сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-88-377 e

В.А.Загребнов, Дж.Т.Льюис*, Ж.В.Пуле*

ПРИНЦИП БОЛЬШИХ УКЛОНЕНИЙ ДЛЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КАЦА

* Дублинский институт перспективных исследований, Ирландия

1988

§ I. Введение

В 1971 году Кац открыл, что для идеального бозе-газа канонический и большой канонический ансамбли не являются вполне эквивалентными, хотя приводят к одному и тому же уравнению состояния. Это выражается в том, что для плотностей больше критической распределение плотности числа частиц в большом ансамбле не является асимптотически вырожденным. Для стандартной модели идеального бозе-газа это распределение имеет экспоненциальный вид и является безгранично делимым. Подробное обсуждение всех этих аспектов поведения идеального бозе-газа содержится в работах [1] и [2]. Следуя введенной там терминологии, мы будем называть функцию распределения для плотности числа частиц в большом ансамбле распределением Каца.

Кац предполагал, что нарушение сильной эквивалентности ансамблей (см. [2]) является патологическим свойством идеального бозе-газа, которое должно исчезнуть при включении сколь угодно малого отталкивающего взаимодействия между частицами. Для проверки этой идеи Дэвис [3] детально исследовал модель среднего поля для неидеального бозе-газа и доказал, что распределение Каца является асимптотически вырожденным, если потенциал среднего поля является строго выпуклой функцией. В работе [4] было доказано утверждение, из которого следует, что распределение Каца является асимптотически вырожденным, если плотность свободной энергии системы существует в термодинамическом пределе и является строго выпуклой функцией плотности числа частиц. С другой стороны, часто бывает необходимо знать скорость, с которой происходит сходимость к асимптотическому распределению,- это проблема больших уклонений.

В статистической механике эту проблему удобнее всего решать, следуя Варадану [5], подход которого позволяет существенно обобщить метод Лапласа. Этот подход кратко изложен в § 2. Эллис [6] использовал его для исследования классических решеточных систем. Для моделей взаимодействующего бозе-газа этот подход был использован в работе [7], а в работе [8] - для квантовых спиновых систем. В § 2 настоящей работы мы докажем, что распределение Каца удовлетворяет принципу больших уклонений только при условии существования плотности свободной энергии, т.е. без требования её строгой выпуклости. Это - обобщение результата работы [4]. В § 3 мы дадим отличное от [7] доказательство того, что распределение Каца для идеального бозе-газа удовлетворяет принципу больших уклонений в формулировке Варадана. Утверждение, доказанное в § 2, применимо к моделям среднего поля, даже когда соответствующий потенциал является невыпуклым. В этом случае плотность свободной энергии (вычисленная в каноническом ансамбле) также может быть невыпуклой функцией: нарушение слабой эквивалентности ансамблей [2]. Тем не менее распределение Каца удовлетворяет принципу больших уклонений, несмотря на то, что функция уклонений невыпукла. Примеры таких функций уклонений приведены Эллисом [6], см. также [9].

Чтобы проиллюстрировать ситуацию, которая возникает в случае невыпуклой функции уклонений в § 3, мы рассмотрим модель Дэвиса [3]. В §4 мы детально исследуем возможные асимптотические распределения Каца в этом случае и структуру фаз для этой модели.

Один из нас (Дж. Т.Л.) благодарен Лаборатории теоретической физики ОИЯИ за гостеприимство, которое позволило подготовить первую версию этой работы.

§ 2. Принцип больших уклонений

Центральным утверждением этой теории является теорема Варадана [5], определяющая асимптотическое поведение интегралов по последовательности вероятностных мер, удовлетворяющих принципу больших уклонений, и распространяющая метод Лапласа на бесконечномерные пространства. Даже в случае одномерного пространства подход Варадана имеет преимущества по сравнению с методом Лапласа: он применим к более широкому классу мер и функций, интегрируемых по этим мерам.

Пусть $\mathbb{E}$ – полное сепарабельное метрическое пространство и $\{K_\ell\}_{\ell=1}^{\infty}$ – последовательность вероятностных мер на борелевских множествах, принадлежащих $\mathbb{E}$. Пусть $\{V_\ell\}_{\ell=1}^{\infty}$ – сходящаяся к бесконечности последовательность положительных чисел: $V_\ell \to \infty$ при $\ell \to \infty$.

Определение 2.I. Последовательность вероятностных мер $\{K_\ell\}_{\ell=1}^{\infty}$ удовлетворяет принципу больших уклонений с константами $\{V_\ell\}_{\ell=1}^{\infty}$ и функцией уклонений $I(\cdot)$, если существует отображение $I: \mathbb{E} \to \mathbb{R}^1_+$, такое, что

(БУ 1) функция $I(\cdot)$ полунепрерывна снизу на $\mathbb{E}$;

(БУ 2) для каждого $m < \infty$ множество $\{x \in \mathbb{E} : I(x) \leqslant m\}$ образует компакт в $\mathbb{E}$;

(БУ 3) для каждого замкнутого множества $C \subset \mathbb{E}$ имеем

$$\limsup_{\ell\to\infty} \frac{1}{V_\ell} \ln K_\ell[C] \leqslant -\inf_{C} I(x) ;$$

(БУ 4) для каждого открытого множества $D \subset \mathbb{E}$ имеем

$$\liminf_{\ell\to\infty} \frac{1}{V_\ell} \ln K_\ell[D] \geqslant -\inf_{D} I(x) .$$

Наиболее подходящим для приложений в статистической механике является следующий вариант теоремы Варадана.

Предложение I. Пусть последовательность вероятностных мер $\{K_\ell[dx]\}_{\ell=1}^{\infty}$ на $\mathbb{E}$ удовлетворяет принципу больших уклонений с константами $\{V_\ell\}_{\ell=1}^{\infty}$ и функцией уклонений $I(\cdot)$. Пусть $G: \mathbb{E} \to \mathbb{R}^1$ является непрерывной функцией, которая ограничена сверху на множестве $\bigcup_{\ell\geqslant 1} \operatorname{supp} K_\ell$. Тогда

$$\lim_{\ell\to\infty} \frac{1}{V_\ell} \ln \int_{\mathbb{E}} K_\ell[dx] \exp\{V_\ell G(x)\} = \sup_{x\in\mathbb{E}} [G(x) - I(x)] .$$

В работе [4] идеи Варадана не использовались, в тот момент авторы не были с ними знакомы. Сейчас мы перестроим рассуждения в доказательстве основной теоремы работы [4] с учетом предложения I, что позволит нам, в конечном счете, упростить доказательство основной теоремы работы [7], касающейся идеального бозе-газа.

Пусть $\{f_\ell\}_{\ell=1}^{\infty}$ – последовательность функций $f_\ell : [0,\infty) \to \mathbb{R}^1$, таких, что $f_\ell(0) = 0$. Давление $p_\ell(\mu)$ в большом каноническом ансамбле определяется через $f_\ell(\rho)$ (плотность свободной энергии в каноническом ансамбле) с помощью соотношения

$$p_\ell(\mu) = \frac{1}{\beta V_\ell} \ln \int_0^\infty m_\ell[dx] \exp\{\beta V_\ell(\mu x - f_\ell(x))\} ,$$

где мера $m_\ell[dx]$ определяется на каждом борелевском множестве $A \subset [0,\infty)$ следующим образом:

$$m_\ell[A] = \sum_{n\geqslant 0} \delta_{n/V_\ell}[A] \quad , \quad \delta_x[A] = \begin{cases} 1 & x \in A \\ 0 & x \notin A \end{cases} ,$$

а $\{V_\ell\}_{\ell=1}^{\infty}$ – последовательность положительных констант: $V_\ell \to \infty$, $\ell\to\infty$. Для каждого μ, такого, что $p_\ell(\mu)$ конечно, распределение Каца $K_\ell^\mu[\cdot]$ определяется следующим образом:

$$K_\ell^\mu[A] = \int_A m_\ell[dx] \exp\{\beta V_\ell(\mu x - f_\ell(x) - p_\ell(\mu))\} \qquad (2.I)$$

для произвольного борелевского множества $A \subset [0,\infty)$.

Теперь мы готовы доказать следующую теорему:

Теорема I. Допустим, что на каждом компакте $K \subset [0,\infty)$ последовательность $\{f_\ell(x)\}_{\ell=1}^{\infty}$ полуограничена снизу и равномерно сходится к полунепрерывной снизу функции f. Пусть μ_∞ определено следующим образом:

$$\mu_\infty = \lim_{\ell\to\infty} \left(\liminf_{x\to\infty} \left\{ \frac{1}{x} \inf_{k\geqslant \ell} f_\ell(x) \right\} \right) .$$

Тогда для каждого $\mu<\mu_\infty$ термодинамический предел для давления в большом каноническом ансамбле: $p(\mu)=\lim_{\ell\to\infty} p_\ell(\mu)$ существует и является преобразованием Лежандра функции f :

$$p(\mu)=f^*(\mu)\stackrel{def}{=}\sup_{x\geq 0}\{\mu x-f(x)\}.$$

Кроме того, последовательность распределений $\{K_\ell^\mu\}_{\ell=1}^\infty$ удовлетворяет принципу больших уклонений с константами $\{V_\ell\}_{\ell=1}^\infty$ и функцией уклонений $I^\mu(x)$, которая равна

$$I^\mu(x)=p(\mu)+f(x)-\mu x .$$

<u>Доказательство</u>. Пусть $g_\ell(x)=\mu x-f_\ell(x)$ и $g(x)=\mu x-f(x)$, тогда

$$p_\ell(\mu)=\frac{1}{\beta V_\ell}\ln\int_0^\infty m_\ell[dx]\exp\{\beta V_\ell g_\ell(x)\}.$$

Выберем a такое, что $\mu<a<\mu_\infty$, и m так, чтобы

$$\lim_{x\to\infty}\inf\left\{\frac{1}{x}\inf_{k\geq m} f_k(x)\right\}>a .$$

Тогда существует x_1 такое, что $f(x)>ax$ для всех $x>x_1$ и $\ell\geq m$. Следовательно, $g_\ell(x)<-(a-\mu)x$ для всех $x>x_1$ и $\ell>m$, и $g(x)\leq-(a-\mu)x$ для $x>x_1$. Однако $g(0)=0$. Поэтому

$$\sup_{[0,\infty)} g(x)=\sup_{[0,x_1]} g(x).$$

Заметим теперь, что $g(x)$ полунепрерывна сверху и полуограничена сверху на компактах, так что $\sup_{[0,x_1]} g(x)$ достигается в некоторой точке $x_0\in[0,x_1]$ и

$$f^*(\mu)=\sup_{[0,\infty)} g(x)=g(x_0)<\infty .$$

Кроме того, для $\varepsilon>0$ существует $\delta>0$ такое, что $g(x_0)-g(x)<\frac{\varepsilon}{2}$ для $x\in[x_0-\delta,x_0+\delta]$. В силу равномерности сходимости $\{f_\ell(x)\}_{\ell\geq 1}$ на компактах $K\subset[0,\infty)$ существует m' такое, что для всех $\ell>m'$ $g(x)-g_\ell(x)<\varepsilon/2$ для всех $x\in[x_0-\delta,x_0+\delta]$. Таким образом, для всех достаточно больших ℓ имеем

$$\int_0^\infty m_\ell[dx]\exp\{\beta V_\ell g_\ell(x)\}>\int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta} m_\ell[dx]\exp\{\beta V_\ell g_\ell(x)\}>\exp\{\beta V_\ell(g(x_0)-\varepsilon)\},$$

поскольку сегмент $[x_0-\delta,x_0+\delta]$ содержит по крайней мере одну точку из множества $\{n/V_\ell\}_{n\geq 0}$. Поскольку $\varepsilon>0$ произвольно, то получаем

$$\lim_{\ell\to\infty}\inf\frac{1}{\beta V_\ell}\ln\int_0^\infty m_\ell[dx]\exp\{\beta V_\ell g_\ell(x)\}\geq g(x_0).$$

С другой стороны, для всех достаточно больших ℓ имеем оценку

$$\int_0^\infty m_\ell[dx]\exp\{\beta V_\ell g_\ell(x)\}<\exp\{\beta V_\ell[g(x_0)+\varepsilon]\}\int_0^{x_1} m_\ell[dx]+$$
$$+\int_{x_1}^\infty m_\ell[dx]\exp\{-\beta V_\ell(A-\mu)x\}\leq\exp\{\beta V_\ell(g_\ell(x_0)+\varepsilon)\}\left[(V_\ell x_1+1)+\right.$$
$$\left.+\{1-\exp(-\beta(A-\mu))\}^{-1}\exp\{-\beta V_\ell(\varepsilon+(A-\mu)x_1+g(x_0))\}\right].$$

Поэтому (в силу того, что $g(x_0)\geq 0$ и $(A-\mu)x_1>0$) получаем

$$\lim_{\ell\to\infty}\sup\frac{1}{\beta V_\ell}\ln\int_0^\infty m_\ell[dx]\exp\{\beta V_\ell g_\ell(x)\}\leq g(x_0)+\varepsilon ,$$

что в силу произвольности $\varepsilon>0$ и доказывает теорему для давления. Рассмотрим теперь свойства последовательности $\{K_\ell^\mu\}_{\ell\geq 1}$. Свойство (БУ1) является следствием полунепрерывности снизу отображения $x\mapsto f(x)$. Далее, для каждого $m<\infty$ множество $L_m=\{x\in\mathbb{E} : I^\mu(x)\leq m\}$ замкнуто. Для $x\in L_m$ имеем

$$f(x)\leq m-p(\mu)+\mu x .$$

С другой стороны, мы показали, что $f(x)\geq ax$, если $x>x_1$. Тогда либо $x\leq x_1$, либо $x\leq[m-p(\mu)]/(a-\mu)$, так что множество L_m ограничено и выполняется свойство (БУ2). Для замкнутого множества $C\subset\mathbb{E}$ и заданного $\varepsilon>0$ для всех достаточно больших ℓ и всех $x_2\in(0,\infty)$ имеем оценку

$$K_\ell^\mu[C]\leq\exp\{\beta V_\ell[\sup_{C\cap[0,x_2]} g(x)+\varepsilon-p_\ell(\mu)]\}\int_{C\cap[0,x_2]} m_\ell[dx]+$$
$$+\int_{C\cap[x_2,\infty)} m_\ell[dx]\exp\{-\beta V_\ell(a-\mu)x\}.$$

Поскольку $\sup_{C\cap[0,x_2]} g(x)\leq\sup_C g(x)$, то для всех достаточно больших ℓ получаем

$$K_\ell^\mu[C]\leq\exp\{\beta V_\ell[\sup_C g(x)+\varepsilon-p_\ell(\mu)]\}\left[(V_\ell x_2+1)+\right.$$
$$\left.+\exp\{-\beta V_\ell[\sup_C g(x)+\varepsilon+(A-\mu)x_2]\}\{1-\exp[-\beta(A-\mu)]\}^{-1}\right].$$

Выберем теперь $x_1\leq x_2$ такие, что $\sup_C g(x)+(a-\mu)x_2\geq 0$. Тогда

$$\lim_{\ell\to\infty}\sup\frac{1}{\beta V_\ell}\ln K_\ell^\mu[C]\leq-p(\mu)+\sup_C g(x)=-\inf_C I^\mu(x),$$

что доказывает (БУ3). Пусть теперь $D\subset[0,\infty)$ - произвольная открытая область и $\gamma\in D$. Для $\varepsilon>0$ выберем δ такое, что $(\gamma-\delta,\gamma+\delta)=$

$= B^{\delta}_{\gamma} \subset D$ и $g(\gamma)-g(x)<\varepsilon/2$ для всех $x\in B^{\delta}_{\gamma}$.
Это возможно, поскольку функция g полунепрерывна сверху. Тогда для достаточно больших ℓ имеем

$$K^{\mu}_{\ell}[D]\geq K^{\mu}_{\ell}[B^{\delta}_{\gamma}]=\int_{B^{\delta}_{\gamma}} m_{\ell}[dx]\exp\{\beta V_{\ell}[g_{\ell}(x)-p_{\ell}(\mu)]\}\geq$$

$$\geq m_{\ell}[B^{\delta}_{\gamma}]\exp\{\beta V_{\ell}[g_{\ell}(\gamma)-\varepsilon-p_{\ell}(\mu)]\}.$$

Множество B^{δ}_{γ} содержит по крайней мере одну точку из множества $\{n/V_{\ell}\}_{n\geq0}$, т.е. $m_{\ell}[B^{\delta}_{\gamma}]\geq1$. Поэтому

$$\liminf_{\ell\to\infty}\frac{1}{\beta V_{\ell}}\ln K^{\mu}_{\ell}[D]\geq -p(\mu)+g(\gamma)=-I^{\mu}(\gamma).$$

Поскольку это неравенство имеет место для каждой точки D, то

$$\liminf_{\ell\to\infty}\frac{1}{\beta V_{\ell}}\ln K^{\mu}_{\ell}[D]\geq\sup_{D}\left(-I^{\mu}(\gamma)\right)=-\inf_{D} I^{\mu}(\gamma),$$

что доказывает (БУ4). □

§ 3. Модель Дэвиса

Основным вероятным пространством для моделей бозонных систем, которые будут рассматриваться ниже, является пространство Ω конечных последовательностей неотрицательных целых чисел:

$$\Omega=\{\omega:\omega=(\omega_1,\omega_2,\dots),\ \omega_j\in\mathbb{N}_+,\ \sum_{j\geq1}\omega_j<\infty\}.$$

Основными случайными величинами являются числа заполнения $\sigma_j:\Omega\to\mathbb{N}_+$, $\{\sigma_j\}_{j=1}^{\infty}$, которые определяются следующим образом: $\sigma_j(\omega)=\omega_j$. Гамильтониан идеального бозе-газа H_{ℓ} в сосуде Λ_{ℓ} имеет вид

$$H_{\ell}(\omega)=\sum_{j\geq1}\lambda_{\ell}(j)\,\sigma_j(\omega),\qquad (3.1)$$

где $\{\lambda_{\ell}(j)\}_{j=1}^{\infty}$ – энергетический спектр одночастичной задачи, который с помощью сдвига всегда можно сделать начинающимся с нуля: $0=\lambda_{\ell}(1)\leq\lambda_{\ell}(2)\leq\dots$. Объем сосуда Λ_{ℓ} обозначим V_{ℓ}, в термодинамическом пределе последовательность $\{V_{\ell}\}_{\ell=1}^{\infty}$ неограниченно возрастает $V_{\ell}\to\infty$ при $\ell\to\infty$ и $\Lambda_{\ell}\uparrow\mathbb{R}^{d}$ (в смысле Фишера).

Чтобы сформулировать условия на последовательность $\{\lambda_{\ell}(j)\}_{\ell,j=1}^{\infty}$, введем функцию

$$\Phi_{\ell}(\beta)=\frac{1}{V_{\ell}}\sum_{j\geq1}\exp\{-\beta\lambda_{\ell}(j)\}.$$

Мы будем предполагать, что выполнены следующие условия:

(C1) предел $\Phi(\beta)=\lim_{\ell\to\infty}\Phi_{\ell}(\beta)$ существует для $\beta\in(0,\infty)$;
(C2) существует такое $\beta_0\in(0,\infty)$, что $\Phi(\beta_0)\neq0$.

Из этого следует [1,2], что последовательность функций распределения $\{F_{\ell}\}_{\ell=1}^{\infty}$, определенная соотношением

$$F_{\ell}(\lambda)=\frac{1}{V_{\ell}}\sum_{\lambda_{\ell}(j)<\lambda}1=\frac{1}{V_{\ell}}\operatorname{card}\{j:\lambda_{\ell}(j)<\lambda\},\qquad (3.2)$$

сходится при $\ell\to\infty$ (по крайней мере в точках непрерывности) к интегральной плотности состояний $F(\lambda)$, которая однозначно определяется своим преобразованием Лапласа $\Phi(\beta)=\int_0^{\infty}dF(\lambda)e^{-\beta\lambda}$ (слабая сходимость см. [10,11]). Критическая плотность ρ_c равна:

$$\rho_c=\begin{cases}\int_0^{\infty}dF(\lambda)(e^{\beta\lambda}-1)^{-1}, & (e^{\beta\lambda}-1)^{-1}\in L^1(\mathbb{R}^1_+,dF(\lambda))\\ \infty, & (e^{\beta\lambda}-1)^{-1}\notin L^1(\mathbb{R}^1_+,dF(\lambda)).\end{cases}$$

Случайная величина $N(\omega)=\sum_{j\geq1}\sigma_j(\omega)$ – это полное число частиц, соответствующее конфигурации $\omega\in\Omega$. Тогда статистическая сумма в каноническом ансамбле имеет вид

$$Z_{\ell}(n)=\begin{cases}1, & n=0\\ \sum_{\{\omega\in\Omega:N(\omega)=n\}}\exp\{-\beta H_{\ell}(\omega)\}, & n\geq1.\end{cases}\qquad (3.3)$$

Плотность свободной энергии $f_{\ell}:[0,\infty)\to\mathbb{R}^1$ определяется вначале только на множестве $\{n/V_{\ell}\}_{n\geq0}$ следующим образом: $f_{\ell}(\frac{n}{V_{\ell}})=-(\beta V_{\ell})^{-1}\ln Z_{\ell}(n)$. Затем она продолжается на всю полуось $[0,\infty)$ с помощью линейной интерполяции. Используя результаты работы [1] и методы, развитые в работе [10], можно доказать (см. Приложение) следующее утверждение.

Теорема 2. Пусть выполнены условия (C1) и (C2). Тогда на каждом компактном подмножестве из $[0,\infty)$ последовательность $\{f_{\ell}(x)\}_{\ell\geq1}$ равномерно сходится к выпуклой функции $f(x)$, удовлетворяющей условию $f(0)=0$, причем $\mu_{\infty}=0$.

Вместе с теоремой 1 из предыдущего параграфа это дает:

Следствие 1. Пусть выполнены условия (C1) и (C2). Тогда для каждого $\mu<0$ последовательность $\{K^{\mu}_{\ell}\}_{\ell=1}^{\infty}$ удовлетворяет принципу больших уклонений с константами $\{V_{\ell}\}_{\ell\geq1}$ и функцией уклонений $I^{\mu}(\cdot)$, которая имеет вид

$$I^{\mu}(x)=f^{*}(\mu)+f(x)-\mu x,\qquad (3.4)$$

где $f^{*}(\mu)=p(\mu)$.

$= B_\gamma^\delta \subset D$ и $g(\gamma)-g(x)<\varepsilon/2$ для всех $x\in B_\gamma^\delta$.
Это возможно, поскольку функция g полунепрерывна сверху. Тогда для достаточно больших ℓ имеем

$$K_\ell^\mu[D]\geq K_\ell^\mu[B_\gamma^\delta]=\int_{B_\gamma^\delta} m_\ell[dx]\exp\{\beta V_\ell[g_\ell(x)-p_\ell(\mu)]\}\geq$$

$$\geq m_\ell[B_\gamma^\delta]\exp\{\beta V_\ell[g_\ell(\gamma)-\varepsilon-p_\ell(\mu)]\}.$$

Множество B_γ^δ содержит по крайней мере одну точку из множества $\{n/V_\ell\}_{n\geq 0}$, т.е. $m_\ell[B_\gamma^\delta]\geq 1$. Поэтому

$$\liminf_{\ell\to\infty}\frac{1}{\beta V_\ell}\ln K_\ell^\mu[D]\geq -p(\mu)+g(\gamma)=-I^\mu(\gamma).$$

Поскольку это неравенство имеет место для каждой точки D, то

$$\liminf_{\ell\to\infty}\frac{1}{\beta V_\ell}\ln K_\ell^\mu[D]\geq \sup_D\left(-I^\mu(\gamma)\right)=-\inf_D I^\mu(\gamma),$$

что доказывает (БУ4). □

§ 3. Модель Дэвиса

Основным вероятным пространством для моделей бозонных систем, которые будут рассматриваться ниже, является пространство Ω конечных последовательностей неотрицательных целых чисел:

$$\Omega=\{\omega : \omega=(\omega_1,\omega_2,\dots),\omega_j\in\mathbb{N}_+,\sum_{j\geq 1}\omega_j<\infty\}.$$

Основными случайными величинами являются числа заполнения $\sigma_j:\Omega\to\mathbb{N}_+$, $\{\sigma_j\}_{j=1}^\infty$, которые определяются следующим образом: $\sigma_j(\omega)=\omega_j$. Гамильтониан идеального бозе-газа H_ℓ в сосуде Λ_ℓ имеет вид

$$H_\ell(\omega)=\sum_{j\geq 1}\lambda_\ell(j)\,\sigma_j(\omega), \tag{3.1}$$

где $\{\lambda_\ell(j)\}_{j=1}^\infty$ – энергетический спектр одночастичной задачи, который с помощью сдвига всегда можно сделать начинающимся с нуля: $0=\lambda_\ell(1)\leq\lambda_\ell(2)\leq\dots$. Объем сосуда Λ_ℓ обозначим V_ℓ, в термодинамическом пределе последовательность $\{V_\ell\}_{\ell=1}^\infty$ неограниченно возрастает $V_\ell\to\infty$ при $\ell\to\infty$ и $\Lambda_\ell\uparrow\mathbb{R}^d$ (в смысле Фишера).

Чтобы сформулировать условия на последовательность $\{\lambda_\ell(j)\}_{\ell,j=1}^\infty$, введем функцию

$$\Phi_\ell(\beta)=\frac{1}{V_\ell}\sum_{j\geq 1}\exp\{-\beta\lambda_\ell(j)\}.$$

Мы будем предполагать, что выполнены следующие условия:

(C1) предел $\Phi(\beta)=\lim_{\ell\to\infty}\Phi_\ell(\beta)$ существует для $\beta\in(0,\infty)$;
(C2) существует такое $\beta_0\in(0,\infty)$, что $\Phi(\beta_0)\neq 0$.

Из этого следует [1,2], что последовательность функций распределения $\{F_\ell\}_{\ell=1}^\infty$, определенная соотношением

$$F_\ell(\lambda)=\frac{1}{V_\ell}\sum_{\lambda_\ell(j)<\lambda}1=\frac{1}{V_\ell}\operatorname{card}\{j:\lambda_\ell(j)<\lambda\}, \tag{3.2}$$

сходится при $\ell\to\infty$ (по крайней мере в точках непрерывности) к интегральной плотности состояний $F(\lambda)$, которая однозначно определяется своим преобразованием Лапласа $\Phi(\beta)=\int_0^\infty dF(\lambda)e^{-\beta\lambda}$ (слабая сходимость см. [10,11]). Критическая плотность ρ_c равна:

$$\rho_c=\begin{cases}\int_0^\infty dF(\lambda)(e^{\beta\lambda}-1)^{-1}, & (e^{\beta\lambda}-1)^{-1}\in L^1(\mathbb{R}^1_+,dF(\lambda))\\ \infty, & (e^{\beta\lambda}-1)^{-1}\notin L^1(\mathbb{R}^1_+,dF(\lambda)).\end{cases}$$

Случайная величина $N(\omega)=\sum_{j\geq 1}\sigma_j(\omega)$ – это полное число частиц, соответствующее конфигурации $\omega\in\Omega$. Тогда статистическая сумма в каноническом ансамбле имеет вид

$$Z_\ell(n)=\begin{cases}1, & n=0\\ \sum_{\{\omega\in\Omega:N(\omega)=n\}}\exp\{-\beta H_\ell(\omega)\}, & n\geq 1.\end{cases} \tag{3.3}$$

Плотность свободной энергии $f_\ell:[0,\infty)\to\mathbb{R}^1$ определяется вначале только на множестве $\{n/V_\ell\}_{n\geq 0}$ следующим образом: $f_\ell(\frac{n}{V_\ell})=-(\beta V_\ell)^{-1}\ln Z_\ell(n)$. Затем она продолжается на всю полуось $[0,\infty)$ с помощью линейной интерполяции. Используя результаты работы [1] и методы, развитые в работе [10], можно доказать (см. Приложение) следующее утверждение.

Теорема 2. Пусть выполнены условия (C1) и (C2). Тогда на каждом компактном подмножестве из $[0,\infty)$ последовательность $\{f_\ell(x)\}_{\ell\geq 1}$ равномерно сходится к выпуклой функции $f(x)$, удовлетворяющей условию $f(0)=0$, причем $\mu_\infty=0$.

Вместе с теоремой 1 из предыдущего параграфа это дает:

Следствие 1. Пусть выполнены условия (C1) и (C2). Тогда для каждого $\mu<0$ последовательность $\{K_\ell^\mu\}_{\ell=1}^\infty$ удовлетворяет принципу больших уклонений с константами $\{V_\ell\}_{\ell\geq 1}$ и функцией уклонений $I^\mu(\cdot)$, которая имеет вид

$$I^\mu(x)=f^*(\mu)+f(x)-\mu x, \tag{3.4}$$

где $f^*(\mu)=p(\mu)$.

Может показаться удивительным, что мы получили этот результат, не используя специфических свойств бозе-газа, в то время как предыдущее доказательство этого результата в работе [7] существенно опиралось на некоторые тонкие факты о свойствах числа заполнения $\{\sigma_j\}_{j=1}^{\infty}$. Например, на тот факт, что в большом каноническом ансамбле это независимые случайные величины, распределенные по геометрическому закону. Поэтому имеет смысл обсудить этот момент подробнее.

Вероятностная (гиббсовская) мера P_ℓ^μ в большом каноническом ансамбле для конечной системы имеет вид

$$P_\ell^\mu[\omega] = \exp\{-\beta V_\ell p_\ell(\mu)\} \exp\{\beta[\mu N(\omega) - H_\ell(\omega)]\},$$

здесь $\mu < 0$. Отсюда следует, что

$$P_\ell^\mu[\sigma_j(\omega) \geq m] = \exp\{\beta m(\mu - \lambda_\ell(j))\} \quad . \tag{3.5}$$

Представляя случайную величину $N(\omega)$ в виде $\sigma_1(\omega) + (N-\sigma_1)(\omega)$ и используя (3.5), можно получить оценку снизу для $P_\ell^\mu[X_\ell(\omega) \in B_y^\delta]$, где $X_\ell(\omega) = N(\omega)/V_\ell$ и $y = E_\ell^\mu[X_\ell(\omega)]$. Эта оценка требовалась в работе [7] при доказательстве свойства (БУ4). Соотношение (3.5) в неявной форме присутствует и в доказательстве теоремы 2. Например, выпуклость функций $x \mapsto f_\ell(x)$ использовалась для доказательства равномерной сходимости последовательности $\{f_\ell(x)\}_{\ell\geq1}$ на компактах. Свойство выпуклости $f_\ell(x)$ эквивалентно неравенству $(Z_\ell(n))^n \geq Z_\ell(n+1) Z_\ell(n-1)$ для всех $n \geq 1$. Однако это эквивалентно утверждению о том, что $n \mapsto P_\ell^\mu[\sigma_j(\omega) \geq m \mid N(\omega) = n]$ – возрастающая функция [I0], поскольку

$$P_\ell^\mu[\sigma_j(\omega) \geq m \mid N(\omega) = n] = \begin{cases} \dfrac{Z_\ell(n-m)}{Z_\ell(n)} \exp\{-\beta m \lambda_\ell(j)\}, & m \leq n \\ 0, & m > n. \end{cases}$$

Следуя Дэвису [3], рассмотрим неидельный бозе-газ с гамильтонианом

$$\tilde{H}_\ell = H_\ell + V_\ell\, w(X_\ell) \quad . \tag{3.6}$$

Здесь H_ℓ – гамильтониан идеального бозе-газа (3.I) и $X_\ell(\omega) = N(\omega)/V_\ell$ – случайная величина, равная плотности числа частиц в сосуде Λ_ℓ. В отличие от Дэвиса мы потребуем только, чтобы функция $w : [0,\infty) \to \mathbb{R}^1$ была полунепрерывна снизу и удовлетворяла условиям [2]:

$$w(0) = 0, \quad \liminf_{x\to\infty} \frac{w(x)}{x} = +\infty \quad . \tag{3.7}$$

Пусть $\tilde{f}_\ell(x) \equiv f_\ell(x) + w(x)$, тогда

$$\tilde{f}_\ell\left(\frac{n}{V_\ell}\right) = -\frac{1}{\beta V_\ell} \ln \sum_{\{\omega\in\Omega : N(\omega)=n\}} \exp\{-\beta H_\ell(\omega)\} \quad . \tag{3.8}$$

Используя теорему 2 и условия (3.7), легко проверить, что последовательность $\{\tilde{f}_\ell\}_{\ell=1}^{\infty}$ удовлетворяет условиям теоремы I с $\mu_\infty = +\infty$. Поэтому с помощью теоремы 2 получаем следующее утверждение.

<u>Теорема 3</u>. Пусть выполнены условия (CI) и (C2) и гамильтониан (3.6) удовлетворяет условиям (3.7). Тогда:

(I) при всех $\mu < \infty$ давление (в большом каноническом ансамбле) для модели (3.6) существует в термодинамическом пределе $\tilde{p}(\mu) = \lim_{\ell\to\infty} \tilde{p}_\ell(\mu)$ и является преобразованием Лежандра $\tilde{f}^*(\mu)$ функции

$$\tilde{f}(x) = f(x) + w(x) \quad , \tag{3.9}$$

где $f(x)$ – плотность свободной энергии идеального бозе-газа; (2) последовательность $\{\tilde{K}_\ell^\mu\}_{\ell=1}^{\infty}$ распределений Каца определяется функциями $\{\tilde{f}_\ell(x)\}_{\ell=1}^{\infty}$ и удовлетворяет принципу больших уклонений с константами $\{V_\ell\}_{\ell\geq1}$ и функцией уклонений

$$\tilde{I}^\mu(x) = \tilde{p}(\mu) + \tilde{f}(x) - \mu x \quad . \tag{3.I0}$$

Из этого следует, что $\tilde{p}^* = \tilde{f}^{**} = \operatorname{conv} \tilde{f}$, где $\operatorname{conv} g$ обозначает минимальное выпуклое продолжение функции g. Следовательно, сегменты $[\tilde{p}'(\mu-0), \tilde{p}'(\mu+0)]$, соответствующие скачкам производной $\tilde{p}'(\mu)$, приводят к появлению линейных участков у функции $\operatorname{conv}\tilde{f}$. Это ещё раз указывает на то, что распределения $\{\tilde{K}_\ell^\mu\}_{\ell=1}^{\infty}$ будут асимптотически вырождены (т.е. вырождено предельное распределение $\lim_{\ell\to\infty} \tilde{K}_\ell^\mu = \tilde{K}^\mu$) лишь тогда, когда функция $w(x)$ строго выпукла [2,3].

§ 4. Термодинамический предел для распределения Каца и бозе-конденсация

В этом параграфе мы рассмотрим, к каким следствиям для термодинамического предела распределения Каца приводит невыпуклость функции $\tilde{f}(x)$. Для простоты мы рассмотрим случай, когда функция $\operatorname{conv}\tilde{f}$ имеет лишь один линейный участок $[\rho_-, \rho_+]$ и $\tilde{f}(x) \geq \operatorname{conv}\tilde{f}(x)$ для $x \in [\rho_-, \rho_+]$, см. рис. I. Из обсуждения этого простого случая становится ясно, как необходимо анализировать общий случай. Напомним [I,2], что распределение Каца в термодинамическом пределе $K^\mu = \lim_{\ell\to\infty} K_\ell^\mu$ определяет разложение предельного (гиббсовского) состояния $\langle - \rangle^{\mu}$, в большом каноническом ансамбле, на экстремальные (канонические) предельные состояния $\langle - \rangle_{\rho}$:

$$\langle - \rangle^{\mu} = \int_0^\infty K^{\mu}[d\rho]\langle - \rangle_{\rho} \; . \qquad (4.I)$$

В общем случае, если предел K^{μ} существует, носитель распределения K^{μ} принадлежит множеству $S_\mu=\{x\in\mathbb{R}^1: I^{\mu}(x)=0\}$. Однако, если S_μ содержит более чем одну точку, нет гарантии, что последовательность $\{K^{\mu}_{\ell}\}_{\ell=1}^{\infty}$ сходится (слабо) [II] . Тем не менее теорема Хелли о выборе (см. [II], Дополнение П) гарантирует секвенциальную компактность обобщенных функций распределения.

В нашем случае, когда $conv\,\tilde f(\rho)$ имеет лишь один линейный участок $[\rho_-,\rho_+]$, а $\tilde f$ не является выпуклой функцией, следует различать три различные возможности, которые определяются критической величиной химического потенциала μ_c . Она определяется из условия $\partial_\mu\tilde p(\mu_c-0)=\rho_-$ (и, следовательно, $\partial_\mu\tilde p(\mu_c+0)=\rho_+$), так что соответствует наклону линейного участка функции $conv\,\tilde f(\rho)$.

(I) $\mu<\mu_c:\ \tilde K^{\mu}_{\ell_k}[dx]\to\tilde K^{\mu}[dx]=\delta_{\tilde\rho(\mu)}(x)dx\ ,\ \tilde\rho(\mu)=\partial_\mu\tilde p(\mu)\,.$ (4.2)

(П) $\mu=\mu_c$: существует подпоследовательность $\{\ell_i\}_{i=1}^{\infty}$, такая, что предел $\lim\limits_{i\to\infty}\tilde K^{\mu_c}_{\ell_i}[dx]=\tilde K^{\mu_c}[dx]$ существует и равен

$$\tilde K^{\mu_c}[dx]=\{\alpha\,\delta_{\rho_-}(x)+(1-\alpha)\delta_{\rho_+}(x)\}dx\ ,\quad 0\le\alpha\le1\ . \qquad (4.3)$$

(Ш) $\mu>\mu_c:\ \tilde K^{\mu}_{\ell_k}[dx]\to\tilde K^{\mu}[dx]=\delta_{\tilde\rho(\mu)}(x)dx\ ,\ \tilde\rho(\mu)=\partial_\mu\tilde p(\mu)\,.$ (4.4)

Ниже мы подробно рассмотрим (и докажем) только (4.3). Доказательство (4.2) и (4.4) проводится аналогично.

Пусть ρ_0 таково, что $\rho_-<\rho_0<\rho_+$, $A_-=[0,\rho_0)$ и $A_+=[\rho_0,+\infty)$. Тогда $\{\tilde K^{\mu_c}_{\ell}[A_-]\}_{\ell=1}^{\infty}$ - ограниченная последовательность вещественных чисел, которая содержит сходящуюся подпоследовательность $\{\tilde K^{\mu_c}_{\ell_k}[A_-]\}_{k\ge1}$. Пусть $\lim\limits_{k\to\infty}\tilde K^{\mu_c}_{\ell_k}[A_-]=\alpha$, $0<\alpha<1$, тогда

$$\int_0^\infty \tilde K^{\mu_c}_{\ell_k}[dx]\exp(-tx)=$$

$$=\tilde K^{\mu_c}_{\ell_k}[A_-]\int_{A_-}L^-_k[dx]\exp(-tx)+\left(1-\tilde K^{\mu_c}_{\ell_k}[A_-]\right)\int_{A_+}L^+_k[dx]\exp(-tx),$$

где $L^-_k[dx]=\tilde K^{\mu_c}_{\ell_k}[dx\cap A_-]/\tilde K^{\mu_c}_{\ell_k}[A_-]$, $L^+_k[dx]=$ $=\tilde K^{\mu_c}_{\ell_k}[dx\cap A_+]/\tilde K^{\mu_c}_{\ell_k}[A_+]$.

Заметим теперь, что последовательности распределений $\{L^{\pm}_k\}_{k\ge1}$ удовлетворяют принципу больших уклонений с функциями уклонений, соответственно, $\tilde I^{\pm}$, где $\tilde I^{+}(\tilde I^{-})$ являются сужениями функции $\tilde I^{\mu_c}$ (3.I0) на A^+ (A^-) . Функция $\tilde I^-(\rho)$ имеет единственный минимум в точке ρ_- , а $\tilde I^+(\rho)$ - единственный минимум в точке ρ_+ . Поэтому

$$\lim_{k\to\infty}\int_0^\infty\tilde K^{\mu_c}_{\ell_k}[dx]\exp(-tx)=\alpha\exp(-t\rho_-)+(1-\alpha)\exp(-t\rho_+).$$

Следовательно, меры $\{\tilde K^{\mu_c}_{\ell_k}[dx]\}_{k\ge1}$ слабо сходятся к вероятностной мере

$$\{\alpha\,\delta_{\rho_-}(x)+(1-\alpha)\delta_{\rho_+}(x)\}dx\ .$$

Случаи (I) и (Ш) рассматриваются аналогично.

Рассмотрим подробнее, как в случае (П) величина параметра α в (4.3) зависит от выбора подпоследовательности $\{\ell_k\}_{k\ge1}$. Заметим, прежде всего, что метод квазисредних Боголюбова [I2] , примененный к вычислению термодинамического предела, для распределения Каца дает

$$\lim_{\mu\to\mu_c-0}\lim_{\ell\to\infty}\tilde K^{\mu}_{\ell}[dx]=\delta_{\rho_-}(x)dx\ ,\ \lim_{\mu\to\mu_c+0}\lim_{\ell\to\infty}\tilde K^{\mu}_{\ell}[dx]=\delta_{\rho_+}(x)dx\ . \qquad (4.5)$$

Для доказательства (4.5) воспользуемся тем, что из определения (2.I) распределения Каца следует

$$\int_0^\infty\tilde K^{\mu}_{\ell}[dx]\exp(-tx)=\exp\{\beta V_\ell[\tilde p_\ell(\mu-t/\beta V_\ell)-\tilde p_\ell(\mu)]\}\ . \qquad (4.6)$$

Поэтому для $\mu\ne\mu_c$ термодинамический предел в правой части (4.6) существует и равен $\exp(-t\tilde p'(\mu))=\exp(-t\tilde\rho(\mu))$. Поскольку левая часть (4.6) является характеристической функцией для меры $\tilde K^{\mu}_{\ell}[dx]$, то распределения $\{\tilde K^{\mu}_{\ell}\}_{\ell\ge1}$, для $\mu\ne\mu_c$, слабо сходятся (см. [II]) к вырожденному распределению, сосредоточенному в точке $x=\tilde\rho(\mu)$, т.е. $\lim\limits_{\ell\to\infty}\tilde K^{\mu}_{\ell}[dx]=\delta_{\tilde\rho(\mu)}(x)dx$. Поскольку в рассматриваемой модели имеется скачок плотности $\lim\limits_{\mu\to\mu_c\pm0}\tilde\rho(\mu)=\rho_\pm$, то это доказывает существование термодинамического предела (4.5) для распределений Каца в смысле квази-

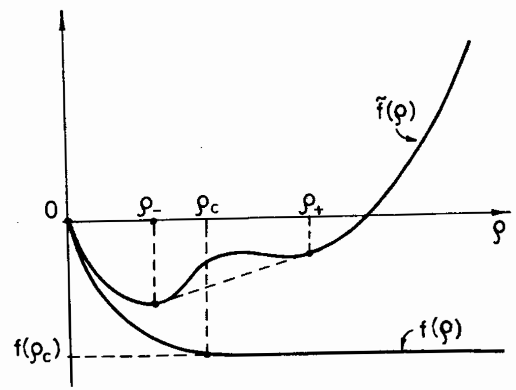

Рис.I

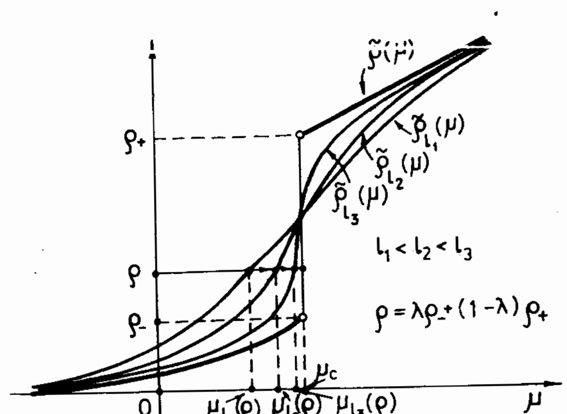

Рис.2

средних. Последнее, вместе с (4.I), означает, что в рассматриваемом нами варианте модели Дэвиса имеется лишь две чистые фазы $\langle - \rangle^{\mu}_{\pm}$, определяемые двумя ветвями плотности $\tilde{\rho}(\mu)$, начинающимися в ρ_- и ρ_+ при $\mu = \mu_c$, см. рис. 2. Таким образом, в этой модели для $\mu \neq \mu_c$ предельное состояние $\langle - \rangle^{\mu}$ единственно: $\langle - \rangle^{\mu \gtrless \mu_c} = \langle - \rangle^{\mu}_{\pm}$, и имеет место сильная эквивалентность канонического и большого канонического ансамблей [2] : $\langle - \rangle^{\mu} = \langle - \rangle_{\tilde{\rho}(\mu)}$, $\tilde{\rho}(\mu) = \partial_\mu \tilde{p}(\mu)$, $\mu \neq \mu_c$.

Для исследования точки $\mu = \mu_c$, где предельное состояние не является чистым,и анализа структуры смеси фаз необходимо воспользоваться обобщенным методом квазисредних, развитым в работах [I3] и [I4]. Основная идея заключается в инфинитезимальном, зависящем от некоторой степени объема V_ℓ сдвиге из точки μ_c : $\mu_\ell = \mu_c + \delta/\beta V_\ell^{\gamma}$, $\gamma > 0$.

Тогда характеристическую функцию распределения $K_\ell^{\mu_\ell}[dx]$ можно представить в виде

$$\int_0^\infty K_\ell^{\mu_\ell}[dx]\exp(-tx) = \frac{\int_0^\infty K_\ell^{\mu_c}[dx]\exp\{-(t-\delta V_\ell^{1-\gamma})x\}}{\int_0^\infty K_\ell^{\mu_c}[dx]\exp(\delta V_\ell^{1-\gamma}x)} . \quad (4.7)$$

Обратимся теперь к определению распределения Каца (2.I) для модели Дэвиса (3.6), т.е. $\tilde{K}_\ell^{\mu}[dx]$. Поскольку $\lim_{x\to\infty} w(x)/x = +\infty$, а $f(x) = \lim_{\ell\to\infty} f_\ell(x)$, то существуют такие достаточно большие числа B и ℓ_0, что для всех $x \geq B$ и $\ell \geq \ell_0$ имеем

$$\delta \cdot V_\ell^{\gamma-1} x + \beta V_\ell \{\mu_c x - w(x) - f_\ell(x)\} < -\beta V_\ell x \quad ,$$

так как $f_\ell(x) > -x$ для $x > B$ и $\ell > \ell_0$, см. рис. I . Тогда для $\ell > \ell_0$ получаем оценку

$$\int_B^\infty \tilde{K}_\ell^{\mu_c}[dx]\exp\{-(t-\delta\cdot V_\ell^{1-\gamma})x\} = \int_B^\infty m_\ell[dx]\exp\{-(t-\delta V_\ell^{1-\gamma})x\} \times$$
$$\times \exp\{\beta V_\ell(\mu_c x - w(x) - f_\ell(x) - \tilde{p}_\ell(\mu_c))\} \leqslant \int_B^\infty m_\ell[dx]\exp\{-(t+\beta V_\ell)x\} < \quad (4.8)$$
$$< \{1 - \exp[-(\beta + t/V_\ell)]\}^{-1} \exp\{-(t+\beta V_\ell)B\} .$$

Из оценки (4.8) следует, что для числителя в правой части (4.7) имеем

$$\lim_{\ell\to\infty}\int_0^\infty \tilde{K}_\ell^{\mu_c}[dx]\exp\{-(t-\delta V_\ell^{1-\gamma})x\} = \lim_{\ell\to\infty}\int_0^B \tilde{K}_\ell^{\mu_c}[dx]\exp\{-(t-\delta V_\ell^{1-\gamma})x\}. \quad (4.9)$$

Поскольку те же рассуждения справедливы и для знаменателя, то из (4.9) следует, что последовательность мер $\{\tilde{K}_\ell^{\mu_c}[dx]\}_{\ell\geq 1}$ образует плотное семейство, которое, в силу теоремы Прохорова (см. [II]), содержит слабо сходящиеся подпоследовательности $\{\tilde K^{\mu_{\ell_k}}_{\ell_k}[dx]\}_{k\ge1}$. Для параметризации всех сходящихся подпоследовательностей воспользуемся представлением (4.7) и приёмом, который уже был использован выше, см. (4.3).

Начнем с наиболее содержательного случая $\gamma=1$. Тогда из (4.3) и (4.7) получаем

$$\lim_{\ell_k\to\infty}\int_0^\infty \tilde K^{\mu_{\ell_k}}_{\ell_k}[dx]\exp(-tx)\equiv\int_0^\infty \tilde K^{\mu_c}_{\delta,\gamma=1}[dx]\exp(-tx)= \\ =\lambda_{\alpha,\delta}\exp(-t\rho_-)+(1-\lambda_{\alpha,\delta})\exp(-t\rho_+), \tag{4.10}$$

где

$$\lambda_{\alpha,\delta}=\frac{\alpha\exp(\delta\cdot\rho_-)}{\alpha\exp(\delta\cdot\rho_-)+(1-\alpha)\exp(\delta\cdot\rho_+)}. \tag{4.11}$$

Из (4.10) следует, что предельное состояние в точке $\mu=\mu_c$, полученное с помощью обобщенного метода квазисредних для показателя $\gamma=1$ и конечного δ, является смесью двух, выделяемых обычным методом квазисредних, чистых фаз $\langle-\rangle^{\mu_c}_{\pm}=\lim_{\mu\to\mu_c\pm0}\langle-\rangle^{\mu}=\langle-\rangle_{\rho_\pm}$:

$$\langle-\rangle^{\mu_c}_{\delta,\gamma=1}=\lambda_{\alpha,\delta}\langle-\rangle^{\mu_c}_{-}+(1-\lambda_{\alpha,\delta})\langle-\rangle^{\mu_c}_{+}, \\ \tilde K^{\mu_c}_{\delta,\gamma=1}[dx]=\{\lambda_{\alpha,\delta}\,\delta_{\rho_-}(x)+(1-\lambda_{\alpha,\delta})\,\delta_{\rho_+}(x)\}\,dx. \tag{4.12}$$

Для того чтобы фиксировать выбор параметров α и δ, заметим, что плотность числа частиц в большом каноническом ансамбле $\tilde\rho_\ell(\mu)=\tilde p'_\ell(\mu)$ для любого конечного ℓ является гладкой монотонной функцией μ. Поэтому для каждой фиксированной плотности ρ существует такая последовательность $\{\mu_\ell(\rho)\}_{\ell\ge1}$, что $\tilde\rho_\ell(\mu_\ell(\rho))=\rho$. Если $\rho_-\le\rho\le\rho_+$, то $\lim_{\ell\to\infty}\mu_\ell(\rho)=\mu_c$, см. рис. 2. Для $\mu_\ell=\mu_c+\delta/\beta V_\ell^\gamma$, $\gamma=1$, с помощью (4.12) получаем

$$\rho=\lim_{\ell_k\to\infty}\int_0^\infty \tilde K^{\mu_{\ell_k}}_{\ell_k}[dx]\,x=\lambda_{\alpha,\delta}\rho_-+(1-\lambda_{\alpha,\delta})\rho_+ .$$

Следовательно, с учетом (4.11) имеем

$$\frac{\rho_+-\rho}{\rho_+-\rho_-}=\frac{\alpha\exp(\delta\cdot\rho_-)}{\alpha\exp(\delta\cdot\rho_-)+(1-\alpha)\exp(\delta\cdot\rho_+)}. \tag{4.13}$$

Соотношение (4.13) устанавливает соответствие между ρ и α, δ:

$$\rho:[\rho_-,\rho_+]\to[0\le\alpha\le1]\times(-\infty<\delta<+\infty).$$

Это означает, что при фиксированном конечном δ и $\mu_\ell=\mu_c+\delta/\beta V_\ell$, подпоследовательность $\{\ell_k\}$, соответствующая плотности $\rho\in[\rho_-,\rho_+]$, выбирается фиксированием $A_-=[0,\rho_0)$ и сходящейся к $\alpha(\rho)$ подпоследовательности $\{\tilde K^{\mu_c}_{\ell_k}[A_-]\}_{k\ge1}$, так что выполняется равенство (4.13). В частности, $\lambda_{\alpha,\delta}=0$ соответствует $\rho<\rho_-$, а $\lambda_{\alpha,\delta}=1$ – выбору $\rho_0>\rho_+$. Наоборот, для фиксированного нетривиального множества

$A_-=[0,\rho_0)$, $\rho_-<\rho_0<\rho_+$ и произвольной подпоследовательности $\tilde K^{\mu_c}_{\ell_k}[A_-]\to\alpha>0$, при $\ell_k\to\infty$, изменения параметра смешивания фаз $\lambda_{\alpha,\delta}$ между 0 и 1 можно добиться, меняя δ от $-\infty$ до $+\infty$. При этом ρ в (4.13) изменяется от ρ_- до ρ_+, для $\delta=\pm\infty$ получаем чистые фазы $\langle-\rangle^{\mu}_{\pm}$ в точке $\mu=\mu_c$.

Случай $\gamma>1$ соответствует "слишком быстрому" стремлению $\mu_\ell=\mu_c+\delta/\beta V_\ell^\gamma$ к μ_c. Таким образом, он сводится к предыдущему заменой δ на величину $\delta\cdot V_\ell^{1-\gamma}$, которая стремится к нулю при $V_\ell\to\infty$. Учитывая это и повторяя рассуждения, приведенные выше для $\gamma=1$, получаем, см. (4.11):

$$\tilde K^{\mu_c}_{\delta,\gamma>1}[dx]=\{\lambda_{\alpha,\delta=0}\,\delta_{\rho_-}(x)+(1-\lambda_{\alpha,\delta=0})\,\delta_{\rho_+}(x)\}\,dx,$$

или

$$\langle-\rangle^{\mu_c}_{\delta,\gamma>1}=\langle-\rangle^{\mu_c}_{\alpha,\delta=0}=\alpha\langle-\rangle^{\mu_c}_{-}+(1-\alpha)\langle-\rangle^{\mu_c}_{+}.$$

Аналогично рассматривается и случай $\gamma<1$. Теперь $\mu_\ell=\mu_c+\delta/\beta V_\ell^\gamma$ стремится к μ_c " слишком медленно". Этот случай опять сводится к $\gamma=1$ заменой δ на $\delta\cdot V_\ell^{1-\gamma}$, но теперь эта величина стремится к $(+\infty)\,\mathrm{sign}\,\delta$. Учитывая это и (4.11), с помощью приведенных выше рассуждений получаем

$$\tilde K^{\mu_c}_{\delta,\gamma<1}[dx]=\delta_{\rho_{\mathrm{sign}\,\delta}}(x)\,dx,$$

или

$$\langle-\rangle^{\mu_c}_{\delta,\gamma<1}=\lim_{\tau\to\infty}\langle-\rangle^{\mu_c}_{\tau\cdot\mathrm{sign}\,\delta,\gamma}=\langle-\rangle^{\mu_c}_{\mathrm{sign}\,\delta},$$

что совпадает с чистыми фазами в точке $\mu=\mu_c$. Таким образом, в случае $\gamma<1$ мы получаем те же результаты, что и методом квазисредних.

В заключение сделаем несколько замечаний о бозе-конденсации в модели Дэвиса (3.6). Для этого, как и в работе [2], воспользуемся соотношением (4.1). Поскольку в каноническом ансамбле модель Дэвиса $(X_\ell(\omega)=\rho)$ совпадает с моделью идеального бозе-газа, то величина бозе-конденсата в состоянии $\langle-\rangle_\rho$ для модели Дэвиса имеет вид

$$\rho_0(\rho)=\lim_{\ell\to\infty}\left\langle\frac{G_1(\omega)}{V_\ell}\right\rangle_{\rho,\Lambda_\ell}=\begin{cases}0, & \rho<\rho_c\\ \rho-\rho_c, & \rho\ge\rho_c,\end{cases}$$

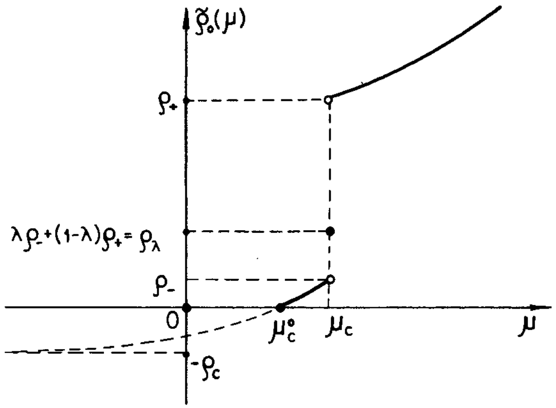

Рис.3

где ρ_c – критическая плотность для идеального бозе-газа, см. рис.I.

Поэтому в большом каноническом ансамбле величина бозе-конденсата для этой модели определяется соотношением

$$\tilde{\rho}_0(\mu) = \lim_{\ell \to \infty} \left\langle \frac{\sigma_1(\omega)}{V_\ell} \right\rangle^{\mu}_{\Lambda_\ell} - \int_0^{\infty} \tilde{K}^{\mu}[dx]\, \rho_0(x) . \qquad (4.I4)$$

Из структуры предельного состояния $\langle - \rangle^{\mu}$ (распределения $\tilde{K}^{\mu}$) для различных μ и формулы (4.I4) следует, что необходимо различать три случая.

<u>Случай A</u> : $\rho_c < \rho_-$. Тогда существует такое $\mu_c^0 < \mu_c : \tilde{\rho}(\mu_c^0) = \rho_c$, что (см. рис. 3)

$$\tilde{\rho}_0(\mu) = \begin{cases} 0 & , \ \mu < \mu_c^0 \\ \tilde{\rho}(\mu) - \rho_c & , \ \mu_c^0 < \mu < \mu_c \\ \lambda\rho_- + (1-\lambda)\rho_+ - \rho_c & , \ \mu = \mu_c \\ \tilde{\rho}(\mu) - \rho_c & , \ \mu > \mu_c . \end{cases} \qquad (4.I5)$$

<u>Случай B</u> : $\rho_- \leqslant \rho_c \leqslant \rho_+$. Тогда для плотности бозе-конденсата получаем

$$\tilde{\rho}_0(\mu) = \begin{cases} 0 & , \ \mu < \mu_c \\ \lambda\rho_- + (1-\lambda)\rho_+ - \rho_c & , \ \mu = \mu_c \\ \tilde{\rho}(\mu) - \rho_c & , \ \mu > \mu_c . \end{cases} \qquad (4.I6)$$

<u>Случай C</u>: $\rho_+ < \rho_c$. Тогда опять найдется $\mu_c^0 > \mu_c$, такое, что

$$\tilde{\rho}_0(\mu) = \begin{cases} 0 & , \ \mu < \mu_c^0 \\ \tilde{\rho}(\mu) - \rho_c & , \ \mu \geqslant \mu_c^0 . \end{cases} \qquad (4.I7)$$

Поведение бозе-конденсата в модели Дэвиса, см. (4.I5)-(4.I7), близко к тому, которое было обнаружено в недавней работе [I5] для бозе-газа в инфинитезимально слабом внешнем поле.

<u>Приложение</u>: Плотность свободной энергии для идеального бозе-газа.

Здесь мы докажем некоторые результаты, касающиеся идеального бозе-газа, которые используются в работе.

Прежде всего заметим, что поскольку $\lambda_\ell(1) = 0$, то $p_\ell(\mu) > -(\beta V_\ell)^{-1} \ln(1 - e^{+\beta\mu})$, так что $p_\ell(\mu) \to +\infty$, когда $\mu \uparrow 0$. Более того, $p(\mu) = \lim_{\ell\to\infty} p_\ell(\mu)$ существует и равен $p(\mu) = \int_0^\infty dF(\lambda)\, p(\mu|\lambda)$, где $p(\mu|\lambda) = \beta^{-1} \ln\left(1 - \exp[-\beta(\lambda - \mu)]\right)^{-1}$ [1] . Было доказано также, что $p^*(x) = \sup_{\mu<0}\{\mu x - p(\mu)\}$ и $p^*(x) = x\mu(x) - p(\mu(x))$, где $\mu(x) = 0$ для $x > \rho_c$, а для $x \leqslant \rho_c$ величина $\mu(x)$ является корнем уравнения $x = p'(\mu)$. Функция $p(\mu)$, определенная на $(-\infty, 0)$, продолжается в точку $\mu = 0$ по непрерывности:

$p(0) = \lim p(\mu \uparrow 0) = \int_0^\infty dF(\lambda)\, p(0|\lambda)$.

<u>Лемма I.</u> Функция $x \mapsto f_\ell(x)$ является выпуклой.

<u>Доказательство.</u> Достаточно доказать, что для каждого n

$$f_\ell\left(\frac{n}{V_\ell}\right) \leqslant \frac{1}{2} f_\ell\left(\frac{n-1}{V_\ell}\right) + \frac{1}{2} f_\ell\left(\frac{n+1}{V_\ell}\right)$$

или

$$\left(Z_\ell(n)\right)^2 \geqslant Z_\ell(n-1)\, Z_\ell(n+1) , \qquad (\text{П.I})$$

где

$$Z_\ell(n) = \sum_{\{\omega \in \Omega \,:\, N(\omega) = n\}} \exp\left\{-\beta\left[\lambda_\ell(1)\omega_1 + \lambda_\ell(2)\omega_2 + \dots\right]\right\} .$$

Доказательство проведем по индукции по числу энергетических уровней. Пусть

$$Z_\ell^{(k)}(n) = \sum_{\{\omega \in \Omega \,:\, N(\omega) = n\}} \exp\left\{-\beta\left[\lambda_\ell(1)\omega_1 + \dots + \lambda_\ell(k)\omega_k\right]\right\} .$$

Для $k = 1$ результат (П.I) тривиален. Допустим, что

$$\left(Z_\ell^{(k)}(n)\right)^2 \geqslant Z_\ell^{(k)}(n-1)\, Z_\ell^{(k)}(n+1)$$

для всех $n \geqslant 1$, так что

$$Z_\ell^{(k)}(n)\,Z_\ell^{(k)}(m) \geqslant Z_\ell^{(k)}(n+1)\,Z_\ell^{(k)}(m-1) .$$

Теперь $Z_\ell^{(k+1)}(n) = \sum_{m=0}^{n} z^{n-m} Z_\ell^{(k)}$, где $z = \exp(-\beta\lambda_\ell(k+1))$. Следовательно, $(Z_\ell^{(k+1)}(n))^2 = S + Z_\ell^{(k)}(n)\sum_{m=0}^{n} z^{n-m} Z_\ell^{(k)}(m)$, где $S = \sum_{m_1=0}^{n-1}\sum_{m_2=0}^{n} z^{2n-m_1-m_2}\cdot Z_\ell^{(k)}(m_1)\times$ $\times Z_\ell^{(k)}(m_2)$, в то же время $Z_\ell^{(k+1)}(n-1)\,Z_\ell^{(k+1)}(n+1) = S + Z_\ell^{(k)}(n+1)\sum_{m=1}^{n} z^{n-m} Z_\ell^{(k)}(m-1)$.

Итак,

$$\left(Z_\ell^{(k+1)}(n)\right)^2 - Z_\ell^{(k+1)}(n-1)\,Z_\ell^{(k+1)}(n+1) =$$

$$= z^n Z_\ell^{(k)}(n) + \sum_{m=1}^{n} z^{n-m}\left\{ Z_\ell^{(k)}(n)\,Z_\ell^{(k)}(m) - \right.$$

$$\left. - Z_\ell^{(k)}(n+1)\,Z_\ell^{(k)}(m-1) \right\} \geqslant 0 . \qquad \square$$

Лемма 2. Плотность свободной энергии идеального бозе-газа в конечном объеме является невозрастающей функцией плотности:

$$f_\ell(x) \leqslant f_\ell(y) \quad , \quad x \geqslant y .$$

Доказательство. Поскольку функция $x \mapsto f_\ell(x)$ выпуклая, то в каждой точке она имеет линию-носитель: для каждого y существует функция $a_\ell(y)$, такая, что для всех $x \geqslant 0$

$$f_\ell(x) - f_\ell(y) \geqslant a_\ell(y)\,(x-y) .$$

Предположим, что существует точка x_0, в которой $a_\ell(x_0) > 0$. Тогда для каждого $\mu < 0$ имеем

$$\exp\{\beta V_\ell p_\ell(\mu)\} = \int_0^\infty m_\ell[dx]\,\exp\{-\beta V_\ell(f_\ell(x)-\mu x)\} \leqslant \int_0^{x_0} m_\ell[dx]\,\times$$

$$\times \exp\{-\beta V_\ell f_\ell(x)\} + \exp\{-\beta V_\ell f_\ell(x_0)\}\int_{x_0}^\infty m_\ell[dx]\,\exp\{-\beta V_\ell a_\ell(x_0)(x-x_0)\} <$$

$< \infty$.

Однако, $p_\ell(\mu) \to +\infty$ при $\mu \uparrow 0$ – противоречие. Поэтому $a_\ell(y) \leqslant 0$ для всех y и для всех $x \geqslant y$: $f_\ell(x) - f_\ell(y) \leqslant 0$. $\square$

Лемма 3. Пусть $x \geqslant 0$, тогда $\liminf_{\ell\to\infty} f_\ell(x) \geqslant p(x) = \sup_{\mu<0}(\mu x - p(\mu))$.

Доказательство. Для $\rho > 0$ имеем

$$\exp\{\beta V_\ell p_\ell(\mu)\} = \int_0^\infty m_\ell[dx]\,\exp\{-\beta V_\ell(f_\ell(x)-\mu x)\} \geqslant$$

$$\geqslant \exp\{-\beta V_\ell(f_\ell(\rho)-\mu\rho)\}$$

и

$$\exp\{\beta V_\ell p_\ell(\mu)\} = \sum_{n\geqslant 0} \exp\left\{-\beta V_\ell\left(f_\ell\left(\frac{n}{V_\ell}\right) - \mu\frac{n}{V_\ell}\right)\right\} .$$

Итак, $p_\ell(\mu) \geqslant -f_\ell\left(\frac{n}{V_\ell}\right) + \mu\frac{n}{V_\ell}$ для каждого n. Поскольку $f_\ell(x)$ продолжается с множества $\{n/V_\ell\}_{n\geqslant 0}$ на $[0,\infty)$ с помощью линейной интерполяции, то $f_\ell(x) \geqslant \mu x - p_\ell(\mu)$ и $\liminf_{\ell\to\infty} f_\ell(x) \geqslant \mu x - p(\mu)$. Тогда $\liminf_{\ell\to\infty} f_\ell(x) \geqslant \sup_\mu\{\mu x - p_\ell(\mu)\} = p^*(x)$ $\square$.

Леммма 4. Пусть $x < \rho_c$. Тогда

$$\limsup_{\ell\to\infty} f_\ell(x) \leqslant p^*(x) .$$

Доказательство. Из определения распределения $K_\ell^\mu[dx]$ (см. § 2) имеем

$$\int_0^\infty K_\ell^\mu[dx]\,\exp(-sx) = \exp\left\{\beta V_\ell\left[p_\ell\left(\mu - \frac{s}{\beta V_\ell}\right) - p_\ell(\mu)\right]\right\} .$$

Для идеального бозе-газа $\mu < 0$. Поэтому мера $K_\ell^\mu[dx]$ слабо сходится при $\ell\to\infty$ к $\delta_{p'(\mu)}(x)dx$. Пусть $x \in [0,\rho_c]$ и $\delta \in (0,\infty)$. Тогда $\lim_{\ell\to\infty} K_\ell^{\mu(x)-\delta}\{A = (p'(\mu(x)-2\delta), x]\} = 1$. По лемме 2

$$\frac{1}{\beta V_\ell}\ln K_\ell^{\mu(x)-\delta}\{A = (p'(\mu(x)-2\delta), x]\} \leqslant \frac{1}{\beta V_\ell}\ln\{V_\ell(x - p'(\mu(x)-2\delta)+1)\} -$$

$$- f_\ell(x) + (\mu(x)-\delta)\,p'(\mu(x)-2\delta) - p(\mu(x)-\delta) .$$

Тогда $\limsup_{\ell\to\infty} f_\ell(x) \leqslant (\mu(x)-\delta)p'(\mu(x)-2\delta) - p(\mu(x)-\delta)$. Поскольку $p(\mu)$ и $p'(\mu)$ непрерывны, а δ произвольно, то это доказывает лемму . $\square$

Лемма 5. Пусть $x \geqslant \rho_c$. Тогда

$$\limsup_{\ell\to\infty} f_\ell(x) \leqslant p^*(\rho_c) .$$

Доказательство. Согласно лемме 2 для каждого $\varepsilon > 0$ и $x \geqslant \rho_c$ имеем $f_\ell(x) \leqslant f_\ell(\rho_c - \varepsilon)$. Поэтому

$$\limsup_{\ell\to\infty} f_\ell(x) \leqslant \limsup_{\ell\to\infty} f_\ell(\rho_c - \varepsilon) .$$

С другой стороны, по лемме 4 имеем $\limsup_{\ell\to\infty} f_\ell(\rho_c-\varepsilon) \leqslant p^*(\rho_c-\varepsilon)$. Тогда, с учетом произвольности ε и непрерывности p, получаем

$$\limsup_{\ell\to\infty} f_\ell(x) \leqslant p^*(\rho_c) . \qquad \square$$

Следствие 1. Поскольку $p^*(x) = p^*(\rho_c)$ для $x \geqslant \rho_c$, то из лемм 4 и 5 получаем $\limsup_{\ell\to\infty} f_\ell(x) \leqslant p^*(x)$, для $x \geqslant 0$. Комбинируя это с результатом леммы 3, получаем теорему 2: $\lim_{\ell\to\infty} f_\ell(x) = p^*(x)$.

Следствие 2. Согласно лемме 2 функции $\{f_\ell(x)\}_{\ell\geqslant 1}$ ограничены на компактах. Поскольку $f_\ell(x) \leqslant 0$, $\mu_\infty \leqslant 0$, а из неравенства $f_\ell(x) \geqslant$ $\geqslant \mu x - p_\ell(\mu)$, для $\mu < 0$ (лемма 3), получаем $\mu_\infty \geqslant 0$, то $\mu_\infty = 0$, что завершает доказательство теоремы 2.

Литература

1. Van den Berg M., Lewis J.T., Pulé J.V. - Helv. Phys. Acta, 1986, v. 59, p. 1271.
2. Загребнов В.А., Папоян Вл.В.-ТМФ, 1986, т. 69, с. 420.
3. Davies E.B. - Commun. Math. Phys., 1972, v. 28, p. 69.
4. Lewis J.T., Pulé J.V. - Lecture Notes in Math., 1984, v. 1095, p. 25.
5. Varadhan S.R.S. - Commun. Pure and Appl. Math., 1966, v. 19, p. 261.
6. Ellis R. Entropy, Large Deviations and Statistical Mechanics. Springer-Verlag, New York 1985.
7. Van den Berg M., Levis J.T., Pulé J.V. Preprint DIAS-STP-86-11, Dublin, 1986.
8. Cegła W., Lewis J.T., Raggio G. Preprint DIAS-STP-87-44, Dublin, 1987.
9. Eisele Th., Ellis R.S. Multiple Phase Transitions in the Generalized Curie - Weiss Model, Preprint, 1985.
10. Buffet E., Pulé J.V. - J. Math. Phys., 1983, v. 24, p. 1608.
11. Биллингсли П. Сходимость вероятностных мер. М.: Наука, 1977.
12. Боголюбов Н.Н. Квазисредние в задачах статистической механики Препринт ОИЯИ Д-781, Дубна, 1961.
13. Бранков Й. Г., Загребнов В.А., Тончев Н.С. - ТМФ, 1986, т. 66.
14. Angelescu N., Zagrebnov V.A. - J.Stat. Phys., 1985, v. 41, p. 323.
15. De Smedt Ph. , Zagrebnov V.A. - Phys. Rev., A, 1987, v. 35, p. 4763.

Рукопись поступила в издательский отдел
27 мая 1988 года.

Загребнов В.А., Льюис Дж.Т., Пуле Ж.В. P17-88-377
Принцип больших уклонений
для распределения Каца

Доказано, что принцип больших уклонений выполняется для распределения плотности частиц (распределение Каца), если только существует термодинамический предел для плотности свободной энергии. Этот результат позволяет дать новое доказательство принципа больших уклонений для распределения Каца в случае идеального Бозе-газа. Для моделей среднего поля с невыпуклым функционалом плотности (например, модель Дэвиса) исследована структура чистых и смешанных фаз.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод авторов

Zagrebnov V.A., Lewis J.T., Pule J.V. P17-88-377
The Large Deviation Principle
for the Kac Distribution

We prove that the Large Deviation Principle holds for the distribution of the particle number density (the Kac distribution) whenever the free energy density exists in the thermodynamic limit. We use this result to give a new proof of the Large Deviation Principle for the Kac distribution of the free Boson gas. In the case of mean-field models, non-convex rate functions can arise; this is illustrated in a model previously studied by E.B.Davies.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988