объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-85-370

В.И.Юкалов

ЭФФЕКТИВНЫЕ ГАМИЛЬТОНИАНЫ ДЛЯ СИСТЕМ СО СМЕШАННОЙ СИММЕТРИЕЙ

Направлено в журнал "Physica A"

1985

1. ВВЕДЕНИЕ

В природе существует огромное число веществ, представляющих собой смеси различных термодинамических фаз. Так, вблизи точек фазовых переходов имеются области предпереходных явлений. В этих областях сосуществуют две фазы, основная и зародыши конкурирующей. Учет такого сосуществования принципиально необходим по нескольким причинам. Во-первых, наличие зародышей резко увеличивает кинетические коэффициенты [1]; во-вторых, оно приводит к качественному изменению термодинамических величин и появлению в некоторых случаях своеобразных аномалий [2,3]; в-третьих, без учета таких гетерофазных зародышей во многих случаях вообще невозможно правильное построение теории фазовых переходов, это, например, непосредственно относится к теории плавления [4–7].

Приведем еще несколько конкретных примеров сосуществующих фаз. Методами рассеяния второй гармоники света и малоугловым рассеянием рентгеновских лучей исследовались предпереходные явления в $BaTiO_3$. Выше точки сегнетоэлектрического перехода были выявлены кластеры поляризации [8]. Методом ядерного гамма-резонанса в Ni были обнаружены [9] кластеры спинов при температуре выше точки Кюри Θ_c. Когерентное неупругое рассеяние нейтронов свидетельствует о существовании в Ni и Fe спиновых волн в парамагнитной области [10] от Θ_c до $2\Theta_c$, хотя их наличие в парамагнитном Fe было подвергнуто сомнению [11]. С помощью электронного парамагнитного резонанса было выяснено, что органические стекла почти во всей области их существования представляют собой смесь твердоподобных и жидкоподобных состояний [12]. Ферромагнетизм может сосуществовать с фазой спинового стекла [13–15] в таких сплавах, как Au–Fe, Pd–Ni, Ni–Mn. Ферромагнитное и антиферромагнитное состояния сосуществуют в $(Mn_{0,95}Ni_{0,05})_3B_4$, как это следует [16] из измерений намагниченности и восприимчивости. Экспериментальные исследования методом трансмиссионной электронной микроскопии выявили сосуществование сегнетоэлектрической и антисегнетоэлектрической фаз в цирконате-титанате свинца-лантана [17]. Монослои Kr на графите представляют собой смеси соразмерной и несоразмерной фаз [18]. При больших плотностях тока в нормальных металлах возможно возникновение доменов с различной проводимостью [19]. В магнитных полупроводниках – халькогенидных шпинелях на фоне немагнитной матрицы появляются магнитные поляроны, ферроны [20]. Аморфный кремний с водородом представляет собой существенно

двухфазную систему, причем пространственное распределение областей фаз, отличающихся концентрацией водорода, совершенно случайно [21]. Наконец, обычный лед, оказывается, является на самом деле смесью из девяти различных кристаллографических фаз, что было выяснено [22] при помощи рассеяния Бриллюэна.

Приведенные примеры показывают, что возникновение разнообразных фазовых смесей – это довольно распространенное явление. Поскольку всякой фазе сопоставляется определенный тип симметрии, то о фазовых смесях можно говорить как о системе со смешанной симметрией.

Особый интерес представляют смеси флуктуирующих фаз. К таким смесям относятся системы, в которых флуктуационным образом появляются зародыши конкурирующих фаз, случайно распределенные в пространстве и имеющие конечное время жизни τ_f, гораздо меньшее времени проведения эксперимента τ_{exp}. Именно эта ситуация обычно имеет место при наблюдении предпереходных явлений. К флуктуирующим фазовым смесям следует отнести также системы, в которых каждая из фаз имеет большое /возможно даже бесконечное/ время жизни, но их распределение в пространстве хаотически флуктуирует с характерным временем τ_f, в течение которого каждая фаза успевает побывать почти во всех частях рассматриваемой системы, причем $\tau_f \ll \tau_{exp}$. По своим физическим свойствам к этим смесям очень близка система, в которой домены разных фаз фиксированы в пространстве случайным образом, так что, хотя время жизни доменов бесконечно и они неподвижны, но их число велико, а характерные объемы Λv гораздо меньше объема всей системы V. Это означает, что, если перейти к линейным размерам доменов $\Lambda\ell \sim (\Lambda v)^{1/3}$ и системы $L \sim V^{1/3}$, то $\Lambda\ell \ll L$. Последнее неравенство можно переписать в прежней форме $\tau_f \ll \tau_{exp}$, определив $\tau_f \sim \Lambda\ell / c_{exp}$, $\tau_{exp} \sim L / c_{exp}$, где c_{exp} – скорость распространения сигнала, используемого при измерении. В том случае, когда время жизни зародышей конкурирующей фазы конечно, необходимо, чтобы оно было гораздо больше времени установления локального равновесия τ_{loc}. Иначе вообще не имело бы смысла говорить о термодинамических фазах. Таким образом, смеси флуктуирующих фаз по определению обладают двумя основными качествами: во-первых, фазы случайно распределены в пространстве, во-вторых, характерные времена подчиняются неравенствам $\tau_{loc} \ll \tau_f \ll \tau_{exp}$. Для большинства веществ время установления локального равновесия $\tau_{loc} \lesssim 10^{-14}$ с. Следовательно, время фазовых флуктуаций $\tau_f \gtrsim 10^{-13}$ с.

В динамической картине движение зародышей одной фазы в другой описывается решениями солитонного или квазисолитонного типа. Физическая природа и математические аналоги таких гетерогенных зародышей подробно обсуждались ранее [23]. Вследствие сложности нелинейных уравнений, аналитические решения, соответствующие солитоноподобным объектам, существуют лишь для одномерных систем [24]. Поэтому и построение статистики солитонов возможно только в одномерном случае.

Устойчивые солитоны, по-видимому, можно было бы трактовать как своеобразные макроскопические дефекты и попытаться описывать их наподобие нелокализованных дефектов в квантовых кристаллах [25,26]. Однако такой подход был бы, очевидно, феноменологическим, так как он требует задания эффективного спектра солитона, а также его взаимодействий с другими солитонами и с частицами системы. Кроме того, реальные гетерофазные зародыши, как отмечалось выше, имеют конечное время жизни, и поэтому их нельзя описывать устойчивыми солитонами.

Микроскопическая теория смесей с флуктуирующими фазами была развита автором [27,5,6,23]. Эта теория была успешно применена для описания кристаллов с диссоциацией решетки и теории плавления [4-7], для исследования ферромагнетиков с парамагнитными зародышами [2,3,28-30], для построения последовательной двухжидкостной модели сверхпроводника [31,32] и для многих других гетерофазных систем. При этом основой теории таких смесей являлось постулирование формы исходного гамильтониана. Вид последнего, как было указано, представляет собой результат перемешивания фаз, или усреднения по конфигурациям гетерофазных флуктуаций [5,6,23,27]. И хотя математическая схема такого усреднения была обсуждена [23,33], его детальная реализация не была опубликована.

Цель данной статьи - устранить этот пробел. Здесь для произвольной решеточной системы дается строгое определение усреднения по гетерофазным конфигурациям с помощью функциональных сумм по характеристическим функциям. Находится общая форма эффективного гамильтониана, соответствующего гетерофазной решеточной системе произвольного вида. Результаты работы представляют корректный математический базис для теории, развитой автором, и обосновывают применимость этой теории к реальным физическим веществам.

2. СМЕШАННАЯ СИММЕТРИЯ

Симметрия системы определяется свойствами функций, образующих пространство физических состояний. Чтобы строго задать состояния со смешанной симметрией, необходимо вспомнить, как строятся пространства состояний для решеточных систем.

Рассмотрим N-узельную решетку $\mathbf{Z}(N) = \{i\}$ с узлами, перенумерованными переменной $i = 1,2\ldots N$. Число N считается, как обычно, асимптотически большим $(N \to \infty)$. Каждому узлу соответствует ортонормированная система функций $\{g_{i\nu}\}$. Замыкание линейной оболочки системы $\{g_{i\nu}\}$, пополненное скалярным произведением и нормой, генерированной этим скалярным произведением, дает гильбертово пространство

$$\mathcal{H}_i = \mathfrak{L}^2\{g_{i\nu}\} = \{g_i\}, \qquad \left(g_i = \sum_\nu C_\nu g_{i\nu}\right),$$

где C_ν - произвольные комплексные числа.

Пусть имеется набор $a = \{a_i\}$, состоящий из мультииндексов $a_i \in \mathbf{A} = \{a\}$. Определим генерирующий вектор

$$e^{a} = \bigotimes_{i \in \mathbf{Z}} e_i^{a_i}, \qquad e_i^{a_i} \in \mathcal{H}_i, \qquad \|e_i^{a_i}\| = 1. \qquad /1/$$

Этот вектор играет роль вакуума. Отберем те функции g_i, которые удовлетворяет неравенству

$$\sum_{i \in \mathbf{Z}} |(e_i^{a_i}, g_i) - 1| < \infty, \qquad /2/$$

и образуем из них неполное тензорное бесконечное /при $N \to \infty$ / произведение

$$g^{a} = \bigotimes_{i \in \mathbf{Z}}^{a} g_i, \qquad (a = \{a_i\}),$$

ассоциированное с генерирующим вектором e^{a}, то есть так называемое произведение Неймана. Класс эквивалентности функций g^{a}, задаваемый неравенством /2/ и дополненный скалярным произведением $(g^{a}, f^{a}) = \prod_{i \in \mathbf{Z}}^{a} (g_i, f_i)$ и нормой, порожденной этим скалярным произведением, определяет гильбертово пространство

$$\mathcal{H}^{a}[\mathbf{Z}] = \bigotimes_{i \in \mathbf{Z}}^{a} \mathcal{H}_i = \mathfrak{L}^2\{g^{a}\}. \qquad /3/$$

С физической точки зрения всякий фиксированный набор $a = \{a_i\}$ соответствует определенной симметрии системы, то есть конкретной термодинамической фазе. Генерирующий, или порождающий, вектор играющий роль вакуума, задает, посредством неравенства /2/, пространство /3/, описывающее чистые состояния с фиксированной симметрией.

Если на множестве $\mathbf{A} = \{a\}$ определена мера $\mu(a)$, то полное пространство всех чистых состояний дается интегралом Гильберта

$$\mathcal{H}[\mathbf{Z}] = \int_{\mathbf{A}}^{\oplus} \mathcal{H}^{a}[\mathbf{Z}]\, d\mu(a). \qquad /4/$$

Крайними примерами чистых состояний служат полностью упорядоченное и полностью разупорядоченное состояния. Первому соответствует условие $a_i = a_0$, что дает пространство

$$\mathcal{H}_1[\mathbf{Z}] = \mathcal{H}^{a}[\mathbf{Z}], \qquad (a = \{a_0\}). \qquad /5/$$

Если же задать множество $\mathbf{D} = \{\tilde{a}\} \subset \mathbf{A}$ из абсолютно стохастических последовательностей $\tilde{a}$, то полностью разупорядоченное чистое состояние принадлежит пространству

$$\mathcal{H}_2[\mathbf{Z}] = \int_{\mathbf{D}}^{\oplus} \mathcal{H}^{\tilde{a}}[\mathbf{Z}]\, d\mu(\tilde{a}). \qquad /6/$$

В промежутке между двумя указанными существует бесконечное множество всевозможных чистых состояний.

Очевидно, что, если под α подразумевать сферические углы, а под $\mathcal{H}_i$ спиновое пространство в узле i, то пространство /5/ отвечает ферромагнитной фазе, а пространство /6/ - парамагнитной. Понятно, что, задавая соответствующим образом меняющиеся от узла к узлу углы α_i, можно определить спиральную, антиферромагнитную и любые другие магнитные структуры. При этом отметим, что решетка $\mathbf{Z}(N)$ в реальном пространстве также может иметь произвольную структуру, а отнюдь не обязательно идеальна. Например, она может быть случайной, как в случае аморфных магнетиков [34]. При одинаковой спиновой структуре магнетик на идеальной решетке и аморфный магнетик соответствуют различным пространствам состояний, ортогональным друг к другу [35] и, естественно, имеют разные физические свойства [36].

Перейдем теперь к построению пространств состояний для систем со смешанной симметрией. Для наглядности будем иметь в виду два типа симметрии, то есть две различные фазы. Это ограничение не принципиально, а все получаемые результаты остаются справедливыми при любом числе фаз произвольной природы.

Допустим, N-узельная решетка $\mathbf{Z}(N)$ распадается на две подрешетки,

$$\mathbf{Z}(N) = \mathbf{Z}_1(N_1) \cup \mathbf{Z}_2(N_2), \qquad /7/$$

с N_1 и N_2 узлами соответственно; так что полное число узлов сохраняется:

$$N = N_1 + N_2. \qquad /8/$$

Если расположение подрешеток $\mathbf{Z}_1$ и $\mathbf{Z}_2$ фиксировано в пространстве, первой из них отвечает пространство физических состояний $\mathcal{H}^{\alpha}[\mathbf{Z}_1]$, а второй $\mathcal{H}^{\alpha'}[\mathbf{Z}_2]$, то полное пространство состояний такой системы представляется произведением $\mathcal{H}^{\alpha}[\mathbf{Z}_1] \otimes \mathcal{H}^{\alpha'}[\mathbf{Z}_2]$. Эта ситуация описывает систему, образованную локализованными доменами.

В случае же смеси флуктуирующих фаз необходимо учесть, что может изменяться как расположение подрешеток в реальном пространстве, так и число узлов в каждой из них. Обозначим набор чисел N_1 и N_2 при условии нормировки /8/ через $\tilde{N} = \{N_1, N_2\}$. Всякому возможному расположению подрешеток на полной решетке $\mathbf{Z}(N)$ поставим в соответствие индекс $\tilde{\chi}$. Рассмотрим двухфазную систему, для которой типы симметрий занумерованы индексом $s = 1,2$. Пусть $\mathcal{F}_s[\mathbf{Z}_s]$, являющееся одним из $\mathcal{H}^{\alpha}[\mathbf{Z}_s]$ или комбинацией последних, означает пространство состояний для части системы, расположенной на подрешетке $\mathbf{Z}_s$, где находится фаза с номером s. Тогда пространство состояний для обеих частей системы имеет вид

$$\mathcal{F}(\tilde{N}, \tilde{\chi}) = \mathcal{F}_1[\mathbf{Z}_1] \otimes \mathcal{F}_2[\mathbf{Z}_2]. \qquad /9/$$

Полное пространство состояний флуктуирующей смеси является, очевидно, прямой суммой пространств вида /9/ по всем числам узлов $N_s = 0,1,2\ldots N$ при сохранении нормировки /8/ и по всевозможным конфигурациям /формам и положениям/ подрешеток при фиксированном наборе $\tilde{N}$:

$$\tilde{\mathcal{F}} = \bigoplus_{\tilde{N}} \bigoplus_{\tilde{\chi}} \mathcal{F}(\tilde{N}, \tilde{\chi}). \qquad /10/$$

Из построения следует, что пространство /10/ содержит все допустимые смешанные состояния системы, включая и чистые, и неоднородные состояния, которые с термодинамической точки зрения могут оказаться метастабильными [37-39] или даже лабильными [38,39].

3. ЛОКАЛЬНАЯ СИММЕТРИЯ

Гамильтониан решеточной системы в общем случае может быть записан в виде

$$H = \sum_n H_n, \quad H_n = \sum_{i_1 \ldots i_n} H_{i_1 \ldots i_n} \bigotimes_{j_1 \neq i_1} 1_{j_1} \otimes \ldots \bigotimes_{j_n \neq i_n} 1_{j_n}, \qquad /11/$$

где 1_j - единичные операторы, H_n - n-узельный гамильтониан. Статистическая сумма смеси флуктуирующих фаз должна содержать квантовомеханический шпур по пространству /9/, а также суммирование по всем допустимым конфигурациям фаз и числам узлов в каждой из них:

$$Z = \mathrm{Sp}_{\tilde{\mathcal{F}}}\, e^{-\beta H} = \sum_{\tilde{N}} \sum_{\tilde{\chi}} p_{\tilde{\chi}}\, \mathrm{Sp}_{\mathcal{F}(\tilde{N},\tilde{\chi})}\, e^{-\beta H}. \qquad /12/$$

Здесь $\beta\Theta = 1$, Θ - температура в энергетических единицах, $p_{\tilde{\chi}}$ - нормировочный множитель фазовых конфигураций, определяемый равенством $\sum_{\tilde{\chi}} p_{\tilde{\chi}} = 1$ $(p_{\tilde{\chi}} = \mathrm{const})$.

Для дальнейшего преобразования формулы /12/ воспользуемся методом локальных квазисредних [23,33], обобщающим обычную процедуру квазиусреднения [40], согласно которой сведения о симметрии системы можно из пространства состояний перенести в гамильтониан. Симметрию последнего можно нарушить разными способами, например, включив в него аддитивный внешний источник, снимаемый после взятия термодинамического предела. Как было указано [23], источник допустимо исключать и одновременно с термодинамическим переходом /но, естественно, не ранее/. В отличие от чистых систем, где источник вводится глобальным образом, в случае смешанных систем он должен быть локальным, то есть неоднородным по пространству. Если удастся включить в гамильтониан все сведения о локальной симметрии, то такой гамильтониан можно определить на пространстве:

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_1[\mathbf{Z}] \otimes \mathcal{F}_2[\mathbf{Z}]. \qquad /13/$$

Выделение частей системы с нужной симметрией производится с помощью характеристической функции

$$\chi_{is} = \begin{cases} 1, & i \in \mathbf{Z}_s, \\ 0, & i \notin \mathbf{Z}_s. \end{cases} \qquad /14/$$

Обратим внимание, что /14/ - это именно функция, заданная на множестве, соответствующем решетке. Поэтому /14/ не следует путать со случайной узловой переменной.

Теперь, на пространстве /13/ можно определить гамильтониан

$$H(\tilde{N}, \tilde{\chi}) = \sum_n H_n(\tilde{N}, \tilde{\chi}), \qquad /15/$$

в котором

$$H_n(\tilde{N}, \tilde{\chi}) = \sum_{i_1 \dots i_n} \sum_{s_1 \dots s_n} \chi_{i_1 s_1} \dots \chi_{i_n s_n} H^{s_1 \dots s_n}_{i_1 \dots i_n},$$

$$H^{s_1 \dots s_n}_{i_1 \dots i_n} = H_{i_1 \dots i_n} \bigotimes_{j_1 \neq i_1} I_{j_1 s_1} \dots \bigotimes_{j_n \neq i_n} I_{j_n s_n}.$$

Источник, фиксирующий локальную симметрию, здесь в явном виде не выписывается. Его можно подразумевать. А можно, как хорошо известно, задавать нужную симметрию и другими способами, не требующими явного введения источника.

Гамильтониан /15/, при действии на пространство /13/, обладает нужными симметрийными свойствами на каждой из подрешеток. Поэтому

$$\mathrm{Sp}_{\mathcal{F}(\tilde{N}, \tilde{\chi})} e^{-\beta H} = \mathrm{Sp}_{\mathcal{F}} e^{-\beta H(\tilde{N}, \tilde{\chi})}. \qquad /16/$$

Это позволяет переписать статистическую сумму /12/ в форме

$$Z = \sum_{\tilde{N}} \sum_{\tilde{\chi}} p_{\tilde{\chi}} \mathrm{Sp}_{\mathcal{F}} e^{-\beta H(\tilde{N}, \tilde{\chi})}. \qquad /17/$$

Обратим внимание, что в случае двух фаз суммирование по $\tilde{N}$ содержит $N+1$ слагаемое. Следовательно, для величины

$$Z_N = \sup_{\tilde{N}} \sum_{\tilde{\chi}} p_{\tilde{\chi}} \mathrm{Sp}_{\mathcal{F}} e^{-\beta H(\tilde{N}, \tilde{\chi})} \qquad /18/$$

верно неравенство $Z_N \le Z \le (N+1) Z_N$, откуда сразу же вытекает асимптотическая форма для свободной энергии

$$f = -\frac{\Theta}{N} \ln Z \simeq -\frac{\Theta}{N} \ln Z_N, \quad (N \to \infty). \qquad /19/$$

Таким образом, из всех наборов $\tilde{N} = \{N_1, N_2\}$ нам нужен единственный, тот, который максимизирует статистическую сумму, то есть дает Z_N. Помня об этом, в дальнейшем будем писать $H\{\tilde{\chi}\} \equiv H(\tilde{N}, \tilde{\chi})$. В выражении /18/, принимающем вид

$$Z_N = \mathrm{Sp}_{\mathcal{F}} \sum_{\tilde{\chi}} p_{\tilde{\chi}} e^{-\beta H\{\tilde{\chi}\}}, \qquad /20/$$

остается провести суммирование по всевозможным конфигурациям фаз при сохранении меры, то есть при фиксированном наборе $\tilde{N}$.

4. ЧАСТИЧНАЯ СИММЕТРИЯ

После того как свойства симметрии включены непосредственно в гамильтониан, надо попытаться выполнить явное суммирование по фазовым конфигурациям. Тогда нам бы удалось избежать необходимости решения задач с неоднородным распределением фаз. Но сведения о том, что одна часть системы, с числом узлов N_1 имеет одну симметрию, а другая часть, с числом узлов N_2, - другую симметрию, сохранились бы за счет перенормировки гамильтониана.

Если в формуле /20/ разложить экспоненту в ряд, то становится очевидным, что для осуществления суммирования по фазовым конфигурациям достаточно разобраться, как суммируются произведения типа

$$X^{mm'}_{ss'}\{\tilde{\chi}[\mathbf{Z}]\} = \prod_{a=1}^{m} \prod_{b=1}^{m'} \chi_{i_a s} \chi_{j_b s'}. \qquad /21/$$

При этом надо помнить, что в каждом из узлов может одновременно находиться только одна фаза:

$$\chi_{is} \chi_{is'} = \delta_{ss'}. \qquad /22/$$

Сумму по характеристическим функциям можно представить как функциональную сумму по решетке:

$$\sum_{\tilde{\chi}} p_{\tilde{\chi}} X^{mm'}_{ss'}\{\tilde{\chi}[\mathbf{Z}]\} = \frac{1}{N^N} \sum_{\mathbf{Z}} p_{ss'} X^{mm'}_{ss'}\{\tilde{\chi}[\mathbf{Z}]\}, \qquad /23/$$

где

$$\sum_{Z} \equiv \sum_{i_1 \in Z} \sum_{i_2 \in Z} \cdots \sum_{i_N \in Z},$$

а $p_{ss'}$ означает вероятность того, что фаза с номером s занимает N_1 узел, а фаза с номером s' – N_2 узла решетки из N узлов,

$$p_{12} = N_1 ! \, N_2 ! / N! , \quad p_{ss} \equiv 1. \qquad /24/$$

При переходе к термодинамическому пределу разумно пользоваться не числами N_1 и N_2, а относительными величинами

$$w_1 \equiv \frac{N_1}{N} \equiv w, \qquad w_2 \equiv \frac{N_2}{N} \equiv 1 - w. \qquad /25/$$

Последние по определению ограничены,

$$0 \le w_s \le 1 \quad (s = 1, 2), \qquad /26/$$

и удовлетворяют условию нормировки

$$w_1 + w_2 = 1. \qquad /27/$$

Величины /25/ имеют смысл концентраций, или вероятностей соответствующих фаз с заданными свойствами симметрии.

Термодинамический предельный переход для смешанной системы следует понимать как стремление к бесконечности каждого из N_s при конечности отношений N_s/N. Подразумевая это, мы для краткости будем использовать обозначение $\lim\limits_{N \to \infty}$.

При $N_s \to \infty$ выражение /24/ принимает вид

$$p_{12} \simeq [2\pi N w(1-w)]^{1/2} [w^{w} (1-w)^{1-w}]^{N},$$

откуда видно, что $\lim\limits_{N \to \infty} p_{12} = 0 \quad (0 < w < 1)$. /28/

Перейдем к суммированию по решетке характеристических произведений типа /21/, опираясь на определение характеристических функций /14/ и свойство /22/. Очевидно, что $\frac{1}{N} \sum\limits_{i \in Z} \chi_{is} = w_s$.

При суммировании произведения двух характеристических функций разобьем двойную сумму по решетке на две суммы: $\sum\limits_{ij} = \sum\limits_{i=j} + \sum\limits_{i \neq j}$. Это дает

$$\frac{1}{N^2} \sum_{ij} \chi_{is} \chi_{js} = \frac{w_s}{N} + w_s^2.$$

В случае произведения трех функций проведем аналогичное разбиение тройной суммы

$$\sum_{ijk} = \sum_{i=j=k} + \sum_{i=j \neq k} + \sum_{i=k \neq j} + \sum_{j=k \neq i} + \sum_{i \neq j \neq k}.$$

В результате получим

$$\frac{1}{N^3} \sum_{ijk} \chi_{is} \chi_{js} \chi_{ks} = \frac{w_s}{N^2} + \frac{3 w_s^2}{N} + w_s^3.$$

Для произведения m характеристических функций, соответствующих одной фазе, находим

$$\frac{1}{N^m} \sum_{i_1 \ldots i_m} \chi_{i_1 s} \chi_{i_2 s} \ldots \chi_{i_m s} = w_s^m + C_m^2 \frac{w_s^{m-1}}{N} +$$

$$+ C_m^3 \frac{w_s^{m-2}}{N^2} + \ldots + C_m^{m-1} \frac{w_s^2}{N^{m-2}} + \frac{w_s}{N^{m-1}},$$

где C_m^2 – число сочетаний из m элементов по n, причем $C_m^n \equiv 0$, если $m < n$. Произведения типа /21/ появляются в процессе разложения в ряд экспоненты в формуле /20/. Этот ряд по определению сходится. Стало быть, переход к пределу /при $N \to \infty$ / для ряда можно производить почленно. Значит, для получения асимптотических выражений в каждом члене ряда допустимо пренебрегать слагаемыми, содержащими степени $1/N$. Таким образом,

$$\frac{1}{N^m} \sum_{i_1 \ldots i_m} \chi_{i_1 s} \ldots \chi_{i_m s} \simeq w_s^m, \quad (N \to \infty).$$

Суммирование по решетке для произведений характеристических функций, соответствующих разным фазам, в силу условия /22/ происходит независимо для каждой из фаз. Окончательно имеем

$$\frac{1}{N^N} \sum_{Z} X_{ss'}^{mm'} \{ \tilde{\chi}[Z] \} \simeq w_s^m w_{s'}^{m'}. \qquad /29/$$

Однако вследствие /28/ межфазные слагаемые исчезают.

На основании этого результата несложно получить асимптотическое равенство

$$\sum_{\tilde{\chi}} p_{\tilde{\chi}} \, e^{-\beta H \{\tilde{\chi}\}} \simeq e^{-\beta \tilde{H}},$$

определяющее перенормированный или эффективный гамильтониан

$$\tilde{H} = \oplus_s H_s, \quad H_s = \sum_n w_s^n H_n^{(s)}, \qquad /30/$$

в котором каждое из слагаемых

$$H_n^{(s)} = \sum_{i_1 \ldots i_n} H^{(s)}_{i_1 \ldots i_n}, \quad H^{(s)}_{i_1 \ldots i_n} = H_{i_1 \ldots i_n} \bigotimes_{j_1 \neq i_1} \mathbf{1}_{j_1 s} \ldots \bigotimes_{j_n \neq i_n} \mathbf{1}_{j_n s}$$

задано на пространстве $\mathcal{F}_s[\mathbf{Z}]$. Заметим, что в гамильтониане /30/ нет межфазных слагаемых. Они выпали при переходе к термодинамическому пределу вследствие свойства /28/. Однако взаимодействие между фазами конечно же не пропадает. Оно учитывается термодинамически благодаря тому, что числа узлов N_1 и N_2 при $N_1 + N_2 = N$ должны максимизировать статистическую сумму /18/. Таким образом, между фазами имеется термодинамическое взаимодействие, поскольку система выбирает те фазовые концентрации, которые минимизируют ее термодинамический потенциал.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основной результат данной работы можно сформулировать в виде следующего утверждения.

Теорема. Для решеточного гамильтониана $H = \sum_n H_n$, заданного на пространстве

$$\tilde{\mathcal{F}} = \bigoplus_N \bigoplus_{\tilde{X}} \mathcal{F}_1[\mathbf{Z}_1] \otimes \mathcal{F}_2[\mathbf{Z}_2],$$

где $\mathbf{Z}_1 \cup \mathbf{Z}_2 = \mathbf{Z}$, асимптотически точно выполняется равенство

$$\mathrm{Sp}_{\tilde{\mathcal{F}}}\, e^{-\beta H} \simeq \mathrm{Sp}_{\mathcal{F}}\, e^{-\beta \tilde{H}}, \quad (N \to \infty),$$

в котором гамильтониан $\tilde{H} = \bigoplus_s \sum_n w_s^n H_n^{(s)}$ определен на пространстве $\mathcal{F} = \mathcal{F}_1[\mathbf{Z}] \otimes \mathcal{F}_2[\mathbf{Z}]$, а фазовые концентрации w_s таковы, что они доставляют наибольшее значение для статистической суммы

$$Z \simeq \sup_{\{w_s\}} \mathrm{Sp}_{\mathcal{F}}\, e^{-\beta \tilde{H}}, \quad \left(\sum_s w_s = 1\right).$$

Как видно из доказательства, эта теорема легко обобщается на случай произвольного числа фаз, то есть для смешанных систем с любым числом различных симметрий. Теорема сохраняет свой смысл и тогда, когда фазы не характеризуются глобальной симметрией, а, возможно, только локальной, или вообще отличаются друг от друга не симметрией, а каким-либо иным макроскопическим свойством, позволяющим построить пространства состояний, ортогональные друг другу.

Проблема суммирования по фазовым конфигурациям обсуждалась мной с разными людьми. Всем им я признателен за внимание и советы. Особенно это относится к Д.Тер Хаару и А.С.Шумовскому. Я благодарен также за дискуссии и стимулирующий критицизм Б.Я.Балагурову, Х.В.Капелю, А.И.Ларкину, Н.М.Плакиде, В.Б.Приезжеву, Д.Е.Хмельницкому и И.Р.Юхновскому.

ЛИТЕРАТУРА

1. Khait Y.L. Phys.Rep., 1983, 99, p.237.
2. Shumovsky A.S., Yukalov V.I. Chem.Phys.Lett., 1981, 83, p.582.
3. Shumovsky A.S., Yukalov V.I. JINR, E17-85-19, Dubna, 1985.
4. Yukalov V.I. Theor.Math.Phys., 1976, 28, p.652.
5. Yukalov V.I. Physica, 1977, 89A, p.363.
6. Юкалов В.И. ОИЯИ, Д17-11490, Дубна, 1978.
7. Yukalov V.I. Phys.Lett., 1981, 81A, p.433.
8. Либертс Г.В., Капостиньш П.П., Звиргздс Ю.А. ФТТ, 1985, 49, с.259.
9. Кумейшин В.Ф., Иванов О.А. ФММ, 1975, 40, с.1295.
10. Lynn J.W., Mook H.A. Phys.Rev., 1981, B23, p.198.
11. Wicksted J., Shirane G., Stensvoll O. Phys.Rev., 1984, B29, p.488.
12. Spielberg J., Gelerinter E. Phys.Rev., 1984, B30, p.2319.
13. Gabay M., Toulouse G. Phys.Rev.Lett., 1981, 47, p.201.
14. Cheung T.D., Kouvel J.S. Phys.Rev., 1983, B28, p.3831.
15. Abdul-Razzag W., Kouvel J. J.App.Phys., 1984, 55, p.1623.
16. Ishii T. et al. Sol.State Comm., 1983, 47, p.303.
17. Ищук В.М., Завадский Э.А., Преснякова О.В. ФТТ, 1984, 26, с.724.
18. Dobrosavljevic L., Radovic Z. Physica, 1984, 127B, p.433.
19. Абрамов Г.И. и др. Письма в ЖЭТФ, 1983, 37, с.453.
20. Белов К.П. и др. Магнитные полупроводники - халькогенидные шпинели. Изд-во МГУ, М., 1981.
21. Бонч-Бруевич В.Л. УФН, 1983, 140, с.583.
22. Polian A., Grimsditch M. Phys.Rev., 1983, B27, p.6409.
23. Yukalov V.I. Physica, 1981, 108A, p.402.
24. Makhankov V.G., Fedyanin V.K. Phys.Rep., 1984, 104, p.1.
25. Пушкаров Д.И. Письма в ЖЭТФ, 1974, 19, с.751.
26. Пушкаров Д.И. ФНТ, 1975, 1, с.581.
27. Yukalov V.I. Theor.Math.Phys., 1976, 26, p.274.
28. Shumovsky A.S., Yukalov V.I. Sov.Phys.Dokl., 1980, 25, p.361.
29. Yukalov V.I. Univ.Oxf., DTP 47/81, Oxford, 1981.
30. Yukalov V.I. Phys.Lett., 1981, 85A, p.68.
31. Шумовский А.С., Юкалов В.И. ДАН СССР, 1982, 266, с.320.
32. Yukalov V.I. JINR, E17-85-114, Dubna, 1985.
33. Yukalov V.I. Phys.Lett., 1981, 81A, p.249.
34. Хандрих К., Кобе С. Аморфные ферро- и ферримагнетики. "Мир", М., 1982.

35. Yukalov V.I. Physica, 1982, 110A, p.247.
36. Ok H.N., Back K.S., Kim C.S. Phys.Rev., 1981, B24, p.6600.
37. Белавин А.А., Поляков А.М. Письма в ЖЭТФ, 1975, 22, с.503.
38. Kislinsky V.B., Shumovsky A.S., Yukalov V.I. JINR, E17-85-119, Dubna, 1985.
39. Kislinsky V.B., Yukalov V.I. JINR, E17-85-237, Dubna, 1985.
40. Bogolubov N.N. Physica, 1960, 26S, p.1.

Рукопись поступила в издательский отдел
17 мая 1985 года.

Юкалов В.И.
P17-85-370

Эффективные гамильтонианы
для систем со смешанной симметрией

Для произвольной решеточной системы, являющейся смесью нескольких фаз, дается строгое определение усреднения по фазовым конфигурациям с помощью функциональных сумм по характеристическим функциям. Находится общая форма эффективного гамильтониана для гетерофазной системы, заданной на решетке.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод автора

Yukalov V.I.
P17-85-370

Effective Hamiltonians
for Systems with Mixed Symmetry

A rigorous definition for the averaging over phase configurations by means of functional sums over characteristic functions is given for an arbitrary lattice system being the mixture of several phases. The general form for the effective Hamiltonian of the heterophase system on a lattice is found.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985