87-329

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 перемёшивания, 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 $\mathbb{V}$,

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

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

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

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

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

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 $\pi_\alpha[\mathcal{A}(\mathbb{V};\xi_\alpha)] \equiv \mathcal{A}_\alpha(\xi_\alpha)$ 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

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

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

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

следует задавать на стандартном расслоенном пространстве (4) в виде

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

При этом представления операторов имеют структуру

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

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

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

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

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

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 $p = \{ p_\alpha \,|\, \alpha = 1,2,\dots s \}$ геометрических вероятностей

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

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

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

Характеристическая функция (3) представляется суммой

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

Имея в виду предельный переход

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

можно записать асимптотическое выражение

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

Окончательно усреднение функционала $F(\xi)$ по фазовым конфигурациям при фиксированном наборе геометрических вероятностей (10) определяется как функциональный интеграл

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

в котором предел понимается в смысле (12).

<u>Теорема 1.</u> 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/.

<u>Следствие</u>. 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

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

дифференциал dp определен в (11),

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

<u>Теорема 2.</u> Пусть у функции

$$y(p) = -\frac{1}{N} \ln \underset{\mathcal{F}}{\mathrm{Tr}}\, e^{-\Gamma(p)} \,, \tag{18}$$

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

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

существует абсолютный минимум

$$y(w) = \operatorname*{abs\,min}_{p}\, y(p) \,. \tag{20}$$

Тогда

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

где предел понимается в смысле (19),

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

Доказательство. Вводя обозначение

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

и используя (I6), можно записать

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

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

$$\int_0^1 e^{-Ny(p)} \bar{A}(p) dp \simeq e^{-Ny(w)} \bar{A}(w) \prod_{\alpha=1}^{3-1} \left(\frac{2\pi}{N y_\alpha''} \right)^{1/2} ,$$

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

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

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

Следствие. Математическое ожидание (I6) дается выражением

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

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

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

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

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

при условии нормировки $\sum_{\alpha=1}^{3} w_\alpha = 1$, 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.

Юкалов В.И. P17-87-329

Сосуществование фаз с разными группами симметрии

Рассматривается система, в которой сосуществуют несколько термодинамических фаз, соответствующих разным группам симметрии. Для такой гетерофазной системы строится представление алгебры локальных наблюдаемых. Проводится усреднение по фазовым конфигурациям, определяемое как континуальное интегрирование по характеристическим функциям подмножеств. Формулируются теоремы, позволяющие находить средние значения наблюдаемых величин.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Yukalov V.I. P17-87-329

Coexistence of Phases with Different Symmetry Groups

A system is considered, in which several thermodynamic phases corresponding to different symmetry groups coexist. For such a heterophase system a representation of the algebra of local observables is realized, being defined as a functional integration over characteristic functions of submanifolds. Theorems are formulated letting to find average values of observable quantities.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987