МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО С ИНТЕГРАЛАМИ ПО ТРАЕКТОРИЯМ ДЛЯ РАСЧЕТОВ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ ЧАСТИЦ

П. Р. Левашов, В. С. Филинов, А. С. Ларкин, Г. С. Демьянов

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

Интерес к моделированию квантовых систем частиц при конечной температуре ощутимо растет, особенно в последние 10–20 лет. Это связано, в первую очередь, с бурным развитием суперкомпьютерной техники, что позволяет учитывать в моделировании все большее число частиц и для ряда задач достигать термодинамического предела. Большие успехи достигнуты в расчетах с использованием метода функционала плотности (МФП). Однако приближение Кона-Шэма, на котором основаны все существующие реализации МФП, не имеет теоретического обоснования, а в выражения для обменно-корреляционной энергии, зачастую, приходится вводить подгоночные параметры для достижения согласия с экспериментом. На сегодняшний день одним из немногих теоретически обоснованных методов расчета термодинамических свойств квантовых систем частиц при конечной температуре является метод Монте-Карло с интегралами по траекториям (МКИТ). Этот метод основан на фейнмановской формулировке квантовой механики и использует статсумму квантовой системы частиц, выраженную через матрицу плотности.

В докладе будут рассмотрены современные достижения метода МКИТ, в том числе касающиеся «смягчения» так называемой фермионной проблемы знаков. Будет представлено новое выражение для высокотемпературной матрицы плотности с учетом эффектов дальнего действия [1]. Будут обсуждаться различные замены переменных, а также проблемы численной реализации. Будут продемонстрированы результаты расчетов для различных квантовых систем частиц: идеального ферми-газа, однородного электронного газа (модель желе), системы квантовых мягких сфер, He^3 [2]. Будут затронуты вопросы, связанные с расчетами функции распределения по импульсам, плотности состояний и динамического структурного фактора [3]. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 24-19-00746.

Литература

1. **Demyanov, G. S.**, Levashov P. R. // *Comp. Phys. Comm.* – 2024. – Vol. 305. – P. 109326.
 2. **Filinov, V. S.**, Levashov P. R., Larkin A. S. // *Phys. Rev. E.* – 2024. – Vol. 109. – P. 024137.
 3. **Filinov, V. S.**, Syrovatka R. A., Levashov P. R. // *Phys. Rev. E.* – 2023. – Vol. 108. – P. 024136.
-