

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. М.В.Ломоносова

ФАКУЛЬТЕТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И КИБЕРНЕТИКИ

На правах рукописи

Аракелов Карен Серопович

МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВОЙ ДИНАМИКИ МАЛОЧАСТИЧНЫХ СИСТЕМ
В КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ С УЧЕТОМ РЕАКЦИЙ

Специальность 05.13.18 — математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2009 г.

Работа выполнена на кафедре квантовой
информатики факультета ВМиК Московского
государственного университета им. М. В. Ломоносова.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Ожигов Юрий Игоревич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук
Александр Васильевич Кузнецов
кандидат физико-математических наук
Владимир Петрович Кудря

Ведущая организация: Институт
Математического Моделирования РАН

Защита состоится “____” _____ 200__ года в ____ часов на заседании
диссертационного совета Д 501.001.43 при Московском государственном
университете им. М. В. Ломоносова по адресу: 119991, Москва,
Ленинские горы, МГУ им. М. В. Ломоносова, факультет ВМиК,
аудитория 685

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке факультета ВМиК
Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова.

Автореферат разослан “____” _____ 200__ г.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук,
профессор

Е. В. Захаров

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Диссертация посвящена разработке новых алгоритмических методов решения квантовых задач рассеяния с учетом реакций для малочастичных систем, а также созданию программного комплекса, реализующего эти методы. Наиболее важными задачами для квантовых малочастичных систем на настоящее время являются:

- расчеты квантовых и классических характеристик элементарного акта простейших химических реакций
- расчеты квантовых и классических характеристик рассеяния произвольной малочастичной системы

Обе эти задачи являются актуальными. Основной трудностью при их решении является экспоненциальное увеличение размерности соответствующего гильбертового пространства с увеличением числа частиц. Еще одной трудностью является необходимость рассчитывать многочастичные волновые функции во всем пространстве по их асимптотикам на условной бесконечности (на достаточном расстоянии). Идея квантового компьютера возникла главным образом из потребности решения этих задач. На настоящее время существенного прогресса в построении квантового компьютера не достигнуто, поэтому необходимы новые расчетные схемы и программные комплексы, помогающие решить эти задачи. В основу разработанных алгоритмов положен метод коллективного поведения (Ожигов, Quantum Computers and Computing, 2007, N 1). Алгоритмы построены на использовании самых первых принципов квантовой физической теории в формулировке Фейнмана и не предполагают использования сложных математических моделей и численных схем (что характерно, например, для существующих расчетных схем для определения характеристик квантового малочастичного рассеяния, основанных на уравнениях Фаддеева). Решение поставленных задач достигается за счет массового проведения численных экспериментов со статистической обработкой результатов. Расчетные схемы, используемые в комплексе для определения характеристик элементарного акта химических реакций, также значительно отличаются от тех, на основании которых

строятся существующие специализированные программы. Главные отличия:

1. принципиальный учет квантового движения реагентов
2. принципиальная легкость конфигурации начального состояния реагентов

Основной расчетной идеей для определения именно квантовых характеристик процессов является группировка финальных состояний системы на основании статистической оценки специальной энергетической характеристики моделируемого процесса - действия, вычисляемого вдоль классической траектории системы. Статистика обрабатывается для всего набора однотипных численных экспериментов, проводимых для этих расчетов. Еще одной особенностью программного комплекса является возможность экспериментального определения критических значений управляющих параметров физической системы. Например, определение прицельного расстояния, при котором происходит закручивание в случае двухчастичного рассеяния.

Цель работы. состоит в решении следующих задач:

1. Создание и развитие алгоритмов для решения широкого спектра задач изучения квантовой динамики малочастичных систем в квазиклассическом приближении.
2. Создание программного комплекса для изучения характеристик квантовой динамики малочастичных систем на основе данных алгоритмов.

Научная новизна. Основные результаты работы следующие. 1. В компьютерном эксперименте по моделированию резонансного рассеяния в случае двухчастичного столкновения модельного иона с собственным атомом определена вероятность образования молекулярного иона. Предложены алгоритмы расчета неадиабатических переходов при атомно-молекулярных столкновениях. Получены вероятности выхода системы для обоих каналов данного процесса. Рассчитано распределение финальных расстояний между парами частиц, которое соответствует квадрату модуля волновой функции системы в квазиклассическом пределе. 2. Исследована тонкая структура кривой углового отклонения

в поле силового центра (потенциал Леннарда-Джонса, дипольный потенциал). Для квантовой задачи рассеяния в квазиклассическом пределе получены плотности рассеяния потока частиц на данный угол. Исследованы зависимости плотности рассеянных частиц в квазиклассическом пределе от тонкой структуры кривой углового отклонения. 3. Проведены расчеты квантовой динамики трехчастичной системы, состоящего из тяжелого и двух легких атомов во всех каналах с учетом ассоциативно-диссоциативных реакций. Получены вероятности выхода каждого канала. Получены графики зависимостей квантовых распределений различных физических величин: функции радиального распределения расстояний между двумя атомами (тяжелым и произвольным легким); функции совместного радиального распределения двух легких атомов относительно тяжелого; функции углового распределения векторов, соединяющих тяжелый и легкие атомы.

Теоретическая и практическая значимость. Теоретическая значимость полученных результатов состоит в следующем:

- Разработан квазиклассический подход для метода коллективного поведения, что позволяет моделировать квантовые эффекты в случае малочастичных задач рассеяния при учете реакций.
- Предложен алгоритм компьютерного расчета квантовых интерференционных эффектов в квазиклассическом случае. Алгоритм основан на статистической обработке массива финальных действий, рассчитанных вдоль классических траекторий для набора однотипных компьютерных экспериментов. Это позволяет получать квантовые поправки для широкого круга моделируемых явлений.

Практическая значимость работы состоит в том, что создан программный комплекс, предназначенный для осуществления численных экспериментов вычислительной физики. Основными функциональными особенностями архитектуры комплекса являются:

- Возможность гибкого расширения и изменения функциональности
- Возможность осуществления расчетов для моделирования задач из принципиально отличающихся предметных областей

вычислительной физики: молекулярной и химической динамики, квантового рассеяния для малочастичных систем, исследования локализованных мод в спектроскопических задачах.

Апробация работы. Результаты настоящей диссертации докладывались на научно-исследовательском семинаре Физико-Технологического Института РАН под руководством К. А. Валиева в 2008 г., на семинаре Института Математического Моделирования РАН под руководством Е. И. Леванова в 2008 г, на международном симпозиуме "Квантовая информатика - 2007".

Публикации автора. Основные результаты диссертации опубликованы в работах [1–4]. См. в конце автореферата.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, включающих 25 параграфов, заключения и списка литературы, включающего 61 наименование, включая работы автора. Текст работы изложен на 123 страницах и содержит 37 рисунков.

Содержание работы. Во введении поставлена цель работы, обозначена ее актуальность и кратко изложены теоретические основы разработанных алгоритмов. В параграфе 1.1 описан метод коллективного поведения, являющийся теоретической основой для созданных алгоритмов. Согласно этому методу, для моделируемой квантовой частицы вводится роевое представление, где каждый экземпляр частицы обладает теми же константами (масса, заряд, силовые константы при межчастичном взаимодействии), что и родительская частица. При этом координаты и импульсы частиц роя распределены по Гауссу со средними значениями, равными координатам и импульсам родительской частицы. Такое представление квантовых частиц является особенно действенным в квазиклассическом случае, когда длины волн де Бройля частиц не являются большими - то есть когда характерные размеры локализации частицы в координатном и импульсном представлениях не являются большими. Показано, что роевое представление частиц приводит к радикальной экономии компьютерных ресурсов при моделировании квантовомеханических процессов. В параграфе 1.2 приводится

краткий вывод выражения для волновой функции в квазиклассическом пределе в формулировке Фейнмана. Демонстрируется, что для учета квантовых интерференционных эффектов в этом пределе необходимо детальное знание поведения классических траекторий системы в зависимости от начальных данных. Траектории могут рассматриваться и для комплексных координат. Этот случай соответствует таким квантовым эффектам как, например, туннелирование. В **параграфе 1.3** описывается программный комплекс, созданный для моделирования квантовых задач. Приводятся его основные архитектурные и функциональные особенности. В **параграфе 1.4** описывается структура диссертации, кратко рассказывается об основном содержании ее глав. **Первая глава** посвящена компьютерному моделированию двухчастичного резонансного рассеяния с образованием молекулярного иона. В ней также рассматриваются основные принципы моделирования неадиабатических переходов при квазиклассических атомных столкновениях. В **параграфе 2.1** формулируется актуальность этой задачи, рассматривается ее история и современное состояние, приводятся литературные ссылки. В **параграфе 2.2** ставится общая задача Ландау-Зинера для неадиабатических переходов в случае квазипересекающихся термов. Излагаются вопросы отделения электронных степеней свободы и формирования диабатических и адиабатических термов. Задача ассоциации молекулярного иона водорода (H_2^+) при столкновении атома водорода и протона формулируется как простейшая двухуровневая задача о неадиабатических переходах при эволюции системы по адиабатическим термам. Матричные элементы гамильтониана задачи в адиабатическом базисе после отделения электронных степеней свободы записываются в виде:

$$\begin{aligned}\tilde{H}_{11} &= E_I(R) = (H_{11} + H_{22})/2 + \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2/4 - V^2} \\ \tilde{H}_{22} &= E_{II}(R) = (H_{11} + H_{22})/2 - \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2/4 - V^2}\end{aligned}\quad (1)$$

Здесь $E_I(R)$ и $E_{II}(R)$ - адиабатические термы, H_{ij} - матричные элементы исходного (электронно-ядерного) двухуровневого гамильтониана в диабатическом базисе, $V = H_{12}$ - матричный элемент оператора

взаимодействия между адиабатическими термами (он считается константой). В случае резонансных процессов (когда $H_{11} = H_{22}$) прямое использование известных методов решения задачи Ландау-Зинера не возможно, т.к. в этом случае на действительной оси отсутствует точка квазипересечения адиабатических термов. Для расчета таких процессов может быть использована теория Е.А. Соловьева (УФН, 157, 3, 1989), связывающая вероятность неадиабатических переходов с положениями серий квазипересечений адиабатических термов на комплексной плоскости. В компьютерном эксперименте такой процесс моделировался с помощью, так называемой, d-D модели - простейшей модели, передающей качественный смысл теории Соловьева. В параграфе 2.3 описываются общие принципы моделирования квазиклассических двухчастичных систем при наличии неадиабатических переходов. Моделирование основано на адиабатическом приближении (отделении электронных степеней свободы и рассмотрении только движения ядер) и методе коллективного поведения. Движение ядер рассматривается квантово (в квазиклассическом пределе) на всей траектории, что отличается от традиционной постановки вопроса (задача Ландау-Зинера), когда движение ядер рассматривается почти всюду классически. Неадиабатические переходы для резонансных процессов рассматриваются с помощью d-D модели, а для процессов с выделенной точкой квазипересечения адиабатических термов с помощью моделирования рождения и уничтожения частиц на термах. Продемонстрировано, что в одномерном случае для движения в квадратичном потенциале метод коллективного поведения воспроизводит точный квантовомеханический результат для эволюции волнового пакета в таком потенциале.

$$P(x, t) = \langle \delta(x - x(t)) \rangle_{x(t)} = \left\langle \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\xi(x - (\bar{x} \cos \omega t + \frac{\bar{p}}{m\omega} \sin \omega t))} d\xi \right\rangle_{\bar{x}, \bar{p}} ;$$

$$P(x, t) = F(t) \exp \left[-\frac{(x - (x_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t))^2}{\sigma_x \cos^2 \omega t + \frac{\sigma_p}{m^2 \omega^2} \sin^2 \omega t} \right] \quad (2)$$

Здесь $F(t)$ - нормировочный коэффициент, зависящий только от времени, ω - частота осцилляторного потенциала, σ_x и σ_p дисперсии

гауссовского распределения экземпляров частиц по координате и импульсу. При определенном выборе дисперсий роевого распределения $\sigma_x = \frac{\sigma_p}{m^2\omega^2} = \frac{\hbar}{m\omega}$ и $p_0 = 0$ такое распределение соответствует когерентному квантовомеханическому состоянию - волновому пакету, сохраняющему форму в процессе эволюции. **В параграфе 2.4** описывается техника численных экспериментов по моделированию резонансного рассеяния положительного атомного иона (протона, H^+) на собственном атоме (водород, H). Эта техника основана на решении уравнений Ньютона для каждой пары экземпляров роевого представления положительного иона и атома в зависящем от их совместного состояния потенциале. Описывается реализация d-D модели и конкретный вид межчастичных потенциалов в каждом из двух состояний: 1) молекулярный ион; 2) отдельные частицы. В первом состоянии межчастичный потенциал является квадратичным, во втором соответствует стандартной зависимости взаимодействия положительного иона с нейтральным атомом: $-\sim 1/r^4$ **В параграфе 2.5** приводятся результаты. Рассчитывается квантовая стационарная функция распределения межчастичных расстояний молекулярного иона. Определяется вероятность выхода процесса для следующих каналов: 1) финальное состояние - молекулярный ион отсутствует 2) финальное состояние - образовался молекулярный ион. На рисунке 1 приведена квантовая функция межчастичных расстояний, рассчитанная для начального относительного импульса 0.1 и прицельного расстояния 2. Величины здесь и далее приводятся в атомных единицах. Приводятся оценки функции распределения для простейшей одномерной задачи в гармоническом потенциале. Показано качественное совпадение полученных данных и оценок, состоящее в том, что функция распределения должна иметь максимумы в классических точках поворота. Приводятся формулы для оценки вероятности образования молекулярного иона для задачи рассеяния основанной на d-D модели. Зависимость рассчитанной таким образом вероятности от начального относительного импульса приведена на рисунке 2. **Во второй главе** с помощью компьютерного моделирования исследуется квантовое

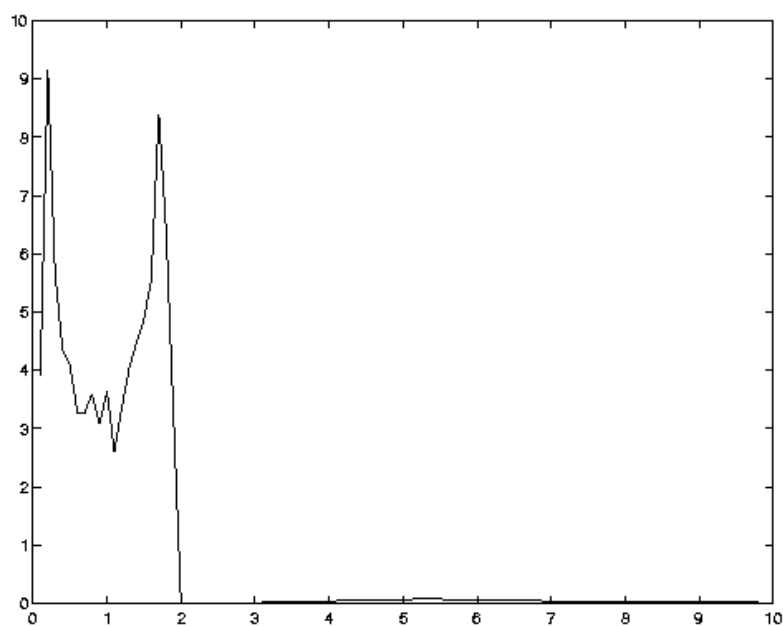


Рисунок 1

Распределение межчастичных расстояний. Относительная скорость частиц - 0.1, прицельное расстояние - 2

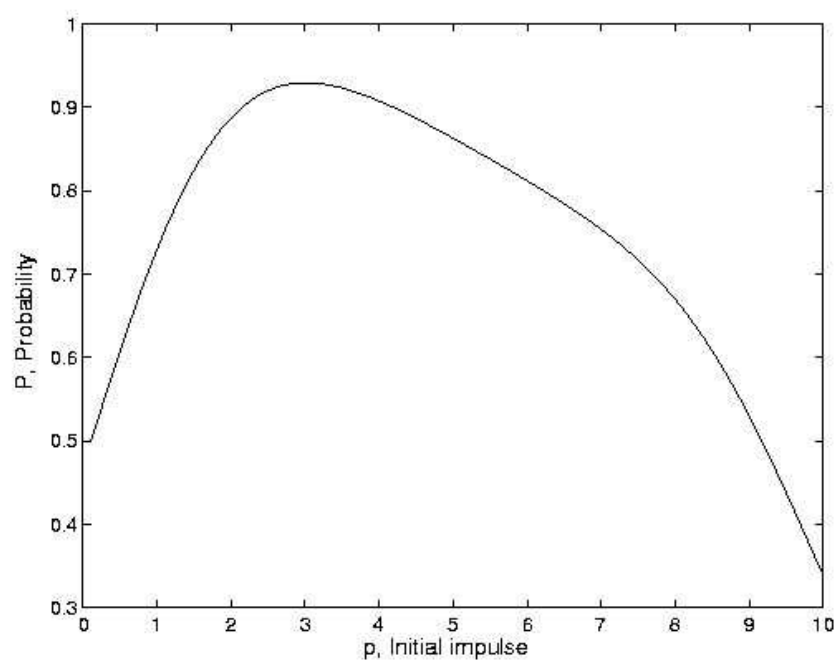


Рисунок 2

Зависимость вероятности образования молекулярного иона от начального относительного импульса ион-атомной пары

рассеяние в квазиклассическом пределе простых атомных частиц на силовых центрах с учетом тонкой структуры кривой углового отклонения. Рассматриваются как центрально-симметричные, так и нецентральные силовые центры. Задача рассеяния на центрально-симметричном потенциале сохраняет свою актуальность из-за наличия у немонотонных потенциалов (типа Леннарда-Джонса) эффекта закручивания. Данный эффект трудно исследовать теоретически из-за расходимости соответствующих интегралов. Исследования рассеяния на нецентральных потенциалах в настоящее время является актуальным, так как традиционная схема решения задач рассеяния (разделение угловых и радиальных переменных) в этом случае неприменима из-за несохранения квадрата полного момента импульса. **В параграфе 3.1** формулируется актуальность исследования задачи рассеяния на силовом центре с немонотонным потенциалом типа Леннарда-Джонса. Приводятся формулы, связывающие характеристики классического рассеяния (углы отклонения) с характеристиками квантового рассеяния в квазиклассическом пределе (фазы рассеяния). Приводятся литературные ссылки. **В параграфе 3.2** с помощью компьютерного моделирования исследуется тонкая структура кривой углового отклонения при классическом рассеянии на потенциале Леннарда-Джонса. Описываются принципы компьютерного моделирования, состоящие в проведении набора однотипных экспериментов с отличающимися управляющими параметрами (прицельными расстояниями) с дальнейшей обработкой финальной статистики. Приведены графики кривой углового отклонения. Показано, что кривая отклонения в потенциале Леннарда-Джонса, имеет тонкую (и, возможно, самоподобную) структуру, соответствующую закручиванию частицы вокруг силового центра. Приведена оценка для значений прицельных параметров, при которых происходит n оборотов частицы вокруг силового центра.

$$b_n = b_\infty - \frac{K^2 \omega_\infty^2}{n^2} \quad (3)$$

Здесь K - коэффициент пропорциональности, зависящий от начальных энергии и момента импульса частицы, b_∞ -прицельный параметр,

при котором частица захватывается потенциалом. Демонстрируется, что критическое поведение классических траекторий рассеяния в области закручивания влияет на зависимости фаз рассеяния в квазиклассическом пределе от начальной энергии падающих частиц.

В параграфе 3.3 приводятся сведения о квантовом рассеянии в квазиклассическом пределе. Демонстрируется связь квантовых и классических характеристик процесса рассеяния. Демонстрируются способы расчета квантовой интерференции, происходящей из-за рассеяния на один и тот же угол рассеиваемых частиц (или парциальных волн исходной плоской волны). Эта интерференция возникает из возможности оценивания интеграла для квазиклассической амплитуды рассеяния $f(\theta)$ с помощью метода стационарной фазы. Применимость метода стационарной фазы обеспечивается малостью постоянной Планка $\hbar$ по сравнению с действием S_{AB} , вычисленным между начальными (А) и конечными (В) координатами частицы, двигающейся вдоль классической траектории. Упоминается, что решениями экстремальных уравнений для углов отклонения, выводимых из метода стационарной фазы, могут быть также комплексные углы. Такие углы соответствуют классически запрещенным процессам: туннелированию или надбарьерному отражению. Эти процессы в работе считаются малыми и не исследуются. **В параграфе 3.4** описывается алгоритм расчета квантовых характеристик рассеяния в квазиклассическом пределе. В основе алгоритма лежит представление квантовой амплитуды перехода между конечной точкой x и начальной x_0 за время t

$$K(x, t, x_0, 0) = F(t)e^{iS(x, x_0) + i\gamma} \quad (4)$$

Здесь x_0 - начальное положение частицы в пучке, характеризующееся прицельным расстоянием, x - конечное положение частицы, двигавшейся вдоль классической траектории в течение времени t , $S(x, x_0)$ - классическое действие, рассчитанное вдоль этой траектории, $F(t)$ - предэкспоненциальный множитель, зависящий только от времени t . Добавочный член γ возникает из-за пролета частиц в области потери квазиклассичности, которая соответствует классическим точкам поворота. В экспериментах точка поворота достигается один раз,

поэтому $\gamma = \pi/4$. В работе моделирование рассеяния плоской волны осуществляется путем представления такой волны набором эквивалентных частиц с фиксированным приращением прицельного параметра. Такая идеология, будучи примененной к моделированию квантовой системы, характеризуемой единственной динамической переменной θ , дает для Ψ -функции системы следующее представление:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \int_{x_0} K(x, t, x_0, 0) \psi(x_0) dx_0; \\ \psi(x, t) &= \sum_i F_i(t) e^{iS(x, x_{0i}) + i\gamma}; \\ \psi(\theta) &= \sum_x \psi(x, t)|_{t \rightarrow \infty} = \sum_j \sqrt{N_j} e^{iS_j + i\gamma} / \sqrt{\sum_j N_j}\end{aligned}\tag{5}$$

Здесь во втором выражении происходит суммирование по начальным состояниям x_{0i} , дающим вклад в амплитуду перехода в конечное состояние x . В третьем выражении суммирование происходит по всем конечным состояниям x , дающим вклад в амплитуду рассеяния на данный угол θ . N_j - количество частиц, входящих в группу с действиями, лежащими в диапазоне $S_j \pm \Delta S$, ΔS - отклонение, одинаковое для всех групп. Описывается методология компьютерного моделирования по определению квантовых характеристик рассеяния. Как и в случае классического рассеяния, проводится набор однотипных экспериментов с последующим расчетом статистики. Важным отличием расчета квантовых характеристик является учет квантовой интерференции конечных состояний. Приведенная ниже формула иллюстрирует расчет квантовой интерференции в случае двух интерферирующих групп:

$$|\psi(x, t)|^2 = (N_1 + N_2 + 2\sqrt{N_1 N_2} \cos(S_2 - S_1)) / (N_1 + N_2)\tag{6}$$

В параграфе 3.5 приводятся результаты компьютерного моделирования. Приводятся кривые углового отклонения и плотности рассеянных частиц для потенциала Леннарда-Джонса и дипольного потенциала для различных начальных энергий и различных плотностей падающих частиц. Последнее обстоятельство выражается в различии шага приращения прицельного параметра в наборе экспериментов. Производится сравнение сечений рассеяния, полученных в физических экспериментах, с сечениями, рассчитанными в работе. Демонстрируется

качественное согласие имеющихся данных. На рисунке 3 изображены кривые углового отклонения в зависимости от прицельного расстояния (b) и плотности рассеянных частиц в зависимости от угла отклонения (θ) для дипольного потенциала в случае дипольного момента, перпендикулярного начальному импульсу частиц. В параграфе 3.6 описываются принципы расчета квантовых характеристик при рассеянии на нецентральной потенциале. Демонстрируется, что в случае сепарабельных потенциалов (потенциалов вида $U(r, \theta) = V(\theta)/r^2$) появляется новый интеграл движения. Выведено трансцендентное уравнение для угла отклонения в случае сепарабельных потенциалов. В параграфе 3.7 описывается компьютерное моделирование квантового рассеяния в квазиклассическом случае на дипольном потенциале в случае дипольного момента перпендикулярного начальному импульсу падающих частиц. Демонстрируется наличие областей закручивания у траекторий частиц. Получены графики зависимостей кривых углового отклонения в зависимости от прицельного расстояния и количества частиц, рассеянных на данный угол, с учетом интерференции и без. Параграф 3.7 является заключением ко второй главе. В нем кратко описываются полученные в главе результаты. В третьей главе с помощью компьютерного моделирования исследуется квантовая динамика трехчастичных систем в квазиклассическом приближении. В параграфе 4.1 описывается классическая постановка задачи для расчета констант скорости элементарного акта химических реакций с использованием имеющейся априори поверхности потенциальной энергии (ППЭ). Демонстрируются алгоритмические и концептуальные недостатки классического подхода, состоящие в следующем: 1) необходимо явно задавать начальное колебательное или вращательное состояние большого ансамбля частиц 2) принципиально исключен учет эффектов квантовой интерференции при эволюции системы на ППЭ. Указывается также, что существующие методы исследования квантовой динамики малочастичных систем (уравнения Фаддеева) не являются удовлетворительными в смысле вычислительных ресурсов. В вычислительном плане применение к малочастичным квантовым системам уравнений Фаддеева сводится

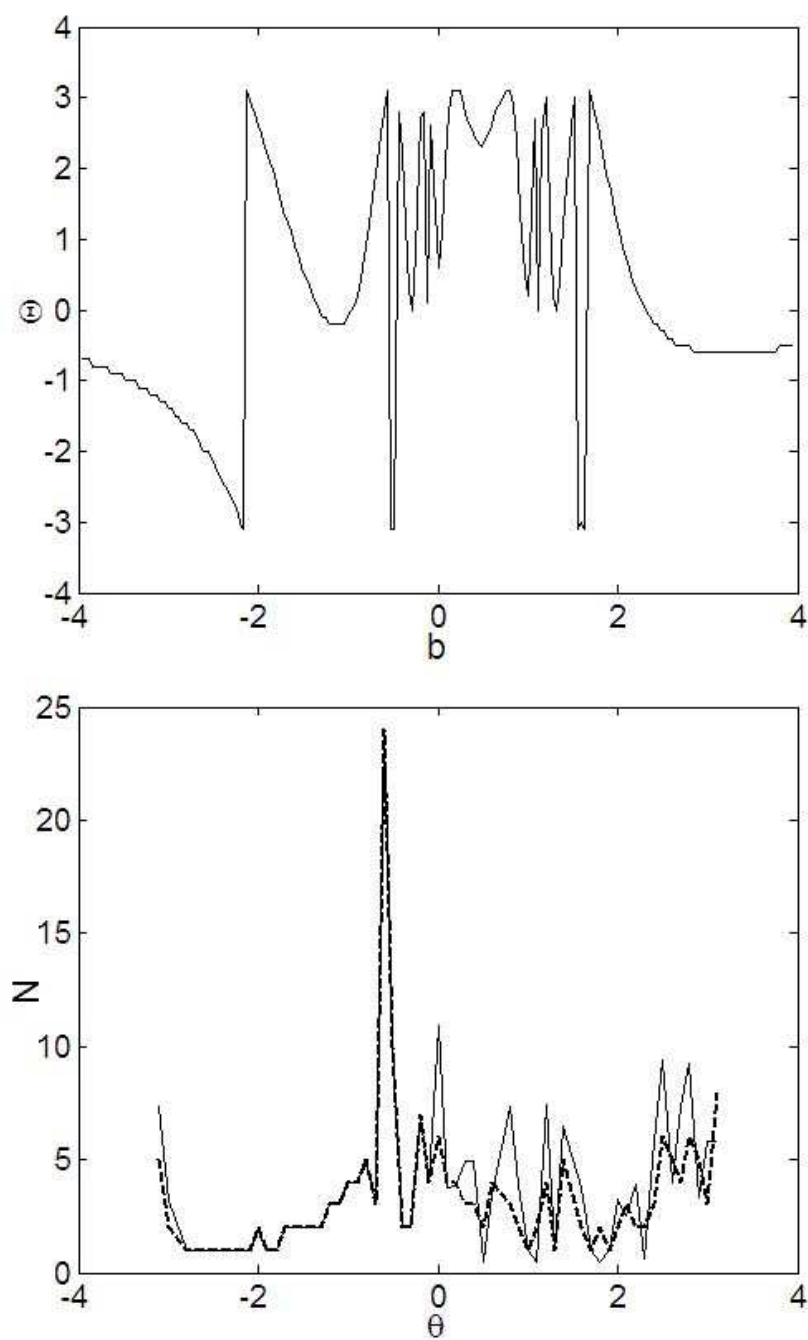


Рисунок 3

Угловое отклонение и плотность рассеянных частиц для дипольного потенциала с учетом интерференции (сплошные линии) и без учета интерференции (пунктир)

к решению системы интегро-дифференциальных уравнений большой размерности. Большинство реальных систем, рассчитанных с помощью этих уравнений, является системами одинаковых частиц. Предлагается новый метод для расчета квантовой динамики малочастичных систем с учетом реакций в квазиклассическом приближении, свободный от отмеченных недостатков. Этот метод является квазиклассическим вариантом метода коллективного поведения. В параграфе 4.2 формулируется квазиклассический метод коллективного поведения для трехчастичной системы. Приводятся формулы (аналогичные 5) для волновой функции трехчастичной системы $\Psi(r^1, r^2, r^3)$. Указывается, что в результирующую волновую функцию системы в квазиклассическом приближении вносят вклады классические траектории различных троек (i, j, k) экземпляров частиц. В компьютерном эксперименте Ψ -функция вычисляется с определенным пространственным разрешением $\Delta r = \{\Delta l_0, \Delta l_0, \Delta l_0\}$. Вклад в нее дают траектории системы, финальные координаты которых лежат в диапазоне

$r^1 \pm \Delta r, r^2 \pm \Delta r, r^3 \pm \Delta r$. Действия, вычисленные вдоль этих траекторий, могут сильно отличаться друг от друга. В этом случае, можно считать, что траектории системы также сильно отличаются. Для расчета квантовых интерференционных эффектов можно положить, что траектории, для которых действия лежат в диапазоне $S = \bar{S} \pm \Delta S$ принадлежат одной и той же группе. ΔS является фиксированным зерном разрешения действия S . Интерференция происходит только между конечными состояниями, отвечающими разным группам траекторий. Алгоритм расчета волновой функции основан на формуле

$$\Psi = \sum_g \sqrt{N_g} e^{iS_g} / \sqrt{\sum_g N_g} \quad (7)$$

Здесь N_g - количество траекторий, входящих в группу g , S_g - среднее действие для этой группы. В параграфе 4.3 формулируются принципы компьютерного моделирования динамики квантово-классических систем, то есть таких систем, у которых часть степеней свободы может рассматриваться квантово, а часть - классически. Если у

малочастичной системы удастся выделить классические степени свободы, то это может резко сократить компьютерные ресурсы необходимые для моделирования. Так, например, если все три частицы должны рассматриваться квантово, то число экспериментов в одном наборе должно равняться числу возможных троек экземпляров частиц. В случае N экземпляров на частицу необходимо N^3 экспериментов. Если же одна из частиц может рассматриваться классически, то число экспериментов равно уже N^2 . Указывается, что классическое рассмотрение одной из частиц справедливо в так называемом двойном адиабатическом приближении, когда масса одной из частиц много больше массы других: $M_Y \gg M_X$. В этом случае движение частиц большой массы рассматривается классически, а остальных частиц квантово. Критерий двойного адиабатического приближения запишется в виде: $E_{el} \gg E_X \gg E_Y$. Здесь E_{el} - энергия электронной подсистемы (проявляющаяся в задаче лишь в ППЭ), E_X, E_Y - энергии частиц X, Y . Обсуждаются вопросы получения заметной квантовой интерференции для малочастичных систем. Указывается, что вероятность обнаружения эффектов интерференции возрастает, если часть степеней свободы, например, движение центра масс системы и вращательное движение системы как целого рассматривать классически, а колебательные степени свободы квантово. Такое разделение движения на классическую и квантовую часть также справедливо в двойном адиабатическом приближении, когда квантовое электронное состояние $\psi_{el}(r_{el}; r_{vibr}, q)$ зависит от колебательных, вращательных и поступательных координат как от параметра, а квантовое колебательное состояние $\psi_{vibr}(r_{vibr}; q)$ зависит от вращательных и поступательных координат (тоже как от параметра). Полная волновая функция в этом случае запишется в виде: $\Psi((r_{el}, r_{vibr}; q)) = \psi_{el}(r_{el}; r_{vibr}, q) \psi_{vibr}(r_{vibr}; q)$. Она зависит от "классических" координат q как от параметров. Критерием выполнимости двойного адиабатического приближения является малость отношения соответствующих энергий. Для колебательно-вращательной задачи этот критерий запишется в виде $E_{el} \gg E_{vibr} \gg E_{rot}, E_{kin}$. В параграфе 4.4 описывается методология численных экспериментов. Эта методология схожа с

изложенной во второй главе за исключением нескольких особенностей.

1) Изучалась динамика системы двух легких и одного тяжелого атома. Выбранные атомные константы соответствовали молекуле воды. 2) Начальные состояния системы моделировалось в виде двух различных колебательных состояний - антисимметричного и полносимметричного. 3) Для начальных положений частиц в фазовом пространстве генерировались рои экземпляров, и в дальнейшем изучалась классическая динамика всех возможных троек экземпляров. Изучались также квантово-классические системы, когда генерация экземпляров тяжелой частицы не происходила. Для моделирования реальных физических систем (например, молекулы воды) необходимо правильно выбрать ППЭ. Приводятся различные возможности выбора ППЭ. Выбор для компьютерного моделирования осуществлен в самом простом виде парных взаимодействий с межчастичным потенциалом Леннарда-Джонса с различными константами для различных взаимодействующих пар частиц. **В параграфе 4.5** излагаются результаты исследований. Рассчитываются функции квантовых распределений с учетом эффектов интерференции и без них. Рассчитываются следующие функции: функции радиального распределения $F_1(r_{H_{1,(2)}O})$ расстояний $r_{H_{1,(2)}O}$ между атомом O и каждым из атомов $H_{1,(2)}$; функция углового распределения $\Theta(\theta)$ от угла θ между векторами $\vec{H_{1,(2)}O}$; функция совместного радиального распределения $F_2(r_{H_{(1)}O}, r_{H_{(2)}O})$, определяющаяся по формуле $F_2(r_1, r_2) = \sum_{\theta} F_2(r_1, r_2, \theta)$, где суммирование проводится по всем θ .

Исследовались следующие выходные каналы: 1) X_2Y - трехатомная молекула, 2) $XY + X$ - двухатомная молекула и свободный атом, 3) $X + Y + X$ - три свободных атома. Функции углового распределения и совместного радиального распределения рассчитывались только для первого канала, функции радиального распределения рассчитывались для второго канала.

Полные вероятности выхода каналов:

для антисимметричного начального колебательного состояния: $P_1 = 50.43\%$, $P_2 = 49.56\%$, $P_3 = 0$.

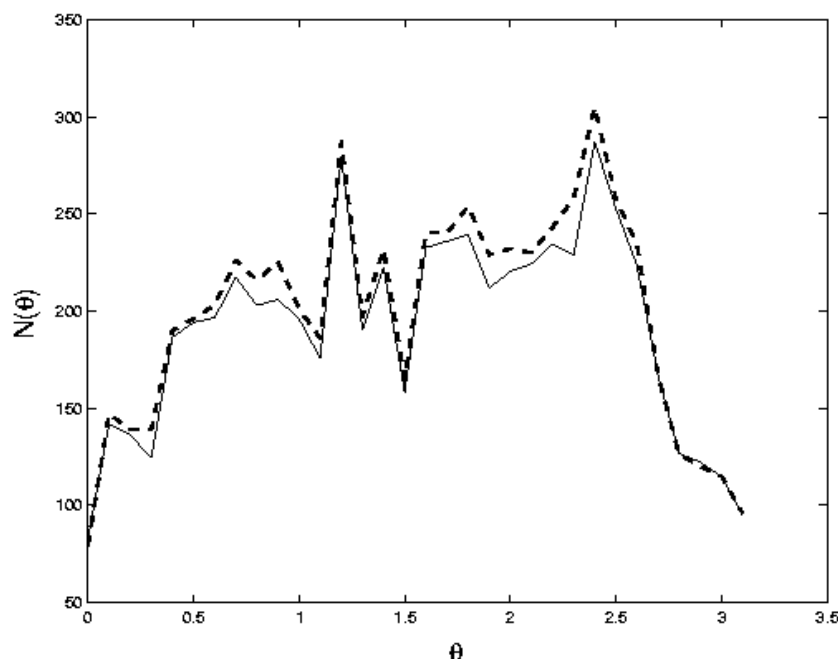


Рисунок 4

Квантовое угловое распределение с учетом интерференции (сплошные линии) и без учета интерференции (пунктир) $\Theta(\theta)$ от угла θ между векторами $H_{1,(2)}\vec{O}$

для полносимметричного начального колебательного состояния $P_1 = 63.80\%$, $P_2 = 36.19\%$, $P_3 = 0$.

На рисунке 4 приведена квантовая функция распределения Θ угла θ между векторами $H_{1,(2)}\vec{O}$ для полносимметричного начального колебательного состояния. **Параграф 4.6** является заключением к третьей главе. В нем кратко описываются полученные в главе результаты. **В четвертой главе** описывается архитектура программного комплекса, построенного для моделирования квантовой динамики малочастичных систем. **В параграфе 5.1** описывается базовая идеология построения архитектуры программного комплекса и проводится ее сравнение с существующими идеологиями. Отмечается, что программный комплекс построен для расчета физических характеристик систем на основе обработки статистики массовых однотипных экспериментов, а не на основе решения для этих характеристик тех или иных уравнений. Поэтому вопросы архитектуры комплекса занимают центральное место. Отмечается

также, что проектируемый таким образом комплекс должен быть гибким, для того, чтобы его можно было применять к широкому спектру задач. В параграфе 5.2 описывается общая архитектура комплекса. Отмечается, что основными задачами, решаемыми при его проектировании, являются следующие: 1) возможность использования комплекса для широкого спектра задач квантовой и классической физики; 2) возможность проведения массовых однотипных экспериментов с последующей обработкой статистики; 3) возможность использования конфигурационных и выходных файлов экспериментов другими программами и комплексами программ. Отмечается, что подобные требования к комплексу могут быть осуществлены только при компонентной структуре его. Описывается компонентная структура комплекса, куда входят следующие компоненты: ConfigurationFile (файлы конфигурации экспериментов), Configuration (обработка конфигурационных файлов), Processor (осуществление экспериментов в соответствии с их конфигурацией), ResultWriter (запись результатов экспериментов в выходной файл), ResultFile (результатирующий файл экспериментов), Consumer (расчет финальной статистики). Описываются программные средства, с помощью которых реализован тот или иной компонент. Отмечается, что в качестве программных средств выбираются признанные кроссплатформенные стандарты: XML, XSD, COM. В параграфе 5.3 описывается конфигурирование экспериментов (программные компоненты ConfigurationFile и Configuration) по рассеянию и реакциям малочастичных систем. В частности, описываются способы задания начального положения частиц в фазовом пространстве и изменения прицельного расстояния (или начальной энергии) для двухчастичных задач рассеяния. Отмечается, что в случае использования комплекса в молекулярно-динамических задачах подобным образом можно задавать изменение температуры или других управляющих параметров. В параграфе 5.4 описывается выполнение экспериментов (программный компонент Processor). Описывается структура компонента Processor и программные средства, с помощью которых он реализован. Компонент реализован с использованием средств объектно-ориентированного программирования (ООП), что

делает возможным использование известных архитектурных шаблонов для относительно простого изменения его функциональности, а значит и расширение спектра решаемых с помощью программного комплекса задач вычислительной физики. Описывается структура классов компонента и их взаимосвязь. **В параграфе 5.5** описывается обработка результатов экспериментов (программный компонент Consumer). Этот программный компонент также реализован с помощью ООП, так как рассчитываемые характеристики могут быть принципиально отличающимися. Описываются принципы реализации статистической обработки выходных файлов экспериментов, основанные на произвольной сортировке (сортировке по произвольной физической характеристике) очень больших массивов данных. **Параграф 5.6** является заключением к главе. В нем кратко описываются основные архитектурные и функциональные особенности созданного программного комплекса. В **заключении** сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе

Основные результаты.

1. Сформулирован квазиклассический вариант метода коллективного поведения для квантовой динамики малочастичных систем. Созданы алгоритмы расчета квантовой интерференции, возникающей при квазиклассической эволюции таких систем. С помощью данных алгоритмов рассчитаны квазиклассические характеристики ряда задач квантовой динамики.
2. В численном эксперименте изучена динамика резонансного рассеяния положительного иона на собственном атоме. Предложены алгоритмы расчета неадиабатических переходов при атомно-молекулярных столкновениях. Определена вероятность образования молекулярного иона при двухчастичном столкновении модельного иона с собственным модельным атомом. Рассчитано распределение финальных расстояний между парами частиц, являющееся, по сути, квадратом модуля волновой функции системы.
3. В численном эксперименте исследованы задачи квантового рассеяния на силовом центре с центрально-симметричным и

нецентральных потенциалами в квазиклассическом пределе. Исследована тонкая структура кривых углового отклонения в зависимости от прицельного параметра в поле силового центра (потенциал Леннарда-Джонса, дипольный потенциал). Получены плотности рассеяния потока частиц на данный угол. Проведено сравнение с экспериментальными данными для случая потенциала Леннарда-Джонса. Продемонстрировано, что экспериментальные зависимости качественно воспроизводятся.

4. В численном эксперименте проведены расчеты квантовой динамики трехчастичной системы с учетом реакций во всех выходных каналах. Система состояла из двух легких и одного тяжелого атомов и приготавливалась в нескольких различных начальных колебательных состояниях. Определены квантовые вероятности выхода каждого канала системы. Рассчитаны квазиклассические квантовые распределения валентных углов и межчастичных расстояний.
5. Создан программный комплекс, предназначенный для осуществления численных экспериментов вычислительной физики. Основными особенностями программного комплекса являются: возможность гибкого расширения и изменения функциональности; как следствие, возможность осуществления расчетов для моделирования задач из принципиально отличающихся предметных областей вычислительной физики: молекулярной и химической динамики, квантового рассеяния для малочастичных систем, исследования локализованных мод в спектроскопических задачах

В заключение автор выражает глубокую благодарность своему научному руководителю, профессору Ю.И. Ожигову за постановку задач, постоянное внимание и помощь в работе.

Публикации автора по теме диссертации

1. Ozhigov A., Arakelov K., Ozhigov Y. Principles of the numerical simulation of many body quantum dynamics // Quantum computers and computing, 2006, vol. 6, №1, p.137-148.
2. Arakelov K., Ozhigov Y. Numerical Method of Entangled State Selection in Association of Molecules // Quantum Computers and Computing, 2007, vol. 7, №1, p.67-80.
3. Аракелов К.С., Ожигов Ю.И. Моделирование динамики запутанных квантовых состояний // Вестник МГУ сер. 15, 2008, №4, с.34-39.
4. Аракелов К.С. Численное моделирование двухчастичного резонансного рассеяния с образованием молекулярного иона // Микроэлектроника, 2008, т.37, №6, с.439-447.