Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. П. Маслов, О парной корреляционной функции, *Матем. заметки*, 1998, том 64, выпуск 1, 157–160

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm1381>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.237.206.68

26 апреля 2023 г., 16:20:23

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

О ПАРНОЙ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ

В. П. Маслов

В отличие от традиционного способа вычисления двухчастичной корреляционной функции, мы применим некоторый новый способ построения асимптотики решения многочастичного уравнения Лиувилля. С помощью этого асимптотического решения может быть выражена и корреляционная функция. Точки бифуркации этого решения вблизи вириального разложения будут точками фазового перехода.

Парную корреляцию можно вычислить, рассмотрев задачу для N -частичного оператора Лиувилля на торе

$$\begin{aligned} & \left(-i \sum_{j=1}^N \frac{p_j}{m} \frac{\partial}{\partial x} + i \sum_{j=1}^N \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^N \frac{\partial V(x_j - x_k)}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial p_j} \right) d(x_1, p_1; \dots; x_N, p_N; t) \\ & = i \frac{\partial}{\partial t} d(x_1, p_1; \dots; x_N, p_N; t), \end{aligned} \quad (1)$$

где x_j, p_j принадлежат тору T^3 радиуса A , $V(x) = V(-x) \in C^\infty$, $d(x_1, p_1; \dots; x_N, p_N; t) \in L^2(T^{6N})$ – симметричная относительно перестановки аргументов (x_j, p_j) и (x_k, p_k) функция.

Пусть N – четное число. Тогда (1) выражается через оператор вида

$$\begin{aligned} \hat{H}_N &= \frac{1}{(N/2)!} \int \dots \int dx_1 dp_1 \dots dx_N dp_N \hat{B}^+(x_1, p_1; x_2, p_2) \dots \hat{B}^+(x_{N-1}, p_{N-1}; x_N, p_N) \\ & \times \left(-i \sum_{j=1}^N \frac{p_j}{m} \frac{\partial}{\partial x_j} + i \sum_{j=1}^N \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^N \frac{\partial V(x_j - x_k)}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial p_j} \right) \\ & \times \text{Symm}_{x_1, p_1; \dots; x_N, p_N} \hat{B}^-(x_1, p_1; x_2, p_2) \dots \hat{B}^-(x_{N-1}, p_{N-1}; x_N, p_N), \end{aligned} \quad (2)$$

где операторы $\hat{B}^\pm(x_1, p_1; x_2, p_2)$ удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$\begin{aligned} [\hat{B}^-(x_1, p_1; x_2, p_2), \hat{B}^+(y_1, k_1; y_2, k_2)] &= \delta(x_1 - y_1) \delta(p_1 - k_1) \delta(x_2 - y_2) \delta(p_2 - k_2), \\ [\hat{B}^\pm(x_1, p_1; x_2, p_2), \hat{B}^\pm(y_1, k_1; y_2, k_2)] &= 0, \end{aligned}$$

и

$$\text{Symm}_{x_1, p_1; \dots; x_N, p_N} \Phi(x_1, p_1; \dots; x_N, p_N) = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} (\hat{P}_{\sigma} \Phi)(x_1, p_1; \dots; x_N, p_N)$$

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 96-01-01544.

(здесь сумма берется по всем перестановкам σ аргументов (x_j, p_j) , а $\hat{P}_\sigma$ – оператор перестановки аргументов). В приближении, когда $N \rightarrow \infty$, коммутатор между операторами $\hat{B}^-(x_1, p_1; x_2, p_2)$ и $\hat{B}^+(y_1, k_1; y_2, k_2)$ мал, и оператору (2) соответствует бесконечномерная классическая гамильтонова система (нестандартные характеристики)

$$\begin{aligned}
 & \int \cdots \int dx_3 dp_3 \cdots dx_N dp_N \Phi^*(x_3, p_3; x_4, p_4; t) \cdots \Phi^*(x_{N-1}, p_{N-1}; x_N, p_N; t) \\
 & \quad \times \frac{\partial}{\partial t} \text{Symm}_{x_1, p_1; \dots; x_N, p_N} \Phi(x_1, p_1; x_2, p_2; t) \cdots \Phi(x_{N-1}, p_{N-1}; x_N, p_N; t) \\
 & = \int \cdots \int dx_3 dp_3 \cdots dx_N dp_N \Phi^*(x_3, p_3; x_4, p_4; t) \cdots \Phi^*(x_{N-1}, p_{N-1}; x_N, p_N; t) \\
 & \quad \times \left(-\frac{p_1}{m} \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{p_2}{m} \frac{\partial}{\partial x_2} - \left(\frac{N}{2} - 1 \right) \left(\frac{p_3}{m} \frac{\partial}{\partial x_3} + \frac{p_4}{m} \frac{\partial}{\partial x_4} \right) + \frac{\partial V}{\partial x_1} (x_1 - x_2) \frac{\partial}{\partial p_1} \right. \\
 & \quad + \frac{\partial V}{\partial x_2} (x_1 - x_2) \frac{\partial}{\partial p_2} + \left(\frac{N}{2} - 1 \right) \left(\frac{\partial V}{\partial x_1} (x_1 - x_3) \frac{\partial}{\partial p_1} + \frac{\partial V}{\partial x_3} (x_1 - x_3) \frac{\partial}{\partial p_3} \right. \\
 & \quad + \frac{\partial V}{\partial x_1} (x_1 - x_4) \frac{\partial}{\partial p_1} + \frac{\partial V}{\partial x_4} (x_1 - x_4) \frac{\partial}{\partial p_4} + \frac{\partial V}{\partial x_2} (x_2 - x_3) \frac{\partial}{\partial p_2} + \frac{\partial V}{\partial x_3} (x_2 - x_3) \frac{\partial}{\partial p_3} \\
 & \quad \left. + \frac{\partial V(x_2 - x_4)}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial p_2} + \frac{\partial V}{\partial x_4} (x_2 - x_4) \frac{\partial}{\partial p_4} \right) \\
 & \quad + \left(\frac{N}{2} - 1 \right) \left(\frac{\partial V}{\partial x_3} (x_3 - x_4) \frac{\partial}{\partial p_3} + \frac{\partial V}{\partial x_4} (x_3 - x_4) \frac{\partial}{\partial p_4} \right) \\
 & \quad + \frac{1}{2} \left(\frac{N}{2} - 1 \right) \left(\frac{N}{2} - 2 \right) \left(\frac{\partial V}{\partial x_3} (x_3 - x_5) \frac{\partial}{\partial p_3} + \frac{\partial V}{\partial x_5} (x_3 - x_5) \frac{\partial}{\partial p_5} \right. \\
 & \quad + \frac{\partial V(x_3 - x_6)}{\partial x_3} \frac{\partial}{\partial p_3} + \frac{\partial V}{\partial x_6} (x_3 - x_6) \frac{\partial}{\partial p_6} + \frac{\partial V(x_4 - x_5)}{\partial x_4} \frac{\partial}{\partial p_4} + \frac{\partial V}{\partial x_5} (x_4 - x_5) \frac{\partial}{\partial p_5} \\
 & \quad \left. \left. + \frac{\partial V(x_4 - x_6)}{\partial x_4} \frac{\partial}{\partial p_4} + \frac{\partial V}{\partial x_6} (x_4 - x_6) \frac{\partial}{\partial p_6} \right) \right) \\
 & \quad \times \text{Symm}_{x_1, p_1; \dots; x_N, p_N} \Phi(x_1, p_1; x_2, p_2; t) \cdots \Phi(x_{N-1}, p_{N-1}; x_N, p_N; t), \tag{3}
 \end{aligned}$$

где $\Phi(x_1, p_1; x_2, p_2; t) \in L^2(T^{12})$.

Будем искать решения уравнения (3) такие, что

$$\Phi(x_1, p_1; x_2, p_2; t) = \Phi(x_2, p_2; x_1, p_1; t) \quad \text{и} \quad \|\hat{\Phi}\hat{\Phi}^*\| < 1,$$

где $\hat{\Phi}\hat{\Phi}^*$ – ядерный оператор в $L^2(T^{2n})$, которому отвечает ядро

$$k(x_1, p_1; x_2, p_2; t) = \iint dy dk \Phi(x_1, p_1; y, k; t) \Phi^*(y, k; x_2, p_2; t),$$

$\|\cdot\|$ – норма ограниченных операторов.

В этом случае уравнение нестандартных характеристик для различных N можно просуммировать “по Пуассону”. Получим уравнение для $\Phi(x_1, p_1; x_2, p_2; t)$ вида

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} \Phi(x_1, p_1; x_2, p_2; t) = - \left(\frac{p_1}{m} \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{p_2}{m} \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \Phi(x_1, p_1; x_2, p_2; t) \\
 & \quad + \varepsilon \left(\frac{\partial V}{\partial x_1} (x_1 - x_2) \frac{\partial}{\partial p_1} + \frac{\partial V}{\partial x_2} (x_1 - x_2) \frac{\partial}{\partial p_2} \right) \Phi(x_1, p_1; x_2, p_2; t) \\
 & \quad + \iint dy dk \left(\frac{\partial V}{\partial x_1} (x_1 - y) \frac{\partial}{\partial p_1} + \frac{\partial V}{\partial y} (x_1 - y) \frac{\partial}{\partial p_2} \right) (G(y, \overset{3}{k}; y, \overset{1}{k}; t) \Phi(x_1, \overset{1}{p}_1; x_2, p_2; t)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + G(y, \overset{3}{k}; x_1, \overset{1}{p}_1; t) \Phi(x_1, \overset{1}{p}_1; x_2, p_2; t) + \iint dy dk \left(\frac{\partial V}{\partial x_2} (x_2 - y) \frac{\overset{2}{\partial}}{\partial p_2} + \frac{\partial V}{\partial y} (x_2 - y) \frac{\overset{2}{\partial}}{\partial k} \right) \\
& \times (G(y, \overset{3}{k}; y, \overset{1}{k}; t) \Phi(x_1, p_1; x_2, p_2; t) + G(y, \overset{3}{k}; x_2, \overset{1}{p}_2; t) \Phi(x_1, p_1; y, \overset{1}{k}; t)) \\
& - \varepsilon \iiint dy dk dy' dk' \left(\frac{\partial V(y - y')}{\partial y} \frac{\overset{2}{\partial}}{\partial k} + \frac{\partial V(y - y')}{\partial y'} (x_2 - y) \frac{\overset{2}{\partial}}{\partial k'} \right) \\
& \times (R^*(y, \overset{1}{k}; y', \overset{1}{k}'; t) \Phi(x_1, p_1; y, \overset{3}{k}; t) \Phi(y', \overset{3}{k}'; x_4, p_2; t)),
\end{aligned}$$

где цифра над аргументом обозначает порядок действия оператора (см. [1]). Здесь

$$R(x_1, p_1; x_2, p_2; t) = \iint dy dk M(x_1, p_1; y, k; t) \Phi(y, k; x_2, p_2; t),$$

$$G(x_1, p_1; x_2, p_2; t) = \iiint dy dk dy' dk' \Phi^*(x_1, p_1; y, k; t) \Phi(y, k; y', k'; t) M^*(y', k'; x_2, p_2; t),$$

а $M(x_1, p_1; x_2, p_2; t)$ определяется из условия

$$- \iint dy dk M(x_1, p_1; y, k; t) K(y, k; x_2, p_2; t) + M(x_1, p_1; x_2, p_2; t) = \delta(x_1 - x_3) \delta(p_1 - p_2).$$

Мы можем искать стационарное распределение уравнения (3) в виде

$$\Phi(x_1, p_1; x_2, p_2) = \frac{\exp(-(p_1^2 + p_2^2)/\theta)}{(2\pi m\theta)^{1/4}} \Phi(x_1, x_2).$$

Такой вид решения отвечает уравнению Максвелла по импульсам. Для $\Phi(x_1, x_2) = \Phi(|x_1 - x_2|)$ получим уравнение вида

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \Phi}{\partial x_1}(x_1, x_2) + \frac{1}{2\theta} \frac{\partial V}{\partial x_1}(x_1 - x_2) R(x_1, x_2) \\
& + \frac{1}{2\theta} \int dy \frac{\partial V}{\partial x_1}(x_1 - y) (G(y, y) \Phi(x_1, x_2) + G(y, x_1) \Phi(y, x_2)) = 0,
\end{aligned}$$

где

$$R(x_1, x_2) = \int dy M(x_1, y) \Phi(y, x_2), \quad G(x_1, x_2) = \iint dy dy' \Phi^*(x_1, y) \Phi(y, y') M^*(y', x_2),$$

а $M(x_1, x_2)$ определяется из условия

$$M(x_1, x_2) - \iint dy dy' \Phi(x_1, y) \Phi^*(y, y') M(y', x_2) = \delta(x_1 - x_2).$$

Положим $\Phi(x_1, x_2) = C + \varphi(x_1, x_2)$, где $\varphi(x_1, x_2)$ – финитная функция, $C = 1/A^3$. Далее, переходя к пределу $A \rightarrow \infty$ и полагая $x = |x_1 - x_2|$, окончательно получим

$$\begin{aligned}
& \varphi'_x(x) + \frac{1}{2\theta} V'_x(x) R(x) + \frac{\pi}{\theta} \int \int_{\substack{0 \leq y \leq \infty \\ -1 \leq \tau \leq 1}} y^2 \tau V'(y) G(y) \varphi(\sqrt{x^2 + y^2 - 2xy\tau}) dy d\tau = 0, \\
& R(x) = \varphi(x) + 4\pi^2 \int_0^\infty \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 dy dz d\tau d\tau' \\
& \quad \times y^2 z^2 \varphi(\sqrt{x^2 + y^2 - 2xy\tau}) \varphi^*(\sqrt{y^2 + z^2 - 2yz\tau'}) R(z), \\
& G(x) = 2\pi \int_0^\infty \int_{-1}^1 dy d\tau y^2 \varphi^*(\sqrt{x^2 + y^2 - 2xy\tau}) \\
& \quad + \int_0^\infty \int_0^\infty \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 dy dz d\tau d\tau' y^2 z^2 \varphi^*(\sqrt{x^2 + y^2 - 2xy\tau}) \varphi(\sqrt{y^2 + z^2 - 2yz\tau'}) G(z).
\end{aligned}$$

Отсюда получаются следующие уравнения для G и R :

$$\begin{aligned}
 G'_x + \frac{\pi}{\theta} \int \int_{\substack{0 \leq y \leq \infty \\ -1 \leq \tau \leq 1}} y^2 \tau V'(y) G(y) G(\sqrt{x^2 + y^2 - 2yx\tau}) dy d\tau \\
 + \frac{\pi}{\theta} \int \int_{\substack{0 \leq y \leq \infty \\ -1 \leq \tau \leq 1}} y^2 \tau V'(y) R^*(y) R(\sqrt{x^2 + y^2 - 2yx\tau}) dy d\tau = 0, \\
 R'_x + \frac{1}{2\theta} V'(x) R + \frac{\pi}{\theta} \int \int_{\substack{0 \leq y \leq \infty \\ -1 \leq \tau \leq 1}} y^2 \tau V'(y) G(y) R(\sqrt{x^2 + y^2 - 2yx\tau}) dy d\tau \\
 + \frac{\pi}{\theta} \int \int_{\substack{0 \leq y \leq \infty \\ -1 \leq \tau \leq 1}} y^2 \tau V'(y) R(y) G(\sqrt{x^2 + y^2 - 2yx\tau}) dy d\tau = 0.
 \end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned}
 G(x) + 2\pi \int \int dy d\tau y^2 G(\sqrt{x^2 + y^2 - 2yx\tau}) G(y) \\
 = 2\pi \int \int dy d\tau y^2 R^*(\sqrt{x^2 + y^2 - 2yx\tau}) R(y).
 \end{aligned} \tag{5}$$

Уравнение в вариациях для (3) около решения $\varphi = \text{const}$ дает первую точку

$$\theta = -\frac{N}{V} \min_p \tilde{V}(p),$$

которую, по-видимому, можно трактовать как точку фазового перехода из газообразного состояния в жидкое, поскольку решение $\varphi = 0$ приводит к корреляционной функции $\Phi\Phi^*$, равной константе, и, следовательно, отвечает газообразному состоянию.

Это означает, что при температурах меньших температуры фазового перехода имеются нетривиальные решения уравнений (4), (5).

В заключение выражаю глубокую благодарность Г. В. Ковалю, оказавшему помощь в проведении трудоемких вычислений.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Маслов В. П. Операторные методы. М.: Наука, 1973.

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Поступило
26.05.98