Доклады Академии наук СССР
1974. Том 219, № 3

УДК 539.21 МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Е. Е. ТАРЕЕВА

О C^*-АЛГЕБРАИЧЕСКОМ ПОДХОДЕ К ПОЛИМОРФНЫМ ФАЗОВЫМ ПЕРЕХОДАМ

(Представлено академиком Н. Н. Боголюбовым 26 III 1974)

При изучении полиморфных превращений — фазовых переходов в твердом теле, сопровождающихся изменением пространственной симметрии, естественным образом возникает вопрос о том, в какую пространственную группу G_1 из заданной пространственной группы G_0 может перейти кристалл при изменении термодинамических параметров. Чтобы дать ответ на этот вопрос в рамках современной микроскопической теории, нужно сравнить свободную энергию F рассматриваемого вещества в различных кристаллических модификациях с симметрией G_0, G_1, $G_2, \ldots$ и выбрать минимальную, при этом вычисление свободной энергии должно быть проведено с большой степенью точности, поскольку оцениваемые разности очень малы сравнительно с F.

В последнее время широко развивается новый C^*-алгебраический подход к проблемам статистической механики и квантовой теории поля. Он дал уже целый ряд строгих результатов, в частности, в применении к изучению некоторых фазовых переходов.

Надеясь, что в дальнейшем и теория полиморфных превращений найдет свое строгое изложение в последовательном C^*-алгебраическом подходе, предлагаем пока некоторый качественный аспект теории, в рамках которого, возможно, удастся сформулировать общий ответ на поставленный в начале заметки вопрос.

Пусть $\mathfrak{A}$ есть C^*-алгебра квазилокальных наблюдаемых A (см. ([1-3])). Состояния физической системы будем описывать линейными положительными нормированными функционалами $\langle f; A\rangle$ на $\mathfrak{A}$. Если в физической задаче определена группа инвариантности G, то мы будем считать, что она действует как группа автоморфизмов на алгебре $\mathfrak{A}$. Действие ее на $A\in\mathfrak{A}$ будем обозначать $\tau_g A$, $g\in G$. На сопряженном пространстве $\mathfrak{A}^*$ при этом можно определить действие операторов τ_g^*, $g\in G$, следующим образом: если $A\in\mathfrak{A}$ и $f\in\mathfrak{A}^*$, то $\langle\tau_g^* f;\ A\rangle=\langle f;\ \tau_g A\rangle$. Будем говорить, что состояние f G-инвариантно, если $\langle\tau_g^* f | A\rangle=\langle f;\ A\rangle$ для всех $g\in G$ и всех $A\in\mathfrak{A}$.

В работе ([4]) рассматривается конкретная C^*-алгебра операторов, действующих в некотором гильбертовом пространстве H. Исследуются центральные разложения (см. ([2, 3])) для равновесных, т. е. удовлетворяющих граничным KMS условиям ([5]), состояний f, инвариантных относительно полной эвклидовой группы движений E^3:

$$\langle f; A\rangle = \int d\mu_f(\Psi)\langle\Psi; A\rangle \tag{1}$$

по чистым равновесным состояниям *. Если симметрия состояний Ψ ниже симметрии состояний f, то говорят о фазовом переходе с понижением симметрии.

---

* Аналогичные разложения рассматривались в работе ([6]).

Если состояние f транзитивно относительно действия группы E^3, т. е. если существует состояние $\varphi\in\mathfrak{A}^*$ такое, что $\mu_f(O_\varphi^E)=1$, где $O_\varphi^E\equiv\{\tau_g^*\varphi\,|\,g\in\in E^3\}$ — орбита состояния φ по отношению к E^3, то можно говорить о внутренней симметрии состояния f как о классе сопряженных относительно E^3 симметрий $H_\Psi^E\equiv\{g\in E^3\,|\,\tau_g^*\Psi=\Psi\}$ состояний Ψ, входящих в (1). При этом разложение (1) существует и единственно и дается инвариантной мерой на компактном однородном пространстве E^3/H_Ψ^E. Если, кроме того, в $\mathrm{supp}(\mu_f)$ найдется хотя бы одно состояние Ψ такое, что орбита O_Ψ^R состояния Ψ относительно действия группы трансляций R^3 является замкнутой (состояние f сильно транзитивное ([4])), то разложение (1) может оказаться разложением по чистым состояниям с кристаллической симметрией. Соответствующий фазовый переход есть переход жидкость — твердое тело.

Сильная транзитивность состояния f взаимно однозначно связана с компактностью однородного пространства R^3/H_Ψ^R, где $H_\Psi^R\equiv\{\mathbf{a}\in R^3\,|\,g\equiv\equiv(I,\,\mathbf{a})\in H_\Psi^E\}$, а компактность R^3/H_Ψ^R необходима для того, чтобы симметрия H_Ψ^E была кристаллического типа (с тремя некомпланарными трансляциями). В ([4]) доказаны существование и единственность разложения (1) для сильно транзитивных состояний f. В этом случае μ_f сводится к мере Хаара на компактном однородном пространстве R^3/H_Ψ^R.

Представляет интерес рассмотреть аналогичным образом и полиморфный фазовый переход. Главным объектом такого рассмотрения должны быть центральные разложения для G_0-инвариантных равновесных состояний f. Ответ на поставленный в начале заметки вопрос связан с существованием и единственностью разложения вида

$$\langle f;A\rangle=\int_\sigma d\mu_g\langle\Phi;\,\tau_gA\rangle.$$

Для того чтобы был возможен переход в другую пространственную группу, необходимо существование хотя бы одного G_0-инвариантного состояния, не являющегося чистым. Каким-либо образом определенная «внутренняя симметрия» состояния f — новая группа G_1, а σ — некоторое множество автоморфизмов, действие которых на $\mathfrak{A}$ и $\mathfrak{A}^*$ определено заданием действия τ_g для $g\in E^3$. В этом случае мы можем говорить не о понижении, а лишь о нарушении симметрии, причем кластерные свойства состояний f и Φ одинаковы.

В простейшем случае перехода в инвариантную подгруппу G_1 группы G_0 мера μ_g существует и единственна — это мера Хаара на компактной фактор-группе G_0/G_1. Рассмотрение некоторых примеров более общего характера позволяет надеяться, что конечная мера μ_g существует не для любой заданной пары групп $(G_0,\,G_1)$ и, следовательно, предлагаемый подход, возможно, приведет к некоторому критерию допустимых полиморфных переходов.

Заметим, что в традиционном подходе мы могли бы столкнуться с такой мерой, проводя осреднение квазисредних ([7]) по вырожденным состояниям статистического равновесия. При этом элементы g характеризуют конкретное вырожденное состояние, подобно фазе в сверхпроводнике или координате кристалла как целого, при рассмотрении перехода жидкость — твердое тело. Множество элементов g является пространством с инвариантным средним, так что состояния с нарушенной симметрией можно осреднить и получить симметрию гамильтониана. Указанные состояния в задаче о полиморфном переходе будут соответствовать основному вырожденному состоянию гамильтониана, сопоставленному исходному эвклидовски инвариантному гамильтониану, в представлении, полученном по G_0-инвариантному состоянию с помощью построения Гельфанда — Наймарка — Сигала ([2], [3]).

В заключение выражаю благодарность акад. Н. Н. Боголюбову за интерес к работе и С. С. Хоружему за полезное обсуждение.

Институт физики высоких давлений
Академии наук СССР
Академгородок Московской обл.

Поступило
18 III 1974

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] *D. Ruelle,* Statistical Mechanics. Rigorous Results, Benjamin, N. Y., 1969; *Д. Рюэль,* Статистическая механика, Строгие результаты, М., 1971. [2] *М. А. Наймарк,* Нормированные кольца, «Наука», 1968. [3] *J. Dixmier,* Les C^x-algebres et leurs representations, Paris, 1964. [4] *G. G. Emch, H. J. F. Knops, E. J. Verboven,* J. Math. Phys., v. 11, 1655 (1970). [5] *D. Kastler, G. Loupias et al.,* Commun. Math. Phys., v. 27, 195 (1972). [6] *R. Haag, N. M. Hugenholtz, M. Winnink,* Commun. Math. Phys., v. 5, 215 (1967). [7] *Н. Н. Боголюбов,* Квазисредние в задачах статистической механики. Препринт R-1461. ОИЯИ, 1963. Избр. тр., т. 3, 1971.