Ученые записки Таврического национального университета имени В.И. Вернадского
Серия «Физико-математические науки». Том 23 (62). 2010 г. № 3. С. 117-124

УДК 539. 391+514. 764.2

ВОССТАНОВЛЕНИЕ КОРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ ПО ЕЕ МОМЕНТАМ

Рошупкин С.Н.

Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина
E-mail: ***rsn@ tnu.crimea.ua***

Рассмотрена общая теория линейного отклика. Рассмотрена эволюция корреляционной функции на коротких временах. Показано, что корреляционная функция может быть восстановлена по ее частотным моментам.
Ключевые слова: корреляционная функция, теория линейного отклика, частотные моменты.

ВВЕДЕНИЕ

При исследовании динамических процессов в многочастичных системах обычно используют в качестве зонда внешнюю силу, которая лишь слегка выводит систему из равновесия, а затем измеряют зависящий от времени линейный отклик на эту силу. Большое число экспериментальных методов попадает в эту категорию: исследование формы линии экспериментальных, инфракрасных и рамановских спектров; изучение формы линии в экспериментах по дипольной или спиновой релаксации; исследование поглощения звука и кинетических характеристик и др. Во всех этих экспериментах изучаются динамические характеристики спонтанных флуктуаций относительно равновесного состояния. Для объяснения этих флуктуаций требуется гораздо меньше информации, чем содержится в микроскопическом состоянии или матрице плотности. Согласно теории линейного отклика эти флуктуации можно строго описать с помощью зависящих от времени корреляционных функций: парных произведений некоторых динамических переменных $A(t)$ и $B(t')$, взятых в различные моменты времени t и t' и усредненных по каноническому ансамблю:

$$S_{AB}(t,t') = \langle A(t)B(t') \rangle . \tag{1}$$

Эти функции представляют собой мощный и гибкий инструмент для теоретического исследования неравновесных характеристик. Особый интерес представляют флуктуации измеримых величин, зависящих от пространственных координат и времени и описывающих в длинноволновой области коллективное движение, характерное для многих систем. С помощью корреляционной функции плотности частиц

$$S_{nn}(\vec{r},t;\vec{r}',t') = \left\langle n(\vec{r},t)n(\vec{r}',t') \right\rangle , \tag{2}$$

описывают, например, рассеяние света, рентгеновских лучей и нейтронов, скажем, в нормальной жидкости. При рассеивании электронов измеряется функция

$S_{\rho\rho}(\vec{r},t;\vec{r}',t')$, которая получается при замене в выражении (2) плотности частиц $n(\vec{r},t)$ плотностью заряда $\rho(\vec{r},t)$. В магнитных системах при рассеянии нейтронов измеряется корреляционная функция намагниченности $M(\vec{r},t)$ и т.д. Важным обстоятельством является то, что некоторые сведения о поведении корреляционных функций на коротких отрезках времени легко получить с помощью их частотных моментов, которые в свою очередь удовлетворяют определенным правилам сумм. Правила сумм представляют собой интегралы, которые можно оценить численно, если известны межчастичный потенциал и статические корреляционные функции. Сведения о статических корреляционных функциях можно получить с помощью численных расчетов. По этой причине можно считать, что частотные моменты корреляционной функции известны.

В предлагаемой вниманию работе показано, что используя частотные моменты корреляционной функции можно восстановить саму корреляционную функцию.

1. ЛИНЕЙНЫЙ ДИНАМИЧЕСКИЙ ОТКЛИК И ПРАВИЛА СУММ

Проанализируем теперь динамический отклик системы на внешнее магнитное поле $\delta h_b(\vec{r},t)$, которое некоторым заданным образом изменяется в пространстве и во времени. Подобный подход объясняется, конечно, тем, что таким образом проводится большинство экспериментов: к системе прикладывают какую либо внешнюю силу, смотрят, что происходит, и делают выводы о свойствах самой системы. Разумеется, некоторые эксперименты не укладываются в эту схему, но многие укладываются; невозможно охватить все сразу. В присутствии внешнего магнитного поля $\delta h_b(\vec{r},t)$ гамильтониан явно зависит от времени и определяется выражением

$$H(t) = H + \delta H_b(t) = H - \int d\vec{r}\, M(\vec{r})\delta h_b(\vec{r},t), \tag{3}$$

в представлении Шредингера, когда оператор $M(\vec{r})$ не зависит от времени. Зависимость от времени содержится в матрице плотности $\rho(t)$, которая описывает состояние системы таким образом, что среднее от величины $M(\vec{r})$ или любого другого оператора равно

$$\left\langle M(\vec{r},t)\right\rangle = Sp\rho(t)M(\vec{r}),\quad Sp\rho(t) = 1. \tag{4}$$

Для дальнейшего нужно решить уравнение для матрицы плотности [1]

$$ih\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = \left[H(t),\rho(t)\right], \tag{5}$$

при начальном условии

$$\rho(-\infty)=\rho^0, \quad \left[H,\ \rho^0\right]=0. \qquad (6)$$

Начальное условие отражает тот факт, что до включения δh_b система стационарна; конечно, должно быть выполнено условие, что $\delta h_b \to -\infty$. Для дальнейших преобразований несущественно, какой вид имеет ρ^0, однако она предполагается известной. Поскольку обычно система вначале находится в равновесном состоянии, удобно выбрать в качестве ρ^0 выражение, соответствующее каноническому ансамблю с фиксированным N, или большому каноническому ансамблю, или какому-либо другому стационарному состоянию. Теперь нужно найти линейный (по δh_b) отклик. Но в первом приближении уравнение (5) легко «решается». А именно: $\rho(t)=\rho^0+\delta\rho(t)$, где

$$\delta\rho(t)=-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} d\tau e^{-iH(t-\tau)/\hbar}\left[\delta H_b(\tau),\rho^0\right]e^{iH(t-\tau)/\hbar}. \qquad (7)$$

Теперь с помощью простых преобразований легко убедится в том, что изменение средней намагниченности $\delta\left\langle M(\vec{r},t)\right\rangle = Sp\rho(t)M(\vec{r}) - Sp\rho^0 M(\vec{r})$ можно записать в виде [3]

$$\delta\left\langle M(\vec{r},t)\right\rangle=\int_{-\infty}^{t} dt'\int d\vec{r}'\left\langle \frac{i}{\hbar}\left[M(\vec{r},t),\right]M(\vec{r}',t')\right\rangle_{равн}\times\delta h_b(\vec{r}',t'), \qquad (8)$$

где $\left\langle A\right\rangle_{равн}=Sp\rho^0 A$ (в дальнейшем индекс «равн» будем опускать). В формуле (8) $M(\vec{r},t)$ -гейзенберговские операторы для невозмущенной системы:

$$M(\vec{r},t)=e^{iHt/\hbar}M(\vec{r})e^{-iHt/\hbar}. \qquad (9)$$

Выражение (8) является основным результатом теории линейного отклика [2]. Из него следует, что функция отклика представляет собой усредненный коммутатор, а не корреляционную функцию, как можно было бы ожидать. Однако это несущественно, так как обе функции оказываются эквивалентными [3]. Обычно определяют функцию отклика следующим образом:

$$\chi''_{MM}\left(\vec{r},t;\vec{r}',t'\right)=\left\langle \frac{1}{2\hbar}\left[M(\vec{r},t),M(\vec{r}',t')\right]\right\rangle. \qquad (10)$$

Поскольку система трансляционно-инвариантна в пространстве и во времени:

$$\chi''\left(\vec{r},t;\vec{r}',t'\right)=\chi''\left(\vec{r}-\vec{r}',t-t'\right),$$

Можно ввести преобразование Фурье:

$$\chi''\left(\vec{r},t;\vec{r}',t'\right)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\int\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}e^{-i\omega(t-t')+i\vec{k}\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)}\chi''\left(\vec{k},\omega\right). \qquad (11)$$

Легко показать [2], что $\chi''\left(\vec{k},\omega\right)$-вещественная, нечетная по ω функция и что она зависит лишь от $k=\left|\vec{k}\right|$, поскольку χ''-коммутатор эрмитовых операторов, а равновесное состояние инвариантно относительно обращения времени и отражений и пространственно изотропно. Полезной бывает комплексная функция отклика $\chi(k,z)$, определяемая выражением

$$\chi(k,z)=\int\frac{d\omega}{\pi}\frac{\chi''(k,\omega)}{\omega-z}. \qquad (12)$$

Эта аналитическая функция комплексной переменной z при условии, что $\operatorname{Im} z\neq 0$. На вещественной оси имеет разрез. Из выражения (10) следует, что

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}\right)^n\chi''\left(\vec{r},t;\vec{r}',t'\right)=\left\langle\frac{1}{2\hbar}\left[\left(i\frac{\partial}{\partial t}\right)^n M(\vec{r},t),M(\vec{r}',t')\right]\right\rangle. \qquad (13)$$

При совпадающих временах $t=t'$ это означает, что

$$\int\frac{d\omega}{\pi}\omega^n\chi''(k,\omega)=\int d\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)e^{-i\vec{k}\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)}\left\langle\left(\frac{1}{\hbar}\right)^n\left[..\left[M\left(\vec{r},t\right),H\right],..,H\right],M\left(\vec{r}',t\right)\right\rangle$$
.(14)

Таким образом, в правой части равенства (14) содержится последовательность коммутаторов, взятых в один и тот же момент времени, которую в принципе, а в некоторых случаях и фактически можно вычислить точно. Правила сумм дают коэффициенты разложения $\chi(k,z)$ при больших z. Из определения (12) видно, что при больших z

$$\chi(k,z)=-\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\left\langle\omega^{(n)}(k)\right\rangle}{zn}\chi(k), \qquad (15)$$

где

$$\left\langle\omega^{(n)}(k)\right\rangle=\frac{\int\frac{d\omega}{\pi}\omega^n\frac{\chi''(k,\omega)}{\omega}}{\int\frac{d\omega}{\pi}\frac{\chi''(k,\omega)}{\omega}}. \qquad (16)$$

При выводе формулы (15) использовано разложение

$$\frac{1}{1-\omega/z} = 1 + \frac{\omega}{z} + \left(\frac{\omega}{z}\right)^2 + \ldots, \tag{17}$$

которое, разумеется, может быть лишь асимптотическим. Оно справедливо, когда $|z|$ значительно больше всех частот, имеющихся в системе, при этом имеются в виду все частоты ω, для которых $\chi''(k,\omega)$ отлична от нуля. Можно также связать правила сумм с разложением в ряд Тейлора по времени t. Выражение (15) эквивалентно равенству

$$\chi''(k,t) = \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-it)^n}{n!} \left\langle \omega^{(n+1)}(k) \right\rangle \chi(k), \tag{18}$$

откуда ясно, что высокочастотное разложение эквивалентно разложению для коротких временных интервалов.

2. ПРОБЛЕМА МОМЕНТОВ

Рассмотрим момент n-ого порядка M_n функции $\chi(\omega)$

$$M_n = \int_a^b \omega^n \chi(\omega)\rho(\omega)d\omega, \tag{19}$$

где $\rho(\omega)$-весовая функция. Заметим, что линейной заменой переменной можно изменить пределы интегрирования. В результате изменится область определения $\chi(\omega)$ и новые моменты будут линейно выражаться через конечное число исходных. Например, пусть

$$x = 2\pi \frac{(\omega - a)}{(b-a)}. \tag{20}$$

Тогда

$$M_n = \frac{2\pi}{b-a} \int_0^{2\pi} \left(\frac{(b-a)x}{2\pi}\right)^n \chi\left(\frac{(b-a)}{2\pi}x - a\right) \rho\left(\frac{(b-a)}{2\pi}x - a\right) dx. \tag{21}$$

Положим

$$\chi(\omega) = \varphi(x), \quad \rho(\omega) = \omega(x), \tag{22}$$

и

$$\mu_n = \int_0^{2\pi} x^n \varphi(x)\omega(x)dx. \tag{23}$$

Тогда

$$\mu_n = \left(\frac{2\pi}{b-a}\right)^{n+1} \int_a^b (\omega - a)^n \chi(\omega)\rho(\omega)d\omega, \tag{24}$$

и следовательно

$$\mu_n = \left(\frac{2\pi}{b-a}\right)^{n+1} \sum_{k=0}^{n} C_n^k (-a)^{n-k} M^k . \tag{25}$$

Отсюда видно, что в силу линейности преобразования пределы интегрирования в (19) можно изменить, не прибегая к каким-либо бесконечным процессам. Обычно рассматриваются пределы $(-\infty,\infty)$, $(0,\infty)$ и $(-1,1)$. Для решения проблемы моментов необходимо установить связь между моментами и коэффициентами разложения функции χ по полиномам, ортогональным с весом ρ в промежутке (a,b). Предположим, что интервалом интегрирования является $(-\infty,\infty)$, а весовой множитель равен $\exp(-\omega^2)$. Можно, конечно, выделить множитель $\exp(-\omega^2)$ из функции $\chi(\omega)$ и определить новую неизвестную функцию $\psi(\omega)$ соотношением

$$\chi(\omega) = \exp(-\omega^2)\psi(\omega) . \tag{26}$$

Соответствующими ортогональными полиномами на интервале $(-\infty,\infty)$ будут $H_n(\omega)$. Разложим теперь $\chi(\omega)$ следующим образом:

$$\chi(\omega) = \sum_n a_n H_n(\omega), \quad a_n = \frac{1}{n!2^n\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(\omega) H_n(\omega) e^{-\omega^2} d\omega . \tag{27}$$

Так как $H_n(\omega)$-полиномы, то интеграл, входящий в выражение для a_n, можно непосредственно выразить через M_n. Например, $H_0(\omega)=1$, так что

$$a_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(\omega) e^{-\omega^2} d\omega = \frac{M_0}{\sqrt{\pi}} . \tag{28}$$

В общем случае

$$H_n(x) = \sum_k \frac{(-1)^k n!}{k!(n-k)!} (2x)^{n-2k} , \tag{29}$$

где при четном n последним членом разложения является постоянная, а при нечетном – член с первой степенью x. Тогда

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_k \frac{(-1)^k}{k!(n-k)!} \frac{M_{n-2k}}{2^{2k}} . \tag{30}$$

При помощи (30) легко найти функцию χ. Существует и другой подход к проблеме моментов. Покажем, что эта проблема эквивалентна интегральному уравнению первого рода. Обратимся, например, к разобранному выше случаю. Умножим обе части уравнения (19) на $\exp\left(-x^2\right)(2x)^n / n!$, получим

$$\frac{(2x)^n}{n!} e^{-x^2} M_n = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(2x\omega)^n}{n!} e^{-\left(x^2+\omega^2\right)} \chi(\omega) d\omega . \tag{31}$$

Суммируя теперь в обеих частях по n, имеем

$$e^{-x^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2x)^n}{n!}M_n=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-(x-\omega)^2}\chi(\omega)d\omega\,. \tag{32}$$

Предполагая, что ряд в левой части сходится, мы видим, что проблема моментов сводится к интегральному уравнению первого рода. Конечно, это уравнение можно решить, разложив χ по полиномам Эрмита. Однако существуют приближенные методы решения интегральных уравнений которые часто могут оказаться более практичными, чем использование соотношения (30) [4]. Подобным образом можно поступать и в случае других промежутков интегрирования. Интервалу $(0,\infty)$ соответствуют весовая функция $e^{-\omega}$ и полиномы Лагерра. Промежутку $(-1,1)$ и $\rho=1$ соответствуют полиномы Лежандра. Если $\rho=\sqrt{1-\omega^2}$, то соответствующими полиномами являются полиномы Чебышева. Весьма важно заметить, что разложение χ по ортогональным полиномам зависит от весовой функции ρ. Действительно характер сходимости для различных весовых функций может быть совершенно различен. Однако, как указывалось выше, выделяя множитель из $\chi(\omega)$ и рассматривая оставшийся множитель как неизвестную функцию, можно произвольным образом менять вес. Обозначим вес через $w(\omega)$, так что

$$M_n=\int_a^b\omega^n\rho(\omega)w(\omega)\varphi(\omega)d\omega,\quad \chi=w\varphi\,. \tag{33}$$

Наиболее подходящий (т.е. обеспечивающей наиболее быструю сходимость) будет также весовая функция w, которая возможно более близка к неизвестной функции χ. Очевидно, если она в точности равна χ, то в разложении φ по полиномам будет только один член, а именно $\varphi=1$. Весьма выгодно использовать любую доступную информацию, чтобы построить наилучшее возможное приближение к χ, и затем взять это приближение в качестве w.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В предлагаемой вниманию работе показано, что спонтанные флуктуации относительно равновесного состояния можно строго описать с помощью зависящих от времени корреляционных функций. При этом важным обстоятельством является то, что некоторые сведения о поведении корреляционных функций на коротких отрезках времени легко получить с помощью их частотных моментов, которые в свою очередь удовлетворяют определенным правилам сумм. Показано, что используя частотные моменты корреляционной функции можно восстановить саму корреляционную функцию.

Список литературы

1. Каданов Л. Квантовая статистическая механика / Каданов Л., Бейм Г. – М.: Мир, 1964.
2. Мартин П., Швингер Ю. Теория систем многих частиц / Мартин П., Швингер Ю. – М.: Изд-во иностр. лит., 1962.
3. Rice S.A. The statistical mechanics of simple liquids / Rice S.A., Gray P. – N. Y., Interscience, 1965.
4. Верлань А.Ф. Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы / Верлань А.Ф., Сизинов В.С. – К.: Наукова Думка, 1986.

Рощупкін С.М. Відновлення кореляційної функції по її моментам / Рощупкін С.М. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 117-124.
Розглянута загальна теорія лінійного відклику. Розглянута еволюція кореляційної функції при малому часі. Показане, що кореляційна функція маже бути відновлена по її частотним моментам.
Ключові слова: кореляційна функція, теорія лінійного откліку, частотні моменти.

Roshchupkin S.N. The constructing correlation function from its frequency moments / Roshchupkin S.N. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010 – Vol. 23(62), No.3. – P. 117-124.
General theory of linear response function was described. We consider evolution of correlation function at short time. It is shown that correlation function may be constructing from its frequency moments.
Keywords: correlation function, the theory of linear response, frequency moments.

Поступила в редакцию 11.10.2010 г.