

ОБЩИЕ ПРОБЛЕМЫ КВАНТОВОЙ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ХИМИИ

УДК 539.192

ФУНКЦИОНАЛЬНОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ И МЕТОД ФАКТОРИЗАЦИИ В КЛАССИЧЕСКОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ

© 2000 г. А. Ю. Захаров

Новгородский государственный университет им. Ярослава Мудрого

Получено представление производящего функционала и статистической суммы классических непрерывных систем с произвольным межатомным потенциалом в виде функционального интеграла. Показано, что классическая статистическая механика эквивалентна нелинейной теории комплекснозначного поля (вещественные фурье-компоненты этого поля порождаются притягивающей частью межатомных потенциалов в пространстве волновых векторов, мнимые – отталкивательной). Установлено, что существование вещественной части вспомогательного поля (и взаимного притяжения частиц в пространстве волновых векторов) является достаточным условием спонтанного нарушения симметрии в системе и наличия фазового перехода второго рода. Показано, что мнимая часть вспомогательного поля может служить причиной фазового перехода первого рода.

Метод функционального интегрирования (в частности – интеграл по путям) появился впервые, вероятно, в работах Винера по броуновскому движению [1]. Затем этот метод был положен в основу квантовой механики Фейнманом [2]. К настоящему времени функциональное интегрирование стало универсальным математическим аппаратом в квантовой теории поля [3–6], статистической физике [5–7], стохастической теории поля [8, 9], стохастической динамике [10] и др. Красота, общность и прозрачность аппарата приводят к дальнейшему расширению области его применения.

Несмотря на выдающиеся результаты 1970-х годов, теория фазовых переходов остается одной из нерешенных пока проблем физики конденсированного состояния материи. В принципе, вся термодинамика заключена в статистической сумме, нахождение которой сводится к вычислению конфигурационного интеграла кратностью порядка числа Авогадро. Одним из обстоятельств, затрудняющих решение проблемы, является “нефакторизованность” структуры подынтегральной функции, т.е. координаты каждой частицы входят в потенциальные энергии взаимодействия со всеми остальными частицами системы и представление подынтегральной функции в виде одночастичных сомножителей в общем случае, на первый взгляд, представляется невозможным.

Первыми моделями, для которых факторизация подынтегральной функции в конфигурационном интеграле была выполнена и за счет этого было получено точное решение, являлись одномерная и двумерная модели Изинга (см., к примеру, [6–8]). Факторизация трансфер-матрицы была достигнута благодаря учету взаимодействий только ближайших соседей на решетке.

Второй моделью, для которой удалось точно факторизовать по атомным координатам подын-

тегральную функцию в конфигурационном интеграле, является классическая континуальная модель с произвольным парным межатомным потенциалом, допускающим разложение Фурье [11]. Проблема “перепутывания” атомных координат была решена, однако вместо нее возникла задача вычисления негауссова функционального интеграла по вспомогательным полям, т.е. теоретико-полевая задача с самодействием. Решение этой проблемы осуществлялось в двух направлениях.

1. Использование эргодического приближения [11], основанного на эргодической теореме Вейля [12], для построения микроскопической теории фазовых переходов второго рода [13, 14].

2. Рассмотрение модельных потенциалов, для которых достаточно ограничиться гауссовым приближением для функциональных интегралов [14].

ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ ФОРМУЛИРОВКА КЛАССИЧЕСКОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ И ФАКТОРИЗАЦИЯ ПО АТОМНЫМ КООРДИНАТАМ

Статистическая сумма (производящий функционал) системы N нерелятивистских частиц, взаимодействующих между собой через парный центральный потенциал $v(\mathbf{r})$ и находящихся во внешнем поле $\varphi(\mathbf{r})$, равна

$$Z\{\varphi(\mathbf{r})\} = \frac{V^N}{N! \lambda^{DN}} \int_{(V \otimes \dots \otimes V)} \int \left(\prod_{s=1}^N \frac{d^D \mathbf{R}_s}{V} \right) \times \exp \left(-\beta \sum_{s=1}^N \varphi(\mathbf{R}_s) \right) \exp \left(-\frac{\beta}{2} \sum_{\substack{s, s'=1 \\ s \neq s'}}^N v(|\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_{s'}|) \right), \quad (1)$$

где $\lambda = (2\pi mT)^{-1/2}$ – тепловая длина волны де-Бройля, β – обратная температура ($\kappa = \hbar = 1$), V – объем системы, D – размерность пространства.

Две экспоненты, содержащие одночастичные энергии во внешнем поле и двухчастичные взаимодействия атомов соответственно, имеют принципиально различные математические структуры. Экспонента от взаимодействия с внешним полем распадается на произведение независимых одночастичных сомножителей типа $\exp(-\beta\phi(\mathbf{R}_s))$, содержащих координаты только одного атома. Аналогичное “расщепление” атомных координат во

второй экспоненте $\exp\left(-\frac{\beta}{2}\sum_{\substack{s,s'=1 \\ s \neq s'}}^N v(|\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_{s'}|)\right)$ возможно только после определенных преобразований.

Положим, что потенциал $v(\mathbf{r})$ абсолютно интегрируем ($v(\mathbf{r}) \in L_1(R^D)$). Тогда существует (вещественный) фурье-образ $\tilde{v}(\mathbf{k})$ межатомного потенциала и энергия межчастичных взаимодействий приводится к виду [11]:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{\substack{s,s'=1 \\ s \neq s'}}^N v(|\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_{s'}|) = \\ & = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k} \in \Omega} \tilde{v}(\mathbf{k}) \left[\sum_{\substack{s,s'=1 \\ s \neq s'}}^N \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_{s'})] \right] = \\ & = -\frac{N}{2}(v(0) - n\tilde{v}(0)) + \\ & + \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k} \in \Omega^+} v^+(\mathbf{k}) [C^2(\mathbf{k}) + S^2(\mathbf{k})] - \\ & - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}' \in \Omega^-} v^-(\mathbf{k}') [C^2(\mathbf{k}') + S^2(\mathbf{k}')], \end{aligned} \quad (2)$$

здесь

$$C(\mathbf{k}) = \sum_{s=1}^N \cos(\mathbf{k}\mathbf{R}_s), \quad S(\mathbf{k}) = \sum_{s=1}^N \sin(\mathbf{k}\mathbf{R}_s) \quad (3)$$

суть коллективные переменные Зубарева [15], $\Omega^+ = \{\mathbf{k} | \tilde{v}(\mathbf{k}) > 0\}$, $\Omega^- = \{\mathbf{k} | \tilde{v}(\mathbf{k}) < 0\}$; $v^+(\mathbf{k}) = \tilde{v}(\mathbf{k})$, $\mathbf{k} \in \Omega^+$; $v^-(\mathbf{k}') = -\tilde{v}(\mathbf{k}')$, $\mathbf{k}' \in \Omega^-$; $v^\pm(\mathbf{k}) > 0$, $n = N/V$; $-Nv(0)/2$ – член, компенсирующий слагаемые с $s = s'$ в правой части (2); суммы по \mathbf{k} , \mathbf{k}' (а в дальнейшем и соответствующие произведения) не содержат члена с $\mathbf{k} = 0$, который уже учтен в (2) слагаемым $N^2 \tilde{v}(0)/2V$.

Множество коллективных переменных $C(\mathbf{k})$, $S(\mathbf{k})$ в силу соотношений $C(\mathbf{k}) = C(-\mathbf{k})$, $S(\mathbf{k}) = -S(-\mathbf{k})$ линейно зависимо. Для выделения полного набора линейно независимых переменных разобьем каждое из множеств Ω^\pm на две части с помощью произвольной плоскости, проходящей через начало координат, и сохраним суммирование по \mathbf{k} , \mathbf{k}' в пределах половин этих множеств $\Omega^\pm/2$. В результате перед суммами по \mathbf{k} , \mathbf{k}' исчезнет множитель 1/2.

Подставив (2) во вторую экспоненту подынтегрального выражения (1), получим экспоненту от диагональной квадратичной формы по переменным $C(\mathbf{k})$, $S(\mathbf{k})$, которую сведем к экспоненте от линейных форм по этим же переменным с помощью преобразования Стратоновича–Хаббарда. В итоге найдем

$$\begin{aligned} & \exp\left(-\frac{\beta}{2} \sum_{\substack{s,s'=1 \\ s \neq s'}}^N v(|\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_{s'}|)\right) = \\ & = \exp\left(\left(\frac{\beta N}{2}\right)[v(0) - n\tilde{v}(0)]\right) \times \\ & \times \left\{ \prod_{\mathbf{k} \in \Omega^+/2-\infty-\infty} \int \int \frac{V dx^+(\mathbf{k}) dy^+(\mathbf{k})}{4\pi\beta v^+(\mathbf{k})} \times \right. \\ & \times \exp\left[-\frac{V}{4\beta v^+(\mathbf{k})} ([x^+(\mathbf{k})]^2 + [y^+(\mathbf{k})]^2)\right] \times \\ & \times \exp(-i[x^+(\mathbf{k})C(\mathbf{k}) + y^+(\mathbf{k})S(\mathbf{k})]) \left. \right\} \times \\ & \times \left\{ \prod_{\mathbf{k}' \in \Omega^-/2-\infty-\infty} \int \int \frac{V dx^-(\mathbf{k}') dy^-(\mathbf{k}')}{4\pi\beta v^-(\mathbf{k}')} \times \right. \\ & \times \exp\left[-\frac{V}{4\beta v^-(\mathbf{k}')} ([x^-(\mathbf{k}')]^2 + [y^-(\mathbf{k}')]^2)\right] \times \\ & \times \exp(-[x^-(\mathbf{k}')C(\mathbf{k}') + y^-(\mathbf{k}')S(\mathbf{k}')]) \left. \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

Соответствие между переменными (3) и переменными интегрирования здесь устанавливается следующим образом:

$$\begin{aligned} C(\mathbf{k}) & \longleftrightarrow x^+(\mathbf{k}); & C(\mathbf{k}') & \longleftrightarrow x^-(\mathbf{k}'); \\ S(\mathbf{k}) & \longleftrightarrow y^+(\mathbf{k}); & S(\mathbf{k}') & \longleftrightarrow y^-(\mathbf{k}'). \end{aligned}$$

Заметим, что атомные координаты \mathbf{R}_s содержатся только в коллективных переменных $C(\mathbf{k})$, $S(\mathbf{k})$; при этом экспоненты с коллективными переменными распадаются на идентичные “одно-

атомные" сомножители точно так же, как и экспонента с внешним полем в (1). Поэтому переходя от произведений по \mathbf{k}, \mathbf{k}' интегралов в (3) к функциональному интегралу по полевым переменным $x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})$ и подставляя (4) в (1) с последующим объединением соответствующих "одноатомных" сомножителей, найдем

$$Z\{\varphi(\mathbf{r})\} = A \int (F_1\{\varphi(\mathbf{r}), x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})\})^N D\mu, \quad (5)$$

где

$$D\mu = \left(\prod_{\mathbf{k} \in \Omega^{+}/2} \frac{V dx^+(\mathbf{k}) dy^+(\mathbf{k})}{4\pi\beta v^+(\mathbf{k})} \times \exp \left[\frac{V([x^+(\mathbf{k})]^2 + [y^+(\mathbf{k})]^2)}{4\beta v^+(\mathbf{k})} \right] \right) \times \left(\prod_{\mathbf{k}' \in \Omega^{-}/2} \frac{V dx^-(\mathbf{k}') dy^-(\mathbf{k}')}{4\pi\beta v^-(\mathbf{k}')} \times \exp \left[\frac{V([x^-(\mathbf{k}')]^2 + [y^-(\mathbf{k}')]^2)}{4\beta v^-(\mathbf{k}')} \right] \right) \quad (6)$$

есть нормированная на единицу гауссова мера

$$\int D\mu = 1, \quad A = \frac{V^N \exp((\beta N/2)[v(0) - n\tilde{v}(0)])}{N! \lambda^{ND}},$$

$$F_1\{\varphi(\mathbf{r}), x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})\} = \int_{(V)} \frac{d\mathbf{R}}{V} \exp \left(-\beta\varphi(\mathbf{R}) - \right. \quad (7)$$

$$-i \sum_{\mathbf{k} \in \Omega^{+}/2} [x^+(\mathbf{k}) \cos(\mathbf{k}\mathbf{R}) + y^+(\mathbf{k}) \sin(\mathbf{k}\mathbf{R})] -$$

$$\left. - \sum_{\mathbf{k}' \in \Omega^{-}/2} [x^-(\mathbf{k}') \cos(\mathbf{k}'\mathbf{R}) + y^-(\mathbf{k}') \sin(\mathbf{k}'\mathbf{R})] \right).$$

Нетрудно заметить, что $F_1\{\varphi(\mathbf{r}), x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})\}$ представляет собой конфигурационный интеграл одной частицы в комплексном внешнем поле

$$\psi(\mathbf{R}) = \varphi(\mathbf{R}) +$$

$$+ \frac{i}{\beta} \sum_{\mathbf{k} \in \Omega^{+}/2} [x^+(\mathbf{k}) \cos(\mathbf{k}\mathbf{R}) + y^+(\mathbf{k}) \sin(\mathbf{k}\mathbf{R})] + \quad (8)$$

$$+ \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}' \in \Omega^{-}/2} [x^-(\mathbf{k}') \cos(\mathbf{k}'\mathbf{R}) + y^-(\mathbf{k}') \sin(\mathbf{k}'\mathbf{R})],$$

а $(F_1\{\varphi(\mathbf{r}), x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})\})^N$ – конфигурационный интеграл идеального классического газа N частиц в этом поле. Выражение (5) является статистической суммой идеального газа, усредненной по всем реализациям случайного гауссова (вследствие определения меры $D\mu$) комплекснозначного внешнего поля, представленного в виде разложения Фурье.

Таким образом, многочастичная классическая система с абсолютно интегрируемыми парными межатомными взаимодействиями эквивалентна идеальному газу частиц в гауссовом случайном комплекснозначном внешнем поле. Другими словами, парное взаимодействие между частицами в классической системе может быть точно учтено перенормировкой внешнего поля.

Положим внешнее поле $\varphi(\mathbf{r})$ равным нулю. Тогда статистическая сумма Z системы имеет вид

$$Z = A \int \dots \int \left(\prod_{\mathbf{k} \in \Omega^{+}/2} \frac{dx^+(\mathbf{k}) dy^+(\mathbf{k}) N}{4\pi n \beta v^+(\mathbf{k})} \right) \times \left(\prod_{\mathbf{k}' \in \Omega^{-}/2} \frac{dx^-(\mathbf{k}') dy^-(\mathbf{k}') N}{4\pi n \beta v^-(\mathbf{k}')} \right) \times \quad (9)$$

$\times \exp[-NH(\dots, x^+(\mathbf{k}), y^+(\mathbf{k}), \dots, x^-(\mathbf{k}'), y^-(\mathbf{k}'), \dots)]$, где

$$H(\dots, x^+(\mathbf{k}), y^+(\mathbf{k}), \dots, x^-(\mathbf{k}'), y^-(\mathbf{k}'), \dots) = H_0 - \ln F_1\{x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})\} = \sum_{\mathbf{k} \in \Omega^{+}/2} \frac{[(x^+(\mathbf{k}))^2 + (y^+(\mathbf{k}))^2]}{4n\beta v^+(\mathbf{k})} + \quad (10)$$

$$+ \sum_{\mathbf{k}' \in \Omega^{-}/2} \frac{[(x^-(\mathbf{k}'))^2 + (y^-(\mathbf{k}'))^2]}{4n\beta v^-(\mathbf{k}')} - \ln F_1\{x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})\},$$

$$F_1\{x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})\} =$$

$$= \int_{(V)} \frac{d^D \mathbf{R}}{V} \exp \left[-i \sum_{\mathbf{k} \in \Omega^{+}/2} (x^+(\mathbf{k}) \cos(\mathbf{k}\mathbf{R}) + y^+(\mathbf{k}) \sin(\mathbf{k}\mathbf{R})) \right] \times \quad (11)$$

$$\times \exp \left[- \sum_{\mathbf{k}' \in \Omega^{-}/2} (x^-(\mathbf{k}') \cos(\mathbf{k}'\mathbf{R}) + y^-(\mathbf{k}') \sin(\mathbf{k}'\mathbf{R})) \right].$$

Интеграл (9) следует вычислять в термодинамическом пределе $N, V \rightarrow \infty, N/V = n = \text{const}$. Переменная N содержится в (9) явно, а переменная V –

в неявном виде: от объема V зависит величина “шага” дискретной переменной \mathbf{k} . В случае компактности множества $\Omega^+ \cup \Omega^-$ (т.е. если это множество содержится внутри шара конечного радиуса) интеграл по переменным $x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})$ имеет конечную кратность и только в термодинамическом пределе переходит в функциональный интеграл. В случае некомпактности множества $\Omega^+ \cup \Omega^-$ интеграл (9) является функциональным и до предельного перехода. Таким образом, помимо N в термодинамическом пределе стремится к бесконечности и кратность интеграла.

С формальной точки зрения функция $H(\dots, x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k}), \dots, x^\pm(\mathbf{k}'), y^\pm(\mathbf{k}'), \dots)$ с точностью до множителя представляет собой гамильтониан некоторого комплекснозначного поля с фурье-компонентами $x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})$. Вещественные фурье-компоненты этого поля $x^\pm(\mathbf{k}'), y^\pm(\mathbf{k}')$ порождены притяжением частиц в пространстве волновых векторов (наличием множества Ω^-), а мнимые $x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})$ обусловлены отталкивательной частью межатомных взаимодействий Ω^+ . Гамильтониан H не является (из-за $\ln F_1\{x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})\}$) квадратичным по полевым переменным $x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})$, поэтому вспомогательное поле в общем случае является самодействующим – имеет место взаимодействие между всеми фурье-гармониками.

**ДОСТАТОЧНОЕ УСЛОВИЕ
СПОНТАННОГО НАРУШЕНИЯ
СИММЕТРИИ ДЛЯ НЕПРЕРЫВНЫХ
МОДЕЛЕЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ
МЕХАНИКИ И ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД
ВТОРОГО РОДА**

Основной вклад в интеграл (9) по мере μ дают значения $x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})$ порядка

$$\begin{aligned} |x^\pm(\mathbf{k})| &= (4\pi\beta v^\pm(\mathbf{k})/N)^{1/2}, \\ |y^\pm(\mathbf{k})| &= (4\pi\beta v^\pm(\mathbf{k})/N)^{1/2}, \end{aligned} \quad (12)$$

т.е. бесконечно малые в термодинамическом пределе. Поэтому на первом этапе исследования гамильтониана разложим $\ln F_1$ по полевым переменным с точностью до членов второго порядка:

$$\begin{aligned} H &= (1/4) \sum_{\mathbf{k} \in \Omega^{+1/2}} ((x^+(\mathbf{k}))^2 + (y^+(\mathbf{k}))^2) \left[\frac{1}{n\beta v^+(\mathbf{k})} + 1 \right] + \\ &+ (1/4) \sum_{\mathbf{k} \in \Omega^{-1/2}} ((x^-(\mathbf{k}'))^2 + (y^-(\mathbf{k}'))^2) \left[\frac{1}{n\beta v^-(\mathbf{k})} - 1 \right]. \end{aligned} \quad (13)$$

В данном приближении гамильтониан соответствует свободному (невзаимодействующему) полю – все фурье-гармоники поля независимы друг от друга, хотя взаимодействия между частицами в не-

которой степени уже учтены (ответ содержит фурье-трансформанту межатомного потенциала).

Положим, что множество Ω^- непусто. Тогда на температурной оси существует особая точка

$$T_s = n \max_{\mathbf{k} \in \Omega^-} v^-(\mathbf{k}'), \quad (14)$$

в которой квадратичная форма, определяющая гамильтониан (13), перестает быть знакоопределенной. При температурах $T \leq T_s$ поле, описываемое этим гамильтонианом, перестает быть устойчивым, и статистическая сумма в данном приближении расходится. Это означает, что при приближении температуры к T_s квадратичное (гауссово) приближение неудовлетворительно – функциональный интеграл (9) расходится по тем переменным $x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})$, для которых $n\beta v^\pm(\mathbf{k}) \geq 1$. Строго говоря, эта расходимость имеет место только в гауссовом приближении и устраняется при учете членов высших порядков по $x^\pm(\mathbf{k}), y^\pm(\mathbf{k})$ в разложении H . Члены высших порядков могут быть интерпретированы как взаимодействие “элементарных возбуждений” и перестройка системы. Более прозрачная интерпретация происходящей перестройки системы может быть получена после вычисления корреляционных функций.

Таким образом, при условии

$$\Omega^- \neq 0 \quad (15)$$

существует температура T_s (14), ниже которой в системе происходит перестройка, т.е. имеет место спонтанное нарушение симметрии.

**МОДЕЛЬНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ
С НЕОТРИЦАТЕЛЬНЫМИ
ФУРЬЕ-ГАРМОНИКАМИ
И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПЕРВОГО РОДА**

Рассмотрим случай, когда условие спонтанного нарушения симметрии (15) не выполняется, т.е. модель, в которой отсутствует межатомное притяжение в \mathbf{k} -пространстве. В этом случае при вычислении континуального интеграла (9) можно ограничиться квадратичным приближением (13) для H и вычислить получающийся гауссов интеграл. В итоге найдем

$$\ln Z_c = \ln C - (V/2) \int_{\Omega^+} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \ln(1 + n\beta v^+(\mathbf{k})). \quad (16)$$

Поскольку $\Omega^- = 0$, а Ω^0 вклада в интеграл (16) не дает, то $v^+(\mathbf{k})$ заменяется на $\tilde{v}(\mathbf{k})$, а Ω^+ на Ω . После этих замен получим

$$\ln Z_c = \ln C - (V/2) \int_{\Omega} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \ln(1 + n\beta \tilde{v}(\mathbf{k})). \quad (17)$$

Из (17) найдем давление P

$$P = P_{id} + n^2 \tilde{v}(0)/2 - (T/2) \int_{\Omega} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \left[\ln(1 + n\beta \tilde{v}(\mathbf{k})) - \frac{n\beta \tilde{v}(\mathbf{k})}{1 + n\beta \tilde{v}(\mathbf{k})} \right], \quad (18)$$

где $P_{id} = nT$ – давление идеального газа.

Условие устойчивости по отношению к флуктуациям плотности имеет вид

$$\partial P / \partial n > 0. \quad (19)$$

Достаточным условием фазового перехода в системе является разрешимость системы уравнений

$$\begin{aligned} \partial P / \partial n &= T + n\tilde{v}(0) - \\ &- (T/2) \int_{\Omega} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{n(\beta \tilde{v}(\mathbf{k}))^2}{(1 + n\beta \tilde{v}(\mathbf{k}))^2} = 0, \quad (20) \\ \partial^2 P / \partial n^2 &= \tilde{v}(0) - \end{aligned}$$

$$- (T/2) \int_{\Omega} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{(\beta \tilde{v}(\mathbf{k}))^2 (1 - n\beta \tilde{v}(\mathbf{k}))}{(1 + n\beta \tilde{v}(\mathbf{k}))^3} = 0$$

вместе с (18) с области положительных n_0, P_0, β_0 . В общем случае произвольного потенциала $\tilde{v}(\mathbf{k})$ получение аналитического решения системы уравнений (20) или установление разрешимости этой системы не представляется возможным.

В качестве примеров рассмотрены классические системы со следующими межатомными потенциалами:

1) отталкивательный трехмерный потенциал Юкавы $\tilde{v}(\mathbf{k}) = A/(k^2 + a^2)$, $A > 0$;

$$2) v(\mathbf{k}) = \frac{A}{|\mathbf{k}|^4 + a^4}, A > 0, D = 1, 2, 3;$$

3) суперпозиция двух юкавских потенциалов $\tilde{v}(\mathbf{k}) = A/(k^2 + a^2) - B/(k^2 + b^2)$ с параметрами A, a, B, b , подобранными таким образом, чтобы при всех \mathbf{k} выполнялось условие положительности $\tilde{v}(\mathbf{k})$.

Численный анализ системы уравнений (20) показывает наличие фазовых переходов во всех перечисленных случаях. Особенно интересен случай суперпозиции юкавских потенциалов, поскольку указанные параметры допускают “реалистичный” межатомный потенциал с отталкиванием на малых расстояниях и притяжением на больших.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Функционально-интегральные представления для статистических сумм решеточных моделей статистической механики давно и хорошо известны (см., напр., [5–7]). Для непрерывных моделей

имеются формальные представления [10], однако эти представления не всегда конструктивны, поскольку они связаны с обращением интегральных операторов. Подобного рода задачи часто имеют неединственное решение (в частности, если ядро оператора является знакопеременным). Здесь мы используем подход, предложенный в работе [11].

Впервые температура T_s (14) появилась, вероятно, в работах Власова [16] как точка ветвления решений нелинейного интегрального уравнения для плотности частиц. “Ответившееся” решение было периодическим в пространстве и потому точка T_s отождествлялась с температурой кристаллизации. Неудовлетворительность этой интерпретации отмечалась в работе [17]; некоторое обобщение результатов Власова было выполнено Тябликовым [18], Базаровым [19] и другими. Большая часть возражений против подобного описания кристаллизации, высказанных в работе [17], последующими исследованиями [18, 19] (и многими другими) так и не снята.

Формула (16) была получена впервые Зубаревым [15] еще в 1954 г. Впоследствии идеи Зубарева получили некоторое продолжение в работах Юхновского с сотрудниками (см., например, работы [20]). К сожалению, в этих работах были сделаны недопустимые аппроксимации для Фурье-трансформант межатомных потенциалов, приводящие к неконтролируемым изменениям потенциалов в реальном пространстве (как известно, интегральный оператор Фурье неограничен). В результате произошло неявное изменение рассматриваемой модели – короткодействующие в координатном пространстве потенциалы заменены на дальнодействующие. В связи с этим остается неясным, какая часть результатов, содержащихся в указанных работах, соответствует исходным моделям (в частности, используемой авторами модели Изинга), а какие результаты появляются вследствие некорректных математических преобразований.

В этих работах не было замечено, что в системе может иметь место фазовый переход и в отсутствие притяжения в \mathbf{k} -пространстве.

Отметим, что нет вполне убедительных оснований отождествлять T_s с температурой фазового перехода, поскольку при приближении T к T_s сверху часть коэффициентов при $x^{\pm}(\mathbf{k}), y^{\pm}(\mathbf{k})$ стремится к нулю, вследствие чего в разложении N по полевым переменным нельзя уже ограничиваться квадратичными слагаемыми, как это сделано в (13). Соответственно, интеграл (9) за пределами квадратичного приближения перестает быть гауссовым и в общем случае явно не вычисляется. Описание фазового перехода за пределами приближения (13) с помощью эргодического приближения выполнено в работе [13].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Wiener N.* // J. Math. and Phys. Sci. 1923. V. 2. № 3. P. 131.
2. *Feynman R.* // Rev. Mod. Phys. 1948. V. 20. № 2. P. 367.
3. *Rivers R.J.* Path Integral Methods in Quantum Field Theory. Cambridge Univ. Press, 1987. 339 p.
4. *Рамон П.* Теория поля. М.: Мир, 1984. 334 с.
5. *Васильев А.Н.* Функциональные методы в квантовой теории поля и статистике. Л.: Изд-во ЛГУ, 1976. 295 с.
6. *Попов В.Н.* Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике. М.: Атомиздат, 1976. 256 с.
7. *Amit D.J.* Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena. N.Y.: McGraw-Hill, 1978. 336 p.
8. *Parisi G.* Statistical Field Theory. Addison-Wesley, 1988. 352 p.
9. *Itzykson C., Drouffe J.-M.* Théorie Statistique des Champs. Paris: CNRS, 1989. 392 p.
10. *Васильев А.Н.* Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике. СПб.: ПИЯФ, 1998. 774 с.
11. *Zakharov A.Yu.* // Phys. Lett. A. 1990. V. 147. № 8/9. P. 442.
12. *Weyl H.* // Math. Ann. 1916. B. 77. № 3. S. 313.
13. *Захаров А.Ю., Локтионов И.К., Грановский Я.И.* // Теплофизика высоких температур. 1997. Т. 35. № 3. С. 367.
14. *Захаров А.Ю., Локтионов И.К.* // Теорет. и мат. физика. 1999. Т. 119. № 1. С. 167.
15. *Зубарев Д.Н.* // Докл. АН СССР. 1954. Т. 95. № 4. С. 757.
16. *Власов А.А.* Теория многих частиц. М.: ГИТТЛ, 1950. 348 с.
17. *Гинзбург В.Л., Ландау Л.Д., Леонтович М.А., Фок В.А.* // ЖЭТФ. 1946. Т. 16. № 3. С. 246.
18. *Тябликов С.В.* // Там же. 1947. Т. 17. № 5. С. 386.
19. *Базаров И.П.* Статистическая теория кристаллического состояния. М.: Изд-во МГУ, 1972. 120 с.
20. *Юхновский И.Р.* Теория фазовых переходов второго рода. Метод коллективных переменных. Киев: Наук. думка, 1985.