,$$

$$\rho_n^N = \frac{1}{Z} e^{-\beta(E_n^N - \mu N_n)}.$$
(П.3.23)

Здесь  $\omega_{nm}^\pm$  — энергии переходов между уровнями с добавлением (удалением) одной частицы,  $\rho_n^N$  — гибсовский вес  $n$ -го состояния с  $N$  частицами.

Особо обратим внимание на химические потенциалы в (П.3.22):

$$\mu_+ = E_0^{N+1} - E_0^N,$$

$$\mu_- = E_0^N - E_0^{N-1}.$$
(П.3.24)

Они не обязательно равны во взаимодействующей системе. Более того, их разность  $\Delta = \mu_+ - \mu_-$ , если она больше нуля, имеет физический смысл запрещенной области — щели в спектре возбуждений (как, например, в полупроводнике), отделяющей занятые состояния от свободных.

Если перейти к фурье-компонентам, разложив функцию Грина по дискретным частотам,

$$G_{\sigma_1\sigma_2}(i, j, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_k G_{\sigma_1\sigma_2}(i, j, \omega_k) e^{-i\omega_k \tau},$$
(П.3.25)

и, соответственно,

$$G_{\sigma_1\sigma_2}(i, j, \omega_k) = \int_0^\beta G_{\sigma_1\sigma_2}(i, j, \tau) e^{i\omega_k \tau} d\tau,$$
(П.3.26)

то из свойства (П.3.22) несложно показать, что в случае бозе-статистики суммирование ведется по четным частотам  $\omega_k = 2\pi k / \beta$ , а в случае фермионов — по нечетным  $\omega_k = 2\pi(k + 1/2) / \beta$ . Это и есть *мацуваровские частоты* [231].

Обозначим  $\langle n | c_{i\sigma} | m \rangle \equiv C_{i\sigma}^{nm}$ . Подставив (П.3.26) в (П.3.22), получаем

$$G_{\sigma_1\sigma_2}(i, j, \tau) = \begin{cases} - \sum_{nm} \rho_n^N e^{\omega_{nm}^+ \tau} C_{i\sigma_1}^{nm} C_{j\sigma_2}^{+mn}, & \tau > 0, \\ \mp \sum_{nm} \rho_n^N e^{\omega_{nm}^- \tau} C_{j\sigma_2}^{+mn} C_{i\sigma_1}^{mn}, & \tau < 0. \end{cases}$$
(П.3.27)

Для удобства перейдем далее к фурье-компонентам по координате, т. е. к импульсному представлению. Также выберем диагональные по спиновым

переменным слагаемые  $G_{\sigma\sigma'} = \delta_{\sigma\sigma'} G_\sigma$ , так как будем рассматривать случай отсутствия ферромагнетизма в системе. Тогда (П.3.22) примет вид

$$G_\sigma(p, \omega_k) = \begin{cases} - \sum_{nm} \rho_n^N e^{\omega_{nm}^+ \tau} |C_{p\sigma}^{+mn}|^2, & \tau > 0, \\ \mp \sum_{nm} \rho_n^N e^{-\omega_{nm}^- \tau} |C_{p\sigma}^{mn}|^2, & \tau < 0. \end{cases} \quad (\text{П.3.28})$$

Введем следующие интегральные соотношения для непрерывной действительной частоты  $\omega$ :

$$\begin{aligned} G(\tau > 0) &= \int e^{-\omega\tau} G^+(\omega) d\omega, \\ G(\tau < 0) &= \int e^{-\omega\tau} G^-(\omega) d\omega. \end{aligned} \quad (\text{П.3.29})$$

Функции  $G^\pm$  — спектральные веса, определяющие аналитическое продолжение в реальные частоты температурной функции Грина. Сравнивая их с (П.3.28), получаем спектральное разложение, впервые введенное Леманом [233]:

$$\begin{aligned} G_\sigma^+(p, \omega) &= - \sum_{nm} \rho_n^N |C_{p\sigma}^{+mn}|^2 \delta(\omega + \omega_{nm}^+), \\ G_\sigma^-(p, \omega) &= \mp \sum_{nm} \rho_n^N |C_{p\sigma}^{mn}|^2 \delta(\omega - \omega_{nm}^-). \end{aligned} \quad (\text{П.3.30})$$

Заметим, что из анализа аргументов дельта-функций можно получить области определений:

$$\begin{aligned} G_\sigma^+(p, \omega) &= 0, & \omega < \mu_+, \\ G_\sigma^-(p, \omega) &= 0, & \omega > \mu_-. \end{aligned} \quad (\text{П.3.31})$$

Последнее соотношение в (П.3.30) после замены  $n \leftrightarrow m$  переписываем в виде

$$\begin{aligned} G_\sigma^-(p, \omega) &= \mp \sum_{nm} \rho_n^{N-1} |C_{p\sigma}^{+mn}|^2 \delta(\omega + \mu_- - E_m^N + E_n^{N-1}) e^{-\beta(\omega-\mu)} = \\ &= \mp \sum_{nm} \rho_n^{N-1} |C_{p\sigma}^{+mn}|^2 \delta(\omega + \omega'_{nm}^+) e^{-\beta(\omega-\mu)}, \quad (\text{П.3.32}) \\ \omega'_{nm}^+ &= E_n^{N-1} - E_m^N + \mu_-. \end{aligned}$$

В большинстве случаев можно пренебречь отличием химических потенциалов, т. е. без потери общности положить  $\mu_+ \approx \mu_- = \mu$ . Поэтому, сравнивая выражение (П.3.32) с функцией Грина при положительном аргументе, получаем

$$G_\sigma^-(p, \omega) = \pm G_\sigma^+(p, \omega) e^{-\beta(\omega-\mu)}. \quad (\text{П.3.33})$$

Теперь введем собственно спектральную плотность

$$A_\sigma(p, \omega) = -G_\sigma^+(p, \omega) + G_\sigma^-(p, \omega). \quad (\text{П.3.34})$$

Суммирование этой величины приводит к измеряемой в фотоэмиссионных экспериментах и экспериментах по аннигиляции позитронов одночастичной плотности состояний:

$$N(\omega) = \sum_{p\sigma} A_\sigma(p, \omega). \quad (\text{П.3.35})$$

В одночастичную плотность состояний дают вклад занятая и свободная от частиц области энергий:

$$\begin{aligned} N_+(\omega) &= - \sum_{p\sigma} G_\sigma^+(p, \omega), \quad \omega > \mu_+, \\ N_-(\omega) &= \sum_{p\sigma} G_\sigma^-(p, \omega), \quad \omega < \mu_-. \end{aligned} \quad (\text{П.3.36})$$

Наличие в спектре взаимодействующей системы одночастичных возбуждений  $\varepsilon(p)$  со слабым затуханием приводит к асимптотическим пикам (полюсам) в спектральной плотности [37, 188]:

$$A(p, \omega) \sim \frac{1}{\omega - \varepsilon(p)}, \quad (\text{П.3.37})$$

что позволяет восстанавливать спектр  $\varepsilon(p)$  и изознергетические поверхности [155, 175].

В отсутствие взаимодействия плотность состояний (П.3.35) имеет стандартный вид суммы дельта-пиков, причем «положительный» вклад, отражающий незанятые состояния, имеет вид

$$N_+(\omega) = \sum_{p\sigma} \delta(\omega - \varepsilon_0(p)) (1 - n_{0\sigma}(p)), \quad \omega > \mu_+, \quad (\text{П.3.38})$$

а «отрицательная» часть, относящаяся к занятым состояниям, представляется как

$$N_-(\omega) = \sum_{p\sigma} \delta(\omega - \varepsilon_0(p)) n_{0\sigma}(p), \quad \omega < \mu_-. \quad (\text{П.3.39})$$

Для доказательства (П.3.38), (П.3.39) можно воспользоваться выражениями (П.3.20) для невзаимодействующей функции Грина, а можно получить их прямо из определения (П.3.30), (П.3.34), если учесть, что:

- 1) при низких температурах максимальный вклад в суммах будет при квантовых числах  $n = 0$ ;
- 2) матричные элементы  $\langle n | c_{i\sigma} | m \rangle$  рассчитываются с учетом ферми-(бозе-) распределения и равны либо  $n_0(p)$ , либо  $1 - n_0(p)$  в зависимости от вероятностей заполнения начального  $m$  и конечного  $n$  состояний;
- 3) суммирование по  $m$ ,  $n$  эквивалентно суммированию по импульсам  $p$  как наиболее адекватным квантовым числам в отсутствие взаимодействия, а гамильтониан  $H_0 = \sum_{p\sigma} (\varepsilon_0(p) - \mu) c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma}$  диагонален в импульсном представлении;

4) выполняются следующие соотношения:

$$\begin{aligned}\omega_{nm}^+ &= E_n^N - E_m^{N+1} + \mu_+ \cong - (E_m^{N+1} - E_0^{N+1}) - (E_0^{N+1} - E_0^N) + \mu_+ = \\ &= - (E_m^{N+1} - E_0^{N+1}) = -\varepsilon_0(p),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\omega_{nm}'^+ &= E_n^{N-1} - E_m^N + \mu_- \cong - (E_m^N - E_0^N) - (E_0^N - E_0^{N-1}) + \mu_- = \\ &= - (E_m^N - E_0^N) = -\varepsilon_0(p). \quad (\text{П.3.40})\end{aligned}$$

В невзаимодействующем случае можно также рассчитать фурье-компоненты функций Грина (П.3.28), воспользовавшись результатом (П.3.20):

$$G_{\sigma_1\sigma_2}^0(p, \omega_k) = \int_0^\beta e^{\omega_k \tau} G_{\sigma_1\sigma_2}^0(p, \tau) d\tau = \delta_{\sigma_1\sigma_2} \frac{1}{i\omega_k - \varepsilon_0(p) + \mu}. \quad (\text{П.3.41})$$

При расчете (П.3.41) для ферми- и бозе-статистики использовался явный вид мацубаровских частот (нечетных и четных, соответственно).

Из (П.3.41) видно, что из полюсов функции Грина можно получить информацию о спектре, аналогично выражению (П.3.37) для спектральной плотности ((П.3.41) справедливо и во взаимодействующей ситуации при слабом затухании спектра квазичастиц), только спектральная плотность дает результат в реальных частотах, потому ее расчет предпочтительней.

В случае наличия взаимодействия согласно (П.3.33) можно показать, что

$$\begin{aligned}G_\sigma^+(p, \omega) &= -A_\sigma(p, \omega) [1 \pm f_\mp(\omega)], \\ G_\sigma^-(p, \omega) &= \mp A_\sigma(p, \omega) f_\mp(\omega), \\ f_\mp(\omega) &= \frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)} \mp 1}.\end{aligned} \quad (\text{П.3.42})$$

Спектральная плотность удовлетворяет нормировке

$$\int A_\sigma(p, \omega) d\omega = \langle c_{p\sigma} c_{p\sigma}^+ \mp c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma} \rangle = 1. \quad (\text{П.3.43})$$

Окончательно, исходя из (П.3.29) и (П.3.42), находим для  $0 < \tau < \beta$ :

$$G_\sigma(p, \omega) = - \int \frac{A_\sigma(p, \omega) e^{-\omega\tau}}{1 \mp e^{-\beta(\omega-\mu)}} d\omega. \quad (\text{П.3.44})$$

Это и есть основное интегральное соотношение, используемое для восстановления плотности состояний в квантовых методах Монте-Карло. Его решение (ядро  $A(p, \omega)$ ) называют *аналитическим продолжением функции Грина в реальные частоты*.

При необходимости можно работать как при положительных, так и при отрицательных временных аргументах функции Грина, так как можно привести весь интервал  $-\beta < \tau < \beta$  к области положительной временной оси  $0 < \tau < \beta$  с помощью соотношений (П.3.22).

Заметим, что выражение (П.3.44) можно обобщить для любого парного коррелятора двух операторов  $A, B$ :

$$-\text{Tr} [T_\tau A(\tau) B(0)], \quad -\beta < \tau < \beta, \quad (\text{П.3.45})$$

если заменить в формулах выше

$$\begin{aligned} \langle n | c_{i\sigma} | m \rangle &\equiv C_{i\sigma}^{nm} \Rightarrow \langle n | A | m \rangle \equiv A^{nm}, \\ \langle n | c_{i\sigma}^+ | m \rangle &\equiv C_{i\sigma}^{+nm} \Rightarrow \langle n | B | m \rangle \equiv B^{nm}. \end{aligned} \quad (\text{П.3.46})$$

Если при действии операторов не меняется число частиц, то следует убрать химический потенциал из формул, и положить, соответственно,

$$\omega_{nm}^\pm = E_n^N - E_m^N. \quad (\text{П.3.47})$$

## Приложение 4

### ВЫВОД РАЗЛОЖЕНИЯ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ

Разобьем гамильтониан на основную часть и возмущение:

$$H = H_0 + V, \quad (\Pi.4.1)$$

тогда в представлении взаимодействия [188] справедлива формула:

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} \sigma(\beta);$$

$$\sigma(\beta) = T_\tau \left( \exp \left[ - \int_0^\beta V(\tau) d\tau \right] \right), \quad (\Pi.4.2)$$

где  $V(\tau) = e^{\tau H_0} V e^{-\tau H_0}$ , а  $T_\tau$  — символ упорядочения  $\tau$  по убыванию. Тогда

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \text{Tr}(e^{-\beta H_0} \sigma) = \\ &= \sum_n \left\langle n \left| e^{-\beta H_0} \left( 1 - \int_0^\beta V(\tau) d\tau + \int_0^\beta d\tau V(\tau) \int_0^\tau d\tau' V(\tau') + \dots \right) \right| n \right\rangle = \\ &= W_0 + W_1 + \dots + W_N + \dots \quad (\Pi.4.3) \end{aligned}$$

Подставим в  $W_N$  выражение для  $V(\tau)$  и приближенно представим интеграл в виде суммы, разбив мнимое время на  $N$  частей длиной  $\Delta\tau = \beta/N$ , и обозначив состояния, диагональные для  $H_0$ , через  $n_1, n_2, \dots, n_N$  ( $H_0 | n_i \rangle = E_i | n_i \rangle$ ):

$$\begin{aligned} W_N &= \\ &= (-\Delta\tau)^N \sum_{\substack{\{n_1, n_2, \dots, n_N\}, \\ \tau_1 > \tau_2 > \dots > \tau_N}} \langle n_1 | e^{\tau_1 E_1} V e^{-\tau_1 E_2} | n_2 \rangle \dots \langle n_N | e^{\tau_N E_N} V e^{-\tau_N E_1} | n_1 \rangle = \\ &= \sum_{\substack{\{n_1, n_2, \dots, n_N\}, \\ \tau_1 > \tau_2 > \dots > \tau_N}} e^{\tau_1 E_1} e^{-\tau_1 E_2} \langle n_1 | -\Delta\tau V | n_2 \rangle \dots e^{\tau_N E_N} e^{-\tau_N E_1} \langle n_N | -\Delta\tau V | n_1 \rangle; \\ &\quad (\Pi.4.4) \end{aligned}$$

развернем упорядочение времен в обратную сторону и разобьем возмущение  $V$  на отдельные слагаемые  $V_k$ :

$$\begin{aligned}
 W_N &= \sum_{\substack{\{n_1, n_2, \dots, n_N\}, \\ \tau_1 > \tau_2 > \dots > \tau_N}} e^{-\beta E_1} \prod_{k=1}^N \langle n_k | -\Delta\tau V | n_{k+1} \rangle e^{\tau_k(E_k - E_{k+1})} = \\
 &= \sum_{\substack{\{n_1, n_2, \dots, n_N\}, \\ \tau_1 > \tau_2 > \dots > \tau_N, \\ k_1, k_2, \dots, k_N}} \left( \prod_{k=1}^{N-1} \langle n_k | -\Delta\tau V_{k_1} | n_{k+1} \rangle e^{-(\tau_{k+1} - \tau_k)E_k} \right) \times \\
 &\quad \times \langle n_N | -\Delta\tau V_{k_N} | n_1 \rangle e^{-(\tau_1 + \beta - \tau_N)E_N}. \tag{П.4.5}
 \end{aligned}$$

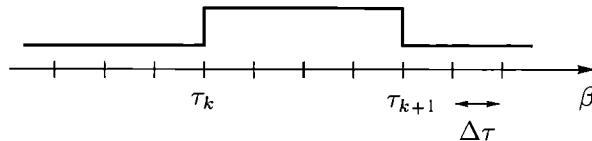


Рис. П.4.1. Случай  $(\tau_{k+1} - \tau_k) = \Delta\tau l$ ,  $l > 1$

Однако в реальном дискретном алгоритме разбиение по времени фиксировано:  $\Delta\tau = \frac{\beta}{M}$ ,  $M \gg 1$ , поэтому для ситуации  $M > N$ , т. е. в случае, когда степень разложения меньше числа разбиений шкалы мнимого времени, все оставшиеся разбиения по времени собираются в экспонентах, так как на этих временных срезах нет изменений состояний (рис. П.4.1), так что для некоторых интервалов  $(\tau_{k+1} - \tau_k) = \Delta\tau l$ ,  $l > 1$ .

## Приложение 5

### СТВЛ-МЕТОД: ФОРМУЛЫ ДЛЯ БАЛАНСА

**1.** Если процедура предполагает определение одной точки  $\tau$  по оси минимального времени, то плотность вероятности

$$W(\tau) = \frac{1}{Z_1} e^{(\tau - \tau_{\min})Q}, \quad \tau_{\min} < \tau < \tau_{\max}. \quad (\Pi.5.1)$$

Найдем сначала  $Z_1$  из условия нормировки:

$$\begin{aligned} 1 = \sum_{\tau=\tau_{\min}}^{\tau_{\max}} W(\tau) &= \frac{1}{\Delta\tau} \int_{\tau_{\min}}^{\tau_{\max}} W(\tau) d\tau = \\ &= \frac{1}{\Delta\tau Z_1} \int_0^{\tau_{\max} - \tau_{\min}} e^{tQ} dt = \frac{e^{(\tau_{\max} - \tau_{\min})Q} - 1}{Z_1 \Delta\tau Q}. \end{aligned} \quad (\Pi.5.2)$$

Следовательно,

$$Z_1 = \frac{e^{(\tau_{\max} - \tau_{\min})Q} - 1}{\Delta\tau Q}. \quad (\Pi.5.3)$$

Осталось случайным образом выбрать значение  $\tau$  согласно функции распределения  $W(\tau)$ . Для этого приравняем образующую функцию

$$F(\tau) = \sum_{\tau'=\tau_{\min}}^{\tau} W(\tau') = \frac{e^{(\tau - \tau_{\min})Q} - 1}{Z_1 \Delta\tau Q} = \frac{e^{(\tau - \tau_{\min})Q} - 1}{e^{(\tau_{\max} - \tau_{\min})Q} - 1} \quad (\Pi.5.4)$$

случайному числу  $R$ , равномерно распределенному на отрезке от 0 до 1:

$$e^{(\tau - \tau_{\min})Q} - 1 = R(e^{(\tau_{\max} - \tau_{\min})Q} - 1), \quad (\Pi.5.5)$$

откуда

$$\tau = \tau_{\min} + \frac{1}{Q} \ln \left( 1 + R \left( e^{(\tau_{\max} - \tau_{\min})Q} - 1 \right) \right). \quad (\Pi.5.6)$$

В случае малого  $Q$  имеем:

$$Z_1 = \frac{1}{\Delta\tau} \left( (\tau_{\max} - \tau_{\min}) + \frac{Q}{2} (\tau_{\max} - \tau_{\min})^2 \right); \quad (\Pi.5.7)$$

$$\tau = \tau_{\min} + (\tau_{\max} - \tau_{\min})R \left( 1 + \frac{Q}{2}(1 - R) \right). \quad (\Pi.5.8)$$

**2.** Если процедура предполагает определение двух точек  $\tau_1$  и  $\tau_2$ , то плотность вероятности

$$W(\tau_1, \tau_2) = \frac{1}{Z_2} e^{(\tau_2 - \tau_1)Q}. \quad (\Pi.5.9)$$

Такая плотность вероятности уже рассматривалась ранее в п. 10.1.4. Кратко напомним процедуру определения  $\tau_1$  и  $\tau_2$ .

Обозначим  $D \equiv (\tau_{\max} - \tau_{\min})$ . Из условия нормировки получим

$$Z_2 = \frac{e^{QD} - QD - 1}{(\Delta\tau Q)^2}. \quad (\text{П.5.10})$$

Действуя аналогично первому случаю, найдем связь  $\tau_2 - \tau_1 \equiv f$  со случайнym числом, равномерно распределенным отрезке от 0 до 1:

$$R_1 = \frac{e^{Qf} (1 + Q(D - f)) - QD - 1}{e^{QD} - QD - 1}. \quad (\text{П.5.11})$$

Трансцендентное уравнение (П.5.11) в общем случае аналитически не решается. Для его решения можно использовать, например, метод дихотомии (деления отрезка пополам).

В случае малого  $Q$  имеем:

$$Z_2 = \frac{D^2}{2(\Delta\tau)^2} \left(1 + \frac{D}{3}\right), \quad (\text{П.5.12})$$

$$f = D(1 - \sqrt{R_1}). \quad (\text{П.5.13})$$

При необходимости это приближенное решение можно взять как первое приближение в итерационном решении уравнения (П.5.11).

Наконец, определим  $\tau_1$  и  $\tau_2$ :

$$\tau_1 = D - R_2 f, \quad (\text{П.5.14})$$

$$\tau_2 = \tau_1 + f, \quad (\text{П.5.15})$$

где  $R_2$  — также случайное число, равномерно распределенное на отрезке от 0 до 1.

## Приложение 6

### СТWL-МЕТОД: АЛГОРИТМ РАБОТЫ СО СПИСКОМ ИМЕН

При обращении к процедурам рождения и уничтожения кинков, а также при выполнении любой процедуры, изменяющей состояние кинка, необходимо быстро находить соответствующий ему диагональный участок траектории в списке имен (или номеров) всех диагональных участков, имеющихся в конфигурации, при этом нежелательно пересортировывать массив имен при уничтожении участка, находящегося внутри массива. Ниже описывается схема алгоритма для работы со списком имен, включающая две основные процедуры: рождение имени диагонального участка *getname*, и уничтожение имени *dropname*, решающая эту задачу.

В начале алгоритма формируются два массива — два списка, взаимно связанных друг с другом, *namelist(j)* — список имен диагональных участков, и *numname(j)* — список номеров имен.

При обращении к первому списку можно узнать, какое имя *name* находится под номером *j*, т. е. *namelist(j) = name*. При обращении ко второму списку, наоборот, можно узнать, под каким номером *j* находится имя *name*: *numname(name) = j*.

Эти два списка в процессе МК-симуляции постоянно меняются, но взаимная связь имен и номеров должна все время оставаться.

Рассмотрим процедуры рождения и уничтожения имен.

1. *Инициализация.* Перед началом работы выполняется процедура *start\_name*, присваивающая всем значениям переменных в массивах номера по порядку, т. е. *numname(j) = j*, *namelist(j) = j*, *j = 1 ÷ nn\_max*. Величина *nn\_max* — максимальное значение имени (и его номера) выбирается из разумных соображений (как правило, из вида рассчитываемой модели можно оценить примерное среднее число кинков, и, соответственно, диагональных участков). Текущее значение количества имен *nn\_name* приравнивается нулю.
2. *Процедура рождения getname.* Новое имя рождается в конце списка. Проверяется условие, чтобы текущее количество имен *nn\_name* было меньше *nn\_max*. Если это условие выполняется, количество текущих имен увеличивается на единицу: *nn\_name = nn\_name+1*, и из списка имен выбирается очередное имя, *name = namelist(nn\_name)*, ему присваивается номер *numname(name) = nn\_name*.
3. *Процедура уничтожения dropname.* Прежде всего проверяется, имеется ли в списке имя *name*, которое требуется уничтожить. Если его номер *nn\_drop = numname(name)* не больше максимального текущего имени *nn\_name*, то процедура разрешается. Далее, если *nn\_drop = nn\_name*, т. е. уничтожаемое имя находится в конце списка имен, то следует просто уменьшить на

единицу текущее количество имен:  $\text{пп\_name} = \text{пп\_name}-1$ ; если  $\text{пп\_drop} < \text{пп\_name}$ , то выбирается последнее имя в списке,  $\text{lastname} = \text{namelist}(\text{пп\_name})$ , ему присваивается номер уничтожаемого имени, т. е.  $\text{numname}(\text{lastname}) = \text{пп\_drop}$ , а уничтожаемое имя заменяется на последнее:  $\text{namelist}(\text{пп\_drop}) = \text{lastname}$ . Уничтожаемое имя также используется: оно помещается на место последнего в списке,  $\text{namelist}(\text{пп\_name}) = \text{name}$ ,  $\text{numname}(\text{name}) = \text{пп\_name}$ . Текущее количество имен уменьшается на единицу,  $\text{пп\_name} = \text{пп\_name}-1$ , так что уничтоженное имя, находясь уже за пределами списка, консервируется. Это позволяет в дальнейшем использовать его при выполнении процедуры рождения, и приводит к тому, что значения имен не возрастают в процессе работы алгоритма, а остаются не больше максимального текущего количества имен  $\text{пп\_name}$ , постоянно перемещаясь по спискам имен  $\text{namelist}$  и номеров имен  $\text{numname}$ .

Со списком имен полезно связать дополнительную информацию о кинках, однозначно определяющую положение диагонального участка  $\text{name}$  в фазовом пространстве, его ближайших соседей и т. п. Например, можно ввести следующие массивы (рис. П.6.1):  $\text{t\_abs}(\text{name})$  — точка на временной шкале, соответствующая кинку, оканчивающему диагональный участок  $\text{name}$ ;  $\text{time}(\text{name})$  — длина диагонального участка  $\text{name}$  на временной шкале;  $\text{n\_occ}(\text{name})$  — число заполнения диагонального участка;  $\text{n\_site}(\text{name})$  — номер узла пространственной решетки, на котором расположен участок  $\text{name}$ ;  $\text{name\_l}(\text{name})$  — имя ближайшего диагонального участка слева от  $\text{name}$  на том же узле решетки;  $\text{name\_r}(\text{name})$  — имя ближайшего участка справа от  $\text{name}$  на том же узле решетки;  $\text{m\_kink\_r}(\text{name})$  — имя диагонального участка на другом узле, с которым связан участок  $\text{name}$  с помощью кинка, оканчивающего справа этот участок;  $\text{b}(\text{name})$  — номер узла, на котором находится диагональный участок  $\text{m\_kink\_r}(\text{name})$ .

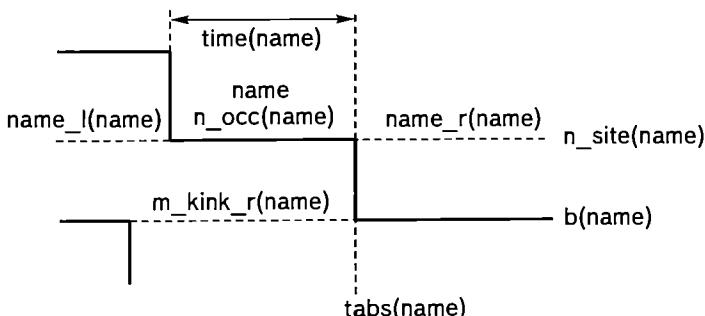


Рис. П.6.1. Массивы имен для оперативного обращения к участкам фазового пространства

Если диагональный участок оканчивается обрывом траектории (например, хвостом червя), то он не связан справа с участком на другом узле. Полезно ввести индекс  $\text{plain}(\text{name})$ , фиксирующий это, равный, например, 1, если кинк справа имеется, и равный нулю, если справа — обрыв траектории.

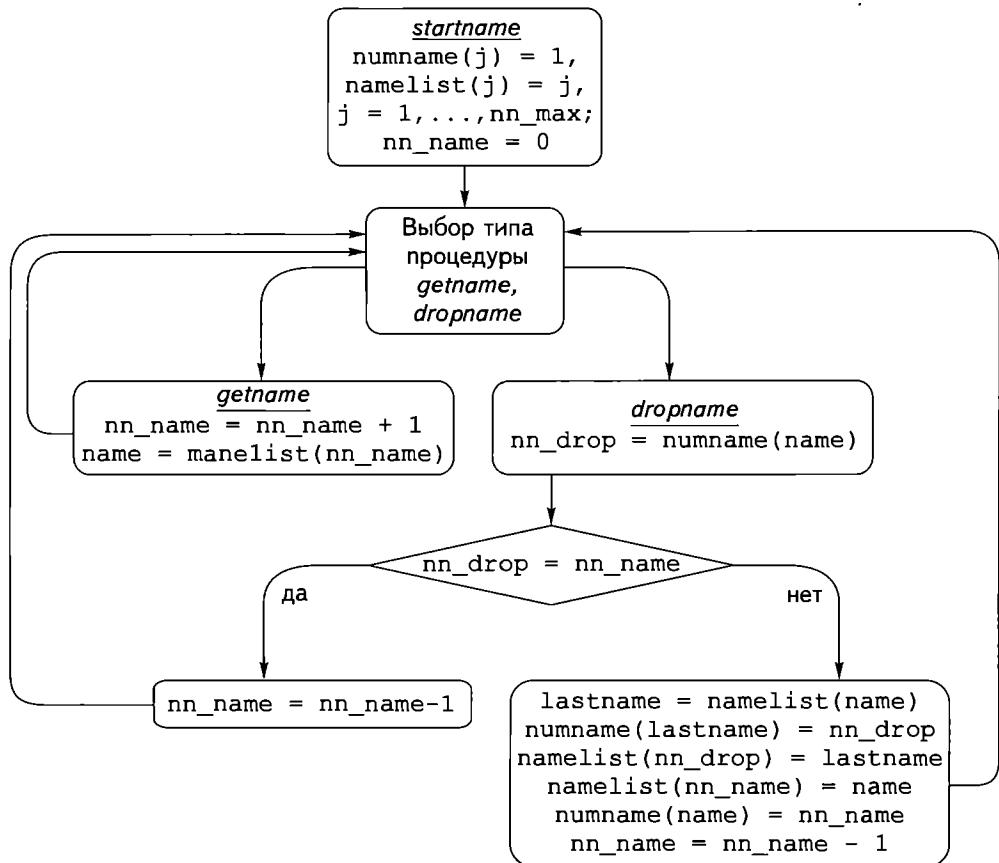


Рис. П.6.2. Блок-схема алгоритма работы со списками имен

Все описанные массивы при реализации МК-процедур удобны для оперативного обращения к участкам фазового пространства. Блок-схема алгоритма работы со списками имен приведена на рис. П.6.2.

## Приложение 7

### ПРЕДСТАВЛЕНИЕ МНОГОЧАСТИЧНОГО КОРРЕЛЯТОРА ЧЕРЕЗ ОПРЕДЕЛИТЕЛИ ОТ ОДНОЧАСТИЧНЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА

Докажем следующее соотношение [204, 205]:

$$\begin{aligned} \langle 0 | a_{i_1} a_{i_2} \dots a_{i_{N_a}} a_{j_{N_a}}^+ \dots a_{j_2}^+ a_{j_1}^+ | 0 \rangle &= \\ &= \det \begin{pmatrix} B_{i_1 j_1} & B_{i_1 j_2} & B_{i_1 j_{N_a}} \\ B_{i_2 j_1} & B_{i_2 j_2} & B_{i_2 j_{N_a}} \\ \dots & \dots & \dots \\ B_{i_{N_a} j_1} & B_{i_{N_a} j_2} & B_{i_{N_a} j_{N_a}} \end{pmatrix}, \quad (\text{П.7.1}) \end{aligned}$$

где  $B_{ij} = \langle 0 | a_i a_j^+ | 0 \rangle$ . Это соотношение похоже на аналогичное соотношение для дискретного детерминантного метода [174], рассмотренное ранее для экспонент от операторов.

Доказательство проведем методом математической индукции. Действительно, для  $N_a = 1$  результат очевиден. Предположим, что (П.7.1) справедливо для  $N_a - 1$ . Справедливо также антикоммутационное соотношение для фермионов:

$$a_i a_j^+ = B_{ij} - a_j^+ a_i. \quad (\text{П.7.2})$$

В уравнении (П.7.1) можно переставить фермионные операторы так, чтобы перенести оператор  $a_{i_{N_a}}$  через все операторы рождения вплоть до вакуумного состояния  $|0\rangle$ . После такой перестановки получим:

$$\begin{aligned} \langle 0 | a_{i_1} a_{i_2} \dots a_{i_{N_a}} a_{j_{N_a}}^+ \dots a_{j_2}^+ a_{j_1}^+ | 0 \rangle &= \\ &= B_{i_{N_a} j_{N_a}} \langle 0 | a_{i_1} a_{i_2} \dots a_{i_{N_a-1}} a_{j_{N_a-1}}^+ \dots a_{j_2}^+ a_{j_1}^+ | 0 \rangle - \\ &\quad - B_{i_{N_a} j_{N_a}-1} \langle 0 | a_{i_1} a_{i_2} \dots a_{i_{N_a-1}} a_{j_{N_a}}^+ a_{j_{N_a-2}}^+ \dots a_{j_2}^+ a_{j_1}^+ | 0 \rangle - \\ &\quad - B_{i_{N_a} j_{N_a}-2} \langle 0 | a_{i_1} a_{i_2} \dots a_{i_{N_a-1}} a_{j_{N_a}}^+ a_{j_{N_a-1}}^+ a_{j_{N_a-3}}^+ \dots a_{j_2}^+ a_{j_1}^+ | 0 \rangle + \dots \quad (\text{П.7.3}) \end{aligned}$$

Выразив  $N_a - 1$  произведений, фигурирующих в (П.7.3) справа, через определители (что можно сделать по предположению индукции), получим, что уравнение (П.7.3) есть просто разложение детерминанта размерности  $N_a \times N_a$  в уравнении (П.7.1) по его крайней строке, что и требовалось доказать.

Представим также обобщение выражения (П.7.1) при учете температуры и включения взаимодействия в систему (доказательство см. в [204, 205]):

$$\begin{aligned} & \left\langle 0 \left| a_{i_1} a_{i_2} \dots a_{i_{N_a}} \left( T \exp \left( - \int_{\tau_1}^{\tau_2} S(\tau) d\tau \right) \right) a_{j_{N_a}}^+ \dots a_{j_2}^+ a_{j_1}^+ \right| 0 \right\rangle = \\ & = \det \begin{pmatrix} B_{i_1 j_1}(\tau_2, \tau_1) & B_{i_1 j_2}(\tau_2, \tau_1) & \dots & B_{i_1 j_{N_a}}(\tau_2, \tau_1) \\ B_{i_2 j_1}(\tau_2, \tau_1) & B_{i_2 j_2}(\tau_2, \tau_1) & \dots & B_{i_2 j_{N_a}}(\tau_2, \tau_1) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ B_{i_{N_a} j_1}(\tau_2, \tau_1) & B_{i_{N_a} j_2}(\tau_2, \tau_1) & \dots & B_{i_{N_a} j_{N_a}}(\tau_2, \tau_1) \end{pmatrix}, \quad (\text{П.7.4}) \end{aligned}$$

где матрица  $B(\tau_2, \tau_1)$  для  $\tau_2 \geq \tau_1$  состоит из элементов

$$B_{ij}(\tau_2, \tau_1) = \left\langle 0 \left| a_i \left( T \exp \left( - \int_{\tau_1}^{\tau_2} S(\tau) d\tau \right) \right) a_j^+ \right| 0 \right\rangle, \quad (\text{П.7.5})$$

где  $S$  — действие, порожденное электрон-бозонным взаимодействием. Эти элементы обладают свойством

$$\begin{aligned} B(\tau_3, \tau_2) B(\tau_2, \tau_1) &= B(\tau_3, \tau_1), \\ B(\tau, \tau) &= 1. \end{aligned} \quad (\text{П.7.6})$$

## Приложение 8

# ПРОЦЕДУРЫ ОБНОВЛЕНИЙ ДЛЯ ДИАГРАММНОГО МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО

### П.8.1. Класс I: обновления, не изменяющие порядок диаграммы

Эти процедуры воспроизводят стандартные правила симуляции заданной функции распределения  $\mathcal{D}_m$ . В настоящем случае имеется множество параметров, имеющих различное физическое значение: внешние параметры  $\{y\}$  включают  $\tau$ ,  $N$ ,  $\alpha$ , и  $k$ , а внутренние параметры описывают топологию диаграммы (индекс  $\xi_m$ ), времена вершин взаимодействия и импульсы фононных пропагаторов. Из вышеизложенного списка параметров следует и список обновлений, которые симулируют распределение  $\mathcal{D}_m$ .

**П.8.1.1. Сдвиг вершины по времени.** Случайным образом выбирается внутренняя вершина диаграммы и изменяется ее положение во времени  $\tau_\nu \rightarrow \tau'_\nu$  в интервале  $(\tau_1, \tau_2)$  между ближайшими левой и правой вершинами:  $\tau_1 < \tau_\nu, \tau'_\nu < \tau_2$ . Допустим, что входящий и исходящий импульсы выбранной вершины есть  $p$  и  $p + q$ . Нормированная плотность вероятности обнаружить вершину в точке  $\tau'_\nu$  является простой экспоненциальной функцией

$$W(\tau'_\nu) = \frac{\Delta E e^{-(\tau'_\nu - \tau_1)\Delta E}}{1 - e^{-(\tau_2 - \tau_1)\Delta E}}, \quad (\text{П.8.1})$$

где  $\Delta E = E(p) - E(p + q) \mp \omega_p$  в зависимости от того, является ли вершина левым или правым краем фононного пропагатора. Решение уравнения

$$\int_{\tau_1}^{\tau'_\nu} W(s) ds = r \quad (\text{П.8.2})$$

имеет вид

$$\tau'_\nu = \tau_1 - \frac{\ln(1 - r [1 - e^{-(\tau_2 - \tau_1)\Delta E}])}{\Delta E}. \quad (\text{П.8.3})$$

Здесь и далее  $r$  — распределенное в пределах единичного интервала случайное число. Так как новое значение выбирается в соответствии с точным распределением вероятности, то вероятность принятия обновления равна единице.

**П.8.1.2. Изменение угла переданного импульса.** Случайным образом выбирается фононный пропагатор, не принадлежащий к концевым фононам (концевые пропагаторы входят в диаграмму парами с одинаковыми импульсами и, следовательно, процедура обновления одного пропагатора к ним неприменима), и его импульс изменяется  $q \rightarrow q'$  таким образом, что  $|q|=|q'|$ .

Пусть пропагатор соединяет вершины в точках  $\tau_1$  и  $\tau_2$ . Вводя определение среднего (в интервале между вершинами) электронного импульса

$$\langle \mathbf{p} \rangle_{\tau_1, \tau_2} = \frac{\int_{\tau_1}^{\tau_2} \mathbf{p}(\tau) d\tau}{\tau_2 - \tau_1} \quad (\text{П.8.4})$$

и вводя обозначение  $\mathbf{p}_0 = \langle \mathbf{p} \rangle_{\tau_1, \tau_2} + \mathbf{q}$ , можно записать плотность вероятности найти азимутальный и полярный углы  $\varphi$  и  $\theta$  между векторами  $\mathbf{q}$  и  $\mathbf{p}_0$  в виде

$$W(\varphi, \theta) \sim \sin \theta \exp \left\{ -\frac{\tau_2 - \tau_1}{2m} p_0 q \cos \theta \right\}. \quad (\text{П.8.5})$$

Этот результат является тривиальным следствием квадратичного закона дисперсии затравочной квазичастицы. Очевидно, что азимутальный угол выбирается случайным образом ( $\varphi = 2\pi\tau$ ), а  $\cos \theta$  выбирается в соответствии с простой экспоненциальной функцией в полной аналогии с уравнениями (П.8.1) и (П.8.3). Вероятность принятия обновления равна единице.

**П.8.1.3. Изменение модуля переданного импульса.** В данной процедуре изменяется модуль переданного импульса без изменения углов между векторами  $\mathbf{q}$  и  $\mathbf{p}_0$ . Плотность вероятности выглядит следующим образом:

$$W(q) \sim V(q) q^2 \exp \left\{ -\frac{\tau_2 - \tau_1}{2m} [q - p_0 \cos \theta]^2 \right\} \sim \\ \sim \exp \left\{ -\frac{\tau_2 - \tau_1}{2m} [q - p_0 \cos \theta]^2 \right\}, \quad (\text{П.8.6})$$

где в явном виде использована независимость произведения  $V(q) \cdot q^2$  от  $q$ . Быстрое решение уравнения  $z = \operatorname{erf}^{-1}(r)$  достигается за счет табуляции интеграла ошибок, и новое значение  $q = z\sqrt{2m/(\tau_2 - \tau_1)} + p_0 \cos \theta$  принимается с единичной вероятностью.

**П.8.1.4. Изменение структуры диаграммы.** Случайным образом выбирается пара соседних вершин внутри диаграммы, и концы фононных пропагаторов, которые исходили из выбранных вершин, обмениваются: если первоначальные передачи импульса в вершинах 1 и 2 были  $\mathbf{q}_1$  и  $\mathbf{q}_2$ , эти импульсы предлагается обменять. Отношение  $R$ , на основании которого принимается обновление, зависит от того, являются ли вершины левыми ( $c = 1$ ), или правыми ( $c = -1$ ) концами пропагаторов:

$$R = e^{-\tau [E(\mathbf{p} + c_1 \mathbf{q}_1 - c_2 \mathbf{q}_2) - E(\mathbf{p}) - \omega_0(c_1 - c_2)]}. \quad (\text{П.8.7})$$

Здесь  $\tau$  — расстояние между вершинами;  $\mathbf{p}$  — электронный импульс между выбранными вершинами.

**П.8.1.5. Изменение длины диаграммы во времени.** Существуют два варианта этой процедуры (пусть единственным искусственным потенциалом является химический потенциал).

В первом варианте новое расстояние  $\tau$  между положением правого конца диаграммы и ближайшей вершиной выбирается в соответствии с плотностью вероятности

$$W(\tau') = \Delta E e^{-\tau' \Delta E}, \quad (\text{П.8.8})$$

где  $\Delta E = E(\mathbf{p}) + N_z \omega_0 - \mu$ ;  $\mathbf{p}$  — импульс последнего электронного пропагатора,  $\mu$  — химический потенциал;  $N_z$  — число концевых фононных пропагаторов.

Во втором варианте изменяется разница во времени между произвольной парой вершин. Плотность вероятности по-прежнему задается выражением (П.8.8), а  $N_z$  — число фононных пропагаторов, разрезаемых вместе с электронным пропагатором, расположенным между выбранными вершинами.

В обоих вариантах вероятность принятия обновления равна единице.

Существует трудность в наборе качественной статистики, связанная с резкой зависимостью функции  $P$  от времени: при больших  $\alpha P(\tau)$  падает почти до нуля на малых временах и затем возвращается к  $P \sim 1$  в области асимптотического поведения (12.186). Однако существует общий рецепт, пригодный в случае подобных трудностей, называемый «реномированным потенциалом» [313–315]. Идея метода основана на изменении статистики предложения диаграмм и состоит в использовании обновлениях отношения

$$R = \frac{A_{\text{fic}}(\tau_{\text{new}})}{A_{\text{fic}}(\tau_{\text{old}})} \quad (\text{П.8.9})$$

и соответствующей модификации всех эстиматоров в данном интервале времен при помощи множителя  $1/A_{\text{fic}}(\tau)$ , где фиктивный потенциал  $A_{\text{fic}}(\tau)$  произволен. Наилучший выбор для вычисления  $P(\tau)$  достигается при  $A_{\text{fic}} \sim 1/P(\tau)$ . Этот ренормируемый потенциал может быть получен самосогласованной подстройкой функции  $A_{\text{fic}}$  к  $1/P_{MC}(\tau)$  после достаточного количества шагов в цикле термализации.

**П.8.1.6. Изменение константы связи.** Так как вес диаграммы пропорционален  $\alpha^{N_p}$ , где  $N_p$  — число фононных пропагаторов, то можно выбирать  $\alpha$  со степенной плотностью вероятности, нормировка которой может быть достигнута за счет ограничения возможных значений  $\alpha$  конечным интервалом. Вероятность принятия обновления равна единице.

**П.8.1.7. Изменение внешнего импульса.** Если дан средний электронный импульс диаграммы  $\bar{\mathbf{p}} = \langle \mathbf{p} \rangle_{0,\tau}$  (П.8.4), а внешний импульс равен  $\mathbf{k}$ , то можно определить вектор  $\mathbf{p}_0 = \mathbf{k} - \langle \mathbf{p} \rangle_{0,\tau}$  и записать плотность вероятности выбрать новый внешний импульс  $\mathbf{k}'$  в виде

$$W(\mathbf{k}') \sim \exp \left\{ -\frac{\tau}{2m} (\mathbf{k}' - \mathbf{p}_0)^2 \right\}. \quad (\text{П.8.10})$$

Как и раньше, новая переменная разыгрывается в соответствии с вероятностью, задаваемой интегралом ошибок [см. раздел и формулу (П4.6)], и обновление всегда принимается.

## П.8.2. Класс II: обновления, изменяющие порядок диаграммы

Общие правила построения обновлений, которые изменяют порядок диаграммы, следующие. Пусть обновление  $\mathcal{A}$  преобразует диаграмму  $\mathcal{D}_m(\xi_m, y, x_1, \dots, x_m)$  в  $\mathcal{D}_{m+n}(\xi_{m+n}, y, x_1, \dots, x_m, x_{m+1}, \dots, x_{m+n})$  и, соответ-

ственno, обновление  $\mathcal{B}$  производит обратное преобразование. Для нового набора параметров вводится векторное обозначение  $\mathbf{x} = \{x_{m+1}, \dots, x_{m+n}\}$ . Обновление  $\mathcal{A}$  состоит из двух шагов. В начале предлагается изменение типа диаграммы в тип  $\mathcal{D}_{m+n}$ , а затем предлагается конкретное значение  $\mathbf{x}$ , которое генерируется в соответствии с нормированной функцией распределения  $W(\mathbf{x})$ . Для быстрой сходимости желательно, чтобы  $W(\mathbf{x})$  была как можно ближе к  $\mathcal{D}_{m+n}(\mathbf{x})$ , т.е. к истинному распределению плотности  $\mathbf{x}$  в новой диаграмме. После предложения модификации обновление либо принимается (с вероятностью  $P_{\text{acc}}(\mathbf{x})$ ), либо отвергается. Обновление  $\mathcal{B}$ , которое уничтожает переменную  $\mathbf{x}$ , принимается с вероятностью  $P_{\text{rem}}(\mathbf{x})$ . Чтобы пара взаимно дополнительных обновлений была сбалансирована, требуется выполнение следующего рецепта в соответствии с правилами Метрополиса [263]:

$$P_{\text{acc}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{R(\mathbf{x})}{W(\mathbf{x})}, & \text{если } R(\mathbf{x}) < W(\mathbf{x}), \\ 1, & \text{в противном случае;} \end{cases} \quad (\text{П.8.11})$$

$$P_{\text{rem}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{W(\mathbf{x})}{R(\mathbf{x})}, & \text{если } R(\mathbf{x}) > W(\mathbf{x}), \\ 1, & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad (\text{П.8.12})$$

где

$$R(\mathbf{x}) = \frac{p_{\mathcal{B}} \mathcal{D}_{m+n}(\xi_{m+n}, y, x_1, \dots, x_m, \mathbf{x})}{p_{\mathcal{A}} \mathcal{D}_m(\xi_m, y, x_1, \dots, x_m)}, \quad (\text{П.8.13})$$

а  $p_{\mathcal{A}}$  и  $p_{\mathcal{B}}$  являются вероятностями, с которыми предпринимаются попытки выполнить обновления  $\mathcal{A}$  и  $\mathcal{B}$ , которые могут быть различными. Для решения задачи о поляроне и учета всех возможных диаграмм достаточно иметь две пары взаимно дополнительных обновлений класса II, которые детально описаны ниже.

**П.8.2.1. Добавление и уничтожение фононных пропагаторов.** Ниже рассмотрен алгоритм процесса, который увеличивает число фононных пропагаторов (кроме тех, что присоединены к конечным точкам диаграммы) на единицу. Это обновление можно выполнить в двух вариантах, которые отличаются плотностью вероятности предложения параметров нового пропагатора. Сначала выбирается положение  $\tau_1$  левого конца добавляемого фононного пропагатора. Это делается посредством случайного выбора (с равной вероятностью) одного из существующих электронных пропагаторов и случайного выбора  $\tau_1$  с постоянной плотностью вероятности внутри выбранного пропагатора. Затем выбираются переданный импульс и длительность во времени, используя следующую функцию распределения:

$$W(\mathbf{q}, \tau) = \frac{\omega_0}{4\pi q_0} e^{-\tau\omega_0(1+q/q_0)^2}, \quad (\text{П.8.14})$$

где  $\frac{q^2}{2} = \omega_0$ . Иными словами, сначала выбирается  $|q|$  в соответствии с распределением  $W_1(q) = \frac{1}{\left[q_0\left(1 + \frac{q}{q_0}\right)^2\right]}$  (изотропный относи-

тельно точки  $\mathbf{q} = 0$ ), а затем  $\tau$  в соответствии с распределением  $W_2(q|\tau) = \omega_0 \left(1 + \frac{q}{q_0}\right)^2 e^{-\tau\omega_0(1+\frac{q}{q_0})^2}$ . Так как типичная длина фононного пропагатора зависит от того, насколько близко импульс полярона находится к положению точки окончания спектра, также необходим и другой вариант выбора новых переменных  $\mathbf{q}$  и  $\tau$ . В этом случае выделяется в фактор функция распределения  $W(\mathbf{q}, \tau) = W_1(q' = |\mathbf{q} - \mathbf{k}|) W_3(\tau)$  (т.е. изотропная относительно точки  $\mathbf{k}$ ), где  $W_3(\tau) = \Omega e^{-\tau\Omega}$ , а  $\Omega \ll \omega_0$  (вплоть до  $\Omega \sim 0,01\omega_0$  вблизи точки окончания спектра).

Следует подчеркнуть, что описанные выше распределения мотивированы физикой задачи. В частности, если бы комбинация  $V^2(q)q^2$  была бы некоторой степенной функцией  $q$  (например, когда вершина взаимодействия не является сингулярной или даже стремится к нулю при  $q \rightarrow 0$ ), то лучше выбрать  $W_1(q \rightarrow 0) \propto V^2(q)q^2$  для того, чтобы вероятность принятия обновления не была сингулярной ни в какой точке возможной области параметров.

После завершения стадии предложения параметров необходимо предпринять шаги для принятия или отклонения обновления в соответствии с (П.8.11). Соответствующая функция  $W(\mathbf{x})$  ( $\mathbf{x} \equiv \{\tau_1, \tau_2, \mathbf{q}\}$ ) имеет вид (для первой версии обновления)

$$W(\mathbf{x}) = \frac{\omega_0 e^{-\tau\omega_0(1+q/q_0)^2}}{4\pi\tau_0 q_0}, \quad (\text{П.8.15})$$

где  $\tau_0$  — длина того свободного пропагатора, где выбрана точка  $\tau_1$ . Как уже отмечалось ранее, форма  $W$  не является однозначной. Таким образом, за исключением множителя  $\frac{p_B}{p_A}$ , который обсуждается ниже, отношение (П.8.13) полностью определено и имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{D}_{m+n}(\xi_{m+n}, y, x_1, \dots, x_m, \mathbf{x})}{\mathcal{D}_m(\xi_m, y, x_1, \dots, x_m)} &= \\ &= \frac{2\sqrt{2}\pi\alpha}{(2\pi)^3} e^{-(\tau_2-\tau_1)\left[\omega_0 + E((\mathbf{p})_{\tau_1, \tau_2} - \mathbf{q}) - E((\mathbf{p})_{\tau_1, \tau_2})\right]}. \quad (\text{П.8.16}) \end{aligned}$$

Алгоритм процесса  $\mathcal{B}$  состоит в выборе (с равной вероятностью) одного из фононных пропагаторов и, если он не присоединен к концу диаграммы, его уничтожении с вероятностями, определенными уравнениями (П.8.12) и (П.8.15). Для полного определения подпроцессов  $\mathcal{A}$  и  $\mathcal{B}$  необходимо определить отношения  $\frac{p_B}{p_A}$ . Вполне разумным является выбор процессов создания и уничтожения с равной вероятностью. Может показаться, что в этом случае  $\frac{p_B}{p_A} = 1$ , что в корне неверно. Дело состоит в том, что при выборе электронного пропагатора для помещения точки  $\tau_1$  имеется  $N_e$  равных шансов, где  $N_e$  — число свободных электронных пропагаторов в диаграмме до изменения (знаменатель выражения (П.8.13)). С другой стороны, когда выбирается фононный пропагатор в обновлении уничтожения, имеется  $N_{ph}$  равных шансов, где  $N_{ph}$  — число фононных пропагаторов в диаграмме, из которой удаляется пропагатор (числитель уравнения (П.8.13)). Числа  $N_e$  и  $N_{ph}$  явно связаны друг

с другом:

$$N_{ph} = (N_e + 1) / 2. \quad (\text{П.8.17})$$

Следовательно, окончательное выражение для фактора имеет вид

$$\frac{p_B}{p_A} = \frac{2N_e}{N_e + 1} = \frac{2N_{ph} - 1}{N_{ph}}. \quad (\text{П.8.18})$$

**П.8.2.2. Добавление и уничтожение пропагаторов, присоединенных к концу диаграммы.** Следует напомнить, что диаграммы для  $G_N$ , см. уравнение (12.180) и рис. 12.5.2.2, содержат пары фононных пропагаторов со свободными (не связанными с остальной частью диаграммы) концами. Каждый пропагатор в паре имеет тот же самый импульс, так как эти пропагаторы возникают из фононных операторов в определении функции  $G_N$  (12.180). Можно сказать, что эти пропагаторы «присоединены» к концам диаграммы, так как они должны либо начинаться при  $t = 0$  (левый присоединенный пропагатор), либо заканчиваться при  $\tau$  (правый присоединенный пропагатор).

Чтобы добавить или убрать пару концевых фононных пропагаторов (например, пропагаторы, обозначенные «B» на рис. 12.5.2.2), используется процедура, аналогичная приведенной в предыдущей секции и отличающаяся описанными ниже деталями. Сначала выбирается позиция  $\tau_1$  для левого пропагатора и  $\tau_2$  для правого пропагатора в соответствии с плотностями вероятности  $W_l(\tau_1) = \Omega e^{-\Omega\tau_1}$  и  $W_r(\tau_2) = \Omega e^{-\Omega(\tau-\tau_2)}$ . В первом варианте обновления  $\Omega = \omega_0$ , а во втором  $\Omega \ll \omega_0$ . Импульс фонона предлагается с тем же самым распределением  $W_1(q' = q)$  или  $W_1(q' = |\mathbf{q} - \mathbf{k}|)$ . Таким образом,

$$W(x) = \frac{\Omega^2 e^{-\Omega(\tau+\tau_1-\tau_2)}}{4\pi q_0 \left(1 + \frac{q'}{q_0}\right)^2}, \quad (\text{П.8.19})$$

и

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{D}_{m+n}(\xi_{m+n}, y, x_1, \dots, x_m, x)}{\mathcal{D}_m(\xi_m, y, x_1, \dots, x_m)} &= \frac{2\sqrt{2}\pi\alpha}{(2\pi)^3} e^{-\omega_0(\tau+\tau_1-\tau_2)} \times \\ &\times \begin{cases} \exp\{-[E(\langle p \rangle_{0,\tau_1} - \mathbf{q}) - E(\langle p \rangle_{0,\tau_1})]\tau_1 - \\ \quad - [E(\langle p \rangle_{\tau_2,\tau_1} - \mathbf{q}) - E(\langle p \rangle_{\tau_2,\tau_1})](\tau - \tau_2)\}, & \tau_1 < \tau_2; \\ \exp\{-[E(\langle p \rangle_{0,\tau_2} - \mathbf{q}) - E(\langle p \rangle_{0,\tau_2})]\tau_2 - \\ \quad - [E(\langle p \rangle_{\tau_2,\tau_1} - 2\mathbf{q}) - E(\langle p \rangle_{\tau_2,\tau_1})](\tau_1 - \tau_2) - \\ \quad - [E(\langle p \rangle_{\tau_1,\tau} - \mathbf{q}) - E(\langle p \rangle_{\tau_1,\tau})](\tau - \tau_1)\}, & \tau_1 > \tau_2. \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{П.8.20})$$

Алгоритм для обратной процедуры состоит в выборе (с равной вероятностью) пары присоединенных пропагаторов и в удалении пары с вероятностью, заданной равенствами (П.8.12) и (П.8.19). Так как процедуры создания и уничтожения пар генерируются с равной вероятностью, то

$$\frac{p_B}{p_A} = \frac{1}{N_z + 1}. \quad (\text{П.8.21})$$

## Список литературы

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., and 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. Aharanov V., and 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., and 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 цепочки // Письма в ЖЭТФ. 2004. Т. 80. С. 498.

26. Елютин П. В., Крищенков 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., Скрябин 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. Кащурников 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. М1. — М.: Наука, 1976. — 584 с.
37. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Теоретическая физика. Т. 9. Статистическая физика. Ч. 72. М2. — М.: Наука, 1978. — 448 с.
38. Eculopotow E. N. Green's Functions in Quantum Physics. Springer Verlag, 1979. — 251 р.
39. Дружин 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., Рыбкин 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. Кащурников В. А., Руднев И. А., Зубин М. В. Намагниченность двумерных сверхпроводников с дефектами // ЖЭТФ. 2002. Т. 121. С. 442.
50. Одинцов Д. С., Кащурников 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. Кащурников В. А., Руднев И. А., Зубин М. В. Упорядоченные состояния и структурные переходы в системе вихрей Абрикосова с периодическим пиннингом // ЖЭТФ. 2003. Т. 123. С. 1212.

56. Barabanov A.F., Beresovsky V.M., Zasinas E., and Maksimov L.A. Key features of the hole spectrum in three-band Hubbard model for high-Tc superconductors // Physica C. 1995. V. 252. P. 308; Biham O., Jarell M., and Jayaprakash C. Spectral function of the Anderson model: A quantum Monte-Carlo calculation // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 2639.
57. White S.R., Scalapino D.J., Sugar R.L., and Bickers N.E. Monte-Carlo Calculation of Dynamical Properties of the Two-Dimensional Hubbard Model // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 63. P. 1523.
58. Берков Д.В., Мешков С.В. Исследование энергетического спектра сильнокоррелированных электронных систем методами Монте-Карло // Письма в ЖЭТФ. 1990. Т. 52. С. 1021.
59. Imada M. Numerical results on superconducting correlation and momentum distribution in repulsive and attractive Hubbard model // Physica C. 1991. V. 185, P. 1447.
60. Sorella S., Parola A., Parrinello M., and Tosatti E. Non-Fermi-Liquid Exponents of the One-Dimensional Hubbard Model // Europhys. Lett. 1990. V. 12. P. 721.
61. Valenti R. and Gros C. Luttinger Liquid Instability of the 2D t-J Model: A Variational Study // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 68. P. 2402.
62. Von der Linden W. and Morgenstern I. Quantum Monte-Carlo study of quasiparticles in the Hubbard model // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 4669.
63. Aoki H. and Kuroki K. Superconductivity in a two-band Hubbard model // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 2125.
64. Takada Y. and Kita T. New Self-Consistency Relation between the Correlation Energy and the Momentum Distribution Function with Application to the One-Dimensional Hubbard Model // J. of the Phys. Soc. of Japan. 1991. V. 60. P. 25.
65. Imada M. On the Mechanism of High-Tc Superconductivity // J. of the Phys. Soc. of Japan. 1987. V. 56. P. 3793; A Quantum Simulation Study of Superconducting Correlation in Electron Systems with Strong Correlation // J. of the Phys. Soc. of Japan. 1988. V. 57. P. 3128.
66. Imada M. and Hatsugai Y. Numerical Studies on the Hubbard Model and the t-J Model in One- and Two-Dimensions // J. of the Phys. Soc. of Japan. 1989. V. 58. P. 3752.
67. Otsuka H. Charge Susceptibility of the Two-Dimensional Hubbard Model near the Half-Filled Band: A Monte-Carlo Study // J. of the Phys. Soc. of Japan. 1990. V. 59. P. 2916.
68. Кашурников В.А., Красавин А.В., Свистунов Б.В. Переход моттовский изолятор — сверхтекучесть в одномерной бозонной модели Хаббарда: квантовый метод Монте-Карло // Письма в ЖЭТФ. 1996. Т. 64. С. 92 [Kashurnikov V.A., Krasavin A.V., Svistunov B.V. // JETP Lett. 1996. V. 64. P. 99].
69. Kashurnikov V.A., Prokof'ev N.V., Svistunov B.V., and Troyer M. Quantum spin chains in a magnetic field // Phys. Rev. B. 1999. V.59. P. 1162.
70. Kagan Yu., Kashurnikov V.A., Krasavin A.V., Svistunov B.V., and Prokof'ev N. V. Quasi-condensation in 2D Interacting Bose Gas: Quantum Monte-Carlo Study // Phys. Rev. A. 2000. V. 61. 043608.
71. Kashurnikov V.A., Mishenko A.S., Tupitsyn I.S., Kharchenko Yu.G. Excitations in One-Dimensional Bose Gas: Exact Quantum Monte-Carlo Method // Physics of Low Dimensional Structures. 1999. № 5–6. P. 13.
72. Kashurnikov V.A., Prokof'ev N. V., Svistunov B. V. Revealing the superfluid — Mott-insulator transition in an optical lattice // Phys. Rev. A. 2002. V. 66. 031601(R).
73. Gr'uter P., Ceperley D., and Lalor F. Critical Temperature of Bose — Einstein Condensation of Hard-Sphere Gases // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 79. P. 3549.
74. Mathey L., Tsai S.-W., and Castro Neto A. H. Competing Types of Order in Two-Dimensional Bose — Fermi Mixtures // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97. 030601.
75. Tsuchiya S., Kurihara S., and Kimura T. Superfluid — Mott insulator transition of spin-1 bosons in an optical lattice // Phys. Rev. A. 2004. V. 70. 043628.
76. Krutitsky K. V. and Graham R. Spin-1 bosons with coupled ground states in optical lattices // Phys. Rev. A. 2004. V. 70. 063610.
77. Kartsev P. F. Rotating Bose-Einstein condensate with attractive interaction in one dimension: Single-L states and mesoscopics // Phys. Rev. A. 2003. V. 68. 063613; Карцев П.Ф. // ЖЭТФ. 2003. Т. 124. С. 932.

78. Mischenko A.S., Prokof'ev N.V., Sakamoto A., Svistunov B.V. Diagrammatic quantum Monte-Carlo study of the Fröhlich polaron // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. P. 6317; Mischenko A.S., Prokof'ev N.V., Svistunov B.V. Single-hole spectral function and spin-charge separation in the t-J model // Phys. Rev. B. 2001. V. 64. 033101.
79. Burovski E.A., Mishchenko A.S., Prokof'ev N.V., and Svistunov B.V. Diagrammatic Quantum Monte-Carlo for Two-Body Problems: Applied to Excitons // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87. 186402.
80. Kuklov A., Prokof'ev N., and Svistunov B. Commensurate Two-Component Bosons in an Optical Lattice: Ground State Phase Diagram // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 92. 050402.
81. Burovski E., Prokof'ev N., and Svistunov B. Truncated-determinant diagrammatic Monte-Carlo for fermions with contact interaction // Phys. Rev. B. 2004. V. 70. 193101.
82. Hohenadler M., Aichhorn M., and Linden W. Single-particle spectral function of the Holstein-Hubbard bipolaron // Phys. Rev. B. 2005. V. 71. 014302.
83. Алеснин С.С. // ЖЭТФ. 2003. Т. 124. С. 1080.
84. Mishchenko S., Nagaosa N., Prokof'ev N.V., Sakamoto A. and Svistunov B.V. Self-trapping of polarons in the Rashba — Pekar model // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. 020301.
85. Boninsegni M., Prokof'ev N.V., and Svistunov B.V. Worm Algorithm for Continuous-Space Path Integral Monte-Carlo Simulations // Worm algorithm and diagrammatic Monte-Carlo: A new approach to continuous-space path integral Monte-Carlo simulations // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 96. 070601; Phys. Rev. E. 2006. V. 74. 036701.
86. Rubtsov A.N., Savkin V.V., and Lichtenstein A.I. Continuous-time quantum Monte-Carlo method for fermions // Phys. Rev. B. 2005. V. 72. 035122.
87. Yokoyama H., Shiba H. Hubbard model in strong correlation regime: variational Monte-Carlo studies on singlet liquid and Neel state // Phys. Soc. Jap. 1987. V. 56. P. 3570.
88. Yokoyama H., Shiba H. Variational Monte-Carlo studies of Hubbard model. III Intensive Correlation Effects // Phys. Soc. Jap. 1990. V. 59. P. 3669.
89. Suzuki M. General correlation theorems on decomposition formulae of exponential operators and extrapolation methods for quantum Monte-Carlo simulations // Phys. Lett. A. 1985. V. 113. P. 299.
90. Fye R.M. New results on Trotter-like approximations // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. P. 6271.
91. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N. et.al. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines // J. Chem. Phys. 1953. V. 21. P. 1087.
92. Scalapino D.J., Sugar R.L. Monte-Carlo calculations of coupled boson-fermion systems II // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. P. 4295.
93. Moreo A. Pairing correlations in the two-dimensional Hubbard model // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. P. 5059; White S.R., Scalapino D.J., Sugar R.L., Loh E.Y., Gubernatis J.E., Scalettar R.T. Numerical study of the two-dimensional Hubbard model // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. P. 506.
94. Sciatto S.J., Marconi U.M.B., Medina R. Monte-Carlo simulations in fermionic systems: the three band Hubbard model case // Physica A. 1991. V. 171. P. 139.
95. Hirsch J.E. Discrete Hubbard-Stratonovich transformation for fermion lattice models // Phys. Rev. B. 1983. V. 28. P. 4059.
96. Batrouni G.G., Scalettar R.T., Zimanyi G.T. Quantum Critical Phenomena in One-Dimensional Bose Systems // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 65. P. 1765; Localization in Interacting, Disordered, Bose Systems // Phys. Rev. Lett. 1991. V. 66. P. 3144; Batrouni G.G., Scalettar R.T. World-Line Monte-Carlo algorithm for a one-dimensional Bose model // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. P. 9051.
97. Hirsch J.E., Scalapino D.J., Sugar R.L., and Blankenbecler R. Efficient Monte-Carlo Procedure for Systems with Fermions // Phys. Rev. Lett. 1981. V. 47. P. 1628.
98. Hirsch J.E., Sugar R.L., Scalapino D.J., and Blankenbecler R. Monte-Carlo simulations of one-dimensional fermion systems // Phys. Rev. B. 1982. V. 26. P. 5033.
99. Hirsch J.E., Scalapino D.J. 2pF and 4pF instabilities in one-quarter-filled-band Hubbard model // Phys. Rev. B. 1983. V. 27. P. 7169.
100. Barnes T. The 2D Heisenberg antiferromagnetic in high-T<sub>c</sub> superconductivity // Int. J. of Modern Physics C. 1991. V. 2. P. 659.

---

*Список литературы*

---

101. *Batrouni G. G., Larson B., Scalettar R. T. et.al.* Universal conductivity in the two-dimensional boson Hubbard model // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. P. 9628.
102. *Ceperley D. M. and Pollock E. L.* Path-Integral Computation of the Low-Temperature Properties of Liquid 4He // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 351.
103. *Pollock E. L. and Ceperley D. M.* Path-integral computation of superfluid densities // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. P. 8343.
104. *Ceperley D. M., Pollock E. L.* Path-integral simulation of the superfluid transition in two-dimensional 4He // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. P. 2084.
105. *Kawashima N. and Gubernatis J. E.* Loop Algorithms for Monte-Carlo Simulations of Quantum Spin Systems // Phys. Rev. Lett. 1994. V. 73. P. 1295.
106. *Kawashima N. and Gubernatis J. E.* Loop algorithms for quantum simulations of fermion models on lattices // Phys. Rev. B. 1994. V. 50. P. 136.
107. *Prokof'ev N. V., Svistunov B. V., Tupitsyn I. S.* // cond-mat/9703200; *Прокофьев Н. В., Свистунов Б. В., Тупицын И. С.* // Письма в ЖЭТФ. 1996. Т. 64. С. 853.
108. *Прокофьев Н. В., Свистунов Б. В., Тупицын И. С.* // ЖЭТФ. 1998. Т. 87. С. 310; *Prokof'ev N. V., Svistunov B. V., Tupitsyn I. S.* // Phys. Lett. A. 1998. V. 238. P. 253.
109. *Syljuasen O. F. and Sandvik A. W.* Quantum Monte-Carlo with directed loops // Phys. Rev. E. 2002. V. 66. 046701.
110. *Henelius P., Frobrich P., Kuntz P. J., Timm C., and Jensen P. J.* Quantum Monte-Carlo simulation of thin magnetic films // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. 094407.
111. *Zyubin M. V. and Kashurnikov V. A.* Universal stochastic series expansion algorithm for Heisenberg model and Bose-Hubbard model with interaction // Phys. Rev. E. 2004. V. 69. 036701.
112. *Sandvik A. W., Singh R. R. P., and Campbell D. K.* Quantum Monte-Carlo in the interaction representation: Application to a spin-Peierls model // Phys. Rev. B. 1997. V. 56. P. 14510.
113. *Sandvik A. W.* Stochastic series expansion method with operator-loop update // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. R14157.
114. *Молотков С. Н., Рыжкин И. А., Татарский В. В.* Исследование одномерной модели Хаббарда с сильными корреляциями квантовым методом Монте-Карло // ФТП. 1989. Т. 31. С. 47.
115. *Assaad F. F. and Wurtz D.* Charge and spin structures in the one-dimensional t-J-model // Phys. Rev. B. 1991. V. 44. P. 2681.
116. *Blankenbecler R., Scalapino D. J. and Sugar R. L.* Monte-Carlo calculations of coupled boson-fermion systems I. // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. P. 2278.
117. *Кашурников В. А.* К вопросу о парных корреляциях в больших двумерных кластерах Си-О: новый нелокальный траекторный алгоритм Монте-Карло // ЖЭТФ. 1995. Т. 108. С. 1796.
118. *Furukawa N., Imada M.* Minus Sign Problem in the Monte-Carlo Simulation of Lattice Fermion Systems // J. Phys. Soc. Jap. 1991. V. 60. P. 810.
119. *Munehisa T. and Munehisa Y.* Improvement in the negative-sign problem in numerical calculations of a quantum spin system // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. N 5, pp.3347-3351.
120. *Prokof'ev N. V. and Svistunov B. V.* Two definitions of superfluid density // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 11282.
121. *Deisz J.* Spin and dimer correlations for S=1 bilinear-biquadratic antiferromagnetic Heisenberg chains // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. P. 2885.
122. *Изюмов Ю. А., Плакидо Н. М., Скрябин Ю. Н.* Магнетизм в высокотемпературных сверхпроводящих соединениях // УФН. 1989. Т. 159. С. 621.
123. *Гинзбург В. Л.* Высокотемпературная сверхпроводимость // УФН. 1991. Т. 161. С. 1.
124. *Локтев В. М.* Механизм высокотемпературной сверхпроводимости медных оксидов // ФНТ. 1996. Т. 22. С. 3.
125. *Lin H. Q., Hirsh J. E., Scalapino D. J.* Pairing in the two-dimensional Hubbard model: an exact diagonalization study // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. P. 7359.
126. *Scalettar R. T., Scalapino D. J., Sugar R. L., White S. R.* Antiferromagnetic, charge-transfer, and pairing correlations in the three-band Hubbard model // Phys. Rev. B. 1991. V. 44. P. 770.

127. *Tauber U.C. and Nelson D.R.* Interactions and pinning energies in the Bose glass phase of vortices in superconductors // *Phys. Rev. B.* 1995. V. 52. P. 16106.
128. *Singh K.G. and Rokhsor D.S.* Disordered bosons: Condensate and excitations // *Phys. Rev. B.* 1994. V. 49. P. 9013.
129. *Chakraverty S., Sudbo A., Anderson P.W., Strong S.* Interlayer tunneling and gap anisotropy in high-temperature superconductors // *Science.* 1993. V. 261. P. 337; *Tajima S., Uchida S., Ishibashi S. et.al.* Optical phonons in cooper oxides with a single CuO<sub>2</sub> plane // *Physica C.* 1990. V. 168. P. 117.
130. *Emery V.J.* High-temperature superconductors. The search for symmetry // *Nature.* 1994. V. 370. P. 598; *Kirtley J.R., Tsuei C.C., Sun J.Z. et.al.* Symmetry of the order parameter in the high-T<sub>c</sub> superconductor YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-d</sub> // *Nature.* 1995. V. 373. P. 225.
131. *Schrieffer J.R., Wen X.-G., and Zhang S.C.* Dynamic spin fluctuations and the bag mechanism of high-T<sub>c</sub> superconductivity // *Phys. Rev. B.* 1989. V. 39. P. 11663.
132. *Millis A.J., Monien H., Pines D.* Phenomenological model of nuclear relaxation in the normal state of YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 42. P. 167.
133. *Bickers N.E., Scalapino D.J., White S.R.* Conserving approximation for strongly correlated electron systems: Bethe-Salpeter equation and dynamics for the two-dimensional Hubbard model // *Phys. Rev. Lett.* 1989. V. 62. P. 961.
134. *Monthoux P., Pines D.* YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub>: A nearly antiferromagnetic Fermi liquid // *Phys. Rev. B.* 1993. V. 47. P. 6069.
135. *Pattnaik P.C., Kane C.L. Newns D.M., and Tsuei C.C.* Evidence for the van Hove scenario in high-temperature superconductivity from quasiparticle-lifetime broadening // *Phys Rev. B.* 1992. V. 45. P. 5714.
136. *Hirsch J.E. and Marsiglio F.* Superconducting state in an oxygen hole metal // *Phys. Rev. B.* 1989. V. 39. P. 11515.
137. *Anderson P.W.* Two crucial experimental tests of the resonating valence bond: Luttinger liquid interlayer tunneling theory of high-T<sub>c</sub> superconductivity // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 42. P. 2624.
138. *Laughlin R.B.* Superconducting ground state of noninteracting particles obeying fractional statistics // *Phys. Rev. Lett.* 1988. V. 60. P. 2677.
139. *Beille J., Dupendant H., Laborde O. et.al.* Pressure effects, anisotropic transport properties and upper critical fields of BiSrCaCuO single crystals: characterization of needle-like Bi-Sr-Ca-Cu-O crystals // *Physica C.* 1988. V. 156. P. 448.
140. *Azuma M., Hiroi Z., Takano M., Bando Y., Takeda Y.* Super-conductivity at 110 K in the infinite-layer compound (Sr<sub>1-x</sub>Ca<sub>x</sub>)<sub>1-y</sub>CuO<sub>2</sub> // *Nature.* 1992. V. 356. P. 775; *Tanaka S., Ueda E., Sato M., Tamasaku K., and Uchida S.* On the Anisotropy of the Superconducting Order Parameter of Cu Oxides Observed by STM/STS // *J. of Phys. Soc. Japan.* 1995. V. 64. P. 1476.
141. *Emery V.J.* Theory of high-T<sub>c</sub> superconductivity in oxides // *Phys. Rev. Lett.* 1987. V. 58. P. 2794.
142. *Fujimori A., Takayama-Muromachi E., Uchido Y.* Electronic structure of superconducting Cu oxides // *Solid State Commun.* 1987. V. 63. P. 857; *Bianconi A., Castellano A.C., de Santis M., Rudolf P., Lagarde P., Flank A.M., Marcelli A.* L2,3 XANES of the high-T<sub>c</sub> superconductor YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> with variable oxygen content // *Solid State Commun.* 1987. V. 63. P. 1009.
143. *Nucker N., Fink J., Fuggle J.C., Durham P.J., Temmerman W.M.* Evidence for holes on oxygen sites in the high-T<sub>c</sub> superconductors La<sub>2-x</sub>Sr<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub> and YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-y</sub> // *Phys. Rev. B.* 1988. V. 37. P. 5158.
144. *Tronquada J.M., Heald S.M., Moodenbaugh A.R., Liang G., Grost M.* Nature of the charge carriers in electron-doped cooper oxide superconductors // *Nature.* 1989. V. 337. P. 720.
145. *Elesin V.F., Krasheninnikov A.V., Openov L.A.* Is the gap anisotropy in high-T<sub>c</sub> superconductors really so high as it is commonly believed? // *Physica C.* 1996. V. 257. P. 53.
146. *Кашурников В.А., Холмовский Е.Г.* Куперовское спаривание и сверхтекучесть в модели Эмери // Письма в ЖЭТФ. 1996. Т. 63. С. 78.

147. Кашурников В.А., Холмовский Е.Г. Проблема куперовского спаривания в модели Эмери // ЖЭТФ. 1996. Т. 110. С. 1883.
148. Еремин М.В., Соловьеванов С.Г., Варламов С.В., Бринкман Д. и др. О спектре элементарных возбуждений в межплоскостном туннелировании в слоистых купратах // Письма в ЖЭТФ. 1994. Т. 60. С. 118.
149. Kaga H., Saikawa T., Ferraz A., and Brito P. Metal-insulator transition and dilute electron and hole doping in the extended Hubbard (d-p) model // Phys. Rev. B. 1994. V. 50. P. 13942.
150. Kotekar N., Quader K.F., and Allender D. W. Charge instabilities and phase separation in three-band extended Hubbard models: Effect of O-O hopping // Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 5899.
151. McMahan A.K., Annett J.F., Martin R.M. Cuprate parameters from numerical Wannier functions // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 6268.
152. Hotta T. Origin of Superconductivity in Cuprate Oxide: Quantum Analysis on the Basis of p-d Model // J. Phys. Soc. Japan. 1993. V. 62. P. 4414; Transition Temperatures in Cuprate Superconductors on the Basis of d-p model // J. Phys. Soc. Japan. 1994. V. 63. P. 4126.
153. Smith M. G., Manthiram A., Zhou J., Goodenough J. B., Markert J. T. Electron-doped superconductivity at 40 K in the infinite-layer compound  $\text{Sr}_{1-x}\text{Nd}_x\text{CuO}_4$  // Nature. 1991. V. 351. P. 549.
154. Er G., Miyamoto Y., Kanamaru F., Kikkawa S. Superconductivity in the infinite-layer compound  $\text{Sr}_x\text{La}_{1-x}\text{CuO}_4$  prepared under high pressure // Physica C. 1991. V. 181. P. 206.
155. Zlatic V., Schotte K.D. and Schliecker G. Spectral properties of the two-dimensional Hubbard model // Phys. Rev. B. 1995. V. 52. P. 3639.
156. Belinicher V.I. and Chernyshev A.L. Hole-hole superconducting pairing in the t-J-model induced by spin-wave exchange // Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 6076.
157. Dagotto E., Nazarenko A., and Boninsegni M. Flat quasiparticle dispersion in the 2D t-J model // Phys. Rev. Lett. 1994. V. 73. P. 728.
158. Chen L. and Benard P. Effect of Fermi-surface topology on the electronic properties of the two-dimensional t-t'-model // Phys. Rev. B. 1995. V. 52. P. 1152.
159. Nazarenko A., Vos K.J.E., Haas S. et.al. Photoemission spectra of  $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ : A theoretical analysis // Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 8676; Belinicher V.I. and Chernyshev A.L. Consistent low-energy reduction of the three-band model for cooper oxides with O-O hopping to the effective t-J model // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. P. 9746.
160. Елесин В.Ф., Кашурников В.А. Зависимость электронных характеристик двумерных кластеров Cu-O от их размеров: новый траекторный алгоритм Монте-Карло // ЖЭТФ. 1994. Т. 106. С. 1773.
161. Bhattacharya A., Wang C. S. Spin and charge fluctuation in an extended Hubbard model of oxide superconductors // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. P. 13949.
162. Dagotto E., Riera J. Superconductivity in the two-dimensional t-J-model // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. P. 12084; Poilblanc D. Binding of holes and the pair spectral function in the t-J-model // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. P. 3368.
163. Wittmann T., Stolze J. Bounds for the ground-state energy in the Emery model determined by cluster calculations // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. P. 3479.
164. Dopf G., Muramatsu A., and Hanke W. Three-band Hubbard model: A Monte-Carlo study // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 9264.
165. Kashurnikov V.A. Pairing correlations in two-dimensional large-size Cu-O clusters: Nonlocal world-line Monte-Carlo algorithm // Phys. Rev. B. 1996. V. 53. P. 5932.
166. Кашурников В.А. Парные корреляции в плоскости CuO: новый нелокальный траекторный алгоритм Монте-Карло // ФНТ. 1996. Т. 22. С. 520.
167. Buendia G.M. Comparative study of numerical techniques for the simulations of a one-dimensional spinless fermion system // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 8163.
168. Moreo A., Scalapino D., Dagotto E. Phase separation in the Hubbard model // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 11442.
169. Sorella S., Baroni S., Car R. and Parrinello M. A Novel Technique for the Simulation of Interacting Fermion Systems // Europhys. Lett. 1989. V. 8. P. 663.

170. *Hirsch J. E.* Simulations of the three-dimensional Hubbard model: Half-filled band sector // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. P. 1851.
171. *Fye R. M. and Hirsch J. E.* Monte-Carlo study of the symmetric Anderson-impurity model // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. P. 433.
172. *Hirsch J. E.* Stable monte carlo algorithm for fermion lattice systems at low temperatures // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. P. 12023.
173. *Hirsch J. E. and Fye R. M.* Monte-Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 2521.
174. *Hirsch J. E.* Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. P. 4403.
175. *Bult N., Scalapino D.J., and White S.R.* Quasiparticle dispersion in the cuprate superconductors and the two-dimensional Hubbard model // Phys. Rev. B. 1994. V. 50. P. 7215.
176. *Preuss R., Hanke W., and von der Linden W.* Quasiparticle Dispersion of 2D Hubbard Model: From an Insulator to a Metal // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 75. P. 1344.
177. *Hubbard J.* Calculation of Partition Functions // Phys. Rev. Lett. 1959. V. 3. P. 77.
178. *Evertz H. G., Lana G., and Marcu M.* Cluster algorithm for vertex models // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70. P. 875.
179. *Pollock E. L. and Ceperley D. M.* Simulation of quantum many-body systems by path-integral methods // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. P. 2555.
180. *Ceperley D. M.* Path integrals in the theory of condensed helium // Rev. Mod. Phys. 1995. V. 67. P. 279.
181. *Boninsegni M., Cole M. W., and Toigo F.* Helium Adsorption on a Lithium Substrate // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 83. P. 2002.
182. *Draeger E. W. and Ceperley D. M.* Bose-Einstein Condensation at a Helium Surface // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 89. 015301.
183. Фейнман Р., Хибbs А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. — М.: Мир, 1968. — 380 с.
184. Фейнман Р. Статистическая механика. — М.: Мир, 1975. — 402 с.
185. *Beard B. B. and Wiese U. J.* Simulations of Discrete Quantum Systems in Continuous Euclidean Time // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. P. 5130.
186. *Handscomb D. C.* // Proc. placeCityCambridge Philos. Soc. 1962. V. 58. P. 594; Proc. Cambridge Philos. Soc. 1964. V. 60. P. 115.
187. *Sandvik A. W., Kurkijärvi J.* Quantum Monte-Carlo simulation method for spin systems // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 5950.
188. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. — М.: Физматгиз, 1962. — 444 с.
189. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. — М.: Добросвет, 1998. — 514 с.
190. Каширников В. А., Красавин А. В. Эффективный квантовый алгоритм Монте-Карло для моделирования сильнокоррелированных систем // ЖЭТФ. 2007. Т. 132. С. 81.
191. *Prokof'ev N. V., Svistunov B. V.* Polaron Problem by Diagrammatic Quantum Monte-Carlo // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81. P. 2514.
192. Мищенко А. С. // УФН. 2005. Т. 175. С. 925.
193. *Kartsev P. F.* Diagrammatic Quantum Monte-Carlo Algorithm in Momentum Representation: Hess-Fairbank Effect and Mesoscopics in 1D BEC with Attractive Interaction // cond-mat/0211356.
194. *Ho T.-L.* Spinor Bose Condensates in Optical Traps // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81. P. 742; *Stamper-Kurn D. M., Andrews M. R., Chikkatur A. P., Inouye S., Miesner H.-J., Stenger J., and Ketterle W.* Optical Confinement of a Bose-Einstein Condensate // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 2027.
195. *Kimura T.* Possibility of a First-Order Superfluid-Mott-Insulator Transition of Spinor Bosons in an Optical Lattice // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94. 110403.
196. *Krutitsky K. W., Timmer M., and Graham R.* First- and second-order superfluid-Mott-insulator phase transitions of spin-1 bosons with coupled ground states in optical lattices // Phys. Rev. A. 2005. V. 71. 033623.

197. Mishchenko S. and Nagaosa N. Electron-Phonon Coupling and a Polaron in the  $t$ - $J$ -model: From the Weak to the Strong Coupling Regime // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 93. 036402.
198. Huang Z.B., Hanke W., and Arrigoni E. Electron-phonon vertex in the two-dimensional one-band Hubbard model // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. 220507.
199. Alexandrov A. S. Polaron dynamics and bipolaron condensation in cuprates // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 12315.
200. Ferrenberg A.N., and Swendsen R.H. Optimized Monte-Carlo data analysis // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 63. P. 1195.
201. Rubtsov A.N. Quantum Monte-Carlo determinantal algorithm without Hubbard-Stratonovich transformation: a general consideration // cond-mat/0302228v1.
202. Rubtsov A.N., Lichtenstein A.I. Continuous Time Quantum Monte-Carlo Method for Fermions: Beyond Auxiliary Field Framework // Письма в ЖЭТФ. 2004. V. 80. P. 67.
203. Burovski E., Prokof'ev N., Svistunov B., and Troyer M. Critical Temperature and Thermodynamics of Attractive Fermions at Unitarity // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 96. 160402.
204. Loh E. Y. and Gubernatis J. E. // Electronic Phase transitions. Elsevier Science Publishers, New York, 1992.
205. Loh E. Y. and Gubernatis J. E. Stable Numerical Simulations of Models of Interacting Electrons in Condensed-Matter Physics // Modern Problems of Condensed Matter Physics. 1992. V. 32. P. 177.
206. Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flann B.P. Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing. Third Edition. Cambridge University Press, 2007. Online: <http://www.nr.com/>
207. Rombouts S.M.A., Heyde K. and Jachowicz N. A quantum Monte-Carlo method for fermions, free of discretization errors // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 82. P. 4155.
208. Krivenko I.S. and Rubtsov A.N. Analytic Continuation of Quantum Monte-Carlo Data: Optimal Stochastic Regularization Approach // cond-mat/0612233v2.
209. Henelius P., Sandvik A.W., Timm C., Girvin S.M. Monte-Carlo study of a two-dimensional quantum ferromagnet // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 364.
210. Sandvik A.W. Finite-size scaling of the ground-state parameters of the two-dimensional Heisenberg model // Phys. Rev. B. 1997. V. 56. P. 11678.
211. Ferrenberg A.N., and Swendsen R.H. New Monte-Carlo technique for studying phase transitions // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. P. 2635.
212. Замалин В. М., Норман Г. Э., Филинов В. С. Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. М.: Наука, 1977. 228 с.
213. Ferdinand A.E. and Fischer M.E. Bounded and Inhomogeneous Ising Models. I. Specific-Heat Anomaly of a Finite Lattice // Phys. Rev. 1969. V. 185. P. 832.
214. Y. Deng, T.M. Garoni, and A.D. Sokal. Dynamic Critical Behavior of the Worm Algorithm for the Ising Model // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 99. 110601.
215. Квантовый эффект Холла // Сб. статей. Пер. с англ., под ред. Ю.В. Шмарцева. М., 1986.
216. Klitzing K.V., Dorda G., and Pepper M. New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance // Phys. Rev. Lett. 1980. V. 45. P. 494.
217. Laughlin R.B. Quantized Hall conductivity in two dimensions // Phys. Rev. B. 1981. V. 23. P. 5632.
218. Tsui D.C., Stormer D.C., and Gossard A.C. Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit // Phys. Rev. Lett. 1982. V. 48. P. 1559.
219. Laughlin R.B. Anomalous Quantum Hall Effect: An Incompressible Quantum Fluid with Fractionally Charged Excitations // Phys. Rev. Lett. 1983. V. 50. P. 1395.
220. Каширников В.А., Маймистов А.И. Целый и дробный квантовые эффекты Холла. М., МИФИ, 2001. 67 с.
221. Лозовик Ю.Е., Юдсон В.И. // Письма в ЖЭТФ. 1975. Т. 22. С. 26.
222. Jiang H.V., Willett R.L., Stormer H.L., Tsui D.C. Quantum liquid versus electron solid around  $\nu=1/5$  Landau-level filling // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 65. P. 633.

223. Goldman V.J., Wang J.K., Su Bo, Hajegai M. Universality of the Hall effect in a magnetic-field-localized two-dimensional electron system // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70. P. 647.
224. Дорожкин С.И., Шашкин А.А., Краивченко Г.В. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1992. Т. 57. С. 55.
225. Sajoto T., Li Y.P., Endel L.W., Tsui D.C., Chauigau M. Hall resistance of the reentrant insulating phase around the 1/5 fractional quantum Hall liquid // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70. P. 2321.
226. Lam K., Girvin S.M. Liquid-solid transition and the fractional quantum-Hall effect // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. P. 473.
227. Price R., Platzman P.M. and He S. Fractional quantum Hall liquid, Wigner solid phase boundary at finite density and magnetic field // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70. P. 339.
228. Platzman P.M., Price R. Quantum freezing of the fractional quantum Hall liquid // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70. P. 3487.
229. Gros G. and MacDonald A.H. Conjecture concerning the fractional Hall hierarchy // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 9514.
230. Kashurnikov V.A., Prokof'ev N.V., Svistunov B.V., and Tupitsyn I.S. Wigner crystal states in the lowest Landau level for  $\mu \geq 1/5$  // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 8644.
231. Matsubara T. // Prog. Theor. Phys. 1955. V. 14. P. 351.
232. Зубарев Д.Н. Двухвременные функции Грина в статистической физике. // УФН. 1960. Т. 71. С. 71.
233. Lehmann H. // Nuovo Cimento. 1954. V. 11. P. 342.
234. Mishchenko A.S., Prokof'ev N.V., Sakamoto A., Svistunov B.V. Comprehensive Study of Fröhlich Polaron // in «Excitonic Processes in Condensed Matter». Singapore. World Scientific. 2001. P. 372.
235. Mishchenko A.S., Nagaosa N., Prokof'ev N.V., Sakamoto A., Svistunov B.V. Optical Conductivity of the Fröhlich Polaron. // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91. 236401.
236. Мищенко А.С. Диаграммный метод Монте-Карло в применении к проблемам поляронов // УФН. 2005. Т. 175. С. 925.
237. Pollet L., Boninsegni M., Kuklov A.B., Prokof'ev N.V., Svistunov B.V., and Troyer M. Superfluidity of Grain Boundaries in Solid  $^4\text{He}$ . // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 98. 135301.
238. Pollet L., Boninsegni M., Kuklov A.B., Prokof'ev N.V., Svistunov B.V., and Troyer M. Local Stress and Superfluid Properties of Solid  $^4\text{He}$  // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101. 097202.
239. Clark A.C., Lin X., and Chan M.H.W. Search for Superfluidity in Solid Hydrogen // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97. 245301.
240. Sasaki S., Ishiguro R., Caupin F., Maris H.J., and Balibar S. // Science. 2006. V. 313. P. 1098.
241. Andreev A.F. and Lifshitz I.M. // Sov. Phys. JETP. 1969. V. 29. P. 1107.
242. Chester G. V. // Phys. Rev. A. 1970. V. 2. P. 256.
243. Meisel M. W. // Physica (Amsterdam). 1992. V. 178B. P. 121.
244. Boninsegni M., Kuklov A.B., Pollet L., Prokof'ev N.V., Svistunov B.V., and Troyer M. Fate of Vacancy-Induced Supersolidity in  $^4\text{He}$  // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97. 080401.
245. Jarvis J.F., Ramm D., and Meyer H. // Phys. Rev. 1968. V. 170. P. 320.
246. Rubtsov A.N. // cond-mat/0302228.
247. Scalapino D.J. and Sugar R.L. Method for Performing Monte-Carlo Calculations for Systems with Fermions // Phys. Rev. Lett. 1981. V. 46. P. 519.
248. Husslein T., Fettes W., and Morgenstern I. // Int. J. Mod. Phys. C. 1997. V. 8. P. 397.
249. Burovskii E., Prokof'ev E., Svistunov B., and Troyer M. // J. Phys. 2006. V. 8. P. 153.
250. Burovskii E., Kozik E., Prokof'ev N., Svistunov B., and Troyer M. Critical Temperature curve in BEC-BCS Crossover // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101. 090402.
251. Mishchenko A.S., Nagaosa N. Quasidegenerate Self-Trapping in One-Dimensional Charge Transfer Exciton // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86. P. 4624.
252. Prokof'ev N.V. and Svistunov B.V. Fermi-polaron problem: Diagrammatic Monte-Carlo method for divergent sign-alternating series // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. 020408 (R).

253. Prokof'ev N. V. and Svistunov B. V. Bold diagrammatic Monte-Carlo: A generic sign-problem tolerant technique for polaron models and possibly interacting many-body problems // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. 125101.
254. Burovski E., Feshke H., and Mishchenko A. S. Exact Treatment of Exciton-Polaron Formation by Diagrammatic Monte-Carlo Simulations // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101. 116403.
255. Поляроны // Под ред. Ю. А. Фирсова. — М.: Наука. 1975. — 424 с.
256. Devreese J. T. Polarons // Encyclopedia of Applied Physics. VCH Publishers, 1996. V. 14. P. 383.
257. Danmascelli A., Shen Z.-X., Hussain Z. Angle-Resolved Photoemission Studies of the Cuprate Superconductors // Rev. Mod. Phys. 2003. V. 75. P. 473.
258. Imada M., Fujimori A., Tokura A. Metal-Insulator Transitions // Rev. Mod. Phys. 1998. V. 70. P. 1039.
259. Хомский Д. И. Проблема промежуточной валентности // УФН. 1979. Т. 129. С. 443.
260. Perfetti L., Berger H., Reginelli A., Degiorgi L., Hochst H., Voit J., Margaritondo G., Grioni M. Spectroscopic Indications of Polaronic Carriers in the Quasi-One-Dimensional Conductor (TaSe<sub>4</sub>)<sub>21</sub> // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87. P. 216404.
261. Плакида Н. М. Высокотемпературные сверхпроводники // М.: Международная программа образования. 1996. 286 с.
262. Алексеев А. И. Применение методов квантовой теории поля в статистической физике // УФН. 1961. Т. 73. С. 41.
263. Прокофьев Н. В., Свистунов Б. В., Тупицын И. С. Точный, полный и универсальный подход Монте-Карло мировых линий в непрерывном времени к статистике дискретных квантовых систем // ЖЭТФ. 1998. Т. 114. С. 570.
264. Ferrenberg I. C., Swendsen R. H. New Monte-Carlo technique for studying phase transitions // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. P. 2635.
265. Grabert H. Charge fluctuations in the single-electron box: Perturbation expansion in the tunneling conductance // Phys. Rev. B. 1994. V. 50. P. 17364.
266. Bonča J., Trugman S. A., Batistic I. Holstein polaron // Phys. Rev. B. 1999. V. 60. P. 1633.
267. Kornilovitch P. E. Continuous-Time Quantum Monte-Carlo Algorithm for the Lattice Polaron // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81. P. 5382.
268. Kornilovitch P. E. Ground-state dispersion and density of states from path-integral Monte-Carlo: Application to the lattice polaron // Phys. Rev. B. 1999. V. 60. P. 3237.
269. Feynman R. P. Statistical Mechanics. Reading. Benjamin. 1972. 354 p.
270. Lee T. D., Low F. E., Pines D. The Motion of Slow Electrons in a Polar Crystal // Phys. Rev. 1953. V. 90. P. 297.
271. Feynman R. P. Slow Electrons in a Polar Crystal // Phys. Rev. 1955. V. 97. P. 660.
272. Дафыдов А. С. Теория твердого тела. — М.: Наука, 1976. 639 с.
273. Ciuchi S., de Pasquale F., Feinberg D. Exact Solution of the Small-Polaron Problem in Infinite Dimensions // Europhys. Lett. 1995. V. 30. P. 151.
274. Fehske H., Loos J., Wellein G. Lattice polaron formation: Effects of nonscreened electron-phonon interaction // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 8016.
275. Bryan R. K. Maximum Entropy Analysis of Oversampled Data Problems // Eur. Biophys. J. 1990. V. 18. P. 165.
276. Jarrell M., Gubernatis J. E. Bayesian Inference and the Analytic Continuation of the Imaginary-Time Quantum Monte-Carlo Data // Phys. Rep. 1996. V. 269. P. 133.
277. Devreese J., Evrard R. On the excited states of a symmetrical polaron model // Phys. Letters. 1966. V. 11. P. 278.
278. Evrard R. On the excited states of the polaron // Phys. Lett. 1965. V. 14. P. 295.
279. Kartheuser E., Evrard E., Devreese J. Mechanism of Absorption of Light by Free Continuum Polarons // Phys. Rev. Lett. 1969. V. 22. P. 94.
280. Devreese J., De Sitter J., Goovaerts M. Optical Absorption of Polarons in the Feynman-Hellwarth-Iddings-Platzman Approximation // Phys. Rev. B. 1972. V. 5. P. 2367.
281. Feynman R., Hellwarth R., Iddings C., Platzman P. Mobility of Slow Electrons in a Polar Crystal // Phys. Rev. 1962. V. 127. P. 1004.

282. Ueta M., Kanzaki H., Kobayashi K., Toyozawa Y. and Hanamura E. *Exciton Processes in Solids*. // Springer-Verlag. Berlin. 1986. 530 p.
283. Пекар С. И., Рашба Э. И., Щека В. И. Свободный и автолокализованный экситоны Ванье–Мотта в ионных кристаллах и энергия активации их теплового перехода друг в друга // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. С. 251.
284. Дыкман И. М., Пекар С. И. Экситоны в ионных кристаллах // ДАН СССР. 1952. Т. 83. С. 825.
285. Egri I. *Excitons and Plasmons in Metals, Semiconductors and Insulators: A Unified Approach* // Phys. Reports. 1985. V. 119. P. 363.
286. Knox R. *Theory of excitons* // Academic press. New York. 1963. 207 p.
287. Albrecht S., Reining L., Sole R.D., Onida G. Ab Initio Calculation of Excitonic Effects in the Optical Spectra of Semiconductors // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 4510.
288. Benedict L.X., Shirley E.L., Bohn R.B. Optical Absorption of Insulators and the Electron-Hole Interaction: An Ab Initio Calculation // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 4514.
289. Rohlfing M., Louie S. G. Electron-Hole Excitations in Semiconductors and Insulators // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81. P. 2312.
290. Cohen M. H., Keffer F. Dipolar Sums in the Primitive Cubic Lattices // Phys. Rev. 1955. V. 99. P. 1128.
291. Horsch P., Khaliullin G. Density Response of Cuprates and Renormalization of Breathing Phonons // Open Problems in Strongly Correlated Electron Systems. J. Bonca et. al. (eds.). Kluwer-Academic, Boston. 2001. P. 81.
292. Horsch P., Khaliullin G., Oudovenko V. Density Response of the t-J-model and Renormalization of Breathing and Half-Breathing Phonon Modes: A Slave-Fermion Calculation // Physica C. 2000. V. 341. P. 117.
293. Hofer J., Conder K., Sasagawa T., Guo-meng Zhao, Willemijn M., Keller H., Kishio K. Oxygen-Isotope Effect on the In-Plane Penetration Depth in Underdoped  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  Single Crystals // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 84. P 4192.
294. Liu K., Manousakis E. Dynamical Properties of a Hole in a Heisenberg Antiferromagnet // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. P. 2425.
295. Manousakis E. The spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on a Square Lattice and its Application to the Cuprous Oxides // Rev. Mod. Phys. 1991. V. 63. P. 1.
296. Xiang T., Wheatley M. Quasiparticle Energy Dispersion in Doped Two-Dimensional Quantum Antiferromagnets // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. R12653.
297. Shraiman B., Siggia E. Two-Particle Excitations in Antiferromagnetic Insulators // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 60. P. 740.
298. Castella H. and Zotos X. Exact calculation of spectral properties of a particle interacting with a one-dimensional fermionic system // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 16186.
299. Schultz T. D. Slow Electrons in Polar Crystals: Self-Energy, Mass, and Mobility // Phys. Rev. 1959. V. 116. P. 526.
300. Bulgac A. and McNeil Forbes M. Zero-temperature thermodynamics of asymmetric Fermi gases at unitarity // Phys. Rev. A. 2007. V. 75. 031605(R).
301. Lobo C., Recati A., Giorgini S., and Stringari S. Normal State of a Polarized Fermi Gas at Unitarity // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97. 200403.
302. Sachdev S. and Yang K. Fermi surfaces and Luttinger's theorem in paired fermion systems // Phys. Rev. B. 2006. V. 73. 174504.
303. Pilati S., Giorgini S. Phase Separation in a Polarized Fermi Gas at Zero Temperature // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 100. 030401.
304. Sheehy D. E. and Radzhovsky L. BEC-BCS Crossover in «Magnetized» Feshbach-Resonantly Paired Superfluids // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 96. 060401.
305. Pao C.-H., Wu S.-T., and Yip S.-K. Superfluid stability in the BEC-BCS crossover // Phys. Rev. B. 2006. V. 73. 132506.
306. Iskin M. and Sa de Melo C. A. R. Two-Species Fermion Mixtures with Population Imbalance // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97. 100404.
307. Hu H. and Liu X.-J. Mean-field phase diagrams of imbalanced Fermi gases near a Feshbach resonance // Phys. Rev. A. 2006. V. 73. 051603(R).

308. *Shin Y., Zwierlein M. W., Schunck C.H., Schirotzek A., and Ketterle W.* Observation of Phase Separation in a Strongly Interacting Imbalanced Fermi Gas // *Phys. Rev. Lett.* 2006. V. 97. 030401; *Shin Y., Schunck C.H., Schirotzek A., and Ketterle W.* // *Nature (London)*. 2008. V. 451. P. 689.
309. *Partridge G.B., Li W., Kamar R.I., Liao Y.A., and Hulet R.G.* // *Science*. 2006. V. 311. P. 503.
310. *Prokof'ev N. V. and Svistunov B. V.* Bold Diagrammatic Monte Carlo Technique: When the Sign Problem Is Welcome // *Phys. Rev. Lett.* 2007. V. 99. 250201.
311. *Kagan M. Yu., Klaptsov A. V., Brodsky I. V., Combescot R., and Leyronas X.* Composite fermions and bosons in ultracold gases and in high-temperature superconductors // *Phys. Usp.* 2006. V. 49. P. 1079.
312. *Petrov D. S., Salomon C., and Shlyapnikov G. V.* Weakly Bound Dimers of Fermionic Atoms // *Phys. Rev. Lett.* 2004. V. 93. 090404.
313. *Ceperley D. M.* The Simulation of Quantum Systems with Random Walks: A New Algorithm for Charged Systems // *J. Comp. Phys.* 1983. V. 51. P. 404.
314. *Ceperley D. M., Alder B.J.* Quantum Monte-Carlo for Molecules: Green's Function and Nodal Release // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 81. P. 5833.
315. *Prokof'ev N.V., Svistunov N. V., Tupitsyn I. S.* Quantum Monte-Carlo Scheme to Study Coherent Tunneling // *Phys. Rev. Lett.* 1999. V. 82. P. 5092.