СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р5 - 10245

А.Н.Ермилов, А.М.Курбатов

МЕТОД Н.Н.БОГОЛЮБОВА (мл.) ДЛЯ (V, N)-СИСТЕМ

1976

Р5 - 10245

А.Н.Ермилов, А.М.Курбатов

МЕТОД Н.Н.БОГОЛЮБОВА (мл.) ДЛЯ (V , N)-СИСТЕМ

Ермилов А.Н., Курбатов А.М. P5 - 10245

Метод Н.Н.Боголюбова (мл.) для (V, N)-систем

Метод Н.Н.Боголюбова (мл.) модифицирован для прямого применения при исследовании систем, заданных объемом и средним числом частиц. Полученный результат значительно расширяет возможности математически строгих исследований для получения асимптотически точных решений в статистической механике модельных систем.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований
Дубна 1976

Ermilov A.N., Kurbatov A.M. P5 - 10245

N.N.Bogolubov (Jr.) Method for (V, N)-Systems

N.N.Bogolubov's(Jr.) method is modified for direct application to researching systems given by volume and average number of particles.The result obtained extends substantially the possibilities of mathematical rigorous investigations to obtain asymptotical exact solutions in statistical mechanics of model systems.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research
Dubna 1976

I. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время метод аппроксимирующих гамильтонианов разработан для прямого применения лишь в случае большого канонического ансамбля, когда в роли известных термодинамических параметров системы выступают объем V и химический потенциал μ. Чтобы использовать его для исследования систем, заданных другими способами, приходится вводить эти параметры (обычно μ) на основе некоторых дополнительных физических соображений или вычислять их с помощью аппроксимирующего гамильтониана. Поскольку схемы вычислений такого типа являются неочевидными, то в настоящее время назрела необходимость обоснования их правомерности и модифицирования метода аппроксимирующих гамильтонианов для прямого применения при рассмотрении статистических систем в рамках ансамблей, отличных от большого канонического.

Наиболее часто встречающимся и интересным случаем является задание термодинамической системы объемом V и средним числом частиц N, возникающее при исследовании металлов /I/ - /4/ и газов. В настоящей работе произведена модификация метода для прямого применения именно для этого варианта.

2. СХЕМА ВЫЧИСЛЕНИЯ ФУНКЦИИ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ

Перейдем теперь к более детальной постановке задачи и описанию схемы асимптотически точного вычисления функции свободной энергии в рамках ансамбля, заданного объемом V и средним числом частиц $\mathcal{N}$.

Термодинамическая эквивалентность в смысле Вентцеля /5/ модельного $H^{(V,\mu)}$ и аппроксимирующего $H_0^{(V,\mu)}(\bar{a}^{(V,\mu)})$ гамильтонианов формулируется обычно следующим образом: гамильтонианы $H^{(V,\mu)}$ и $H_0^{(V,\mu)}(\bar{a}^{(V,\mu)})$ являются термодинамически эквивалентными, если для любого фиксированного μ

$$f_V[H^{(V,\mu)}] - f_V[H_0^{(V,\mu)}(\bar{a}^{(V,\mu)})] \xrightarrow[V\to\infty]{} 0, \tag{I}$$

причем существенным является тот факт, что выражения для свободных энергий модельного и аппроксимирующего гамильтонианов в соотношении (I) берутся при одном и том же значении μ.

Постоянные $\bar{a}^{(V,\mu)}$, входящие в гамильтониан $H_0^{(V,\mu)}(a)$, определяются из условия минимакса

$$\begin{gathered}
f_V[H_0^{(V,\mu)}(a_i,\tilde{a}_j^{(V,\mu)}(a_i))] = \max_{a_j} f_V[H_0^{(V,\mu)}(a_i,a_j)],\\
f_V[H_0^{(V,\mu)}(\bar{a}_i^{(V,\mu)},\tilde{a}_j^{(V,\mu)}(\bar{a}_i^{(V,\mu)}))] = \min_{a_i} f_V[H_0^{(V,\mu)}(a_i,\tilde{a}_j^{(V,\mu)}(a_i))], \quad (2)\\
\bar{a}_j^{(V,\mu)} = \tilde{a}_j^{(V,\mu)}(\bar{a}_i^{(V,\mu)}), \quad (i=1,\dots,r;\ j=r+1,\dots,r+s).
\end{gathered}$$

Тогда, если исследуемая система задана большим каноническим ансамблем, то есть, если при каждом значении объема V известен химический потенциал $\mu^{(V)}$, вычисление асимптотического значения функции свободной энергии модельного гамильтониана $f_\infty[H]$ не содержит принципиальных трудностей, а именно, для этого достаточно вычислить предел

$$\lim_{V\to\infty} f_V[H_0^{(V,\mu^{(V)})}(\bar{a}^{(V,\mu^{(V)})})], \tag{3}$$

или же, если при любых a_m ($m=1, 2, \dots, r+s$) существует предел функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана

$$\lim_{V\to\infty} f_V[H_0^{(V,\mu)}(a)] = f_\infty[H_0^{(\mu)}(a)], \tag{4}$$

то обычно

$$f_\infty[H] = f_\infty[H_0^{(\mu)}(\bar{a}^{(\infty,\mu)})], \tag{5}$$

где $a^{(\infty,\mu)}$ – решение минимаксной задачи для предельной функции (4):

$$\begin{gathered}
f_\infty[H_0^{(\mu)}(a_i,\tilde{a}_j^{(\infty,\mu)}(a_i))] = \max_{a_j} f_\infty[H_0^{(\mu)}(a_i,a_j)],\\
f_\infty[H_0^{(\mu)}(\bar{a}_i^{(\infty,\mu)},\tilde{a}_j^{(\infty,\mu)}(\bar{a}_i^{(\infty,\mu)}))] = \min_{a_i} f_\infty[H_0^{(\mu)}(a_i,\tilde{a}_j^{(\infty,\mu)}(a_i))], \quad (6)\\
\bar{a}_j^{(\infty,\mu)} = \tilde{a}_j^{(\infty,\mu)}(\bar{a}_i^{(\infty,\mu)}), \quad (i=1,\dots r;\ j=r+1,\dots r+s).
\end{gathered}$$

Однако в широком ряде физически интересных случаев при каждом объеме V известен не химический потенциал $\mu^{(V)}$, а среднее число частиц в системе $\mathcal{N}^{(V)}$. Как уже отмечалось выше, важным примером тому служит ситуация, возникающая при изучении металлов, скажем, явления сверхпроводимости.

Здесь при вычислении предела (3) химический потенциал μ должен быть определен как функция V и $\mathcal{N}^{(V)}$ $\mu=\bar{\mu}(V,\mathcal{N}^{(V)})$ из условия

$$\frac{\partial f_V[H^{(V,\mu)}]}{\partial\mu} = -\frac{\mathcal{N}^{(V)}}{V}. \tag{7}$$

Однако функция $f_V[H^{(V,\mu)}]$ нам не известна.

Если мы заменим (7) на уравнение

$$\frac{\partial f_V[H_0^{(V,\mu)}(\bar{a}^{(V,\mu)})]}{\partial\mu} = -\frac{\mathcal{N}^{(V)}}{V}, \tag{8}$$

то у нас нет оснований полагать, что $\mu=\bar{\mu}'(V,\mathcal{N}^{(V)})$, определенный из уравнения (8), совпадает с действительным химическим потенциалом $\mu=\bar{\mu}(V,\mathcal{N}^{(V)})$, найденным на основании (7) и что, если мы подставим $\bar{\mu}'$ в (3) и совершим предельный переход $V\to\infty$, то получим правильный результат.

С другой стороны, если при произвольном фиксированном μ

$$\lim_{V\to\infty} f_V[H_0^{(V,\mu)}(\bar{a}^{(V,\mu)})] = f_\infty[H_0^{(\mu)}(\bar{a}^{(\infty,\mu)})], \tag{9}$$

где $\bar{a}^{(\infty,\mu)}$ – решение минимаксной задачи (6) для предельной функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана, то из термодинамической эквивалентности модельного и аппроксимирующего гамильтонианов (I) следует, что $f_\infty[H_0^{(\mu)}(\bar{a}^{(\infty,\mu)})]$ как функция аргумента μ является поточечным пределом при $V\to\infty$ последовательности $f_V[H^{(V,\mu)}]$:

$$\lim_{V\to\infty} f_V[H^{(V,\mu)}] = f_\infty[H_0^{(\mu)}(\bar{a}^{(\infty,\mu)})]. \qquad (II)$$

Если, исходя из этого, нам удастся показать, что последовательность $f_V[H^{(V,\mu(\mathcal{N}^{(V)}))}]$ сходится при $V\to\infty$ к $f_\infty[H_0^{(\mu(v^{(\infty)}))}(\bar{a}^{(\infty,\mu(v^{(\infty)}))})]$

$$\lim_{V\to\infty} f_V[H^{(V,\mu(\mathcal{N}^{(V)}))}] = f_\infty[H_0^{(\mu^{(v^{(\infty)})})}(\bar{a}^{(\infty,\mu^{(v^{(\infty)})})})], \qquad (I2)$$

где $\mu^{(v^{(\infty)})}$ есть решение уравнения

$$\frac{\mathfrak{D} f_\infty[H_0^{(\mu)}(\bar{a}^{(\infty,\mu)})]}{\mathfrak{D}\mu} = -\frac{1}{v^{(\infty)}}, \qquad (I3)$$

где $v^{(\infty)}$ – предельное значение среднего объема системы, приходящегося на одну частицу:

$$v^{(\infty)} = \lim_{V\to\infty}\frac{V}{\mathcal{N}^{(V)}}, \qquad (I4)$$

то мы получим удобный метод для вычисления предельного значения функции свободной энергии модельного гамильтониана. А именно, если определить, согласно условию минимакса (6), предельную свободную энергию аппроксимирующего гамильтониана (8) как функцию μ, то искомый предел функции свободной энергии модельного гамильтониана находится как значение этой функции при μ, определяемым из уравнения (I3).

3. ОБОСНОВАНИЕ СХЕМЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ ФУНКЦИИ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ

Для доказательства соотношения (I2) введем в рассмотрение функции

$$\mathcal{X}(V,\mu) = f_V[H^{(V,\mu)}] + \mu\frac{\mathcal{N}^{(V)}}{V} \qquad (I5)$$

и

$$\mathcal{X}(\infty,\mu) = \lim_{V\to\infty}\mathcal{X}(V,\mu). \qquad (I6)$$

Согласно (II) и (I4),

$$\mathcal{X}(\infty,\mu) = f_\infty[H_0^{(\mu)}(\bar{a}^{(\infty,\mu)})] + \mu\frac{1}{v^{(\infty)}}. \qquad (I7)$$

Тогда уравнения для определения $\bar{\mu}(V,\mathcal{N}^{(V)})$ (6) и $\mu^{(v^{(\infty)})}$ (7) принимают соответственно вид

$$\frac{\partial\mathcal{X}(V,\mu)}{\partial\mu} = 0, \qquad (I8)$$

$$\frac{\partial\mathcal{X}(\infty,\mu)}{\partial\mu} = 0. \qquad (I9)$$

Выражение $\mathcal{X}(V,\mu)$ является вещественной функцией вещественного аргумента μ вида

$$\mathcal{X}(V,\mu) = \mathcal{X}_V[\mathfrak{A} - \mu(N - \mathcal{N}^{(V)})], \qquad (20)$$

где $N = N^+$ – оператор числа частиц. С физической точки зрения, тот факт, что при некотором значении μ не существует второй производной

$$\mathcal{X}_V''[\mathfrak{A} - \mu(N - \mathcal{N}^{(V)})] = \frac{\partial^2 f_V[H^{(V,\mu)}]}{\partial\mu^2},$$

означает, что это значение μ является точкой фазового перехода первого или второго рода, что в реальных физических системах может иметь место на любом интервале (μ_1,μ_2) не более, чем в конечном числе точек. Тогда, как показано в работе /6/, из свойства (20) следует, что функция $\mathcal{X}(V,\mu)$ является выпуклой при любом значении V.

Из определения выпуклой функции посредством неравенства Иенсена непосредственно можно показать, что и предельная функция $\mathcal{X}(\infty,\mu)$ (I6) выпукла.

В таком случае уравнения (6) и (7) эквивалентны соответственно следующим задачам на абсолютный максимум:

$$\mathcal{X}(V,\mu(\mathcal{N}^{(V)})) = \max_{\mu}\mathcal{X}(V,\mu), \qquad (2I)$$

$$\mathcal{L}(\infty,\mu^{(v^{(\infty)})}) = \max_{\mu} \mathcal{L}(\infty,\mu). \qquad (22)$$

И, следовательно, ввиду (I4) соотношение (I2) эквивалентно утверждению

$$\lim_{V\to\infty} \max_{\mu} \mathcal{L}(V,\mu) = \max_{\mu} \lim_{V\to\infty} \mathcal{L}(V,\mu), \qquad (23)$$
$$\lim_{V\to\infty} \mu(\mathcal{N}^{(V)}) = \mu^{(v^{(\infty)})},$$

к доказательству которого мы сейчас и приступим.

Л е м м а I

Последовательность заданных выпуклых на интервале (p,q) функций $\{f_n(x)\}$, сходящаяся поточечно на (p,q) к некоторой функции $f(x)$, равностепенно ограничена на любом отрезке $[x_1,x_2]$, содержащемся в (p,q).

Д о к а з а т е л ь с т в о

Из определения выпуклой функции следует, что предельная функция $f(x)$ также является выпуклой. Поэтому $f(x)$ непрерывна на любом отрезке, принадлежащем (p,q), в частности и на отрезке $[\frac{p+x_1}{2}, \frac{q+x_2}{2}]\subset(p,q)$. В таком случае существуют точная нижняя и верхняя грани функции $f(x)$ на $[\frac{p+x_1}{2},\frac{q+x_2}{2}]$, которые мы обозначим через L_1 и L_2:

$$\operatorname*{Inf}_{x\in[\frac{p+x_1}{2},\frac{q+x_2}{2}]} f(x) = L_1, \qquad \operatorname*{Sup}_{x\in[\frac{p+x_1}{2},\frac{q+x_2}{2}]} f(x) = L_2. \qquad (24)$$

В силу поточечной сходимости $f_n(x)\xrightarrow[n\to\infty]{} f(x)$

$$\exists N: \forall n>N$$

$$2L_1-L_2\leqslant f_n\left(\frac{p+x_1}{2}\right), \quad f_n(x_1)\leqslant 2L_2-L_1, \qquad (25)$$

$$2L_1-L_2\leqslant f_n(x_1),\ 2L_1-L_2\leqslant f_n(x_2). \qquad (26)$$

По определению выпуклой функции

$$\forall x\in[x_1,x_2] \quad f_n(x_1)=f_n\left(\lambda\frac{p+x_1}{2}+(1-\lambda)x\right)\geqslant\lambda f_n\left(\frac{p+x_1}{2}\right)+(1-\lambda)f_n(x), \qquad (27)$$

где

$$\lambda=\frac{x-x_1}{x-\frac{p+x_1}{2}}\in\left(0,\frac{2(x_2-x_1)}{2x_2-x_1-p}\right)\subset(0,1).$$

Откуда на основании (25) имеем

$$\forall n>N \quad f_n(x)\leqslant\frac{f_n(x_1)-\lambda f_n(\frac{p+x_1}{2})}{1-\lambda}\leqslant\frac{2L_2-L_1-\lambda(2L_1-L_2)}{1-\lambda}=2L_1-L_2+\frac{3(L_2-L_1)}{1-\lambda},$$

или

$$\forall n>N \qquad (28)$$
$$f_n(x)\leqslant 2L_1-L_2+3(L_2-L_1)\frac{2x_2-x_1-p}{x_1-p}.$$

В силу выпуклости на (p,q) функции $f_n(x)$ непрерывны на $[x_1,x_2]$, поэтому при любом n существуют

$$\operatorname*{Inf}_{x\in[x_1,x_2]} f_n(x)=L_1^{(n)}, \qquad \operatorname*{Sup}_{x\in[x_1,x_2]} f_n(x)=L_2^{(n)}. \qquad (29)$$

Откуда

$$\forall n\ \forall x\in[x_1,x_2] \qquad f_n(x)\leqslant P_2, \qquad (30)$$

где

$$P_2=\max\left\{L_2^{(1)},\dots,L_2^{(N)},\ 2L_1-L_2+3(L_2-L_1)\frac{2x_2-x_1-p}{x_1-p}\right\}.$$

С другой стороны, согласно определению выпуклой функции и соотношению (26),

$$\forall x\in[x_1,x_2],\ \forall n>N$$
$$f_n(x)=f_n\left(\frac{x_2-x}{x_2-x_1}x_1+\frac{x-x_1}{x_2-x_1}x_2\right)\geqslant\frac{x_2-x}{x_2-x_1}f_n(x_1)+\frac{x-x_1}{x_2-x_1}f_n(x_2)\geqslant 2L_1-L_2,$$

откуда

$$\forall n\ \forall x\in[x_1,x_2] \qquad P_1\leqslant f_n(x),$$

$$P_1 = \min\{\ell_1^{(n)}, \dots, \ell_2^{(n)}, 2\ell_1 - \ell_2\}.$$

Таким образом, согласно (29) и (30),

$$\forall n \quad \forall x \in [x_1, x_2] \quad \exists P = \max\{|P_1|, |P_2|\}: \qquad (31)$$
$$|f_n(x)| \leqslant P,$$

что и требовалось доказать.

Л е м м а 2

Если последовательность заданных выпуклых на интервале (p,q) функций $\{f_n(x)\}$ сходится поточечно на (p,q) к некоторой функции $f(x)$, то эта сходимость является равномерной на любом отрезке $[x_1, x_2]$, принадлежащем (p,q).

Д о к а з а т е л ь с т в о

Поскольку

$$f_n\left(\frac{p+x_1}{2}\right) \xrightarrow[n\to\infty]{} f\left(\frac{p+x_1}{2}\right), \qquad f_n\left(\frac{q+x_2}{2}\right) \xrightarrow[n\to\infty]{} f\left(\frac{q+x_2}{2}\right),$$

то

$$\exists Q: \forall n \qquad (32)$$
$$\left|f_n\left(\frac{p+x_1}{2}\right)\right| \leqslant Q, \quad \left|f_n\left(\frac{q+x_2}{2}\right)\right| \leqslant Q.$$

Так как для выпуклой на (p,q) функции выражение

$$\frac{f(x)-f(c)}{x-c},$$

где $x \in (p,q)$ и $x \neq c$, есть невозрастающая функция x,

$$\forall x, x' \in [x_1, x_2] \quad \frac{f_n(x) - f_n(x')}{x - x'} \leqslant \frac{f_n(x) - f_n\left(\frac{q+x_2}{2}\right)}{x - \frac{q+x_2}{2}}.$$

Откуда на основании леммы I и неравенства (32)

$$\frac{f_n(x) - f_n(x')}{x - x'} \leqslant \frac{|f_n(x)| + \left|f_n\left(\frac{q+x_2}{2}\right)\right|}{x_2 - \frac{q+x_2}{2}} \leqslant 2\,\frac{P+Q}{q-x_2} \leqslant K_2. \qquad (33)$$

Аналогично доказывается, что

$$K_1 \leqslant \frac{f_n(x) - f_n(x')}{x - x'}. \qquad (34)$$

Неравенства (33),(34) дают

$$\forall n \quad \forall x, x' \in [x_1, x_2]$$
$$|f_n(x) - f_n(x')| \leqslant K|x - x'|,$$

т.е., что последовательность $\{f_n(x)\}$ является равностепенно непрерывной на отрезке $[x_1, x_2]$. Поэтому сходимость $f_n(x) \xrightarrow[n\to\infty]{} f(x)$ является равномерной на $[x_1, x_2]$, что и требовалось доказать.

Л е м м а 3

Пусть последовательность заданных на действительной оси выпуклых функций $\{f_n(x)\}$ сходится поточечно к некоторой функции $f(x)$. Если для этой предельной функции существует и единственна точка, в которой она принимает максимальное значение, то, начиная с некоторого n, существуют абсолютные максимумы самих функций $f_n(x)$, и последовательность этих максимальных значений сходится к максимуму функции $f(x)$

$$\lim_{n\to\infty} \max_x f_n(x) = \max_x \lim_{n\to\infty} f_n(x). \qquad (35)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о

Итак, пусть решение $\bar{x}$ задачи на абсолютный максимум

$$f(\bar{x}) = \max_x f(x) \qquad (36)$$

существует и единственно. Выберем произвольный конечный отрезок $[x_1, x_2]$, содержащий $\bar{x}$ как внутреннюю точку: $\bar{x} \in (x_1, x_2)$. Поскольку $f_n(x)$ выпуклы на всей действительной оси, согласно лемме 2 ,

$$f_n(x) \overset{[x_1, x_2]}{\underset{n\to\infty}{\rightrightarrows}} f(x), \qquad (37)$$

т.е.

$$\forall \varepsilon>0\ \exists N:\ \forall n>N\quad \forall x\in[x_1,x_2] \qquad (38)$$
$$|f_n(x)-f(x)|<\varepsilon.$$

максимизируя это неравенство по x на отрезке $[x_1,x_2]$ и учитывая (36) и то, что $\bar{x}\in[x_1,x_2]$, получаем

$$\forall \varepsilon>0\ \exists N:\ \forall n>N \qquad (39)$$
$$\left|\max_{x\in[x_1,x_2]} f_n(x)-f(\bar{x})\right|<\varepsilon.$$

Докажем, что, начиная с некоторого n, решения $\bar{x}_n$ задачи на абсолютный максимум на отрезке $[x_1,x_2]$ для функции $f_n(x)$:

$$f_n(\bar{x}_n)=\max_{x\in[x_1,x_2]} f_n(x) \qquad (40)$$

лежат внутри отрезка $[x_1,x_2]$: $\bar{x}_n\in(x_1,x_2)$.

Предположим, что это не так: пусть

$$\forall n\ \exists N_n>n:\qquad f_{N_n}(x_1)=\max_{x\in[x_1,x_2]} f_{N_n}(x) \qquad (41)$$

или

$$\forall n\ \exists N_n>n:\qquad f_{N_n}(x_2)=\max_{x\in[x_1,x_2]} f_{N_n}(x). \qquad (42)$$

Ниже для определенности будем считать, что выполняется соотношение (41).

В таком случае, ввиду (39),

$$f_{N_n}(x_1)\xrightarrow[n\to\infty]{} f(\bar{x}). \qquad (43)$$

Выбросив из последовательности $\{N_n\}$ $(n=1,2,\ldots)$ повторяющиеся члены, образуем последовательность $\{N_n'\}$. Тогда $\{f_{N_n'}(x_1)\}$ как подпоследовательность $\{f_{N_n}(x_1)\}$ также сходится к $f(\bar{x})$:

$$f_{N_n'}(x_1)\xrightarrow[n\to\infty]{} f(\bar{x}). \qquad (44)$$

Но $\{f_{N_n'}(x_1)\}$ есть подпоследовательность сходящейся последовательности $\{f_n(x_1)\}$, поэтому

$$f_n(x_1)\xrightarrow[n\to\infty]{} f(\bar{x}). \qquad (45)$$

С другой стороны, ввиду поточечной сходимости $f_n(x)$ к $f(x)$ на отрезке $[x_1,x_2]$

$$f_n(x_1)\xrightarrow[n\to\infty]{} f(x_1) \qquad (46)$$

и, сравнивая соотношения (45) и (46), имеем

$$f(x_1)=f(\bar{x}).$$

Полученное противоречие с условием единственности точки $\bar{x}$, доставляющей абсолютный максимум предельной функции $f(x)$, доказывает наше утверждение, что

$$\exists N_1:\ \forall n>N_1 \qquad (47)$$
$$f_n(x_1)<\max_{x\in[x_1,x_2]} f_n(x)=f_n(\bar{x}_n).$$

Рассматривая случай (42), совершенно аналогично убеждаемся, что

$$\exists N_2:\ \forall n>N_2 \qquad (48)$$
$$f_n(x_2)<\max_{x\in[x_1,x_2]} f_n(x)=f_n(\bar{x}_n).$$

По определению выпуклой функции

$$\forall x<x_1$$

$$f_n(x_1)=f_n(\lambda x+(1-\lambda)\bar{x}_n)\geq \lambda f_n(x)+(1-\lambda)f_n(\bar{x}_n),\quad \lambda=\frac{\bar{x}_n-x_1}{\bar{x}_n-x}.$$

Откуда, ввиду неравенства (47),

$$f_n(x_1)>\lambda f(x)+(1-\lambda)f(x_1),$$

следовательно,

$$\forall n>N_1 \quad \forall x<x_1 \qquad f_n(x)<f_n(x_1). \tag{49}$$

Аналогично,

$$\forall n>N_2 \quad \forall x>x_2 \qquad f_n(x)<f_n(x_2). \tag{50}$$

В таком случае, в силу (47),(48),

$$\exists N: \forall n>N \quad \forall x \notin [x_1,x_2] \qquad f_n(x)<\max_{x'\in[x_1,x_2]} f_n(x')=f_n(\bar{x}_n), \tag{51}$$

т.е. начиная с некоторого n существует решение задачи на абсолютный максимум на всей действительной оси для функций $f_n(x)$, причем оно принадлежит отрезку $[x_1,x_2]$:

$$\exists N: \quad \forall n>N \quad \exists \max_x f_n(x) \ \& \qquad \max_x f_n(x)=\max_{x\in[x_1,x_2]} f_n(x)=f_n(\bar{x}_n). \tag{52}$$

Тогда соотношение (39) принимает вид

$$\forall \varepsilon>0 \ \exists N: \ \forall n>N \quad \exists \max_x f_n(x) \ \& \qquad \left|\max_x f_n(x)-\max_x f(x)\right|<\varepsilon,$$

что и требовалось доказать.

Л е м м а 4

В условиях леммы 3

$$\bar{x}_n \xrightarrow[n\to\infty]{} \bar{x}. \tag{53}$$

Д о к а з а т е л ь с т в о

Проведем доказательство от противного. Допустим, что

$$\exists \varepsilon>0: \ \forall n \ \exists N_n>n: \qquad |\bar{x}_{N_n}-\bar{x}|\geq\varepsilon. \tag{54}$$

Выбросив из последовательности $\{N_n\}$ повторяющиеся члены, образуем последовательность $\{N'_n\}$. В таком случае $\{x_{N'_n}\}$ является подпоследовательностью $\{x_{N_n}\}$, и, следовательно, по лемме 3

$$f_{N'_n}(x_{N'_n}) \xrightarrow[n\to\infty]{} f(\bar{x}). \tag{54}$$

С другой стороны, согласно той же лемме 3, соотношение (53) дает

$$\exists N: \forall n>N \qquad x_{N'_n}\in[x_1,x_2]\setminus(\bar{x}-\varepsilon,\bar{x}+\varepsilon), \tag{55}$$

поэтому из $\{x_{N'_n}\}$ всегда можно выбрать подпоследовательность $\{x_{N''_n}\}$, сходящуюся к некоторому $\tilde{x}\neq\bar{x}$:

$$\forall æ>0 \ \exists N: \forall n>N \qquad |\bar{x}_{N''_n}-\tilde{x}|<æ, \tag{56}$$

$$\tilde{x}\neq\bar{x}. \tag{57}$$

Откуда, ввиду непрерывности функции $f(x)$ (см. доказательство леммы I), получаем

$$\forall \delta>0 \ \exists M_1: \ \forall n>M_1 \qquad |f(\bar{x}_{N''_n})-f(\tilde{x})|<\delta. \tag{58}$$

По лемме 2 $f_n(x) \overset{[x_1,x_2]}{\underset{n\to\infty}{\rightrightarrows}} f(x)$, поэтому, в силу (55) и того, что $N''_n \xrightarrow[n\to\infty]{} \infty$, имеем

$$\forall \delta>0 \ \exists M_2: \ \forall n>M_2 \qquad |f_{N''_n}(\bar{x}_{N''_n})-f(\bar{x}_{N''_n})|<\delta. \tag{59}$$

Складывая почленно неравенства (58),(59), убеждаемся, что

$$f_{N''_n}(x_{N''_n}) \xrightarrow[n\to\infty]{} f(\tilde{x}). \tag{60}$$

Сравнивая (60) с (54), учитывая, что $\{f_{N''_n}(x_{N''_n})\}$ является подпоследовательностью $\{f_{N'_n}(x_{N'_n})\}$ и принимая во внимание (57), получаем

$$f(\bar{x})=f(\tilde{x}), \quad \bar{x}\neq\tilde{x}. \tag{61}$$

Это соотношение противоречит условию единственности решения задачи на абсолютный максимум для предельной функции $f(x)$, что и доказывает утверждение леммы.

Условие лемм 3 и 4 существования и единственности абсолютного максимума предельной функции $f(x)$ в применении к семейству выпуклых по переменной μ функций $\mathcal{X}(V,\mu)$ с точки зрения физики означает, что имеется принципиальная возможность определения в термодинамическом пределе химического потенциала системы исходя из отношения ее объема к среднему числу частиц, что заведомо выполняется для реальных систем.

Таким образом, применяя леммы 3 и 4 к семейству функций $\mathcal{X}(V,\mu)$, убеждаемся в том, что справедлива следующая

Т е о р е м а I

Пусть

I) для модельного $H^{(V,\mu)}$ и аппроксимирующего $H_0^{(V,\mu)}(\bar{a})$ гамильтонианов при любом фиксированном μ имеет место асимптотическая близость функций свободной энергии:

$$f_V[H^{(V,\mu)}] - f_V[H_0^{(V,\mu)}(\bar{a}^{(V,\mu)})] \xrightarrow[V\to\infty]{} 0, \tag{62}$$

где $\bar{a}^{(V,\mu)}$ – решение минимаксной задачи (2),

2) при любом фиксированном μ

$$\lim_{V\to\infty} f_V[H_0^{(V,\mu)}(\bar{a}^{(V,\mu)})] = f_\infty[H_0^{(\mu)}(\bar{a}^{(\infty,\mu)})], \tag{63}$$

где $f_\infty[H_0^{(\mu)}(a)]$ есть поточечный предел функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана

$$f_\infty[H_0^{(\mu)}(a)] = \lim_{V\to\infty} f_V[H_0^{(V,\mu)}(a)], \tag{64}$$

а $\bar{a}^{(\infty,\mu)}$ – решение минимаксной задачи (6) для этой предельной функции,

тогда существует предельное при $V\to\infty$ значение функции свободной энергии системы с гамильтонианом $H^{(V,\mu)}$, заданной объемом V и средним числом частиц $\mathcal{N}$, равное

$$\lim_{V\to\infty} f_V[H_0^{(V,\mu(\mathcal{N}^{(V)}))}(\bar{a}^{(V,\mu(\mathcal{N}^{(V)}))})] = \max_\mu \mathcal{X}(\infty,\mu) - \mu^{(v^{(\infty)})}\frac{1}{v^{(\infty)}} \tag{65}$$

$$= f_\infty[H_0^{(\mu^{(v^{(\infty)})})}(\bar{a}^{(\infty,\mu^{(v^{(\infty)})})})], \tag{66}$$

где $\mu^{(v^{(\infty)})}$– решение задачи на абсолютный максимум для функции $\mathcal{X}(\infty,\mu) = f_\infty[H_0^{(\mu)}(\bar{a}^{(\infty,\mu)})] + \mu\frac{1}{v^{(\infty)}}$:

$$\mathcal{X}(\infty,\bar{\mu}^{(v^{(\infty)})}) = \max_\mu \mathcal{X}(\infty,\mu), \tag{67}$$

$v^{(\infty)}$ – предельное значение среднего объема системы, приходящегося на одну частицу

$$v^{(\infty)} = \lim_{V\to\infty}\frac{V}{\mathcal{N}^{(V)}}. \tag{68}$$

З а м е ч а н и е I

Условие (2) естественно в том смысле, что оно выполняется для всех исследовавшихся ранее систем (см., напр., /I/-/4/).

З а м е ч а н и е 2

Обычно решение минимаксной задачи (6) для предельной функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана (64) сводится к исследованию системы уравнений

$$\frac{\partial f_\infty[H_0^{(\mu)}(a)]}{\partial a_m} = 0, \quad (m=1,\dots,r+s). \tag{69}$$

В таком случае условие абсолютного максимума (57), эквивалентное уравнению

$$\frac{\mathcal{D} f_\infty[H_0^{(\mu)}(\bar{a}^{(\infty,\mu)})]}{\mathcal{D}\mu} = -\frac{1}{v^{(\infty)}} \tag{70}$$

(см. п.2), принимает вид

$$\frac{\partial f_\infty[H_0^{(\mu)}(\bar{a}^{(\infty,\mu)})]}{\partial\mu} = -\frac{1}{v^{(\infty)}}, \tag{71}$$

поскольку

$$\frac{\partial f_\infty[H_0^{(\mu)}(\bar{a}^{(\infty,\mu)})]}{\partial\mu} = \sum_{m=1}^{r+s} \frac{\partial f_\infty[H_0^{(\mu)}(a)]}{\partial a_m}\bigg|_{a=\bar{a}^{(\infty,\mu)}} \cdot \frac{\partial \bar{a}_m^{(\infty,\mu)}}{\partial\mu} + \frac{\partial f_\infty[H_0^{(\mu)}(\bar{a}^{(\infty,\mu)})]}{\partial\mu} = \frac{\partial f_\infty[H_0^{(\mu)}(\bar{a}^{(\infty,\mu)})]}{\partial\mu}. \tag{72}$$

Тогда нахождение асимптотически точного значения функции свободной энергии системы с гамильтонианом $H^{(V,\mu)}$, заданной объемом V и средним числом частиц $\mathcal{N}$, сводится к вычислению предельной функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана $H_0^{(V,\mu)}(a)$ при значениях a_m и μ, удовлетворяющих системе уравнений

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f_\infty[H_0^{(\mu)}(a)]}{\partial a_m} = 0, \quad (m=1,\ldots,r+s), \\ \dfrac{\partial f_\infty[H_0^{(\mu)}(a)]}{\partial\mu} = -\dfrac{1}{v^{(\infty)}}. \end{cases} \tag{73}$$

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результатом настоящей работы является модификация метода Н.Н.Боголюбова (мл.) для прямого применения при исследовании многочастичных квантовых систем, заданных объемом и средним числом частиц.

Так, в теореме I в сжатом виде сформулирован способ точного в термодинамическом пределе вычисления функции свободной энергии таких систем путем решения задачи на абсолютный максимум относительно химического потенциала μ для вспомогательной функции $\mathcal{J}(\infty,\mu)$ (I6). Замечание 2 к теореме I утверждает возможность сведения асимптотически точного вычисления свободной энергии к решению системы уравнений самосогласования совместно с уравнением для химического потенциала для предельной функции свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана (73).

Полученный результат значительно расширяет возможности математически строгих исследований для получения асимптотически точных решений в статистической механике модельных систем и представляет самостоятельный интерес для развития метода аппроксимирующих гамильтонианов.

Пользуясь случаем, авторы выражают глубокую благодарность профессору Н.Н.Боголюбову (мл.) за постановку задачи и постоянное внимание к работе, а также участникам семинара сектора теории конденсированного состояния ЛТФ ОИЯИ за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

I. N.N.Bogolubov (Jr.), Physica, 32, 933, 1966.
2. Н.Н.Боголюбов (мл.), Метод исследования модельных гамильтонианов, М., Наука , I974.
3. Б.В.Мощинский, В.К.Федянин, ОИЯИ, Р4-849I, Дубна, I975.
4. Н.Н.Боголюбов (мл.), А.Н.Ермилов, А.М.Курбатов, ОИЯИ, PI7-9772, Дубна, I976.
5. G.Wentzel, Phys. Rev., 120, 1572, 1960.
6. А.Н.Ермилов, А.М.Курбатов, ОИЯИ, Р5-I0237, Дубна, I976.

Рукопись потупила в издательский отдел
I9 ноября I976 года.