

ОБМЕН И СПИНОВЫЕ СОСТОЯНИЯ В КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ В УСЛОВИЯХ СИЛЬНЫХ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ ИНТЕГРАЛОВ ПО ТРАЕКТОРИЯМ ФЕЙНМАНА

*С. В. Шевкунов**

*Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
195251, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 12 января 2013 г.

Исследованы фундаментальные закономерности в поведении электронов в модельных квантовых точках, обусловленные обменом и сильными кулоновскими корреляциями. Методом интегралов по траекториям на основе первых принципов численно моделируются системы 2, 3, 4 и 6 взаимодействующих тождественных электронов, заключенных в трехмерную сферическую потенциальную яму с параболическим удерживающим потенциалом на фоне термических флуктуаций. Рассчитаны температурные зависимости спина и коллективной спиновой магнитной восприимчивости в модельных квантовых точках различных пространственных размеров. Представлена принципиально точная процедура учета перестановочной симметрии и спинового состояния электронов, позволяющая выполнить численные расчеты в рамках доступных современных компьютерных мощностей. Определены условия применимости вириального эстиматора энергии и его оптимальная форма в системах с обменом. Предложен альтернативный основному эстиматору корреляционный эстиматор кинетической энергии. Продемонстрирована фундаментальная связь между кинетической энергией квантовой частицы и характером ее виртуальной диффузии в мнимом времени. В терминах интегралов по траекториям численно воспроизведен процесс естественного «спаривания» спинов электронов при сжатии квантовой точки и охлаждении системы. Получены температурные зависимости спиновой магнитной восприимчивости электронных пар с характерным максимумом, обусловленным «спариванием» спинов.

DOI: 10.7868/S0044451013100131

1. ВВЕДЕНИЕ

Свойства систем, состоящих из небольшого количества сильно взаимодействующих электронов, удерживаемых в трехмерной потенциальной яме наноскопических размеров, вызывают повышенный интерес в связи с их уникальными характеристиками, открывающими перспективы построения принципиально новых радиоэлектронных и электронно-оптических устройств хранения и обработки информации. Объекты такого рода получили название квантовых точек [1–3]. Квантовые точки могут существовать в форме нанокристаллов, взвешенных в коллоидном растворе [4] или выращенных методами эпитаксии на кристаллической подложке [5, 6]. В

отличие от атомов, где электроны «спрессованы» в сильном электрическом поле ядра и занимают объем с линейными размерами около десятой доли нанометра, линейные размеры квантовых точек могут варьироваться в относительно широких пределах — от нескольких нанометров до нескольких десятков нанометров, превышая атомные на один–три порядка. В этом диапазоне размеров расстояния между энергетическими уровнями на порядки меньше, чем в электронных оболочках атомов, и могут быть сравнимы с энергией теплового движения [7].

Отсутствие источников сильного постоянного фонового поля, такого как поле ядра в атомах, делает межэлектронные корреляции в квантовых точках ведущим фактором, определяющим вид волновой функции электронов. Принципиальное значение для корректного описания спиновых состояний в системах с сильными межэлектронными корреля-

*E-mail: shevk54@mail.ru

ляциями имеет детальный учет обменных эффектов. Примером служит явление спинового кроссовера в комплексах на основе ионов переходных элементов, содержащих в электронных оболочках d -электроны. Такие системы способны демонстрировать трансформации устойчивых состояний, обладающих близкими значениями энергии, но кардинально различающихся по величине спина — спиновый кроссовер [8–11]. Явление спин-кроссовера объясняют проявлением статического эффекта Яна–Теллера [12] — снятием вырождения электронных состояний и расщепления электронных уровней с образованием близких по энергии, но, возможно, различающихся спином и разделенных потенциальным барьером электронных состояний вследствие нарушений пространственной симметрии молекулярного комплекса за счет слабых деформаций в поле матрицы [13–18].

В этих обстоятельствах особое значение приобретает задача теоретического изучения фундаментальных закономерностей в зависимости спиновых состояний от геометрии и пространственной симметрии фонового поля, роли обменных эффектов в формировании спиновых состояний и зависимости магнитной восприимчивости от спинового состояния в условиях термических флуктуаций.

Проблема смешанных квантовых состояний представляется еще более сложной, чем решение уравнения Шредингера для основного состояния, так как на этом пути необходимо включить в решение все чистые квантовые состояния. Эта безнадежная, на первый взгляд, задача обретает в терминах интегралов по траекториям Фейнмана более естественные формы, чем в традиционном волновом подходе Шредингера. В терминах интегралов по траекториям удастся сформулировать принципиально точную и реализуемую численно процедуру учета межэлектронных корреляций, свободную от одноэлектронного и квазиклассического приближений [18–26].

2. ОБМЕН И СПИН В ФОРМАЛИЗМЕ ИНТЕГРАЛОВ ПО ТРАЕКТОРИЯМ

Квантовое состояние системы N фермионов записывается в виде многочастичной волновой функции

$$\begin{aligned} \Psi(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \\ = \Psi(\{\sigma_i\}, \{\mathbf{x}_i\}) \quad (1) \end{aligned}$$

спиновых $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N = \{\sigma_i\}$, $\sigma_i = \pm 1/2$ (в единицах \hbar) и координатных $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N \equiv \{\mathbf{x}_i\}$ переменных. С позиций теории представлений конечных групп функция (1) является тензором ранга $2N$ [27–29]. Все тензоры типа (1) составляют субстрат группы перестановок π' , которая представляет прямое произведение на себя группы π_N всех перестановок N различных элементов: $\pi' = \pi_N \otimes \pi_N$. Каждой перестановке аргументов в (1) отвечает некоторое преобразование в тензорном пространстве (1) и линейное преобразование в соответствующем ему векторном пространстве V_N [30]. Все матрицы этих линейных преобразований составляют представление группы π_N , которое, в свою очередь, разбивается на неприводимые представления — совокупности преобразований, не выводящих элемент векторного пространства V_N из соответствующего подпространства $V_N^{(k)}$. Подпространствам $V_N^{(k)}$ соответствуют подпространства $\Psi_N^{(k)}$ в пространстве тензоров ранга N . Можно показать [30], что базисные элементы этих подпространств получаются действием операторов Юнга на несимметризованный тензор [31]. Набор операторов Юнга с различными размещениями аргументов в клетках его схемы порождает инвариантное относительно парных перестановок тензорное подпространство $\Psi_N^{(k)}$.

Принцип неразличимости фермионов устанавливает, что возможны только состояния, описываемые антисимметричными тензорами (1), меняющими знак при одновременной перестановке в паре спиновых $\sigma_i \leftrightarrow \sigma_j$ и в соответствующей ей паре координатных $\mathbf{x}_i \leftrightarrow \mathbf{x}_j$ переменных. Можно показать [30], что пространство всех антисимметричных тензоров (1) ранга $2N$ исчерпывается прямыми произведениями всех подпространств $\Psi_N^{(i)} \otimes \Psi_N^{(i, tr)}$, генерируемых операторами Юнга [31] со взаимно транспонированными (дуальными) схемами. Построенное таким образом пространство антисимметричных тензоров является полным. Полнота следует из подсчета размерности пространства и линейной независимости базисных функций [30].

В случае фермионов со спином $1/2$ (электронов) каждой схеме Юнга с незаполненными клетками i , значит, каждому неприводимому представлению группы перестановок π_N однозначно соответствует собственная функция оператора квадрата спина системы в целом с собственным значением, равным $S(S+1)$ (в единицах \hbar^2), и спиновым числом $S = 0, 1, 2, \dots, N/2$ для четных и $S = 1/2, 3/2, \dots, N/2$ для нечетных S [31].

Статистическая сумма квантовой системы пред-

ставляет собой след статистического оператора

$$Z = \text{Tr} \left(\exp \left(-\beta \hat{H} \right) \right) = \sum_S \sum_{\{m_i\}} \sum_{\{\mathbf{r}_i\}} \langle S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} | \times \exp(-\beta \hat{H}) | S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} \rangle, \quad (2)$$

где \hat{H} — оператор энергии, $\beta = 1/k_B T$ — обратная температура, k_B — постоянная Больцмана. Суммирование диагональных матричных элементов

$$\langle S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} \rangle$$

в выражении (2) проводится по линейно независимым состояниям $\langle S, \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\} |$, отвечающим различным значениям S , различным собственным значениям оператора проекции спина $\{m_i\}$ и оператора координат $\{\mathbf{r}_i\}$. Построение базиса, состоящего из полного набора ортогональных функций в пространстве антисимметризованных по парным перестановкам тензоров вида (1) является ключевым требованием корректного вычисления статистической суммы и равновесных средних. Полный набор антисимметризованных волновых функций вида (1) получается действием операторов симметрии Юнга [30, 31], которые не сводятся к простейшим блоковым схемам на основе детерминантов. Применение упрощенных схем при симметризации волновых функций приводит к волновым функциям, не являющимся взаимно ортогональными собственными функциями оператора квадрата спина [32]. Такие функции не отвечают конкретному спиновому состоянию и могут являться только некоторой линейной комбинацией спиновых состояний с различными S . Сумма диагональных элементов, вычисленная суммированием по таким функциям, в силу их линейной зависимости содержит повторяющиеся квантовые состояния, а часть состояний может, наоборот, не содержать. Таким образом, сумма (2) по функциям, хотя и должным образом симметризованным по перестановкам, но не удовлетворяющим условиям полноты и ортогональности, не является статистической суммой, а вычисленные на ее основе средние не являются каноническими равновесными средними.

Гамильтониан нерелятивистских частиц не действует на спиновые переменные. Поэтому спиновая часть волновой функции (1) распадается на произведение одночастичных спиновых функций. В частности, собственная функция оператора проекции спина представляется в виде произведения собственных функций одночастичного оператора проекции спина

$$\Psi(\{m_i\}; \{\sigma_i\}, \{\mathbf{x}_i\}) \propto \prod_{i=1}^N \chi(m_i, \sigma_i), \quad (3)$$

каждая из которых отвечает своему собственному значению проекции спина $m_i = \pm 1/2$ (в единицах \hbar). Совокупность этих значений $m_1, m_2, \dots, m_N \equiv \{m_i\}$ определяет собственное значение оператора проекции спина системы в целом, равное $M_\Sigma \equiv m_1 + m_2 + \dots + m_N$.

В координатном представлении функции (1) являются собственными функциями оператора координат, имеющими вид многомерных δ -функций Дирака,

$$\Psi(\{\mathbf{r}_i\}; \{\sigma_i\}, \{\mathbf{x}_i\}) \propto \prod_{i=1}^N \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{r}_i), \quad (4)$$

где совокупность трехмерных векторов $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N \equiv \{\mathbf{r}_i\}$ представляет собственное значение многочастичного оператора координат. Запись волновой функции (3) в виде произведения одночастичных волновых функций не означает одночастичного приближения, а является только следствием того, что многомерная δ -функция Дирака, по определению, распадается на произведение одномерных.

Комбинируя выражения (3) и (4), для собственных функций операторов квадрата спина, проекции спина и оператора координат нерелятивистских взаимодействующих различных квантовых частиц получаем

$$\Psi(\{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\}; \{\sigma_i\}, \{\mathbf{x}_i\}) = \chi(\{m_i\}; \{\sigma_i\}) \delta(\{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\}), \quad (5)$$

где

$$\chi(\{m_i\}; \{\sigma_i\}) \equiv \prod_{i=1}^N \chi(m_i, \sigma_i),$$

$$\delta(\{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\}) \equiv \prod_{i=1}^N \delta(\mathbf{x}_i - \mathbf{r}_i)$$

— соответственно спиновая и координатная части многочастичной волновой функции различных частиц.

В силу того, что оператор проекции спина коммутирует с оператором квадрата спина [31], функция (1) может быть одновременно и собственной функцией оператора квадрата спина системы $\Psi(S, \{m_i\}; \{\mathbf{r}_i\}; \{\sigma_i\}, \{\mathbf{x}_i\})$ со спиновым числом S . Для этого она должна удовлетворять дополнительным условиям симметрии относительно перестановок спиновых переменных [31].

Конкретный тип перестановочной симметрии записывается в форме линейной комбинации функций типа (1) с переставленными аргументами. Каждую такую перестановку можно изобразить графом (диаграммой), состоящим из стрелок (связей), указывающих начальную и конечную позиции переставляемого элемента (см. рис. 3 в работе [33]). В силу того, что в координатном представлении несимметризованная волновая функция (4) распадается на произведение одночастичных функций, она обладает свойством дополнителности относительно произвольных перестановок \hat{P}_n в ряду спиновых переменных:

$$\begin{aligned} \Psi \left(\{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\}; \hat{P}_n \{\sigma_i\}, \{\mathbf{x}_i\} \right) &= \\ &= \Psi \left(P_n^{-1} \{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\}; \{\sigma_i\}, \{\mathbf{x}_i\} \right), \end{aligned} \quad (6)$$

и аналогичным свойством относительно перестановок в ряду пространственных переменных:

$$\begin{aligned} \Psi \left(\{m_i\}, \{\mathbf{r}_i\}; \{\sigma_i\}, \hat{P}_n \{\mathbf{x}_i\} \right) &= \\ &= \Psi \left(\{m_i\}, P_n^{-1} \{\mathbf{r}_i\}; \{\sigma_i\}, \{\mathbf{x}_i\} \right). \end{aligned} \quad (7)$$

Свойства (6) и (7) означают, что симметризация по переменным равносильна симметризации по собственным значениям с заменой всех перестановок на обратные. Обратной перестановке соответствует граф с измененными направлениями всех связей на противоположные — обратный граф.

Любая перестановка может быть задана как с помощью позиционного оператора перестановок \hat{P}_n , действие которого определяется номерами позиций, в которых находятся переставляемые элементы, так и с помощью оператора перестановок по номерам \hat{N}_n , действие которого на перестановку \hat{P}_r определяется номерами элементов, а не их позициями, $\hat{N}_n = \hat{P}_r \hat{P}_n \hat{P}_r^{-1}$. Поскольку при любом размещении аргументов номера их позиций совпадают с номерами собственных значений (с учетом тождеств (6), (7)), последовательное действие операторов $\hat{P}_n \hat{P}_k$ на произвольную перестановку аргументов $\{\sigma_i\}$ или $\{\mathbf{x}_i\}$ в функции (5) равносильно действию операторов $\hat{N}_n^{-1} \hat{N}_k^{-1}$ на произвольную перестановку собственных значений $\{m_i\}$ или $\{\mathbf{r}_i\}$. Действие операторов на произвольное размещение обладает свойством [33]

$$\left(\hat{P}_n \hat{P}_k \right)^{-1} = \hat{P}_k^{-1} \hat{P}_n^{-1} = \hat{N}_n^{-1} \hat{N}_k^{-1}.$$

Оператор Юнга сводится к последовательному действию операторов парных перестановок по номерам

$$\begin{aligned} \hat{J}(S) &= (1 \pm \hat{n}_w) (1 \pm \hat{n}_v) \dots (1 \pm \hat{n}_c) \times \\ &\times (1 \pm \hat{n}_b) (1 \pm \hat{n}_a), \end{aligned} \quad (8)$$

причем перестановка имеет знак «+», если производится между аргументами, стоящими в одной строке, и знак «−», если производится между аргументами, стоящими в одном столбце. После раскрытия скобок в (8) оператор Юнга принимает вид линейной комбинации операторов перестановок по номерам,

$$\sum_{n=1}^{N!} \alpha_J(n) \hat{N}_n,$$

где коэффициенты $\alpha_J(n) = 0$, если перестановка \hat{N}_n не содержится в операторе симметрии Юнга $\hat{J}(S)$, отвечающего спиновому числу S , и

$$\alpha_J(n) = (-1)^{c(r)+c(u)} = \pm 1,$$

если перестановка $\hat{N}_n = \hat{N}_r \hat{N}_u \hat{N}_w$ содержится в операторе симметрии Юнга $\hat{J}(S)$, причем \hat{N}_w — суперпозиция перестановок между аргументами, содержащимися в одних и тех же строках схемы Юнга, \hat{N}_r — перестановка среди аргументов, содержащихся в клетках первого столбца, \hat{N}_u — перестановка среди аргументов, содержащихся в клетках второго столбца схемы Юнга, а $c(r)$ и $c(u)$ — их четности. Аналогично определяются значения коэффициентов $\alpha_{J^T}(l)$, относящихся к оператору Юнга $\hat{J}^T(S)$ с транспонированной схемой, действующего на спиновые переменные. Симметрия собственной функции оператора квадрата спина задается линейной комбинацией волновых функций, симметризованных действием на них операторов Юнга $\hat{J}^T(S)$ с различными размещениями аргументов в клетках схемы [30–32]:

$$\begin{aligned} \Psi(S, \{m_i\} \{\mathbf{r}_i\}; \{\sigma_i\}, \{\mathbf{x}_i\}) &= \sum_{p=1}^{N!} \eta_S(p) \tilde{B}(S)^{-1/2} \times \\ &\times \sum_{l=1}^{N!} \tilde{\alpha}_S(l) \chi \left(\hat{N}_p \hat{N}_l^{-1} \hat{N}_p^{-1} \{m_i\}; \{\sigma_i\} \right) \times \\ &\times \sum_{k=1}^{N!} \varphi_S(k) B(S)^{-1/2} \sum_{n=1}^{N!} \tilde{\alpha}_S(n) \times \\ &\times \delta \left(\hat{N}_k \hat{N}_n^{-1} \hat{N}_k^{-1} \{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\} \right), \end{aligned} \quad (9)$$

где $B(S)$ и $\tilde{B}(S)$ — количества перестановок с ненулевыми коэффициентами $\alpha_S(n)$ и $\tilde{\alpha}_S(l)$, содержащихся соответственно в операторах симметрии Юнга $\hat{J}(S)$ и $\hat{J}^T(S)$. Суммированием по p и по k с

коэффициентами $\eta_S(p)$ и $\varphi_S(k)$ в (9) осуществляется построение линейных комбинаций, состоящих из симметризованных операторами Юнга функций с различными \hat{N}_p - и \hat{N}_k -размещениями аргументов в клетках схемы.

Поскольку оператор \hat{H} не действует на спиновые переменные, спиновая часть волновой функции нерелятивистских электронов может быть «пронесена» мимо статистического оператора, и его диагональный матричный элемент принимает вид

$$\begin{aligned} \langle S, M_\Sigma, \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | S, M_\Sigma, \{\mathbf{r}_i\} \rangle &= \\ &= \sum_{\sigma_i = \pm 1/2} \left| \tilde{B}(S)^{-1} \sum_{p=1}^{N!} \eta_S(p) \times \right. \\ &\times \sum_{l=1}^{N!} \alpha_S(l) \chi \left(\hat{N}_p \hat{N}_l^{-1} \hat{N}_p^{-1} \{m_i\}; \{\sigma_i\} \right) \left. \right|^2 \times \\ &\times \int \dots \int B(S)^{-1} \left[\sum_{k'=1}^{N!} \varphi_S^*(k') \sum_{n'=1}^{N!} \alpha_S(n') \times \right. \\ &\times \delta \left(\hat{N}_{k'} \hat{N}_{n'}^{-1} \hat{N}_{k'}^{-1} \{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\} \right) \left. \right] \exp(-\beta \hat{H}) \times \\ &\times \sum_{k=1}^{N!} \varphi_S(k) \sum_{n=1}^{N!} \alpha_S(n) \times \\ &\times \delta \left(\hat{N}_k \hat{N}_n^{-1} \hat{N}_k^{-1} \{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\} \right) d\mathbf{x}_1 \dots d\mathbf{x}_N = \\ &= \sum_{\sigma_i = \pm 1/2} \left| \tilde{B}(S)^{-1} \sum_{p=1}^{N!} \eta_S(p) \sum_{l=1}^{N!} \alpha_S(l) \times \right. \\ &\times \chi \left(\hat{N}_p \hat{N}_l^{-1} \hat{N}_p^{-1} \{m_i\}; \{\sigma_i\} \right) \left. \right|^2 \times \\ &\times B(S)^{-1} \sum_{k,k'=1}^{N!} \varphi_S^*(k) \varphi_S(k') \times \\ &\times \sum_{n,n'=1}^{N!} \alpha_S(n) \alpha_S(n') \int \dots \int \delta(\{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{y}_i\}) \times \\ &\times \exp(-\beta \hat{H}) \delta \left(\hat{N}_{k'} \hat{N}_{n'} \hat{N}_{k'}^{-1} \hat{N}_k \hat{N}_n^{-1} \hat{N}_k^{-1} \{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{y}_i\} \right) \times \\ &\times d\mathbf{y}_1 \dots d\mathbf{y}_N. \quad (10) \end{aligned}$$

В последнем выражении проведена замена переменных, $\{\mathbf{y}_i\} = \hat{N}_{k'} \hat{N}_{n'}^{-1} \hat{N}_{k'}^{-1} \{\mathbf{x}_i\}$, и использовано свойство

$$\delta \left(\hat{N}_r^{-1} \{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{y}_i\} \right) = \delta \left(\{\mathbf{r}_i\}; \hat{N}_r \{\mathbf{y}_i\} \right)$$

многомерной δ -функции Дирака в применении к $\hat{N}_r = \hat{N}_{k'} \hat{N}_{n'}^{-1} \hat{N}_{k'}^{-1}$. Перестановка $\hat{N}_m \equiv \hat{N}_{k'} \hat{N}_{n'} \times \hat{N}_{k'}^{-1} \hat{N}_k \hat{N}_n^{-1} \hat{N}_k^{-1}$ имеет комбинаторный вес

$$\begin{aligned} \alpha_J(m) &= (-1)^{c(k')+c(n')-c(k')+c(k)-c(n)-c(k)} = \\ &= (-1)^{c(n')-c(n)} = (-1)^{c(n')+c(n)} = \alpha_S(n') \alpha_S(n). \end{aligned}$$

По этой причине, а также с учетом нормировки на единицу спиновой волновой функции под знаком модуля в (10) и нормировки координатной части, в силу которой коэффициенты разложения по различным размещениям аргументов в схеме Юнга $J(S)$ удовлетворяют условию

$$\sum_{k,k'=1}^{N!} \varphi_S^*(k) \varphi_S(k') = 1,$$

последнее выражение для диагонального матричного элемента в представлении симметризованных функций может быть записано в терминах недиагональных элементов несимметризованного представления:

$$\begin{aligned} \langle S, M_\Sigma, \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | S, M_\Sigma, \{\mathbf{r}_i\} \rangle &= \\ &= \sum_{m=1}^{N!} \alpha_S(m) \int_V \dots \int_V \delta(\{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\}) \times \\ &\times \exp(-\beta \hat{H}) \delta \left(\hat{N}_m \{\mathbf{r}_i\}; \{\mathbf{x}_i\} \right) d\mathbf{x}_1 \dots d\mathbf{x}_N = \\ &= \sum_{m=1}^{N!} \alpha_S(m) \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{N}_m \{\mathbf{r}_i\} \rangle, \quad (11) \end{aligned}$$

где $\alpha_S(m) = \pm 1$, если перестановка \hat{N}_m содержится в операторе симметрии Юнга $\hat{J}(S)$, и $\alpha_S(m) = 0$, если такой перестановки в операторе нет,

$$\langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{N}_m \{\mathbf{r}_i\} \rangle$$

— недиагональный матричный элемент статистического оператора в несимметризованном координатном представлении.

Суммирование диагональных матричных элементов (11) по различным квантовым состояниям $S, M_\Sigma, \{\mathbf{r}_i\}$ приводит к статистической сумме системы [33–36]:

$$\begin{aligned}
 Z_e &= \text{Tr} \left(\exp(-\beta \hat{H}) \right) = \frac{1}{N!} \sum_{S=1}^{N/2} (2S+1) \sum_{m=1}^{N!} \alpha_S(m) \times \\
 &\times \int_V \dots \int_V \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{N}_m \{\mathbf{r}_i\} \rangle d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N = \\
 &= \frac{1}{N!} \sum_{S=1}^{N/2} (2S+1) \sum_{\{v_i\}} \omega_S(\{v_i\}) \times \\
 &\times \int \dots \int \langle \{\mathbf{r}_i\} | \exp(-\beta \hat{H}) | \hat{\prod}_{\{v_i\}} \{\mathbf{r}_i\} \rangle d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N = \\
 &= \frac{1}{N!} \sum_{\{v_i\}} \omega(\{v_i\}) \int_V \dots \int_V \prod_{j=1}^M \{v_i\} \langle \{\mathbf{r}(j)\} | \times \\
 &\times \exp(-\beta \hat{H}/M) | \{\mathbf{r}_i(j+1)\} \rangle d\mathbf{r}_1(1) d\mathbf{r}_1(2) \dots d\mathbf{r}_i(j) \times \\
 &\times d\mathbf{r}_i(j+1) \dots d\mathbf{r}_N(M-1) d\mathbf{r}_N(M) \quad (12)
 \end{aligned}$$

с условиями

$$\{\mathbf{r}_i(M+1)\} = \hat{\prod}_{\{v_i\}} \{\mathbf{r}_i(1)\}$$

на концах цепочки матричных элементов, на что указывает значок $\{v_i\}$ у знака произведения в (12), причем $\hat{\prod}_{\{v_i\}}$ — произвольная перестановка класса перестановок $\{v_i\}$ (перестановка-прототип). Класс перестановок характеризуется многомерным индексом $\{v_i\} = v_1, v_2, \dots, v_N$, где v_i — количество циклов в графе перестановки, длиной в i звеньев (парных перестановок). Поскольку величина матричного элемента не зависит от нумерации вершин графа перестановки, во втором равенстве в выражении (12) все матричные элементы с перестановками \hat{N}_m , принадлежащими одному классу перестановок $\{v_i\}$ в операторе Юнга со схемой $J(S)$, объединены с общим множителем

$$\omega_S(\{v_i\}) = \sum_m^{\{v_i\}} \alpha_S(m),$$

а их сумма по всем схемам Юнга равна

$$\omega(\{v_i\}) \equiv \sum_{S=0,1/2}^{N/2} (2S+1) \omega_S(\{v_i\}).$$

В пределе $M \rightarrow \infty$, используя явное выражение для асимптотики высокотемпературных матричных элементов статистического оператора [37], статистическую сумму электронов (12) перепишем в терминах интеграла по траекториям Фейнмана (континуального интеграла [38]):

$$\begin{aligned}
 Z_e &= \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{N!} \left(\frac{m_e M}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{3MN/2} \sum_{\{v_i\}} \omega(\{v_i\}) \times \\
 &\times \int_V \dots \int_V \exp \left\{ - \sum_{j=1}^M \{v_i\} \left[\sum_{i=1}^N \frac{m_e M}{2\beta\hbar^2} \times \right. \right. \\
 &\times \left. \left. (\mathbf{r}_i(j+1) - \mathbf{r}_i(j))^2 - \frac{\beta}{M} \sum_{l < k=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_i(k)|} \right] \right\} \times \\
 &\times d\mathbf{r}_1(1) d\mathbf{r}_2(2) \dots d\mathbf{r}_i(j) d\mathbf{r}_i(j+1) \dots d\mathbf{r}_N(M-1) \times \\
 &\times d\mathbf{r}_N(M), \quad (13)
 \end{aligned}$$

где e — элементарный заряд, а m_e — масса электрона. Сумма по j в показателе экспоненты в (13) представляет собой функционал действия в мнимом времени $t = -i\hbar\beta$, вычисленный вдоль замкнутых траекторий

$$\{\mathbf{r}_i(1), d\mathbf{r}_i(2), \dots, \mathbf{r}_i(M-1), d\mathbf{r}_i(M)\}$$

с условиями их сцепления $\{\mathbf{r}_i(M+1)\} = \hat{\prod}_{\{v_i\}} \{\mathbf{r}_i(1)\}$, а выражение под знаком интеграла — матричный элемент оператора эволюции в мнимом времени, $\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$, в форме интеграла по траекториям.

3. РАСЧЕТ РАВНОВЕСНОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ

Расчет квантовомеханических наблюдаемых сводится к усреднению соответствующих функций (эстиматоров), вычисляемых на ломаных траекториях [35, 36, 39–42]. Расчет многомерных интегралов осуществляется численно методом Монте-Карло на основе марковского случайного процесса блужданий в пространстве траекторий. Принципиально точный результат получается в пределе бесконечно длинного процесса и бесконечного количества звеньев в траекториях, $M \rightarrow \infty$. Конечномерная (допредельная, $M < \infty$) аппроксимация траекторий позволяет хранить в памяти компьютера конечное количество координат и манипулировать ими.

Расчет кинетической энергии требует специального рассмотрения, так как основной эстиматор кинетической энергии обладает неблагоприятными для расчетов флуктуационными свойствами. При $M \rightarrow \infty$ его дисперсия расходится. Увеличение M при расчетах с этим эстиматором сопровождается быстрым ростом флуктуационных погрешностей и, вместо уточнения вычислений, может привести к обратному эффекту.

3.1. Основной (термодинамический) эстиматор энергии в системе с обменом

Обобщение выражения (13) на случай статистической суммы смешанной системы, состоящей из N электронов, рассматриваемых как квантовые частицы, и I сферически-симметричных частиц, подчиняющихся классической статистике, имеет вид

$$\begin{aligned}
 Z = \text{Tr} \left(\exp \left(-\beta \hat{H} \right) \right) &= \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{I!} \left(\frac{m_q}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{3I/2} \times \\
 &\times \frac{1}{N!} \left(\frac{m_e M}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{3MN/2} \sum_{\{v_i\}} \omega(\{v_i\}) \times \\
 &\times \int_V \dots \int_V \exp \left\{ -\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \{v_i\} \frac{m_e M}{2\beta\hbar^2} \times \right. \\
 &\quad \times (\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_i(j+1))^2 - \frac{\beta}{M} \times \\
 &\quad \times \sum_{j=1}^M \left[\sum_{k=1}^N \Phi_e(\mathbf{r}_i(j)) + \sum_{i < k=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_k(j)|} + \right. \\
 &\quad \left. \left. + \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^I u_{qe}(|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{R}_k|) \right] - \right. \\
 &\quad \left. - \beta \left[\sum_{k=1}^I \Phi_q(\mathbf{R}_k) + \sum_{i < k=1}^I u_{qq}(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_k|) \right] \right\} \times \\
 &\quad \times d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_I d\mathbf{r}_1(1) d\mathbf{r}_1(2) \dots d\mathbf{r}_i(j) \times \\
 &\quad \times d\mathbf{r}_i(j+1) \dots d\mathbf{r}_N(M-1) d\mathbf{r}_N(M). \quad (14)
 \end{aligned}$$

Запись выражения (14), расширенного на случай систем, содержащих «классические» частицы, позволяет применять развиваемый здесь формализм на следующем этапе детализации модели с явным учетом атомарной структуры квантовой точки. Здесь и далее q — электрический заряд классических частиц, m_q — масса классической частицы, $\Phi_e(\mathbf{r})$ — оператор взаимодействия электрона с внешним полем, $\Phi_q(\mathbf{R})$ — энергия взаимодействия классической частицы с внешним полем, M — количество звеньев ломаной, представляющей фейнмановскую траекторию электрона в допредельной аппроксимации континуального интеграла, $\mathbf{r}_i(j)$ — декартовы координаты j -й вершины i -й траектории, \mathbf{R}_k — декартовы координаты k -й классической частицы, $u_{qe}(r)$ — оператор взаимодействия электрона с классической частицей, а $u_{qq}(R)$ — энергия взаимодействия классических частиц на расстоянии r . Суммирование по $\{v_i\}$ в (14) проводится по всем вариантам $\{v_i\}$ сцепления нумерованных траекторий в циклы с условием $\sum_{i=1}^N i v_i = N$. Внутренняя энергия системы равна производной свободной энергии Гельмгольца

$F = -\beta^{-1} \ln Z$ по обратной температуре β при постоянных объеме V и внешних полях:

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle_c = \frac{\partial(\beta F)}{\partial \beta} &= \frac{3}{2} I k_B T + \lim_{M \rightarrow \infty} \left\{ \left\langle \frac{3}{2} M N k_B T - \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \{v_i\} \frac{m_e M}{2\beta^2 \hbar^2} (\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_i(j+1))^2 \right\rangle_c + \right. \\
 &\quad \left. + \left\langle \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left[\sum_{i=1}^N \Phi_e(\mathbf{r}_i(j)) + \sum_{i < k=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_k(j)|} + \right. \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^I u_{qe}(|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{R}_k|) \right] + \right. \\
 &\quad \left. \left. + \left[\sum_{k=1}^I \Phi_q(\mathbf{R}_k) + \sum_{i < k=1}^I u_{qq}(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_k|) \right] \right\rangle_c \right\}, \quad (15)
 \end{aligned}$$

где $\langle \dots \rangle_c$ обозначает операцию канонического усреднения в пространстве виртуальных траекторий и различных вариантов их сцепления:

$$\begin{aligned}
 \langle \dots \rangle_c &= \\
 &= \int_V \dots \int_V \sum_{\{v_i\}} (\dots \rho(I, N, M, \{v_i\}, \{\mathbf{R}_k\}, \{\mathbf{r}_i(j)\})) \times \\
 &\quad \times d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_I d\mathbf{r}_1(1) d\mathbf{r}_1(2) \dots d\mathbf{r}_i(j) \times \\
 &\quad \times d\mathbf{r}_i(j+1) \dots d\mathbf{r}_N(M-1) d\mathbf{r}_N(M) \quad (16)
 \end{aligned}$$

с функцией распределения

$$\begin{aligned}
 \rho(I, N, M, \{v_i\}, \{\mathbf{R}_k\}, \{\mathbf{r}_i(j)\}) &\propto \omega(\{v_i\}) \times \\
 &\quad \times \exp \left\{ -\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \{v_i\} \frac{m_e M}{2\beta\hbar^2} \times \right. \\
 &\quad \times (\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_i(j+1))^2 - \frac{\beta}{M} \times \\
 &\quad \times \sum_{j=1}^M \left[\sum_{i=1}^N \Phi_e(\mathbf{r}_i(j)) + \sum_{i < k=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_k(j)|} + \right. \\
 &\quad \left. \left. + \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^I u_{qe}(|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{R}_k|) \right] - \right. \\
 &\quad \left. - \beta \left[\sum_{k=1}^I \Phi_q(\mathbf{R}_k) + \sum_{i < k=1}^I u_{qq}(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_k|) \right] \right\}. \quad (17)
 \end{aligned}$$

Кинетическая энергия частиц сорта α , обладающих массой m_α , равна $K^\alpha = m_\alpha \partial F / \partial m_\alpha$, а первое слагаемое в (15),

$$K^q = \frac{3}{2} I k_B T, \quad (18)$$

является равновесной средней кинетической энергией классических частиц. Следующее слагаемое, равное равновесному среднему величины

$$K_{th}^e = \frac{3}{2}MNk_B T - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \{v_i\} \frac{m_e M}{2\beta^2 \hbar^2} (\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_i(j+1))^2, \quad (19)$$

является кинетической энергией электронов, а оставшееся равновесное среднее функции

$$U = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left[\sum_{i=1}^N \Phi_e(\mathbf{r}_i(j)) + \sum_{i < k=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_k(j)|} + \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^I u_{qe} (|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{R}_k|) \right] + \left[\sum_{k=1}^I \Phi_q(\mathbf{R}_k) + \sum_{i < k=1}^I (|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_k|) \right] \quad (20)$$

представляет потенциальную энергию системы в целом. Проблема применения основного эстиматора K_{th}^e для численных расчетов очевидна уже из самой структуры выражения (19), представляющего собой разность двух величин, растущих почти линейно с ростом M . Дисперсия каждого из слагаемых под знаком суммы в (19) имеет порядок $(k_B T)^2$, а дисперсия суммы ведет себя как $M(k_B T)^2$, т. е. при $M \rightarrow \infty$ расходится линейно по M . При расчетах в конечных выборках вместе с ней с темпом порядка $M^{1/2}$ расходится и флуктуационная погрешность K_{th}^e , и расчет с основным эстиматором становится невозможным. В то же время с понижением температуры его дисперсия убывает как T^2 , и соответственно, флуктуационная погрешность уменьшается с темпом порядка T , что внушает надежды на возможность использования этого эстиматора в расчетах при достаточно низких температурах [35, 36, 41, 42].

3.2. Корреляционный эстиматор кинетической энергии

Для четного количества звеньев M проведем каноническое усреднение $\langle \dots \rangle_e$ эстиматора (19) в два этапа: сначала выполним усреднение по положениям вершин $\mathbf{r}_i(j)$, имеющим четные номера j ($\langle \dots \rangle_e$), а затем полученный результат усредним по положениям вершин с нечетными номерами ($\langle \dots \rangle_o$),

$$\begin{aligned} \langle K_{th}^e \rangle_e &= \frac{3}{2}MNk_B T - \left\langle \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{M/2} \{v_i\} \frac{m_e M}{2\beta^2 \hbar^2} \times \right. \right. \\ &\times \left. \left. \left((\mathbf{r}_i(2j+1) - \mathbf{r}_i(2j))^2 + (\mathbf{r}_i(2j) - \mathbf{r}_i(2j-1))^2 \right) \right\rangle_e \right\rangle_o = \\ &= \frac{3}{2}MNk_B T - \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{M/2} \{v_i\} \frac{m_e M}{2\beta^2 \hbar^2} \times \right. \\ &\times \left. \left(\mathbf{r}_i(2j+1) - \mathbf{r}_i(2j-1) \right)^2 \right\rangle_o + \\ &+ 2 \left\langle \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{M/2} \{v_i\} \frac{m_e M}{2\beta^2 \hbar^2} \times \right. \right. \\ &\times \left. \left. \left((\mathbf{r}_i(2j) - \mathbf{r}_i(2j-1))^2 \cdot (\mathbf{r}_i(2j+1) - \mathbf{r}_i(2j))^2 \right) \right\rangle_e \right\rangle_o = \\ &= 2 \left[\frac{3}{2}M'Nk_B T - \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{M'} \{v_i\} \frac{m_e M'}{2\beta^2 \hbar^2} \times \right. \right. \\ &\times \left. \left. \left(\mathbf{r}_i(2j+1) - \mathbf{r}_i(2j-1) \right)^2 \right\rangle_o \right] + \\ &+ \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \{v_i\} \frac{m_e M}{2\beta^2 \hbar^2} \times \right. \\ &\times \left. \left. \left((\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_i(j-1)) \cdot (\mathbf{r}_i(j+1) - \mathbf{r}_i(j)) \right) \right\rangle_c, \quad (21) \end{aligned}$$

с условиями, что $\mathbf{r}_i(0) \equiv \mathbf{r}_k(M-1)$, $\mathbf{r}_i(M+1) \equiv \mathbf{r}_k(1)$ в точках сцепления i -й и k -й траекторий. В последнем равенстве (21) использовано обозначение $M' \equiv M/2$ и известное [37] тождество для функции распределения, полученной интегрированием по вершинам с четными номерами:

$$\begin{aligned} \int_V \dots \int_V \rho(I, N, M, \{v_i\}, \{\mathbf{R}_k\}, \{\mathbf{r}_i(j)\}) \times \\ \times d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_4 \dots d\mathbf{r}_{2j} \dots d\mathbf{r}_M = \\ = \rho(I, N, M/2, \{v_i\}, \{\mathbf{R}_k\}, \{\mathbf{r}_i(2j-1)\}), \end{aligned}$$

а во второй сумме — равенство средних, различающихся сдвигом по траектории на одно звено. В силу этого равенства суммирование в последнем выражении в (21) проведено не через одну вершину, как в предыдущем равенстве, а по всем вершинам; при этом коэффициент перед суммой уменьшен в два раза. Поскольку левая часть выражения (21), а также выражение в квадратных скобках равны кинетической энергии электронов, выраженной в терминах основного эстиматора, последняя сумма в (21) с

обратным знаком тоже равна кинетической энергии, а соответствующий эстиматор

$$K_{cor}^e \equiv - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \{v_i\} \frac{m_e M}{2\beta^2 \hbar^2} \times \\ \times ((\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_i(j-1)) \cdot (\mathbf{r}_i(j+1) - \mathbf{r}_i(j))) \quad (22)$$

естественно назвать корреляционным эстиматором кинетической энергии. Действительно, поскольку статистический оператор $\exp(-\beta \hat{H})$ изоморфен квантовомеханическому пропагатору $\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ в мнимом времени $t = -i\hbar\beta$, а

$$\mathbf{v}_j^k = - \frac{\mathbf{r}_j^k - \mathbf{r}_{j-1}^k}{i\hbar\beta/M} \equiv \mathbf{v}^k \left(\frac{jt}{M} \right)$$

имеет смысл виртуальной скорости электрона в мнимом времени на j -м звене траектории, выражение (22) может быть переписано в форме скалярных произведений скоростей,

$$K_{cor}^e \equiv \sum_{k=1}^N M \sum_{j=1}^M \{v_i\} \frac{m_e}{2} (\mathbf{v}_j^k \cdot \mathbf{v}_{j+1}^k), \quad (23)$$

и его каноническое среднее выражается через двувременной автокоррелятор скорости в мнимом времени, $\vartheta(\delta) \equiv \langle \langle (\mathbf{v}(\tau) \cdot \mathbf{v}(\tau + \rho)) \rangle \rangle_c$, полученный двойным усреднением — сначала по времени $\tau = jt/M$, $j = 1, \dots, M$ вдоль траекторий $\langle \dots \rangle_\tau$, а затем в конфигурационном пространстве этих траекторий:

$$\langle K_{cor}^e \rangle_c = \frac{NM^2 m_e \vartheta}{2} \left(- \frac{i\hbar\beta}{M} \right).$$

Точное выражение получается в пределе $M \rightarrow \infty$. Поскольку коэффициент диффузии тоже выражается через двувременной автокоррелятор скорости [43], из полученных выше соотношений очевидна фундаментальная связь между кинетической энергией и характером виртуальной диффузии квантовой частицы в мнимом времени. Скалярные произведения в (22), (23) принимают отрицательные значения, а вклад в кинетическую энергию, соответственно, положительные значения при условии, что угол между векторами, входящими в скалярные произведения, тупой, что соответствует изгибу траектории «назад». Каждая такая точка поворота дает положительный вклад в результирующую кинетическую энергию. При сжатии клубка виртуальной траектории количество точек поворота увеличивается и кинетическая энергия повышается. Для пространственно-неограниченной частицы наличие точек поворота обусловлено только условием замкнутости траектории, а их равновесное среднее количество обеспечивает величину кинетической энергии $3k_B T/2$, отвечающую классическому пределу.

Средняя длина звена траектории $|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_i(j-1)|$ и ее флуктуации ведут себя примерно как $M^{-1/2}$, а дисперсия — как M^{-1} . В пренебрежении корреляциями между соседними звеньями и вследствие центрированности случайной величины $\langle (\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_i(j-1)) \rangle_c = 0$ дисперсия скалярного произведения $((\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_i(j-1)) \cdot (\mathbf{r}_i(j+1) - \mathbf{r}_i(j)))$ в (22) распадается в произведение дисперсий каждого из сомножителей и поэтому ведет себя как M^{-2} . С учетом общего количества M подобных флуктуирующих слагаемых и множителя M перед скалярным произведением в каждом слагаемом в сумме (22), дисперсия диффузионного эстиматора ведет себя как $MM^2(k_B T)^2 M^{-2} = M(k_B T)^2$, т.е., как и в случае основного эстиматора, расходится при $M \rightarrow \infty$ линейно по M и убывает квадратично по температуре при охлаждении. Хотя корреляционный эстиматор не дает выигрыша во флуктуационной погрешности расчетов, наличие его в качестве независимого способа вычисления энергии представляет интерес для целей контроля и оценок погрешностей при расчетах в конечных выборках.

Очевидно обобщение представленной процедуры, позволяющее получить целое семейство эстиматоров перекрестного вида, схожего с (22). Достаточно записать аналогичные выражения с условием последовательного усреднения по координатам не каждой второй, как в представленном алгоритме, а каждой третьей, четвертой и т.д. вершинам траекторий.

3.3. Вириальный эстиматор энергии в пространственно ограниченной системе с обменом

Для перехода к вириальному эстиматору достаточно провести замену пространственных переменных интегрирования

$$\tilde{\mathbf{R}}_k \equiv \beta^{-1/2} \mathbf{R}_k, \quad \tilde{\mathbf{r}}_i(j) \equiv \beta^{-1/2} \mathbf{r}_i(j).$$

После такой замены зависимости от β как в квадратичной форме, так и в предынтегральных множителях в (14) аннулируются, и внутренняя энергия системы принимает вид

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle_c &= \frac{\partial(\beta F)}{\partial \beta} = \lim_{M \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{2\beta^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \beta^{1/2}} \times \right. \\
&\times \ln \left(\sum_{\{v_i\}} \omega(\{v_i\}) \times \int \dots \int \exp \left(- \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \{v_i\} \frac{m_e M}{2\hbar^2} \times \right. \right. \\
&\times (\tilde{\mathbf{r}}_i(j) - \tilde{\mathbf{r}}_i(j-1))^2 - \frac{\beta}{M} \sum_{j=1}^M \left[\sum_{i=1}^N \Phi_e(\beta^{1/2} \tilde{\mathbf{r}}_i(j)) + \right. \\
&\quad + \sum_{i < k=1}^N \frac{e^2}{\beta^{1/2} |\tilde{\mathbf{r}}_i(j) - \tilde{\mathbf{r}}_k(j)|} + \\
&\quad \left. \left. + \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^I u_{qe}(\beta^{1/2} |\tilde{\mathbf{r}}_i(j) - \tilde{\mathbf{R}}_k|) \right] \right) - \\
&\quad - \beta \left[\sum_{k=1}^I \Phi_q(\beta^{1/2} \tilde{\mathbf{R}}_k) + \right. \\
&\quad \left. \left. + \sum_{i < k=1}^I u_{qq}(\beta^{1/2} |\tilde{\mathbf{R}}_i - \tilde{\mathbf{R}}_k|) \right] \right) \left. \right\} \times \\
&\times d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_I d\mathbf{r}_1(1) d\mathbf{r}_1(2) \dots d\mathbf{r}_i(j) \times \\
&\times d\mathbf{r}_i(j+1) \dots d\mathbf{r}_N(M-1) d\mathbf{r}_N(M) = \\
&= \lim_{M \rightarrow \infty} (\langle K_{vir} \rangle_c + \langle U \rangle_c), \quad (24)
\end{aligned}$$

где вириальный эстиматор кинетической энергии системы

$$\begin{aligned}
K_{vir} &\equiv \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left[\sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_i(j) \cdot \nabla \Phi_e(\mathbf{r}_i(j))) - \right. \right. \\
&\quad - \sum_{i < k=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_k(j)|} + \\
&\quad \left. \left. + \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^I |\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{R}_k| \frac{\partial u_{qe}(r)}{\partial r} \Big|_{r=|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{R}_k|} \right] + \right. \\
&\quad + \sum_{k=1}^I (\mathbf{R}_k, \nabla \Phi_q(\mathbf{R}_k)) + \\
&\quad \left. + \sum_{i < k=1}^I |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_k| \frac{\partial u_{qq}(r)}{\partial r} \Big|_{r=|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_k|} \right\}. \quad (25)
\end{aligned}$$

При написании выражения (25) использованы тождества

$$\frac{\partial}{\partial \beta} = \frac{1}{2\beta^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \beta^{1/2}},$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta^{1/2}} \Phi(\beta^{1/2} \tilde{\mathbf{r}}) = \beta^{-1/2} (\mathbf{r} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r})),$$

где $\nabla \Phi(\mathbf{r})$ обозначает вектор-градиент, а скобки — скалярное произведение.

Вириальный эстиматор кинетической энергии электронов получается вычитанием из (25) кинетической энергии классических частиц:

$$K_{vir}^e = K_{vir} - \frac{3}{2} I k_B T. \quad (26)$$

Поскольку вириальный эстиматор выражается через пространственные производные потенциальной энергии, переход к вириальному эстиматору в системах, ограниченных твердыми стенками, невозможен ввиду разрывности энергии на контакте со стенкой. С другой стороны, наличие пространственных ограничений является принципиальным условием устойчивости любой системы частиц при ненулевых температурах.

В соответствии с требованиями применимости вириального эстиматора будем рассматривать взаимодействие со стенками как одну из составляющих взаимодействий с непрерывным внешним полем:

$$\begin{aligned}
\Phi_e(\mathbf{r}) &= -e\varphi(\mathbf{r}) + W_e(\mathbf{r}), \\
\Phi_q(\mathbf{r}) &= q\varphi(\mathbf{r}) + W_q(\mathbf{r}), \quad (27)
\end{aligned}$$

где $\varphi(\mathbf{r})$ — потенциал внешнего электрического поля, а $W_e(\mathbf{r})$ и $W_q(\mathbf{r})$ — ограничивающие движение частиц в пространстве бесконечно глубокие, по сравнению с тепловой энергией $k_B T$, потенциальные ямы с «мягкими» стенками. Для унификации формы записи всех слагаемых в выражении (25) удобно представлять удерживающую потенциальную яму в форме комбинации центрально-симметричных полей силовых центров, локализованных в точках $\{\mathbf{a}_m\} = \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \dots$ и $\{\mathbf{b}_n\} = \mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3, \dots$:

$$W_e(\mathbf{r}) = \sum_m w_m^e (|\mathbf{r} - \mathbf{a}_m|),$$

$$W_q(\mathbf{R}) = \sum_n w_n^q (|\mathbf{R} - \mathbf{b}_n|).$$

Количество центров может быть конечным и бесконечным. После разложения внешнего поля в сумму центрально-симметричных полей и подстановки его в такой форме в (25) вириальный эстиматор приобретает вид

$$\begin{aligned}
 K_{vir} = & \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left[-e \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_i(j) \cdot \nabla \varphi(\mathbf{r}_i(j))) - \right. \right. \\
 & - \sum_{i < k=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_k(j)|} + \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^I |\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{R}_k| \times \\
 & \times \left. \left. \frac{\partial u_{qe}(r)}{\partial r} \Big|_{r=|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{R}_k|} \right] + q \sum_{k=1}^I (\mathbf{R}_k \cdot \nabla \varphi(\mathbf{R}_k)) + \right. \\
 & \left. + \sum_{i < k=1}^I |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_k| \frac{\partial u_{qq}(r)}{\partial r} \Big|_{r=|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_k|} \right\} + \\
 & + \frac{1}{2} \left(\sum_m \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_i(j) \cdot \nabla w_m^e (|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{a}_m|)) + \right. \\
 & \left. + \sum_n \sum_{k=1}^I (\mathbf{R}_k \cdot \nabla w_n^q (|\mathbf{R}_k - \mathbf{b}_n|)) \right). \quad (28)
 \end{aligned}$$

В частности, в отсутствие внешнего поля ($\varphi(\mathbf{r}) = \text{const}$) и в системе с кулоновским взаимодействием между частицами ($u_{qe}(r) = -qe/r$, $u_{qq}(r) = qq/r$) выражение (28) упрощается до

$$K_{vir} = -\frac{1}{2} U_{Coul} + \frac{1}{2} W. \quad (29)$$

Первый член представляет кулоновское взаимодействие частиц,

$$\begin{aligned}
 U_{Coul} = & \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left[\sum_{i < k=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_k(j)|} - \right. \\
 & \left. - \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^I \frac{qe}{|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{R}_k|} \right] + \sum_{i < k=1}^I \frac{qq}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_k|}, \quad (30)
 \end{aligned}$$

а второй,

$$\begin{aligned}
 W = & \sum_m \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N \left(\mathbf{r}_i(j) \cdot \nabla w_m^e (|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{a}_m|) + \right. \\
 & \left. + \sum_n \sum_{k=1}^I (\mathbf{R}_k \cdot \nabla w_n^q (|\mathbf{R}_k - \mathbf{b}_n|)) \right), \quad (31)
 \end{aligned}$$

— вклад, обусловленный взаимодействиями со стенками. Из (29) видно, что равенство между удвоенной кинетической и потенциальной энергиями квантовой равновесной системы кулоновских частиц, $2\langle K_{vir} \rangle_c = -\langle U_{Coul} \rangle_c$, выполняется только в отсутствие границ.

4. ДЕТАЛИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ПРОЦЕДУРЫ

Исследуется модельная квантовая точка, состоящая из N неразличимых взаимодействующих пере-

лятивистских электронов со спином $S = 1/2$ в трехмерной параболической потенциальной яме. Гамильтониан системы имеет вид [44, 45]

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N \frac{m_e \omega_0^2}{2} r_i^2 + \sum_{i < k}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|}, \quad (32)$$

где ω_0 — частота колебательного кванта, задающая жесткость стенок потенциальной ямы, $r_i = |\mathbf{r}_i|$, ∇_i^2 — оператор Лапласа, действующий на пространственные переменные \mathbf{r}_i волновой функции электронов, $A \equiv m_e \omega_0^2$ — жесткость стенок потенциальной ямы.

Равновесные средние рассчитывались методом Монте-Карло [46], численным усреднением в последовательности конфигураций виртуальных траекторий электронов $\{\mathbf{r}_i(j)\}$ и способов их сцепления $\{v_i\}$. Использовались марковские цепи длиной 10^{11} – 10^{12} шагов, охватывающие случайную выборку объемом до 5×10^{11} виртуальных траекторий. Тестовые вычисления проводились с различными числами вершин в диапазоне $10 \leq M \leq 1280$, при этом большая часть физически значимых расчетов выполнена в оптимальном режиме с $M = 320$. Расчет одного состояния занимал несколько десятков часов компьютерного времени.

Численно рассчитывались равновесная энергия, равновесные распределения по спиновым состояниям, средние значения спинового числа S . Энергия вычислялась усреднением эстиматора потенциальной

$$\begin{aligned}
 U = & \frac{1}{M} \times \\
 & \times \sum_{j=1}^M \left[\sum_{i=1}^N \frac{A}{2} r_i^2(j) + \sum_{i < k=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_k(j)|} \right] \quad (33)
 \end{aligned}$$

и следующих эстиматоров кинетической энергии: основного

$$\begin{aligned}
 K_{th}^e = & \frac{3}{2} MN k_B T - \\
 & - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \{v_i\} \frac{m_e M}{2\beta^2 \hbar^2} (\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_i(j+1))^2, \quad (34)
 \end{aligned}$$

вириального, в соответствии с (13), (18),

$$\begin{aligned}
 K_{vir}^e = & \frac{1}{M} \times \\
 & \times \sum_{j=1}^M \left[\sum_{i=1}^N \frac{A}{2} r_i^2(j) - \sum_{i < k=1}^N \frac{e^2}{2|\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_k(j)|} \right] \quad (35)
 \end{aligned}$$

и корреляционного

$$K_{cor}^e = - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \{v_i\} \frac{m_e M}{2\beta^2 \hbar^2} \times \\ \times ((\mathbf{r}_i(j) - \mathbf{r}_i(j-1)) \cdot (\mathbf{r}_i(j+1) - \mathbf{r}_i(j))). \quad (36)$$

Распределение $\Gamma_{\{v_i\}}(S) = (2S+1)\omega_S(\{v_i\})/\omega(\{v_i\})$ по спиновым состояниям S для заданного разбиения $\{v_i\}$ траекторий на циклы усреднялось по конфигурациям и различным способам сцепления траекторий, чтобы получить равновесное распределение по спиновым состояниям $\Gamma(S) = \langle \Gamma_{\{v_i\}}(S) \rangle_c$; аналогично усреднялось и само спиновое число S . Комбинаторные весовые коэффициенты для $N \leq 10$ заранее рассчитывались прямым перебором на компьютере всех перестановок, содержащихся в схемах Юнга. В работах [19, 22, 40] приведены значения этих коэффициентов для $N = 2$, в [22] — для $N = 3$, в [33] — для $N = 5$, а в табл. 1, 2 данной работы представлены коэффициенты, рассчитанные для $N = 4$ и для $N = 6$. В работе [35] опубликована таблица этих коэффициентов для $N = 10$ и развит принципиально точный формализм, позволяющий вообще снять ограничения по N . В последующих работах он апробирован на расчетах для плотной водородной плазмы [26, 34, 36, 41], плотной гелиевой плазмы [42, 47], плотного электронного газа [39, 48, 49] и на исследовании общих закономерностей формирования спиновых состояний систем неразличимых фермионов [50]. Флуктуационные погрешности, обусловленные усреднением в конечных выборках, оценивались по флуктуациям частичных средних.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

5.1. Эстиматоры энергии и оптимальная степень дискретизации траекторий

В разреженной плазме линейные размеры области квантовомеханической пространственной локализации электронов могут в первом приближении оцениваться тепловой длиной волны де Бройля $\Lambda = h/(2\pi m_e k_B T)^{1/2}$. В условиях сильных пространственных корреляций такой критерий неприемлем, так как он не учитывает корреляции в относительном положении отдельных фрагментов взаимодействующих траекторий. Критерием вырождения здесь служит вероятность сцепления траекторий в циклы, которая, в свою очередь, отражается на величине среднего статистического веса конфигураций $\langle \text{sign}(\rho) \rangle_+$. Значение $\langle \text{sign}(\rho) \rangle_+ = 1$ в последнем столбце табл. 3 означает, что независимо от

степени дискретизации M в подавляющей части микросостояний электронные траектории оставались расцепленными, что соответствует отсутствию вырождения.

Корректность вычисления энергии является основным критерием корректности вычислительной процедуры в целом. Из данных, представленных во втором и третьем столбцах табл. 3, видно, что с наращиванием количества звеньев M в траекториях равновесные средние кинетической энергии, вычисленные через основной (термодинамический) $\langle K_{th}^e \rangle_c$ и вириальный $\langle K_{vir}^e \rangle_c$ эстиматоры быстро выходят на предельное значение. Расчет в этих условиях можно проводить уже с $M = 40$, со средней длиной звена в траекториях примерно 0.7 нм. Увеличение M выше этого значения сопровождается ростом флуктуационных погрешностей основного эстиматора. Погрешность же вириального эстиматора не меняется. Таким образом, в условиях отсутствия вырождения возможен расчет как с основным, так и с вириальным эстиматором, однако с ростом M эффективность основного эстиматора понижается. Для корреляционного эстиматора $\langle K_{cor}^e \rangle_c$ (третий столбец табл. 3) сходимость по M существенно хуже, и его применение здесь возможно только при $M > 160$. При этом флуктуационная погрешность корреляционного эстиматора ведет себя так же неблагоприятно, как и погрешность основного эстиматора. Применение флуктуационного эстиматора оправдано здесь только в качестве независимого способа расчета в целях контроля.

В условиях на порядок более жесткого удерживающего поля (табл. 4) средний статистический вес конфигураций уменьшается вдвое до $\langle \text{sign}(\rho) \rangle_+ = 0.41-0.46$. Такой режим следует отнести к умеренному вырождению. Выход на предельное значение для основного и вириального эстиматоров происходит здесь при $M = 160$, а для корреляционного — только для $M > 640$. С наращиванием M темпы роста флуктуационной погрешности основного и корреляционного эстиматоров соизмеримы. Таким образом, корректное описание вырожденных состояний требует выполнять расчеты с большими, но практически достижимыми значениями степени дискретизации траекторий. Из-за повышенных требований к величине M вириальный эстиматор здесь более предпочтителен.

Дальнейшее сжатие квантовой точки сопровождается переходом к сильновырожденным состояниям электронов, резкому уменьшению среднего статистического веса конфигураций вплоть до значений $\langle \text{sign}(\rho) \rangle_+ < 0.01$ при $A = 4.0$ эВ/нм², что вле-

Таблица 1. Таблица нормированных весовых коэффициентов $\tilde{\omega}(\{v_i\}) = \omega(\{v_i\})/\omega(N, 0, \dots, 0)$ для $N = 4$ фермионов со спином 1/2, содержащая комбинаторные веса всех способов разбиения нумерованных фейнмановских траекторий на циклы $\{v_i\}$, а также $\Gamma_{\{v_i\}}(S)$ — относительные вклады различных спиновых состояний S в $\tilde{\omega}(\{v_i\})$

$\{v_i\}$	$\Gamma_{\{v_i\}}(S)$			$\tilde{\omega}(\{v_i\})$
	$S = 0$	$S = 1$	$S = 2$	
(0,0,0,1)	0.0	-0.25	1.25	-2.66667
(1,0,1,0)	-0.111111	0.0	1.111111	4.0
(0,2,0,0)	0.2	-0.2	1.0	1.66667
(2,1,0,0)	0.0	0.166667	0.833333	-4.0
(4,0,0,0)	0.111111	0.333333	0.555556	1.0

Таблица 2. То же, что в табл. 1, для $N = 6$

$\{v_i\}$	$\Gamma_{\{v_i\}}(S)$				$\tilde{\omega}(\{v_i\})$
	$S = 0$	$S = 1$	$S = 2$	$S = 3$	
(0,0,0,0,0,1)	0.0	0.0	-0.167778	1.167778	-45.0
(1,0,0,0,1,0)	0.0	-0.05	0.0	1.05	60.0
(0,1,0,1,0,0)	-0.032609	0.054348	-0.163044	1.141304	34.5
(2,0,0,1,0,0)	-0.026786	-0.044643	0.133929	0.937500	-42.0
(0,0,2,0,0,0)	0.062500	0.0	-0.156250	1.093750	16.0
(1,1,1,0,0,0)	0.027778	0.0	0.0	0.972222	-54.0
(3,0,1,0,0,0)	-0.022727	0.0	0.227273	0.795455	22.0
(0,3,0,0,0,0)	-0.093750	0.156250	-0.156250	1.093750	-6.0
(2,2,0,0,0,0)	0.023438	0.039063	0.117188	0.820313	24.0
(4,1,0,0,0,0)	0.017857	0.089286	0.267857	0.625000	-10.5
(6,0,0,0,0,0)	0.062500	0.187500	0.312500	0.437500	1.0

чет увеличение флуктуационных погрешностей всех рассчитываемых равновесных средних. В наиболее трудных для расчета условиях, представленных в табл. 5, 6, вычисления возможны только с вириальным эстиматором с $M = 320-640$.

Из сопоставления данных, приведенных в табл. 3-6, следует заключить, что рассчитываемое равновесное значение спинового числа $\langle S \rangle_c$ более устойчиво к вариациям M , чем кинетическая энергия. При тех значениях M , которые достаточны для корректного расчета кинетической энергии, получение достоверных значений $\langle S \rangle_c$ и, значит,

корректное описание спиновых состояний обеспечены. С учетом этих результатов физически значимые расчеты выполнены для $M = 320-640$, а приводимые данные по кинетической энергии получены на основе вириального эстиматора (29).

5.2. Спин

Каждому микросостоянию в пространстве блужданий $(\{v_i\}, \{\mathbf{r}_i(j)\})$ отвечает определенное распределение по спиновым состояниям $\Gamma_{\{v_i\}}(S)$. Усреднением текущих распределений $\Gamma_{\{v_i\}}(S)$ по микро-

Таблица 3. Результаты численного расчета равновесной кинетической энергии с помощью различных эstimаторов и равновесной потенциальной энергии $\langle U \rangle_c$, а также вычисления равновесного среднего спинового числа $\langle S \rangle_c$ и среднего статистического веса конфигураций $\langle \text{sign}(\rho) \rangle_+$ в системе $N = 3$ электронов при температуре $T = 300$ К в трехмерной параболической сферически-симметричной потенциальной яме $Ar^2/2$ (квантовой точке) с коэффициентом жесткости удерживающего потенциала $A = 0.06$ эВ/нм² с различными числами звеньев M в виртуальных траекториях электронов. Энергия приведена в электронвольтах. Флуктуационная погрешность энергии оценена через флуктуации частичных средних. Расчет в случайных выборках объемом в $M \times 10^8$ марковских шагов

M	$\langle K_{th}^e \rangle_c$	$\langle K_{vir}^e \rangle_c$	$\langle K_{cor}^e \rangle_c$	$\langle U \rangle_c$	$\langle S \rangle_c$	$\langle \text{sign}(\rho) \rangle_+$
10	0.1692 ± 0.0001	0.1694 ± 0.0001	0.1374 ± 0.0001	1.6905 ± 0.0001	1.167	1.00
20	0.1706 ± 0.0001	0.1708 ± 0.0001	0.1525 ± 0.0001	1.6917 ± 0.0001	1.167	1.00
40	0.1710 ± 0.0003	0.1712 ± 0.0001	0.1610 ± 0.0003	1.6922 ± 0.0001	1.167	1.00
80	0.1734 ± 0.0006	0.1712 ± 0.0001	0.1661 ± 0.0005	1.6922 ± 0.0001	1.167	1.00
160	0.175 ± 0.001	0.1713 ± 0.0001	0.169 ± 0.001	1.6922 ± 0.0001	1.167	1.00
320	0.169 ± 0.001	0.1714 ± 0.0001	0.169 ± 0.001	1.6922 ± 0.0002	1.167	1.00
640	0.169 ± 0.004	0.1713 ± 0.0001	0.167 ± 0.003	1.6922 ± 0.0002	1.167	1.00
1280	0.175 ± 0.004	0.1711 ± 0.0001	0.180 ± 0.003	1.6922 ± 0.0001	1.167	1.00

Таблица 4. То же, что в табл. 3, для $A = 0.6$ эВ/нм²

M	$\langle K_{th}^e \rangle_c$	$\langle K_{vir}^e \rangle_c$	$\langle K_{cor}^e \rangle_c$	$\langle K \rangle_c$	$\langle S \rangle_c$	$\langle \text{sign}(\rho) \rangle_+$
10	0.3877 ± 0.0002	0.3872 ± 0.0002	0.1896 ± 0.0001	3.6899 ± 0.0002	1.093	0.41
20	0.4175 ± 0.0003	0.4173 ± 0.0002	0.2774 ± 0.0002	3.7209 ± 0.0002	1.107	0.44
40	0.4286 ± 0.0005	0.4277 ± 0.0003	0.3445 ± 0.0004	3.7309 ± 0.0002	1.110	0.46
80	0.434 ± 0.001	0.4307 ± 0.0003	0.3848 ± 0.0006	3.7336 ± 0.0003	1.113	0.46
160	0.436 ± 0.001	0.4316 ± 0.0005	0.4071 ± 0.0007	3.7345 ± 0.0003	1.113	0.46
320	0.431 ± 0.001	0.4321 ± 0.0005	0.418 ± 0.002	3.7346 ± 0.0003	1.113	0.46
640	0.436 ± 0.002	0.4321 ± 0.0005	0.428 ± 0.002	3.7350 ± 0.0003	1.113	0.46
1280	0.433 ± 0.004	0.4315 ± 0.0004	0.434 ± 0.003	3.7347 ± 0.0004	1.113	0.46

состояниям получается распределение по спиновым состояниям для данного смешанного квантового состояния:

$$\Gamma(S) \equiv \langle \Gamma_{\{v_i\}}(S) \rangle_c.$$

Равновесное среднее значение спинового числа получается из $\Gamma(S)$ как

$$\langle S \rangle_c = \sum_{S=0,1/2}^{N/2} S \times \Gamma(S).$$

При описании методами вторичного квантования, как правило, предполагается, что самой низкой энергией обладает квантовое состояние с минимальным спином. Такое ожидание основывается на одноэлектронном приближении, исходящем из того, что полная волновая функция ансамбля частиц распадается на линейную комбинацию произведений одночастичных волновых функций. В такой модели одноэлектронные уровни заполняются в соответствии с принципом Паули последовательно снизу вверх, при

Таблица 5. То же, что в табл. 3, для $A = 2.0$ эВ/нм²

M	$\langle K_{th}^e \rangle_c$	$\langle K_{vir}^e \rangle_c$	$\langle K_{cor}^e \rangle_c$	$\langle U \rangle_c$	$\langle S \rangle_c$	$\langle \text{sign}(\rho) \rangle_+$
10	0.593 ± 0.004	0.589 ± 0.004	0.216 ± 0.001	5.519 ± 0.002	0.76	0.02
20	0.710 ± 0.003	0.709 ± 0.003	0.368 ± 0.003	5.634 ± 0.002	0.81	0.03
40	0.765 ± 0.003	0.757 ± 0.004	0.523 ± 0.002	5.684 ± 0.003	0.82	0.04
80	0.782 ± 0.005	0.771 ± 0.003	0.638 ± 0.003	5.696 ± 0.002	0.86	0.04
160	0.775 ± 0.005	0.786 ± 0.004	0.710 ± 0.006	5.703 ± 0.001	0.87	0.04
320	0.80 ± 0.01	0.782 ± 0.004	0.75 ± 0.01	5.702 ± 0.003	0.88	0.04
640	0.78 ± 0.01	0.787 ± 0.004	0.75 ± 0.01	5.707 ± 0.004	0.86	0.04
1280	0.79 ± 0.02	0.785 ± 0.004	0.76 ± 0.01	5.706 ± 0.003	0.90	0.04

Таблица 6. То же, что в табл. 3, для $A = 4.0$ эВ/нм²

M	$\langle K_{th}^e \rangle_c$	$\langle K_{vir}^e \rangle_c$	$\langle K_{cor}^e \rangle_c$	$\langle U \rangle_c$	$\langle S \rangle_c$	$\langle \text{sign}(\rho) \rangle_+$
10	0.7 ± 0.6	0.8 ± 0.9	0.2 ± 0.3	6.9 ± 0.9	0.75	< 0.01
20	0.9 ± 0.1	0.95 ± 0.05	0.36 ± 0.02	7.13 ± 0.03	0.66	< 0.01
40	1.0 ± 0.1	1.00 ± 0.05	0.60 ± 0.03	7.24 ± 0.02	0.69	< 0.01
80	1.09 ± 0.07	1.10 ± 0.05	0.79 ± 0.03	7.28 ± 0.02	0.59	< 0.01
160	1.04 ± 0.07	1.09 ± 0.03	0.93 ± 0.03	7.29 ± 0.02	0.78	< 0.01
320	1.2 ± 0.1	1.07 ± 0.03	1.01 ± 0.07	7.28 ± 0.02	0.73	< 0.01
640	1.1 ± 0.1	1.07 ± 0.03	0.9 ± 0.1	7.29 ± 0.02	0.71	< 0.01
1280	1.1 ± 0.3	1.14 ± 0.03	1.0 ± 0.3	7.30 ± 0.02	0.75	< 0.01

этом на каждом уровне располагаются по два электрона со «спаренными» спинами, обеспечивая таким образом в основном квантовом состоянии минимальный спин системы.

В квантовых точках в условиях сильных межчастичных корреляций одноэлектронное приближение неприменимо. В этих условиях спектр энергетических уровней системы не является комбинацией энергетических уровней отдельных электронов, и картина последовательного заполнения одночастичных уровней парами электронов со «спаренными» спинами теряет смысл. Нет оснований ожидать, что в такой системе переход в основное квантовое состояние должен с необходимостью сопровождаться уменьшением спина до минимального значения. Отсутствие такого универсального правила подтверждается и ненулевыми спинами электронных обо-

лочек атомов, которые могут иметь в основном состоянии высокие значения, особенно для элементов середины Таблицы химических элементов.

На рис. 1 представлена рассчитанная методом интегралов по траекториям эволюция распределений по спиновым состояниям, $\Gamma(S)$, и равновесного среднего значения спинового числа, $\langle S \rangle_c$, с вариациями размеров квантовых точек. В системе двух электронов (рис. 1а) сжатие квантовой точки (движение вправо вдоль оси абсцисс) сопровождается монотонным уменьшением спина до предельного нулевого значения (кривая 1), что в терминах одноэлектронного подхода следует классифицировать как «спаривание» спинов. В системе трех электронов (рис. 1б) при сжатии квантовой точки спин тоже выходит на свое минимальное значение $\langle S \rangle_c \rightarrow 1/2$; при этом $\Gamma(1/2) \rightarrow 1$, а $\Gamma(3/2) \rightarrow 0$. Таким образом, и в этом

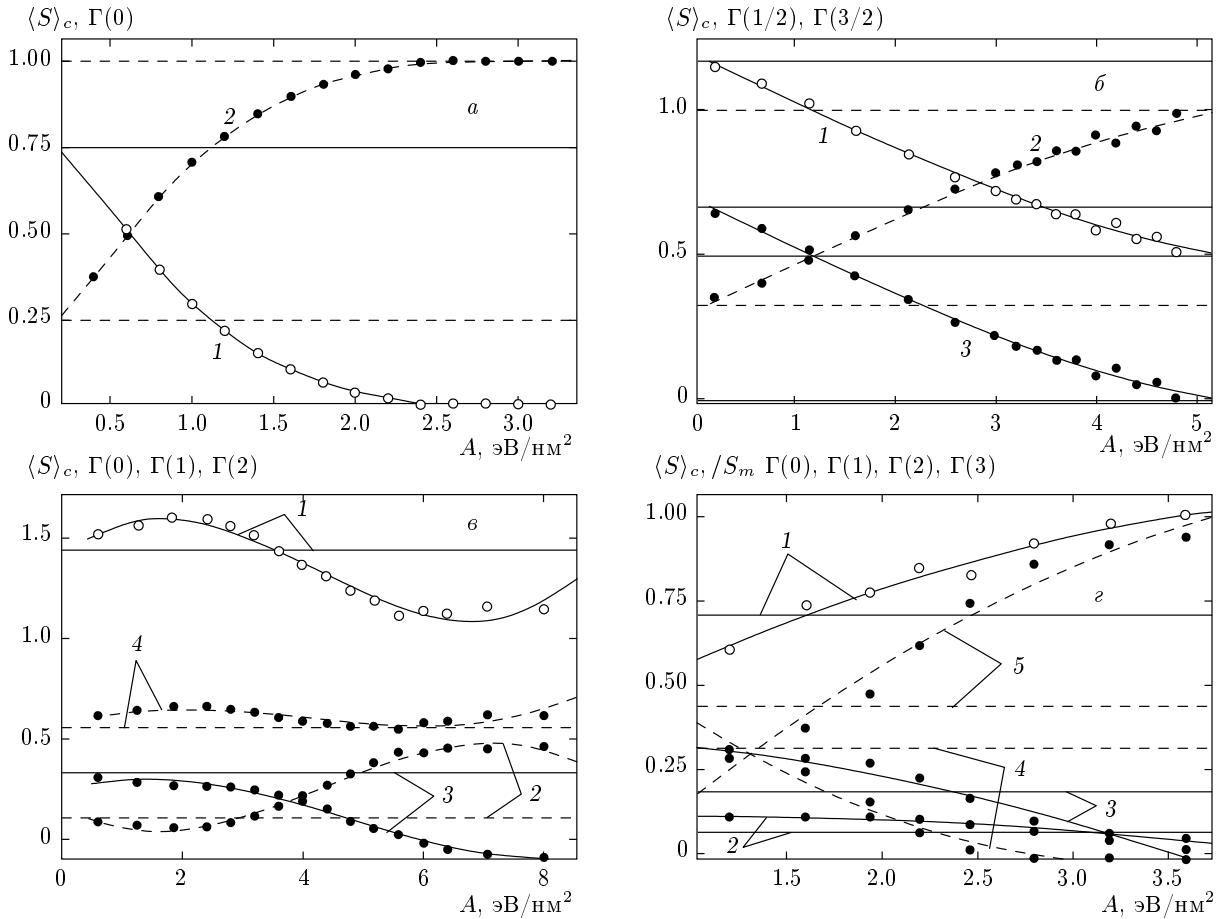


Рис. 1. Равновесное среднее значение спинового числа S оператора квадрата спина (кривые 1) и вероятности $\Gamma(S)$ (кривые 2–5) различных спиновых состояний для взаимодействующих неразличимых электронов в сферически-симметричных модельных квантовых точках в зависимости от коэффициента жесткости удерживающего параболического потенциала: *a* – два электрона (2 – $\Gamma(0)$, $M = 640$); *б* – три электрона (2 – $\Gamma(1/2)$, 3 – $\Gamma(3/2)$, $M = 320$); *в* – четыре электрона (2 – $\Gamma(0)$, 3 – $\Gamma(1)$, 4 – $\Gamma(2)$, $M = 320$); *г* – 1 – равновесное среднее приведенное значение спинового числа $\langle s \rangle_c = \langle S \rangle_c / S_m$, где $S_m = N/2 = 3$ – его максимальное значение, 2 – $\Gamma(0)$, 3 – $\Gamma(1)$, 4 – $\Gamma(2)$, 5 – $\Gamma(3)$, $M = 320$. Прямыми горизонтальными линиями отмечены предельные значения $\langle S \rangle_c$ и $\Gamma(S)$ в состояниях со «спаренными» спинами $S = 0$, $\Gamma(0) = 1$ (*a*) и $S = 1/2$, $\Gamma(1/2) = 1$, $\Gamma(3/2) = 0$ (*б*), а также в смешанном квантовом состоянии в отсутствие пространственных корреляций между электронами ($A \rightarrow 0$) $S = 3/4$, $\Gamma(0) = 1/4$ (*a*), $S = 7/6$, $\Gamma(1/2) = 1/3$, $\Gamma(3/2) = 2/3$ (*б*), $S = 13/9$, $\Gamma(0) = 1/9$, $\Gamma(1) = 1/3$ и $\Gamma(2) = 5/9$ (*в*) и $S = 17/24$, $\Gamma(0) = 1/16$, $\Gamma(1) = 3/16$, $\Gamma(2) = 5/16$, $\Gamma(3) = 7/16$ (*г*). Температура 300 К

случае качественно картина выглядит, как «спаривание» спинов двух из трех электронов, при этом спин выходит на свое минимальное значение, хотя и отличное от нуля. При расширении квантовой точки ($A \rightarrow 0$) вероятности спиновых состояний выходят на свои предельные значения, пропорциональные степени их вырождения $(2S + 1)$ по проекции спина,

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \rightarrow \frac{1}{3}, \quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \rightarrow \frac{2}{3},$$

а спиновое число приближается к своему предельно-

му значению

$$\langle S \rangle_c \rightarrow \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{3}{2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{7}{6}.$$

Этот режим отвечает полностью нескоррелированному движению электронов и безразличному распределению по спиновым состояниям.

Модель «спаривающихся» одноэлектронных спинов перестает давать правильные результаты в системах четырех и более электронов. Спин системы, состоящей из четырех электронов (рис. 1*в*), при сжа-

тии квантовой точки меняется немонотонно, сначала увеличиваясь относительно своего предельного значения, соответствующего полностью нескоррелированному движению, а затем становится меньше его, но не выходит на нулевое значение. Вероятность состояния с самым высоким значением спина, $\Gamma(2)$, при сжатии квантовой точки не только не уменьшается, но остается выше своего предельного значения $5/9$, отвечающего нескоррелированному движению. Причина этого явления становится ясной из анализа величин комбинаторных весовых коэффициентов различных способов сцепления в циклы, получающихся сортировкой всех перестановок, содержащихся в операторе симметрии Юнга (см. табл. 1). При расширении квантовой точки вероятность распада на короткие циклы увеличивается. Предельно разреженному состоянию отвечает последняя строка табл. 1. Наоборот, при сжатии системы длинные циклы получают преимущество. Первая строка табл. 1 соответствует организации системы в единый цикл, состоящий из четырех траекторий. В таком способе сцепления траекторий комбинаторный весовой коэффициент состояния с самым высоким значением спина ($S = 2$) максимален и составляет 1.25, в то время как состоянию $S = 1$ отвечает коэффициент -0.25 , а в состоянии $S = 0$ этот способ сцепления вообще не дает вклада. В то же время образование длинных циклов при уплотнении системы сдерживается кулоновским отталкиванием между траекториями. Отталкивание усиливается при сжатии квантовой точки, делая судьбу длинных циклов трудно предсказуемой. Таким образом, спиновое состояние системы является результатом конкуренции встречных факторов, способствующих образованию и распаду длинных циклов. Баланс этих факторов зависит как от конфигурации и жесткости внешних полей, удерживающих электроны, так и от температуры.

Вероятно, в системах с небольшими числами сильно взаимодействующих квантовых частиц не существует каких-либо универсальных правил, которым подчиняется поведение спина при сжатии. Данные, полученные для системы шести электронов (рис. 1г), подтверждают это ожидание. Спин системы монотонно растет при сжатии квантовой точки вместе со статистическим весом состояния, отвечающего максимальному спину $S = 3$. Физическая причина роста та же, что и в предыдущем примере, в чем можно убедиться, исходя из распределения весовых комбинаторных коэффициентов, отвечающих состоянию с самым длинным циклом, в первой строке табл. 2.

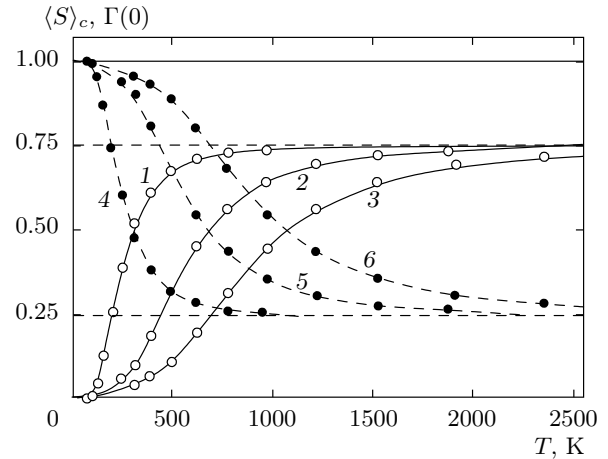


Рис. 2. То же, что на рис. 1а: кривые 1–3 — $\langle S \rangle_c$, 4–6 — $\Gamma(0)$ как функции температуры для двух электронов в сферически-симметричных модельных квантовых точках с различными значениями коэффициента жесткости A удерживающего поля: 1, 4 — 0.6 эВ/нм^2 ; 2, 5 — 2.0 эВ/нм^2 ; 3, 6 — 4.0 эВ/нм^2 . $M = 640$

5.3. Обмен и спин в условиях термических флуктуаций

С повышением температуры средняя длина электронных траекторий уменьшается и вероятность их сцепления в циклы падает. В то же время с повышением температуры следует ожидать и развитие встречного эффекта, заключающегося в ослаблении кулоновских корреляций, которые препятствуют объединению в циклы. Следует, однако, учитывать, что ослабление кулоновских корреляций с ростом температуры в квантовой системе может развиваться медленнее, чем в классических системах. Это происходит из-за сужения области квантовомеханической неопределенности в положении квантовой частицы при нагревании, сопровождающегося пространственной консолидацией ее заряда. Поведение спина электронов в квантовой точке при нагревании — результат комбинации различных разнонаправленных факторов.

В простейшем случае двух электронов (рис. 2) спин системы (кривые 1–3) при охлаждении монотонно уменьшается к нулю, т. е., ведет себя так же, как при изотермическом сжатии квантовой точки. «Спаривание» спинов происходит здесь раньше в квантовых точках с меньшими пространственными размерами. В системе трех электронов поведение спина более сложное, чем при изотермическом сжатии. При охлаждении спин сначала уменьшается,

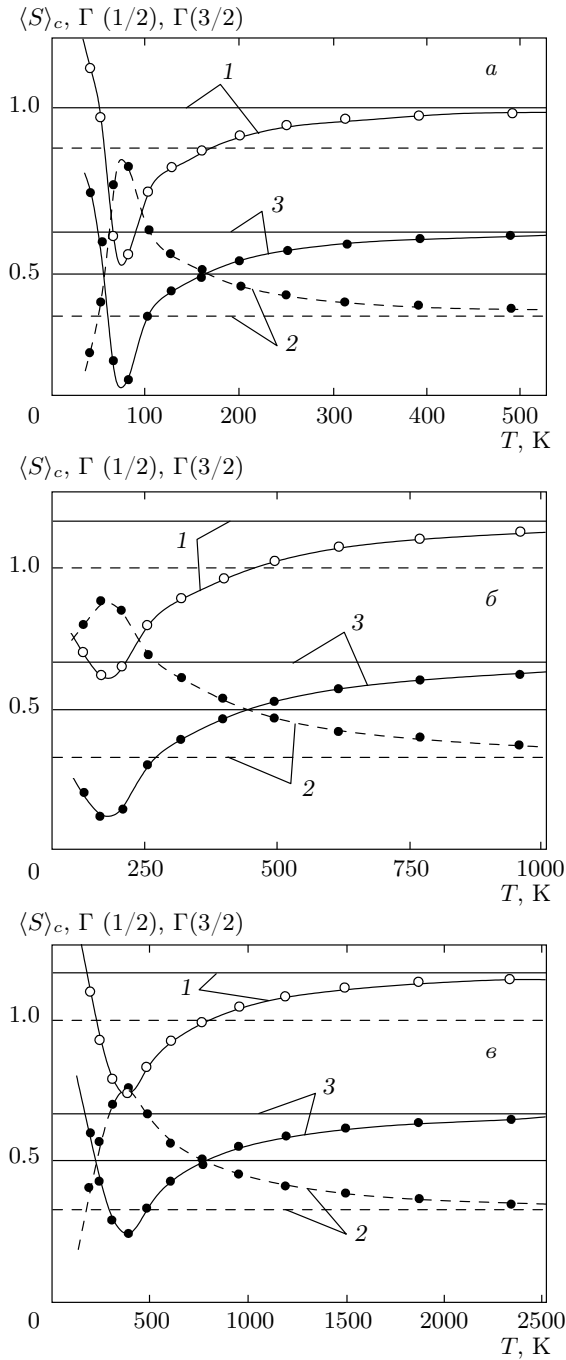


Рис. 3. То же, что на рис. 1б, как функции температуры, для трех электронов в квантовых точках с различными значениями коэффициента жесткости A : $a - 0.6$ эВ/нм²; $б - 2.0$ эВ/нм²; $в - 4.0$ эВ/нм². $M = 640$

приближаясь к своему минимальному возможному значению $S = 1/2$, но затем снова растет (рис. 3а). Немонотонный ход зависимости спина системы трех электронов от температуры воспроизводится в квантовых точках различных размеров (рис. 3б,в) и является, по всей видимости, результатом наложения указанных выше встречных факторов.

Сложный ход зависимости спина от температуры воспроизводится и в системе четырех электронов (рис. 4). Хотя вероятность $\Gamma(1)$ (кривая 3) при понижении температуры монотонно приближается к нулевому значению, а вероятность $\Gamma(0)$ (кривая 2) растет, картину «спаривающихся» спинов нарушают высокие значения $\Gamma(3)$ (кривая 4). При сжатии квантовой точки роль кулоновских корреляций высоких порядков и их влияние на распределение по размерам циклов усиливаются, а ход зависимостей вероятностей различных спиновых состояний в области низких температур становится еще более сложным (рис. 4в).

5.4. Спиновая парамагнитная восприимчивость

Асимптотика равновесного среднего значения проекции спинового магнитного момента системы на направление внешнего магнитного поля \mathbf{H} в смешанном квантовом состоянии, в ведущем по H порядке имеет вид

$$\begin{aligned} \langle \mu_H \rangle_c \Big|_{H \rightarrow 0} &= -\frac{e\hbar}{m_e} \sum_{S=1,1/2}^{N/2} \Gamma(S) \left[\frac{1}{2S+1} \times \right. \\ &\times \left. \sum_{M_\Sigma=-S}^{M_\Sigma=S} M_\Sigma \exp\left(-\frac{e\hbar}{m_e} \frac{M_\Sigma \mu_0 H}{k_B T}\right) \right] \Big|_{H \rightarrow 0} = \\ &= \frac{\mu_0 e^2 \hbar^2}{m_e^2 k_B T} \sum_{S=1,1/2}^{N/2} \Gamma(S) \langle M_\Sigma^2 \rangle_S H, \quad (37) \end{aligned}$$

где

$$\langle M_\Sigma^2 \rangle_S = \left(\frac{2}{2S+1} \sum_{M_\Sigma=1,1/2}^{M_\Sigma=S} M_\Sigma^2 \right) \quad (38)$$

— средний квадрат квантового числа M_Σ в спиновом состоянии S при $H = 0$, $-e\hbar/m_e$ — спиновое гиромангнитное отношение, а μ_0 — магнитная постоянная. Начальная ($H \rightarrow 0$) спиновая магнитная восприимчивость, в согласии с общей флуктуационной

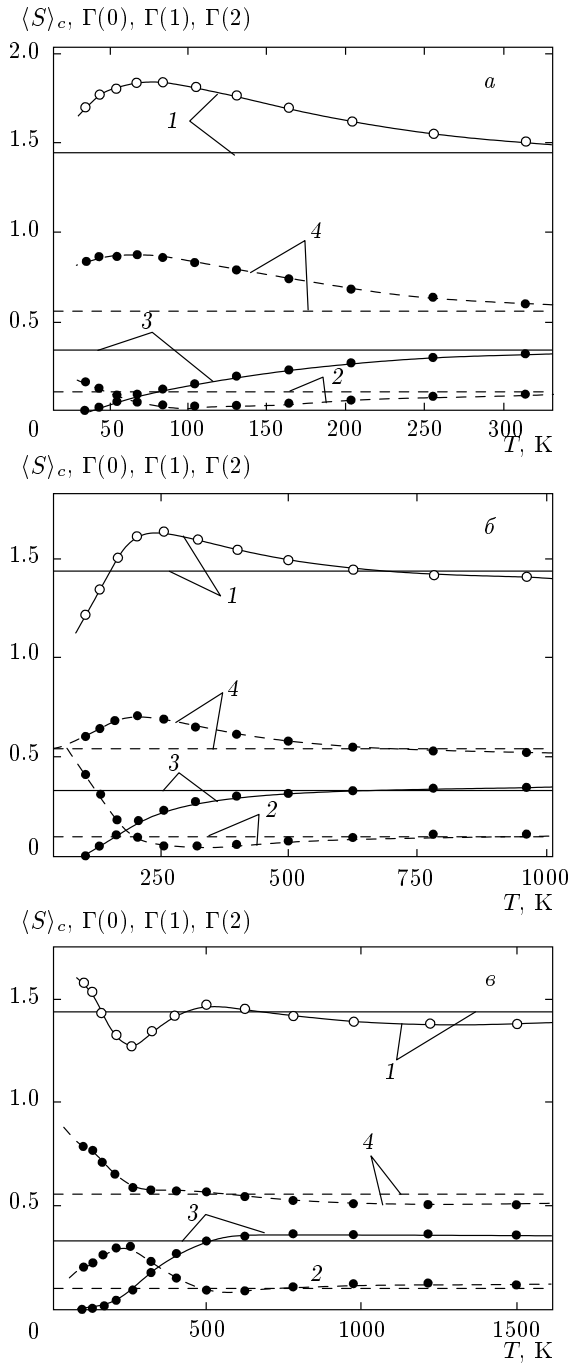


Рис. 4. То же, что на рис. 1в, как функции температуры, для четырех электронов в квантовых точках с различными значениями коэффициента жесткости A : $a - 0.6 \text{ эВ/нм}^2$; $б - 2.0 \text{ эВ/нм}^2$; $в - 4.0 \text{ эВ/нм}^2$. $M = 640$

теоремой, выражается через средний квадрат магнитного момента:

$$\kappa(N) = \left. \frac{\partial \langle \mu_H \rangle_c}{\partial H} \right|_{H=0} = \frac{\mu_0 e^2 \hbar^2}{m_e^2 k_B T} \times \sum_{S=1,1/2}^{N/2} \Gamma(S) \langle M_\Sigma^2 \rangle_S = \frac{\langle \mu_H^2 \rangle_c}{k_B T}, \quad (39)$$

где $\mu_H = -e\hbar M_\Sigma / m_e$ — собственное значение оператора проекции магнитного момента на направление поля \mathbf{H} .

Асимптотика выражения (38) в макроскопическом пределе $S \rightarrow \infty$ имеет вид $\langle M_\Sigma^2 \rangle_S \sim S^2/3$. Подставляя это выражение в (39) и учитывая, что $\hbar^2 S^2$ является асимптотикой собственного значения оператора квадрата спина $P_S^2 = \hbar^2 S(S+1)$, убеждаемся, что в макроскопическом пределе $N \rightarrow \infty$ формула (39) имеет классическую асимптотику [51]:

$$\kappa(N) \sim \frac{\mu_0 e^2}{m_e^2 k_B T} \sum_{S=1,1/2}^{N/2} \Gamma(S) \frac{P_S^2}{3} = \mu_0 \frac{\langle \mu^2 \rangle_c}{3 k_B T}, \quad (40)$$

в которой $\mu = -eP_S / m_e$ — модуль спинового магнитного момента системы.

Как видно из предпоследнего выражения в (39), спиновая магнитная восприимчивость системы электронов является линейным функционалом распределения по спиновым состояниям $\Gamma(S)$ с универсальными постоянными коэффициентами

$$\begin{aligned} \langle M_\Sigma^2 \rangle_0 &= 0, & \langle M_\Sigma^2 \rangle_{1/2} &= 1/4, & \langle M_\Sigma^2 \rangle_1 &= 2/3, \\ \langle M_\Sigma^2 \rangle_{3/2} &= 5/4, & \langle M_\Sigma^2 \rangle_2 &= 2, \\ \langle M_\Sigma^2 \rangle_{5/2} &= 35/12, & \langle M_\Sigma^2 \rangle_3 &= 4, \dots \end{aligned}$$

В простейшем случае одного электрона

$$\kappa(1) = \frac{\mu_0 e^2 \hbar^2}{4 m_e^2 k_B T}. \quad (41)$$

Для двух электронов $\langle S \rangle_c = \Gamma(0) \times 0 + \Gamma(1) \times 1 = \Gamma(1)$. Поэтому магнитная восприимчивость пропорциональна здесь равновесному значению спинового числа:

$$\kappa(2) = \frac{2 \mu_0 e^2 \hbar^2}{3 m_e^2 k_B T} \langle S \rangle_c. \quad (42)$$

Для трех, четырех и шести электронов соответственно имеем

$$\kappa(3) = \frac{\mu_0 e^2 \hbar^2}{m_e^2 k_B T} \left[\frac{1}{4} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{5}{4} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \right], \quad (43)$$

$$\kappa(4) = \frac{\mu_0 e^2 \hbar^2}{m_e^2 k_B T} \left[\frac{2}{3} \Gamma(1) + 2 \Gamma(2) \right], \quad (44)$$

$$\kappa(6) = \frac{\mu_0 e^2 \hbar^2}{m_e^2 k_B T} \left[\frac{2}{3} \Gamma(1) + 2 \Gamma(2) + 4 \Gamma(3) \right]. \quad (45)$$

Из (41)–(45) видно, что магнитная восприимчивость неразличимых частиц в общем случае ведет себя по N нелинейно. Аддитивность коллективной восприимчивости в малой системе неразличимых частиц отсутствует и в высокотемпературном пределе. Действительно, поскольку при $T \rightarrow \infty$ в системе двух электронов $\langle S \rangle_c \rightarrow 3/4$, высокотемпературная асимптотика выражения (42) имеет вид

$$\kappa(2) \sim \frac{\mu_0 e^2 \hbar^2}{2m_e^2 k_B T} = 2\kappa(1).$$

Однако в системе трех электронов при $T \rightarrow \infty$ вероятности $\Gamma(1/2) \rightarrow 1/3$, $\Gamma(3/2) \rightarrow 2/3$ и высокотемпературная асимптотика магнитной восприимчивости имеет вид

$$\kappa(3) \sim \frac{11}{12} \frac{\mu_0 e^2 \hbar^2}{m_e^2 k_B T} \neq 3\kappa(1).$$

Аналогично,

$$\kappa(4) \sim \frac{4}{3} \frac{\mu_0 e^2 \hbar^2}{m_e^2 k_B T} \neq 4\kappa(1),$$

$$\kappa(6) \sim \frac{5}{2} \frac{\mu_0 e^2 \hbar^2}{m_e^2 k_B T} \neq 6\kappa(1).$$

Аддитивность имеет место только в макроскопическом пределе (40).

Наличие температуры в знаменателях выражений (42)–(45) обеспечивает при охлаждении системы рост ее спиновой магнитной восприимчивости, однако в случае одновременного достаточно быстрого убывания величины $\Gamma(S)$ для всех состояний с $S \neq 0$, т.е., роста $\Gamma(0)$ и уменьшения $\langle S \rangle_c$, можно после прохождения максимального значения восприимчивости ожидать ее падение. Таким образом, наличие максимума на температурной зависимости магнитной восприимчивости зависит от того, будет ли спин системы сохранять конечные значения или уменьшаться до нуля при $T \rightarrow 0$.

На рис. 5 представлены результаты численного расчета методом интегралов по траекториям спиновой парамагнитной восприимчивости для одного и двух электронов в параболических квантовых точках различного размера как функций температуры. Спиновая магнитная восприимчивость изолированного электрона (кривая 1) не зависит от удерживающего поля и, согласно выражению (41), монотонно растет при охлаждении системы. Наиболее интересным является поведение восприимчивости пары электронов (кривые 2–4): с понижением температуры она, сначала растет, а затем вследствие быстрого уменьшения $\langle S \rangle_c$ в (42) убывает до нуля. Положение и высота образующегося на температурной

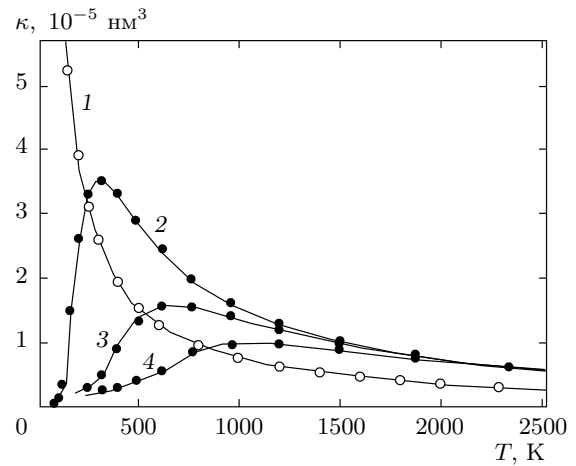


Рис. 5. Спиновая парамагнитная восприимчивость одного (1) и двух (2–4) электронов в параболических квантовых точках с различными значениями коэффициента жесткости A удерживающего поля: 2 — 0.6 эВ/нм²; 3 — 2.0 эВ/нм²; 4 — 4.0 эВ/нм². $M = 640$

зависимости максимума однозначно связаны с геометрическими параметрами квантовой точки. При уменьшении размеров последней максимум сдвигается к высоким температурам.

Магнитная восприимчивость является измеримой в лабораторных экспериментах величиной, а форма ее температурной зависимости содержит информацию о пространственных характеристиках квантовой точки. Само по себе наличие выраженного максимума на полученной экспериментально температурной зависимости спиновой магнитной восприимчивости свидетельствует о наличии в квантовой точке именно двух электронов. Как следует из выражений (43)–(45) и общего выражения (39) для магнитной восприимчивости систем с большим количеством электронов, а также характера температурных зависимостей входящих в эти формулы величин $\Gamma(S)$, рис. 2–5, ожидать обязательного «спаривания» спинов и гарантированного убывания $\langle S \rangle_c$ до нулевых значений при охлаждении в общем случае $N > 2$ ожидать не приходится. Следует также отметить, что в реальном эксперименте на спиновую магнитную восприимчивость могут накладываться магнитные эффекты, связанные с орбитальным движением электронов, которые, однако, нивелируются при нарушении сферической симметрии удерживающего поля.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты работы суммируются следующим образом. Поведение спина систем небольшого количества взаимодействующих электронов при понижении температуры достаточно сложное, в котором трудно выделить какие-либо простые правила. Исключение составляет случай двух электронов, где отчетливо наблюдается монотонное «спаривание» спинов при охлаждении системы и ярко выраженный максимум на температурной зависимости спиновой магнитной восприимчивости. Положение максимума спиновой магнитной восприимчивости двух электронов определяется геометрическими размерами квантовой точки, что может быть использовано для извлечения из макроскопических измерений информации о размерах квантовой точки.

В общем случае квантовых точек, содержащих три и более электронов, поведение спина с вариациями температуры более сложное. Спин системы на фоне термических флуктуаций формируется в конкуренции встречных факторов, на результат которой влияют геометрические размеры и форма квантовой точки. Главными встречными факторами, сопровождающими понижение температуры, являются увеличение расстояний между расталкивающимися виртуальными электронными траекториями и увеличение средней длины траекторий. Первый фактор препятствует, а второй, наоборот, благоприятствует образованию длинных циклов. Компромисс в виде некоторого предельного распределения по длинам циклов и отвечающего этому распределению спина системы является тонким балансом между двумя соизмеримыми факторами, каждый из которых должен быть описан самым детальным образом. Относительно небольшие вариации внешнего поля, размеров и формы квантовой точки существенно влияют на ее спиновое состояние, что, по всей видимости, объясняет явление спинового кроссовера.

При понижении температуры или сжатии квантовых точек, содержащих три и более электронов, не наблюдается безусловного спаривания спинов электронов. Напротив, при сжатии квантовой точки спин системы демонстрирует тенденцию к росту. Причина этого явления состоит в стимулировании объединений траекторий в более длинные циклы. В свою очередь, более длинные циклы отвечают циклическим перестановкам в таких операторах Юнга, которые соответствуют более высоким значениям спина. В системах, в которых спин с охлаждением не приближается к нулевому значению, наблюдает-

ся рост магнитной восприимчивости.

Для корректного описания спиновых состояний ключевым условием является детальный учет обменных эффектов и пространственных межэлектронных корреляций всех порядков. Даже относительно небольшие огрубления, допущенные при расчете этих характеристик, могут многократно усиливать-ся при суммировании разнонаправленных соизмеримых факторов и приводить к качественным искажениям в результирующем распределении по циклам и в спиновом состоянии.

ЛИТЕРАТУРА

1. R. C. Ashoori, *Nature* **379**, 413 (1996).
2. M. A. Kastner, *Phys. Today* **46**, 24 (1993).
3. B. Meurer, D. Heitmann, and K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1371 (1992).
4. Y. Yin and P. A. Alivisatos, *Nature* **437**, 664 (2005).
5. К. Д. Моисеев, Я. А. Пархоменко, Е. В. Гущина, А. В. Анкудинов, М. П. Михайлова, Н. А. Берг, Ю. П. Яковлев, *ФТП* **43**, 1142 (2009).
6. V. Tasco, N. Deguffroy, A. N. Baranov, E. Tournie, B. Satpari, A. Trampert, M. Dunaevski, and A. Titkov, *J. Cryst. Growth* **301**, 713 (2007).
7. Д. С. Пономарев, И. С. Васильевский, Г. Б. Галиев, Е. А. Климов, Р. А. Хабибуллин, В. А. Кульбачинский, Н. А. Юзеева, *ФТП* **46**, 500 (2012).
8. M. Kabir and K. J. Van Vliet, *Phys. Rev. B* **85**, 054431 (2012).
9. И. С. Любутин, К. В. Фролов, *ЖЭТФ* **120**, 693 (2001).
10. С. Г. Овчинников, *ЖЭТФ* **143**, 141 (2013).
11. С. Г. Овчинников, *ЖЭТФ* **134**, 172 (2008).
12. Р. Нокс, А. Голд, *Симметрия в твердом теле*, Наука, Москва (1970).
13. T. Kambara, *Chem. Phys.* **70**, 4199 (1979).
14. T. Sasaki and T. Kambara, *J. Chem. Phys.* **74**, 3472 (1981).
15. T. Kambara, *J. Chem. Phys.* **74**, 4557 (1981).
16. A. M. Milne and E. N. Maslem, *Acta Crystallogr. B* **44**, 254 (1988).
17. R. M. Golding, *Mol. Phys.* **12**, 13 (1967).
18. С. В. Шевкунов, *ТВТ* **28**, 1 (1990).

19. С. В. Шевкунов, Матем. моделирование **2**, 3 (1990).
20. S. V. Shevkunov and P. N. Vorontsov-Velyaminov, Mol. Simulation **7**, 205 (1991).
21. S. V. Shevkunov and P. N. Vorontsov-Velyaminov, Mol. Simulation **7**, 249 (1991).
22. С. В. Шевкунов, ТВТ **29**, 45 (1991).
23. С. В. Шевкунов, К. М. Арефьев, Научно-технические ведомости СПбГТУ **1**, 59 (1998).
24. С. В. Шевкунов, ДАН **369**, 43 (1999).
25. К. М. Arefiev and S. V. Shevkunov, Int. J. Appl. Mech. Engin. **7**, 1095 (2002).
26. С. В. Шевкунов, ДАН **414**, 472 (2007).
27. Ж. Серр, *Линейные представления конечных групп*, Мир, Москва (1970).
28. А. А. Кириллов, *Элементы теории представлений*, Наука, Москва (1978).
29. В. Д. Ляховский, А. А. Болохов, *Группы симметрии и элементарные частицы*, Изд-во ЛГУ, Ленинград (1983).
30. Г. Вейль, *Теория групп и квантовая механика*, Мир, Москва (1983).
31. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1974).
32. А. С. Давыдов, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1973).
33. С. В. Шевкунов, ЖЭТФ **118**, 36 (2000).
34. С. В. Шевкунов, ДАН **382**, 615 (2002).
35. С. В. Шевкунов, ЖЭТФ **121**, 1098 (2002).
36. С. В. Шевкунов, ЖЭТФ **127**, 696 (2005).
37. R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York (1965) (перевод: Р. П. Фейнман, А. Р. Хиббс, *Квантовая механика и интегралы по траекториям*, Мир, Москва (1968)).
38. Ф. А. Березин, *Метод вторичного квантования*, Наука, Москва (1986).
39. С. В. Шевкунов, ЖЭТФ **133**, 25 (2008).
40. С. В. Шевкунов, Матем. моделирование **22**, 79 (2010).
41. С. В. Шевкунов, ЖЭТФ **132**, 453 (2007).
42. С. В. Шевкунов, ЖЭТФ **139**, 769 (2011).
43. Ю. Б. Румер, М. Ш. Рывкин, *Термодинамика, статистическая физика и кинетика*, Наука, Москва (1972).
44. Ю. Е. Лозовик, С. Ю. Волков, ФТТ **45**, 345 (2003).
45. M. Bonitz, P. Ludwig, H. Baumgartner, C. Henning, A. Filinov, D. Block, O. Arp, A. Piel, S. Kading, Y. Ivanov, A. Melzer, H. Fehske, and V. Filinov, Phys. Plasmas **15**, 055704 (2008).
46. В. М. Замалин, Г. Э. Норман, В. С. Филинов, *Метод Монте-Карло в статистической термодинамике*, Наука, Москва (1977).
47. С. В. Шевкунов, Физика плазмы **36**, 960 (2010).
48. С. В. Шевкунов, ЖЭТФ **130**, 105 (2006).
49. С. В. Шевкунов, ДАН **409**, 176 (2006).
50. С. В. Шевкунов, Ж. вычислит. матем. и матем. физ. **43**, 1825 (2003).
51. T. L. Hill, *Statistical Mechanics. Principles and Selected Applications*, McGraw-Hill, New-York (1956).