УД К 519. 24

П.В. Резніченко, канд. фіз.-мат. наук, методист
Кіровоградський кібернетико-технічний коледж

Існування граничного гібсового розподілу для кластерної моделі неперервного гармонічного осцилятора

Застосовані рівняння Кірквуд– Зальсбурга для дослідження кореляційних функцій для малих значень активності. За допомогою Пуасонівського аналізу виконаний термодинамічний граничний перехід для кластерної моделі гармонічного осцилятора.

великий канонічний розподіл, велика статистична сума, кореляційні функції, термодинамічна границя, густина ймовірності, міра Лебега, міра Лебега–Пуасона

Статистична механіка розглядає великі фізичні системи, що складаються з великого числа компонент і займають великий об'єм в просторі R^3 [1,2]. В відповідності з принципами математичного мислення внутрішні властивості великих об'єктів можуть бути виявлені при відповідному граничному переході. Тому в статистичній фізиці загально прийнято переходити до границі нескінченного об'єму $\Lambda \to \infty$ (ця границя також називається термодинамічною границею).

На прикладі розглянемо асимптотичні властивості фізичної системи при термодинамічному граничному переході коли термодинамічні величини аналітично залежать від параметрів. Цей найпростіший випадок означає відсутність фазового переходу: режим високої температури і малої густини.

Мета статистичної механіки полягає в установленні відповідності між мікроскопічним і макроскопічним рівнями розуміння природи. Строго мікроскопічного опису більшості фазових переходів, що відбуваються в природі не існує [3,4].

Модель неперервного гармонічного осцилятора. Кластерна модель неперервного гармонічного осцилятора являє собою систему, в якій частинки об'єднані в пари-кластери. Одна з частинок пари головна і має координату $x \in R^d$. Друга частинка кластера може відхилюватись від основної частинки-осцилююча частинка. Величина її відхилення від основної частинки $U_x ЄR^2$ (точки x поки що для спрощення береться в одному напрямку). Частинки взаємодіють таким чином. Осцилюючі частинки взаємодіють тільки з відповідними основними частинками кластера. Для того, щоб осцилююча частинки утримувались біля x, її розподіл береться за гаусовою мірою, тобто у виразі для енергії стоїть au^2_x.

Позначення та основний результат:

– конфігураційний простір:

$$X = R^d, \quad U = R^1, \quad Z = X \otimes U;$$

$$\Gamma = \Gamma_Z := \left\{ \widetilde{\gamma} = (\gamma, U_\gamma) \subset Z \left(\gamma \cap K \right) < \infty \text{ для всіх } K \in B_c\left(R^d\right) \right\}; \qquad (1)$$

$$\widetilde{\gamma} = \left\{ (x_1, u_{x1}), \ldots, (x_n, u_n), \ldots \right\};$$

– міри на *КП;*

– міри на *Z;*

– σ_d - міра Лебега на X σ_1 - міра Лебега на $U;$

– $\sigma := \sigma_d \otimes \sigma_1$;

– $\Gamma_0 = \underset{n \in N_0}{U} \Gamma^{(n)}, \quad \Gamma^{(n)} := \{\eta C R^d \,|\, \eta \,| = n \}$ – простір скінчених конфігурацій, який відповідає ситуації, коли кількість частинок є фіксована.

Простір скінчених конфігурацій $\Gamma_\wedge$ у фіксованому об'ємі $\Lambda \subset R^d$

$$\lambda = \{x_1, ..., x_N \,|\, x_i \in \Lambda, N \in N_0 \}, \quad N_0 = NU\{O\},$$

що містять фіксовану кількість N частинок

$$\Gamma_\wedge^{(N)} := \{\gamma \in \Gamma_\wedge \| \gamma = N, \quad N \in N_0 \}, \quad \Gamma_\wedge^{(o)} := \phi.;$$

– міри на Γ_o, Γ_Λ;

– $\sigma^{(n)} := \sigma_d^{\otimes n} \otimes \sigma^{\otimes n} \; o\left(sym^n_{R^d \otimes R^1}\right)^{-1},$

де відображена $sym^n_{R^d \otimes R^1}$ – симетризація впорядкованого набору кластерів.

Граничний гібсовий розподіл зручніше отримати в рамках великого канонічного ансамбля. Тому введемо на КП міру Лебега-Пуассона

$$x_{z\sigma} := \sum_{n \geq 0} \frac{z^n}{n!} \sigma^{(n)}. \tag{2}$$

Потенціал взаємодії та енергія конфігурації

а) далеко діючий потенціал $\phi^{(l)}: R^d \rightarrow R:$

1) неперервний і $\phi^{(l)} \in L^1\left(R^d\right)$;

2) для будь-якої послідовності $(x_1, ..., x_n, ...)$ такої, що $|\, x_i - x_j \,| \geq \nu_0$ для $i \neq j$

$$\sup_{x \in R^d} \sum_{i=1}^{\infty} \phi^{(\ell)}(x - x_i) \leq \phi_0^{(\ell)} < a$$

б) короткодіючий потенціал $\phi^{(S)}: R^d \rightarrow R_+$

$$\phi^{(S)}(x-y) = +\infty, \quad |x-y| < \nu_0$$

і

$$\int_{|x| \geq \nu_0} \phi^{(S)}(x)\, dx < \infty. \tag{4}$$

Енергія взаємодії конфігурації $\widetilde{\gamma}$ кластерів

$$U(\widetilde{\gamma}) = \sum_{\{x,x'\} c \gamma} \left[\phi^{(\ell)}(x-x') u_x u_{x'} + \phi^{(S)}(x-x') + a u_x^2 + a u_{x'}^2\right].$$

В рамках великого канонічного апсамбля система нескінченного числа тотожних частинок описується нескінченною послідовністю кореляційних функцій. Для дослідження кореляційних функцій при малих значеннях активності використовується рівняння Кірквуда-Зальцбурга.

Для нашої моделі рівняння КЗ мають такий вигляд:

$$\rho_\wedge(\widetilde{\eta}) = z\, e^{-\beta W(\{\widetilde{x}\}, \eta \setminus \{\widetilde{x}\})} x_\wedge(\widetilde{\eta}) \int_{\Gamma_\wedge} \underset{\{\widetilde{y}\} \subset \widetilde{\gamma}}{\Pi} \left(e^{-\beta\left[\phi^{(\ell)}(x-y) u_x u_y + \phi^{(S)}(x-y) + a\left(u_x^2 + u_x^2\right)\right.} - 1 \right) \times$$

$$\times \rho_\wedge\left(\widetilde{\eta} \setminus \{\widetilde{x}\} \cup \widetilde{\gamma} \;\right)_1 \setminus_{z\sigma}(d\widetilde{\gamma})) \tag{5}$$

або більш детально

$$\rho_{\wedge}\left(\{\widetilde{x}_1\}\right)=\chi_{\wedge}\left(\{\widetilde{x}_1\}\right)z\left[1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\int_{\wedge^n}\prod_{j=1}^{n}\left(e^{-\beta\left[\phi^{(l)}\left(x_1-y_j\right)u_{x1}u_{yj}+\phi^{(S)}\left(x_1-y_j\right)+a\left(u_{x1}^2+u_{yj}^2\right)\right]}-1\right)\times\right.$$
$$\left.\times\rho_{\wedge}\left(\widetilde{x}_2,...,\widetilde{x}_m,\widetilde{y}_1,...\widetilde{y}_n\right)d\widetilde{y}_1...d\widetilde{y}_n\right]; \tag{6}$$

$$\rho_{\wedge}\left(\{\widetilde{x}_1,...,\widetilde{x}_m\}\right)=\chi_{\wedge}\left(\{\widetilde{x}_1,...,\widetilde{x}_m\}\right)z\,e^{-\beta W\left(\{x_1\},\{\widetilde{x}_2,...\widetilde{x}_m\}\right)}\times$$
$$\text{x}\left[\rho_{\wedge}\left(\{\widetilde{x}_2,...,\widetilde{x}_m\}\right)+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\int_{\wedge^n}\prod_{j=1}^{n}\left(e^{-\beta\left[\phi^{(l)}\left(x_1-y_j\right)u_{x_1}u_{y_j}+\phi^{(S)}\left(x_1-y_j\right)+a\left(u_{x_1}^2+u_{y_j}^2\right)\right]}-1\right)\right]\times$$
$$\times\rho_{\wedge}\left(\{\widetilde{x}_2,...\widetilde{x}_m,\widetilde{y}_1,...,\widetilde{y}_n\}\right)d\widetilde{y}_1...d\widetilde{y}_n \text{ при } m>1. \tag{7}$$

Щоб визначити оператор КЗ доводиться наступна Лема.

Величина

$$C(\beta)=\sup_{x\in R^d}\int_{R^d}\int_{R^1}\left|e^{-\beta\left[\phi^{(e)}\left(x-x^1\right)u_x u_{x1}+\phi^{(S)}\left(x-x^1\right)+a\left(u_x^2+u_{x1}^2\right)\right]}-1\right|dx\,dx'<\infty. \tag{8}$$

Це умова регулярності для нашої моделі.

Основний результат роботи формулюємо у вигляді:

Теорема 1. Для локально скінчених конфігурацій на КП кластерної моделі неперервного гармонічного осцилятора для комплексних значень активності

$$|Z|<e^{-2\beta B-1}C(\beta)^{-1}$$

існує граничний гібсовий розподіл до якого прямують кореляційні функції $\rho\left(\{\widetilde{x}_1,...\widetilde{x}_m\}\right)$ при $\Lambda\to\infty$, які є єдиними розв'язками рівнянь КЗ в просторі E_ξ.

Послідовність $\rho_{\wedge}$ при $V(\Lambda)\to\infty$ прямує до граничного гібсового розподілу в наступному сенсі:

Теорема 2. Для всіх Z з круга $|z|<e^{-\beta B-1}C(\beta)^{-1}$ функції $\rho_{\wedge}(\widetilde{x})_m$ мають своєю границею при $V(\Lambda)\to\infty$ функції $\rho(\widetilde{x})_m$ в тому розумінні, що $\left|\rho_{\wedge}(\widetilde{x})_m-\rho(\widetilde{x})_m\right|\le\xi^m\varepsilon(\Lambda)$ де функція $\lim_{\lambda\to\infty}\varepsilon(\lambda)=0$, а λ означає найменшу віддаль точок $x_1, ..., x_m\in\Lambda$ до границі сосуда Λ.

Список літератури

1. Рюэль Д. Статистическая механика / Рюэль Д. – М.: Мир, 1971. – 368 с.
2. Минлос Р.А. Введение в математическую статистическую физику / Минлос Р.А.– М.:МЦНМО, 2002. – 112 с.
3. Синай Я.Г. Теория фазовых переходов / Синай Я.Г. – М.: Наука, 1980. – 206 с.
4. Х. – 0. Георги Гиббсовские меры и фазовые переходы / Х. – 0. Георги – М.: «Мир», 1992. – 621с.
5. S. Albeverio, Yu. G. Kondratiev, M. Rockner. Analisis and geometry on configuration spaces / S. Albeverio, Yu. G. Kondratiev, M. Rockner – J. Funct. Anal. 154 (2), 444-500 (1998).

Одержано 19.03.10