ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 538.9 ГРНТИ 29.19.03
DOI: 10.34680/2076-8052.2023.5(134).716-726 Специальность ВАК 1.3.8

Научная статья

О НЕКОТОРЫХ СТРОГИХ РЕЗУЛЬТАТАХ В ТЕОРИИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Захаров А. Ю., Захаров М. А.

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого (Великий Новгород, Россия)

Аннотация Работа содержит критический анализ методов и результатов, используемых и применяемых в настоящее время в теории конденсированного состояния вещества. Разработан единый математический аппарат – метод функционального интегрирования, который в равной мере применим ко всем основным распределениям статистической физики: микроканоническому, каноническому и большому каноническому распределению. В рамках этого метода выполнена точная факторизация конфигурационного интеграла по атомным координатам и установлена связь между микроканоническим и каноническим ансамблями. Показано, что межатомные взаимодействия могут быть исключены путем перенормировки внешних случайных полей, а случайные внешние поля могут быть исключены перенормировкой межатомных потенциалов. Предложена новая постановка задач равновесной статистической механики как динамической теории поля с гамильтонианом, зависящим от температуры.

Ключевые слова: микроканонический ансамбль, канонический ансамбль, статистическая сумма, функциональный интеграл, межатомные потенциалы

Для цитирования: Захаров А. Ю., Захаров М. А. О некоторых строгих результатах в теории конденсированного состояния // Вестник НовГУ. 2023. 5(134). 716-726. DOI: 10.34680/2076-8052.2023.5(134).716-726

Research Article

ON SOME RIGOROUS RESULTS IN CONDENSED MATTER THEORY

Zakharov A. Yu., Zakharov M. A.

Yaroslav-the-Wise Novgorod State University (Veliky Novgorod, Russia)

Abstract The work contains a critical analysis of the methods and results currently used and applied in the theory of condensed matter. A unified mathematical apparatus has been developed - the method of functional integration which is equally applicable to all main distributions of statistical physics: microcanonical, canonical, and grand canonical ensembles. Within the framework of this method, an exact factorization of the configuration integral with respect to atomic coordinates was performed and a connection between the microcanonical and canonical ensembles was established. It is shown that interatomic interactions can be eliminated by renormalizing external random fields, and random external fields can be eliminated by renormalizing interatomic potentials. A new formulation of problems of equilibrium statistical mechanics as a dynamic field theory with a Hamiltonian depending on temperature is proposed.

Keywords: microcanonical ensemble, canonical ensemble, partition function, functional integral, interatomic potentials

For citation: Zakharov A. Yu., Zakharov M. A. On some rigorous results in condensed matter theory // Vestnik NovSU. 2023. 5(134). 716-726. DOI: 10.34680/2076-8052.2023.5(134).716-726

Введение

Статистическая механика существенно отличается от всех остальных разделов теоретической физики тем, что она с момента создания и по настоящее время является «плохо определенной» дисциплиной. Дело состоит, прежде всего, в том, что она изначально допускает несколько различных формулировок (ансамблей), эквивалентность которых пока не доказана. Более того, есть веские основания [1-3] для сомнений в эквивалентности этих ансамблей.

Существующие доводы (на «физическом» уровне строгости) в пользу эквивалентности микроканонического, канонического и большого канонического ансамблей хорошо известны, однако во всех более или менее нетривиальных ситуациях они совершенно неубедительны и никак не могут служить доказательствами эквивалентности. Особенно неубедительны эти аргументы в следующих случаях.

• Прежде всего, в окрестности точек фазовых переходов, когда картина определяется в основном сильно развитыми флуктуациями, естественно не имеет места положение о возможности пренебрежения флуктуациями при переходе от канонического к большому каноническому ансамблю.

• В многофазных системах канонический ансамбль, в отличие от большого канонического ансамбля, требует конструкций типа построения Максвелла. В итоге свойства сосуществующих фаз оказываются зависящими от совершенно «нефизических» участков кривых или (гипер)поверхностей (к примеру, от участка изотермы Ван-дер-Ваальса, на котором производная давления по объему положительна).

• Теоремы типа Бореля и Максвелла (см., к примеру, [4, 5]) о локализации мер в пространствах большого числа измерений, используемые при переходе от микроканонического ансамбля к каноническому, непосредственно применимы в случаях, когда поверхность постоянной энергии $H(q,p) - E = 0$ в фазовом пространстве системы достаточно проста (к примеру – сфера или цилиндр). Ясно, что для системы взаимодействующих частиц эта поверхность может быть сколь угодно сложной и имеющиеся в настоящее время обобщения теорем (см., к примеру, [6]) не решают проблемы. Наконец, в случае микрогетерогенных, малых систем, фрактальных объектов, а также систем с сильно развитой поверхностью и систем с размерами порядка нанометров (наносистем) размерность фазового пространства часто оказывается недостаточно большой для применимости соответствующих асимптотических теорем.

По перечисленным причинам представляется необходимым создание математического аппарата, в равной мере применимого ко всем ансамблям статистической механики. Цель данной работы заключена в развитии такого аппарата.

Микроканонический ансамбль

Наиболее обоснованным является микроканонический ансамбль, в котором рассматриваемая система полностью изолирована от внешнего мира и проблема нахождения термодинамических функций сводится к вычислению доступного объема фазового пространства $\Delta\Gamma$ как функции от числа частиц N, объема V системы, энергии E, а также “небольшой” неопределенности в энергии δE:

$$\Delta\Gamma(N,V,E,\delta E)=\frac{1}{N!}\int_{(E-\delta E\le H(p,q)\le E)} d\Gamma, \tag{1}$$

где q,p – совокупность обобщённых координат и импульсов всех частиц системы. Таким образом, задача состоит в определении объема, заключенного между двумя поверхностями постоянной энергии в фазовом пространстве системы с гамильтонианом общего вида. Эта задача в общем виде очень сложна и в явном виде решена только в весьма немногих простых частных случаях, когда поверхность постоянной энергии в фазовом пространстве имеет вид сферы или цилиндра.

Введем функцию

$$\chi_\Omega(x)=\begin{cases}1, & x\in\Omega;\\ 0, & x\not\in\Omega,\end{cases} \tag{2}$$

называемую характеристической функцией множества Ω или разрывным множителем Дирихле. Эта функция придает точкам, принадлежащим множеству Ω, единичный вес, а всем прочим точкам – нулевой вес. Тогда выражение для доступного объема фазового пространства системы может быть записано в форме:

$$\Delta\Gamma=\frac{1}{N!}\int \chi_{[E-\delta E,E]}(H(p,q))\ d\Gamma, \tag{3}$$

в которой благодаря характеристической функции в подынтегральном выражении ограничения на область интегрирования по обобщенным координатам q и импульсам p учитываются автоматически. Поэтому интеграл (3) определяет объем фазового пространства, заключенного между поверхностями σ_1: $H(p,q)=(E-\delta E)$ и σ_2: $H(p,q)=E$ в общем случае совершенно произвольного межатомного потенциала. При этом поверхности постоянной энергии могут иметь сколь угодно сложную структуру, в частности, они вполне могут быть несвязными.

Для характеристической функции используем известное интегральное представление:

$$\chi_{[E-\delta E,E]}(x)=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin\left(\frac{\tau\delta E}{2}\right)}{\tau}\exp\left[i\tau\left(x-E+\frac{\delta E}{2}\right)\right]\ d\tau. \tag{4}$$

Подставляя (4) в (3), найдем

$$\Delta\Gamma(N,V,E,\delta E)=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin\left(\frac{\tau\delta E}{2}\right)}{\tau}\exp\left[-i\tau\left(E-\frac{\delta E}{2}\right)\right]\left\{\frac{1}{N!}\int \exp[i\tau H(p,q)]\ dpdq\right\}d\tau. \tag{5}$$

Выражение в фигурных скобках в этом интеграле

$$Z(-i\tau) = \frac{1}{N!}\int \exp[i\tau H(p,q)]\ dpdq \tag{6}$$

представляет собой каноническую статистическую сумму рассматриваемой системы как функцию от комплексной обратной температуры $\beta = -i\tau$.

Таким образом, согласно (5) существует интегральное преобразование, связывающее каноническую статистическую сумму и величину доступного объема фазового пространства системы. Отметим, что это преобразование изначально не предполагает обязательности термодинамического предельного перехода $N, V \to \infty$, $n = N/V = cons$, т.е. оно справедливо не только для макроскопических систем, но и для малых систем, включая наносистемы. Преобразование (5) содержит в себе принципиальную возможность построения статистической термодинамики малых систем из «первых принципов».

Взаимные перенормировки межатомных потенциалов и случайных внешних полей

Для канонического ансамбля в классической статистической механике имеется определенный дуализм между внешними полями и межатомными взаимодействиями. Он состоит в том, что двухчастичные межатомные взаимодействия статистически эквивалентны комплексному случайному внешнему полю. Другими словами, межатомные взаимодействия могут быть точно учтены посредством перенормировки внешнего поля, а случайное внешнее поле, в свою очередь, может быть точно учтено перенормировкой межатомных потенциалов. Докажем это утверждение.

Будем рассматривать однокомпонентную классическую систему, содержащую N бесструктурных частиц (т.е., частиц без внутренних степеней свободы), взаимодействующих между собой через произвольный центральный парный потенциал $v(\mathbf{r})$ и находящихся во внешнем поле $\varphi(\mathbf{r})$. Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$H(q,p) = \sum_{k=1}^{N} \mathbf{p}_k^2/2m + (1/2)\sum_{s,s'=1_{(s\neq s')}}^{N} v(\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_{s'}) + \sum_{s=1}^{N} \varphi(\mathbf{R}_s). \tag{7}$$

Производящий функционал системы после интегрирования по импульсным переменным имеет известный вид:

$$Z\{\varphi(r)\} = \frac{V^N}{N!\ \lambda^{DN}} \int\underset{(V^N)}{\dots}\int \left(\prod_{s=1}^{N} \frac{d^D R_s}{V}\right) \exp\left(-\beta \sum_{s=1}^{N} \varphi(R_s)\right) \times$$
$$\times \exp\left(-\frac{\beta}{2}\sum_{s,s'=1_{s\neq s'}}^{N} v(|R_s - R_{s'}|)\right), \tag{8}$$

где $\lambda = (2\pi\hbar^2/mk_BT)^{1/2}$ – тепловая длина волны де Бройля, $\beta = 1/k_BT$ – обратная температура, V – объем системы, D – размерность пространства, $\hbar$ и k_B –

постоянные Планка и Больцмана соответственно.

В этой формуле первая экспонента, связанная с внешним полем, распадается на произведение идентичных одноатомных сомножителей типа $\exp(-\beta\varphi(R_s))$. Вторая экспонента на одночастичные сомножители не распадается из-за взаимных «зацеплений» атомных координат R_s через межатомный потенциал.

Одним из путей «разделения» атомных переменных для достаточно общего класса межатомных потенциалов является представление производящего функционала через функциональный интеграл. Существует несколько вариантов такого представления для статистической суммы. Будем использовать вариант метода факторизации, предложенный в работе [7] и развитый далее в работах [8, 9].

Положим, что центральный межатомный потенциал $v(r)$ допускает разложение Фурье. Тогда энергия межатомных взаимодействий представляется в виде

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\sum_{\substack{s,s'=1 \\ s\neq s'}}^{N} v(|R_s - R_{s'}|) = -\frac{N}{2}v(0) + \frac{1}{2V}\sum_{k\in\Omega^+} v^+(k)[C^2(k) + S^2(k)] - \\ -\frac{1}{2V}\sum_{k'\in\Omega^-} v^-(k')[C^2(k') + S^2(k')];\end{aligned} \quad (9)$$

где

$$C(k) = \sum_{s=1}^{N} \cos(kR_s); \quad S(k) = \sum_{s=1}^{N} \sin(kR_s), \quad (10)$$

слагаемое $-\frac{N}{2}v(0)$ компенсирует член с $s = s'$ в правой части (9), $\Omega^\pm$ обозначают части пространства волновых векторов Ω, в которых Фурье-трансформанта $\tilde{v}(k)$ межатомного потенциала положительна и отрицательна соответственно, $v^\pm(k) = \pm\tilde{v}(k)$ при $k \in \Omega^\pm$.

Экспонента, содержащая энергию двухчастичных взаимодействий в производящем функционале (8) распадается на произведение по k и k' сомножителей типа

$$\exp\left(-\frac{\beta v^+(k)}{2V}[C^2(k) + S^2(k)]\right), \quad \exp\left(\frac{\beta v^-(k')}{2V}[C^2(k') + S^2(k')]\right). \quad (11)$$

Используя преобразование Стратоновича–Хаббарда для каждого из этих сомножителей, найдем представление производящего функционала через функциональный интеграл:

$$\begin{aligned}Z\{\varphi(r)\} = \frac{V^N}{N!\lambda^{DN}} e^{\frac{\beta N}{2}v(0)} \times \\ \times \int\limits_{-\infty}^{+\infty}\!\!\dots\!\int \left(\prod_{k\in\Omega^+} \frac{\beta m\omega^2(k)dx^+(k)\ dy^+(k)}{2\pi} \exp\left\{-\frac{\beta m\omega^2(k)\left([x^+(k)]^2+[y^+(k)]^2\right)}{2}\right\}\right) \times \\ \times \left(\prod_{k'\in\Omega^-} \frac{\beta m\omega^2(k')dx^-(k')\ dy^-(k')}{2\pi} \exp\left\{-\frac{\beta m\omega^2(k')\left([x^-(k')]^2+[y^-(k')]^2\right)}{2}\right\}\right) \times \\ \times [F_1(x^\pm(k), y^\pm(k), \{\varphi(r)\})]^N;\end{aligned} \quad (12)$$

здесь

$$F_1(x^{\pm}(k), y^{\pm}(k), \{\varphi(r)\}) = \int_{(V)} \left[\frac{dr}{V}\ e^{-\beta\varphi(r)} \times \right.$$
$$\times \exp\left\{i\beta \sum_{k\in\Omega^+} \sqrt{\frac{mv^+(k)}{V}}\omega(k)[x^+(k)\ \cos(kr) + y^+(k)\ \sin(kr)]\right\} \times \tag{13}$$
$$\left. \times \exp\left\{\beta \sum_{k'\in\Omega^-} \sqrt{\frac{mv^-(k')}{V}}\omega(k')[x^-(k')\ \cos(k'r) + y^-(k')\ \sin(k'r)]\right\}\right],$$

$\omega(k)$ – произвольная положительная функция волнового вектора, имеющая размерность круговой частоты; m – произвольный положительный параметр с размерностью массы, а $x^{\pm}(k)$, $y^{\pm}(k)$ – вспомогательные переменные, появившиеся в результате преобразования Стратоновича–Хаббарда.

На этом этапе проблема «зацепления» атомных координат разрешена – подынтегральное выражение в (12) распалось на N идентичных сомножителей, каждый из которых содержит координаты только одного из атомов. После интегрирования по переменным $R_1, \cdots, R_N$ каждый из сомножителей приводит к выражению $F_1(x^{\pm}(k), y^{\pm}(k), \{\varphi(r)\})$, что даёт в итоге $[F_1(x^{\pm}(k), y^{\pm}(k), \{\varphi(r)\})]^N$ в подынтегральном выражении.

Функция $F_1(x^{\pm}(k), y^{\pm}(k), \{\varphi(r)\})$ имеет прозрачный физический смысл – это есть конфигурационный интеграл одной частицы в комплексном внешнем поле $\psi(r)$

$$\psi(r) = \varphi(r) - i \sum_{k\in\Omega^+} \sqrt{\frac{mv^+(k)}{V}}\ \omega(k)[x^+(k)\ \cos(kr) + y^+(k)\ \sin(kr)] - $$
$$- \sum_{k'\in\Omega^-} \sqrt{\frac{mv^-(k')}{V}}\ \omega(k')[x^-(k')\ \cos(k'r) + y^-(k')\ \sin(k'r)]. \tag{14}$$

Это поле представляет собой сумму двух полей – исходного внешнего поля $\varphi(r)$ и некоторого искусственного комплексно-значного поля, порожденного исключением межатомных взаимодействий и представленного в виде ряда Фурье с коэффициентами $\sqrt{\frac{mv^{\pm}(k)}{V}}\ \omega(k)\ x^{\pm}(k)$, $\sqrt{\frac{mv^{\pm}(k)}{V}}\ \omega(k)\ y^{\pm}(k)$. Величина $[F_1(x^{\pm}(k), y^{\pm}(k), \{\varphi(r)\})]^N$ есть просто конфигурационный интеграл классического идеального газа, помещенного во внешнее поле $\psi(R)$. Формула (12) представляет собой статистическую сумму классического идеального газа, усредненную по всем конфигурациям комплексно-значного внешнего поля, каждая из Фурье-гармоник которого распределена по нормальному закону.

Таким образом, классическая система многих частиц с взаимодействиями эквивалентна идеальному газу во внешнем комплексно-значном случайном поле с нормально распределенными Фурье-гармониками.

Гамильтониан вспомогательного поля

Формула (12) допускает еще один вариант физической интерпретации – функциональный интеграл (12) определяет статистический интеграл системы взаимодействующих (нелинейных) осцилляторов. Действительно:

$$Z\{\varphi(r)\} = \frac{V^N}{N!\lambda^{DN}} e^{\frac{\beta N}{2}v(0)} \int D_0\mu e^{-W_1}, \tag{15}$$

где

$$D_0\mu = \left(\prod_{k\in\Omega^+} \frac{dx^+(k)\ dy^+(k)}{2\pi}\right)\left(\prod_{k\prime\in\Omega^-} \frac{dx^-(k\prime)\ dy^-(k\prime)}{2\pi}\right) - \tag{16}$$

лебегова мера в пространстве переменных $x^{\pm}(k)$, $y^{\pm}(k)$ (заметим, кстати, что эти переменные имеют размерность длины), а

$$\begin{gathered} W_1 = \frac{1}{2}\sum_{k\in\Omega^+} m\omega^2(k)([x^+(k)]^2 + [y^+(k)]^2) + \\ + \frac{1}{2}\sum_{k\prime\in\Omega^-} m\omega^2(k')([x^-(k')]^2 + [y^-(k')]^2) - \\ - \frac{N}{\beta}\ln F_1(x^{\pm}(k), y^{\pm}(k), \{\varphi(r)\}) - \end{gathered} \tag{17}$$

гамильтониан взаимодействия некоторой фиктивной системы с обобщенными координатами $x^{\pm}(k)$, $y^{\pm}(k)$. Слагаемые вида $\frac{1}{2}m\omega^2(k)[x^{\pm}(k)]^2$ и $\frac{1}{2}m\omega^2(k)[y^{\pm}(k)]^2$ имеют вид, характерный для потенциальной энергии осцилляторов с массой m и круговой частотой $\omega(k)$, поэтому первые две суммы по k и k' определяют потенциальную энергию системы гармонических осцилляторов с некоторым законом дисперсии $\omega(k)$. Последнее слагаемое $-\frac{N}{\beta}\ln F_1(x^{\pm}(k),\ y^{\pm}(k), \{\varphi(r)\})$ в (17) определяет некоторую поправку к этой энергии, порождающую изменение параметров системы гармонических осцилляторов и нелинейные эффекты (ангармонизмы). Вектор k нумерует обобщенные координаты фиктивной системы, а функциональный интеграл (12) представляет собой конфигурационный интеграл этой системы.

Приведем выражение (12) к виду статистического интеграла системы осцилляторов с взаимодействием (17). Воспользовавшись тождеством

$$\frac{\beta}{2\pi m}\int_{-\infty}^{+\infty}\!\!\int dp_x\ dp_y \exp\left[-\beta\left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m}\right)\right] = 1, \tag{18}$$

получим:

$$\begin{aligned} & Z\{\varphi(r)\} = \frac{V^N}{N!\lambda^{DN}} e^{\frac{\beta N}{2}v(0)} \times \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty}\!\!\dots\int \left(\prod_{k\in\Omega^+}\left[\frac{\beta\omega(k)}{2\pi}\right]^2 dx^+(k)dp_x^+(k)\ \ dy^+(k)dp_y^+(k)\right) \times \\ & \times \left(\prod_{k\prime\in\Omega^-}\left[\frac{\beta\omega(k\prime)}{2\pi}\right]^2 dx^-(k')dp_x^-(k')\ \ dy^-(k')dp_y^-(k')\right) \times \\ & \times \exp\left\{-\beta\sum_{k\in\Omega^+}\left(\frac{\left([p_x^+(k)]^2 + [p_y^+(k)]^2\right)}{2m} + \frac{m\omega^2(k)([x^+(k)]^2 + [y^+(k)]^2)}{2}\right)\right\} \times \\ & \times \exp\left\{-\beta\sum_{k\prime\in\Omega^-}\left(\frac{\left([p_x^-(k\prime)]^2 + [p_y^-(k\prime)]^2\right)}{2m} + \frac{m\omega^2(k\prime)([x^-(k\prime)]^2 + [y^-(k\prime)]^2)}{2}\right)\right\} \times \\ & \times [F_1(x^{\pm}(k), y^{\pm}(k), \{\varphi(r)\})]^N. \end{aligned} \tag{19}$$

Данный интеграл представляет собой классическую статистическую сумму системы, описываемой гамильтонианом H:

$$H = \sum_{k\in\Omega^+}\left\{\left[\frac{[p_x^+(k)]^2}{2m}+\frac{m\omega^2(k)(x^+(k))^2}{2}\right]+\left[\frac{[p_y^+(k)]^2}{2m}+\frac{m\omega^2(k)(y^+(k))^2}{2}\right]\right\}+$$
$$+\sum_{k'\in\Omega^-}\left\{\left[\frac{[p_x^-(k')]^2}{2m}+\frac{m\omega^2(k')(x^-(k'))^2}{2}\right]+\left[\frac{[p_y^-(k')]^2}{2m}+\frac{m\omega^2(k')(y^-(k'))^2}{2}\right]\right\}- \quad (20)$$
$$-\frac{N}{\beta}\ln F_1(x^\pm(k),\ y^\pm(k),\{\varphi(r)\}).$$

Заметим, что множитель $\frac{2\pi}{\beta\omega(k)}$ в подынтегральном выражении формулы (19) играет роль естественной элементарной ячейки фазового пространства (т. е. постоянной Планка) и имеет ее размерность.

Гамильтониан (20) помимо своих «естественных» переменных – обобщенных координат $x^\pm(k)$, $y^\pm(k)$ и обобщенных импульсов $p_x^\pm(k)$, $p_y^\pm(k)$ – содержит еще и температуру, поскольку от последней зависит функция $F_1(x^\pm(k), y^\pm(k), \{\varphi(r)\})$.

Таким образом, проблема вычисления статистической суммы системы взаимодействующих через произвольный парный потенциал классических частиц эквивалентна проблеме расчета статистической суммы квазичастиц — системы взаимодействующих фиктивных нелинейных осцилляторов, описываемой гамильтонианом (20). В термодинамическом пределе система осцилляторов с гамильтонианом (20) переходит в нелинейное самодействующее поле. Поэтому равновесная классическая статистическая механика допускает альтернативную (к вычислению статистических сумм или иных статичных величин) формулировку в виде теории нелинейного поля с соответствующим предельным гамильтонианом.

Спонтанное нарушение симметрии в классической статистике

Положим внешнее поле $\varphi(\mathbf{r})$ тождественно равным нулю и рассмотрим случай достаточно высоких температур. Тогда основной вклад в интеграл (12) по полевым переменным $x^\pm(\mathbf{k})$, $y^\pm(\mathbf{k})$ дают малые их значения, при которых выражение для $\ln F_1(x^\pm(k), y^\pm(k))$ имеет вид:

$$\ln\mathcal{F}_1 \approx -\frac{\beta^2 m}{2V}\sum_{\mathbf{k}\in\Omega^+/2} v^+(\mathbf{k})\omega^2(\mathbf{k})\{[x^+(\mathbf{k})+x^+(-\mathbf{k})]^2+[y^+(\mathbf{k})-y^+(-\mathbf{k})]^2\}+$$
$$+\frac{\beta^2 m}{2V}\sum_{\mathbf{k}\in\Omega^-/2} v^-(\mathbf{k}')\omega^2(\mathbf{k}')\{[x^-(\mathbf{k}')+x^-(-\mathbf{k}')]^2+[y^-(\mathbf{k}')-y^-(-\mathbf{k}')]^2\}. \quad (21)$$

Здесь множества $\Omega^\pm$ разделены на пары непересекающихся множеств $\Omega^\pm/2$ посредством произвольной плоскости, проходящей через начало координат и суммирование по $\mathbf{k}$, $\mathbf{k}'$ осуществляется в пределах $\Omega^\pm/2$. Переходя от переменных $x^\pm(\mathbf{k})$, $y^\pm(\mathbf{k})$ к переменным $X^\pm(\mathbf{k})$, $Y^\pm(\mathbf{k})$, $Z^\pm(\mathbf{k})$, $W^\pm(\mathbf{k})$

$$\begin{cases} X^{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{x^{\pm}(\mathbf{k})+x^{\pm}(-\mathbf{k})}{2} \\ Z^{\pm}(\mathbf{k}) = x^{\pm}(\mathbf{k}) - x^{\pm}(-\mathbf{k}) \end{cases}; \quad \begin{cases} W^{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{y^{\pm}(\mathbf{k})+y^{\pm}(-\mathbf{k})}{2} \\ Y^{\pm}(\mathbf{k}) = y^{\pm}(\mathbf{k}) - y^{\pm}(-\mathbf{k}) \end{cases}, \tag{22}$$

и интегрируя по переменным $Z^{\pm}(\mathbf{k})$, $W^{\pm}(\mathbf{k})$, получим соответствующий гамильтониан (17) в квадратичном приближении по полевым переменным:

$$\begin{gathered} W_1 \approx \frac{1}{2}\sum_{k\in\Omega^+/2} m\omega^2(k)[1+n\beta v^+(\mathbf{k})]([X^+(k)]^2+[Y^+(k)]^2)+ \\ +\frac{1}{2}\sum_{k'\in\Omega^-/2} m\omega^2(k')[1-n\beta v^-(\mathbf{k}')]([X^-(k')]^2+[Y^-(k')]^2). \end{gathered} \tag{23}$$

Если множество Ω^- непусто (т.е., существуют такие значения волновых векторов, при которых Фурье-трансформанта потенциала отрицательна), то при достаточно низких температурах $T < T_c$

$$T_c = n\max_{\mathbf{k}'\in\Omega^-} v^-(\mathbf{k}') = -n\min_{\mathbf{k}\in\Omega}\tilde{v}(\mathbf{k}) \tag{24}$$

квадратичная форма (23) становится знакопеременной (точка минимума эффективного потенциала $\mathcal{W}_1$ в пространстве переменных $X^{\pm}(\mathbf{k})$, $Y^{\pm}(\mathbf{k})$ в начале координат переходит в седловую точку). Если ограничиться квадратичным приближением для $\mathcal{W}_1$ в (15), то соответствующий функциональный интеграл расходится. Аналогичное явление в теории поля называется спонтанным нарушением симметрии. Элементарная оценка показывает, что в исходном интеграле (15) никакой расходимости нет, т.е., при $T < T_c$ и в окрестности T_c квадратичное приближение недостаточно. Тем не менее, превращение точки минимума в седловую точку является признаком наличия фазового перехода в системе.

Таким образом, с понижением температуры гамильтониан $\mathcal{H}$ вспомогательного поля претерпевает следующие этапы эволюции:

1. при высоких температурах $T \gg T_c$ гамильтониан описывает систему невзаимодействующих осцилляторов (величинами $n\beta v^{\pm}(\mathbf{k})$ в (23) можно пренебречь);

2. при $T < T_c$, $(T - T_c) \sim T_c$ происходит изменение параметров m, $\omega(\mathbf{k})$ осцилляторов и в окрестности T_c наименьшая по $\mathbf{k}$ из $\omega(\mathbf{k})$ стремится к нулю. В этой ситуации в разложении гамильтониана $\mathcal{H}$ по степеням $x^{\pm}(\mathbf{k})$, $y^{\pm}(\mathbf{k})$ необходимо сохранить члены по меньшей мере третьего и четвертого порядков. Это означает, что помимо спонтанного нарушения симметрии начинает проявляться взаимодействие осцилляторов (нелинейные эффекты).

Заметим, что температура T_c не обязательно совпадает с точкой фазового перехода в системе. С полевой точки зрения в окрестности T_c происходит “конденсация” вспомогательных осцилляторов, а при $T \le T_c$ фазовый переход уже произошел.

Заключение

В данной работе показано, что основные ансамбли классической статистической механики допускают единое описание с помощью функционального интегрирования. В частности, такое описание позволило:

1. Установить новую связь между микроканоническим и каноническим ансамблями.

2. Установить определенный дуализм между внешними случайными полями и межатомными взаимодействиями. Межатомные взаимодействия могут быть точно исключены путем перенормировок внешних случайных полей, а случайные внешние поля – перенормировкой межатомных потенциалов.

3. Найти новую постановку задач равновесной статистической механики – как динамической теории поля с гамильтонианом, зависящим от температуры. Это приводит к проблеме исследования уравнений движения вспомогательного поля и поиску связей между решениями уравнений движения и термодинамическими характеристиками системы (в частности, с фазовыми переходами).

Список литературы

1. Gross D. H. E. Microcanonical thermodynamics. Singapore: World Scientific, 2001. 287 p.
2. Gross D. H. E. Microcanonical thermodynamics and statistical, fragmentation of dissipative systems. The topological structure of the N-body phase space // Physics Reports. 1997. 279(3). 119-202. DOI: 10.1016/S0370-1573(96)00024-5
3. Lavenda B. H. Statistical Physics: A Probabilistic Approach. New York: Wiley-Interscience, 1991. 371 p.
4. Кац М. Вероятность и смежные вопросы в физике / перевод с английского Р. А. Минлоса. Москва: Мир, 1965. 407 с.
5. Леви П. Конкретные проблемы функционального анализа: с добавлением Ф. Пеллегрино об аналитических функционалах / перевод со 2-го французского издания В. С. Бермана; под редакцией Г. Е. Шилова. Москва: Наука, 1967. 510 с.
6. Ledoux M. The concentration of measure phenomenon. – Providence: American Mathematical Society, 2001. 181 p.
7. Zakharov A. Yu. Exact Calculation Method of Partition Function for One-Component Classical Systems with Two-Body Interactions // Physics Letters A. 1990. 147(8/9). 442-444. DOI: 10.1016/0375-9601(90)90603-L
8. Захаров А. Ю. Функциональное интегрирование и метод факторизации в классической статистической механике // Журнал физической химии. 2000. 74(1). 48-53.
9. Zakharov A. Yu. Ensembles in classical statistical mechanics and their unification via nonlinear field theory // International Journal of Quantum Chemistry. 2004. 100(4). 442-447. DOI: 10.1002/qua.10808

References

1. Gross D. H. E. Microcanonical thermodynamics. Singapore, World Scientific, 2001. 287 p.
2. Gross D. H. E. Microcanonical thermodynamics and statistical, fragmentation of dissipative systems. The topological structure of the N-body phase space // Physics Reports. 1997. 279(3). 19–202. DOI: 10.1016/S0370-1573(96)00024-5

3. Lavenda B. H. Statistical Physics: A Probabilistic Approach. New York, Wiley-Interscience, 1991. 371 p.

4. Kac M. Probability and related topics in physical sciences. Volume I. Interscience Publ., New York, 1959. 266 p. (Russ. ed.: Kats M. Veroiatnost' i smezhnye voprosy v fizike. Moscow, Mir Publ., 1965. 407 p.)

5. Lévy P. Problèmes concrets d'analyse fonctionnelle: avec un complément sur les fonctionnelles analytiques par F. Pellegrino [Specific problems of functional analysis: with the addition of F. Pellegrino on analytic functionals]. 2de édition. Paris, Gauthier-Villars, 1951. 477 p. (Russ. ed.: Levi P. Konkretnye problemy funktsional'nogo analiza: s dobavleniem F. Pellegrino ob analiticheskikh funktsionalakh. Moscow, Nauka Publ., 1967. 510 p.)

6. Ledoux M. The concentration of measure phenomenon. Providence: American Mathematical Society, 2001. 181 p.

7. Zakharov A. Yu. Exact Calculation Method of Partition Function for One-Component Classical Systems with Two-Body Interactions // Physics Letters A. 1990. 147(8/9). 442-444. DOI: 10.1016/0375-9601(90)90603-L

8. Zakharov A. Yu. Functional integration and method of factorization in classical statistical mechanics // Russian Journal of Physical Chemistry A. 2000. 74(1). 40-45.

9. Zakharov A. Yu. Ensembles in classical statistical mechanics and their unification via nonlinear field theory // International Journal of Quantum Chemistry. 2004. 100(4). 442-447. DOI: 10.1002/qua.10808

Информация об авторах

Захаров Анатолий Юльевич – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого (Великий Новгород, Россия), ORCID: 0000-0002-7850-0086, Anatoly.Zakharov@novsu.ru

Захаров Максим Анатольевич – доктор физико-математических наук, доцент, профессор, Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого (Великий Новгород, Россия), ORCID: 0000-0002-9144-340X, Maxim.Zakharov@novsu.ru