

Алгоритм равномерно пригодного вычисления элементов матрицы плотности

Иванов А.А.

Белорусский национальный технический университет

В настоящее время большинство представляющих интерес физических проблем не могут быть решены ни точно, ни в рамках канонической теории возмущений. Поэтому большое внимание уделяется разработке непertурбативных методов описания квантовых систем. Один из таких методов, называемый операторным методом (ОМ) приближенного решения уравнения Шредингера оказался очень эффективным при описании различных физических систем. Однако, большинство приложений ОМ рассматривались ранее для систем в чистых квантовых состояниях. Обобщение ОМ на случай квантовой статистики было предложено в 2002 году. Оно основано на дополнении ОМ кумулянтным разложением (КР). В данной работе рассматривается алгоритм непertурбативного вычисления матрицы плотности квантовой системы, основанный на ОМ и КР, который затем применяется к модельной системе – квантовому ангармоническому осциллятору. Мы будем рассматривать построение равномерно пригодного приближения (РПП), то есть такого приближения, которое справедливо при любых значениях параметров гамильтониана и температуры.

Чрезвычайно важную роль в описании квантовых систем играет статистический оператор или матрица плотности. Например, по известной матрице плотности можно вычислить среднее значение любой физической величины и вероятности ее различных значений. Описание, основанное на матрице плотности, может использоваться для смешанных квантовых состояний. Обычно приближенное вычисление матрицы плотности основывается на различных модификациях теории возмущений и интегралах по траекториям Фейнмана. Эти методы не универсальны, так как связаны с наличием в системе малого параметра или серьезно ограничены возникающими при расчетах математическими трудностями даже для простейших гамильтонианов.

Полученные в работе выражения определяют равномерно пригодное приближение для матрицы плотности и плотности вероятности квантовых ангармонических осцилляторов. Решение этих уравнений представляет собой достаточно сложную задачу. Численные расчеты показывают, что рассмотренный метод приводит к значениям, отличающимся от рассчитанных на основе интегралов по траекториям в не более, чем на 20%.

УДК 539.2 (075.8)