

ИНТЕГРАЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ И ФУНКЦИЙ ОТКЛИКА С ПОМОЩЬЮ ИНТЕГРАЛОВ ПО ПУТЯМ. МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ–КАРЛО ОДНО- И ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ ПЛАЗМЕННЫХ СРЕД

Филинов В.С., Левашов П.Р., Ларкин А.С.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**vlafimir_filinov@mail.ru*

Вигнеровская формулировка квантовой механики и теорема Винера–Хинчина используются для вывода нового представления (в виде интегралов по траекториям) квантовой плотности состояний (DOS) и динамического структурного фактора (DSF) для электрон–протонной плазмы (двухкомпонентная плазма, ТКП) и электронного газа на фоне равномерно распределенных в пространстве некоррелированных положительных дискретных зарядов («протонов»), образующих нейтрализующий фон (однокомпонентная плазма, ОКП).

DSF характеризуют спектр возбуждения системы и количество энергии, поглощаемой системой при воздействии внешнего поля. Эти функции содержат информацию о межчастичных корреляциях и их эволюции во времени. Полученная функция Вигнера напоминает модифицированное распределение Максвелла–Больцмана, но учитывает квантовые эффекты. Предлагается подход Монте–Карло с интегралами по траекториям для моделирования термодинамических функций. Рассчитанные свойства включают DOS, DSF, функции распределения по импульсу и функции радиального распределения со спиновым разрешением (РФР).

РФР для электронов с одинаковой проекцией спина выявили обменно-корреляционные полости с характерным «размером» порядка тепловой длины волны. В ТКП кулоновское притяжение приводит к появлению высоких пиков в электрон-протонных РФР на малых межчастичных расстояниях, в то время как для ОКП аналогичные РФР демонстрируют неожиданное снижение, возникающее из-за трех-частичных эффектов, вызванных отталкиванием электронов, препятствующим нахождению двух электронов вблизи любого третьего некоррелированного «нейтрализующего заряда».

ТКП DOS в целом выше, чем для ОКП. Для отрицательной энергии ТКП DOS быстро затухает на пять порядков и демонстрирует колебания, описывающие состояния с дискретными уровнями энергии. Квантовые эффекты делают функции распределения по импульсу немаксвелловскими со степенной асимптотикой для больших импульсов («квантовый хвост»).