объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-88-740

В.И.Юкалов

МЕТОДЫ НАРУШЕНИЯ СИММЕТРИИ СТАТИСТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Направлено в Оргкомитет Всесоюзного коллоквиума "Современный групповой анализ: методы и приложения", Баку, октябрь 1988 г.

1988

1. МИКРОСОСТОЯНИЯ И СТАТИСТИЧЕСКИЕ СОСТОЯНИЯ

В настоящей работе рассматривается вопрос о том, как для статистической системы можно строить макроскопические состояния, соответствующие разным термодинамическим фазам. Предполагается, что каждая термодинамическая фаза характеризуется определенной группой симметрии.

Конкретизируем постановку задачи. Статистическая система, состоящая из N частиц, описывается гамильтонианом H, принадлежащим алгебре наблюдаемых величин $\mathcal{A}$. На базис $\{\phi_n\}$ квадратично интегрируемых собственных функций гамильтониана можно натянуть линейную оболочку

$$\mathcal{H} = \mathcal{L}^2\{\phi_n \mid H\phi_n = E_n\phi_n\}, \qquad /1/$$

представляющую собой гильбертово пространство микросостояний. Пусть гамильтониан инвариантен относительно преобразований U, образующих группу

$$G = \{U \mid U^{-1} HU = H\}. \qquad /2/$$

Очевидно пространство /1/ инвариантно относительно группы /2/:

$$G\mathcal{H} = \mathcal{H}. \qquad /3/$$

Представление алгебры $\mathcal{A}$ на пространстве $\mathcal{H}$ обозначим $\pi[\mathcal{A}]$. Если $f(\mathcal{A})$ - функция операторов из алгебры $\mathcal{A}$, то след этой функции записывается в виде одной из тождественных форм

$$\operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} f(\pi[\mathcal{A}]) \equiv \operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} \pi[f(\mathcal{A})] \equiv \operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} f(\mathcal{A}).$$

Далее рассматриваются равновесные ситуации, когда статистический оператор задается равенством

$$\hat{\rho} \equiv \frac{\exp(-H/T)}{\operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} \exp(-H/T)}, \qquad /4/$$

в котором T - температура, $k_B \equiv 1$. Статистическое состояние системы определяется как положительный линейный функционал на алгебре наблюдаемых:

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} \hat{\rho}\mathcal{A} = \operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} \pi[\hat{\rho}]\pi[\mathcal{A}]; \qquad /5/$$

из /4/ и /5/ сразу следует, что выполняется нормировка $\langle \hat{1} \rangle = 1$.

Предположим, что в пространстве микросостояний /1/ можно выделить подпространства $\mathcal{H}_\nu$, инвариантные относительно подгруппы G_ν группы /2/, то есть

$$G_\nu\mathcal{H}_\nu = \mathcal{H}_\nu \subset \mathcal{H}, \qquad /6/$$

где

$$G_\nu \subset G \quad (\nu = 1,2,\ldots). \qquad /7/$$

Представление алгебры $\mathcal{A}$ на подпространстве $\mathcal{H}_\nu$ обозначим

$$\mathcal{A}_\nu \equiv \pi_\nu[\mathcal{A}]. \qquad /8/$$

Вводя статистический оператор

$$\hat{\rho}_\nu = \frac{\exp(-H/T)}{\operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}_\nu} \pi_\nu[\exp(-H/T)]}, \qquad /9/$$

определим статистическое состояние

$$\langle \mathcal{A} \rangle_\nu = \operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}_\nu} \hat{\rho}_\nu\mathcal{A} = \operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}_\nu} \pi_\nu[\hat{\rho}_\nu]\mathcal{A}_\nu. \qquad /10/$$

Будем считать, что состояние /10/ описывает термодинамическую фазу с номером ν.

2. РАЗЛОЖЕНИЕ ПО НИЗКОСИММЕТРИЙНЫМ СОСТОЯНИЯМ

Между состояниями /5/ и /10/ можно установить связь, показывающую, что /5/ является линейной комбинацией состояний /10/.

Определим подпространство $\mathcal{H}_\perp$, служащее ортогональным дополнением к $\bigoplus_\nu \mathcal{H}_\nu$,

$$\mathcal{H}_\perp = \mathcal{H} \setminus \bigoplus_\nu \mathcal{H}_\nu. \qquad /11/$$

Зададим соответствующий статистический оператор

$$\hat{\rho}_\perp = \frac{\exp(-H/T)}{\operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}_\perp} \exp(-H/T)} \qquad /12/$$

и состояние

$$\langle \mathfrak{A} \rangle_{\perp} = \operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}_{\perp}} \hat{\rho}_{\perp} \mathfrak{A}. \qquad /13/$$

Так как

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{\nu} \mathcal{H}_{\nu} \oplus \mathcal{H}_{\perp}, \qquad /14/$$

то для следа от $f(\mathfrak{A})$ можно записать

$$\operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} f(\mathfrak{A}) = \sum_{\nu} \operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}_{\nu}} f(\mathfrak{A}) + \operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}_{\perp}} f(\mathfrak{A}). \qquad /15/$$

Вводя коэффициенты

$$\lambda_{\nu} \equiv \frac{\operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}_{\nu}} \exp(-H/T)}{\operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} \exp(-H/T)}, \qquad \lambda_{\perp} \equiv \frac{\operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}_{\perp}} \exp(-H/T)}{\operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} \exp(-H/T)}, \qquad /16/$$

получаем

$$\langle \mathfrak{A} \rangle = \sum_{\nu} \lambda_{\nu} \langle \mathfrak{A}_{\nu} \rangle + \lambda_{\perp} \langle \mathfrak{A} \rangle_{\perp}. \qquad /17/$$

Если совокупность всех подгрупп G_{ν} /$\nu = 1,2,\dots$/ исчерпывает группу G,

$$G = \bigoplus_{\nu} G_{\nu}, \qquad /18/$$

и, соответственно,

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{\nu} \mathcal{H}_{\nu}, \qquad /19/$$

то $\mathcal{H}_{\perp}$ пусто. Тогда вместо /17/ имеем

$$\langle \mathfrak{A} \rangle = \sum_{\nu} \lambda_{\nu} \langle \mathfrak{A} \rangle_{\nu}. \qquad /20/$$

Выражение /20/ представляет собой известное разложение эргодического состояния по состояниям с более низкой симметрией[1]. Заметим, что, согласно /16/, $\sum_{\nu} \lambda_{\nu} = 1$. Так как при переходе от состояния /5/ к состояниям /10/ необходимо перейти от полного пространства микросостояний $\mathcal{H}$ к подпространствам $\mathcal{H}_{\nu}$ и от полной группы симметрии G к подгруппам G_{ν}, то состояния /10/ называют состояниями с нарушенной симметрией, или квазисредними[2]. Из /20/ следует, что проинтегрированное по группе G

квазисреднее /10/, вообще говоря, не совпадает со средним /5/, это совпадение может произойти только в некоторых специальных случаях[3].

3. МЕТОД ОГРАНИЧЕННОГО СЛЕДА

Поскольку для определения состояний /10/ надо брать след по подпространству $\mathcal{H}_{\nu}$, являющемуся ограниченной частью пространства $\mathcal{H}$, то вычисление таких квазисредних эквивалентно применению метода ограниченного следа.

Явное построение подпространств $\mathcal{H}_{\nu}$, соответствующих конкретным термодинамическим фазам, как правило, нереализуемо, так как неизвестны собственные функции реальных многочастичных гамильтонианов. Более того, даже если в некоторых простых случаях, как например, для модели Изинга, все собственные функции и удается построить[4], тем не менее явное вычисление следа удается осуществить лишь для одно- и двумерных моделей.

Процедуру выделения подпространств $\mathcal{H}_{\nu}$ можно провести и неявно, для чего были развиты эффективные методы квазиусреднения. Здесь будут кратко перечислены основные методы, более подробное обсуждение которых можно найти в обзорах[5-7], а также будут рассмотрены новые варианты этих методов.

а/ Метод инфинитезимальных источников

Концепция квазисредних была впервые четко сформулирована Боголюбовым[2,8], предложившим метод инфинитезимальных источников. Суть этого метода в следующем. К гамильтониану H, инвариантному относительно преобразований симметрии из группы G, добавляется слагаемое, так что симметрия суммы

$$H_{\nu}(\epsilon) = H + \epsilon \Gamma_{\nu} \qquad (\|\Gamma_{\nu}\| \sim N) \qquad /21/$$

снижается до подгруппы G_{ν}. Статистические состояния строятся с помощью статистического оператора

$$\hat{\rho}_{\nu}(\epsilon) = \frac{\exp[-H_{\nu}(\epsilon)/T]}{\operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} \exp[-H_{\nu}(\epsilon)/T]}. \qquad /22/$$

Квазисредние определяются в результате двойного предельного перехода

$$\langle \mathfrak{A} \rangle_{\nu} = \lim_{\epsilon \to 0} \lim_{N \to \infty} \operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} \hat{\rho}_{\nu}(\epsilon) \mathfrak{A}. \qquad /23/$$

При этом пределы в /23/ переставлять нельзя, источник $\epsilon\Gamma_\nu$, нарушающий симметрию, убирается только после термодинамического предельного перехода ($N \to \infty$).

б/ Задание граничных условий

Разновидностью рассмотренного способа квазиусреднения служит добавление к гамильтониану H слагаемого, действующего не на все части системы, а только на ее границы, так что нарушение симметрии происходит на поверхности системы. То есть строится гамильтониан

$$H(\Sigma_\nu) = H + \Sigma_\nu \quad (\|\Sigma_\nu\| \sim N^{2/3}). \qquad /24/$$

Норма исходного гамильтониана всегда предполагается пропорциональной числу частиц $N \sim \|H\|$. Задав статистический оператор

$$\hat{\rho}(\Sigma_\nu) = \frac{\exp[-H(\Sigma_\nu)/T]}{\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}} \exp[-H(\Sigma_\nu)/T]}, \qquad /25/$$

можно определить квазисредние

$$\langle \mathcal{A} \rangle_\nu = \lim_{N\to\infty} \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\, \hat{\rho}(\Sigma_\nu)\mathcal{A}. \qquad /26/$$

В данном случае достаточен один предельный переход, так как нетермодинамическое слагаемое Σ_ν не вносит вклада в окончательные выражения за исключением того факта, что оно нарушает симметрию системы. Такой способ нарушения симметрии на границе используется для решеточных моделей с короткодействием[9].

в/ Нарушение перестановочных соотношений

Возможно также нарушить симметрию гамильтониана не добавлением к нему источников, а определенным изменением коммутационных соотношений для операторов, входящих в этот гамильтониан[5,10], то есть надо построить представление канонических перестановочных соотношений на подпространстве $\mathcal{H}_\nu$ с нарушенной симметрией.

г/ Приближение среднего поля

Квазисреднее можно определить, вычисляя его по теории возмущений, начинающейся с приближения среднего поля, имеющего заданную симметрию. Если межчастичные взаимодействия носят дальнодействующий характер, то метод среднего поля дает точные результаты, а нарушение симметрии достигается заменой исходного гамильтониана на термодинамически эквивалентный ему аппроксимирующий гамильтониан[11].

д/ Метод аналитического продолжения

Первые три метода из перечисленных дают возможность выделить статистическое состояние, соответствующее абсолютно устойчивой термодинамической фазе. Часто бывает необходимо выделить статистическое состояние, соответствующее метастабильной или лабильной фазе. Приближение среднего поля дает такую возможность. Более общий подход был подробно описан и математически обоснован Сьюэллом[7]. Этот подход можно назвать методом аналитического продолжения, так как он основан на следующем. Одним из способов строится статистическое состояние в той области термодинамических переменных /температура, плотность и т.д./, где это состояние абсолютно устойчиво. Затем данное состояние аналитически продолжается в ту область термодинамических переменных, где оно становится метастабильным или лабильным.

В дополнение к этим методам сформулируем другие способы нарушения симметрии.

1/ Метод термодинамических источников[12]

Для того, чтобы избавиться от двойного предельного перехода в методе инфинитезимальных источников, можно нарушить симметрию, образуя гамильтониан

$$H_\nu(N^{-\alpha}) = H + N^{-\alpha}\Gamma_\nu, \qquad /27/$$

в котором

$$\|\Gamma_\nu\| \sim N, \quad 0 < \alpha < 1. \qquad /28/$$

Тогда состояние с нарушенной симметрией определяется равенством

$$\langle \mathcal{A} \rangle_\nu = \lim_{N\to\infty} \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}\, \hat{\rho}_\nu(N^{-\alpha})\mathcal{A}. \qquad /29/$$

К состоянию /29/ можно прийти от квазисреднего /23/ при замене $\epsilon \to N^{-\alpha}$. Важно, чтобы показатель α был ограничен сверху, иначе влияние источника будет убывать при $N \to \infty$ слишком быстро и симметрия не будет нарушена.

2/ Метод упорядочивающих источников[4,13]

Этот метод является комбинацией метода термодинамических источников и приближения среднего поля. Из алгебры наблюдаемых $\mathfrak{A}$ выделяется оператор $\hat{\sigma} \subset \mathfrak{A}$, среднее от которого служит параметром порядка искомой термодинамической фазы,

$$\sigma_\nu \equiv \langle \hat{\sigma} \rangle_\nu . \qquad /30/$$

Симметрия гамильтониана нарушается включением источника, явно содержащего параметр порядка:

$$H_\nu(\epsilon) = H + \epsilon \Gamma_\nu [\sigma_\nu(\epsilon)], \qquad /32/$$

где

$$\sigma_\nu(\epsilon) = \operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} \hat{\rho}_\nu(\epsilon)\sigma, \qquad /32/$$

а статистический оператор определен так же, как в /22/. Состояние, соответствующее ν-й термодинамической фазе, задается выражением

$$\langle \mathfrak{A} \rangle_\nu = \lim_{\epsilon\to 0} \operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} \hat{\rho}_\nu(\epsilon)\mathfrak{A} \qquad /33/$$

при условии

$$\lim_{\epsilon\to 0} \sigma_\nu(\epsilon) = \sigma_\nu, \qquad \epsilon = N^{-a}. \qquad /34/$$

3/ Метод восстанавливающих источников[13,14]

Иногда для описания нужной термодинамической фазы надо не нарушить симметрию гамильтониана, а изменить ее, например, для описания метастабильной парамагнитной фазы в присутствии внешнего магнитного поля. В такой ситуации гамильтониан системы H' имеет чужую, по отношению к исследуемой фазе, симметрию. Неправильную симметрию можно восстановить до правильной добавлением дополнительного слагаемого, дающего гамильтониан

$$H_\nu = H' + D_\nu \qquad /35/$$

с восстановленной симметрией, характеризующей интересующую нас термодинамическую фазу. Далее образуем гамильтониан

$$H_\nu(\lambda) = H' + \lambda D_\nu \qquad /36/$$

и статистический оператор

$$\hat{\rho}_\nu(\lambda) = \frac{\exp[-H_\nu(\lambda)/T]}{\operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} \exp[-H_\nu(\lambda)/T]} . \qquad /37/$$

Состояние

$$\langle \mathfrak{A}(\lambda) \rangle_\nu \equiv \operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} \hat{\rho}_\nu(\lambda)\mathfrak{A} \quad (\lambda \simeq 1) \qquad /38/$$

описывает нужную термодинамическую фазу с параметром порядка

$$\sigma_\nu = \lim_{\lambda\to 1} \operatorname*{Tr}_{\mathcal{H}} \hat{\rho}_\nu(\lambda)\sigma . \qquad /39/$$

После того, как состояние /38/ построено, лишнее слагаемое D_ν убирается с помощью аналитического продолжения функций /38/ к значениям $\lambda \to 0$. Иными словами, состояние искомой термодинамической фазы определяется в результате перехода от /38/ к выражению

$$\langle \mathfrak{A} \rangle_\nu = \lim_{\lambda\to 0} \langle \mathfrak{A}(\lambda) \rangle_\nu . \qquad /40/$$

4/ Метод симметрийных условий[15]

Симметрию можно нарушить не непосредственно в гамильтониане, а в получаемых с его помощью уравнениях для корреляционных функций или функций Грина, накладывая на эти функции дополнительные условия симметрии. Таким образом, из всех возможных решений уравнений для этих функций отбираются только те, которые соответствуют исследуемой термодинамической фазе. Данный метод очень удобен, например, при описании кристаллов[16-19].

5/ Метод асимптотических условий[14]

Если гамильтониан имеет симметрию чужой фазы, то на решения уравнений движения для корреляционных функций или функций Грина не удается наложить условия симметрии искомой фазы. Тем не менее отбор нужных решений можно осуществить с помощью асимптотических условий симметрии. Для этого среди множества параметров h, входящих в гамильтониан $H'(h)$, ищутся такие значения h_0, при которых симметрия гамильтониана $H'(h_0)$ восстанавливается до нужной. Затем на решения уравнений движения накладываются асимптотические условия, так, чтобы при $h \to h_0$ эти решения обладали правильными свойствами симметрии.

Предложенные методы выделения чистых состояний удобны для построения смешанных состояний в теории гетерофазных систем [3,13,20].

ЛИТЕРАТУРА

1. Emch G.G. - Algebraic Methods in Statistical Mechanics and Quantum Field Theory. Wiley, New York, 1972.
2. Боголюбов Н.Н. - Избранные труды, т.2. Наукова думка, Киев, 1970.
3. Юкалов В.И. - ТМФ, 1976, 26, с.403.
4. Yukalov V.I. - Physica, 1987, 144A, p.369.
5. Боголюбов Н.Н./мл./, Шумовский А.С., Юкалов В.И. - ТМФ, 1984, 60, с.432.
6. Шумовский А.С., Юкалов В.И. - Фазовые состояния и переходы. ОИЯИ, Р17-85-676, Дубна, 1985.
7. Sewell G.L. - Phys.Rep., 1980, 57, p.307.
8. Bogolubov N.N. - Physica, 1960, S26, p.1.
9. Синай Я.Г. - Теория фазовых переходов. Наука, М., 1980.
10. Bogolubov N.N.(jr) - J.Math.Phys., 1973, 14, p.26.
11. Боголюбов Н.Н./мл./ и др. - Метод аппроксимирующего гамильтониана в статистической физике. Изд. БАН, София,1981.
12. Yukalov V.I. - Physica, 1981, 108A, p.402.
13. Yukalov V.I. - Physica, 1987, 141A, p.352.
14. Yukalov V.I. - Phys.Lett., 1981, A85, p.68.
15. Юкалов В.И. - ТМФ, 1976, 28, с.92.
16. Yukalov V.I. - Ann.Physik, 1979, 36, p,31.
17. Yukalov V.I. - Ann.Physik, 1980, 37, p,171.
18. Yukalov V.I. - Ann.Physik, 1981, 38, p.419.
19. Yukalov V.I., Zubov V.I. - Forts.Phys., 1983, 31, p.627.
20. Yukalov V.I. - Phys.Lett., 1987, A125, p.95.

Рукопись поступила в издательский отдел
11 октября 1988 года.

Юкалов В.И. P17-88-740

Методы нарушения симметрии статистических систем

Дается обзор основных методов нарушения симметрии при построении статистических состояний, соответствующих различным термодинамическим фазам. Это - метод инфинитезимальных источников, задание граничных условий, нарушение перестановочных соотношений, приближение среднего поля, метод аналитического продолжения. Формулируются новые варианты этих методов: метод термодинамических источников, метод упорядочивающих источников, метод восстанавливающих источников, метод симметрийных условий и метод асимптотических условий.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод Г.Г.Сандуковской

Yukalov V.I. P17-88-740

Methods of Symmetry Breaking for Statistical Systems

A review is given of main methods of symmetry breaking when constructing statistical states corresponding to different thermodynamic phases. These are the method of infinitesimal sources, imposing of boundary conditions, perturbing of commutation relations, mean field approximation and the method of analytical continuation. New variants of these methods are formulated: the method of thermodynamic sources, method of ordering sources, method of restoring sources and the method of asymptotic conditions.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988