объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-87-329

В.И.Юкалов

СОСУЩЕСТВОВАНИЕ ФАЗ С РАЗНЫМИ ГРУППАМИ СИММЕТРИИ

Направлено в Оргкомитет XVI Международного коллоквиума по теоретико-групповым методам в физике, Варна, НРБ, июнь 1987 г.

1987

При описании фазовых переходов между чистыми термодинамическими фазами возникает следующая характерная ситуация /I/. Гамильтониан системы инвариантен относительно некоторой группы преобразований G, называемой группой симметрии гамильтониана. Эта группа имеет подгруппы $G_\alpha \subset G$, соответствующие чистым термодинамическим фазам. Вообще говоря, вопрос о том, какие фазы возможны при заданной группе симметрии гамильтониана и какие подгруппы отвечают каждой из фаз,- это отдельная сложная проблема /2/, которая здесь не рассматривается. Допустим, что соответствие между подгруппами симметрии и термодинамическими фазами установлено. Имеется другая проблема, связанная с тем, что в природе многие системы не являются чистыми, а состоят из нескольких фаз. Причем эти фазы не локализованы в пространственных доменах, а флуктуируют, меняя свои конфигурации и перемешиваясь. Если время наблюдения гораздо больше времени перемешивания, то формально система выглядит однородной, несмотря на то, что она в действительности состоит из нескольких фаз с разной симметрией. Статистическая теория таких гетерофазных флуктуаций была предложена автором /3-7/. В данном докладе анализируются некоторые математические аспекты, на которых базируется эта теория.

Пусть имеется система частиц на измеримом по Лебегу множестве $\mathbb{V} = \{x \mid mes\, \mathbb{V} = \int_{\mathbb{V}} dx = V\}$. На множестве $\mathbb{V}$ задано гильбертово пространство микроскопических состояний $\mathcal{H}$. На этом пространстве определена алгебра локальных наблюдаемых $\mathcal{A}(\Lambda) = \{A(\Lambda)\}$ $(\Lambda \subset \mathbb{V})$, образованная операторами вида

$$A(\Lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} \int_{\Lambda} A_k(x_1, x_2, \dots x_k)\, dx_1 dx_2 \dots dx_k \;,$$

где $A_k(\cdots)$ - операторное распределение, $A_0 \equiv const\ \hat{1}$. При конструировании упорядоченного множества $\{\Lambda_i \mid i = 1, 2, \dots\}$ ограниченных открытых областей $\Lambda_i \subset \Lambda_{i+1}$ и задании изотонной последовательности алгебр $\mathcal{A}(\Lambda_1) \subset \mathcal{A}(\Lambda_2) \subset \dots$, в которой $\Lambda_1 \subset \Lambda_2 \subset \cdots$, получается сеть алгебр $\{\mathcal{A}(\Lambda_i)\}$. Для сети алгебр можно определить индуктивный предел, $\lim_{i\to\infty} \mathcal{A}(\Lambda_i)$, называемый квазилокальной алгеброй.

Предположим, рассматриваемая система состоит из нескольких термодинамических фаз, перенумерованных индексом $\alpha = 1, 2, \dots s$. Пространственное расположение фаз характеризуется заданием семейства подмножеств $\{\mathbb{V}_\alpha\}$, образующего покрытие множества $\mathbb{V}$,

$$\bigcup_{\alpha=1}^{s} \mathbb{V}_\alpha = \mathbb{V}\,, \quad \sum_{\alpha=1}^{s} V_\alpha = V \quad (V_\alpha \equiv \mathrm{mes}\, \mathbb{V}_\alpha)\,. \tag{1}$$

В свою очередь, в пространстве микроскопических состояний $\mathcal{H}$ можно выделить [7] подпространства $\mathcal{F}_\alpha \subset \mathcal{H}$ $(\alpha = 1,2,\dots s)$, на которых сосредоточены условные вероятностные меры, отвечающие соответствующим термодинамическим фазам. Каждое из пространств $\mathcal{F}_\alpha$ представляет собой множество векторов, типичных [7] для фазы α . На пространстве $\mathcal{F}_\alpha$ определяется представление алгебры локальных наблюдаемых $\pi_\alpha[\mathcal{A}(\Lambda_\alpha)]$ для областей $\Lambda_\alpha \subset \mathbb{V}_\alpha$. При записи представлений операторов из этой алгебры можно определить операторные распределения $A_{k\alpha}(\cdots)$ с помощью равенства

$$\pi_\alpha[A(\Lambda_\alpha)] = \sum_{k=0}^{\infty} \int_{\Lambda_\alpha} A_{k\alpha}(x_1, x_2, \dots x_k)\, dx_1 dx_2 \dots dx_k\,. \tag{2}$$

Разбиение множества $\mathbb{V}$ на подмножества $\{\mathbb{V}_\alpha\}$ проводится с помощью метода разделяющих поверхностей Гиббса в его теории гетерогенных систем. **Математически такое разбиение удобно фиксировать** [6,7], **задав набор характеристических** функций подмножеств, имеющих вид

$$\xi_\alpha(x) = \begin{cases} 1, & x \in \mathbb{V}_\alpha\,, \\ 0, & x \notin \mathbb{V}_\alpha\,. \end{cases} \tag{3}$$

Тогда на основании тождества

$$\int_{\mathbb{V}_\alpha} A_{k\alpha}(x_1, \dots x_k)\, dx_1 \dots dx_k \equiv \int_{\mathbb{V}} A_{k\alpha}(x_1, \dots x_k; \xi_\alpha)\, dx_1 \dots dx_k$$

представление квазилокальной алгебры $\pi_\alpha[\mathcal{A}(\mathbb{V}_\alpha)]$ может быть продолжено до представления квазилокальной алгебры $\pi_\alpha[\mathcal{A}(\mathbb{V};\xi_\alpha)] \equiv$ $\equiv \mathcal{A}_\alpha(\xi_\alpha)$ с операторными распределениями

$$A_{k\alpha}(x_1, x_2, \dots x_k; \xi_\alpha) = A_{k\alpha}(x_1, x_2, \dots x_k) \prod_{j=1}^{k} \xi_\alpha(x_j)\,.$$

Отсюда видно, что $\xi_\alpha(x)$ играет роль дополнительной функциональной переменной. Для того чтобы определить представление квазилокальной алгебры $\mathcal{A}(\mathbb{V})$, которую в дальнейшем будем называть глобальной алгеброй, дабы отличать её от квазилокальных алгебр $\mathcal{A}(\mathbb{V};\xi_\alpha)$, необходимо понять , какую конструкцию можно составить из подпространств $\mathcal{F}_\alpha$.

Допустим, имеется топологическое пространство $\mathcal{F}$, на котором задано отображение $map_\alpha : \mathcal{F} \to \mathcal{F}_\alpha$, определяющее $\mathcal{F}_\alpha$. Тройка $(\mathcal{F}, map_\alpha, \mathcal{F}_\alpha)$ называется пространством расслоения, $\mathcal{F}$ —тотальным пространством, $\mathcal{F}_\alpha$ – базой расслоения. Процедура получения $\mathcal{F}_\alpha$ из $\mathcal{F}$ по данному отображению называется расслоением, а обратный процесс восстановления $\mathcal{F}$ по $\mathcal{F}_\alpha$ – сечением расслоения. Если тотальные пространства различных расслоений гомеоморфны, а их базы одинаковы, то такие расслоения эквивалентны. Для наших целей можно воспользоваться любым из эквивалентных расслоений. Удобно выбрать так называемое стандартное расслоение с тотальным пространством в виде тензорного произведения $\bigotimes_\alpha \mathcal{F}_\alpha$. Это тотальное пространство при фиксированном наборе отображений $\mathcal{F} \to \mathcal{F}_\alpha$ $(\alpha = 1,2,\dots s)$ будем называть стандартным расслоенным пространством

$$\mathcal{F} = \bigotimes_\alpha \mathcal{F}_\alpha \qquad (map_\alpha : \mathcal{F} \to \mathcal{F}_\alpha)\,. \tag{4}$$

Базы расслоения, соответствующие разным термодинамическим фазам, не обязательно взаимно ортогональны, хотя во многих случаях это так [5].

Теперь глобальную алгебру $\mathcal{A}(\mathbb{V})$ можно интерпретировать как прямую сумму квазилокальных алгебр $\mathcal{A}(\mathbb{V}, \xi_\alpha)$, а соответствующее представление $\pi[\mathcal{A}(\mathbb{V})] \equiv \mathcal{A}(\xi)$, в котором

$$\xi \equiv \{\xi_\alpha(x) \mid \alpha = 1,2,\dots s\,;\ x \in \mathbb{V}\}\,, \tag{5}$$

следует задавать на стандартном расслоенном пространстве (4) в виде

$$\mathcal{A}(\xi) = \bigoplus_\alpha \mathcal{A}_\alpha(\xi_\alpha) = \{A(\xi)\}\,. \tag{6}$$

При этом представления операторов имеют структуру

$$A(\xi) = \bigoplus_\alpha A_\alpha(\xi_\alpha)\,, \qquad A_\alpha(\xi_\alpha) = \sum_{k=0}^{\infty} \int_{\mathbb{V}} A_{k\alpha}(x_1, x_2, \dots x_k) \prod_{j=1}^{k} \xi_\alpha(x_j)\, dx_j\,. \tag{7}$$

Множество всех возможных наборов образует топологическое пространство $\{\xi\}$, на котором задается [7] функциональная мера $\mathcal{D}\xi$. Статистический оператор квазиравновесного гетерофазного ансамбля имеет форму

$$\rho(\xi) = e^{-\Gamma(\xi)} \Big/ \mathrm{Tr}_{\mathcal{F}} \int e^{-\Gamma(\xi)} \mathcal{D}\xi\,, \tag{8}$$

где $\Gamma(\xi)$ – квазигамильтониан системы. Математические ожидания, сопоставляемые наблюдаемым величинам, определяются по формуле

$$\langle A\rangle = \mathop{\mathrm{Tr}}_{\mathcal{F}} \int \rho(\xi)\, A(\xi)\,\mathcal{D}\xi . \tag{9}$$

Функциональные интегралы в (8) и (9) описывают усреднение по конфигурациям фаз.

Задавая функциональную меру $\mathcal{D}\xi$, можно заметить, что усреднение по фазовым конфигурациям содержит два вида действий. Первое действие – это перебор всех конфигураций при фиксированном наборе $p=\{p_\alpha \mid \alpha=1,2,\dots s\}$ геометрических вероятностей

$$p_\alpha = \frac{V_\alpha}{V} \quad \left(0\le p_\alpha\le 1\,,\ \sum_{\alpha=1}^{s} p_\alpha = 1\right). \tag{10}$$

Второе действие – это вариация каждого из p_α от нуля до единицы с учетом условия их нормировки. В соответствии со сказанным

$$\mathcal{D}\xi = \mathcal{D}_p\xi\, dp\,,\quad dp=\prod_{\alpha=1}^{s}\delta\left(\sum_{\gamma=1}^{s}p_\gamma -1\right)dp_\alpha . \tag{11}$$

Функциональный дифференциал $\mathcal{D}_p\xi$ определяется следующим образом. Задается разбиение каждого из подмножеств $\mathbb{V}_\alpha$ посредством подпокрытий $\{\mathbb{V}_{\alpha i}\}$, таких, что

$$\bigcup_{i=1}^{n_\alpha}\mathbb{V}_{\alpha i}=\mathbb{V}_\alpha\,,\ \sum_{i=1}^{n_\alpha}V_{\alpha i}=V_\alpha\ \left(\sum_{\alpha=1}^{s}n_\alpha = n\,,\ V_{\alpha i}=\mathrm{mes}\,\mathbb{V}_{\alpha i}\right).$$

Характеристическая функция (3) представляется суммой

$$\xi_\alpha(x)=\sum_{i=1}^{n_\alpha}\xi_{\alpha i}(x-a_{\alpha i})\,,\ \xi_{\alpha i}(x-a_{\alpha i})=\begin{cases}1, & x\in\mathbb{V}_{\alpha i}\,,\\ 0, & x\notin \mathbb{V}_{\alpha i}\,.\end{cases}$$

Имея в виду предельный переход

$$n\to\infty\,,\ n_\alpha\to\infty\,,\ V_{\alpha i}\to 0\quad (p_\alpha = const)\,, \tag{12}$$

можно записать асимптотическое выражение

$$\mathcal{D}_p\xi \simeq \prod_{\alpha=1}^{s}\prod_{i=1}^{n_\alpha}\frac{da_{\alpha i}}{V}\quad (n\to\infty)\,. \tag{13}$$

Окончательно усреднение функционала $F(\xi)$ по фазовым конфигурациям при фиксированном наборе геометрических вероятностей (10) определяет-

ся как функциональный интеграл

$$\int F(\xi)\,\mathcal{D}_p\xi = \lim_{n\to\infty}\int F(\xi)\prod_{\alpha=1}^{s}\prod_{i=1}^{n_\alpha}\frac{da_\alpha}{V}\,, \tag{14}$$

в котором предел понимается в смысле (12).

Теорема 1. Если функционал $F(\xi)$ является полиномом от характеристических функций (3), то

$$\int F(\xi)\,\mathcal{D}_p\xi = F(p)\,, \tag{15}$$

где $F(p)$ получается из $F(\xi)$ в результате замены $\xi_\alpha(x)\to p_\alpha$. Доказательство со всеми подробностями дается в работе /7/.

Следствие. Теорему можно распространить на произвольные функционалы, представленные рядами по степеням характеристических функций подмножеств, если полагать, как это обычно считается в физических задачах, что суммирование и интегрирование допустимо менять местами. Тогда из формулы (9) для математического ожидания следует

$$\langle A\rangle = \mathop{\mathrm{Tr}}_{\mathcal F}\int_0^1 \rho(p)\,A(p)\,dp\,, \tag{16}$$

дифференциал dp определен в (11),

$$\rho(p)=e^{-\Gamma(p)}\Big/\mathop{\mathrm{Tr}}_{\mathcal F}\int_0^1 e^{-\Gamma(p)}\,dp\,. \tag{17}$$

Теорема 2. Пусть у функции

$$y(p)=-\frac1N \ln \mathop{\mathrm{Tr}}_{\mathcal F}\, e^{-\Gamma(p)}\,, \tag{18}$$

в которой $N\equiv N(V)$ – некоторое число, такое, что

$$N\to\infty\,,\ V\to\infty\,,\ N/V\to const\,, \tag{19}$$

существует абсолютный минимум

$$y(w)=\mathop{\mathrm{abs\,min}}_p\, y(p)\,. \tag{20}$$

Тогда

$$\lim_{N\to\infty}\frac1N \mathop{\mathrm{Tr}}_{\mathcal F}\left[\int_0^1\rho(p)A(p)\,dp - \rho(w)A(w)\right]=0\,, \tag{21}$$

где предел понимается в смысле (19),

$$\rho(w) = e^{-\Gamma(w)} \Big/ \mathop{\mathrm{Tr}}_{\mathcal{F}} e^{-\Gamma(w)} . \tag{22}$$

Доказательство. Вводя обозначение

$$\bar{A}(p) \equiv \mathop{\mathrm{Tr}}_{\mathcal{F}} e^{-\Gamma(p)} A(p) \Big/ \mathop{\mathrm{Tr}}_{\mathcal{F}} e^{-\Gamma(p)}$$

и используя (I6), можно записать

$$\mathop{\mathrm{Tr}}_{\mathcal{F}} \rho(p) A(p) = e^{-Ny(p)} \bar{A}(p) \Big/ \int_0^1 e^{-Ny(p)} dp .$$

Применяя метод Лапласа при $N \to \infty$, находим

$$\int_0^1 e^{-Ny(p)} \bar{A}(p)\, dp \simeq e^{-Ny(w)} \bar{A}(w) \prod_{\alpha=1}^{s-1} \left(\frac{2\pi}{N y''_\alpha} \right)^{1/2} ,$$

где $y''_\alpha \equiv \partial^2 y(w) / \partial w_\alpha^2$ $(N \to \infty)$. Поэтому

$$\mathop{\mathrm{Tr}}_{\mathcal{F}} \int_0^1 \rho(p) A(p)\, dp \simeq \bar{A}(w) .$$

Вспоминая обозначение $\bar{A}(p)$ и определение (22), получаем (2I).

Следствие. Математическое ожидание (I6) дается выражением

$$\langle A \rangle \simeq \mathop{\mathrm{Tr}}_{\mathcal{F}} \rho(w) A(w) \qquad (V \to \infty) . \tag{23}$$

Представление операторов наблюдаемых величин (7) на расслоенном пространстве (4) принимает структуру

$$A(w) = \bigoplus_\alpha A_\alpha(w_\alpha) ,$$
$$A_\alpha(w_\alpha) = \sum_{k=0}^{\infty} w_\alpha^k \int_V A_{k\alpha}(x_1, x_2, \ldots x_k)\, dx_1 dx_2 \ldots dx_k . \tag{24}$$

Набор $w \equiv \{ w_\alpha \}$ задает вероятности термодинамических фаз и находится из минимизации термодинамического потенциала

$$y(w) = -\frac{1}{N} \ln \mathop{\mathrm{Tr}}_{\mathcal{F}} e^{-\Gamma(w)} \tag{25}$$

при условии нормировки $\sum_{\alpha=1}^{s} w_\alpha = 1$, следующем из (I0).

Развитая теория применима для гетерофазных систем произвольной природы и любого числа термодинамических фаз. Её даже можно обобщить на случай континуальной смеси фаз, когда фазовый индекс α пробегает непрерывное множество $\{\alpha\}$. Например, это могут быть магнитные фазы с разными локальными величинами или направлениями намагниченностей. Такая ситуация может возникнуть в разупорядоченных веществах с примесями /I8/ или в спиновых стеклах /9,I0/. Обобщение на континуальную смесь фаз осуществляется достаточно просто. Расслоенное пространство (4) становится непрерывным произведением. На множестве $\{\alpha\}$ задается мера $dm(\alpha)$. Представление глобальной алгебры на расслоенном пространстве (4) определяется как прямой интеграл на поле представлений $\{\mathcal{A}_\alpha(\xi_\alpha)\}$, то есть $\mathcal{A}(\xi) = \int^{\oplus} \mathcal{A}_\alpha(\xi_\alpha)\, dm(\alpha)$. Все последующие выражения сохраняют свой смысл при замене сумм по α на соответствующие интегралы по $dm(\alpha)$.

Литература

I. Рюэль Д. Статистическая механика. М.: Мир, I97I.
2. Birman J.L. – Physica, I982, II4A, p. 564.
3. Юкалов В.И. – ТМФ, I976, 26, с. 403.
4. Yukalov V.I. – Physica, I98I, I08A, p. 402.
5. Yukalov V.I. – Phys. Lett., I98I, 85A, p. 68.
6. Yukalov V.I. – Phys. Rev., I985, B32, p. 436.
7. Yukalov V.I. – Physica, I987, I4IA, p. 352.
8. Аржников А.К., Ведяев А.В. – ФНТ, I982, 8, с. II85.
9. Duplantier B. – J. Phys., I98I, AI4, p. 283.
I0. Sompolinsky H. – Phys. Rev. Lett., I98I, 47, p. 935.

Рукопись поступила в издательский отдел
I2 мая I987 года.