Физика низких температур, 1997, т. 23, № 9, с. 915–922

О самосогласованном определении квазисредних в статистической физике

Ю. М. Полуэктов

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт», Украина, 310108, г. Харьков, ул. Академическая, 1
E-mail:kfti@kfti.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 28 декабря 1996 г., после переработки 26 марта 1997 г.

Понятие квазисреднего, введенное Н. Н. Боголюбовым для описания состояний многочастичных систем со спонтанно нарушенной симметрией (сверхтекучие жидкости, сверхпроводники, кристаллы и др.), обобщено таким образом, что поля, вводимые в исходный гамильтониан для нарушения его симметрии, не предполагаются заданными извне, а определяются свойствами самого физического объекта и находятся в результате решения системы уравнений в приближении самосогласованного поля.

Поняття квазісереднього, запроваджене Н. Н. Боголюбовим для опису станів багаточасткових систем із спонтанно порушеною симетрією (надплинні рідини, надпровідники, кристали та ін.) узагальнено в тому відношенні, що поля, які уведені в початковий гамільтоніан для порушення його симетрії, не припускаються заданими зовні, а визначаються властивостями самого фізичного об'єкта і знаходяться в результаті вирішення системи рівнянь в наближенні самоузгодженого поля.

PACS: **05.30.–d**

1. Введение

Концепция квазисредних была введена Боголюбовым [1,2] как результат исследований многочастичных систем с вырожденным состоянием статистического равновесия. В таком состоянии находятся различные физические объекты, в частности: жидкий гелий в сверхтекучей фазе, металлы в сверхпроводящем состоянии, магнетики в ферромагнитном состоянии, кристаллы и многие другие системы, состоящие из большого числа взаимодействующих частиц. Состояния, для описания которых возникает необходимость во введении понятия квазисреднего, характеризуются наблюдаемыми, которые не могут быть рассчитаны с помощью операции обычного усреднения, поскольку соответствующие средние обращаются в нуль в силу свойств симметрии гамильтониана. Чтобы получить ненулевые значения наблюдаемых, согласно Боголюбову, к исходному гамильтониану следует добавить гамильтониан (с малым коэффициентом ν перед ним), содержащий внешние поля, нарушающие ту симметрию, вследствие которой средние обращаются в нуль. В дальнейшем усреднение следует проводить с новым гамильтонианом и после термодинамического предельного перехода $V \to \infty$ (V — объем системы) перейти в пределу $\nu \to 0$. Полученные таким путем средние, называемые квазисредними, в определенной области термодинамических параметров уже могут быть отличными от нуля. Состояния с отличными от нуля квазисредними обычно называют состояниями со спонтанно нарушенной симметрией.

Введенное Боголюбовым понятие квазисреднего оказывается весьма полезным для исследования фазовых переходов, сопровождающихся изменением симметрии состояния статистического равновесия. Однако при использовании концепции квазисредних в настоящем ее виде остается в стороне ряд важных взаимосвязанных моментов. В частности, не совсем удобным является то, что для нахождения квазисреднего требуется заранее знать симметрию той фазы, в которую переходит система из симметричного состояния. В рамках самой концепции квазисредних тип спонтанно нарушенной симметрии определить нельзя. Между тем было бы желательно, чтобы концепция квазисредних включала в себя способ, позволяющий, хотя бы принципиально, получить ответ на вопрос о том, какие состояния со спонтанно нарушенной симметрией возможны при данных значениях термодинамических параметров. Это открывало бы возможность для построения на основе микроскопического подхода фазовой диаграммы системы многих взаимодействующих частиц. Предполагая поля, нарушающие симметрию, заданными извне, решить поставленный вопрос нельзя. Включением вспомогательных полей можно произвольным образом нарушить любую симметрию системы, но не все мыслимые возможности будут допустимы. Было бы более естественно, чтобы, как это имеет место в действительности, характер нарушения симметрии определялся не заданными определенным способом внешними полями или наложением иным способом дополнительных граничных условий, отбирающих нужную симметрию, а природой самой многочастичной системы и симметрией межчастичных взаимодействий. Разумеется, если система находится в реальных внешних полях, то симметрия ее состояния определяется также и симметрией этих полей.

По изложенным причинам представляется естественным дополнить концепцию квазисредних так, чтобы она позволяла находить все допустимые фазы со спонтанно нарушенной симметрией при данных термодинамических параметрах и тем самым давала возможность построения фазовой диаграммы системы. Как показано в данной работе, это можно сделать, предположив, что нарушающие симметрию поля должны определяться самосогласованно в результате решения уравнений, описывающих многочастичную систему в некотором приближении. Предъявив к нарушающему симметрию гамильтониану требование простоты, заключающееся в том, что в него не должны входить члены выше второго порядка по полевым операторам, мы почти с необходимостью приходим к приближению самосогласованного поля для определения вида и симметрии этого гамильтониана. Тем самым задается четкий алгоритм построения добавки к исходному гамильтониану, которая нарушала бы любые его симметрии всеми допустимыми способами.

Поскольку симметрия состояний многочастичной системы определяется ее природой (в частности, статистикой частиц) и симметрией межчастичных взаимодействий, а также ее взаимодействием с внешними полями, но не величиной межчастичного взаимодействия, то имеются все основания полагать, что возможные состояния системы со спонтанно нарушенной симметрией можно получить уже в приближении самосогласованного поля. Дополнительный учет корреляционных взаимодействий, не включенных в приближение среднего поля, хотя и изменяет параметры системы, но не приводит к появлению фаз с новой симметрией.

Во втором разделе данной статьи показано, как из условий симметрии гамильтониана вытекают правила отбора для обычных средних. Наличие таких правил отбора не позволяет пользоваться обычными средними для описания состояний со спонтанно нарушенной симметрией и приводит к необходимости введения квазисредних. В третьем разделе с целью самосогласованного определения квазисредних вводится вспомогательный гамильтониан общего вида, содержащий поля, которые определяют симметрию, нарушаемую данным гамильтонианом. В приближении самосогласованного поля получены уравнения для этих полей. Кратко обсуждена проблема построения фазовой диаграммы многочастичной системы на основе микроскопического подхода.

2. Симметрия гамильтониана и правила отбора

Будем рассматривать многочастичные системы, определяемые гамильтонианом

$$H = \int dq\, dq'\, \psi^+(q) H(q,\, q') \psi(q') +$$
$$+ \frac{1}{2}\int dq\, dq' \psi^+(q)\psi^+(q') U(x,\, x')\psi(q')\psi(q) \;, \qquad (1)$$

где

$$H(q,\, q') = H_0(q,\, q') - \mu\delta(q - q') \;, \qquad (2)$$
$$H_0(q,\, q') = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{x'}\delta(q - q') + U_0(x)\delta(q - q') \;.$$

В (1) $\psi^+(q)$, $\psi(q)$ — операторы рождения и уничтожения частицы с координатами q; $U(x,\, x')$ — потенциал межчастичного взаимодействия, не зависящий от спиновых переменных. Отметим, что в H включен член с химическим потенциалом μ. В одночастичном гамильтониане (2) m — масса частицы, а $U_0(x)$ — внешний потенциал (в частности, для электронов в твердом теле это может быть периодический потенциал решетки). Гамильтониан (1) описывает как ферми-, так и бозе-частицы, при этом полевые операторы подчиняются соответственно антикоммутационным или коммутационным соотношениям. Для ферми-частиц $q = (x,\, \sigma)$, где $x = \{r\}$ — пространственная координата; σ — проекция спина, а знак интегрирования означает интегрирование по пространственным координатам и суммирование по дискретной переменной, кроме того, $\delta(q-q')=$ $=\delta(x-x')\delta_{\sigma\,\sigma'}$. Для бозе-частиц $q=x$.

Рассмотрим унитарные преобразования полевых операторов:

$$\psi \to T_\lambda \psi T_\lambda^+ , \tag{3}$$

где $\lambda=(\lambda_1 , \ldots, \lambda_p)$ — набор непрерывных или дискретных параметров. Предположим, что новые операторы линейно выражаются через старые

$$T_\lambda \psi(q) T_\lambda^+ = \int dq' T_\lambda(q, q')\psi(q') , \tag{4}$$

причем в силу унитарности

$$\int dq''\, T_\lambda(q, q'')\, T_\lambda^*(q', q'') = \delta(q-q') . \tag{5}$$

Если для одночастичного гамильтониана (2) и потенциала межчастичного взаимодействия выполнены условия

$$\int dq\, dq' H(q, q') T_\lambda^*(q, q_1) T_\lambda(q', q_2) = H(q_1 , q_2) , \tag{6}$$

$$\int dq\, dq' U(x, x') T_\lambda^*(q, q_1) T_\lambda^*(q', q_2) T_\lambda(q', q_3) T_\lambda(q, q_4) = U(x_1 , x_2)\delta(q_2-q_3)\delta(q_1-q_4) , \tag{7}$$

то гамильтониан (1) инвариантен относительно унитарных преобразований T_λ:

$$T_\lambda H T_\lambda^+ = H . \tag{8}$$

Совокупность всех преобразований, для которых выполнены условия (6)–(8), образуют группу симметрии гамильтониана (1). Наблюдаемые характеристики системы вычисляются путем усреднения эрмитовых операторов, выраженных через полевые операторы, со статистическим оператором

$$\rho = e^{\beta(\Omega - H)} , \tag{9}$$

где $\beta = 1/T$ — обратная температура, а Ω — термодинамический потенциал, определяемый условием нормировки $\mathrm{Sp}\,\rho = 1$.

Чтобы рассмотреть средние от произведений полевых операторов, введем для последних новые обозначения:

$$\xi_\alpha(q) = \begin{cases} \psi(q) , & \alpha = 1 , \\ \psi^+(q) , & \alpha = 2 . \end{cases} \tag{10}$$

В этих обозначениях соотношение (4) записывается в виде

$$T_\lambda \xi_\alpha(q) T_\lambda^+ = \int dq' T_\lambda^{(\alpha)}(q, q')\xi_\alpha(q') , \tag{11}$$

причем

$$T_\alpha^{(1)}(q, q') = T_\lambda^{(2)^*}(q, q') = T_\lambda(q, q') .$$

Среднее от произведения n полевых операторов с учетом симметрии гамильтониана (8) можно представить в виде

$$\langle\, \xi_{\alpha_1}(q_1) \ldots \xi_{\alpha_n}(q_n) \,\rangle = \mathrm{Sp}\left(e^{\beta(\Omega-H)}\, \xi_{\alpha_1}(q_1) \ldots \xi_{\alpha_n}(q_n)\right) = \mathrm{Sp}\left(T_\lambda e^{\beta(\Omega-H)}\, T_\lambda^+\, \xi_{\alpha_1}(q_1) \ldots \xi_{\alpha_n}(q_n)\right) =$$

$$= \mathrm{Sp}\left(e^{\beta(\Omega-H)}\, T_\lambda^+ \xi_{\alpha_1}(q_1) \ldots \xi_{\alpha_n}(q_n) T_\lambda\right) = \int dq_1' \ldots dq_n'\, T_\lambda^{(\alpha_1)^*}(q_1' , q_1) \ldots T_\lambda^{*(\alpha_n)}(q_n' , q_n)\, \langle\, \xi_{\alpha_1}(q_1') \ldots \xi_{\alpha_n}(q_n') \,\rangle .$$

Таким образом, инвариантность гамильтониана приводит к следующим правилам отбора для средних:

$$\int dq_1' \ldots dq_n' \left\{ \delta(q_1-q_1') \ldots \delta(q_n-q_n') - T_\lambda^{(\alpha_1)^*}(q_1' , q_1) \ldots T_\lambda^{*(\alpha_n)}(q_n' , q_n) \right\} \langle\, \xi_{\alpha_1}(q_1') \ldots \xi_{\alpha_n}(q_n') \,\rangle = 0 . \tag{12}$$

Функции Грина представляют собой линейные формы из средних значений, поэтому такие же правила отбора справедливы и для них.

Состояние системы, в котором отличны от нуля только такие наблюдаемые, которые выражаются через средние, разрешенные правилами отбора (12), называется высокосимметричным (или просто симметричным) состоянием.

Рассмотрим преобразования (4), зависящие от непрерывных параметров λ, выбранных так, чтобы

$$T_{\lambda=0}(q, q') = \delta(q-q') .$$

Вблизи $\lambda = 0$ имеем разложение

$$T_\lambda(q, q') = \delta(q - q') + i\sum_{a=1}^{p} \delta\lambda_a G_a(q, q') ,$$

где в силу (5) генераторы преобразования удовлетворяют условию

$$G_a(q, q') = G_a^*(q' , q) . \tag{13}$$

Непрерывным линейным преобразованиям симметрии могут быть поставлены в соответствие эрмитовы операторы в представлении вторичного квантования:

$$G_a = \int dq\, dq' \psi^+(q) G_a(q, q') \psi(q') . \tag{14}$$

Для преобразований, оставляющих гамильтониан (1) инвариантным, операторы (14) являются интегралами движения [3].

В отсутствие внешних полей и при потенциале взаимодействия, зависящем от модуля разности координат, гамильтониан (1) инвариантен относительно трансляций на произвольный вектор, относительно поворотов в координатном и независимо в спиновом пространствах на произвольные углы и относительно фазовых преобразований.

Правила отбора для средних возникают и в том случае, если гамильтониан инвариантен относительно преобразований, характеризуемых дискретным набором параметров λ в (2). Пусть, например, гамильтониан (1) при наличии периодического поля $U_0(x)$ инвариантен относительно трансляций на векторы кристаллической решетки

$$\mathbf{t} = \sum_j n_j \mathbf{t}_j ,$$

где $\mathbf{t}_j$ — элементарные векторы решетки, n_j — целые числа, $j = 1,2,3$. Тогда из (12) получаем условие инвариантности средних относительно трансляций на векторы $\mathbf{t}$. Здесь, однако, не возникает закон сохранения какой-либо величины, как это имеет место при непрерывных преобразованиях. Из приведенного рассмотрения видно, что гиббсовская статистическая механика, основанная на распределении (9), описывает только высокосимметричное состояние и не может описывать состояния со спонтанно нарушенной симметрией, а следовательно, и фазовые переходы между состояниями с различной симметрией.

3. Самосогласованное определение квазисредних

Чтобы получить возможность описывать состояния систем многих частиц со спонтанной нарушенной симметрией, Боголюбов предложил [1,2] вычислять средние, предварительно нарушив с помощью дополнительного гамильтониана симметрию исходного гамильтониана (1). Воспользоваться таким подходом можно в том случае, если заранее известно, какая симметрия и как должна быть нарушена. Было бы, однако, более последовательно, если бы концепция квазисредних позволяла устанавливать возможный характер нарушения симметрии при данных термодинамических параметрах. Для реализации такой программы, следуя подходу Боголюбова, добавим к гамильтониану (1) некоторый дополнительный гамильтониан, не конкретизируя заранее, какую симметрию исходного гамильтониана он должен нарушить. Исходя из принципа простоты предположим, что этот дополнительный гамильтониан содержит члены не выше второго порядка по полевым операторам. В таком случае вспомогательный гамильтониан имеет вид

$$\begin{aligned} H' = {} & \int dq \Big[F(q)\psi^+(q) + F^*(q)\psi(q) \Big] + \\ & + \int dq\, dq' \Big[\psi^+(q) W(q, q') \psi(q') + \\ & + \frac{1}{2}\, \psi^+(q)\Delta(q, q')\psi^+(q') + \frac{1}{2}\, \psi(q')\Delta^*(q', q)\psi(q) \Big] . \end{aligned} \tag{15}$$

Гамильтониан H' содержит пока неизвестные поля $F(q)$, $W(q, q')$, $\Delta(q, q')$, вид которых и определяет симметрию, нарушаемую этим гамильтонианом. Из эрмитовости H' следуют условия

$$W(q, q') = W^*(q', q) , \quad \Delta(q, q') = \mp \Delta(q', q) \tag{16}$$

(минус — для ферми-, плюс — для бозе-систем). Линейные по полевым операторам члены в (15) присутствуют только для бозе-систем, а в случае ферми-систем $F(q) = 0$. Гамильтониан (15) инвариантен относительно унитарных преобразований T_λ

$$T_\lambda H' T_\lambda^+ = H' , \tag{17}$$

если поля удовлетворяют условиям

$$\int dq' F(q') T_\lambda^*(q', q) = F(q) , \tag{18a}$$

$$\int dq'' dq''' T^*_\lambda(q'', q) T_\lambda(q''', q') W(q'', q''') = W(q, q'), \quad (18б)$$

$$\int dq' dq''' T^*_\lambda(q'', q) T^*_\lambda(q''', q') \Delta(q'', q''') = \Delta(q, q') . \quad (18в)$$

Введем новый гамильтониан

$$H_\nu = H + \nu H' \quad (19)$$

(ν — малый вещественный параметр) и статистический оператор

$$\rho_\nu = e^{\beta(\Omega_\nu - H_\nu)} , \quad \mathrm{Sp}\, \rho_\nu = 1 . \quad (20)$$

Все аргументы [1,2] относительно необходимости введения гамильтониана H_ν для описания состояний со спонтанно нарушенной симметрией остаются полностью применимы и в данном случае. Квазисреднее произвольного оператора a определяется выражением

$$\langle a \rangle = \lim_{\nu \to 0} \lim_{V \to \infty} \mathrm{Sp}\, (\rho_\nu a) . \quad (21)$$

В дополнение к боголюбовскому определению (21) будем полагать, что поля $F(q)$, $W(q, q')$, $\Delta(q, q')$ в (15) не задаются произвольно, а их симметрия и значения определяются состоянием самой системы. Если симметрия полей в (19) такова, что гамильтониан H' инвариантен относительно тех же преобразований, что и исходный гамильтониан (1), то мы имеем дело с ситуацией, когда симметрия спонтанно не нарушена. В этом случае средние можно вычислять с помощью статистического оператора ρ (9). Если же симметрия гамильтониана H' более низкая, чем H, то имеем состояние со спонтанно нарушенной симметрией и при этом отличные от нуля квазисредние являются параметрами порядка такого состояния.

Совокупность всех возможных состояний многочастичной системы, отличающихся симметрией, определяется природой системы, симметрией потенциала межчастичного взаимодействия и симметрией внешних полей (если таковые присутствуют), а не интенсивностью межчастичного взаимодействия. Поэтому естественно полагать, что поля $F(q)$, $W(q, q')$, $\Delta(q, q')$, определяющие симметрию фазы, можно получить, используя приближение самосогласованного поля.

Для перехода к приближению самосогласованного поля разобьем исходный гамильтониан (1) на сумму двух слагаемых:

$$H = H_0 + H_c , \quad (22)$$

где первое слагаемое представляет собой гамильтониан в приближении самосогласованного поля [4]

$$H_0 = \int dq\, dq'\, \psi^+(q) H(q, q') \psi(q') + H' + E_0 \quad (23)$$

(E_0 — постоянная), а второе слагаемое

$$H_c = \frac{1}{2} \int dq\, dq' \psi^+(q) \psi^+(q') U(x, x') \psi(q') \psi(q) - - H' - E_0 , \quad (24)$$

— гамильтониан, учитывающий корреляции частиц, не учтенные в приближении самосогласованного поля. Метод самосогласованного поля на ферми-системы с нарушенной фазовой инвариантностью был обобщен Боголюбовым в [5].

До сих пор все соотношения относились как к ферми-, так и к бозе-системам. В дальнейшем для определенности будем рассматривать только системы ферми-частиц. В этом случае в H' следует положить $F(q) = 0$ и тогда квадратичный по полевым операторам гамильтониан H_0 может быть приведен к диагональному виду боголюбовским u–v-преобразованием [4]. В результате диагонализации приходим к системе уравнений для коэффициентов канонического преобразования, которые имеют смысл одночастичных волновых функций квазичастиц [4]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x^2 u_i(q) + \left[U_0(x) - \mu\right] u_i(q) - \int dq' U(x, x') \left[\rho(q, q') u_i(q') - \rho(q', q') u_i(q) - \tau(q, q') v_i(q')\right] = \varepsilon_i u_i(q), \quad (25а)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x^2 v_i(q) + \left[U_0(x) - \mu\right] v_i(q) - \int dq' U(x, x') \left[\rho^*(q, q') v_i(q') - \rho(q', q') v_i(q) - \tau^*(q, q') u_i(q')\right] = -\varepsilon_i v_i(q) . \quad (25б)$$

где одночастичные матрицы плотности определены выражениями

$$\rho(q, q') = \langle\, \psi^+(q')\psi(q) \,\rangle_0 =$$

$$= \sum_i \left[u_i(q)u_i^*(q')f_i + v_i^*(q)v_i(q')(1 - f_i) \right], \quad (26а)$$

$$\tau(q, q') = \langle\, \psi(q')\psi(q) \,\rangle_0 =$$

$$= \sum_i \left[u_i(q)v_i^*(q')f_i + v_i^*(q)u_i(q')(1 - f_i) \right], \quad (26б)$$

причем $f_i \equiv f(\varepsilon_i) = [\exp(\beta\varepsilon_i) + 1]^{-1}$, i — набор квантовых чисел, характеризующих состояние квазичастицы, ε_i — энергия квазичастицы. Усреднение в (26) производится со статистическим оператором

$$\rho_0 = e^{\beta(\Omega_0 - H_0)}, \quad (27)$$

где параметр Ω_0 определяется условием Sp $\rho_0 = 1$ и при соответствующем выборе постоянной E_0 в (23) является термодинамическим потенциалом системы в приближении самосогласованного поля. Симметрия гамильтониана H_0 совпадает с симметрией H', так что посредством усреднения с ρ_0 (27) можно получить все состояния со спонтанно нарушенной симметрией, которые получаются при использовании статистического оператора ρ_ν (20).

Поля, входящие в H', связаны с матрицами плотности (26) соотношениями [4,6]

$$W(q, q') = -U(x, x')\rho(q, q') +$$

$$+ \delta(q - q') \int dq'' U(x, x'')\rho(q'', q''), \quad (28а)$$

$$\Delta(q, q') = U(x, x')\tau(q, q'). \quad (28б)$$

Одночастичные матрицы плотности удовлетворяют системе уравнений, которая с учетом (26), (27) получается из системы самосогласованных уравнений (25) [6]:

$$\int dq'' \Big[H(q, q'')\rho(q'', q') - \rho(q, q'')H(q'', q') + W(q, q'')\rho(q'', q') -$$
$$- \rho(q, q'')W(q'', q') - \Delta(q, q'')\tau^*(q'', q') + \tau(q, q'')\Delta^*(q'', q') \Big] = 0, \quad (29)$$

$$\int dq'' \Big[H(q, q'')\tau(q'', q') + \tau(q, q'')H^*(q'', q') + W(q, q'')\tau(q'', q') +$$
$$+ \tau(q, q'')W^*(q'', q') - \Delta(q, q'')\rho^*(q'', q') - \rho(q, q'')\Delta(q'', q') \Big] + \Delta(q, q') = 0. \quad (30)$$

Таким образом, самосогласованное определение квазисредних помимо соотношений (20), (21) включает систему уравнений (29),(30), позволяющую находить поля, нарушающие симметрию исходного гамильтониана (1) и определяющие симметрию гамильтониана (19).

Система (29), (30), очевидно, имеет решения, для которых $\rho(q, q') \neq 0$, $\tau(q, q') = 0$ (и соответственно $W(q, q') \neq 0$, $\Delta(q, q') = 0$). Для таких решений гамильтониан H_ν инвариантен относительно фазовых преобразований, а средние, содержащие неравное число операторов рождения и уничтожения (аномальные), в силу правил отбора (12), равны нулю. Эти решения описывают нормальные (несверхпроводящие и несверхтекучие) системы, у которых в зависимости от вида $\rho(q, q')$ могут быть нарушены иные симметрии (магнитоупорядоченные, пространственно-неоднородные, анизотропные состояния). Другой, более общий тип решений системы (29), (30) с $\rho(q, q') \neq 0$, $\tau(q, q') \neq 0$ (и соответственно $W(q, q') \neq 0$, $\Delta(q,q') \neq 0$) описывает состояния с нарушенной фазовой инвариантностью. Для таких состояний характерно наличие аномальных средних, содержащих неравное число операторов рождения и уничтожения. В этом случае система обладает свойством сверхтекучести (или сверхпроводимости для заряженных частиц). Переход в сверхтекучую фазу также может сопровождаться нарушением иных симметрий, например симметрий по отношению к вращениям в координатном и/или спиновом пространствах. Таким образом, могут существовать сверхтекучие фазы различной симметрии, как это имеет место в ^{3}He [7]. Сверхпроводящие переходы в кристаллических проводниках наряду с нарушением фазовой инвариантности могут сопровождаться нарушением пространственной симметрии в распределении электронов [8].

Состояния со спонтанно нарушенными симметриями являются, как известно [1,2], вырожденными. Покажем, как это обстоятельство проявляется при самосогласованном определении квазисредних. Пусть T_{λ_0} — унитарное преобразование, относительно которого гамильтониан H инвариантен (8), а H' — неинвариантен, т.е.

$$H'_{\lambda_0} = T_{\lambda_0} H' T^{+}_{\lambda_0} \neq H' . \tag{31}$$

Определим гамильтониан

$$H_{\nu\lambda_0} = T_{\lambda_0} H_{\nu} T^{+}_{\lambda_0} = H + \nu H'_{\lambda_0} , \tag{32}$$

зависящий от набора параметров λ_0 . С помощью (32) может быть введен статистический оператор

$$\rho_{\nu\lambda_0} = \exp\,[\beta(\Omega_{\nu\lambda_0} - H_{\nu\lambda_0})] , \tag{33}$$

который так же, как (20), применим для вычисления квазисредних. Энергии, вычисленные со статистическими операторами ρ_{ν} и $\rho_{\nu\lambda_0}$, совпадают, поскольку

$$\mathrm{Sp}\left\{\exp\,[\beta(\Omega_{\nu\lambda_0} - H_{\nu\lambda_0})]\; H_{\nu\lambda_0}\right\} =$$
$$= \mathrm{Sp}\left\{\exp\,[\beta(\Omega_{\nu} - H_{\nu})]\; H_{\nu}\right\} ,$$

причем $\Omega_{\nu\lambda_0} = \Omega_{\nu}$. Таким образом, состояние статистического равновесия вырождено по параметрам λ_0 . Гамильтониан H'_{λ_0} может быть получен из (15), если в H' провести замены

$$W(q, q') \to W_{\lambda_0}(q, q') =$$
$$= \int dq_1\, dq_2\, T^{*}_{\lambda_0}(q_1 , q) T_{\lambda_0}(q_2 , q') W(q_1 , q_2) , \tag{34а}$$

$$\Delta(q, q') \to \Delta_{\lambda_0}(q, q') =$$
$$= \int dq_1\, dq_2\, T^{*}_{\lambda_0}(q_1 , q)\, T^{*}_{\lambda_0}(q_2 , q') \Delta(q_1 , q_2) . \tag{34б}$$

Одночастичные матрицы плотности $\rho_{\lambda_0}(q, q')$, $\tau_{\lambda_0}(q, q')$, определяемые аналогично (34а), (34б), связаны с $W_{\lambda_0}(q, q')$, $\Delta_{\lambda_0}(q, q')$ соотношениями (28) и удовлетворяют уравнениям (29), (30). При практическом использовании квазисредних следует зафиксировать набор параметров λ_0 , что отвечает определенному выбору оси квантования в случае вырождения относительно вращений в спиновом или координатном пространствах, выбору определенного начала отсчета при вырождении относительно трансляций и выбору определенной фазы при вырождении относительно фазовых преобразований.

Кратко обсудим последовательность построения фазовой диаграммы системы многих частиц на основе самосогласованного определения квазисредних. Поскольку мы используем большой канонический ансамбль, естественно в качестве термодинамических переменных выбрать химический потенциал μ и температуру T. Решения самосогласованных уравнений, отличающиеся по характеру нарушения симметрии, существуют в определенных областях фазовой диаграммы. Эти области могут совпадать или перекрываться, так что данной точке фазовой диаграммы чаще всего соответствует множество фаз различной симметрии. Из всех возможных при данных μ и T фаз, реализуется та, которая отвечает минимуму термодинамического потенциала. Если области существования двух или большего числа фаз со спонтанно нарушенной симметрией перекрываются, то может оказаться так, что в одной части области перекрытия реализуется минимум термодинамического потенциала первой фазы, а в другой части области — второй. Линия фазового перехода между этими фазами определяется из условия равенства термодинамических потенциалов двух фаз и является линией фазового перехода первого рода, поскольку параметры порядка этих фаз на ней имеют конечные значения.

Следует отметить, что фазовая диаграмма системы частиц, рассчитанная в приближении самосогласованного поля, может существенно отличаться от истинной фазовой диаграммы. Хотя учет корреляционного гамильтониана (24) не приводит к появлению фаз с новой симметрией, тем не менее он может значительно изменить вид фазовой диаграммы, поскольку фазы, нестабильные в приближении среднего самосогласованного поля, могут стать стабильными при учете корреляционного взаимодействия. Именно с такой ситуацией столкнулись при анализе стабильности сверхтекучих фаз ^{3}He. Как известно [7], в жидком ^{3}He, согласно расчетам в приближении среднего поля, во всей области существования сверхтекучести минимум термодинамического потенциала имеет B-фаза, что, однако, противоречит наблюдениям. Учет взаимодействий, не учтенных в приближении среднего поля, приводит, в согласии с экспериментом, к стабилизации в некоторой области термодинамических параметров A-фазы. На границе между A- и B-фазами, в согласии с вышесказанным, осуществляется переход первого рода.

4. Заключение

Предложенное самосогласованное обобщение понятия квазисреднего основывается на том, что характер нарушения симметрии состояния статистического равновесия многочастичной системы определяется ее внутренними свойствами. В силу этого, поля, входящие в добавочный гамильтониан, который нарушает симметрию исходного гамильтониана, должны находиться в результате решения системы уравнений, полученной в приближении самосогласованного поля. Фактически самосогласованное определение квазисредних базируется на допущении, что все возможные фазы со спонтанно нарушенной симметрией могут быть получены уже в приближении самосогласованного поля, хотя этого приближения, вообще говоря, недостаточно для определения их стабильности, а следовательно, и для построения фазовой диаграммы. Указанное предположение, вероятнее всего, следует рассматривать как дополнительный результат гиббсовской статистической механики, поскольку, как это, например, видно из второго раздела данной работы, в обычном распределении Гиббса не содержится никакой информации о состояниях, симметрия которых ниже симметрии гамильтониана, и не указаны подходы к исследованию таких состояний. В силу этой неполноты, стандартная статистическая механика пригодна только для исследования высокосимметричных состояний и не может быть использована для описания состояний со спонтанно нарушенной симметрией и, следовательно, фазовых переходов между такими состояниями. Именно данное обстоятельство побудило Боголюбова к поиску подходов к корректному описанию систем многих взаимодействующих частиц со спонтанно нарушенной симметрией в рамках статистической механики, в результате чего им и была сформулирована концепция квазисредних.

1. N. N. Bogolubov, *Physica* **26S**, 1 (1960).
2. Н. Н. Боголюбов, *Квазисредние в задачах статистической механики*, в кн.: *Статистическая физика и квантовая теория поля*, Наука, Москва (1973).
3. А. И. Ахиезер, С. В. Пелетминский, *Методы статистической физики*, Наука, Москва (1977).
4. Ю. М. Полуэктов *ФНТ* **22**, 402 (1996).
5. Н. Н. Боголюбов, *ДАН СССР* **119**, 224 (1958).
6. Yu. M. Poluektov, *Czech. J. Phys.* **46**, S2, 955 (1996).
7. A. J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 331 (1975).
8. Ю. М. Полуэктов *ФНТ* **21**, 183 (1995).

About self-consistent definition of quasi-averages in the statistical physics

Yu. M. Poluektov

Bogoliubov's concept of a quasi-average introduced to describe the states of many-particle systems of spontaneously broken symmetry (superfluid liquids, superconductors, crystals and others) is generalized. The fields that are introduced in the initial Hamiltonian to break its symmetry are not given from without but are defined from the physical object properties and derived by solving the set of equations in the self-consistent field approximation.