Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

П. Л. Рубин, О решетчатом приближении в теории критических флуктуаций,
ТМФ, 2002, том 132, номер 1, 141–149

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf352>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и
согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.80.253.173

26 апреля 2023 г., 09:16:27

© 2002 г.

П. Л. Рубин*

О РЕШЕТЧАТОМ ПРИБЛИЖЕНИИ В ТЕОРИИ КРИТИЧЕСКИХ ФЛУКТУАЦИЙ

Флуктуации вблизи критической точки рассмотрены с помощью решетчатого приближения – аппроксимации поля параметра порядка $f(x)$ последовательностью сходящихся к $f(x)$ ступенчатых функций. Показано, что последовательное использование этого метода в том случае, когда вероятность флуктуации дается гамильтонианом Ландау, приводит к тривиальному результату: флуктуации исчезают, поскольку мера в пространстве описывающих их функций оказывается сосредоточенной на единственной функции $f \equiv 0$. Это может означать, что аппроксимация исходных гладких функций ступенчатыми непригодна в качестве способа вычисления рассматриваемого функционального интеграла (и определения соответствующей меры), хотя в гауссовом случае решетчатое приближение оказывается эффективным и дает тот же результат, что и другие методы.

Ключевые слова: критические флуктуации, негауссов функциональный интеграл, гамильтониан Ландау, решетчатое приближение.

1. ВВЕДЕНИЕ

При приближении к точке фазового перехода второго рода (критической точке) наблюдается резкое увеличение интенсивности и радиуса корреляции флуктуаций так называемого параметра порядка – той новой макроскопической величины, которая возникает в точке фазового перехода (например, при превращении парамагнетика в ферромагнетик это магнитный момент). До достижения точки фазового перехода макроскопическое (среднее) значение параметра порядка равно нулю, но критические флуктуации служат предвестником его возникновения. Задачей, не нашедшей пока точного решения, является вычисление корреляционной функции флуктуаций параметра порядка вблизи критической точки. Поскольку радиус корреляции флуктуаций в конденсированных средах при этом становится много больше размера молекулярной неоднородности среды, параметр порядка можно рассматривать как макроскопическую величину – непрерывную функцию координат. Поэтому одним из способов решения задачи о флуктуациях служит метод функционального интеграла.

* Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия. E-mail: rubin@sci.lebedev.ru

Пусть $f = f(x)$ – поле флуктуирующего параметра порядка, имеющего нулевое среднее вблизи точки перехода. В настоящей работе параметр порядка предполагается скалярным. Пусть функционал $\mathcal{E} = \mathcal{E}(f)$ – энергия, необходимая для возникновения поля $f(x)$, отнесенная к температуре образца (при макроскопически больших величинах радиуса корреляции флуктуаций параметра порядка энергию $\mathcal{E}$ можно рассматривать макроскопически). Корреляционную функцию флуктуаций параметра порядка можно представить в виде функционального интеграла [1], [2]

$$C(x, x') = \int f(x)f(x') \exp[-\mathcal{E}(f)] Df. \quad (1)$$

Интегрирование по Df – это усреднение по всем конфигурациям поля флуктуирующей величины.

Если разложить энергию флуктуации в ряд по f и ограничиться первыми членами, то при макроскопических масштабах корреляционной длины в первом приближении следует принять [1]

$$\mathcal{E}(f) = \frac{1}{2} \int [(a\nabla f)^2 + mf^2] dx = \frac{1}{2} \langle f | -a\Delta + m | f \rangle. \quad (2)$$

Здесь $a > 0$, $m > 0$; слагаемое $a(\nabla f)^2$ – поправка на нелокальность зависимости плотности энергии от f . Последнее равенство в выражении (2) получено с помощью интегрирования по частям; $\langle f | \hat{Q} | f \rangle$ – сокращенная запись интеграла, подобная принятой в квантовой механике:

$$\langle u | f \rangle = \int u(x)f(x) dx$$

(для вещественных функций) и аналогично для $\langle \cdot | \cdot | \cdot \rangle$.

Если имеет место равенство (2), то интеграл (1) является гауссовым и легко вычисляется [3]:

$$C(x, x') = G(x - x'). \quad (3)$$

Здесь $G(x)$ – функция Грина оператора $\hat{Q} = -a\Delta + m$, т.е. решение уравнения $\hat{Q}G(x) = \delta(x)$ с соответствующими граничными условиями. Будем считать, что корреляционная длина много меньше размеров образца и точки x, x' удалены от его границ. Тогда в качестве граничного условия можно принять $G(\infty) = 0$. В этом случае (формула Орнштейна–Чернике [1])

$$C(x, x') = G(r) = \frac{1}{4\pi ar} \exp(-r\sqrt{m/a}), \quad r = |x - x'|. \quad (4)$$

Отметим следующее обстоятельство. Формально интегрирование в формуле (1) подразумевает усреднение в том числе и по быстро осциллирующим функциям, тогда как на самом деле спектральные компоненты функции f с длинами волн менее молекулярных размеров, естественно, учитываться не должны [2]. Формула Орнштейна–Чернике (которая включает вклады всех спектральных компонент f) показывает, что формальный

учет сколь угодно быстро осциллирующих функций не приводит к бессмысленным результатам, поскольку их вероятность мала из-за слагаемых в выражении для энергии, содержащих производные f .

При приближении к критической точке параметр m становится малым, и разложение $\mathcal{E}$ по f можно продолжить [1], [2]:

$$\mathcal{E}(f) = \int \left[\frac{(a\nabla f)^2 + mf^2}{2} + gf^4 \right] dx, \quad (5)$$

где $g > 0$ – постоянная. Подстановка интеграла (5) в формулу (1) порождает функциональный интеграл, вычислить который значительно сложнее, чем соответствующий гауссов интеграл (при $g = 0$). На самом деле даже формальное определение этого интеграла можно считать самостоятельной проблемой. В настоящей работе функциональный интеграл (5) будет вычислен как предел интеграла конечной кратности, который возникает при приближенной замене исходных функций f ступенчатыми функциями с неограниченным увеличением числа ступенек и уменьшением их размера [3] (решетчатое приближение). Фактически речь при этом идет одновременно и об определении, и о вычислении интеграла. Вычисления можно последовательно провести до конца, но оказывается, что формула (5) приводит к тривиальному результату: флуктуации исчезают, и с вероятностью 1 функция f не отклоняется от своего среднего нулевого значения, в частности, $C(x, x') \equiv 0$. Этот результат выглядит неожиданным и будет обсужден ниже.

2. ВЫЧИСЛЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ИНТЕГРАЛА

Корреляционную функцию легко найти, если известен характеристический функционал

$$\phi(u) = \int \exp[i\langle u|f\rangle - \mathcal{E}(f)] Df, \quad (6)$$

вычисление которого и будет целью настоящей работы. Здесь $u(x)$ – некоторая произвольная функция. Она предполагается лишь достаточно регулярной и имеющей ограниченный носитель.

Как уже упоминалось, сначала функция f приближенно заменяется ступенчатой функцией. Пусть область, занятая рассматриваемым образцом Ω , имеет объем V . Если размеры образца много больше радиуса корреляции флуктуаций, форма образца несущественна. Ради удобства будем предполагать, что образец имеет форму куба. Разобьем его на N малых “элементарных” областей (для простоты – одинаковых). Удобно выполнить это разбиение путем последовательного деления ребер куба на 2^n одинаковых частей ($n = 2, 3, \dots$) и проведением через точки деления (гипер)плоскостей, параллельных граням куба. Тогда каждое новое разбиение сводится к измельчению предыдущего, и $N = 2^{nd}$ (d – размерность пространства, в первую очередь имеется в виду $d = 3$).

Объем элементарного кубика V/N для краткости будем обозначать ε_N или просто ε , если явно указывать N не обязательно. Замену исходной функции на ступенчатую можно записать в виде приближенного равенства

$$f(x) \simeq \sum_{n=1}^N a_n \chi_n(x), \quad (7)$$

где $\chi_n(x)$ – характеристическая функция n -го элементарного объема (кубика), т. е. $\chi_n(x) = 1$ внутри кубика и $\chi_n(x) = 0$ вне его.

Далее следует тем или иным способом заменить производные $f(x)$ соответствующими конечными разностями, выполнить интегрирование по $da_1 da_2 \dots da_N$ и перейти к пределу $N \rightarrow \infty$. В процессе вычислений следует учитывать нормировку интеграла.

Пусть $\phi_N(u)$ – упомянутая выше аппроксимация характеристического функционала. Поскольку должно выполняться условие $\phi(0) = 1$ (среднее значение единицы есть единица), естественно потребовать, чтобы и $\phi_N(0) = 1$ или, по крайней мере, предел $\lim_{N \rightarrow \infty} \phi_N(0)$ оставался конечным. Здесь 0 – функция, тождественно равная нулю. Для выполнения условия нормировки описанная выше процедура должна быть дополнена добавлением соответствующего множителя к конечномерному интегралу $\phi_N(u)$. Можно, например, вместо $\phi_N(u)$ сразу рассматривать отношение $\phi_N(u)/\phi_N(0)$. Условие нормировки позволяет вести вычисления с точностью до не зависящих от u множителей, поскольку они все равно сократятся в процессе нормировки. В таких случаях вместо знака равенства будем использовать знак пропорциональности “ $\sim$ ”.

Заметим, что описанная выше процедура априори не связана с использованием того или иного функционального пространства. Однако в процессе вычислений будет удобно считать, что ступенчатые функции $\chi_n(x)$ и их линейные комбинации относятся к гильбертову пространству $L = L_2(\Omega)$, а также изменить нормировку функций. Пусть $e_n(x) = \chi_n(x)/\sqrt{\varepsilon_N}$. Тогда вместо (7) следует записать

$$f(x) \simeq \sum_{n=1}^N f_n e_n(x), \quad (8)$$

где $f_n = \langle f | e_n \rangle$. Очевидно, что функции $e_i(x)$ взаимно ортогональны и нормированы в пространстве L . Интегрирование теперь надо вести по $df_1 df_2 \dots df_N$ вместо $da_1 da_2 \dots da_N$. В результате получается определение функционального интеграла, близкое к приведенному в книге Березина [4] (правда, без проверки инвариантности относительно изменения базиса).

Теперь можно более подробно рассмотреть конечномерное приближение к характеристическому функционалу

$$\phi_N \sim \int \exp[W(f)_N] df_1 \dots df_N, \quad (9)$$

где

$$W(f)_N = i \sum_{i=1}^N f_i u_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N Q_{ij} f_i f_j - \frac{g}{\varepsilon} \sum_{i=1}^N f_i^4. \quad (10)$$

Здесь $u_i = \langle e_i | u \rangle$ и $f_i = \langle e_i | f \rangle$. Матрица Q_{ij} представляет собой сумму $m\delta_{ij}$ и матрицы D_{ij} , с помощью которой производные в формуле (2) заменяются их конечно-разностным приближением.

Матрицу D_{ij} можно выбирать по-разному. Естественно предположить, что конечный результат не должен зависеть от ее конкретного вида, если при неограниченном измельчении разбиения области Ω сумма

$$\sum_j Q_{ij} f_j = \sum_j Q_{ij}^{(N)} f_j \quad (11)$$

переходит в $\hat{Q}f$ (для дважды дифференцируемых функций). Поэтому матрица D_{ij} не будет задана явно. Сделаем лишь следующее предположение. Согласно сказанному выше, функция f заменяется ступенчатой и, следовательно, недифференцируемой функцией. Поэтому оператор D сначала заменяется некоторым другим оператором $\tilde{D}$, который по заданному ступенчатому приближению к функции f строит ступенчатое же приближение к Df . Этот оператор предполагается инвариантным в следующем смысле.

Вообще говоря, одна и та же ступенчатая функция $\tilde{f}$, аппроксимирующая исходную функцию f , может получиться при разных разбиениях (при разных N). Например, так будет, если f – постоянная. Оператор $\tilde{D}$ должен быть таким, чтобы $\tilde{D}\tilde{f}$ зависела только от самой ступенчатой функции $\tilde{f}$, но не от способа, с помощью которого она была получена. Выполнить это условие нетрудно, и тогда аналогичным свойством инвариантности будет обладать и оператор $\tilde{Q} = m + \tilde{D}$. Матрица $Q_{ij}^{(N)}$ – это фактически матрица оператора $P_N \tilde{Q} P_N$ (проекторы P_N определены ниже, см. (19)).

Для вычисления интеграла (9) можно использовать то обстоятельство, что он представляет собой преобразование Фурье произведения двух функций и, следовательно, ϕ_N с точностью до постоянного (не зависящего от u) множителя – свертка двух соответствующих фурье-образов:

$$\begin{aligned} \phi_N^{(1)}(u) &\sim \int \exp\left(i \sum_{n=1}^N f_n u_n - \frac{1}{2} \sum_{n,m=1}^N \tilde{Q}_{mn}^{(N)} f_m f_n\right) \prod_j df_j = \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{mn} G_{mn}^{(N)} u_m u_n\right) \end{aligned} \quad (12)$$

и

$$\phi_N^{(2)}(u) \sim \int \exp\left(i \sum f_n u_n - \frac{g}{\varepsilon} \sum_{n=1}^N f_n^4\right) \prod_j df_j. \quad (13)$$

Первый из них представляет собой обычный гауссов интеграл конечной кратности, так что $G_{ij}^{(N)}$ и $\tilde{Q}_{ij}^{(N)}$ – взаимно-обратные матрицы:

$$\sum_k \tilde{Q}_{ik}^{(N)} G_{kj}^{(N)} = \delta_{ij}. \quad (14)$$

Второй интеграл сводится к произведению одинаковых функций:

$$\phi_N^{(2)}(u) = \prod_{j=1}^N K[u_j(\varepsilon/g)^{1/4}], \quad (15)$$

где

$$K(x) = \frac{2}{\Gamma(1/4)} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ikx - k^4) dk = 1 - \frac{\Gamma(3/4)}{2\Gamma(1/2)} x^2 + \dots. \quad (16)$$

Итак,

$$\phi_N(u) \sim \int \phi_N^{(1)}(w) \phi_N^{(2)}(u-w) dw, \quad dw = \prod_j dw_j. \quad (17)$$

Заметим, что $\phi_N^{(1)}(w)$ – плотность распределения Гаусса с точностью до нормировочного множителя (см. (12)). Поэтому можно написать

$$\phi_N(u) \sim \int \phi_N^{(2)}(u-w) d\mu_N(w), \quad (18)$$

где $d\mu_N(w)$ – гауссова мера с плотностью

$$C_N \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{mn} G_{mn}^{(N)} u_m u_n\right).$$

Постоянная C_N выбирается таким образом, чтобы выполнялось условие нормировки $\int d\mu_N(u) = 1$, при этом множители пропорциональности в (17) и (18) не совпадают.

В формуле (18) интегрируемую функцию можно считать заданной на N -мерном линейном пространстве $L_N = P_N L$, где ортогональный проектор P_N в дираковских обозначениях можно записать как

$$P_N = \sum_{i=1}^N |e_i\rangle \langle e_i|. \quad (19)$$

Функции $e_i(x)$ ($i = 1, \dots, N$) образуют базис этого пространства. В этом же пространстве задана и мера μ_N . Следующий шаг состоит в том, чтобы показать, что меру μ_N можно рассматривать как сужение на L_N некоторой меры в исходном гильбертовом пространстве L .

Отметим сначала, что при $N_2 > N_1$ пространство L_{N_1} естественно вложено в L_{N_2} . Это следует из способа построения последовательных разбиений куба Ω . Рассмотрим

характеристические функционалы φ_{N_1} и φ_{N_2} мер (распределений) μ_{N_1} и μ_{N_2} . Согласно (14)

$$\varphi_{N_1}(f) = \int \exp[i\langle f | u \rangle] d\mu_{N_1}(u) = \exp\left(-\frac{1}{2}\langle f | \tilde{Q} | f \rangle\right), \quad f \in L_{N_1} \quad (20)$$

(см. формулу (11) и ее обсуждение). То же справедливо и для φ_{N_2} , но при $f \in L_{N_2}$. Эти формулы имеют место благодаря инвариантности оператора $\tilde{Q}$ (см. выше). Отсюда следует согласованность рассматриваемых мер в пространствах L_{N_1} и L_{N_2} , поскольку характеристический функционал полностью определяет меру.

Семейство подобных согласованных мер в свою очередь определяет меру μ в исходном гильбертовом пространстве L , сужения которой на L_N совпадают с μ_N . Эта мера счетно-аддитивна на алгебре $\mathcal{U}$ цилиндрических множеств, порожденных проекциями $P_N: L \rightarrow L_N$ (см., например, [5]). Алгебра $\mathcal{U}$, вообще говоря, не является счетной (σ -алгеброй). Однако она может быть единственным образом продолжена на минимальную σ -алгебру, содержащую $\mathcal{U}$ [6]. Пусть μ далее обозначает это продолжение¹⁾, тогда вместо (18) можно записать

$$\phi_N(u) \sim \int \phi_N^{(2)}(u - w) d\mu(w), \quad (21)$$

поскольку все функции $\phi_N^{(2)}$ измеримы относительно μ .

Теперь легко закончить вычисление $\phi(u)$. При вещественных x , очевидно, имеет место неравенство

$$|K(x)| \leq 1, \quad (22)$$

так что из (16) и (17) для разности $\psi_N(u) = \phi_N^{(2)}(u) - 1$ нетрудно получить

$$|\psi_N(u)| \leq c\sqrt{\varepsilon} \sum_j u_j^2, \quad (23)$$

где c — некоторая положительная константа (можно использовать (16), (22) и метод индукции). Отсюда следует, что

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \phi_N^{(2)}(u) = 1 \quad (24)$$

для всех $u \in L$, поскольку $\varepsilon \rightarrow 0$ при $N \rightarrow \infty$. Теперь из равенства (21) вследствие общих свойств интеграла Лебега [6] следует, что

$$\phi(u) = \lim_{N \rightarrow \infty} \phi_N(u) = 1, \quad (25)$$

¹⁾Подчеркнем, что при расширении исходной алгебры не требуется расширения самого исходного пространства L , и μ не совпадает с мерой, которая может быть построена по заданному оператору Q согласно теореме Минлоса (ср. [5], [7]).

поскольку $|\phi_N^{(2)}(u)| \leq 1$. Нормировка здесь очевидным образом правильная, и отсюда следует сделанное во введении утверждение: поскольку характеристический функционал, отвечающий флуктуациям параметра порядка, тождественно равен единице, корреляционные функции f любого порядка равны нулю, флуктуации отсутствуют, и f с вероятностью 1 не отклоняется от своего равновесного значения $f = 0$. Отметим, что результат, как и ожидалось, не зависит от конкретного выбора оператора $\tilde{Q}$. Кроме того, можно заметить, что характеристический функционал и корреляционная функция не обладают свойством непрерывности по g при $g = 0$.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Прежде чем обсуждать полученный результат, можно привести более непосредственный, хотя, возможно, и менее строгий его вывод. Будем полагать, что формула свертки верна не только для конечномерной аппроксимации функционального интеграла ϕ_N , но и для него самого, т.е.

$$\phi(u) = \int \phi^{(2)}(w) \phi^{(1)}(u - w) Dw.$$

Здесь $\phi^{(1)}(u) = \exp[-(u|G|u)/2]$, $\phi^{(2)}(u) = \int \exp[i(u|f) - g \int f^4(x) dx] Df$.

Последний интеграл вычисляется аналогично тому, как выше была выполнена оценка в уравнении (24), т.е.

$$\phi^{(2)}(u) = 1. \quad (26)$$

Поскольку свертка любого функционала с единицей может дать только постоянную, и с учетом требования нормировки эта постоянная может быть только единицей, окончательно получаем

$$\phi(u) = 1. \quad (27)$$

Смысл этого достаточно неожиданного результата становится яснее, если рассмотреть исходный интеграл в одномерном случае²⁾ ($d = 1$). Полученный выше результат остается справедливым. В то же время в одномерном случае рассмотренный функциональный интеграл может быть вычислен с помощью меры Винера (см., например, [8]). Мера Винера сосредоточена на множестве непрерывных функций, так что добавление множителя $\exp[-g \int_a^b f^4(x) dx]$ под знаком функционального интеграла не приводит к возникновению каких-либо сингулярностей, а результат не сводится к заключению, что $f \equiv 0$ с вероятностью 1.

Приведенные рассуждения позволяют с заметной долей уверенности предположить, что аппроксимация исходных гладких функций ступенчатыми приводит к практически бесполезному тривиальному определению меры и функционального интеграла, если исходная вероятность флуктуации определяется гамильтонианом Ландау. Следует также отметить, что по существу тот же функциональный интеграл, что и в данной работе,

²⁾ Вне связи с тем обстоятельством, что в одномерном случае речь о фазовом переходе не идет.

рассматривался в связи с его применением к квантовой теории поля в двумерном пространстве [8]. При этом получена нетривиальная модель теории поля. Однако в этих вычислениях использовался другой метод, включавший процедуру вычитания бесконечных контрчленов для регуляризации членов ряда теории возмущений. В итоге можно сделать вывод, что результат вычисления рассмотренного функционального интеграла чувствителен к способу его предварительной конечномерной аппроксимации перед переходом к пределу, тогда как в случае аналогичного гауссового интеграла результат практически не зависит от метода вычисления.

Благодарности. Автор обсуждал эту работу с Р. А. Минлосом, С. А. Пироговым и участниками семинара Теоретического отдела ФИАН. Замечания Р. А. Минлоса особенно помогли в выяснении смысла полученных результатов. Всем упомянутым лицам автор выражает искреннюю благодарность.

Список литературы

- [1] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика. М.: Наука, 1967.
- [2] К. Вильсон, Дж. Когут. Ренормализационная группа и ϵ -разложение. М.: Мир, 1975.
- [3] В. Н. Попов. Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике. М.: Атомиздат, 1976.
- [4] Ф. А. Березин. Метод вторичного квантования. М.: Наука, 1986.
- [5] Ю. Л. Далецкий, С. В. Фомин. Меры и дифференциальные уравнения в бесконечномерных пространствах. М.: Наука, 1983.
- [6] Н. Данфорд, Дж. Т. Шварц. Линейные операторы. Т. 1. М.: ИЛ, 1962.
- [7] Т. Хиде. Броуновское движение. М.: Наука, 1987.
- [8] Дж. Глимм, А. Джаффе. Математические методы квантовой физики. М.: Мир, 1984.

Поступила в редакцию 15.XI.2001 г.,
после доработки 26.II.2002 г.