23차 통계물리 겨울학교 보충 노트

박수찬
가톨릭대학교

Gaussian 적분

실수 대칭 양의 정부호 (real symmetric positive-definite) 행렬 $\mathcal{K}$에 대하여 다음 적분을 고려한다.

$$I = \int \left(\prod_{i=1}^{N} d\phi_i \right) \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{ij} \phi_i \mathcal{K}_{ij} \phi_j \right).$$

$O^T_{ki} \mathcal{K}_{ij} O_{jl} = d_k \delta_{kl}$ 로 대각화가 된다고 하고 ($d_i > 0$), $\phi_i = O_{ij}\psi_j$ 로 치환적분을 하면 (Jacobian은 $\det O = 1$),

$$\sum_{ij} \phi_i \mathcal{K}_{ij} \phi_j = \sum_{ijkl} \psi_k O^T_{ki} \mathcal{K}_{ij} O_{jl} \psi_l = \sum_k d_k \psi_k^2,$$
$$I = \prod_i \int d\psi_i \exp\left(-\frac{1}{2} \psi_i^2 d_i \right) = \sqrt{\frac{(2\pi)^N}{\det \mathcal{K}}}.$$

여기에서 $\det \mathcal{K} = \det O^T \mathcal{K} O = \prod_i d_i$ 를 이용하였다.

$\mathcal{J}_{ij}$ 계산

d차원 격자점의 벡터를 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_d)$라고 쓰고, Dirac의 bracket notation을 이용하여 $\mathcal{K}$를 다음과 같이 쓴다.

$$\langle \boldsymbol{x} | \mathcal{K} | \boldsymbol{y} \rangle = 2K \left[\mathfrak{p} \delta_{\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{d} \left(\delta_{x_j, y_j+1} + \delta_{x_j, y_j-1} \right) \right].$$

단, $x_i = 1, 2, \ldots, L$이고, 편의상 L은 홀수라고 하자.

Translational invariance를 이용하기 위해 Fourier 변환된 state vector $|\boldsymbol{k}\rangle$을 다음과 같이 도입하자.

$$|\boldsymbol{k}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{x}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} |\boldsymbol{x}\rangle, \quad \boldsymbol{k} = (k_1, \ldots, k_d).$$

위에서 $k_i = 2\pi n_i / L$이고 $n_i = -(L-1)/2, \ldots, (L-1)/2$ 인 정수이다 (periodic boundary conditions).

$\mathcal{L} = \mathcal{K}/(2K)$라 하자. $\mathcal{L}$의 성질만 분석하면 충분하다. $|\boldsymbol{k}\rangle$은 $\mathcal{L}$의 eigenstate임을 다음과 같이 확인할 수 있다.

$$\mathcal{L}|\boldsymbol{k}\rangle = \sum_{\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}} \frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{y}}}{\sqrt{N}} |\boldsymbol{x}\rangle \langle \boldsymbol{x}|\mathcal{L}|\boldsymbol{y}\rangle = \left[\mathfrak{p} + \sum_{j=1}^{d} \cos(k_j) \right] |\boldsymbol{k}\rangle.$$

이로부터 $\mathfrak{p} > d$이어야 $\mathcal{L}$ (즉, $\mathcal{K}$)은 양의 정부호 행렬이 됨을 알 수 있다. 따라서,

$$\mathcal{L}^{-1}_{\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}} \equiv \langle \boldsymbol{x}|\mathcal{L}^{-1}|\boldsymbol{y}\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{k}\rangle\langle \boldsymbol{k}|\boldsymbol{y}\rangle}{\mathfrak{p} + \sum_{j=1}^{d} \cos(k_j)}$$
$$= \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}}{\mathfrak{p} + \sum_{j=1}^{d} \cos(k_j)}.$$

$N \to \infty$이면 위 합은 아래의 적분이 된다 (Riemann 적분).

$$I_d(\boldsymbol{r}) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{\mathfrak{p} + \sum_{j=1}^{d} \cos(k_j)},$$
$$\mathcal{L}^{-1}_{\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}} = I_d(\boldsymbol{r}) + o(1) \quad (\boldsymbol{r} \equiv \boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}).$$

$A = \mathfrak{p} + \sum_{j=2}^{d} \cos k_j > 1$이라고 하고 k_1에 대하여 먼저 적분을 하자. 편의상 $x = r_1$은 자연수라고 두자.

$$I_1(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{ikx} dk}{A + \cos k} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{2z^x dz}{z^2 + 2Az + 1}. \quad (1)$$

위에서 C는 원점이 중심이고 반지름이 1인 복소평면의 원을 의미한다. $A = \cosh \kappa > 1$라고 하면 ($\kappa > 0$), $z = -e^{-\kappa}$에서 simple pole을 가지므로, ($-e^{\kappa}$는 C 바깥)

$$I_1(x) = \frac{(-1)^x e^{-\kappa x}}{\sinh \kappa}.$$

식 (1)에서 $k \mapsto -k$로 치환하면 $I_1(x) = I_1(-x)$이므로 임의의 정수 x에 대하여 $I_1(x) = I_1(|x|)$ 가 된다.

이제 d차원 적분을 고려하자. $\boldsymbol{r}$의 성분중, 가장 큰 절대값을 갖는 성분을 x라고 하고, 이 성분에 수직인 성분을 $\boldsymbol{r}_\perp$이라고 하자. 그러면 I_d는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$|I_d(\boldsymbol{r})| = \left| \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^{d-1}k_\perp}{(2\pi)^{d-1}} e^{i\boldsymbol{k}_\perp\cdot\boldsymbol{r}_\perp} I_1(x) \right|$$
$$\leq \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^{d-1}k_\perp}{(2\pi)^{d-1}} \frac{e^{-\kappa|x|}}{\sinh \kappa}.$$

$\mathfrak{p} - d + 1 := \cosh(\sqrt{d}\kappa_0)$라고 하면, $|\boldsymbol{r}|^2 = |\boldsymbol{r}_\perp|^2 + x^2 \leq x^2 d$이므로, $\kappa|x| > \kappa_0 |\boldsymbol{r}|$, $\kappa > \kappa_0$이다. 따라서, $|I_d(\boldsymbol{r})| \leq e^{-\kappa_0|\boldsymbol{r}|}/\sinh\kappa_0$ 가 성립되어 $\mathcal{J}_{\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}}$는 $|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|$가 큰 경우에 (최소한) 지수함수적으로 감소함을 알 수 있다.

$\Delta(\boldsymbol{r})$ 계산

$\int_0^\infty dt e^{-yt} = 1/y$를 이용하고, $\boldsymbol{k}$의 각 성분에 대한 gaussian 적분을 하면, $\Delta(\boldsymbol{r})$은 다음과 같이 된다.

$$
\begin{aligned}
\Delta(\boldsymbol{r}) &= \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{\alpha^2 k^2 + \mu^2} = \int_0^\infty dt \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \exp\left(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \alpha^2 t k^2 - \mu^2 t\right) = \int_0^\infty \frac{dt}{(4\pi\alpha^2 t)^{d/2}} \exp\left[-\mu^2 t - \frac{r^2}{4\alpha^2 t}\right] \\
&= \frac{\mu^{d-2} y^{-\nu}}{2\alpha^d (2\pi)^{d/2}} \int_{-\infty}^\infty dx e^{-\nu x} \exp(-y\cosh x) = \frac{\mu^{d-2} y^{-\nu}}{\alpha^d (2\pi)^{d/2}} \int_0^\infty \cosh(\nu x) \exp\left(-y\cosh x\right) dx = \frac{\mu^{d-2}}{\alpha^d (2\pi)^{d/2}} \frac{K_\nu(y)}{y^\nu}.
\end{aligned}
$$

위에서 $t = re^x/(2\alpha\mu)$로 치환하였고 ($y \equiv \mu r/\alpha, \nu \equiv \frac{d}{2} - 1$), $e^{-\nu x} = \cosh(\nu x) - \sinh(\nu x)$이고 sinh을 포함한 적분은 0이 됨을 이용하였다. 또한, $K_\nu(y)$는 modified Bessel function of the second kind로서

$$
K_\nu(y) = \int_0^\infty \cosh(\nu t) \exp(-y\cosh t) dt = K_{-\nu}(y)
$$

를 만족한다. $y \gg 1$에 대하여 $K_\nu(y) \sim e^{-y} y^{-1/2}$이고, $y \ll 1$인 경우, $K_\nu(y) \sim y^{-|\nu|}$이므로,

$$
\Delta(\boldsymbol{r}) \sim \begin{cases} e^{-\mu|\boldsymbol{r}|/\alpha} r^{-(d-1)/2}, & \mu r \gg 1, \\ r^{-(d-2)}, & \mu r \ll 1 \text{ and } d \geq 2, \\ \text{const}, & \mu r \ll 1 \text{ and } d < 2. \end{cases}
$$