объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-85-403

В.А.Загребнов, Вл.В.Папоян*

О ПРОБЛЕМЕ ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ АНСАМБЛЕЙ ДЛЯ БОЗЕ-СИСТЕМ (ИДЕАЛЬНЫЙ БОЗЕ-ГАЗ)

Направлено в журнал "Изв.АН АрмССР"
/сер.: Математика/

* Математический институт им. В.А.Стеклова АН СССР

1985

ВВЕДЕНИЕ

В недавней работе [1] обсуждалась проблема эквивалентности ансамблей для идеального бозе-газа. В ней были введены понятия слабой /термодинамической/ и сильной /статистической/ эквивалентности канонического ансамбля /КА/ и большого канонического ансамбля /БКА/. Там же показано, что последняя для идеального бозе-газа нарушается из-за аномальных флуктуаций плотности числа частиц /они равны флуктуации плотности числа частиц в основном состоянии/ в БКА ниже точки фазового перехода, который связан с появлением бозе-конденсации, т.е. макроскопического заполнения основного состояния.

Для исследования проблемы эквивалентности ансамблей в работе [1] были использованы два метода. Первый - это обобщенный авторами для исследования статистической эквивалентности ансамблей подход Н.Н.Боголюбова [2], который впервые обратил внимание на проблему эквивалентности КА и БКА*. Второй - это метод характеристической функции, впервые использованный для исследования идеального бозе-газа М.Кацем. см. [5], и являющийся, в определенном смысле, более общим, чем первый метод.

Цель настоящей работы /работа состоит из двух частей/ - продемонстрировать причины возникновения неэквивалентности ансамблей для бозе-систем, а именно установить, является ли неэквивалентность следствием фазового перехода /бозе-конденсации/ или аномальных флуктуаций плотности числа частиц? Для этого мы рассмотрим ряд точно решаемых моделей неидеального бозе-газа, в которых взаимодействие включается между различными группами частиц с целью выделения эффекта, приводящего к неэквивалентности КА и БКА.

Первая часть работы посвящена идеальному бозе-газу. Ее цель - продемонстрировать, что проблема эквивалентности ансамблей нетривиальна уже в этом случае, и изложить технические результаты, необходимые во второй части для исследования неидеальных бозе-систем.

Основной результат второй части работы сводится к следующему: отталкивающее взаимодействие между частицами, приводящее к подавлению аномальных флуктуаций плотности, восстанавливает статистическую эквивалентность ансамблей, несмотря на то,

---

* В появившихся через несколько лет работах [3,4] метод Н.Н.Боголюбова был приоткрыт и в некоторых пунктах уточнен, дискуссия о трудностях этого подхода содержится в обзоре [5].

что явление бозе-конденсации /фазовый переход/ в этой системе сохраняется.

В заключение этого пункта напомним основное определение, которое является отправной точкой дальнейшего исследования.

Определение 1.1.[1] Пусть

/а/ термодинамические пределы для плотности свободной энергии $f(\beta, \rho)$ в КА и давления $p(\beta,\mu)$ в БКА существуют и связаны преобразованием Лежандра:

$$p(\beta, \mu) = \sup_{\rho}(\rho\mu - f(\beta, \rho)), \qquad f(\beta, \rho) = \sup_{\mu}(\rho\mu - p(\beta, \mu)); \qquad /1.1/$$

/б/ для соответствующих значений химического потенциала μ и плотности ρ, которые определяются из /1.1/, т.е. $\rho = \bar{\rho}(\mu)$ или $\mu = \bar{\mu}(\rho)$, предельные состояния в обоих ансамблях совпадают:

$$\langle - \rangle_{КА}(\beta, \bar{\rho}(\mu)) = \langle - \rangle_{БКА}(\beta, \mu), \quad \langle - \rangle_{КА}(\beta, \rho) = \langle - \rangle_{БКА}(\beta, \bar{\mu}(\rho)). \qquad /1.2/$$

Тогда КА и БКА термодинамически /слабо/эквивалентны, если выполнено условие /а/, и статистически /сильно/эквивалентны,если выполнены условия /а/ и /б/.

Замечание 1.1. Естественно, что проверка условия /а/ много проще, чем условия /б/. Поэтому иногда ограничиваются проверкой только соотношений /1.1/ и их выполнение называют эквивалентностью ансамблей [6].

Замечание 1.2. Может возникнуть впечатление, что требование /свойство/ термодинамической эквивалентности /а/ настолько слабо, что выполняется для всех содержательных, с точки зрения физики, моделей. То, что это не так, было замечено в [7], а работа [8] посвящена анализу причин нарушения термодинамической /слабой/ эквивалентности ансамблей для магнитных систем.

2. ИДЕАЛЬНЫЙ БОЗЕ-ГАЗ. БОЗЕ-КОНДЕНСАЦИЯ

Пусть $\Lambda \subset \boldsymbol{R}^{\nu}$ - компактная односвязная область ν-мерного пространства с конечным объемом /мерой/ $|\Lambda| = V$ и гладкой границей $\partial\Lambda$/сосуд Λ/. Тогда пространство одночастичных состояний $\mathcal{H}_{\Lambda} = L^2(\Lambda)$, а одночастичный гамильтониан $T^{(1)}_{\Lambda,\sigma}$ является самосопряженным расширением оператора кинетической энергии:

$$K_{\Lambda} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta, \qquad D(K_{\Lambda}) = C_0^{\infty}(\Lambda), \qquad /2.1/$$

где m - масса частиц, а Δ - оператор Лапласа, которое задается граничными условиями:

$$\frac{\partial}{\partial n(x)}\psi(x) + \sigma(x)\psi(x) = 0, \quad x \in \partial\Lambda; \quad \sigma(x) \geq 0, \quad \psi \in D(T^{(1)}_{\Lambda,\sigma}). \qquad /2.2/$$

Здесь $\partial/\partial n(x)$ - производная вдоль внешней нормали к поверхности $\partial\Lambda$, а $\sigma(x)$ - гладкая функция на этой поверхности. Известно,что спектр оператора $T^{(1)}_{\Lambda,\sigma}$ является тогда чисто дискретным и состоит из неотрицательных собственных значений $\{\epsilon_{\ell}^{(\sigma)}(\Lambda)\}_{\ell=0}^{\infty}$, которые мы будем считать упорядоченными: $0 \leq \epsilon_0^{(\sigma)}(\Lambda) \leq \epsilon_1^{(\sigma)}(\Lambda) \leq \dots$.

Как обычно, через $\mathcal{G}_{\Lambda}^{(N)} = (\bigotimes_{j=1}^{N} \mathcal{H}_{\Lambda})_{symm}$ мы будем обозначать пространство симметричных N-частичных волновых функций, соответствующих состояниям N бозонов в сосуде Λ. Гамильтониан идеального бозе-газа в этом N-частичном секторе имеет вид:

$$T^{(N)}_{\Lambda,\sigma} = \sum_{j=1}^{N}(1 \otimes 1 \otimes \dots \otimes T^{(j)}_{\Lambda,\sigma} \otimes \dots \otimes 1); \quad T^{(j)}_{\Lambda,\sigma} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\alpha=1}^{\nu}\frac{\partial^2}{\partial x^2_{j,\alpha}}\right)_{\sigma} \qquad /2.3/$$

Соответствующее фоковское пространство имеет вид $\mathcal{F}(\mathcal{H}_{\Lambda}) = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{G}_{\Lambda}^{(N)}$, а гамильтониан идеального бозе-газа, действующий на плотной области определения $D(T_{\Lambda,\sigma})$ в этом пространстве, мы будем обозначать через $T_{\Lambda,\sigma}$.

Напомним теперь, что статистическая сумма для идеального бозе-газа при фиксированном числе частиц N в сосуде Λ и температуре β^{-1} /т.е. в КА/ имеет вид

$$Z_{\Lambda}^{(\sigma)}(\beta, N) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{G}_{\Lambda}^{(N)}} \exp(-\beta T^{(N)}_{\Lambda,\sigma}) = \sum_{\{n_{\ell}:\ \sum_{\ell=0} n_{\ell} = N\}} \exp(-\beta \sum_{\ell=0} \epsilon_{\ell}^{(\sigma)}(\Lambda) n_{\ell}), \qquad /2.4/$$

где суммирование производится по числам заполнения $n_{\ell} = 0,1,2,\dots$ для каждого из одночастичных уровней $\epsilon_{\ell}^{(\sigma)}(\Lambda)$. Соответствующая статистическая сумма в БКА для температуры β^{-1} и фиксированном химическом потенциале $\mu < \epsilon_0^{(\sigma)}(\Lambda)$ вычисляется явно:

$$\Xi_{\Lambda}^{(\sigma)}(\beta, \mu) = \mathrm{Tr}_{\mathcal{F}(\mathcal{H}_{\Lambda})} \exp(-\beta T_{\Lambda,\sigma}) = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} Z_{\Lambda}^{(\sigma)}(\beta, N) = \qquad /2.5/$$

$$= \prod_{\ell=0}^{\infty}(1 - e^{-\beta(\epsilon_{\ell}^{(\sigma)}(\Lambda) - \mu)})^{-1}.$$

Отвечающие этим ансамблям плотности термодинамических потенциалов /плотность свободной энергии и давление/ имеют вид

$$f_{\Lambda}^{(\sigma)}(\beta, \frac{N}{V}) = -\frac{1}{\beta V}\ln Z_{\Lambda}^{(\sigma)}(\beta, N), \quad p_{\Lambda}^{(\sigma)}(\beta, \mu) = \frac{1}{\beta V}\sum_{\ell=0}^{\infty}\ln\{1 - e^{-\beta(\epsilon_{\ell}^{(\sigma)}(\Lambda) - \mu)}\}^{-1}. \qquad /2.6/$$

Поскольку ниже нас будут интересовать свойства бозе-систем в термодинамическом пределе ($t-\lim$), когда $\Lambda \nearrow \boldsymbol{R}^{\nu}$ и $N \to \infty$ так, что $N/V \to \rho$ -плотность числа частиц в системе, то удобно ввести функцию

$$\mathcal{N}_{\Lambda}^{(\sigma)}(\epsilon) = \frac{1}{V}\sum_{\{\ell:\epsilon_{\ell}^{(\sigma)}(\Lambda)<\epsilon\}} 1. \qquad /2.7/$$

Действительно, с ее помощью давление /2.6/ можно представить в виде

$$p_{\Lambda}^{(\sigma)}(\beta,\mu) = -\frac{1}{\beta}\int_0^{\infty} d\,\mathcal{N}_{\Lambda}^{(\sigma)}(\epsilon)\ln(1-e^{-\beta(\epsilon-\mu)}), \qquad /2.8/$$

и вопрос о существовании $t-\lim$ для давления в БКА сводится к проблеме существования /слабого/ предела [9] для мер $\{d\mathcal{N}_{\Lambda}^{(\sigma)}(\epsilon)\}_{\Lambda\subset R^{\nu}}$.

Теорема 2.1. Предел $d\mathcal{N}(\epsilon)$ для мер $\{d\mathcal{N}_{\Lambda}^{(\sigma)}(\epsilon)\}_{\Lambda\subset R^{\nu}}$ существует, не зависит от граничных условий /2.2/ и имеет вид

$$d\mathcal{N}(\epsilon) = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m}\right)^{\nu/2}\frac{\epsilon^{\nu/2-1}}{\Gamma(\nu/2)}\,d\epsilon. \qquad /2.9/$$

Замечание 2.1. Хотя утверждения такого типа для одночастичных операторов Шредингера известны и в более общих ситуациях, см. например [10-12], в приложении 1 для удобства читателей приведено краткое изложение основных моментов доказательства теоремы 2.1. Мы сделали это еще и потому, что по аналогичной схеме построены доказательства некоторых других утверждений настоящей работы, в которых используется метод характеристических функций.

Следствие 2.1. Из /2.9/ следует, что $t-\lim$ для давления идеального бозе-газа $p_{\Lambda}^{(\sigma)}(\beta,\mu)$ при $\mu<0$ существует, не зависит от граничных условий /2.2/ и имеет вид

$$p(\beta,\mu) = -\frac{1}{\beta}\int_0^{\infty} d\mathcal{N}(\epsilon)\ln\{1-e^{-\beta(\epsilon-\mu)}\}. \qquad /2.10/$$

С учетом того, что $t-\lim \epsilon_0^{(\sigma)}(\Lambda) = 0$, выражение /2.10/ может быть продолжено /по непрерывности/ для $\nu\ge 3$ в точку $\mu = 0$.

Следствие 2.2. Аналогично для средней плотности числа частиц в БКА $\rho_{\Lambda}^{(\sigma)}(\beta,\mu) = \langle N/V\rangle_{\Lambda,\sigma}(\beta,\mu)$, которая в конечном сосуде Λ имеет вид

$$\rho_{\Lambda}^{(\sigma)}(\beta,\mu) = \partial_{\mu}p_{\Lambda}^{(\sigma)}(\beta,\mu) = \frac{1}{V}\sum_{\ell=0}^{\infty}\{e^{\beta(\epsilon_{\ell}^{(\sigma)}(\Lambda)-\mu)}-1\}^{-1};$$

$$\langle n_{\ell}\rangle_{\Lambda}(\beta,\mu) = \{e^{\beta(\epsilon_{\ell}^{(\sigma)}(\Lambda)-\mu)}-1\}^{-1}; \qquad /2.11/$$

в пределе $t-\lim$, при $\mu<0$, получаем следующее выражение:

$$\bar{\rho}(\beta,\mu) = \int_0^{\infty} d\mathcal{N}(\epsilon)\{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1\}^{-1}. \qquad /2.12/$$

Так же, как и выше, для $\nu\ge 3$ это выражение может быть продолжено на $\mu = 0$, причем интеграл в правой части /2.12/ достигает в этой точке своего максимума:

$$\rho_c(\beta) \equiv \bar{\rho}(\beta,\mu=0). \qquad /2.13/$$

Следствие 2.3. Для $\nu\ge 3$ из /2.13/ и явного вида функции $\rho_{\Lambda}^{(\sigma)}(\beta,\mu)$ /2.11/ следует, что для $\rho\ge\rho_c(\beta)$ существует последовательность $\{\bar{\mu}_{\Lambda}(\rho)\}_{\Lambda\subset R^{\nu}}$ такая, что:

/а/ $\rho_{\Lambda}^{(\sigma)}(\beta,\bar{\mu}_{\Lambda}(\rho)) = \rho$; /2.14/

/б/ $t-\lim\bar{\mu}_{\Lambda}(\rho) = 0$; $\bar{\mu}_{\Lambda}(\rho)|_{V\to\infty} \simeq \epsilon_0^{(\sigma)}(\Lambda) - \frac{1}{\beta V}(\rho-\rho_c(\beta))^{-1} + \mathcal{O}(V^{-1})$;

/в/ $\rho_{\Lambda}^{(\sigma)}(\beta,\bar{\mu}_{\Lambda}(\rho_c)) = \rho_c(\beta)$, $\bar{\mu}_{\Lambda}(\rho_c)|_{V\to\infty} \simeq \epsilon_0^{(\sigma)}(\Lambda) - aV^{-\gamma}$, $a>0$, $0<\gamma<1$.

Это означает, что в выражении для суммы средних плотностей числа частиц на каждом одночастичном уровне /при заданной полной плотности числа частиц $\rho>\rho_c(\beta)$/:

$$\rho = \rho_{\Lambda}^{(\sigma)}(\beta,\bar{\mu}_{\Lambda}(\rho)) = \frac{1}{V}\,\frac{1}{e^{\beta(\epsilon_0^{(\sigma)}(\Lambda)-\bar{\mu}_{\Lambda})}-1} + \frac{1}{V}\sum_{\ell\ge 1}\langle n_{\ell}\rangle_{\Lambda}(\beta,\bar{\mu}_{\Lambda}). \qquad /2.15/$$

первый член в правой части /плотность числа частиц в основном состоянии/ в $t-\lim$ отличен от нуля и равен $\rho_0(\beta)$, а второй член, в силу следствия 2.2, сходится к $\rho_c(\beta)$, т.е.

$$\rho_0(\beta) = \rho-\rho_c(\beta). \qquad /2.16/$$

Замечание 2.2. Явление накопления /в $t-\lim$ / макроскопического числа частиц $\rho_0(\beta)$ с энергией, равной нулю, для идеального бозе-газа при $\nu\ge 3$, когда плотность среднего числа частиц превышает некоторую критическую плотность $\rho_c(\beta)$ известно как явление бозе-конденсации. Оно хорошо изучено в БКА /см, например, [5,13] /, поскольку в этом ансамбле большинство вычислений можно проделать в явном виде уже в конечном объеме. Для КА провести аналогичные выкладки в конечном объеме не удается. Эти трудности в свое время породили даже сомнения в том, что поведение идеального бозе-газа в этих двух ансамблях *почти оди-*

наково, и что явление бозе-конденсации имеет место и в КА. Положительный ответ на этот вопрос был впервые получен в известных лекциях Н.Н.Боголюбова [2].

3. ПРОБЛЕМА ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ АНСАМБЛЕЙ

Теорема 3.1.[2] Для идеального бозе-газа КА и БКА слабо /термодинамически/ эквивалентны, причем средние числа заполнения в обоих ансамблях, при соответствующих плотностях и химических потенциалах в $t-\lim$, совпадают для $\epsilon > 0$ /либо $\mu < 0$ /, а в основном состоянии совпадают средние плотности числа частиц:

$$<n_\epsilon>(\beta,\rho) = <n_\epsilon>(\beta,\bar{\mu}(\rho)),$$

$$t-\lim\frac{1}{V}<n_{\ell=0}>_\Lambda(\beta,\rho) = t\cdot\lim\frac{1}{V}<n_{\ell=0}>_\Lambda(\beta,\bar{\mu}_\Lambda(\rho)) = \rho_0(\beta,\rho). \qquad /3.1/$$

Здесь сходящаяся последовательность $\{\bar{\mu}(\rho)\}_{\Lambda\subset R^\nu}$ определяется из уравнения /2.15/, причем $\bar{\mu}(\rho<\rho_c)<0$ и $\bar{\mu}(\rho\geq\rho_c)=0$.

Замечание 3.1. Метод доказательства этой теоремы, предложенный в [2], заключался в сведении вычисления $t-\lim$ для плотности свободной энергии $f_\Lambda^{(\sigma)}(\beta,N/V)$ к оценке, с помощью метода перевала, асимптотики интеграла Коши /см. /2.5/ и /2.6//:

$$e^{-\beta V f_\Lambda^{(\sigma)}(\beta,N/V)} = \frac{1}{2\pi i}\oint_C \frac{dz}{z^{N+1}} e^{\beta V p_\Lambda^{(\sigma)}(\beta,z)}, \quad \mu = \operatorname{Ln} z. \qquad /3.2/$$

На некоторые трудности, возникающие в этом подходе, было указано в [14,15] /см. также обзор [5]/, там же приведены необходимые дополнительные аргументы, доказывающие корректность результатов [2]. Как уже отмечалось выше, независимо термодинамическая эквивалентность ансамблей была доказана в [3,4], там же подтвержден вывод работы [2] о том, что бозе-конденсация происходит и в КА при тех же значениях критических параметров, что и в БКА. Еще одно доказательство термодинамической эквивалентности ансамблей, использующее некоторые специальные свойства функции плотности Каца для идеального бозе-газа, было предложено недавно в [16]. В приложении 2 мы приводим простое доказательство теоремы 3.1, которое основано на другой идее, а именно на одном общем утверждении /теорема Минлоса-Повзнера/ относительно преобразования Лапласа.

Замечание 3.2. Отметим теперь, что исключение из граничных условий /2.2/ случая $\sigma(x)<0$, $x\in\partial\Lambda$ /"притягивающие" стенки/ существенно. Особенности поведения идеального бозе-газа в этом случае рассматривались в [17,18]. Они определяются тем, что теперь

в $t-\lim$ в одночастичном спектре остается связанное состояние, отделенное щелью от неотрицательного непрерывного спектра. Такая структура спектра приводит к тому, что термодинамическое поведение идеального бозе-газа при $\sigma(x)<0$ отличается от случая $\sigma(x)\geq 0$: для размерностей $\nu = 1,2$ возможна бозе-конденсация, а для $\nu\geq 3$ характер бозе-конденсации отличается от той, которая имеется в случае "отталкивающих" стенок. Поэтому в настоящей работе мы ограничимся только случаем граничных условий $\sigma(x)\geq 0$, $x\in\partial\Lambda$, а стремление $\Lambda\nearrow R^\nu$ будем понимать в смысле, предложенном Фишером [19], например, как изотропное расширение произвольного сосуда $\Lambda\subset R^\nu$. Это избавляет от необходимости оговорок по поводу неизотропного роста Λ, которое может привести к явлению обобщенной бозе-конденсации, см. [16] и [20,21].

Замечание 3.3. Если Λ является параллелепипедом, то наряду с граничными условиями /2.2/ можно рассматривать периодические граничные условия. В этом случае результаты теоремы 2.1 и следствий 2.1-2.3 не изменяются [17]. Поэтому ниже мы будем опускать индекс, указывающий на выбор граничных условий, если этого не будет требовать ход рассуждений.

Из определений КА и БКА следует, что средние в этих ансамблях связаны соотношением

$$<->_\Lambda(\beta,\mu) = \sum_{N=0}^{\infty} P_{\beta,\mu}^{(\Lambda)}(N/V)<->_\Lambda(\beta,N/V);\quad F_{\beta,\mu}^{(\Lambda)}(x) = \sum_{0\leq N/V<x} P_{\beta,\mu}^{(\Lambda)}(\frac{N}{V}).$$

Здесь $F_{\beta,\mu}^{(\Lambda)}(\cdot)$ - функция распределения случайной /в БКА/ величины - плотности числа частиц в конечном сосуде Λ:

$$F_{\beta,\mu}^{(\Lambda)}(x) = \Pr_{\beta,\mu}^{(\Lambda)}(\frac{N}{V}<x) = \sum_{0\leq N/V<x}\frac{e^{\beta\mu N}Z_\Lambda(\beta,N)}{\Xi_\Lambda(\beta,\mu)}. \qquad /3.4/$$

Таким образом, вопрос о сильной эквивалентности КА и БКА сводится к тому, какой вид имеет вероятностное распределение /3.4/ в термодинамическом пределе.

Теорема 3.2.[1,5] Распределения $\{F_{\beta,\mu}^{(\Lambda)}\}_{\Lambda\subset R^\nu}$ сходятся /в слабом смысле/ к предельному распределению $F_{\beta,\mu}$, плотность которого имеет вид

$$\frac{dF_{\beta,\mu}(x)}{dx} = \delta(x-\bar{\rho}(\beta,\mu)),\quad \nu = 1,2; \qquad /3.5а/$$

$$\frac{dF_{\beta,\mu}(x)}{dx} = \begin{cases}\delta(x-\bar{\rho}(\beta,\mu)), & \mu\leq 0\ (\bar{\rho}(\beta,\mu)\leq\rho_c)\\ \dfrac{\theta(x-\rho_c)}{\rho-\rho_c}\exp\{-\dfrac{x-\rho_c}{\rho-\rho_c}\}, & \mu = 0\ (\rho>\rho_c)\end{cases}\quad \nu\geq 3. \qquad /3.5б/$$

Доказательство. Известно, что для доказательства слабой сходимости конечномерных распределений достаточно установить сходимость соответствующих характеристических функций [9], которые в данном случае имеют вид

$$\phi_\Lambda(t) = \langle e^{itN/V}\rangle_\Lambda(\beta,\mu) = \exp\{\beta V(p_\Lambda(\beta,\mu + \frac{it}{\beta V}) - p_\Lambda(\beta,\mu))\}. \qquad /3.6/$$

/а/. Как следует из теоремы 2 для $\nu = 1,2$ множество допустимых значений μ /область изменения химического потенциала, для которой давление /2.10/ и плотность /2.12/ конечны/ - это $\mu < 0$. Поэтому в разложении

$$p_\Lambda(\beta,\mu + \frac{it}{\beta V}) = p_\Lambda(\beta,\mu) + \frac{it}{\beta V}\partial_\mu p_\Lambda(\beta,\mu) + \frac{1}{2}(\frac{it}{\beta V})^2\partial^2_\mu p_\Lambda(\beta,\mu+\theta\frac{it}{\beta V}),$$
$$|\theta| < 1, \qquad /3.7/$$

предел

$$t\text{-}\lim \partial^2_\mu p_\Lambda(\beta,\mu+\theta\frac{it}{\beta V}) = \beta\int_0^\infty d\mathfrak{N}(\epsilon)[(e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1)^{-2} + (e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1)^{-1}] \qquad /3.8/$$

конечен для всех допустимых значений химического потенциала. Это означает, что

$$t\text{-}\lim \phi_\Lambda(t) = e^{it\bar\rho(\beta,\mu)} = \int_0^\infty dF_{\beta,\mu}(x)\,e^{itx}, \qquad /3.9/$$

откуда следует /3.5а/.

/б/. Для $\mu < 0$ /т.е. $\bar\rho(\beta,\mu) < \rho_c$/ доказательство /3.6б/ основано на аргументах, которые приведены выше. Особенности возникают только для $\mu = 0$, которое, в силу следствий 2.1-2.3, принадлежит области допустимых значений химического потенциала для $\nu \geq 3$ /точка бозе-конденсации/. Выделим в /2.22/ вклад, соответствующий $\epsilon_0(\Lambda)$, тогда

$$\phi_\Lambda(t) = \frac{(1-e^{-\beta(\epsilon_0(\Lambda)-\mu-\frac{it}{\beta V})})^{-1}}{(1-e^{-\beta(\epsilon_0(\Lambda)-\mu)})^{-1}}\cdot\exp\{\frac{it}{\beta V}\sum_{\ell=1}^\infty\langle n_\ell\rangle_\Lambda(\beta,\mu) +$$
$$/3.10/$$
$$+\frac{1}{2}(\frac{it}{\beta V})^2\sum_{\ell=1}^\infty[\langle n_\ell\rangle^2_\Lambda(\beta,\mu+\tilde\theta\frac{it}{\beta V}) + \langle n_\ell\rangle_\Lambda(\beta,\mu+\tilde\theta\frac{it}{\beta V})]\},\quad|\tilde\theta|<1.$$

Из следствия 2.3 известно, что состояние $\langle - \rangle(\beta,\mu)$ в точке $\mu = 0$ вырождено: различные пределы соответствуют разным асимптотикам последовательностей $\{\bar\mu(\beta,\rho)\}_{\Lambda\subset R^\nu}$, которые определяются условиями конечности давления и плотности полного числа частиц ρ /см. /2.14/ и /2.15//. Поэтому множество пределов для характеристической функции $\phi_\Lambda(t)$, соответствующих точке $\mu = 0$, получится, если в /3.10/ воспользоваться асимптотиками для $\{\bar\mu(\beta,\rho)\}_{\Lambda\subset R^\nu}$, см. /2.14/. Тогда для первого сомножителя в /3.10/ получаем

$$t\text{-}\lim\frac{(1-e^{-\beta(\epsilon_0(\Lambda)-\bar\mu_\Lambda(\beta,\rho)-\frac{it}{\beta V})})^{-1}}{(1-e^{-\beta(\epsilon_0(\Lambda)-\bar\mu_\Lambda(\beta,\rho))})^{-1}} = \frac{1}{1-it(\rho-\rho_c)}. \qquad /3.11/$$

Заметим теперь, что из теоремы 2.1 для первых двух уровней одночастичного спектра получаем следующую асимптотику при $V\to\infty$: $\epsilon_{\ell=0,1}(\Lambda) = a_{\ell=0,1}V^{-2/\nu}$. Поэтому для $\nu \geq 3$ получаем

$$t\text{-}\lim\frac{1}{V^2}\sum_{\ell=1}^\infty\langle n_\ell\rangle^2_\Lambda(\beta,\bar\mu_\Lambda+\tilde\theta\frac{it}{\beta V}) = \lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\int_{\epsilon_1(\Lambda)}^\infty d\mathfrak{N}_\Lambda(\epsilon)\{e^{\beta(\epsilon-\epsilon_0(\Lambda))}-1\}^{-2} = 0, \qquad /3.12/$$

а кроме того

$$t\text{-}\lim\frac{1}{V}\sum_{\ell=1}^\infty\langle n_\ell\rangle(\beta,\bar\mu_\Lambda) = \rho_c(\beta),\quad t\text{-}\lim\frac{1}{V^2}\sum_{\ell=1}^\infty\langle n_\ell\rangle(\beta,\bar\mu_\Lambda+\theta'\frac{it}{\beta V}) = 0. \qquad /3.13/$$

Собирая вместе пределы /3.11/-/3.13/, получаем /3.5б/ для $\mu = 0$ и $\rho > \rho_c(\beta)$. Наконец, из следствия 2.3 вытекает, что случай $\mu = 0$ и $\rho = \rho_c(\beta)$ соответствует для $\bar\mu_\Lambda(\rho_c)$ асимптотике /2.14//в/. Используя ее в /3.11/-/3.13/, получаем /3.5б/ для $\mu = 0$ и $\rho = \rho_c(\beta)$. □

Следствие 3.1. КА и БКА для идеального бозе-газа /$\nu \geq 3$/ не являются сильно /статистически/ эквивалентными: в точке $\mu = 0$ имеется бесконечное множество предельных состояний БКА, которые дополнительно индексируются плотностью $\rho \geq \rho_c$, причем для $\rho > \rho_c$

$$\langle - \rangle(\beta,\mu=0\,|\,\rho) \neq \langle - \rangle(\beta,\rho). \qquad /3.14/$$

4. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Если условия, необходимые для перехода от КА к БКА, хорошо известны /см.[19]/, то примеры, рассмотренные в работах [7,8], показывают, что существуют модели, для которых

$$p(\beta,\mu) = \sup_\rho(\rho\mu - f(\beta,\rho)), \qquad /4.1а/$$

но в то же время:

$$f(\beta,\rho) \neq \sup_\mu(\rho\mu - p(\beta,\mu)) = \tilde f(\beta,\rho). \qquad /4.1б/$$

Поэтому доказательство слабой /термодинамической/ эквивалентности КА и БКА требует специальных аргументов*. Для случая идеального бозе-газа они сводятся, например, к рассуждениям, приведенным в приложении 2. Заметим, что заодно доказывается и существование термодинамического предела в КА - обычно /см.[19]/ существование термодинамического предела в БКА извлекается из его существования в КА, для идеального бозе-газа стратегия обратная.

Замечание о возможности различной степени эквивалентности ансамблей обсуждается в Приложении /авторы - Р.Л.Добрушин, Р.А.Минлос, Ю.М.Сухов/ к книге[19]. Там же указано на связь этой проблемы с центральными предельными теоремами для числа частиц в БКА[22,23]. Здесь мы отметим только, что нарушение сильной /статистической/ эквивалентности ансамблей для идеального бозе-газа $(\nu \geq 3)$ связано с особенностями флуктуаций плотности числа частиц в КА и БКА /см. теорему 3.2 и[1]/:

$$t - \lim \mathfrak{D}^{(\Lambda)}_{\beta,\mu}\left(\frac{N}{V}\right) = t - \lim \mathfrak{D}^{(\Lambda)}_{\beta,\mu}\left(\frac{n_0}{V}\right) = \begin{cases} 0, & \mu < 0,\ \rho < \rho_c \\ \rho_0^2, & \mu = 0,\ \rho \geq \rho_c \end{cases};$$

$$t - \lim \mathfrak{D}^{(\Lambda)}_{\beta,\rho}\left(\frac{n_0}{V}\right) = 0. \qquad /4.2/$$

Здесь $\mathfrak{D}^{(\Lambda)}_{\beta,\mu}(\cdot)$ и $\mathfrak{D}^{(\Lambda)}_{\beta,\rho}(\cdot)$ - дисперсии, соответственно, в БКА и КА.

Из /4.2/ следует /неравенство Чебышева/, что в БКА для $\mu = 0$ и $\rho > \rho_c$ нарушается закон больших чисел как для полной плотности числа частиц, так и для плотности бозе-конденсата. Как впервые отметили Березин, Синай[24] и Добрушин[25], это нарушение может служить критерием для проверки существования в системе фазового перехода первого рода /плоский участок на $p-v$ диаграмме/, см. также[26]. Поэтому бозе-конденсация в идеальном газе классифицируется как фазовый переход первого рода[5,27], хотя некоторые авторы, основываясь на температурном поведении удельной теплоемкости, относят ее к фазовому переходу третьего рода, см. например[28,29].

---

*Заметим, например, что в таком известном курсе статистической механики, как[27], при исследовании идеального бозе-газа в КА подразумевается, что слабая эквивалентность ансамблей доказана /см.[27] гл.12, §4/.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Доказательство теоремы 2.1

Для меры $d\mathfrak{N}^{(\sigma)}_{\Lambda}(\epsilon)$ существует преобразование Лапласа:

$$F^{(\sigma)}_{\Lambda}(t) = \int_0^{\infty} d\mathfrak{N}^{(\sigma)}_{\Lambda}(\epsilon)e^{-\epsilon t} = \frac{1}{V}\,\mathrm{Tr}\, e^{-tT^{(1)}_{\Lambda,\sigma}} = \frac{1}{V}\int_{\Lambda} dx\, Q^{(\sigma)}_{\Lambda}(t;x,x). \qquad /П1.1/$$

Ядро оператора $\exp(-tT^{(1)}_{\Lambda,\sigma})$ удовлетворяет следующим неравенствам:

$$0 \leq Q^{(\infty)}_{\Lambda}(t;x,y) \leq Q^{(\sigma)}_{\Lambda}(t;x,y) \leq Q^{(0)}_{\Lambda}(t;x,y), \qquad /П1.2/$$

которые являются прямым следствием формулы Грина. Здесь индексы (∞) и (0) соответствуют граничным условиям Дирихле и Неймана. Как показано в работе[30], для любых фиксированных $t > 0$ и $x, y \in \Lambda$ имеем

$$|Q^{(\infty)}_{\Lambda}(t;x,y) - Q(t;x,y)| < e^{\nu/2}\left(\frac{2\pi t\hbar^2}{m}\right)^{\nu/2} e^{-\ell_y^2 \frac{m}{2t\hbar^2}};$$

$$|Q^{(0)}_{\Lambda}(t;x,y) - Q(t;x,y)| < c\, e^{\frac{\lambda t\hbar^2}{m}}\left(\frac{t\hbar^2}{m}\right)^{\nu/2} e^{-c\frac{\ell_x^2+\ell_y^2}{2t\hbar^2}m}. \qquad /П1.3/$$

где $\ell_{x,y} = \mathrm{dist}(x,y;\partial\Lambda)$, а $Q(t;x,y)$ ядро оператора $\exp(-tT^{(1)})$, которое имеет вид

$$Q(t;x,y) = \frac{\exp\{-\frac{|x-y|^2}{2t\hbar^2}m\}}{(2\pi t\hbar^2/m)^{\nu/2}}. \qquad /П1.4/$$

Из неравенств /П1.2/, оценок /П1.3/ и формулы /П1.4/ следует, что $t-\lim$ преобразования Лапласа /П1.1/ существует, не зависит от граничных условий и равен

$$t - \lim F^{(\sigma)}_{\Lambda}(t) = \left(\frac{2\pi t\hbar^2}{m}\right)^{-\nu/2}. \qquad /П1.5/$$

Доказательство /2.9/ строится теперь с помощью /П1.5/ по плану известной в теории вероятностей теоремы о слабой сходимости распределений, см., например,[9]. Несущественное отличие заключается лишь в том, что поскольку вероятностная мера

$$d\mu^{(\sigma)}_{\Lambda,t}(\lambda) = \{F^{(\sigma)}_{\Lambda}(t)\}^{-1} e^{-t\lambda}\, d\mathfrak{N}^{(\sigma)}_{\Lambda}(\lambda) \qquad /П1.6/$$

имеет носитель на R^1_+, то вместо преобразования Фурье мы можем использовать для построения характеристической функции преобразование Лапласа:

$$\phi^{(\sigma)}_{\Lambda, t}(\xi) = \int_0^\infty d\mu^{(\sigma)}_{\Lambda, t}(\lambda) e^{-\xi\lambda} = \frac{F^{(\sigma)}_\Lambda(t + \xi)}{F^{(\sigma)}_\Lambda(t)}. \qquad /\Pi 1.7/$$

Тогда из /П1.5/ следует, что функция /П1.7/ сходится к характеристической функции некоторого распределения $d\mu_t(\lambda) = \{F(t)\}^{-1} e^{-t\lambda} d\tilde{\mathcal{N}}(\lambda)$. Следовательно, в силу /П1.6/, предел /2.9/ существует и не зависит от граничных условий. Кроме того, из /П1.5/ следует, что правая часть этого выражения является преобразованием Лапласа некоторой меры $d\tilde{\mathcal{N}}(\epsilon)$ и функция непрерывна. Поэтому $t-\lim \mathcal{N}^{(\sigma)}_\Lambda(\epsilon) = \mathcal{N}(\epsilon) = \tilde{\mathcal{N}}(\epsilon)$, откуда и получается явный вид для предельной меры $d\mathcal{N}(\epsilon)$. □

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Доказательство теоремы 3.1

Начнем с доказательства существования $t-\lim f_\Lambda(\beta, \rho = N/V)$ в КА, основываясь на том, что БКА термодинамический предел для давления существует и имеет вид /2.10/ /см. следствие 2.1/. Для этого заметим, что $p_\Lambda(\beta, \mu)$ и $f_\Lambda(\beta, \rho)$ связаны соотношением /2.5/

$$e^{\beta V p_\Lambda(\beta, \mu)} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta V(\mu \frac{N}{V} - f_\Lambda(\beta, \frac{N}{V}))}. \qquad /\Pi 2.1/$$

Теорема П2.1 /теорема Минлоса-Повзнера[31]/. Если функции $\{f_\Lambda(\beta, \rho)\}_\Lambda$ не возрастают для $\rho \in R^1_+$, то в регулярных точках по плотности ρ имеем

$$t - \lim f_\Lambda(\beta, \rho) = f(\beta, \rho) = \sup_\mu(\rho\mu - p(\beta, \mu)). \qquad /\Pi 2.2/$$

Замечание П2.1. Множество значений $\partial_\mu p(\beta, \mu)$ называется R-точками, а множество регулярных точек есть внутреннее множество R-точек, см.[31]. Поэтому из /2.10/ следует, что множество регулярных точек в /П2.2/ совпадает с отрезком $[0, \rho_c)$ и соответствует $\mu < 0$.

Это означает, что на отрезке $[0, \rho_c)$ соотношение /П2.2/ доказано. Рассмотрим теперь множество $[\rho_c, +\infty)$:

$$e^{\beta V p_\Lambda(\beta, \mu)} = \sum_{0 \le \rho < \rho_c} e^{\beta V(\mu\rho - f_\Lambda(\beta, \rho))} + \sum_{\rho_c \le \rho} e^{\beta V(\mu\rho - f_\Lambda(\beta, \rho))}. \qquad /\Pi 2.3/$$

Пусть теперь для определенности граничные условия (σ) - периодические /доказательство для других граничных условий /2.2/ проводится по той же схеме/, тогда $\epsilon_0(\Lambda) = 0$ и $p_\Lambda(\beta, \mu = 0) = +\infty$, см./2.6/. В то же время $p_\Lambda(\beta, \bar{\mu}_\Lambda) < +\infty$ и $t - \lim p_\Lambda(\beta, \bar{\mu}_\Lambda) = p(\beta, 0)$ $(\nu \ge 3)$ для *любой последовательности* $\{\bar{\mu}_\Lambda\}_{\Lambda \subset R^\nu}$, которая сходится к нулю $(\bar{\mu}_\Lambda \nearrow 0)$ не быстрее чем экспоненциально. Из этого замечания и представления /П2.3/, с учетом /П2.2/, следует, что предел $t - \lim f_\Lambda(\beta, \rho \ge \rho_c) = \phi(\beta)$ существует и не зависит от $\rho \ge \rho_c$. Поскольку функции $\{f_\Lambda(\beta, \rho)\}_{\Lambda \subset R^\nu}$ выпуклы для $\rho \ge 0$, то $\phi(\beta) = \lim_{\rho \to \rho_c - 0} f(\beta, \rho) = f(\beta, \rho_c)$ или, иными словами,

$$f(\beta, \rho > \rho_c) = \sup_{\mu \le 0}(\rho\mu - p(\beta, \mu)) = -p(\beta, \mu = 0) = f(\beta, \rho_c). \qquad /\Pi 2.4/$$

Оставшаяся часть доказательства теоремы проводится, исходя из того, что предел $t - \lim f_\Lambda(\beta, \rho)$ существует и равен $f(\beta, \rho)$, в полной аналогии с тем, как это делается в[1,2] со ссылкой на лемму Гриффитса, см., например,[32]. Действительно, функции $f_\Lambda(\beta, \rho)$ /а следовательно и предел/ являются выпуклыми функциями спектра. Поэтому с помощью дифференцирования по спектру доказываются соотношения /3.1/. □

ЛИТЕРАТУРА

1. Загребнов В.А., Папоян Вл.В. В кн.: III Международный симпозиум по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. ОИЯИ, Д17-84-850, Дубна, 1984, с. 301.
2. Боголюбов Н.Н. Лекции по квантовой статистике. Избр. труды в трех томах. "Наукова думка", Киев, 1970, т.2.
3. Dingle R.B. Advances in Physics, 1952, 1, p.117.
4. Fraser A.R. The Philosophical Magazine, 1951, 42, No.325, p.156;165.
5. Ziff R.M., Uhlenbeck G.E., Kac M. Phys.Rep., 1977, 32C, No.4, p.169.
6. Griffiths R.B. In: Phase Transition and Critical Phenomena. (Ed. by C.Domb and M.S.Green). Academic Press, N.Y., 1972, vol.1.
7. Angelescu N., Nenciu G., Tonchev N.S. JINR, E17-82-798, Dubna, 1982, p.1.
8. Katsura S. Prog.Theor.Phys., 1955, vol.13, p.571.
9. Ширяев А.Н. Вероятность. "Наука", М., 1980.
10. Пастур Л.А. ТМФ, 1971, 6, № 3, с.415.
11. Лифшиц И.М., Гредескул С.А., Пастур Л.А. Введение в теорию неупорядоченных систем. "Наука", М., 1982.
12. Шубин М.А. УМН, 1979, 34, № 2, с.95.
13. Bratteli O., Robinson D.W. Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics. Springer Verlag, New York, 1981, vol.2.

14. Schubert G. Z.Naturforsch., 1947, 2a, p.250.
15. Dingle R.B. Proc.Camb.Phil.Soc., 1949, 45, p.275.
16. De Smedt Ph. Thermodynamical and Dynamical Properties of Bose Systems. Ph.D. Thesis, Katholicke Universiteit Leuven, 1983.
17. Robinson D.W. Comm.Math.Phys., 1976, 50, p.53.
18. Landau L.J., Wilde I.F. Comm.Math.Phys., 1979, 70, p.43.
19. Рюэль Д. Статистическая механика. Строгие результаты. "Мир", М., 1971.
20. Van den Berg M. J.Math.Phys., 1982, 23, No.6, p.1159.
21. Van den Berg M., Lewis J.T. Physica, 1982, 110A, p.550.
22. Халфина А.М. Матем.сборник, 1969, 80, № 1, с.3.
23. Минлос Р.А., Халфина А.М. Изв.АН СССР, сер.матем., 1970, 34, № 5, с.1173.
24. Березин Ф.А., Синай Я.Г. Труды Моск.матем.об-ва, 1967, 17, с.197.
25. Dobrushin R.L. Existence of Phase Transitions in Models of a Lattice Gas. Proc.Fifth Berkeley Symposium Math. Stat. and Probl., 1967, III, p.73.
26. Минлос Р.А., Синай Я.Г. Труды Моск.матем.об-ва, 1968, 19, с.113.
27. Хуанг К. Статистическая механика. "Мир", М., 1966.
28. Толмачев В.В. Теория бозе-газа. Изд-во Моск.ун-та, М., 1969.
29. Исихара А. Статистическая физика. "Мир", М., 1973.
30. Angelescu N., Nenciu G. Comm.Math.Phys., 1973, 29, p.15.
31. Минлос Р.А., Повзнер А.Я. Труды Моск.матем.об-ва, 1967, 17, с.243.
32. Боголюбов Н.Н. /мл./ и др. Метод аппроксимирующего гамильтониана в статистической физике. Изд-во БАН, София, 1981.

Рукопись поступила в издательский отдел
30 мая 1985 года.