УДК 530.145

В. С. БАРБУЛЯК, канд. физ.-мат. наук (Львов. ун-т)

Шахматные оценки и критическая температура в квантовых решеточных системах

Шахматные оценки и квазиклассический предел для оператора Шредингера использованы для доказательства существования критической температуры в системе ангармонических квантовых осцилляторов.

Шахові оцінки та квазікласична границя для оператора Шредінгера використані для доведення існування критичної температури в системі ангармонічних квантових осциляторів.

При исследовании существования периодических гиббсовских состояний и фазовых переходов применимы так называемые шахматные оценки — следствие положительности при отражениях состояний и неравенства Шварца для специальным образом определенного скалярного произведения. В случае классических решеточных систем такие оценки получены в [1]; в [2] они распространены на квантовый случай. В настоящей работе шахматные оценки будут использованы при доказательстве существования критической температуры в системе ангармонических квантовых осцилляторов, являющейся обобщением рассмотренных в [3, 4].

Бесконечная система взаимодействующих частиц на решетке $\mathbb{Z}^d$ описывается формальным гамильтонианом

$$H = -\frac{1}{2m}\sum_{k}\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} - \mathcal{J}\sum_{\langle k,j\rangle} s(x_k)\,s(x_j) + \sum_{k} W(x_k), \tag{1}$$

где $s(t)$ — нечетная монотонно возрастающая на $\mathbb{R}$ либо четная монотонно возрастающая на $\mathbb{R}_+$ функция такая, что $s^2(t) \geqslant ct^2$. При этом будем предполагать существование постоянных $C>0$, $\alpha>0$ таких, что $\forall x \in \mathbb{R}\ |s(x)| \leqslant Ce^{\alpha|x|}$. Такая модель впервые введена в [5]. Символ $\langle k, j\rangle$ обозначает здесь пару ближайших соседей из $\mathbb{Z}^d$, т. е. таких, что $\| k - j \|_{\mathbb{R}^d} = 1$. Относительно потенциала W предполагается выполнение условий:

$$\begin{aligned} &1)\ W \in C^\infty(\mathbb{R}^1);\\ &2)\ W(x) > \mathcal{J} d s^2(x),\ x \in \mathbb{R};\\ &3)\ \forall x \in \mathbb{R}\ W(x) = W(-x); \end{aligned} \tag{2}$$

4) для некоторого $q_0 > 0$ функция $W(x)$ в точках $\pm q_0$ имеет строгий глобальный невырожденный минимум.

Каждому параллелепипеду $\Lambda = \{k = (k_1, \ldots, k_d) \mid 0 \leqslant k_1 \leqslant L_1 - 1, \ldots, 0 \leqslant k_d \leqslant L_d - 1\} \subset \mathbb{Z}^d$ поставим в соответствие локальный гамильтониан с периодическими граничными условиями

$$H_\Lambda^{\text{per}} = -\frac{1}{2m}\sum_{k\in\Lambda}\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} - \mathcal{J}\sum_{\langle k,j\rangle\in\Lambda} s(x_k)\,s(x_j) + \sum_{k\in\Lambda} W(x_k). \tag{3}$$

Здесь символ $\langle k, j\rangle$ обозначает пару ближайших соседей из Λ, причем ближайшими считаются также крайние точки параллелепипеда в каждом из измерений.

При выполнении условий (2) оператор H_Λ^{per} существенно самосопряжен в $L_2(\mathbb{R}^\Lambda, dx_\Lambda)$, и при $\beta > 0$ оператор $\exp(-\beta H_\Lambda^{\text{per}})$ ядерный, откуда следует существование гиббсовского состояния в области Λ. Задача построения гиббсовского состояния бесконечной системы (периодического гиббсовского состояния) эквивалентна построению меры формального вида [6]

$$d\nu_\beta^{\text{per}}(\omega(\cdot)) = \frac{1}{Z_\beta} e^{-\frac{m}{2}\sum_k\int_0^\beta \dot\omega_k^2(\tau)d\tau + \mathcal{J}\sum_{\langle k,j\rangle}\int_0^\beta s(\omega_k(\tau))s(\omega_j(\tau))d\tau - \sum_k\int_0^\beta W(\omega_k(\tau))d\tau} \prod_{k,\tau} d\omega_k(\tau)$$

на функциональном пространстве $\Omega = C(S_\beta;\ \mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}) \ni \omega(\cdot) = (\omega_k(\cdot))_{k\in\mathbb{Z}^d}$, $\forall k \in \mathbb{Z}^d\ \omega_k(\cdot) \in C(S_\beta)$. В [2] с применением шахматных оценок получено утверждение 2, из которого следует такая теорема.

Теорема 1. *При выполнении условий* 1, 2 *из* (2) *периодическое гиббсовское состояние с гамильтонианом* (1) (*мера* ν_β^{per}) *существует при любой обратной температуре* $\beta > 0$.

Среднее по мере ν_β^{per} обозначим $\langle \ldots \rangle_\beta$. Среднее по мере $\nu_{\beta,\Lambda}^{\text{per}}$, отвечающей гамильтониану (3), обозначим $\langle \ldots \rangle_{\beta,\Lambda}$.

Лемма 1 (*шахматная оценка*). *Пусть* G — *интегрируемая по мере* $\nu_{\beta,\Lambda}^{\text{per}}$ *функция. Тогда справедливо неравенство*

$$\langle G(x_0)\rangle_{\beta,\Lambda} \leqslant \langle \prod_{k\in\Lambda} G(x_k)\rangle_{\beta,\Lambda}^{1/|\Lambda|}.$$

Пусть теперь Λ_{2^m} — куб со стороной 2^m, а функция F интегрируема по мере ν_β^{per}. Справедлива лемма.

Лемма 2. *Если для некоторой постоянной* M

$$\langle F(x_0)\rangle_{\beta,\Lambda_2} \leqslant M,$$

то существует постоянная M_1 такая, что

$$\langle F(x_0)\rangle_\beta \leqslant M_1.$$

Доказательство. Лемма 1 и одно из следствий неравенства Шварца (см. соотношение (3.9) из [1]) позволяют получить равномерную по m оценку

$$\langle E(x_0)\rangle_{\beta,\Lambda_{2^m}} \leqslant M_1,$$

откуда и следует утверждение леммы.

Теорема 2. *При $d \geqslant 3$ для произвольного потенциала $\mathbb{W}$, удовлетворяющего условиям* (2), *и функции s такой, что*

$$\langle [s'(x_0)]^2\rangle_{\beta,\Lambda_2} \leqslant M, \tag{4}$$

найдется некоторое $m_0 > 0$, что $\forall m > m_0$ в системе, описываемой гамильтонианом (1), *существует критическая температура.*

Доказательство. Введем параметр дальнего порядка [3, 4]

$$P(\beta) = \lim_{|\Lambda|\to\infty} \left\langle \left(\frac{1}{|\Lambda|} \sum_{k\in\Lambda} s(x_k) \right)^2 \right\rangle_{\beta,\Lambda}.$$

Признаком неединственности меры ν_β^{per} является положительность $P(\beta)$ при β, больших некоторого β_0. Температура β_0 называется критической.

Определим преобразование Фурье

$$\widetilde{s}(x_p) = \frac{1}{\sqrt{|\Lambda|}} \sum_{k\in\Lambda} s(x_k) e^{ipk}.$$

Отсюда непосредственно следует

$$\frac{1}{|\Lambda|} \widetilde{s}^2(x_0) = \left(\frac{1}{|\Lambda|} \sum_{k\in\Lambda} s(x_k) \right)^2. \tag{5}$$

Из соотношения

$$\sum_{k\in\Lambda} s^2(x_k) = \widetilde{s}^2(x_0) + \sum_{p\in\Lambda^*, p\neq 0} \widetilde{s}(x_p)\, \widetilde{s}(x_{-p}),$$

где

$$\Lambda^* = \{p = (p_1, \ldots, p_d) \mid p_i = 2\pi k_i/L_i,\ 0 \leqslant k_i \leqslant L_i - 1;\ 1 \leqslant i \leqslant d\},$$

и из (5) получим

$$\left\langle \left(\frac{1}{|\Lambda|} \sum_{k\in\Lambda} s(x_k) \right)^2 \right\rangle_{\beta,\Lambda} = \langle s^2(x_0)\rangle_{\beta,\Lambda} - \frac{1}{|\Lambda|} \sum \langle \widetilde{s}(x_p)\, \widetilde{s}(x_{-p})\rangle_{\beta,\Lambda}. \tag{6}$$

Метод инфракрасных оценок [3, 4] позволяет получить следующее неравенство:

$$(\widetilde{s}(x_p),\ \widetilde{s}(x_{-p})) \leqslant \frac{1}{2\beta \mathcal{J} E(p)} \tag{7}$$

Здесь $E(p) = d - \sum_{i=1}^{d} \cos p_i$, а

$$(A, B) = \frac{1}{\mathrm{Tr}(\exp(-\beta H))} \int_0^1 \mathrm{Tr}\,(e^{-x\beta H} A e^{-(1-x)\beta H} B)\, dx$$

— двухточечная функция Дюамеля.

Кроме того, непосредственное вычисление среднего по мере ν_β^{per} двойного коммутатора [4] приводит к результату

$$K \equiv \langle [\widetilde{s}(x_p),\ [H,\ \widetilde{s}(x_{-p})]]\rangle_\beta = \frac{1}{m} \langle [s'(x_0)]^2\rangle_\beta.$$

Из леммы 2 следует оценка

$$K \leqslant M_1 m^{-1}, \tag{8}$$

а из оценки корреляционных функций, приведенной в [3], с учетом (7) и (8) следует неравенство

$$\langle \widetilde{s}(x_p)\widetilde{s}(x_{-p})\rangle_{\beta,\Lambda} \leqslant \frac{1}{2}\left(\frac{M_1}{2m\mathcal{J}E(p)}\right)^{1/2}\operatorname{cth}\left(\beta^2\frac{M_1\mathcal{J}E(p)}{2m}\right)^{1/2}.$$

Отсюда и из (6), переходя к пределу при $\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^d$, получаем

$$P(\beta) \geqslant \langle s^2(x_0)\rangle_\beta - \frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^d}\int\limits_{(0,2\pi]^d}\left(\frac{M_1}{2m\mathcal{J}E(p)}\right)^{1/2}\operatorname{cth}\left(\beta^2\frac{M_1\mathcal{J}E(p)}{2m}\right)^{1/2}dp. \tag{9}$$

Рассмотрим гамильтониан

$$\widehat{H} = -\frac{1}{2m}\sum_{k\in\mathbb{Z}^d}\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} W(x_k) \equiv \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} H_k,$$

описывающий систему невзаимодействующих частиц. Среднее по мере, отвечающей этому гамильтониану, обозначим $\langle\ldots\rangle_{\beta,\widehat{H}}$. Неравенства типа Жинибра [7] позволяют записать соотношение

$$\langle s^2(x_0)\rangle_\beta \geqslant \langle s^2(x_0)\rangle_{\beta,\widehat{H}} = \langle s^2(x_0)\rangle_{\beta,H_0}.$$

Здесь $H_0 = -\frac{1}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + W(x)$ — оператор Шредингера с основным состоянием $\varphi_0(x)$. Асимптотика $\varphi_0(x)$ при $m\to\infty$ (квазиклассический предел) такова, что $\forall\,\varepsilon > 0$

$$\int\limits_{|x-y|\leqslant\varepsilon} |\varphi_0(x)|^2 dx \to \frac{1}{2}, \ y = \pm q_0 \tag{10}$$

(по этому поводу см. [8]). Из спектральной теоремы следует

$$\lim_{\beta\to+\infty}\langle s^2(x_0)\rangle_{\beta,H_0} = \int\limits_{\mathbb{R}} s^2(x)\,\varphi_0^2(x)\,dx.$$

Оценки роста основного состояния $\varphi_0(x)$ на бесконечности [8] и предположения относительно s позволяют заключить, что последний интеграл сходится. Таким образом, для некоторых m_1 и β_1 при всех $m > m_1$, $\beta > \beta_1$ справедлива оценка

$$\langle s^2(x_0)\rangle_\beta \geqslant \frac{1}{2}s^2(q_0). \tag{11}$$

Из (9) и (11) следует оценка параметра дальнего порядка

$$P(\beta) \geqslant \frac{1}{2}\left[s^2(q_0) - \frac{1}{(2\pi)^d}\int\limits_{(0,2\pi]^d}\left(\frac{M_1}{2m\mathcal{J}E(p)}\right)^{1/2}\operatorname{cth}\left(\beta^2\frac{M_1\mathcal{J}E(p)}{2m}\right)^{1/2}dp\right]. \tag{12}$$

Достаточное условие существования критической температуры получим из условия положительности правой части (12) при $\beta\to+\infty$. Учитывая, что функция $\operatorname{cth} x$ при $x\to+\infty$ монотонно убывает и стремится к 1, и обозначив

$$I_d = \frac{1}{(2\pi)^d}\int\limits_{(0,2\pi]^d}\frac{1}{\sqrt{E(p)}}\,dp,$$

это условие можно записать так:

$$s^2(q_0) - I_d \sqrt{\frac{M_1}{2m\mathcal{J}}} > 0. \tag{13}$$

Критическая температура β_0 равна $\max(\beta_1, \beta_2)$, где β_2 — решение уравнения

$$s^2(q_0) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int\limits_{(0,2\pi]^d} \left(\frac{M_1}{2m\mathcal{J}E(p)}\right)^{1/2} \operatorname{cth}\left(\beta_2^2 \frac{M_1\mathcal{J}E(p)}{2m}\right)^{1/2} dp.$$

Это решение существует в силу условия (13).

Из (13) также следует, что существует масса m_2, при которой оно выполнено. Положив $m_0 = \max(m_1, m_2)$, получим утверждение теоремы.

Замечание 1. Соотношение (10) справедливо и при увеличении глубины минимума потенциала W, поэтому из (13) непосредственно вытекает такое следствие.

Следствие. *Для потенциала W, удовлетворяющего условиям* (2), *с фиксированными m и $\mathcal{J}$ и функции s такой, что*

$$\langle [s'(x_0)]^2 \rangle_{\beta, \Lambda_2} \leqslant M$$

при $d \geqslant 3$ существуют глубина минимума λ_0 и расстояние между минимумами $2q_0$ такие, что при всех $\lambda > \lambda_0$ и $q > q_0$ в системе, описываемой гамильтонианом (1), *существует критическая температура.*

Замечание 2. Выполнение условия (4) обеспечивается требованием достаточно быстрого роста функции $W(x)$ при $x \to \infty$. В частности, из условия 2 в (2) вытекает, что достаточным условием выполнения (4) является полиномиальная ограниченность $s(x)$.

1. *Шлосман С. Б.* Метод отражательной положительности в математической теории фазовых переходов первого рода // Успехи мат. наук.— 1986.— 41, вып. 3.— С. 69—111.
2. *Барбуляк В. С. Кондратьев Ю. Г.* Критерий существования периодических гиббсовских состояний квантовых решеточных систем // Методы функционального анализа в задачах математической физики.— Киев : Ин-т математики АН УССР.— 1990.— С. 30—41.
3. *Dyson F. J., Lieb E. H., Simon B.* Phase transitions in quantum spin systems with isotropic and nonisotropic interactions // J. Stat. Phys.— 1978.— 18, N 4.— P. 335—383.
4. *Пастур Л. А., Хоруженко Б. А.* Фазовые переходы в квантовых моделях ротаторов и сегнетоэлектриков // Теорет. и мат. физика.— 1987.— 73, № 1.— С. 111—124.
5. *Сухов Ю. М.* Линейные бозонные модели временной эволюции в квантовой статистической механике // Изв. АН СССР. Сер. мат.— 1984.— 48, № 1.— С. 155—191.
6. *Глоба С. А., Кондратьев Ю. Г.* Построение гиббсовских состояний квантовых решеточных систем // Применение методов функционального анализа в задачах математической физики.— Киев : Ин-т математики АН УССР.— 1987.— С. 4—16.
7. *Саймон Б.* Модель $P(\varphi)_2$ эвклидовой квантовой теории поля.— М. : Мир, 1976.— 360 с.
8. *Simon B.* Semiclassical analysis of low lying eigenvalues. II. Tunneling // Ann. Math.— 1984.— 120, N 1.— P. 89—118.

Получено 21.05.91