ЛИТЕРАТУРА

1. Хеерман Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М., 1990. 175 с.

2. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. М., 1990. Т. 1. 349 с. Т. 2. 396 с.

3. Аринштейн Э. А., Пилипенко В. А., Шабаева Н. И., Флягин М. Я. Оценка фрактальной размерности неупорядоченной двухмерной структуры // Тез. докл. XV Международной конф. «Математические методы в технике и технологиях». Тамбов, 2002.

Эдуард Абрамович АРИНШТЕЙН — профессор кафедры моделирования физических процессов и систем физического факультета, доктор физико-математических наук;
Владимир Евгеньевич ВЕРШИНИН— старший преподаватель кафедры моделирования физических процессов и систем

УДК 536.75

РАСЧЕТ ОПЕРАТОРА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ

АННОТАЦИЯ. Показано, что матричные элементы одномерного потенциала в температурном представлении взаимодействия определяются преобразованием Лапласа его координатного представления.

It is shown, that the matrix elements of one-dimensional potential in temperature representation of interaction are defined by Laplas transformation of its coordinate representation.

При описании квантовых систем вся информация о равновесном состоянии содержится в матрице плотности $\rho = e^{-\beta(H_0+V)}$ либо в связанном с нею операторе температурного рассеяния Мацубары $S = e^{\beta H_0} e^{-\beta(H_0+V)}$ [1]. К сожалению, в силу того, что операторы $\hat{H}_0 = \sum \frac{\hat{p}_i^2}{2m}$ и $\hat{V}$ взаимодействия не коммутируют между собой и с другими операторами, воспользоваться исходными выражениями для нахождения статистической суммы и термодинамических величин практически невозможно. Этот факт выводит на первое место проблему приближенного вычисления операторов $\hat{\rho}$ и $\hat{S}$ и придания им удобного для расчетов вида. Одним из путей решения указанной задачи является замена дифференциального оператора интегральным. Дифференцирование по обратной температуре приводит к хорошо известному уравнению Блоха для оператора Мацубары:

$$\frac{\partial \hat{S}}{\partial \beta} = -\hat{V}(\beta) \cdot \hat{S}, \quad \hat{S}(0) = 1, \tag{1}$$

где $\hat{V}(\beta)=e^{\beta\hat{H}_0}\hat{V}e^{-\beta\hat{H}_0}$ — оператор взаимодействия в представлении взаимодействия. Решение уравнения (1) может быть записано в виде Т-экспоненты:

$$\hat{S}(\beta)=T\exp(-\int_0^\beta e^{\tau H_0}Ve^{-\tau H_0}d\tau). \qquad (2)$$

Т-упорядочение проводится по обратной температуре *b*. Соотношение (2) приводит к необходимости вычисления континуального интеграла, что возможно лишь для Гауссовых функций, представляющих практический интерес лишь для узкого круга задач. Уравнению (1) можно придать вид:

$$\hat{S}(\beta)=1-\int_0^\beta e^{\tau H_0}\hat{V}e^{-\tau H_0}\hat{S}(\beta)d\tau. \qquad (3)$$

Приближенное решение данного уравнения возможно при указании явного вида оператора $\hat{V}(\beta)=e^{\beta H_0}\hat{V}e^{-\beta H_0}$. Рассмотрим решение этой задачи для системы с одной степенью свободы. Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x). \qquad (4)$$

Отметим ряд соотношений, проверяемых непосредственным разложением:

$$\exp(\frac{\lambda^2}{2}\frac{d^2}{dx^2})\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{u^2}{2}}\psi(x+\lambda u)du;\ \exp(-\frac{\lambda^2}{2}\frac{d^2}{dx^2})\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{u^2}{2}}\psi(x+i\lambda u)du\ ,\ (l>0). \qquad (5)$$

Во втором из соотношений (5) предполагается, что функция $y(x)$ имеет аналитическое продолжение в комплексную плоскость.

С целью нахождения интегрального представления оператора $\hat{V}(\beta)$ в координатном представлении, рассмотрим действие эрмитово сопряженного оператора на произвольную функцию $\psi(x)$.

$$\hat{V}^+(\beta)\psi(x)=\left[e^{-\beta\hat{H}_0}V(x)e^{\beta\hat{H}_0}\right]\psi(x)=\left[e^{\frac{\lambda^2}{2}\frac{d^2}{dx^2}}V(x)e^{-\frac{\lambda^2}{2}\frac{d^2}{dx^2}}\right]\psi(x)=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{u^2}{2}}V(x+\lambda u)\left[e^{-\frac{\lambda^2}{2}\frac{d^2}{dx^2}}\right]\psi(x+\lambda u)du.$$

В силу очевидного соотношения $\lambda\frac{d\psi(x+\lambda u)}{dx}=\frac{d\psi(x+\lambda u)}{du}$, действие операторной экспоненты можно перенести на переменную *u*. Это позволяет провести интегрирование по частям

$$\hat{V}^+(\beta)\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\left[e^{-\frac{1}{2}\frac{d^2}{du^2}}e^{-\frac{u^2}{2}}V(x+\lambda u)\right]\psi(x+\lambda u)du=$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}du\psi(x+\lambda u)\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{z^2}{2}}e^{-\frac{(u+iz)^2}{2}}V(x+\lambda(u+iz))dz.$$

После замены переменной *y=x+lu* окончательно приходим к виду:

$\hat{V}^{+}(\beta)\psi(x)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\tilde{V}^{+}(x,y)\psi(y)dy$, где $\tilde{V}^{+}(x,y)$ матрица оператора $\hat{V}^{+}(\beta)$ в координатном представлении.

$$\tilde{V}^{+}(x,y)=\frac{1}{2\pi\lambda}\int\limits_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{z^2}{2}}e^{-\frac{(y-x+i\lambda z)^2}{2\lambda^2}}V(y+i\lambda z))dz=\left[s=y+i\lambda z\right]=$$

$$=\frac{1}{2\pi i\lambda^2}\int\limits_{y-i\infty}^{y+i\infty}e^{\frac{(s-y)^2}{2\lambda^2}}e^{-\frac{(s-x)^2}{2\lambda^2}}V(s))ds=\frac{e^{\frac{(y^2-x^2)}{\lambda^2}}}{2\pi i\lambda^2}\int\limits_{y-i\infty}^{y+i\infty}e^{\frac{(x-y)s}{\lambda^2}}V(s)ds=\frac{e^{\frac{(y^2-x^2)}{\lambda^2}}}{\lambda^2}v(\frac{x-y}{\lambda^2}). \tag{6}$$

Функция $v(\frac{x-y}{\lambda^2})=\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{y-i\infty}^{y+i\infty}e^{\frac{(x-y)s}{\lambda^2}}V(s)ds$ является «оригиналом» подынтегрального выражения в обратном преобразовании Лапласа и кусочно-непрерывной функцией действительного переменного [2]. При этом выполняется условие: $v(t)=0,(t<0)$. Положение контура интегрирования в (6) определяется условием: y>a где a — показатель роста «оригинала» [2]. Сама функция $V(s)$ представляет собой «изображение» в прямом преобразовании Лапласа и это, в определенном смысле, неудобно, поскольку область аналитичности функции $V(s)$ (s — комплексное число) должна определяться значением показателя роста функции-оригинала, что невозможно сделать заранее при определении $V(s)$.

Несложно записать явный вид $\tilde{V}(x,y)$ матрицы исходного оператора $\hat{V}(\beta)$:

$$\tilde{V}(x,y)=\left(\tilde{V}^{+}(y,x)\right)^{*}=\frac{e^{\frac{(x^2-y^2)}{\lambda^2}}}{2\pi i\lambda^2}\int\limits_{x-i\infty}^{x+i\infty}e^{\frac{(y-x)s}{\lambda^2}}V(s)ds=\frac{e^{\frac{(x^2-y^2)y}{\lambda^2}}}{\lambda^2}v(\frac{y-x}{\lambda^2}),\quad (x>a). \tag{7}$$

Соотношение (7) позволяет легко определять интересующие нас матрицы с помощью таблиц преобразования Лапласа. Рассмотрим в качестве примера некоторые потенциалы:

$$1)\ V(x)=x^{-n},\quad v(\frac{x-y}{\lambda^2})=\frac{\left(\frac{x-y}{\lambda^2}\right)^{n-1}}{(n-1)!}\quad (x>0).$$

$$2)\ V(x)=\frac{e^{-ax}}{x},\quad v(\frac{x-y}{\lambda^2})=\begin{cases}0 & 0<\frac{x-y}{\lambda^2}<a\\ 1 & a<\frac{x-y}{\lambda^2}\end{cases}.$$

$$3)\ V(x)=\frac{e^{-ax}}{x^n},\quad v(\frac{x-y}{\lambda^2})=\begin{cases}0 & 0<\frac{x-y}{\lambda^2}<a\\ \frac{\left(\frac{x-y}{\lambda^2}-a\right)^{n-1}}{(n-1)!} & a<\frac{x-y}{\lambda^2}\end{cases}.$$

Работа выполнена при поддержке Минобразования РФ, грант 01.01.002.

ЛИТЕРАТУРА

1. Фейнман Р. Статистическая механика. М., 1978. 407 с.

2. Свешников А. Г., Тихонов А. Н. Теория функций комплексной переменной. М., 1979. 296 с.