Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Д. П. Санкович, Гауссовы функциональные интегралы и гиббсовские равновесные средние, *ТМФ*, 1999, том 119, номер 2, 345–352

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf743>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 34.229.45.116

26 апреля 2023 г., 14:48:23

© 1999 г.

Д. П. Санкович*

ГАУССОВЫ ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ИНТЕГРАЛЫ И ГИББСОВСКИЕ РАВНОВЕСНЫЕ СРЕДНИЕ

Показано, что гиббсовские равновесные средние от бозе-операторов могут быть представлены как функциональные интегралы по специальной гауссовой мере, определенной в соответствующем пространстве непрерывных функций. Данная мера, возникающая в методе T -произведений Боголюбова, не является винеровской.

1. T -ПРОИЗВЕДЕНИЕ

Понятие хронологического произведения (T -произведения) операторов возникло в квантовой механике при рассмотрении уравнения Шредингера с зависящим от времени гамильтонианом [1]. Такое уравнение появляется в так называемом представлении взаимодействия и имеет вид

$$i \frac{d\Phi(t)}{dt} = \tilde{H}(t)\Phi(t),$$

где

$$\tilde{H}(t) = e^{iH_0(t-t_0)} V e^{-iH_0(t-t_0)}$$

и $H = H_0 + V$ есть не зависящий от времени гамильтониан рассматриваемой динамической системы. Если Φ означает не зависящий от времени вектор состояния в гейзенберговом представлении, то $\Phi(t) = S(t, t_0)\Phi$, где

$$S(t, t_0) = e^{iH_0(t-t_0)} e^{-iH(t-t_0)}, \quad S(t_0, t_0) = I.$$

Оператор $S(t, t_0)$ является оператором эволюции. Он удовлетворяет уравнению с начальным условием

$$i \frac{\partial}{\partial t} S(t, t_0) = \tilde{H}(t)S(t, t_0), \quad S(t_0, t_0) = I. \quad (1)$$

Оператор $S(+\infty, -\infty)$ в квантовой механике называется матрицей рассеяния [2]. Оператор эволюции $S(t, t_0)$ является унитарным пропагатором [3], т.е. он удовлетворяет следующим условиям:

* Математический институт им. В. А. Стеклова РАН, Москва, Россия

- а) $S(t, t_1)S(t_1, t_0) = S(t, t_0)$,
 б) $S(t, t) = I$,
 в) $S(t, t_0)$ сильно непрерывен по совокупности переменных t и t_0 .

Уравнение с начальным условием (1) формально эквивалентно интегральному уравнению

$$S(t, t_0) = I - i \int_{t_0}^t \tilde{H}(\tau) S(\tau, t_0) d\tau.$$

С помощью последовательных подстановок можно установить, что имеет место разложение Дайсона

$$S(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} S_n(t, t_0), \quad (2)$$

где

$$S_n(t, t_0) = (-i)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \tilde{H}(t_1) \tilde{H}(t_2) \cdots \tilde{H}(t_n). \quad (3)$$

Соотношение (3) удобно записать в форме

$$S_n(t, t_0) = \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n T[\tilde{H}(t_1) \tilde{H}(t_2) \cdots \tilde{H}(t_n)],$$

где введено T -произведение

$$T[V(t_1)V(t_2) \cdots V(t_n)] = \sum \pm \theta(t_{i_1} > t_{i_2} > \cdots > t_{i_n}) V(t_{i_1}) V(t_{i_2}) \cdots V(t_{i_n}), \quad (4)$$

причем

$$\theta(t_1 > t_2 > \cdots > t_n) = \begin{cases} 1, & \text{если } t_1 \geq t_2 \geq \cdots \geq t_n, \\ 0 & \text{во всех других случаях.} \end{cases}$$

Сумма в соотношении (4) взята по всем возможным перестановкам индексов $1, 2, \dots, n$. Знак минус соответствует фермиевскому случаю и определяется числом ферми-перестановок, необходимых для получения соответствующего члена.

С помощью формулы (4) разложение (2) может быть записано в следующей символической форме:

$$S(t, t_0) = T \exp \left[-i \int_{t_0}^t \tilde{H}(\tau) d\tau \right].$$

Из определения T -произведения следует, что операторы под знаком T -произведения коммутируют.

Отметим, что общие условия существования решения эволюционного уравнения

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = A(t)\varphi(t),$$

где $A(t)$ — неограниченный оператор, были впервые найдены в работе [4].

С помощью хронологического произведения можно получить одну важную формулу равновесной статистической механики [5]. Рассмотрим операторное уравнение

$$\frac{dU(s)}{ds} = -[H_0 + H_1(s)]U(s), \quad U(0) = I. \quad (5)$$

Решение уравнения (5) имеет вид

$$U(\beta) = T \exp \left\{ - \int_0^\beta [H_0 + H_1(\sigma)] d\sigma \right\}. \quad (6)$$

Будем считать в уравнении (5), что $U(s) = e^{-sH_0}C(s)$. Тогда для оператора $C(s)$ выполняется уравнение с начальным условием

$$\frac{dC(s)}{ds} = -e^{sH_0}H_1(s)e^{-sH_0}C(s), \quad C(0) = I,$$

имеющее соответствующее решение

$$C(s) = T \exp \left[- \int_0^s d\sigma e^{\sigma H_0} H_1(\sigma) e^{-\sigma H_0} \right].$$

Поэтому

$$U(\beta) = e^{-\beta H_0} T \exp \left[- \int_0^\beta ds e^{sH_0} H_1(s) e^{-sH_0} \right]. \quad (7)$$

Для специального случая, когда оператор $H_1(s) = H_1$ не зависит от s , находим, сравнивая решения (6) и (7), формулу Боголюбова

$$e^{-\beta(H_0+H_1)} = e^{-\beta H_0} T \exp \left[- \int_0^\beta ds e^{sH_0} H_1 e^{-sH_0} \right].$$

Эта формула необходима для представления статистической суммы в виде функционального интеграла.

2. ГИББСОВСКИЕ РАВНОВЕСНЫЕ СРЕДНИЕ

Если $\hat{A}$ – линейная оболочка от бозе-операторов и $\hat{\Gamma}$ – положительно-определенный квадратичный гамильтониан, то [5] справедлива формула

$$2 \ln \langle e^{\hat{A}} \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle, \quad (8)$$

где

$$\langle \dots \rangle = \frac{\text{Tr} [\dots e^{-\beta \hat{\Gamma}}]}{\text{Tr} e^{-\beta \hat{\Gamma}}}$$

обозначает гиббсовское среднее по гамильтониану $\hat{\Gamma}$.

Рассмотрим среднее

$$\left\langle T \exp \left[i \sum_{k=1}^{N+1} \nu_k \hat{Q}(s_k) \right] \right\rangle, \quad (9)$$

где ν_k — действительные числа и

$$0 = s_1 < s_2 < \dots < s_k < \dots < s_N < s_{N+1} = \beta. \quad (10)$$

Операторы $\hat{Q}(s)$ и $\hat{\Gamma}$ заданы соотношениями

$$\hat{Q}(s) = e^{s\hat{\Gamma}} \hat{q} e^{-s\hat{\Gamma}}, \quad \hat{\Gamma} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{q}^2,$$

т.е. рассматривается одномерный гармонический осциллятор. Принимая во внимание формулу (8), можно записать

$$\left\langle T \exp \left[i \sum_{k=1}^{N+1} \nu_k \hat{Q}(s_k) \right] \right\rangle = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N+1} \sum_{m=1}^{N+1} \nu_n \nu_m \left\langle T [\hat{Q}(s_n) \hat{Q}(s_m)] \right\rangle \right\}.$$

Вычисление среднего в правой части последнего соотношения осуществляется на основе определения хронологического произведения (4) и приводит к формуле

$$\left\langle T [\hat{Q}(s_n) \hat{Q}(s_m)] \right\rangle = (2m\omega(1 - e^{-\beta\omega}))^{-1} (e^{-\omega|s_n - s_m|} + e^{-\beta\omega + \omega|s_n - s_m|}).$$

Таким образом, среднее (9) можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} \left\langle T \exp \left[i \sum_{k=1}^{N+1} \nu_k \hat{Q}(s_k) \right] \right\rangle = \\ = \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{n,m=1}^{N+1} \nu_n \nu_m (2m\omega(1 - e^{-\beta\omega}))^{-1} (e^{-\omega|s_n - s_m|} + e^{-\beta\omega + \omega|s_n - s_m|}) \right]. \end{aligned}$$

Запишем последнюю формулу в более удобной для дальнейшего изучения форме. Рассмотрим выражение

$$K(s_n, s_m) = e^{-\omega|s_n - s_m|} + e^{-\beta\omega + \omega|s_n - s_m|}, \quad 0 < s_n, s_m < \beta,$$

как функцию переменного s_n . Эта функция, которую обозначим через $y(s_n)$, удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{d^2 y(s_n)}{ds_n^2} - \omega^2 y(s_n) = -2\omega (1 - e^{-\beta\omega}) \delta(s_n - s_m) \quad (11)$$

и граничным условиям

$$y(0) = y(\beta), \quad y'(0) = y'(\beta).$$

Будем искать решение уравнения (11) в виде

$$y(s) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{2\pi i n \frac{s}{\beta}}.$$

Получим, что

$$K(s_j, s_k) = 2\omega \frac{1 - e^{-\beta\omega}}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e^{2\pi i n \frac{s_j - s_k}{\beta}}}{\omega^2 + \left(\frac{2\pi n}{\beta}\right)^2}.$$

Таким образом, для среднего (9) имеем представление

$$\left\langle T \exp \left[i \sum_{k=1}^{N+1} \nu_k \widehat{Q}(s_k) \right] \right\rangle = \exp[-\Omega(\{\nu_k\})], \quad (12)$$

где квадратичная по переменным ν_k форма имеет вид

$$\Omega(\{\nu_k\}) \equiv \frac{1}{2m\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{|\sum_{k=1}^{N+1} \nu_k e^{\frac{2\pi i n}{\beta} s_k}|^2}{\omega^2 + \left(\frac{2\pi n}{\beta}\right)^2}.$$

Очевидно, что $\Omega \geq 0$. Кроме того, $\Omega = 0$ тогда и только тогда, когда $\nu_1 + \nu_{N+1} = 0$, $\nu_2 = 0, \dots, \nu_N = 0$.

Введем новые переменные $\eta_1 = \nu_1 + \nu_{N+1}$, $\eta_2 = \nu_2, \dots, \eta_N = \nu_N$. Тогда формулу (12) можно записать следующим образом:

$$\left\langle T \exp \left[i \sum_{k=1}^{N+1} \nu_k \widehat{Q}(s_k) \right] \right\rangle = \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N A_{jk} \eta_j \eta_k \right), \quad (13)$$

где

$$\sum_{j,k=1}^N A_{jk} \eta_j \eta_k = \frac{1}{m\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{|\sum_{k=1}^N \eta_k e^{\frac{2\pi i n}{\beta} s_k}|^2}{\omega^2 + \left(\frac{2\pi n}{\beta}\right)^2}, \quad (14)$$

а матрица ковариаций имеет матричные элементы

$$A_{jk} = \frac{1}{2m\omega \operatorname{sh} \frac{\beta\omega}{2}} \operatorname{ch} \left(\frac{\beta\omega}{2} - \frac{\beta\omega}{N} |j - k| \right).$$

При выводе последней формулы разбиение (10) определено простым соотношением $s_j = \beta N^{-1}(j - 1)$.

Применим теперь формулы (13), (14) для установления связи гиббсовских равновесных средних от бозе-операторов с функциональным интегралом.

3. ГАУССОВЫ ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ИНТЕГРАЛЫ

Рассмотрим выражение

$$\int \left\langle T \exp \left[i \sum_{k=1}^{N+1} \nu_k \widehat{Q}(s_k) \right] \right\rangle \exp \left\{ -i \sum_{k=1}^{N+1} \nu_k q_k \right\} d\nu_1 \dots d\nu_N d\nu_{N+1},$$

где q_k — действительные числа и интегрирование по каждой переменной ν_i распространяется на всю действительную ось. Принимая во внимание формулу (13) и известные значения гауссовых интегралов, получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^{N+1}} \int \left\langle T \exp \left[i \sum_{k=1}^{N+1} \nu_k \widehat{Q}(s_k) \right] \right\rangle \exp \left\{ -i \sum_{k=1}^{N+1} \nu_k q_k \right\} d\nu_1 \dots d\nu_N d\nu_{N+1} = \\ = \rho(q_1, q_2, \dots, q_{N+1}), \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$\rho(q_1, q_2, \dots, q_{N+1}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}}} \frac{\delta(q_1 - q_{N+1})}{(\det A)^{\frac{1}{2}}} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^N (A^{-1})_{jk} q_j q_k \right], \quad (16)$$

$\delta(q)$ — дельта-функция Дирака, A^{-1} — обратная к A матрица ковариаций с матричными элементами

$$(A^{-1})_{ij} = \frac{m\omega}{\operatorname{sh} \frac{\beta\omega}{N}} \left(2 \operatorname{ch} \frac{\beta\omega}{N} \delta_{i,j} - \delta_{i,j+1} - \delta_{i,j-1} \right).$$

Определитель обратной матрицы ковариаций имеет вид

$$\det(A^{-1}) = \frac{1}{2} (m\omega)^N \left[\left(\operatorname{ch} \frac{\beta\omega}{N} + 1 \right)^{N+1} - \left(\operatorname{ch} \frac{\beta\omega}{N} - 1 \right)^{N+1} \right].$$

Из формулы (16) следует, что

$$\rho \geq 0, \quad \int \rho dq_1 \dots dq_{N+1} = 1. \quad (17)$$

С помощью соотношения (15) можно вычислить средние вида

$$\langle T[f(\widehat{Q}(s_1), \dots, \widehat{Q}(s_{N+1}))] \rangle.$$

Действительно, примем во внимание комплексную формулу Фурье

$$\begin{aligned} f(Q_1, \dots, Q_{N+1}) = \frac{1}{(2\pi)^{N+1}} \int f(q_1, \dots, q_{N+1}) \times \\ \times \exp \left\{ i \sum_{j=1}^N \nu_j (Q_j - q_j) \right\} dq_1 \dots dq_{N+1} d\nu_1 \dots d\nu_{N+1}. \end{aligned}$$

Поскольку операторы $\widehat{Q}(s_j)$ коммутируют под знаком T -произведения, то

$$\langle T[f(\widehat{Q}(s_1), \dots, \widehat{Q}(s_{N+1}))] \rangle = \int f(q_1, \dots, q_{N+1}) \rho(q_1, \dots, q_{N+1}) dq_1 \dots dq_{N+1}. \quad (18)$$

Учитывая свойства (17), видим, что

$$0 \leq \langle T[f(\widehat{Q}(s_1), \dots, \widehat{Q}(s_{N+1}))] \rangle \leq M, \quad \text{если} \quad 0 \leq f(\widehat{Q}(s_1), \dots, \widehat{Q}(s_{N+1})) \leq M. \quad (19)$$

Рассмотрим теперь функционалы $F(q)$ действительных функций (“траекторий”) $q(s)$, определенных на отрезке $0 \leq s \leq \beta$. Построим интеграл

$$I \equiv \int F(q) d\mu \quad (20)$$

по соответствующей мере.

Сначала рассмотрим подмножество “специальных функционалов” [5], являющихся непрерывными функциями конечного числа N переменных,

$$F^{(N)}(q) \equiv \Phi(q_1, q_2, \dots, q_N),$$

где $q_j = q(s_j)$. В этом случае по определению имеем

$$I^{(N)} = \int \Phi(q_1, q_2, \dots, q_N) \rho(q_1, q_2, \dots, q_N) dq_1 dq_2 \dots dq_N. \quad (21)$$

Тогда из формул (18), (19) следует, что

$$\langle T[F^{(N)}(\widehat{Q})] \rangle = \int F^{(N)}(q) d\mu$$

и $\langle T[F^{(N)}(\widehat{Q})] \rangle \geq 0$, если $F^{(N)}(q) \geq 0$ для произвольных действительных чисел $q_1, q_2, \dots, q_N$. Рассмотрим теперь последовательность функций $\{q_N(s)\}$, $N = 1, 2, \dots$, определенных следующим образом:

$$q_N(s) = q(s_j) \quad \text{для} \quad s_j \leq s < s_{j+1}, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad q_N(\beta) = q(\beta). \quad (22)$$

Набор точек $\{s_j\}$ представляет собой разбиение (10) отрезка $[0, \beta]$. Предположим, что $|s_{j+1} - s_j| \leq \Delta s$ для $j = 1, 2, \dots, N$, и будем считать, что $\Delta s \rightarrow 0$, если $N \rightarrow \infty$. В этом случае последовательность ступенчатых функций (22) равномерно стремится к функции $q(s)$. Тогда функциональный интеграл (20) может быть задан как предел при $N \rightarrow \infty$ интегралов (21), определенных на подмножестве “специальных функционалов”, поскольку функционалы $F(q_N(s))$ относятся к этому подмножеству:

$$I = \lim_{N \rightarrow \infty} I^{(N)}.$$

Рассмотрим пространство $C^\circ[0, \beta]$ непрерывных функций $q(s)$, определенных на сегменте $[0, \beta]$ и удовлетворяющих условию $q(0) = q(\beta)$. Относительно равномерной метрики

$$\rho(q, p) = \sup_{s \in [0, \beta]} |q(s) - p(s)|$$

это пространство метрическое. Квадратная матрица $A = (A_{jk})$ порядка N является положительной симметрической матрицей, т.е. отображение $(j, k) \rightarrow A_{jk}$ есть ядро положительного типа на множестве $\{1, 2, \dots, N\}$. Следовательно [6], можно говорить о гауссовой мере γ_A на пространстве R^N с ковариацией A . По теореме Стоуна–Вейерштрасса [7] соответствующее множество “специальных функционалов” плотно во множестве всех непрерывных функций, заданных на пространстве $C^\circ[0, \beta]$. В пространстве $C^\circ[0, \beta]$ можно ввести σ -алгебру, порожденную квазиинтервалами (цилиндрическими множествами). Эта σ -алгебра совпадает с σ -алгеброй, порожденной открытыми в метрике ρ множествами. Распространение гауссовой меры с квазиинтервалов на их борелевское замыкание задает гауссову меру в пространстве $C^\circ[0, \beta]$ [8].

Список литературы

- [1] *F. J. Dyson*. Phys. Rev. 1949. V. 75. P. 486.
- [2] *Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков*. Введение в теорию квантованных полей. М.: Наука, 1973.
- [3] *М. Рид, Б. Саймон*. Методы современной математической физики. Т. 2. М.: Мир, 1978.
- [4] *T. Kato*. J. Math. Soc. Japan. 1953. V. 5. P. 208.
- [5] *Н. Н. Боголюбов, Н. Н. Боголюбов (мл.)*. Аспекты теории полярона. Сообщения ОИЯИ, Р17-81-65. Дубна: ОИЯИ, 1981.
- [6] *Н. Бурбаки*. Интегрирование. Гл. III–V, IX. М.: Наука, 1977.
- [7] *Ф. Рисс, Б. Секефальви-Надь*. Лекции по функциональному анализу. М.: Мир, 1979.
- [8] *Ю. Л. Далецкий, С. В. Фомин*. Меры и дифференциальные уравнения в бесконечномерных пространствах. М.: Наука, 1978.

Поступила в редакцию 8.X.1998 г.,
после доработки 1.XII.1998 г.