УДК 517.9

В. В. Горунович (Ин-т математики НАН Украины, Киев)

О ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ В ОДНОЙ ТОЧНО РЕШАЕМОЙ МОДЕЛИ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ БОЗОНОВ

Within the framework of grand canonical ensemble, we study a model system — lattice Bose gas with repulsive interaction of hard-core type on a complete graph. We show that there is a phase transition in the corresponding ideal system (Bose – Einstein condensation). For the system of interacting particles, we obtain an explicit expression for pressure in the thermodynamic limit, which implies that there is no phase transition in these system.

У формалізмі великого канонічного ансамблю розглядається модельна система — гратчастий бозе-газ із відштовхуючою взаємодією типу твердих серцевин на досконалому графі. Показано, що у відповідній ідеальній системі є фазовий перехід (конденсація Бозе – Ейнштейна). Для системи взаємодіючих частинок у термодинамічній границі одержано явний вираз для тиску, аналіз якого показує, що фазовий перехід у такій системі не відбувається.

Введение. Хотя со времени появления первых работ, посвященных конденсации Бозе–Эйнштейна, прошло более полувека, интерес к этому физическому феномену не ослабевает. Прогресс в исследовании конденсации Бозе–Эйнштейна в последнее время связан с совершенствованием применяемого математического аппарата. В этом смысле прежде всего следует отметить работы Льюиса и соавторов (см. [1, 2] и имеющуюся в них библиографию), в которых использовались методы теории вероятностей и которые на строгом уровне (т. е. уровне строгих математических утверждений) „закрыли" многие пробелы в исследовании этого явления для случая идеального газа бозонов. Ситуация гораздо сложнее в случае систем взаимодействующих бозонов. В этом направлении имеется значительное количество работ (см., например, [2 – 5]), в которых получено много интересных результатов, но они не дают полного ответа на основной вопрос: как влияет межчастичное взаимодействие на конденсацию бозонов? В частности, это связано с тем, что, как правило, рассматриваемые модельные системы получаются путем *ad hoc* аппроксимации взаимодействия в „пространстве моментов", которая обусловливает явно невосстановимую „деформацию" потенциала в „x"-пространстве. Поэтому весьма важным является рассмотрение конденсации Бозе–Эйнштейна в модельных системах, где взаимодействие между частицами изначально задано в „x"-пространстве.

В настоящей работе мы рассматриваем модельную систему — ν-мерный решеточный газ взаимодействующих бозе-частиц на совершенном графе. Оператор кинетической энергии — это соответствующим образом нормированный дискретный аналог оператора Лапласа. Между собой „частицы" решеточного газа взаимодействуют посредством потенциала типа взаимодействия твердых сфер (т. е. в каждом узле может находиться не более одной частицы). В формализме большого канонического ансамбля мы точно вычисляем давление в системе и показываем, что фазовый переход (конденсации Бозе–Эйнштейна) в такой системе не происходит.

1. Постановка задачи. Мы рассматриваем модельную систему (решеточный бозе-газ), конфигурационное пространство которой — это ν-мерная кубическая решетка $\mathbb{Z}^\nu$; в каждом ее узле $r \in \mathbb{Z}^\nu$ определены бозонные операторы a_r^+, a_r, удовлетворяющие каноническим коммутационным соотношениям

$$[a_r, a_s^+] = \delta_{r,s}; \quad [a_r, a_s] = [a_r^+, a_s^+] = 0; \quad r, s \in \mathbb{Z}^\nu.$$

Вначале считаем, что система занимает конечную область с объемом (числом узлов решетки) $V = |\Lambda|$. В формализме большого канонического ансамбля мы рассматриваем такую систему с гамильтонианом (с химическим потенциалом μ):

$$H_{Б} = T - \mu \sum_{r} a_r^+ a_r + \frac{1}{2} \sum_{r,s} a_r^+ a_s^+ a_r a_s \varphi(r-s),$$

$$T = \frac{q}{4V} \sum_{r,s} [a_r^+ - a_s^+][a_r - a_s]. \tag{1}$$

Здесь T — оператор кинетической энергии, соответствующий „свободному движению частицы" на решетке; q $(q>0)$ — „масса частицы"; $\varphi(r)$ — потенциал взаимодействия „частиц" — считается симметричным и интегрируемым

$$\varphi(r) = \varphi(-r), \tag{2}$$

$$\sum_{r \neq 0} \varphi(r) = b < \infty, \tag{3}$$

и имеет „твердую сердцевину":

$$\varphi(0) = +\infty. \tag{4}$$

Условие (4) редуцирует фоковское пространство системы

$$\mathcal{H}_{\varphi} = \overset{\infty}{\underset{n=1}{\oplus}} \mathcal{H}_n^{\text{сим}}, \quad \mathcal{H}_n^{\text{сим}} = \underbrace{\mathcal{H}_V \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}_V}_{V \text{ раз (симметризовано)}},$$

где $\mathcal{H}_V = \{\Phi(r), r \in \Lambda\}$ — V-мерное гильбертово пространство (одночастичное пространство), к подпространству $\mathcal{H}_{\Phi} - \mathcal{H}'_{\Phi}$, состоящему из функций, принадлежащих $\mathcal{H}_{\Phi}$, которые равны нулю при совпадении, по крайней мере, двух аргументов. Это обстоятельство обусловливает тот факт, что приведенную выше систему можно рассматривать как квантовую спиновую систему [6] (анизотропную модель Гайзенберга) с гамильтонианом

$$H_r = \frac{1}{2} \sum_{r \neq r'} \left\{ \frac{q}{V}(s_r^x s_{r'}^x + s_r^y s_{r'}^y) + s_r^z s_{r'}^z \varphi(r-r') \right\} - h \sum_{r} s_r^z + c \sum_{r} 1_{(r)}, \tag{5}$$

где

$$h = \mu - \frac{q}{2} - \frac{b}{2}, \quad c = -\frac{V}{2}\left(\mu - \frac{q}{2} - \frac{b}{2}\right),$$

$1_{(r)}$ — единичный оператор, а s_r^x, s_r^y, s_r^z — компоненты оператора спина $\bar{s}_r$ частицы со спином $1/2$. H_r действует в пространстве $R_V = \otimes_{i=1}^{V} R$, где R двумерное гильбертово пространство, в котором действуют операторы s_r^x, s_r^y, s_r^z.

Нашей конечной целью является вычисление $p(\beta, \mu)$-давления определенной выше модельной бозе-системы в термодинамическом пределе $\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^{\nu}$ (т. е. $V \to \infty$) при заданной обратной температуре β:

$$p(\beta, \mu) = \lim_{V \to \infty} p_V(\beta, \mu), \tag{6}$$

где $p_V(\beta, \mu)$ — давление в исходной конечной системе:

$$p_V(\beta, \mu) = (\beta V)^{-1} \ln Z_V(\beta, \mu). \tag{7}$$

Здесь $Z_V(\beta, \mu)$ — большая статистическая сумма

$$Z_V(\beta, \mu) = \mathrm{tr}_{\mathcal{H}'_{\Phi}} (\exp(-\beta H_{Б})), \tag{8}$$

($\mathrm{tr}_{\mathcal{H}'_\Phi}(\cdot)$ означает операцию взятия следа по пространству $\mathcal{H}'_\Phi$).

Вследствие указанной выше эквивалентности между рассматриваемой бозе-системой и квантовой спиновой системой (моделью Гайзенберга), имеем

$$Z_V(\beta, \mu) = \mathrm{tr}_{R_V}(\exp(-\beta H_r)), \tag{9}$$

и, таким образом, вычисление $p(\beta, \mu)$ сводится к вычислению $f_r(\beta, \mu)$-удельной свободной энергии квантовой системы с гамильтонианом H_r:

$$\begin{gathered} p(\beta, \mu) = -f_r(\beta, \mu) = -\lim_{V\to\infty} f_{r;V}(\beta, \mu), \\ f_{r;V}(\beta, \mu) = -(\beta V)^{-1} \ln \mathrm{tr}_{R_V}(\exp(-\beta H_r)). \end{gathered} \tag{10}$$

В настоящей работе мы ограничиваемся рассмотрением случая, когда $\varphi(r \neq \neq 0) = 0$, т. е. „чистого" взаимодействия типа твердых сфер (сердцевин). Таким образом,

$$\varphi(r=0) = +\infty, \quad \varphi(r \neq 0) = 0. \tag{11}$$

Чтобы ответить на вопрос: как такого типа взаимодействие влияет на конденсацию Бозе–Эйнштейна, сначала нужно исследовать бозе-систему с гамильтонианом $T - \mu \sum_r a_r^+ a_r$, т. е. идеальный (невзаимодействующий) бозе-газ.

2. Идеальный решеточный бозе-газ. Рассмотрим определенную выше систему в случае, когда взаимодействие между „частицами" отсутствует: $\varphi(r) \equiv 0$, $r \in \Lambda$, и гамильтониан имеет следующий вид:

$$H_0 = \frac{q}{4V} \sum_{r\neq s} [a_r^+ - a_s^+][a_r - a_s] - \mu \sum_r a_r^+ a_r. \tag{12}$$

Легко видеть, что оператор T — ортогональный проектор на пространство, ортогональное пространству постоянных функций. Спектр T (собственные значения) состоит из двух точек: $\{0, q/2\}$, где значение $q/2$ — $(V-1)$-кратно вырождено. Переходя к „представлению моментов" (импульсному представлению), приведем гамильтониан (12) к диагональному виду

$$H_0 = \sum_{k=1}^{V} \varepsilon_k b_k^+ b_k - \mu \sum_{k=1}^{V} b_k^+ b_k. \tag{13}$$

Здесь b_k^+, b_k — новые бозе-операторы, которые связаны с операторами a_r^+, a_r соотношениями

$$b_k^+ = \sum_r a_r^+ f_k(r), \quad b_k = \sum_r a_r f_k(r), \tag{14}$$

где $f_k(r)$ — собственные функции оператора T, а ε_k, $k \in \{1, \ldots, V\}$, — соответствующие им собственные значения: $\varepsilon_1 = 0$; $\varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \ldots = \varepsilon_V = q/2$.

Для большой статистической суммы рассматриваемой системы — $Z_{V;0}$ имеем

$$Z_{V;0}(\beta, \mu) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{\beta\mu n} \sum_{n_1+\ldots+n_V=n} e^{-\beta\sum_i \varepsilon_i n_i} = \prod_{i=1}^{V} (1 - e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)})^{-1}.$$

Используя известные термодинамические соотношения, для давления $p_0(\beta, \mu)$ и плотности ρ как функции μ получаем следующие выражения:

$$p_{0,V}(\beta,\mu) = (\beta V)^{-1}\sum_{i=1}^{V}\ln(1-e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)})^{-1},$$
$$\rho = \frac{1}{V}\sum_{i=1}^{V} e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)}(1-e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)})^{-1}. \tag{15}$$

Чтобы описать рассматриваемую невзаимодействующую систему в термодинамическом пределе, воспользуемся результатами работы [1] (хотя вычисления несложно провести и непосредственно).

Определим одночастичную статистическую сумму и плотность состояний:

$$\Phi_V(\beta) = (V)^{-1}\sum_{i=1}^{V}\exp(-\beta\varepsilon_i) = \int\limits_{[0,\infty)} e^{\beta\varepsilon}dF_V(\varepsilon),$$
$$dF_V(\varepsilon) = \frac{1}{V}\left[\delta(\varepsilon)+(V-1)\delta\left(\varepsilon-\frac{q}{2}\right)\right]d\varepsilon. \tag{16}$$

Учитывая (16), (15) можно представить в следующем виде:

$$p_{0,V}(\beta,\mu) = \int dF_V(\varepsilon)\frac{1}{\beta}\ln(1-\exp[\beta(\mu-\varepsilon)])^{-1},$$
$$\rho = \int dF_V(\varepsilon)\exp(\beta(\mu_V-\varepsilon))(1-\exp(\beta(\mu_V-\varepsilon)))^{-1},$$

где $\mu_V=\mu_V(\rho)$, $V\in\{1,\ldots,\}$ — единственный корень второго из уравнений (15). Так как предел $\Phi(\beta)=\lim\limits_{V\to\infty}\Phi_V(\beta)$ существует и определяется выражением

$$\Phi(\beta) = \int\limits_{[0,\infty)} dF(\varepsilon)e^{-\beta\varepsilon},$$

где $F(\varepsilon)$ — предельная плотность состояний

$$dF(\varepsilon) = \delta\left(\varepsilon-\frac{q}{2}\right)d\varepsilon,$$

мы можем теперь непосредственно воспользоваться результатами [1]. Таким образом, имеем:

i) предел $p_0(\beta,\mu)=\lim\limits_{V\to\infty}p_{0,V}(\beta,\mu)$ существует для всех $\mu\in(-\infty,q/2)$ и задается формулой

$$\beta p_0(\beta,\mu) = \ln\frac{1}{(1-e^{\beta(\mu-q/2)})}; \tag{17}$$

ii) предел $\mu(\rho)=\lim\limits_{V\to\infty}\mu_V(\rho)$ (т. е. химического потенциала как функции средней плотности) существует для всех $\rho\in(0,\infty)$ и задан как единственный в промежутке $(-\infty,q/2)$ корень уравнения $dp_0(\beta,\mu)/d\mu(\rho)=\rho$ для $\rho<\rho_k$ и $\mu(\rho)=0$ для $\rho\ge\rho_k$, где $\rho_k=(\exp(\beta q/2)-1)^{-1}$ — критическая плотность;

iii) предел $\pi(\rho)=\lim\limits_{V\to\infty}\pi_V(\rho)$, где $\pi_V(\rho)=(p_{0,V}\circ\mu_V)(\rho)$ — давление, как функция средней плотности существует и задается в следующем виде:

$$\pi(\rho) = \begin{cases}\beta^{-1}\ln(1+\rho), & \rho<\rho_k = (e^{\beta q/2}-1)^{-1};\\ \beta^{-1}\ln(1+\rho_k), & \rho\ge\rho_k.\end{cases} \tag{18}$$

Соотношение (18) — это уравнение состояния.

Из утверждений i) – iii) следует, что в невзаимодействующем решеточном бозе-газе (системе с гамильтонианом (12)) имеет место фазовый переход (конденсация Бозе–Эйнштейна), аналогичный фазовому переходу в непрерывных невзаимодействующих бозе-системах (см. [1]).

3. Основной результат. Как уже отмечалось, нашей основной задачей является выяснение влияния взаимодействия между бозе-частицами на конденсацию Бозе–Эйнштейна. Для рассматриваемой модельной системы (решеточного бозе-газа с взаимодействием типа твердых сердцевин) ответ на этот вопрос дает следующая теорема.

Теорема 1. *Предел* $p(\beta, \mu) = \lim\limits_{V \to \infty} p_V(\beta, \mu)$ *существует для всех* $\mu \in (-\infty, \infty)$, $\beta \in (0, \infty)$, $\rho \in [0, 1]$ *и определяется согласно формуле*

$$p(\beta, \mu) = \begin{cases} \dfrac{1}{2}\left(\mu - \dfrac{q}{2}\right)(1 + u) - \dfrac{1}{\beta} \ln \left(\dfrac{\sqrt{1-u^2}}{2} \left(\dfrac{1+u}{1-u} \right)^{u/2} \right), & \mu \geq \dfrac{q}{2}; \\ \dfrac{1}{2}\left(\mu - \dfrac{q}{2}\right)(u - 1) - \dfrac{1}{\beta} \ln \left(\dfrac{\sqrt{1-u^2}}{2} \left(\dfrac{1+u}{1-u} \right)^{u/2} \right), & \mu \leq \dfrac{q}{2}, \end{cases} \tag{19}$$

где

$$u = \frac{e^{\beta|\mu - q/2|} - 1}{e^{\beta|\mu - q/2|} + 1}. \tag{20}$$

Замечание. Давление, как функция химического потенциала $p(\beta, \mu)$, — производящая функция рассматриваемой системы. Используя ее явный вид, а также те же аргументы, что и в работе [1] при вычислении количества конденсата — выпуклость $p_V(\mu)$ и неравенство Гриффитса, нетрудно вычислить в термодинамическом пределе плотность как функцию μ. Имеем

$$\rho = \begin{cases} \dfrac{1}{2}(1 + u), & \mu \geq \dfrac{q}{2}; \\ \dfrac{1}{2}(1 - u), & \mu \leq \dfrac{q}{2}. \end{cases}$$

Учитывая это соотношение в (19), (20), получаем следующее уравнение состояния $(\pi(\rho) = (p \circ \mu)(\rho))$ рассматриваемой взаимодействующей системы:

$$\pi(\rho) = -\frac{1}{\beta} \ln(1 - \rho).$$

Легко видеть, что это уравнение не имеет особенностей для всех $\rho \in [0, 1]$ и $\beta \in (0, \infty)$, т. е в этой системе не происходит конденсация Бозе–Эйнштейна, и, таким образом, имеет место существенное различие между рассматриваемым нами случаем и случаем канонического ансамбля [3, 4].

4. Вспомогательный результат. „Формула для следа" $(\mathrm{tr}_{R_V}\{e^{-\beta H_r}\})$. Для вычисления в термодинамическом пределе давления в рассматриваемой системе взаимодействующих бозонов (системе с гамильтонианом $H_{\text{Б}}$) воспользуемся указанной выше аналогией между этой системой и квантовой спиновой системой. При этом основанием для нашего дальнейшего доказательства теоремы 1 будет полученная ниже „формула для следа".

Вначале представим гамильтониан H_r в следующем виде:

$$H_r = \frac{q}{2V}\left\{(\overline{S}_V)^2 - (S_V^z)^2\right\} - hS_V^z - \frac{q}{2V}\sum_i \left\{(\overline{S}_i)^2 - (S_i^z)^2\right\} + c\mathrm{I}_{(V)},$$

где

$$\overline{S}_V = \sum_{\alpha \in \{x,y,z\}} S_V^{\alpha}, \quad S_V^{\alpha} = \sum_{i=1}^{V} S_i^{\alpha}, \quad \alpha \in \{x, y, z\}, \quad \mathrm{I}_{(V)} = \sum_i 1_{(i)}.$$

В случае, когда в этом гамильтониане опущено предпоследнее слагаемое, т. е. для гамильтониана

$$H_r^0 = \frac{q}{2V}\left\{(\overline{S}_V)^2 - (S_V^z)^2\right\} - hS_V^z + c\mathrm{I}_{(V)}$$

справедлива „формула для следа" (1.4) из [7]. Тогда

$$\mathrm{tr}_{R_V}(-\beta H_r^0) = \sum_{\mathcal{T} \in \Pi_V} c^{1/2}(V, \mathcal{T})\mathrm{tr}_{\mathfrak{D}(\mathcal{T})}(\exp(-\beta H_r^0(\mathcal{T})),$$

где $\Pi_V = \{\mathcal{T} : 0 \le \mathcal{T} \le V/2\}$, $c^{1/2}(V, \mathcal{T}) \in \mathbb{Z}^+ \cup \{0\}$, а оператор $H_r^0(\mathcal{T})$ определен на $\mathfrak{D}(\mathcal{T})$— $(2\mathcal{T} + 1)$-мерном гильбертовом пространстве и имеет следующий вид:

$$H_r^0(\mathcal{T}) = \frac{q}{2V}\left\{\mathcal{T}(\mathcal{T}+1)\cdot 1_{\mathfrak{D}(\mathcal{T})} - ({}^{\mathcal{T}}S^z)^2\right\} - h^{\mathcal{T}}S^z + c1_{\mathfrak{D}(\mathcal{T})},$$

где $({}^{\mathcal{T}}\overline{S})^2$ и ${}^{\mathcal{T}}S^z$ — операторы спина $\mathcal{T}$, действующие в $\mathfrak{D}(\mathcal{T})$ и имеющие собственные значения $\mathcal{T}(\mathcal{T} + 1)$ и $m_{\mathcal{T}} = \{-\mathcal{T}, -\mathcal{T} + 1, \ldots, \mathcal{T} - 1, \mathcal{T}\}$ соответственно.

Основное утверждение этого пункта состоит в том, что для $\mathrm{tr}_{R_V}(\exp(-\beta H_r))$ справедливо представление

$$\mathrm{tr}_{R_V}(\exp\{-\beta H_r\}) = e^{\beta q/4} \sum_{\mathcal{T} \in \Pi_V} c^{1/2}(V, \mathcal{T})\mathrm{tr}_{\mathfrak{D}(\mathcal{T})}(e^{-\beta H_r^0(\mathcal{T})}). \tag{21}$$

Это соотношение является обобщением „формулы для следа" (1.4) из [7] на случай спина $1/2$ (вырожденный случай).

Доказательство (21) проведем непосредственно, вычисляя $\mathrm{tr}_{R_V}(e^{-\beta H_r})$ по системе функций, которые являются собственными функциями операторов $(\overline{S}_V)^2$, S_V^z, $(\overline{s}_1)^2, \ldots, (\overline{s}_V)^2$, $s_1^z, \ldots, s_V^z$, соответствующими собственным значениям $\mathcal{T}_V(\mathcal{T}_V + 1)$, M_V, $j_1(j_1 + 1), \ldots, j_V(j_V + 1)$, $m_1, \ldots, m_V$, где $\mathcal{T}_V \in \Pi_V = \{0, 1/2, \ldots, V/2\}$, $M_V \in \{\mathcal{T}_V, \ldots, -\mathcal{T}_V\}$ $j_k = 1/2$, $m_k \in \{1/2, \ldots, -1/2\}$, $k \in \{1, \ldots, V\}$. По построению эти функции являются также собственными функциями операторов $(\overline{S}_{(i)_2})^2, \ldots, (\overline{S}_{(i)_{V-1}})^2$, где

$$\overline{S}_{(i)_k} = \sum_{n=1}^{k} \overline{s}_{i_n}, \quad (i)_k = \{i_1, \ldots, i_k\}, \quad k \in \{1, \ldots, V\};$$

$$i_n \in \{1, \ldots, V\}, \quad n \in \{1, \ldots, k\},$$

$i_k \ne i_s$ для $k \ne s$, с собственными значениями $\mathcal{T}_{(i)_2}, \ldots, \mathcal{T}_{(i)_{V-1}}$, где $\mathcal{T}_{(i)_2} \in \{0, 1\}, \ldots, \mathcal{T}_{(i)_{V-1}} \in \{\mathcal{T}_{(i)_{V-2}} - 1/2, \mathcal{T}_{(i)_{V-2}} + 1/2\}$. Вначале построим такие функции для системы, состоящей из двух спинов (т. е. $V = 2$). Эти функции (система функций) имеют вид (см. [7])

$$\Psi_2(\mathcal{T}_2, M_2, j_1, j_2) =$$

$$= \sum_{m_1 \in \{1/2, -1/2\}} \sum_{m_2 \in \{1/2, -1/2\}} G_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{\mathcal{T}_2, M_2} \Psi_1(j_1, m_1)\Psi_2(j_1, m_1).$$

Здесь $\Psi_1(j_k, m_k)$, $k \in \{1, 2\}$, — собственная функция операторов $(\bar{s}_k)^2$ и s_k^z с собственными значениями $j_k(j_k+1)$ и $m_k \in \{1/2, -1/2\}$, $G^{\mathcal{T}_2, M_2}_{j_1, m_1; j_2, m_2}$ — коэффициенты Клебша – Гордона;

$$\mathcal{T}_2 \in \{j_1 + j_2, j_1 - j_2\}, \quad M_2 \in \{-\mathcal{T}_2, \ldots, \mathcal{T}_2\}.$$

Пусть теперь $V = 3$. В этом случае

$$\Psi_3(\mathcal{T}_3, M_3, \mathcal{T}_{(i)_2}, j_1, j_2, j_3) = \sum_{m_{i_3} \in \{1/2, -1/2\}} \cdot \sum_{M_2 = -\mathcal{T}_{(i)_2}}^{\mathcal{T}_{(i)_2}} G^{\mathcal{T}_3, M_3}_{j_3, m_3; \mathcal{T}_2, M_2} \times$$

$$\times \Psi_1(j_{i_3}, m_{i_3}) \Psi_2(\mathcal{T}_{(i)_2}, M_2, j_{i_1}, j_{i_2}),$$

$$\mathcal{T}_3 \in \left\{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\}, \quad M_3 \in \{-\mathcal{T}_3, \ldots, \mathcal{T}_3\},$$

$$i_1, i_2, i_3 \in \{1, 2, 3\}, \quad i_k \neq i_l, \quad k \neq l; \quad \{i_1, i_2\} \simeq \{i_2, i_3\}.$$

Аналогично (по индукции) мы можем построить искомую систему функций для произвольного V. Имеем

$$\Psi_V(\mathcal{T}_V, M_V, \mathcal{T}_{(i)_{V-1}}, \ldots, \mathcal{T}_{(i)_2}, j_1, \ldots, j_V) =$$

$$= \sum_{m_{i_V} \in \{1/2, -1/2\}} \sum_{M_{V-1} = -\mathcal{T}_{(i)_{V-1}}}^{\mathcal{T}_{(i)_{V-1}}} G^{\mathcal{T}_V, M_V}_{j_{i_V}, m_{i_V}; \mathcal{T}_{(i)_{V-1}}, M_{V-1}} \times$$

$$\times \Psi_1(j_{i_V}, m_{i_V}) \Psi_{V-1}(\mathcal{T}_{(i)_{V-1}}, M_{V-1}, \ldots, \mathcal{T}_{(i)_2}, j_{i_1}, \ldots, j_{i_{V-1}}), \tag{22}$$

Здесь последовательность $i_1, i_2, \ldots, i_V$ — это всевозможные перестановки чисел $1, 2, \ldots, V$ такие, что две из них эквивалентны, если они отличаются лишь порядком первых двух чисел. Вычисляя $\mathrm{tr}_{R_V}(e^{-\beta H_r})$ по системе функций (22) (учитывая, что оператор H_r на этих функциях диагонален), получаем

$$\mathrm{tr}_{R_V}(e^{-\beta H_r}) = \sum_{\mathcal{T}_V \in \Pi_V} \sum_{M_V = -\mathcal{T}_V}^{\mathcal{T}_V} \sum_{(i_1, \ldots, i_V)} \sum_{\mathcal{T}_{(i)_{V-1}}} (\Psi_V, e^{-\beta H_r} \Psi_V) =$$

$$= \sum_{\mathcal{T}_V \in \Pi_V} \sum_{M_V = -\mathcal{T}_V}^{\mathcal{T}_V} C^{1/2}(V, \mathcal{T}_V) \times$$

$$\times \exp\left\{-\beta\left(\frac{q}{4} + \frac{q}{2V}(\mathcal{T}_V(\mathcal{T}_V + 1) - (M_V)^2) - hM_V + cV\right)\right\}, \tag{23}$$

где $C^{1/2}(V, \mathcal{T}_V) = \sum_{(i_1, \ldots, i_V)} \sum_{\mathcal{T}_{(i)_{V-1}}} 1$.

Отсюда следует соотношение (21).

5. Доказательство теоремы 1. Для доказательства теоремы 1 воспользуемся некоторыми формулировками и результатами работы [8], относящимися к реализации метода больших уклонений на случай квантовых спиновых систем.

Рассмотрим последовательность $\{\mathbb{K}_l : l = 1, 2, \ldots\}$ вероятностных мер на борелевских подмножествах некоторого полного сепарабельного метрического пространства E (в нашем доказательстве теоремы 1 E — это или интервал $[0, 1]$, или интервал $[-1, 1]$) и расходящуюся последовательность положительных чисел $\{ V_l : l = 1, 2, \ldots \}$. Говорят [1, 2, 8], что $\{ \mathbb{K}_l \}$ удовлетворяет принципу больших уклонений с константами $\{ V_l \}$ и оценочной функцией $I : E \to \to (0, \infty)$, если выполняются такие условия:

БУ$_1$) $I(\cdot)$ — полунепрерывна снизу на E;

БУ$_2$) для каждого $m < \infty$ $\{ x : I(x) \le m \}$ — компакт;

БУ$_3$) для каждого замкнутого $c \subset E$

$$\limsup_{l \to \infty} (V_l)^{-1} \ln \mathbb{K}_l[c] \le -\inf_c I(x);$$

(БУ$_4$) для каждого открытого $G \subset E$

$$\liminf_{l \to \infty} (V_l)^{-1} \ln \mathbb{K}_l[G] \le -\inf_G I(x).$$

Для такой последовательности вероятностных мер справедлива следующая теорема (см. [8]).

Теорема 2. *Пусть* $\{ f_l \}$ — *последовательность непрерывных функций* $\{ f_l \} : E \to \mathbb{R}$, *которые ограничены сверху, и* $\{ f_l \}$ *сходится к функции* $f : E \to \to \mathbb{R}$ *равномерно на ограниченных подмножествах. Тогда*

$$\lim_{l \to \infty} V_l^{-1} \ln \int_E \exp(V_l f_l(x)) \mathbb{K}_l[dx] = \sup_E \{ f(x) - I(x) \}.$$

Эту теорему мы используем ниже для получения предельного значения для свободной энергии $f_{r;V}(\beta, \mu)$.

На интервале $[0, 1]$ определим вероятностную меру $\mathbb{K}_V^{1/2}$ (т. е. последовательность мер для $V = 1, 2, \ldots$) следующим образом:

$$\mathbb{K}_V^{1/2}[B] = (C^{1/2}(V))^{-1} \sum_{\{\mathcal{T} : 2\mathcal{T}/V \in B\}} c^{1/2}(V, \mathcal{T}), \quad B \subseteq [0, 1], \tag{24}$$

$$C^{1/2}(V) = \sum_{\mathcal{T} \in \Pi_V} c^{1/2}(V, \mathcal{T}).$$

Тогда, вводя по определению

$$f_{r,V}^{1,2}\left(\beta, \frac{2\mathcal{T}}{V}\right) = (\beta V)^{-1} \ln \operatorname{tr}_{\mathfrak{D}(\mathcal{T})} (e^{-\beta H_r^0(\mathcal{T})}), \tag{25}$$

используя „формулу для следа" (21) и определение (24), нетрудно получить

$$f_{r;V}(\beta, \mu) = -\frac{q}{4V} - \frac{1}{\beta V} \ln C^{1/2}(V) - \frac{1}{\beta V} \ln \int_{[0,1]} \exp(-\beta V f_{V;r}^{1/2}(\beta; u)) \mathbb{K}_V^{1/2}[du], \tag{26}$$

где $f_{r;V}^{1/2}(\cdot)$ — некоторая непрерывная на интервале $[0, 1]$ функция, удовлетворяющая (25).

Как показано в [8] (там приведен результат для случая спина произвольной амплитуды), последовательность $\{ K_V^{1/2}, V \ge 1 \}$ удовлетворяет принципу больших уклонений БУ$_1$) – БУ$_4$) с константами $\{ V \}$ и оценочной функцией $I(u)$ вида

$$I^{1/2}(u) = \ln 2 + \sup_{\alpha \ge 0} \{ \alpha u - \ln(2 \cosh(\alpha)) \}, \tag{27}$$

или (после несложных преобразований)

$$I^{1/2}(u) = \ln 2 + \ln\left(\frac{\sqrt{1-u^2}}{2}\left(\frac{1+u}{1-u}\right)^{u/2}\right). \tag{28}$$

Предполагая, что последовательность $\{f_{r;V}^{1/2}, V = 1, 2, \dots\}$ сходится равномерно по $u \in [0, 1]$ к функции $f_r^{1/2}(\cdot)$, из (26) и теоремы 2 следует, что $f_r(\beta, \mu)$ существует и задается следующим выражением:

$$f_r(\beta, \mu) = \inf_{u\in[0,1]} \{f^{1/2}(\beta; u) - \beta^{-1} I_0^{1/2}(u)\},$$
$$I_0^{1/2}(u) = I^{1/2}(1) - I^{1/2}(u). \tag{29}$$

Таким образом, дальнейшее доказательство утверждения теоремы 1 сводится к вычислению предела последовательности функций $f_{r;V}^{1/2}(\cdot)$, определенных согласно (25).

Учитывая явный вид $H_r^0(\mathcal{T})$ (см. (21)), имеем

$$f_{r;V}^{1/2}\left(\beta; \frac{2\mathcal{T}}{V}\right) = \frac{1}{2V^2}\mathcal{T}(\mathcal{T}+1) + \frac{cV}{V} - \frac{1}{\beta V}\ln \sum_{k\in\mathbb{S}} \exp\left\{\frac{\beta q k^2}{2V} + \beta h k\right\}, \tag{30}$$

$$\mathbb{S} = \{-\mathcal{T}, -\mathcal{T}+1, \dots, \mathcal{T}-1, \mathcal{T}\}.$$

Введя на интервале $[-1, 1]$ вероятностную меру $\nu(\cdot)$ согласно

$$\nu[A] = (2\mathcal{T}+1)^{-1}\{k \in \mathbb{S} : k\mathcal{T}^{-1} \in A\}, \quad A \subseteq [-1, 1],$$

перепишем (30) в таком виде:

$$f_{r;V}^{1/2}\left(\beta; \frac{2\mathcal{T}}{V}\right) = \frac{q}{2V^2}\mathcal{T}(\mathcal{T}+1) + c - \frac{1}{\beta V}\ln\,(2\mathcal{T}+1) -$$
$$- \frac{1}{\beta V}\ln \int_{[-1,1]} \exp\left(\mathcal{T}\cdot x\cdot\beta\cdot h + \frac{q\beta}{2V}x^2\mathcal{T}^2\right)\nu[dx].$$

Следовательно,

$$f_{r;V}^{1/2}(\beta; u) = \frac{q}{8}u\left(u + \frac{2}{V}\right) + c - \frac{1}{\beta V}\ln(uV+1) -$$
$$- \frac{1}{\beta V}\ln \int_{[-1,1]} \exp(\beta V \varphi_V(x, u))\nu[dx]. \tag{31}$$

Учитывая, что при $V \to \infty$ $\varphi_V(x, u)$ сходится равномерно к функции $\varphi(x, u) = (h/2)ux + (q/8)u^2x^2$, а последовательность $\{\nu_V \equiv \nu : V \ge 1\}$ удовлетворяет условиям $\text{БУ}_1) - \text{БУ}_4)$ с оценочной функцией, тождественно равной нулю, и применяя теорему 2, получаем предельную функцию последовательности $\{f_{r;V}^{1/2}(\cdot)\}$ в виде

$$f_{r;V}^{1/2}(\beta; u) = \frac{q}{8}u^2 + \frac{h}{2} - \sup_{x\in[-1,1]}\left\{\frac{h}{2}ux + \frac{q}{8}u^2x^2\right\}. \tag{32}$$

После простых вычислений утверждение теоремы 1 следует из соотношений (28), (29) и (32).

6. Обсуждение результата. Сравнение результата, полученного нами, с результатами работ [3, 4], где аналогичная система исследовалась с помощью формализма канонического ансамбля и где было показано, что фазовый переход (конденсация Бозе–Эйнштейна) в такой системе происходит, приводит нас к известной проблеме статистической механики, а именно, к проблеме эквивалентности ансамблей. Напомним, что эквивалентность большого канонического и канонического ансамблей понимается как в слабом (термодинамическом), так и в сильном (микроскопическом) смыслах (см., например, [9]). В [9, 10] вопрос об эквивалентности ансамблей исследовался для системы идеального бозе-газа [9] и для некоторых аппроксимационных моделей взаимодействующего бозе-газа [10]. В [10] на примере ряда моделей показано, что для взаимодействующего (неидеального) бозе-газа эквивалентность ансамблей отсутствует даже в слабом смысле. Сравнение нашего результата с результатами работ [3, 4] показывает, что справедливо более сильное утверждение, чем то, что большой канонический и канонический ансамбли систем взаимодействующих бозонов неэквивалентны в слабом смысле, а именно, что рассматриваемая система в различных ансамблях (другими словами, при различных граничных условиях) проявляет различное физическое поведение.

1. *Berg M. van den, Lewis J. T., Pulé J. V.* A general theory of Bose – Einstein condensation // Helv. phus. acta. – 1986. – **59**. – P. 1271–1288.
2. *Berg M. van den, Lewis J. T., Pulé J. V.* The large deviation principle and some models of an interacting boson gas // Communs Math. Phys. – 1988. – **118**. – P. 61–85.
3. *Balint Toth.* Phase transition is an interacting bose system – An application of the theory of Ventsel' and Freidlin // Transp. Statist. Phys. – 1990. – **61**. – P. 749–764.
4. *Penrose O.* Bose – Einstein condensation in an exactly solyble system of interacting particles // Ibid. – 1991. – **63**, № 3/4. – P. 761–780.
5. *Ginibre J.* Reduced density matrices of the anisotrophic Heisenberg model // Communs Math. Phys. – 1968. – **10**. – P. 140–154.
6. *Cegla W., Lewis J. T., Raggic G. A.* The free energy of quantym spin systems and large deviations // Ibid. – 1988. – **118**. – P. 337–354.
7. *Кондон Е., Шортли Г.* Теория атомных спектров. – М.: Изд-во иностр. лит., 1949. – 320 с.
8. *Загребнов В. А., Папоян Вл. В.* Идеальный бозе-газ: флуктуации и неэквивалентность ансамблей // Теорет. и мат. физика. – 1986. – **69**, № 3. – 420 с.
9. *Папоян Вл. В.* Проблема эквивалентности ансамблей для модели Хаданга – Янга – Латтинджера // Сообщ. Объед. ин-та ядер. исслед. – 1986. – 20 с.
10. *Горунович В. В.* О конденсации Бозе – Эйнштейна в одной модели решеточного газа // Методы мат. физики бесконечных систем. – Киев: Ин-т математики АН Украины, 1991. – С. 30–44.

Получено 17.11.95