

Молекулярная динамика идеального ферми-газа для расчета термодинамических свойств

Г. С. Демьянов и П. Р. Левашов

Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., д. 13, стр. 2,
Москва 125412, Россия

E-mail: demyanovgs@jiht.ru

Статья поступила в редакцию 20 ноября 2025 г.

Аннотация. В данной работе рассматривается псевдопотенциальный подход к моделированию идеального неполяризованного ферми-газа методом классической молекулярной динамики. На основе детерминантного представления конфигурационной функции распределения получены выражения для псевдопотенциала, сил и энергии, позволяющие воспроизводить квантостатистическое конфигурационное распределение с помощью решения классических уравнений движения с термостатом Нозе–Гувера. В работе проведено прямое сравнение результатов моделирования с аналитическими решениями для энергии, радиальных функций распределения и статического структурного фактора в широком диапазоне параметра вырождения. Показано, что метод обеспечивает количественно точное воспроизведение всех исследованных статических характеристик идеального ферми-газа и корректно учитывает обменное взаимодействие. Этот метод иллюстрирует, что классическая молекулярная динамика может быть применена для точного расчета статистических свойств невзаимодействующих и, потенциально, взаимодействующих ферми-систем.

1. ВВЕДЕНИЕ

Численное моделирование квантовых многочастичных систем на основе первопринципных методов играет ключевую роль в современной статистической физике, физике плазмы и физике конденсированного состояния [1, 2]. Для описания таких систем необходимо корректно учитывать как межчастичное взаимодействие, так и тождественность частиц, приводящую к ферми- или бозе-статистике [3, 4]. Взаимодействующие вырожденные системы представляют основной интерес для современной физики [5]. При этом идеальный ферми-газ остается фундаментальной модельной системой для верификации методов моделирования взаимодействующих систем вследствие доступности точного решения для ее термодинамических свойств [6, 7].

Стандартным формализмом для описания квантовых ансамблей является оператор плотности и связанные с ним представления статистической суммы в виде интегралов по траекториям [8, 9]. На этом формализме построены методы Монте-Карло с интегралами по траекториям, которые, в принципе, позволяют вычислять термодинамические величины с заданной точностью при произвольном уровне вырождения и неидеальности. Однако в случае фермионов возникает хорошо известная проблема знаков [2, 10], когда весовые коэффициенты различных конфигураций могут быть как положительными, так и отрицательными, что приводит к экспоненциальному росту статистической погрешности с увеличением числа частиц и понижением температуры [11]. На практике это серьезно ограничивает размер систем и область параметров, доступных для прямых расчетов.

Недавно в работе В.С. Филинова и соавторов [12] был предложен подход, основанный на специальных преобразованиях переменных, позволяющий переписать вклад перестановок в статистическую сумму идеального ферми-газа через неотрицательный детерминант и тем самым избежать проблемы знаков без потери точности. Авторами данной работы [13] этот метод был подробно разобран и показана его эффективность как в аналити-

ческих преобразованиях, так и при проведении расчетов Монте-Карло.

Параллельно развиваются методы молекулярной динамики с интегралами по траекториям, в которых квантовые эффекты также учитываются за счет высокотемпературных разбиений [3], когда частицы представляются замкнутыми ломаными. Эти методы изначально были разработаны для различных частиц (большиманонов), но впоследствии были распространены и на бозе- и ферми-статистику. В частности, в работе [14] предложено псевдопотенциальное описание обменных эффектов, позволяющее включить эффект квантовой статистики в эффективный потенциал классической молекулярной динамики. Было показано, что такой подход способен с высокой точностью воспроизводить статические энергии простых модельных систем даже вблизи основного состояния. Однако в работе [14] расчеты проводились для сравнительно небольших систем.

Отдельный интерес представляет более прямое описание квантовых эффектов на языке классической механики [9], в котором многочастичные обменные взаимодействия, возникающие вследствие вырождения, переносятся в эффективный псевдопотенциал, который является функцией N трехмерных координат. В этом случае можно использовать стандартные схемы моделирования молекулярной динамики для построения канонического ансамбля, приближенно соответствующего функции распределения квантовой системы. Такое описание заведомо не воспроизводит истинную квантовую временную эволюцию [15], а значит и динамические корреляции, но может оказаться полезным для расчета термодинамических и статических структурных характеристик, а также учета обменных эффектов для более сложных квазиклассических схем [9, 16, 17].

Настоящая работа посвящена построению и исследованию псевдопотенциального подхода [16, 18] к моделированию трехмерного идеального ферми-газа методом классической молекулярной динамики (МД). Исследуется способность псевдопотенциального

описания и моделирования методом классической молекулярной динамики количественно воспроизводить точные аналитические зависимости для энергии, радиальных корреляционных функций и статического структурного фактора идеального ферми-газа в широком диапазоне параметра вырождения. Дополнительно анализируются ограничения применимости метода и особенности его численной реализации.

2. МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ

Термодинамические характеристики квантовой системы, описываемой гамильтонианом $\hat{H}$ при температуре T , выражаются через оператор плотности

$$\hat{\rho}(\beta) = e^{-\beta\hat{H}}, \quad \beta = (k_B T)^{-1}, \quad (1)$$

и его координатное представление

$$\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \beta) = \langle \mathbf{R} | \hat{\rho}(\beta) | \mathbf{R}' \rangle, \quad (2)$$

где $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ — совокупность координат всех частиц. Оператор $\hat{\rho}(\beta)$ подчиняется дифференциальному уравнению

$$\frac{d\hat{\rho}(\beta)}{d\beta} = -\hat{H} \hat{\rho}(\beta), \quad (3)$$

известному как уравнение Блоха, которое описывает изменение матрицы плотности при изменении обратной температуры β .

Статистическая сумма квантовой системы выражается через след оператора плотности. Для системы из N неразличимых фермионов она принимает вид:

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!} \sum_P (-1)^P \int_{V^N} d\mathbf{R} \rho(\mathbf{R}, \hat{P}\mathbf{R}; \beta), \quad (4)$$

где $\hat{P}$ — оператор перестановки координат частиц с четностью P , а $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ [8]. При малом вырождении (высоких температурах) основной вклад в (4) дает тождественная перестановка; в этом пределе система подчиняется бoльцмановской статистике.

Для невзаимодействующей системы оператор плотности в координатном представлении имеет гауссов вид:

$$\rho_0(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \beta) = \kappa^{3N} \exp \left[-\pi \kappa^2 \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_i)^2 \right], \quad \kappa^2 = \frac{m}{2\pi \hbar^2 \beta}. \quad (5)$$

Это решение непосредственно следует из уравнения Блоха (3) для свободных частиц [8]. Полученная функция ρ_0 служит исходной для вычисления термодинамических свойств как для классического (бoльцмановского), так и для квантового (ферми- или бозе-) невзаимодействующих газов [13]. Так как в данной работе будет рассмотрен только невзаимодействующий ферми-газ, индекс “0” в ρ_0 будет опущен.

Подставляя выражение (5) в формулу (4), получаем интегральное представление статистической суммы:

$$Z(\beta) = \frac{\kappa^{3N}}{N!} \sum_P (-1)^P \int_{V^N} \exp \left[-\pi \kappa^2 \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_i - \hat{P}\mathbf{r}_i)^2 \right] d\mathbf{R}. \quad (6)$$

Суммирование по перестановкам удобно переписать в детерминантной форме:

$$\begin{aligned} \sum_P (-1)^P \exp \left[-\pi \kappa^2 \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_i - \hat{P}\mathbf{r}_i)^2 \right] &= \\ &= \sum_P (-1)^P \prod_{i=1}^N e^{-\pi \kappa^2 (\mathbf{r}_i - \hat{P}\mathbf{r}_i)^2} = \det A(\mathbf{R}, \beta), \end{aligned} \quad (7)$$

где матрица $A(\mathbf{R}, \beta)$ состоит из элементов $A_{ij}(\mathbf{r}_{ij}, \beta)$:

$$A(\mathbf{R}, \beta) = \|A_{ij}(\mathbf{r}_{ij}, \beta)\|, \quad A_{ij}(\mathbf{r}_{ij}, \beta) = e^{-\pi \kappa^2 (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2}. \quad (8)$$

Матрица $A(\mathbf{R}, \beta)$ является положительно определенной [5], и, следовательно, ее детерминант неотрицателен, что играет ключевую роль при дальнейшем построении псевдопотенциального представления ферми-системы. Докажем это следующим образом. Используем интегральное представление гауссовой функции (преобразование Фурье в $\mathbb{R}^3$):

$$e^{-\pi \kappa^2 |\mathbf{x}|^2} = \kappa^{-3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\pi |\boldsymbol{\xi}|^2 / \kappa^2} e^{2\pi i \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}} d\boldsymbol{\xi}. \quad (9)$$

Подставляя $\mathbf{x} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, получаем представление матричного элемента:

$$A_{ij}(\mathbf{r}_{ij}, \beta) = \kappa^{-3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\pi |\boldsymbol{\xi}|^2 / \kappa^2} e^{2\pi i \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{r}_i} e^{-2\pi i \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{r}_j} d\boldsymbol{\xi}. \quad (10)$$

Тогда для любого $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_N) \in \mathbb{C}^N$:

$$\begin{aligned} \mathbf{z}^\dagger A(\mathbf{R}, \beta) \mathbf{z} &= \sum_{i,j} \bar{z}_i z_j A_{ij}(\mathbf{r}_{ij}, \beta) = \\ &= \kappa^{-3} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\pi |\boldsymbol{\xi}|^2 / \kappa^2} \left| \sum_{j=1}^N z_j e^{2\pi i \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{r}_j} \right|^2 d\boldsymbol{\xi} \geq 0, \end{aligned} \quad (11)$$

где под $\mathbf{z}^\dagger$ понимается транспонирование и комплексное сопряжение (эрмитово сопряжение). Таким образом, $\mathbf{z}^\dagger A(\mathbf{R}, \beta) \mathbf{z}$ представляет из себя интеграл от положительной функции. Следовательно, $A(\mathbf{R}, \beta)$ положительно определена, а потому произведение ее собственных значений, то есть детерминант матрицы, неотрицателен.

Итого, статистическая сумма идеального ферми-газа принимает вид:

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!} \kappa^{3N} \int_{V^N} \det \left\| e^{-\pi \kappa^2 (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2} \right\| d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N. \quad (12)$$

При дифференцировании выражения (12) для вычисления энергии возникает производная по температуре от детерминанта, которая выражается через сам детерминант (формула Якоби [19]):

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \det A(\mathbf{R}, \beta) = \det A(\mathbf{R}, \beta) \times \text{tr} \left(A^{-1}(\mathbf{R}, \beta) \frac{\partial A(\mathbf{R}, \beta)}{\partial \beta} \right), \quad (13)$$

где $A^{-1}(\mathbf{R}, \beta)$ — обратная матрица. Таким образом, представляется возможным записать производную по температуре в виде среднего по ансамблю. После дифференцирования (12) получаем:

$$\beta E = -\beta \frac{\partial \ln Z(\beta)}{\partial \beta} = \frac{3N}{2} - \langle \text{tr}(A^{-1}(\mathbf{R}, \beta) \Pi) \rangle, \quad (14)$$

где матрица из производных имеет вид:

$$\Pi_{ij} = \beta \frac{\partial A_{ij}(\mathbf{r}_{ij}, \beta)}{\partial \beta} = \pi \kappa^2 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2 A_{ij}(\mathbf{r}_{ij}, \beta), \quad (15)$$

а под средним в выражении (14) понимается:

$$\langle(\dots)\rangle = \frac{1}{Z(\beta)N!} \kappa^{3N} \int_{V^N} (\dots) \det \|e^{-\pi\kappa^2(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2}\| d\mathbf{R}. \quad (16)$$

Таким образом, полученные формулы могут использоваться при моделировании стандартными методами Монте-Карло [13]. Однако было бы интересно применить метод классической молекулярной динамики для моделирования вырожденного (невзаимодействующего) ферми-газа. Для этого можно воспользоваться псевдопотенциальным подходом.

3. ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛЬНЫЙ ПОДХОД ДЛЯ ИДЕАЛЬНОГО ФЕРМИ-ГАЗА

Основная идея псевдопотенциального подхода состоит в следующем. Пусть статистическая сумма системы из N частиц имеет следующий вид:

$$Z(\beta) \propto \int_{V^N} W(\mathbf{R}, \beta) d\mathbf{R}, \quad (17)$$

где $W(\mathbf{R}, \beta)$ — неотрицательная функция. Введем псевдопотенциал

$$\Phi(\mathbf{R}, \beta) = -\frac{1}{\beta} \ln W(\mathbf{R}, \beta). \quad (18)$$

Тогда $W(\mathbf{R}, \beta) \propto e^{-\beta\Phi(\mathbf{R}, \beta)}$.

Рассмотрим систему со следующим классическим гамильтонианом:

$$H_\beta(\mathbf{R}, \mathbf{P}) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m_i} + \Phi(\mathbf{R}, \beta), \quad (19)$$

где $\mathbf{P} = \{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N\}$ — импульсы частиц. Тогда, решая для этой системы классические уравнения движения:

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{f}_i(\mathbf{R}) = -\nabla_{\mathbf{r}_i} \Phi(\mathbf{R}, \beta) = \frac{1}{\beta} \nabla_{\mathbf{r}_i} \ln W(\mathbf{R}, \beta), \quad (20)$$

с использованием термостата Нозе–Гувера можно получить конфигурации, соответствующие каноническому распределению для изначальной квантовой системы (см. уравнение (17)).

При этом стоит отметить, что при наличии вырождения отдельные координаты $\mathbf{r}_i$ перестают иметь смысл координат частиц, а являются переменными, описывающими фазовое пространство. Тем не менее, в данной работе даже в случае вырожденных систем $\mathbf{r}_i$ будут называться координатами частиц для удобства.

Рассмотрим идеальный ферми-газ. В этом случае $W(\mathbf{R}, \beta) = \det A(\mathbf{R}, \beta)$ и $\beta\Phi(\mathbf{R}, \beta) = -\ln \det A(\mathbf{R}, \beta)$. Выпишем далее выражения для сил:

$$\beta \mathbf{f}_i = -\beta \nabla_i \Phi = \nabla_i \ln \det A = \frac{1}{\det A} \nabla_i \det A. \quad (21)$$

Снова используя формулу дифференцирования детерминанта, можно получить выражение для силы, действующей на i -ю частицу со стороны остальных:

$$\beta \mathbf{f}_i = \text{tr} (A^{-1} \nabla_{\mathbf{r}_i} A) = \sum_{m,n} (A^{-1})_{nm} \nabla_{\mathbf{r}_i} A_{mn}. \quad (22)$$

Градиент матричного элемента имеет вид:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{r}_i} A_{mn} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \exp [-\pi\kappa^2(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n)^2] = \\ &= -2\pi\kappa^2 A_{mn}(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n)(\delta_{mi} - \delta_{ni}). \end{aligned} \quad (23)$$

Подставляя выражение выше в (22), получаем

$$\beta \mathbf{f}_i = -2\pi\kappa^2 \sum_{j=1}^N [(A^{-1})_{ji} A_{ij} + (A^{-1})_{ij} A_{ji}] (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \quad (24)$$

Слагаемое $j = i$ дает нуль, так как $(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_i = \mathbf{0})$. Матрица A симметрична, а значит и A^{-1} симметрична. Тогда формула (24) упрощается:

$$\beta \mathbf{f}_i = -4\pi\kappa^2 \sum_{j \neq i} A_{ij} (A^{-1})_{ij} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j). \quad (25)$$

Полученное выражение (25) будет использовано далее для решения уравнений движения (20) точек $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$. В результате, можно получать корректные статические величины в термодинамическом равновесии (например, корреляционную функцию $g(r)$, статистический структурный фактор $S(q)$, энергию E и т.д.).

Однако временная эволюция, генерируемая классическими уравнениями движения (20) для гамильтониана $H_\beta(\mathbf{R}, \mathbf{P})$, не совпадает с квантовой эволюцией исходной квантовой системы ферми-газа. Это проявляется в динамических корреляциях, например, в динамическом структурном факторе (ДСФ).

ДСФ классической системы определяется следующим образом. Обозначим $\rho_{\mathbf{q}}(\mathbf{R}(t)) = \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j(t)}$. Тогда при эволюции по классическим уравнениям движения получаем ДСФ в виде:

$$S_{\text{cl}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi N} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle \rho_{\mathbf{q}}(\mathbf{R}(t)) \rho_{-\mathbf{q}}(\mathbf{R}(0)) \rangle_{H_\beta}, \quad (26)$$

где усреднение берется с весом $W(\mathbf{R}, \beta)$. Для (26) выполняется классическая симметрия по частоте

$$S_{\text{cl}}(\mathbf{q}, -\omega) = S_{\text{cl}}(\mathbf{q}, \omega). \quad (27)$$

Квантовая ДСФ [20] вводится с использованием оператора унитарной эволюции $\hat{\rho}_{\mathbf{q}}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\rho}_{\mathbf{q}} e^{-i\hat{H}t/\hbar}$, где $\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = e^{-i\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{r}}_j}$:

$$S_{\text{qm}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi N} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \frac{1}{Z} \text{Tr} [e^{-\beta\hat{H}} \hat{\rho}_{\mathbf{q}}(t) \hat{\rho}_{-\mathbf{q}}(0)]. \quad (28)$$

Эта функция обладает следующим свойством [20] (следствие флуктуационно-диссипативной теоремы [21]):

$$S_{\text{qm}}(\mathbf{q}, -\omega) = e^{-\beta\hbar\omega} S_{\text{qm}}(\mathbf{q}, \omega). \quad (29)$$

При высоких температурах $k_B T \gg \hbar\omega$ уравнение (29) переходит в классический предел (27) (см. §124 и формулу (124.19) в [21]), что соответствует переходу ферми-газа в невырожденное состояние. Таким образом, псевдопотенциальный подход не позволит корректно воспроизвести динамические свойства вырожденных квантовых систем.

4. ЧАСТИЧНО ПОЛЯРИЗОВАННЫЙ ИДЕАЛЬНЫЙ ФЕРМИ-ГАЗ: ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛЫ, СИЛЫ И ДЕТАЛИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

4.1. Формулы для частично поляризованного газа

Рассмотрим две подсистемы с проекциями спина $\sigma \in \{u, d\}$ (то есть со значением спина, равным $1/2$) и числами частиц N_σ ($N_u + N_d = N$). Перестановки

в статистической сумме учитываются только внутри каждой подсистемы, и конфигурационный вес факторизуется:

$$W(\mathbf{R}, \beta) = \det A^u(\beta) \det A^d(\beta),$$

$$A_{ij}^\sigma = \exp[-\pi\kappa^2 |\mathbf{r}_i^\sigma - \mathbf{r}_j^\sigma|^2]. \quad (30)$$

Тогда псевдопотенциал есть сумма вкладов от каждого типа частиц:

$$\beta\Phi(\mathbf{R}, \beta) = -\ln \det A^u(\beta) - \ln \det A^d(\beta), \quad (31)$$

и силы действуют только между частицами одной и той же проекции спина:

$$\beta \mathbf{f}_i^\sigma = -4\pi\kappa^2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_\sigma} A_{ij}^\sigma (A^\sigma)_{ij}^{-1} (\mathbf{r}_i^\sigma - \mathbf{r}_j^\sigma). \quad (32)$$

При этом частицы с различными проекциями спина не действуют друг на друга.

Энергия для некоторой конфигурации частиц также состоит из двух вкладов:

$$\beta E = \frac{3N}{2} - \text{tr}[(A^u)^{-1}\Pi^u] - \text{tr}[(A^d)^{-1}\Pi^d], \quad (33)$$

где

$$\Pi_{ij}^\sigma = \pi\kappa^2 |\mathbf{r}_i^\sigma - \mathbf{r}_j^\sigma|^2 A_{ij}^\sigma. \quad (34)$$

В расчетах мы будем рассматривать только неполяризованный идеальный ферми-газ ($N_u = N_d$), чтобы сравнить результаты моделирования с теоретическими значениями [6].

4.2. Детали реализации расчета сил

В расчетах рассматривается система из N частиц в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Поэтому в моделировании расстояния между частицами рассчитываются в соответствии с правилом ближайшего изображения (правило БИ или minimum image convention):

$$\mathbf{r}_{ij}^\sigma = \mathbf{r}_i^\sigma - \mathbf{r}_j^\sigma - L \left\lceil \frac{\mathbf{r}_i^\sigma - \mathbf{r}_j^\sigma}{L} \right\rceil, \quad r_{ij}^\sigma = |\mathbf{r}_{ij}^\sigma|, \quad (35)$$

где L — размер ребра кубической ячейки, а квадратные скобки обозначают покомпонентное округление к ближайшему целому числу.

На каждом шаге молекулярной динамики силы рассчитываются следующим образом. Для каждого типа частиц $\sigma \in \{u, d\}$ выполняются следующие шаги:

1. Строится матрица A^σ с учетом правила БИ. Для численной устойчивости обращения матрицы к ней добавляется небольшая единичная матрица, $A^\sigma \leftarrow A^\sigma + \varepsilon I$, где $\varepsilon = 10^{-12}$.
2. Обратная матрица $(A^\sigma)^{-1}$ вычисляется через разложение Холецкого [22]. Поскольку матрица A^σ симметрична и положительно определена, она представляется в виде:

$$A^\sigma = L^\sigma (L^\sigma)^T,$$

где L^σ — нижнетреугольная матрица. Явное обращение матрицы A^σ не выполняется: вместо этого решаются две последовательные треугольные системы

$$L^\sigma Y = I, \quad (L^\sigma)^T X = Y,$$

что эквивалентно вычислению $X = (A^\sigma)^{-1}$. Такой способ более устойчив с численной точки зрения

в сравнении с обычными методами обращения матриц.

3. Силы вычисляются по формуле (32).

4. Энергия системы βE рассчитывается по формуле (33).

В качестве характеристики вырождения плазмы удобно использовать приведенную температуру θ , равную отношению $k_B T$ к энергии Ферми $E_F = \hbar^2 k_F^2 / (2m_e)$, $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$. При $\theta \gg 1$ вырождение в системе мало и она является классической, тогда как при $\theta \lesssim 1$ система сильно вырождена.

Моделирование проводилось в NVT -ансамбле с использованием термостата Нозе–Гувера с помощью LAMMPS. Интегрирование уравнений движения выполнялось схемой Верле с шагом по времени $\Delta t = 10^{-3}$ фс для $\theta \leq 1$, $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ фс для $\theta = 5$ и $\Delta t = 2 \times 10^{-6}$ фс для $\theta = 10, 100$. Объем системы задавался через безразмерный параметр $r_s = 10$:

$$L^3/N = \frac{4\pi(a_B r_s)^3}{3}, \quad (36)$$

где $a_B = 0.529177 \text{ \AA}$ — боровский радиус. Температура системы определялась через энергию Ферми E_F и задавалась как $T = \theta E_F / k_B$. Для каждого моделирования производилось не менее 10^5 шагов на равновесном участке.

Статический структурный фактор вычислялся напрямую из МД как коррелятор мод плотности. Для системы из двух типов частиц вводим микроскопические плотности в обратном пространстве:

$$\rho_a(\mathbf{q}) = \sum_{i \in a} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \quad (37)$$

и определяем парциальные статические структурные факторы:

$$S_{ab}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \langle \rho_a(\mathbf{q}) \rho_b(-\mathbf{q}) \rangle, \quad (38)$$

где $a, b \in \{u, d\}$. Далее эта функция сферически усредняется по направлениям $\mathbf{q}$ и анализируется как функция $q = |\mathbf{q}|$; при этом минимальное значение волнового вектора есть $q_{\min} = 2\pi/L$. Связь с радиальными функциями распределения (корреляционными функциями $g_{ab}(r)$) при $q > 0$ имеет вид:

$$S_{ab}(\mathbf{q}) = c_a \delta_{ab} + n c_a c_b \int d^3r e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} [g_{ab}(r) - 1], \quad (39)$$

где $n = N/V$, $n_{u,d} = N_{u,d}/V$ и $c_{u,d} = N_{u,d}/N$. В изотропном случае выражение принимает вид:

$$S_{ab}(q) = c_a \delta_{ab} + 4\pi n c_a c_b \int_0^\infty r^2 [g_{ab}(r) - 1] \frac{\sin(qr)}{qr} dr. \quad (40)$$

Для идеального неполяризованного ферми-газа выполняется $g_{ud}(r) = 1$, откуда следует $S_{ud}(q) = 0$ при $q > 0$, а $S_{aa}(q)$ на больших волновых векторах стремятся к долям компонентов, $S_{aa}(q \rightarrow \infty) \rightarrow c_a$.

4.3. Аналитические формулы для свойств идеального ферми-газа

Рассмотрим однородный идеальный ферми-газ со спиновым вырождением $g = 2$ (неполяризованный

случай). Введем обозначение

$$z = e^{\beta\mu}. \quad (41)$$

Стандартные интегралы Ферми–Дирака зададим следующим образом:

$$f_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \frac{t^{\nu-1} dt}{z^{-1}e^t + 1}. \quad (42)$$

Отметим, что иногда в качестве определения интегралов Ферми–Дирака используются следующие функции $I_\mu(\eta)$ [6]:

$$f_\nu(z) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} I_{\nu-1}(\eta), \quad z = e^\eta. \quad (43)$$

Из [21, §56] следует, что число частиц и термодинамический потенциал выражаются через интегралы по распределению Ферми; в параметрической форме (по μ) это дает уравнение состояния и связь $N(T, V, \mu)$ [21]. Перейдя к безразмерной записи (42), получаем компактные формулы для числа частиц [23]:

$$N = Vg\kappa^3 f_{3/2}(z), \quad (44)$$

и энергии:

$$\beta E/N = \frac{3f_{5/2}(z)}{2f_{3/2}(z)}. \quad (45)$$

Из условия нормировки числа частиц (44) следует, что при фиксированной плотности n химический потенциал μ (а значит и $z = e^{\beta\mu}$) определяется только комбинацией $n/\kappa^3 \propto \theta^{-3/2}$, что задает $z = z(\theta)$ как функцию только θ . Следовательно, все термодинамические величины в безразмерной форме зависят исключительно от приведенной температуры θ .

Для идеального неполяризованного ферми-газа радиальные функции распределения двух типов частиц имеют вид [7, 21]

$$g_{ud}(r) = 1, \quad g_{uu}(r) = 1 - \left[\frac{K(r)}{n_u} \right]^2, \quad (46)$$

где

$$K(r) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{1 + e^{\beta(\epsilon_k - \mu)}}. \quad (47)$$

Далее переходим к безразмерным переменным $x = q/k_F$, $\rho = rk_F$ и $\eta = \mu/T$, а также учтем связь

$$k_F a_B = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{r_s}. \quad (48)$$

Параметр η фиксируется из уравнения для числа частиц (44):

$$f_{3/2}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{t^{1/2} dt}{1 + e^{t-\eta}} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \theta^{-3/2}. \quad (49)$$

Удобно ввести нормированную функцию

$$F(\rho; \theta) = \frac{K(r)}{n_u}, \quad (50)$$

которая после интегрирования по углам имеет вид:

$$F(\rho; \theta) = \frac{3}{\rho} \int_0^\infty y n_F(y; \theta, \eta) \sin(\rho y) dy, \quad (51)$$

причем по определению $F(0; \theta) = 1$. Тогда выражение для $g_{uu}(r)$ компактно записывается как

$$g_{uu}(r) = 1 - |F(\rho; \theta)|^2, \quad \rho = rk_F. \quad (52)$$

Для неполяризованного газа с $c_u = c_d = 1/2$ из (39) при подстановке аналитических $g_{ab}(r)$ получаем для $x > 0$:

$$S_{uu}(x; \theta) = \frac{1}{2} - \frac{1}{3\pi x} \int_0^\infty \rho |F(\rho; \theta)|^2 \sin(x\rho) d\rho, \quad (53)$$

$$S_{ud}(x; \theta) = 0. \quad (54)$$

5. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОБСУЖДЕНИЕ

В данном разделе представлены результаты моделирования идеального неполяризованного ферми-газа методом классической молекулярной динамики с использованием псевдопотенциального представления, описанного выше. Напомним, что термодинамика данной системы зависит только от приведенной температуры θ . Тем не менее, в моделировании параметр Бракнера r_s был фиксирован и равен 10. Результаты приведены для $N = 500$ частиц.

На рисунке 1 показана зависимость безразмерной энергии на одну частицу $\beta E/N$ от приведенной температуры θ , полученная в ходе МД-моделирования. Эти результаты сравниваются с аналитическим результатом, полученным с помощью пакета `ifg` [6].

Во всем диапазоне $0.2 \leq \theta \leq 100$ наблюдается отличное согласие данных моделирования с теорией. Так, отличие МД-данных от теоретических значений меньше, чем их статистическая погрешность. Таким образом, псевдопотенциальный подход воспроизводит значение энергии даже в случае $\theta \ll 1$, когда система является сильно вырожденной. При этом, при больших температурах, $\theta \gg 1$, результат стремится к классическому значению, $\beta E = 3N/2$.

Тем не менее, более чувствительной величиной является корреляционная функция или радиальная функция распределения (РФР) для фермионов с одинаковой проекцией спина. На рисунке 2 представлены РФР $g_{uu}(r)$ для неполяризованного идеального ферми-газа, вычисленные с использованием МД-моделирования с псевдопотенциалом для значений приведенной температуры $\theta \in [0.2, 10]$. Также на графике пунктирными линиями показаны расчеты по формуле (52).

Для всех температур наблюдается характерное поведение, обусловленное обменными эффектами. Так, РФР стремится к нулю при $r \rightarrow 0$, что иллюстрирует выполнение принципа Паули. Глубина этого провала возрастает при уменьшении θ , то есть по мере перехода в более вырожденный режим. Также можно заметить, что при $\theta = 0.2$ в области $rk_F \approx 4$ возникает небольшой максимум РФР, соответствующий структурным корреляциям, возникающим из-за обменных эффектов. На больших расстояниях все функции распределения стремятся к единице.

Полученные кривые при $\theta \leq 5$ находятся в хорошем согласии с аналитическим выражением (52). Тем не менее, при $\theta = 10$ можно видеть небольшие отклонения расчетных данных от теоретических значений на

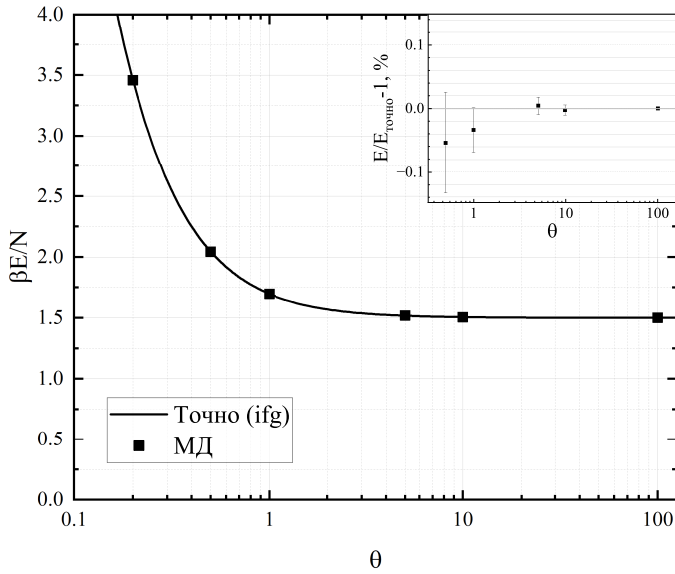


Рисунок 1. Безразмерная энергия $\beta E/N$ идеального неполяризованного ферми-газа в зависимости от приведенной температуры θ и относительное отклонение результатов псевдопотенциальной молекулярной динамики от точного аналитического решения (верхняя панель). Точками представлен результат классической МД, а сплошная кривая получена с помощью пакета *ifg* [6]. По горизонтальной оси используется логарифмический масштаб.

малых расстояниях. Это отличие обусловлено значительным ростом температуры в сравнении с меньшими значениями θ , вследствие чего необходимо значительно (на несколько порядков) уменьшать шаг МД-моделирования для описания обменных эффектов на малых расстояниях. Таким образом, наиболее удобным с точки зрения моделирования является случай вырожденного ферми-газа, где наблюдается согласие как по энергии, так и по РФР.

Несмотря на невозможность воспроизведения динамического структурного фактора, МД моделирование должно воспроизводить поведение статического структурного фактора. На рисунке 3 приведены парциальные статические структурные факторы $S_{uu}(q)$ и $S_{ud}(q)$ для неполяризованного идеального ферми-газа, вычисленные с помощью МД при различных значениях приведенной температуры $\theta \in [0.2, 5]$. Отметим, что структурный фактор вычислялся напрямую по формуле (38), но не как преобразование Фурье от РФР.

Для всех рассмотренных температур кривые $S_{ud}(q)$ флуктуируют около нулевого значения, что совпадает с аналитическим результатом (54). Это подтверждает отсутствие взаимодействия между частицами с противоположными проекциями спина. В то же время, структурный фактор $S_{uu}(q)$ демонстрирует характерное для ферми-систем подавление флуктуаций плотности на малых волновых числах, возникающее вследствие принципа Паули. По мере увеличения q функция $S_{uu}(q)$ монотонно возрастает и стремится к асимптотическому значению $1/2$, совпадающему с долей компоненты в неполяризованном газе. Чем меньше θ , тем более выражена область подавления на малых q , что отражает усиление обменных корреляций в вырожденной системе. При боль-

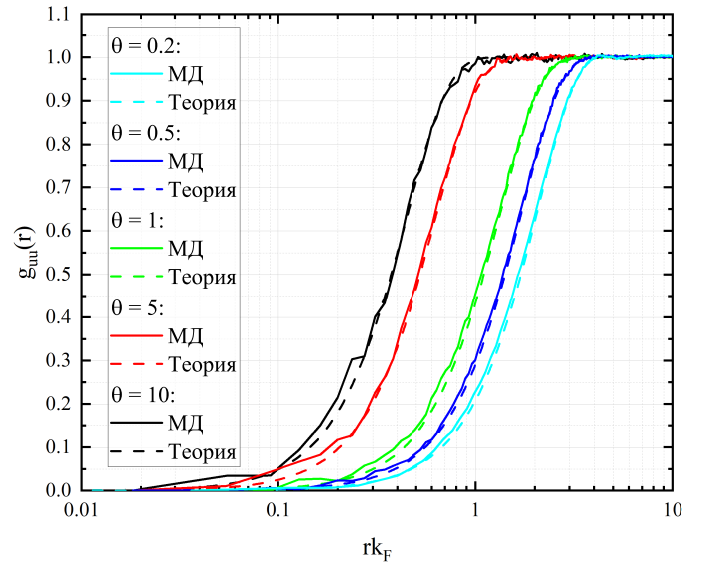


Рисунок 2. Радиальная функция распределения $g(r)$ для идеального неполяризованного ферми-газа при различных значениях приведенной температуры θ . Сплошными линиями показаны данные из МД-моделирования, пунктирными линиями показан расчет по формуле (52). По горизонтальной оси используется логарифмический масштаб. В случае вырожденного газа наблюдается отличное согласие МД-результатов с теоретическими данными, тогда как при приближении к невырожденному случаю наблюдаются отличия, возникающие вследствие конечного шага интегрирования уравнений движения.

ших θ кривые меняются слабо и приближаются к классическому пределу.

Из-за конечного размера ячейки возникает ограничение на минимальную длину волны $q_{\min} = 2\pi/L$, что не позволяет рассчитать структурный фактор при $q < q_{\min}$. Тем не менее, в области $q \geq q_{\min}$ полученные из МД-моделирования зависимости $S_{uu}(q)$ находятся в отличном согласии с аналитическими выражениями для идеального ферми-газа (53).

В целом, полученные результаты показывают, что молекулярная динамика классической системы с псевдопотенциалом, вычисленным из квантовой функции распределения, обеспечивает высокую точность воспроизведения термодинамических и структурных характеристик идеального неполяризованного ферми-газа как при слабом, так и при сильном вырождении. Было показано, что энергия, радиальная функция распределения и статический структурный фактор отлично согласуются с аналитическими результатами. Это подтверждает, что МД-моделирование с использованием псевдопотенциального подхода позволяет получать точные данные для термодинамических свойств вырожденных систем.

Стоит отметить, что выражение для статистической суммы (12) может непосредственно применяться в расчетах методом Монте-Карло [13]. Более того, в случае идеального ферми-газа использование МД не дает преимуществ и даже усложняет моделирование из-за конечного шага по времени. Однако полученный многочастичный псевдопотенциал и соответствующие силы представляют особый интерес при рассмотрении двухкомпонентных систем, где могут возникать

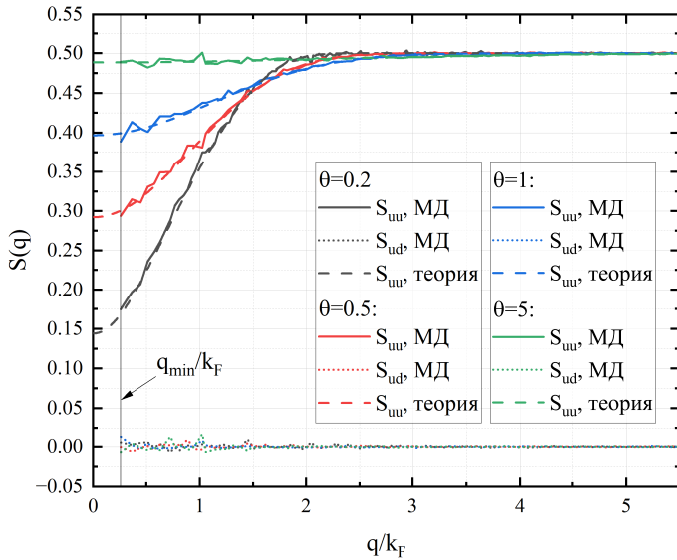


Рисунок 3. Парциальные статические структурные факторы $S_{uu}(q)$ и $S_{ud}(q)$ для неполяризованного идеального ферми-газа при различных значениях приведенной температуры θ . Сплошными линиями показаны результаты МД-моделирования для $S_{uu}(q)$, точечная линия показывает МД-результат для $S_{ud}(q)$, а пунктирная кривая — результат расчета по аналитическим формулам (53). Для доступных значений волновых векторов $q \geq q_{\min}$ наблюдается отличное согласие результатов МД-моделирования с теоретическими данными.

связанные состояния. Их описание в рамках квазиклассической МД существенно упрощается в сравнении с методом Монте-Карло, что делает рассматриваемый подход особенно полезным при моделировании вырожденных двухкомпонентных систем, например, плотной водородной плазмы, с использованием псевдопотенциала Кельбга [9].

В дальнейших работах этот метод будет распространен на случай взаимодействующих систем, а также применен в случае формализма интегралов по траекториям с использованием замены переменных, представленной в работе [12] (см. также [13]), позволяющей решить проблему знаков.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе разработан и исследован псевдопотенциальный подход к моделированию идеального ферми-газа методом классической молекулярной динамики, в том числе в случае сильного вырождения. На основе представления функции распределения идеального ферми-газа в виде детерминанта в работе были получены выражения для многочастичного псевдопотенциала, “межчастичных” сил и энергии, что позволяет использовать стандартные схемы молекулярной динамики с термостатом Нозе–Гувера для генерации конфигурационного ансамбля, эквивалентного квантовому ансамблю и подчиняющегося статистике Ферми.

Сравнение с аналитическими решениями показало, что предложенный подход количественно воспроизводит термодинамические и структурные характеристики идеального ферми-газа как при слабом, так и при сильном вырождении. При этом, наиболее удобным для

моделирования с численной точки зрения является случай вырожденной системы. Было показано, что энергия, радиальная функция распределения и статический структурный фактор ферми-газа отлично согласуются с теорией, включая малое значение корреляционной функции на малых расстояниях вследствие выполнения принципа Паули, подавление длинноволновых флуктуаций плотности, а также корректное асимптотическое поведение при высоких температурах. Тем не менее, представленный метод может быть применен только для расчета статических свойств газа, тогда как представляющий огромный интерес динамический структурный фактор является недоступным для этого метода. Тем не менее, данный метод позволяет рассматривать сотни фермионов в моделировании, что зачастую недоступно в традиционных методах моделирования.

БЛАГОДАРНОСТИ

Данная работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики “БА-ЗИС” (грант № 23-1-5-119-1). Авторы выражают благодарность Центру коллективного пользования “Дальневосточный вычислительный ресурс” ИАПУ ДВО РАН за предоставленное вычислительное время.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dornheim T *et al* 2025 *Nature Communications* **16** 5103
2. Dornheim T, Groth S and Bonitz M 2018 *Physics Reports* **744** 1–86
3. Tuckerman M E, Berne B J, Martyna G J and Klein M L 1993 *The Journal of Chemical Physics* **99** 2796–2808
4. Ceperley D M 1995 *Rev. Mod. Phys.* **67** 279–355
5. Filinov V, Levashov P and Larkin A 2025 *Physics Letters A* **548** 130542
6. Kozharin A S and Levashov P R 2021 *Contributions to Plasma Physics* **61** e202100139
7. Tolias P, Dornheim T and Vorberger J 2025 *Contributions to Plasma Physics* **65** e202400135
8. Feynman R P 1972 *Statistical mechanics: a set of lectures by R. P. Feynman* Frontiers in physics (pub-BENJAMIN:adr: pub-BENJAMIN) notes taken by R. Kikuchi and H. A. Feiveson. Edited by Jacob Shaham
9. Filinov A V, Golubnychiy V O, Bonitz M, Ebeling W and Dufty J W 2004 *Phys. Rev. E* **70** 046411
10. Alexandru A, Başar G m c, Bedaque P F and Warrington N C 2022 *Rev. Mod. Phys.* **94** 015006
11. Dornheim T 2021 *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **54** 335001
12. Filinov V S, Larkin A S and Levashov P R 2020 *Phys. Rev. E* **102** 033203
13. Демьянов Г С и Левашов П Р 2024 *Вестник ОИВТ РАН* **16** 22–31
14. Miura S and Okazaki S 2000 *The Journal of Chemical Physics* **112** 10116–10124
15. Cao J and Voth G A 1994 *The Journal of Chemical Physics* **100** 5106–5117
16. Minoo H, Gomberg M M and Deutsch C 1981 *Phys. Rev. A* **23** 924–943
17. Kelbg G 1963 *Annalen der Physik* **467** 219–224
18. Ebeling W, Fortov V E and Filinov V 2017 *Theoretical Approaches to Quantum Monte Carlo Methods* (Cham, Switzerland: Springer International Publishing) pp 397–442
19. Magnus J R and Neudecker H 2019 *Matrix differential calculus with applications in statistics and econometrics* (Chichester, West Sussex, UK: John Wiley & Sons)

20. Böhme M P *et al* 2025 Correlation function metrology for warm dense matter: Recent developments and practical guidelines arXiv:2510.00493 URL <https://arxiv.org/abs/2510.00493>
21. Ландау Л Д и Лифшиц Е М 2002 *Теоретическая физика. Том 5. Статистическая физика. Часть 1* 5-е изд. (Москва: Физматлит)
22. Krishnamoorthy A and Menon D 2013 Matrix inversion using cholesky decomposition *2013 Signal Processing: Algorithms, Architectures, Arrangements, and Applications (SPA)* pp 70–72
23. Левашов П Р 2024 *Уравнение состояния и термодинамические коэффициенты идеального ферми-газа* (Москва: МФТИ) Учебно-методическое пособие