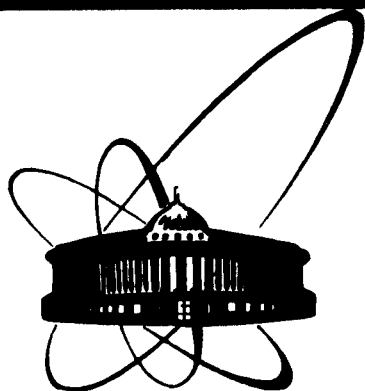


87-425



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-87-425

Вл.В. Папоян*

ПРОБЛЕМА ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ АНСАМБЛЕЙ
ДЛЯ МОДЕЛИ ХУАНГА - ЯНГА - ЛАТТИНДЖЕРА

*Ереванский государственный университет

1987

ВВЕДЕНИЕ

Работы Хуанга, Янга^{/1/} и Хуанга, Янга, Латтинджера^{/2/} открыли новый этап исследования бозе-газа твердых шаров. Уравнение Шредингера для этой модели /N-число частиц/ в сосуде $\Lambda \subseteq LR^V$, $V = |\Lambda|$ с периодическими граничными условиями записывается в виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \dots + \nabla_N^2) \Psi(\vec{\Gamma}_1, \dots, \vec{\Gamma}_N) = E \Psi(\vec{\Gamma}_1, \dots, \vec{\Gamma}_N),$$

$$|\vec{\Gamma}_i - \vec{\Gamma}_j| > a, \quad i \neq j, \quad i, j = 1, 2, \dots, N; \quad /1.1/$$

$$\Psi(\vec{\Gamma}_1, \dots, \vec{\Gamma}_N) = 0, \quad |\vec{\Gamma}_i - \vec{\Gamma}_j| \leq a \quad i, j = 1, 2, \dots, N, \quad (i \neq j).$$

В первом порядке теории возмущения оператор взаимодействия в этой системе принимает вид /в работах^{/1,2/} был использован метод псевдопотенциалов/:

$$H'_\Lambda = T_\Lambda + \frac{4\pi a \hbar^2}{mV} (N^2 - \frac{1}{2} \sum_i n_i^2),$$

/1.2/

$$\frac{a}{v^{1/2}} \ll 1; \quad |\vec{k}| a \ll 1 \quad (k^\alpha = \frac{2\pi}{V} \mathbf{s}^\alpha \mathbf{s} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N, \quad \alpha = x, y, z),$$

где T_Λ - самосопряженное расширение оператора кинетической энергии, n_i - число заполнения, v - удельный объем. Подробное обсуждение модели /1.2/ при помощи метода больших уклонений изложено в^{/3/}

Авторами^{/2/} было предложено следующее упрощение модели /1.2/:

$$H_\Lambda = T_\Lambda + \frac{4\pi a \hbar^2}{mV} (N^2 - \frac{1}{2} n_0^2), \quad /1.3/$$

так как при низких температурах основной вклад в притягивающую часть взаимодействия будут давать невозбужденные частицы, находящиеся в основном состоянии. В настоящей работе рассматривается модель неидеального бозе-газа, гамильтониан которой является более общим, чем /1.3/:

$$H_{\Lambda}^{\beta} = T_{\Lambda} + \frac{g}{2} \frac{N^2}{V} - \frac{\lambda}{2} \frac{n_0^2}{V}, \quad /1.4/$$

где $g \geq \lambda > 0$.

Замечание 1.1. Требование $g \geq \lambda$ обусловлено накладываемым на взаимодействие условием устойчивости $U^{\text{взаим}} \geq -BN$, где $B > 0$.

Замечание 1.2. В отличие от моделей с гамильтонианами /1.2/ и /1.3/ на константы g и λ , кроме условия устойчивости, нет никаких других ограничений. Предложенная выше модель лишь при определенных g и λ будет совпадать с аппроксимацией модели бозе-газа твердых шаров. Мотивировкой рассмотрения модели с гамильтонианом /1.4/ явился тот факт, что для идеального бозе-газа

включение отталкивающего взаимодействия $\frac{g}{2} \frac{N^2}{V}$ ($g > 0$) восстанавливало сильную эквивалентность канонического /КА/ и большого канонического ансамблей /БКА/ /4/.

Как повлияет на эквивалентность ансамблей включение притягивающего взаимодействия $-\frac{\lambda}{2} \frac{n_0^2}{V}$ ($\lambda > 0$) - вопрос, исследованию которого и посвящена настоящая работа.

2. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Рассмотрим модель бозе-газа в сосуде $\Lambda \subseteq \mathbb{R}^{\nu}$ ($|\Lambda| = V$), $\nu \geq 1$, гамильтониан которой имеет вид:

$$H_{\Lambda}^{\lambda} = T_{\Lambda} - \frac{\lambda}{2} \frac{n_0^2}{V}, \quad \lambda > 0. \quad /2.1/$$

Замечание 2.1. Модель с гамильтонианом /2.1/ неустойчива в БКА, $p^{\lambda}(\beta, \mu) = +\infty$ /см. также /4/ /.

Теорема 2.1. В КА для модели с гамильтонианом /2.1/ имеем

$$f_{\Lambda}^{\lambda}(\beta, \rho) = \text{tlim} f_{\Lambda}^{\lambda}(\beta, \rho) = -\frac{\lambda}{2} \bar{\xi}^2 \rho^2 + f_0(\beta, \rho(1 - \bar{\xi})), \quad /2.2/$$

$$\bar{\xi} = \begin{cases} 0; & \rho \leq \rho_c^{\lambda} \\ \xi^* = \max\{\xi_1, \xi_2\}; & \rho > \rho_c^{\lambda}, \end{cases}$$

где $f_0(\beta, \rho)$ - плотность свободной энергии идеального бозе-газа, а $\{\xi_1, \xi_2\}$ - корни уравнения

$$\lambda \xi \rho + \frac{\partial f_0(u)}{\partial u} \Big|_{u=\rho(1-\xi)} = 0, \quad /2.3/$$

т.е. в этой модели имеется бозе-конденсация с критическим параметром:

$$\rho_c^{\lambda} = \begin{cases} \rho_c^0 & \text{при } \nu \geq 5, \lambda \leq \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0} \\ \rho^* < \rho_c^0 & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

где ρ_c^0 - критическая плотность, при которой в идеальном бозе-газе начинается бозе-эйнштейновская конденсация, а ρ^* - решение уравнения

$$f_0(\rho) + \frac{\lambda}{2} \xi^* \rho^2 - f_0(\rho(1 - \xi^*)) = 0. \quad /2.4/$$

Доказательство. Из следствия /2.2/ /4/ получаем

$$f^{\lambda}(\beta, \rho) = \inf_{\xi > 0} [-\frac{\lambda}{2} \xi^2 \rho^2 + f_0(\beta, \rho(1 - \xi))], \quad /2.5/$$

где $\xi = \text{tlim} \langle \frac{n_0}{N} \rangle (\beta, \rho)$. Исследуем функцию $F(\xi) = -\frac{\lambda}{2} \xi^2 \rho^2 + f_0(\rho(1 - \xi))$; найдем те $\bar{\xi}$, при которых $F(\xi)$ имеет наименьшее значение. Для этого рассмотрим уравнение $\frac{dF(\xi)}{d\xi} = 0$ /т.е.

задачу нахождения максимума и минимума/, что равносильно уравнению /2.3/.

Замечание 2.2. При $\rho \leq \rho_c^0$ и $2 < \nu < 5$ уравнение /2.3/, начиная с некоторого $\bar{\rho}$, может иметь два корня ξ_1, ξ_2 , отличных от нуля, так как для $2 < \nu < 5$ при $\xi \rightarrow 0$ $\frac{\partial^2 f(u)}{\partial u^2} \Big|_{u=\rho(1-\xi)} \rightarrow 0$. Существование этих решений показано на рис.1.

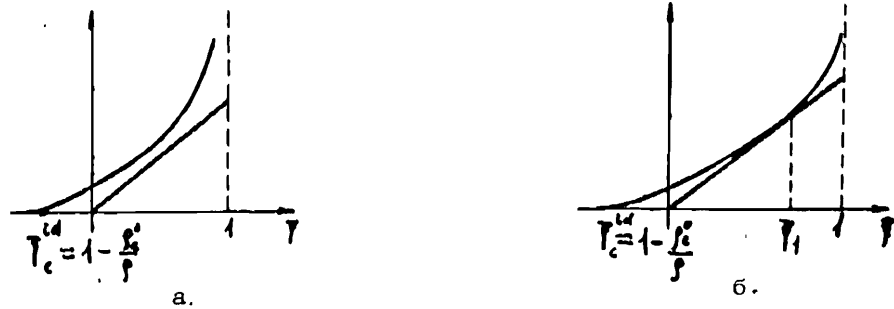


Рис.1. Графическое решение уравнения /2.3/ при $\rho < \rho_c^0$, $\nu < 5$ а - плотность ρ мала и нет корней; б - $\rho = \bar{\rho}$ существует один корень; в - $\rho > \bar{\rho}$ существуют два корня, отличных от нуля. Пунктиром показан случай $1 \leq \nu \leq 2$. $\text{tg } \alpha_1 = \lambda$,

$$\text{а } \text{tg } \alpha_2 = \rho \frac{\partial^2 f_0(u)}{\partial u^2} \Big|_{u=\rho(1-\xi)} \text{ из-за пересечения } \lambda < \frac{\partial^2 f_0(u)}{\partial u^2} \Big|_{u=\rho(1-\bar{\xi})}$$

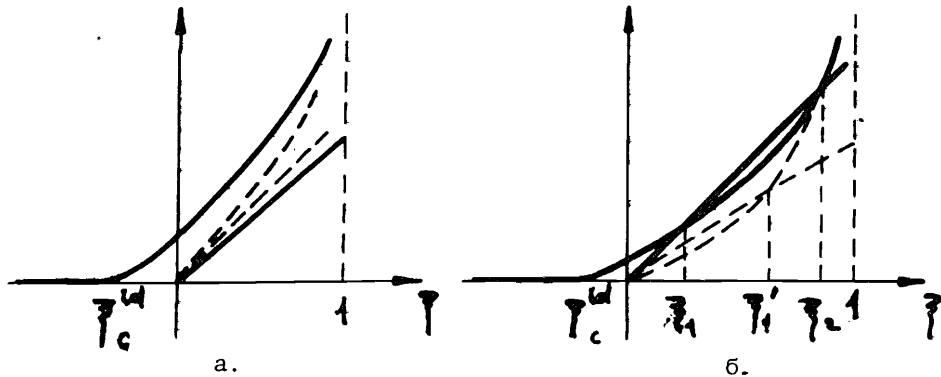
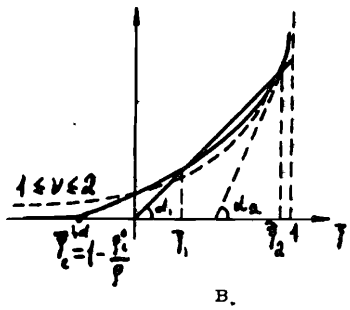


Рис.2. Графическое решение уравнения /2.3/ при $\rho \leq \rho_c^0$, $\nu \geq 5$, пунктиром изображен случай $2 < \nu < 5$

$$\text{а. } \lambda \leq \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0 - 0}, \quad \text{б. } \lambda > \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0 - 0}$$

Замечание 2.3. При $\rho \leq \rho_c^0$ и $\nu \geq 5$ для $\lambda \leq \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0 - 0}$

/для идеального бозе-газа вторая производная по ρ плотности свободной энергии $f_0(\rho)$ в точке ρ_c^0 терпит разрыв /5/. Уравнение /2.3/ не имеет отличных от нуля решений /см. рис.2а/, а при

$\lambda > \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0 - 0}$ уравнение /2.3/ имеет такие же решения, как

при $2 < \nu < 5$ /см рис.2б/.

Замечание 2.4. При $\rho > \rho_c^0$ и $\nu > 2$ уравнение /2.3/ имеет всегда один корень ξ^* , отличный от нуля /существование этого единственного корня обусловлено наличием бозе-конденсата у идеального бозе-газа для $\nu > 2$ /. Решение показано графически на рис.3.

Решения уравнения /2.3/ как функции ρ изображены на рис.4.

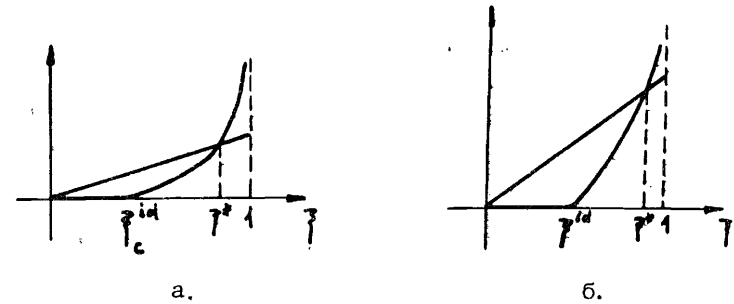


Рис.3. Графическое решение уравнения /2.3/ при $\rho > \rho_c^0$, $\nu > 2$. а. $2 < \nu < 5$; б. $\nu \geq 5$;

Функция $F(\bar{\xi})$ при $2 < \nu < 5$ для $\rho \leq \bar{\rho}$, т.е. тогда, когда уравнение /2.3/ не имеет корней или имеет один корень $\rho = \bar{\rho}$, достигает своего наименьшего значения при $\xi = 0$, что видно из рис.5. Для $\bar{\rho} < \rho \leq \rho_c^0$, т.е. тогда, когда мы имеем два решения ξ_1, ξ_2 уравнения /2.3/ $\xi^* = \max\{\xi_1, \xi_2\}$, будет соответствовать точке, в которой $F(\xi)$ имеет минимум, так как $\frac{\partial F(\xi)}{\partial \xi} \rightarrow \infty$ при $\xi \rightarrow 1$. Замечаем, что для $\rho = \rho^*$, $F(\xi^*) = F(0)$ /см. уравнение 2.4 и рис.6б/, для $\rho < \rho^*$, $F(\xi^*) > F(0)$ /рис.6а/; в этих случаях $\xi = 0$, а при $\rho > \rho^*$, $F(\xi^*) < F(0)$ /рис.6в/ и $\xi = \xi^*$.

Для $\nu \geq 5$ и $\lambda > \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0 - 0}$. Поведение $F(\xi)$ при $\rho \leq \rho_c^0$

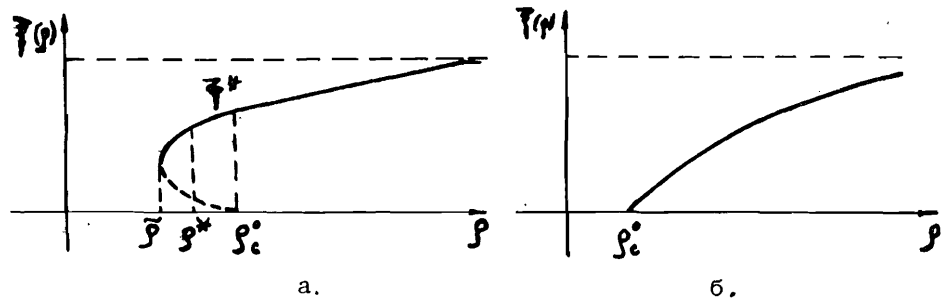


Рис.4. Решение уравнения /2.3/ как функции ρ .

а. $1 \leq \nu < 5; \nu \geq 5, \lambda > \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0} - 0$. Ветвь

$\xi_1(\rho)$ изображена пунктиром, ξ_1 соответствуют $\max F(\xi)$.

б. $\nu \geq 5, \lambda \leq \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0} - 0$.

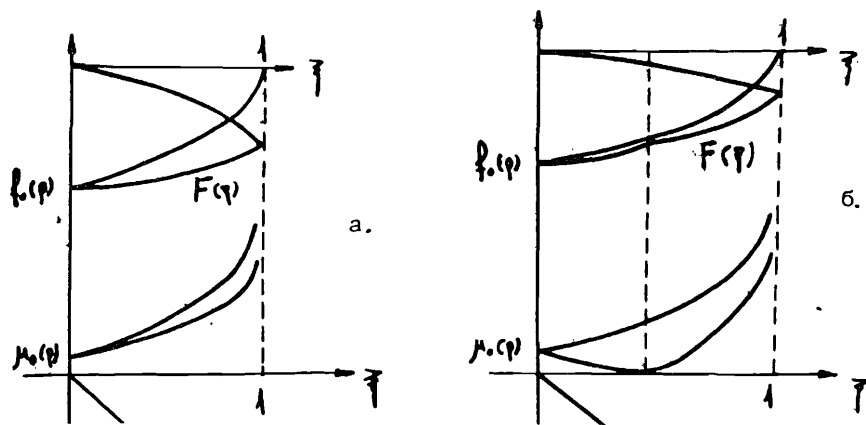


Рис.5. Функция $F(\xi)$ и соответствующие производные для

$\rho \leq \rho_c^0, 1 \leq \nu < 5$ и $\nu \geq 5, \lambda > \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0} - 0$.

а. $\rho < \tilde{\rho}$, уравнение /2.3/ не имеет корней также и для $\nu \geq 5, \lambda \leq \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0} - 0$. б. $\rho = \tilde{\rho}$, уравнение в этой точке имеет перегиб.

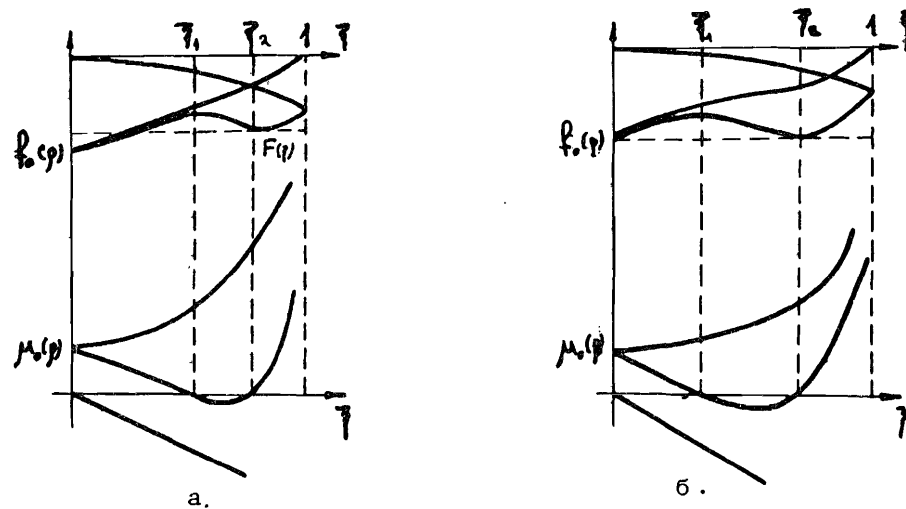


Рис.6. Функция $F(\xi)$ и соответствующие производные для $\tilde{\rho} < \rho \leq \rho_c^0$ при

$1 \leq \nu < 5$ и $\nu > 5, \lambda > \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0} - 0$

- а. $\rho < \rho^*, F(\xi^*) > F(0), \xi^- = 0$,
- б. $\rho = \rho^*, F(\xi^*) = F(0), \xi^- = 0$,
- в. $\rho > \rho^*, F(\xi^*) < F(0), \xi^- = \xi^*$,

будет таким же, как описано выше, так как в этом случае у уравнения /2.3/ существуют два ненулевых решения ξ_1, ξ_2 /см. замечание 2.3/. В то время как для $\nu \geq 5$

и $\lambda \leq \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0} - 0$, уравнение /2.3/ не имеет корней, отличных от нуля при $\rho < \rho_c^0$, и поэтому $F(\xi)$ достигает своего наименьшего значения при $\xi = 0$. Из замечания 2.4 и того факта, что $\partial_\xi F(\xi)$ при $\xi \rightarrow 1$, следует, что для $\rho > \rho_c^0$ и $\nu > 2, \xi^*$ - решение уравнения /2.3/ соответствует точке минимума функции $F(\xi)$ и, как видно из рис.7, $F(\xi)$ достигает наименьшего значения в точке $\xi = \xi^*$.

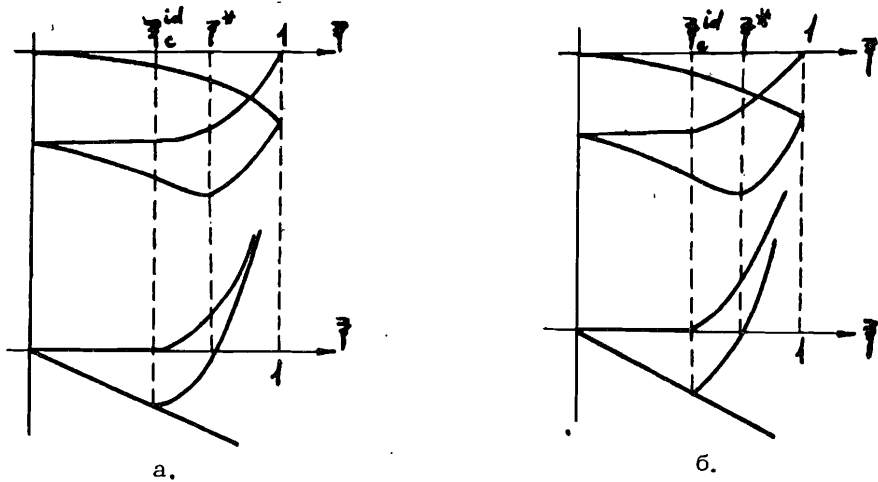


Рис.7. Функция $F(\xi)$ и соответствующие производные для $\rho > \rho_c^0$, $\nu > 2$. а. $2 < \nu < 5$; б. $\nu \geq 5$.

Замечание 2.5. В отличие от идеального бозе-газа, при $1 \leq \nu \leq 2$ в рассматриваемой модели имеется бозе-конденсация. В самом деле, для $1 \leq \nu \leq 2$ уравнение /2.3/ может иметь два корня ξ_1, ξ_2 , отличных от нуля /рис.1в/ и, аналогично случаю $2 < \nu < 5$ и $\rho \leq \rho_c^0$, $F(\xi)$ при $\rho > \rho^*$ достигает своего наименьшего значения в точке $\xi = \xi^* = \max\{\xi_1, \xi_2\}$, такое поведение $F(\xi)$ изображено на рис.5, 6.

Для полного завершения доказательства теоремы осталось показать, что $\rho^* < \rho_c^0$. Это на самом деле так, потому что ситуация, при которой уравнение /2.3/ имеет два отличных от нуля решения, возможна только при

$$1 \leq \nu < 5$$

$$\rho < \rho_c^0 \text{ и } \left\{ \begin{array}{l} \nu \geq 5, \lambda > \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0} - 0. \end{array} \right.$$

В случае, когда $\nu \geq 5$ и $\lambda < \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0} - 0$, бозе-эйнштейнов-

ская конденсация в модели с гамильтонианом /2.1/ начинается при критической плотности ρ_c^0 , как и у идеального бозе-газа: $\xi = \xi^*$ отлично от нуля только при $\rho > \rho_c^0$, так как для $\rho \leq \rho_c^0$ уравнение /2.3/ не имеет корней. □

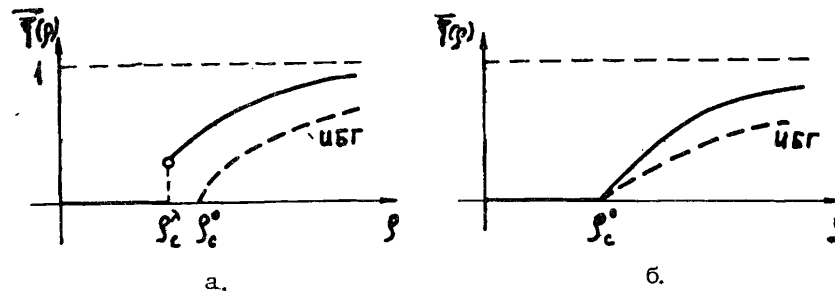


Рис.8. Функция $\bar{\xi}(\rho)$, пунктиром изображена функция $\bar{\xi}^{id}(\rho)$ для идеального бозе-газа $\xi^{id}(\rho) = 1 - \frac{\rho_c^0}{\rho}$.

$$\text{а. } 1 \leq \nu < 5, \text{ и } \nu \geq 5, \lambda > \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0} - 0$$

$$\text{б. } \nu \geq 5, \lambda \leq \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0} - 0$$

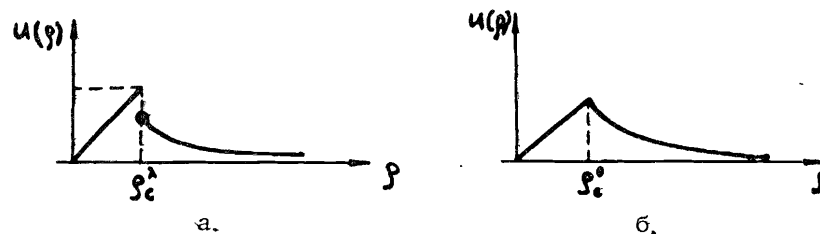


Рис.9. Функция $u(\rho) = \rho(1 - \bar{\xi}(\rho))$, а. $1 \leq \nu < 5$,

$$\text{и } \nu \geq 5, \lambda > \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0} - 0, \text{ б. } \nu \geq 5, \lambda < \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0} - 0.$$

Замечание 2.6. Функции $\bar{\xi}(\rho)$ и $u(\rho) = \rho(1 - \bar{\xi}(\rho))$ непрерывны в случае $\nu \geq 5, \lambda \leq \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho \rightarrow \rho_c^0} - 0$ и терпят разрыв в точке

ρ_c^λ в остальных случаях.

Поведение $\bar{\xi}(\rho)$ и $u(\rho)$ изображено на рис.8 и 9. Замечаем, что для $\rho > \rho_c^\lambda$

$$\frac{\partial u}{\partial \rho} = \frac{\lambda}{\lambda - \frac{\partial^2 f_0(u)}{\partial u^2} \Big|_{u=\rho(1-\bar{\xi})}} < 0,$$

так как $\lambda < \frac{\partial^2 f_0(u)}{\partial u^2} \Big|_{u=\rho(1-\bar{\xi})}$. Это видно из рис.1в, 2 и 3

/в точке $\bar{\xi}$ уравнение /2.3/ имеет корни/. При $\lambda \rightarrow 0$, $\bar{\xi}(\rho) \rightarrow \bar{\xi}^{id} = 1 - \frac{\rho_c^0}{\rho}$, а при $\rho \rightarrow \infty$ $\bar{\xi}(\rho) \rightarrow 1$, $u(\rho) \rightarrow 0$.

Следствие 2.1. $f^\lambda(\rho)$ - невыпуклая функция ρ при $\rho > \rho_c^\lambda$

$$\frac{d^2 f^\lambda(\rho)}{d\rho^2} = \frac{\lambda \frac{\partial^2 f_0(u)}{\partial u^2} \Big|_{u=\rho(1-\bar{\xi})}}{\lambda - \frac{\partial^2 f_0(u)}{\partial u^2} \Big|_{u=\rho(1-\bar{\xi})}} < 0. \quad /2.5/'$$

Следствие 2.2. Термодинамическая /слабая/ эквивалентность ансамблей КА и БКА для модели с гамильтонианом /2.1/ нарушается, так как в БКА $p^\lambda(\beta, \mu) = +\infty$, а в КА

$$\text{tlim}_\Lambda f^\lambda_\Lambda(\beta, \rho) = f^\lambda(\beta, \rho).$$

Вернемся к модели неидеального бозе-газа в сосуде $\Lambda \subseteq \mathbb{R}^V$ $\nu \geq 1$, $|\Lambda| = V$, предложенной в пункте 1

$$H_\Lambda^g = T_\Lambda + \frac{g}{2} \frac{N^2}{V} - \frac{\lambda}{2} \frac{n_0^2}{V} \quad (g \geq \lambda > 0). \quad /2.6/$$

В КА, так как $N = \text{const}$, и согласно теореме 2.1, имеем

$$\text{tlim}_\Lambda f_\Lambda^g(\beta, \rho) = f^g(\beta, \rho) = \frac{g}{2} \rho^2 - \frac{\lambda}{2} \rho^2 \bar{\xi}^2 + f_0(\beta, \rho(1-\bar{\xi})). \quad /2.7/$$

Замечание 2.7. В БКА, в отличие от модели с гамильтонианом /2.1/, из-за устойчивости модели /2.6/ ($g \geq \lambda$, см. замечание 1.1/ термодинамический предел давления $p_\Lambda^g(\beta, \mu)$ существует и конечен

$$\text{tlim}_\Lambda p_\Lambda^g(\beta, \mu) = p^g(\beta, \mu) = \sup_\rho [\mu \rho - f^g(\beta, \rho)]. \quad /2.8/$$

Замечание 2.8. Плотность свободной энергии $f^g(\beta, \rho)$ в точках ρ_1 и ρ_2 меняет выпуклость. В самом деле,

$$\frac{d^2 f^g(\rho)}{d\rho^2} = g + \frac{d^2 f^\lambda(\rho)}{d\rho^2} \begin{cases} \geq 0; & \rho \leq \rho_1 \\ < 0; & \rho_1 < \rho < \rho_2 \\ \geq 0; & \rho \geq \rho_2. \end{cases}$$

где точки перегиба $\rho_1 = \rho_c^\lambda$, а ρ_2 - решение уравнения

$$\frac{g\lambda}{g-\lambda} = \frac{\partial^2 f_0(u)}{\partial u^2} \Big|_{u=\rho(1-\bar{\xi})}.$$

Замечание 2.9. В рассматриваемой модели бозе-газа с гамильтонианом /2.6/ при $\rho = \rho_c^\lambda$ начинается макроскопическое заполнение основного состояния - бозе-эйнштейновская конденсация,

так как $\bar{\xi}(\rho) = \text{tlim} \langle \frac{n_0}{N} \rangle(\beta, \rho) = \xi^* \neq 0$ (ξ^* и ρ_c^λ определены в теореме 2.1/.

3. ПРОБЛЕМА ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ АНСАМБЛЕЙ

Теорема 3.1. Для модели неидеального бозе-газа с гамильтонианом /2.6/ нарушена слабая /термодинамическая/ эквивалентность ансамблей /КА и БКА/.

Доказательство: Из свойства преобразования Лежандра, а именно - преобразование Лежандра любой функции выпукло, и из замечания 2.8 следует утверждение теоремы 3.1.

$$f^g(\beta, \rho) \neq \bar{f}^g(\beta, \rho) = \sup_\mu [\mu \rho - p^g(\beta, \mu)], \quad /3.1/$$

где $p^g(\beta, \rho)$ определено в /2.8/.

Замечание 3.1. В силу свойств преобразования Лежандра /2.8/ и /3.1/ $\bar{f}^g(\beta, \rho) = f^*(\beta, \rho)$, где $f^*(\beta, \rho)$ есть наименьшая выпуклая огибающая /8.7/, т.е. построение Максвелла $f^g(\beta, \rho)$ /см.рис.10/; здесь для $f^*(\beta, \rho)$ имеем

$$f^*(\beta, \rho) = \begin{cases} f^g(\beta, \rho) & \rho < \rho_{c_1}^g, \quad \rho > \rho_{c_2}^g \\ \mu_c \rho - p_c & \rho_{c_1}^g \leq \rho \leq \rho_{c_2}^g. \end{cases} \quad /3.2/$$

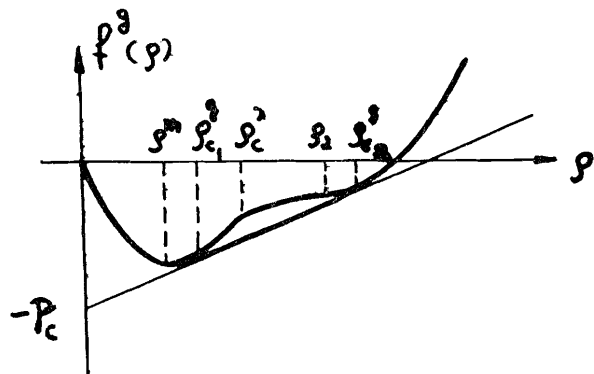


Рис.10. Плотность свободной энергии $f^g(\beta, \rho)$ и наименьшая выпуклая огибающая /общая касательная/.

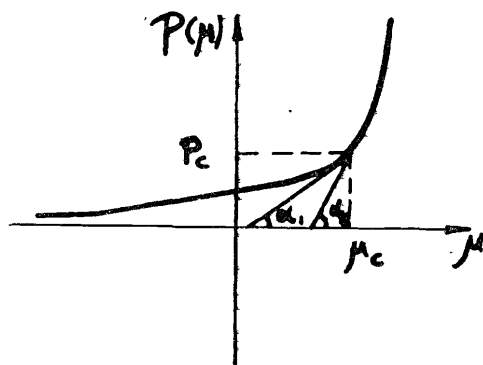


Рис.11. Давление $p(\beta, \mu)$.

$$\operatorname{tg} \alpha_1 = \rho_{c_1}^g, \quad \operatorname{tg} \alpha_2 = \rho_{c_2}^g.$$

Прямая $\mu_c \rho - p_c$ - общая касательная к $f^g(\beta, \rho)$, проходящая через точки $f^g(\rho_{c_1}^g)$ и $f^g(\rho_{c_2}^g)$, μ_c - точка излома $p^g(\mu)$,

$p_c = p^g(\mu_c)$ /рис.11/, а точки $\rho_{c_1}^g$ и $\rho_{c_2}^g$ определяются следующим образом:

$$\rho_{c_1}^g = \left. \frac{\partial p(\mu)}{\partial \mu} \right|_{\mu \rightarrow \mu_c - 0}; \quad \rho_{c_2}^g = \left. \frac{\partial p(\mu)}{\partial \mu} \right|_{\mu \rightarrow \mu_c + 0}. \quad /3.3/$$

Замечание 3.2. Из-за наличия плоского участка у $\bar{f}^g(\beta, \rho)$

и поведения $\bar{\mu}(\beta, \rho) = \partial_\rho f^g(\beta, \rho)$ /рис.12/ в предложенной модели бозе-газа /2.6/ имеется фазовый переход первого рода. Прежде чем перейти к рассмотрению вопроса о сильной эквивалентности ансамблей, докажем следующую лемму.

Лемма 3.1. Термодинамический предел $\langle \frac{N}{V} \rangle_\Lambda(\beta, \mu)$ в БКА существует и имеет вид:

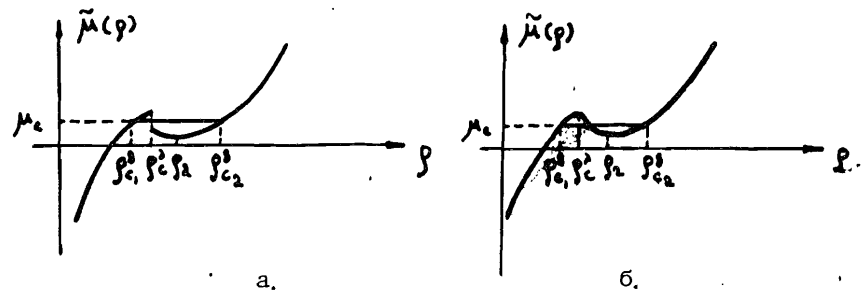


Рис.12. $\bar{\mu}(\rho)$ химический потенциал как функция ρ .

$$\begin{aligned} \text{а. } 1 \leq \nu < 5 \quad \text{и } \nu \geq 5, \lambda > \left. \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \right|_{\rho \rightarrow \rho_c^g} - 0 \\ \text{б. } \nu \geq 5, \lambda \leq \left. \frac{\partial^2 f_0(\rho)}{\partial \rho^2} \right|_{\rho \rightarrow \rho_c^g} - 0. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \lim \langle \frac{N}{V} \rangle_\Lambda(\beta, \mu) = \bar{\rho}(\beta, \mu) = \begin{cases} \partial_\mu p(\mu); & \mu < \mu_c, \mu > \mu_c, \\ \tau \rho_{c_1}^g + (1 - \tau) \rho_{c_2}^g; & \mu = \mu_c, \end{cases} \quad /3.4/ \end{aligned}$$

где $0 \leq \tau \leq 1$.

Доказательство. В однофазных областях, т.е. для $\mu < \mu_c$

и $\mu > \mu_c$ точка $\bar{\rho}(\beta, \mu) = \partial_\mu p(\beta, \mu)$ соответствует максимуму функции $F(\rho) \equiv \mu \rho - f^g(\beta, \rho)$ и выполняются соотношения /2.8/ и /3.1/, тогда имеем /3.4а/.

В области фазового перехода, т.е. для $\mu = \mu_c$, следуя обобщенной концепции квазисредних /8,9/, рассмотрим систему с гамильтонианом

$$H_\Lambda^g(h_\Lambda) = T_\Lambda + \frac{g}{2} \frac{N^2}{V} - \frac{\lambda}{2} \frac{n_0^2}{V} + h_\Lambda N. \quad /3.5/$$

где $h_\Lambda = \frac{\delta}{V^a}$, $a > 0$, $\delta = \text{const}$ /при $V \rightarrow \infty$ (t-lim) эта система

будет соответствовать исходной с гамильтонианом /2.6/. Тогда для $\bar{\rho}(\beta, \mu)$ имеем

$$\bar{\rho}(\beta, \mu) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sum_{N=0}^{\infty} \frac{N}{V} e^{\beta V[(\mu - h_{\Lambda}) \frac{N}{V} - f_{\Lambda}^g(\frac{N}{V})]}}{\sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta V[(\mu - h_{\Lambda}) \frac{N}{V} - f_{\Lambda}^g(\frac{N}{V})]}} \quad /3.6/$$

Заменив в /3.6/ суммы на соответствующие интегралы Стильтьеса, получим

$$\bar{\rho}(\beta, \mu) = \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \frac{\int_0^{\infty} \rho e^{\beta V[(\mu - h_{\Lambda}) \rho - f_{\Lambda}^g(\rho)]} \Gamma(d\rho)}{\int_0^{\infty} e^{\beta V[(\mu - h_{\Lambda}) \rho - f_{\Lambda}^g(\rho)]} \Gamma(d\rho)},$$

где $\Gamma(d\rho)$ - некая мера, перейдем к интегралам Римана

$$\bar{\rho}(\beta, \mu) = \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \frac{\int_0^{\infty} \rho e^{\beta V[(\mu - h_{\Lambda}) \rho - f_{\Lambda}^g(\rho)]} \times d\rho + O(\frac{1}{V^{\gamma}})}{\int_0^{\infty} e^{\beta V[(\mu - h_{\Lambda}) \rho - f_{\Lambda}^g(\rho)]} \times d\rho + O(\frac{1}{V^{\gamma}})}, \quad /3.7/$$

где $\gamma > 0$. Как известно из /10/, интегралы такого типа могут быть разложены в асимптотический ряд при помощи метода перевала; главный член асимптотики для интегралов Лапласа имеет вид

$$G(\Omega) \equiv \int_0^{\infty} g(z) \exp[\Omega S(z)] dz = \sum_{i=1}^k \sqrt{-\frac{2\pi}{\Omega S''(z_i)}} (g(z_i) + O(\Omega^{-1})) e^{\Omega S(z_i)}, \quad /3.8/$$

где параметр $\Omega \rightarrow \infty$, z_i - точка перевала, вырожденная k раз. Тогда применим /3.8/ к интегралам /3.7/ и учитывая, что точке перевала будут соответствовать $\rho_1(h_{\Lambda}) \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \rho_{c_1}^g$ и $\rho_2(h_{\Lambda}) \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \rho_{c_2}^g$ при $\mu = \mu_c$, имеем

$$\bar{\rho}(\beta, \mu_c) = \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \frac{A_1(h_{\Lambda}) e^{\beta V F_1(h_{\Lambda})} + A_2(h_{\Lambda}) e^{\beta V F_2(h_{\Lambda})} + O(\frac{1}{V^{\gamma}})}{B_1(h_{\Lambda}) e^{\beta V F_1(h_{\Lambda})} + B_2(h_{\Lambda}) e^{\beta V F_2(h_{\Lambda})} + O(\frac{1}{V^{\gamma}})}, \quad /3.9/$$

где введены следующие обозначения:

$$F_{1,2}(h_{\Lambda}) \equiv \mu_c \rho_{1,2}(h_{\Lambda}) - f_{\Lambda}^g(\rho_{1,2}(h_{\Lambda})),$$

$$A_{1,2}(h_{\Lambda}) \equiv a_{1,2}(h_{\Lambda}) [\rho_{1,2}(h_{\Lambda}) - O(\frac{1}{V})] e^{-\beta V \rho_{1,2}(h_{\Lambda}) \cdot h_{\Lambda}}$$

$$B_{1,2}(h_{\Lambda}) \equiv a_{1,2}(h_{\Lambda}) [1 - O(\frac{1}{V})] e^{-\beta V \rho_{1,2}(h_{\Lambda}) \cdot h_{\Lambda}} \quad /3.10/$$

$$a_{1,2}(h_{\Lambda}) \equiv \sqrt{\frac{1}{\left. \frac{d^2 F(\rho)}{d\rho^2} \right|_{\rho = \rho_{1,2}(h_{\Lambda})}}}$$

Замечаем, что

$$a_{1,2} = \lim_{\gamma \rightarrow \infty} a_{1,2}(h_{\Lambda}) = \sqrt{\frac{1}{\left. \frac{d^2 F(\rho)}{d\rho^2} \right|_{\rho = \rho_{c_{1,2}}^g}}}, \quad /3.11/$$

Разложим функции $F_{1,2}(h_{\Lambda})$ в ряд Тейлора по малому параметру $h_{\Lambda} = \frac{\delta}{V^{\alpha}}$, тогда

$$F_{1,2}(h_{\Lambda}) = \mu_c \rho_{c_{1,2}}^g - f_{\Lambda}^g(\rho_{c_{1,2}}^g) + h_{\Lambda} \mu_c \frac{\partial \rho}{\partial \mu} \Big|_{\mu = \mu_c + \eta h_{\Lambda}} - h_{\Lambda} \left(\frac{\partial f^g(\rho)}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \mu} \right)_{\mu = \mu_c + \eta h_{\Lambda}},$$

где $0 \leq \eta \leq 1$; так как точки $\rho_{c_{1,2}}^g$ выбраны так, что

$$\rho_c = \mu_c \rho_{c_1}^g - f(\rho_{c_1}^g) = \mu_c \rho_{c_2}^g - f(\rho_{c_2}^g),$$

/см. замечание 3.1/, то

$$F_1(h_\Lambda) = F_2(h_\Lambda), \quad /3.12/$$

и для выражения /3.9/ имеем

$$\bar{\rho}(\beta, \mu_c) = \text{tlim} \frac{A_1(h_\Lambda) + A_2(h_\Lambda) + O(e^{-V})}{B_1(h_\Lambda) + B_2(h_\Lambda) + O(e^{-V})}. \quad /3.13/$$

Чтобы выполнить термодинамический предельный переход, рассмотрим 3 различных случая.

1. $a > 1$. Тогда, учитывая $h_\Lambda = \frac{\delta}{V^a}$, и то, что выражения

/3.10, 11, 13/ в пределе $V \rightarrow \infty$, имеем

$$\bar{\rho}(\beta, \mu_c) = \tau \rho_{c_1}^g + (1 - \tau) \rho_{c_2}^g, \quad /3.14/$$

где

$$\tau = \frac{a_1}{a_1 + a_2}. \quad /3.15/$$

2. $a = 1$. Опять-таки для /3.13/ в пределе $V \rightarrow \infty$ получаем /3.14/, но

$$\tau = \frac{a_1 e^{-\beta \delta \rho_{c_1}^g}}{a_1 e^{-\beta \delta \rho_{c_1}^g} + a_2 e^{-\beta \delta \rho_{c_2}^g}}. \quad /3.16/$$

3. $0 < a < 1$. Рассмотрим сначала $\delta > 0$, тогда выражение /3.13/ перепишем в виде

$$\bar{\rho}(\beta, \rho) = \text{tlim} \frac{A_1(h_\Lambda) \left(1 + \frac{A_2(h_\Lambda)}{A_1(h_\Lambda)}\right) + O(e^{-V})}{B_1(h_\Lambda) \left(1 + \frac{B_2(h_\Lambda)}{B_1(h_\Lambda)}\right) + O(e^{-V})} =$$

$$\begin{aligned} &= \text{tlim} \frac{A_1(h_\Lambda) \left(1 + \frac{a_2(h_\Lambda)(\rho_2(h_\Lambda) + O(\frac{1}{V}))}{a_1(h_\Lambda)(\rho_1(h_\Lambda) + O(\frac{1}{V}))}\right) e^{-\beta \delta V^{1-a}(\rho_2(h_\Lambda) - \rho_1(h_\Lambda))} + O(e^{-V})}{B_1(h_\Lambda) \left(1 + \frac{a_2(h_\Lambda)(1 + O(\frac{1}{V}))}{a_1(h_\Lambda)(1 + O(\frac{1}{V}))}\right) e^{-\beta \delta V^{1-a}(\rho_2(h_\Lambda) - \rho_1(h_\Lambda))} + O(e^{-V})} \\ &= \text{tlim} \frac{A_1(h_\Lambda)(1 + O(e^{-V^{1-a}})) + O(e^{-V})}{B_1(h_\Lambda)(1 + O(e^{-V^{1-a}})) + O(e^{-V})} = \rho_{c_1}^g. \end{aligned}$$

Здесь существенным является тот факт, что $\rho_2(h_\Lambda) > \rho_1(h_\Lambda)$. Когда же $\delta < 0$, выражение /3.13/ можно переписать в виде

$$\bar{\rho}(\beta, \mu_c) = \text{tlim} \frac{A_2(h_\Lambda) \left(1 + \frac{A_1(h_\Lambda)}{A_2(h_\Lambda)}\right) + O(e^{-V})}{B_2(h_\Lambda) \left(1 + \frac{B_1(h_\Lambda)}{B_2(h_\Lambda)}\right) + O(e^{-V})},$$

и аналогично случаю, когда $\delta > 0$, учитывая $\rho_2(h_\Lambda) > \rho_1(h_\Lambda)$, получаем

$$\bar{\rho}(\beta, \mu_c) = \rho_{c_2}^g \quad (\delta < 0),$$

т.е. опять имеем выражение /3.14/, но

$$\tau = \begin{cases} 0 & \delta < 0, \\ 1 & \delta > 0. \end{cases} \quad /3.17/$$

Замечание 3.3. При доказательстве леммы 3.1, а именно, в случаях 1 и 2 был использован несколько иной метод введения квазисредних, который отличается от обычного способа одновременным стремлением h_Λ к нулю и выполнении термодинамического предела, в то время как при обычном способе выполняется сперва термодинамический предельный переход, а затем h_Λ устремляется к нулю /случай 3/. Подробно обобщенный метод квазисредних изложен в /9/.

Теорема 3.2. Сильная /статистическая/ эквивалентность ансамблей /КА и БКА/ нарушена в области фазового перехода $\mu = \mu_c$ ($\rho_{c_1}^g \leq \rho \leq \rho_{c_2}^g$), и функция плотности Каца /4,5/ для модели /2.6/ имеет вид

$$K_{\beta, \mu}(x|\rho) = \begin{cases} \delta(x - \bar{\rho}(\beta, \mu)); & \mu > \mu_c, \quad \mu < \mu_c, \\ \tau \delta(x - \rho_{c_1}^g) + (1 - \tau) \delta(x - \rho_{c_2}^g); & \mu = \mu_c, \end{cases}$$

где τ определено в лемме 3.1.

Доказательство. Из определения функции плотности Каца /4,5/ следует, что ее характеристическая функция для модели /2.6/ имеет вид

$$\Phi_{\Lambda}(t) = \langle e^{it \frac{N}{V}} \rangle_{\Lambda}(\beta, \mu) = \frac{\sum_{N=0}^{\infty} e^{it \frac{N}{V}} e^{\beta v [\mu \frac{N}{V} - r_{\Lambda}^g(\frac{N}{V}, \beta)]}}{\sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta v [\mu \frac{N}{V} - r_{\Lambda}^g(\frac{N}{V}, \beta)]}} \quad /3.18/$$

Применяя к суммам /3.18/ те же рассуждения, что и к суммам /3.6/, имеем для $\mu < \mu_c$ и $\mu > \mu_c$

$$\Phi(t) = \lim_{\Lambda} \Phi_{\Lambda}(t) = e^{it \bar{\rho}(\beta, \mu)}, \quad /3.19/$$

а для $\mu = \mu_c$

$$\Phi(t) = \tau e^{i \psi_{c_1}^g} + (1 - \tau) e^{i \psi_{c_2}^g}, \quad /3.20/$$

где τ определяются выражениями /3.15-17/. Перейдем от характеристической функции к функциям плотности Каца, получаем утверждение теоремы 3.2.

Следствие 3.1. Предельные гиббсовские состояния при $\mu = \mu_c$ являются линейной комбинацией крайних точек $\rho_{c_1}^g$ и $\rho_{c_2}^g$.

Замечание 3.4. В рассмотренной модели неидеального бозе-газа /2.6/, так же как и у идеального бозе-газа, имеется фазовый переход 1-го рода /плоский участок на $\rho - v$ диаграмме/.

Но в отличие от идеального бозе-газа, за счет притяжения $-\frac{\lambda}{2} \frac{n_0^2}{V}$ в модели /2.6/ нарушается не только сильная /статистическая/, но и слабая /термодинамическая/ эквивалентность КА и БКА.

В заключение я выражаю искреннюю благодарность В.А.Загребнову за постановку задачи и ценные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Huang K., Yang C.N. - Phys.Rev., 1957, 105, p.767.
2. Huang K., Yang C.N. Lattinger J.M. - Phys.Rev., 1957, 105, p.776.
3. Van der Berg M., Lewis J.T., Pule J.V. - DIAS-STP-86-11, 1.
4. Загребнов В.А., Папоян Вл.В. - ТМФ, 1986, 69, № 3, с.420.
5. Ziff R.M., Uhlenbeck G.K., Kac M. - Phys.Rep., 1977, 32C, No.4, p.169.
6. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1978, т.1.
7. Lebowitz J.L., Penrose O. Journal of Mathematical Physics, 1966, 7, No.1, p.98.
8. Боголюбов Н.Н. Избранные труды в трех томах "Наукова думка", Киев, 1971, т.3, с.174.
9. Бранков Й.Г., Загребнов В.А., Тончев Н.С. - ТМФ, 1986, № 1, с.109.
10. Федорюк М.В. Метод перевала. М.: Наука, 1977, гл.11.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 июня 1987 года.

**ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Папоян Вл.В.
Проблема эквивалентности ансамблей
для модели Хуанга - Янга - Латтинджера

P17-87-425

Рассматривается обобщенная модель Хуанга - Янга - Латтинджера бозе-газа твердых шаров. Изучены термодинамические свойства этой модели. Показано, что в точке фазового перехода /первого рода/ для этой системы нарушена не только статистическая /сильная/, но и термодинамическая /слабая/ эквивалентность канонического и большого канонического ансамблей, а предельные равновесные состояния являются выпуклыми комбинациями двух крайних точек /чистых фаз/.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Բաբոյան Վլ.Վ.
The Problem of Equivalence of Ensembles
for the Huang - Yang - Lattinger Model

P17-87-425

A generalization of the Huang - Yang - Lattinger model of a Bose gas of hard spheres is considered; and thermodynamic properties of the model are studied. It is shown that at a phase-transition point (of the first order) in that system, statistical (strong) and thermodynamic (weak) equivalences of canonical and grand canonical ensembles are both broken, and limit equilibrium states are linear convex combinations of two extreme points (pure phases).

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987