3.3. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

МЕТОД ПРОИЗВОДЯЩЕГО ФУНКЦИОНАЛА В КЛАССИЧЕСКОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

Пилипенко Владимир Афанасьевич
канд. физ.-мат. наук, доцент
Тюменского государственного университета,
РФ, г. Тюмень
E-mail: v-pilipenko@list.ru

GENERATING FUNCTIONAL METHOD IN CLASSICAL STATISTICAL PHYSICS

Vladimir Pilipenko
candidate of Science, assistant professor of Tyumen State University,
Russia, Tyumen

АННОТАЦИЯ

Исследуется уравнение Боголюбова для производящего функционала бесконечных систем классической статистической физики. Сформулирован критерий фазовых переходов первого рода в методе производящего функционала.

ABSTRACT

The Bogoliubov equation for generating functional of classical statistical physics is studied. The first order phase transitions are considered on the basic of the generating functional method.

Ключевые слова: производящий функционал; фазовые переходы.
Keywords: generating functional; phase transitions.

Равновесные свойства конденсированного состояния вещества изучаются методом ансамблей Гиббса или методом частичных функций распределения. Помимо технических трудностей, которые имеются при использовании этих методов, есть и принципиальные вопросы, связанные с описанием критического состояния вещества и фазовых переходов в системе. Чтобы включить в систему статистической физики наличие фазовых переходов требуется выполнение термодинамического предельного перехода к бесконечной системе частиц.

Построенные на основе концепции термодинамического предельного перехода бесконечночастичные модели, описывающие объемные свойства реальных физических систем, и определение понятия предельного гиббсовского распределения [3, с. 48] позволило сформулировать основную проблему равновесной статистической физики как задачу описания всех предельных распределений Гиббса, отвечающих заданному гамильтониану, во всей области термодинамических состояний. Сложность этой проблемы требует привлечения далеко не традиционных в этой области математических средств.

Плодотворным в этом отношении является метод производящего функционала, эффективность применения которого к исследованию статистических систем обусловлена использованием понятий и методов функционального анализа. Производящий функционал ввел в статистическую физику Н.Н. Боголюбов в 1946 г. в работе [2, с. 99]. Математические проблемы метода производящего функционала, его связь с методом предельных гиббсовских распределений, а также применение этого метода в статистической физике рассмотрены в обзоре [4, с. 159].

Рассмотрим бесконечночастичные математические модели, описывающие объемные свойства систем одинаковых частиц, находящихся в равновесии со средой и имеющих с ней механический, тепловой и материальный контакты. Интенсивность теплового взаимодействия характеризуется величиной β, обратно пропорциональной температуре, а интенсивность материального взаимодействия характеризуется активностью z. Потенциальная энергия взаимодействия N частиц имеет вид

$$U(x)_N = \sum_{i=1}^{N} \Phi_1(x_i) + \sum_{i<j}^{N} \Phi_2(x_i, x_j) \qquad (1)$$

где потенциал внешнего поля $\Phi_1(x)$ удовлетворяет условию

$$\forall \beta > 0 \; exp(-\beta\Phi_1) \in L^{\infty}(R^{\nu}) \qquad (2)$$

а бинарный потенциал $\Phi_2(x, y)$ – симметричная функция, удовлетворяющая условию регулярности

$$\forall \beta > 0 \; exp\big(-\beta\Phi_2(x, y)\big) - 1 \in L^{\infty}(R^{\nu}) \cap L^1(R^{\nu}) \qquad (3)$$

Центральным в методе производящего функционала является уравнение Боголюбова – основное уравнение равновесной статистической физики, которому удовлетворяют производящие функционалы $A(t)$ гиббсовских состояний системы:

$$D(x)A(t) = z(x)A(h[x]t + f[x]) \tag{4}$$

с условием нормировки:

$$A(0) = 1 \tag{5}$$

где $D(x)A(t)$ – функциональная производная производящего функционала, определенного на пространстве интегрируемых функций $t(x) \in L^1(R^\nu)$. Через потенциалы взаимодействия выражаются функция Майера

$$f[x] \equiv f[x](y) = f(x,y) = exp\big(-\beta\Phi_2(x,y)\big) - 1$$

функция

$$h[x] \equiv f[x] + 1$$

и функция

$$z(x) = zexp(-\beta\Phi_1(x))$$

Свойства параметров $z(x)$ и $f[x]$ уравнения Боголюбова (4) обеспечивают существование первой функциональной производной у функционала $A(t)$ и, следовательно, решения уравнения Боголюбова лежат во множестве аналитических на $L^1(R^\nu)$ функционалов. Для конечных систем (все частицы находятся в области $\Delta \subset R^\nu$, что формально можно достигнуть, положив $\Phi_1(x) = \infty$, если $x \in R^\nu \backslash \Delta$) уравнение Боголюбова имеет единственное решение, являющееся производящим функционалом гиббсовского распределения статистическая сумма большого канонического ансамбля (БКА) Гиббса.

$$A_\Delta(t) = \frac{1}{\Xi}\sum_{N\geq 0}\frac{z^N}{N!}\int \chi_\Delta\,(x)_N exp\{-\beta U(x)_N\}\prod_{i=1}^{N}\big(1 + t(x_i)\big)d(x)_N \tag{6}$$

Где $$\Xi = \sum_{N\geq 0}\frac{z^N}{N!}\int \chi_\Delta\,(x)_N exp\{-\beta U(x)_N\}d(x)_N \tag{7}$$

Единственность решения уравнения Боголюбова для конечных систем означает, что существует только одна однородная фаза во всей области термодинамических состояний.

В случае бесконечных систем уравнение Боголюбова имеет, по крайней мере, одно решение, являющегося производящим функционалом гиббсовского распределения, если дополнительно наложить на потенциалы условия, приводящие к оценкам s-частичных функций распределения БКА

$$\forall \Delta \subset R^{\nu}\ \rho_{\Delta}(x)_s = D(x)_s A_{\Delta}(0) \leq b\alpha^s$$

с постоянными b>0 и α>0, зависящими, быть может, от (z, β), но не зависящими от Δ. Частичные функции распределения БКА имеют вид

$$\rho_{\Delta}(x)_s = \frac{1}{\Xi}\sum_{N\geq 0}\frac{z^N}{(N-s)!}\int \chi_{\Delta}\,(x)_{N-s} exp\{-\beta U(x)_N\} d(x)_{N-s}$$

Из существования производящего функционала гиббсовского распределения во всей области физических состояний термодинамической системы (z, β) следует существование решения и у всех точных интегральных и интегро-дифференциальных уравнений для частичных функций распределения, которые могут быть получены из уравнения Боголюбова. Подобный результат другими методами получен только при малых активностях и малых плотностях.

Уравнение Боголюбова (4) допускает обобщение на случай многокомпонентных систем с многочастичным взаимодействием как для непрерывных, так и для решеточных систем [5, с. 116].

Статистическим критерием фазовых переходов первого рода является наличие нескольких решений уравнения (4) с условием (5), являющихся производящими функционалами гиббсовских распределений при заданных термодинамических параметрах. Множество этих решений не пусто. Выяснена структура этого множества. Оно является выпуклым множеством, которое полностью характеризуются своими крайними точками. Эти точки интерпретируются в статистической физике как состояния, соответствующие чистым фазам. Поэтому понятна актуальность задачи по выделению тех параметров (z, β) с фиксированным взаимодействием, при которых уравнение Боголюбова имеет единственное нормированное решение (область однофазных состояний системы), и тех параметров (z, β), когда уравнение Боголюбова имеет несколько нормированных решений (область многофазных состояний системы). Несмотря на свою кажущуюся простоту, уравнение Боголюбова для бесконечных систем сложно для исследования. Поэтому при исследовании однозначной разрешимости желательно искать такие методы, которые не требуют явного построения решений или перехода к уравнениям для частичных функций распределения.

Как известно, для построения термодинамики системы достаточно знать унарную и бинарную функции распределения. Существующие приближения практически не поддаются обоснованию и зачастую приводят к термодинамической несогласованности теории. В монографии [1, с. 25] сформулирован вариационный принцип для термодинамического потенциала большого канонического ансамбля, который обеспечивает термодинамическую согласованность теории в любом приближении, получаемом из этого вариационного принципа.

Список литературы:

1. Аринштейн Э.А. Вариационный принцип в теории частичных функций распределения статистической физики. – М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2008. – 148 с.
2. Боголюбов Н.Н. Избранные труды, т. 2, Киев: Наукова думка, 1970, – с. 99–209.
3. Добрушин Р.Л. Задача единственности гиббсовского случайного поля и проблема фазовых переходов // Функц. анализ и его прилож., – 1968, – т. 2, – с. 44–57.
4. Назин Г.И. Метод производящего функционала // Теория вероятностей. Математическая статистика. Теоретическая кибернетика. Т. 22. Итоги науки и техники, ВИНИТИ АН СССР, 1984, М., – с. 159–201.
5. Пилипенко В.А. Решеточные системы с многочастичным взаимодействием //Вестник Тюменского госуниверситета. – 2002. – № 3. – С. 116–118.