Національна Академія наук України
Інститут математики

На правах рукопису

ПІЛЯВСЬКИЙ Анатолій Іванович

ДОСЛІДЖЕННЯ НЕСКІНЧЕННИХ СИСТЕМ ЗАРЯДЖЕНИХ ЧАСТИНОК МЕТОДОМ ФУНКЦІОНАЛЬНОГО ІНТЕГРУВАННЯ

01.01.03 - математична фізика

АВТОРЕФЕРАТ
дисертації на здобуття вченого ступеня
доктора фізико-математичних наук

Київ 1995

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана у відділі математичних методів у статистичній механіці Інституту математики Національної Академії Наук України

Наукові консультанти: - член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор ПЕТРИНА Д.Я.
- доктор фізико-математичних наук, РЕБЕНКО О.Л.

Офіційні опоненти: - доктор фізико-математичних наук, професор ГОЛОВКО М.Ф.

- доктор фізико-математичних наук, професор ЕЙДЕЛЬМАН С.Д.

- доктор фізико-математичних наук, професор СВІДЗІНСЬКИЙ А.В.

Провідна установа - Харківський державний університет

Захист дисертації відбудеться "18" квітня 1995 року о 15 годині на засіданні спеціалізованої ради Д.01.66.02 при Інституті математики НАН України за адресою: 252601 Київ - 4, вул. Терещенківська, 3.

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці Інституту.

Автореферат розісланий "16" березня 1995 р.

Вчений секретар спеціалізованої ради ЛУЧКА А.Ю.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Дослідження станів нескінченних систем заряджених частинок є важливою задачею сучасної математичної фізики, яка має як прикладне, так і теоретичне значення.

Стани скінченних систем повністю визначаються послідовністю функцій розподілу (або кореляційних функцій) в класичному випадку і послідовністю статистичних операторів комплексів частинок (або редукованих матриць густини) - в квантовому. При скінченному числі частинок і об`ємі системи ці функції (оператори), з математичної точки зору, визначаються строго. Якщо у виразах для них попрямувати (при постійній густині) число частинок і об`єм до нескінченності (виконати, так званий, термодинамічний граничний перехід), ми і отримаємо функції (оператори), що описують стани нескінченних систем заряджених частинок. Саме такий підхід і використовується в нашій роботі.

Проблема обгрунтування термодинамічного граничного переходу для систем з кулонівською взаємодією досить складна і вимагає розробки і використання найсучасніших математичних методів. Суттєві успіхи при описі просторово однорідних систем заряджених частинок пов`язані з працями Д. Бріджеса (D. Brydges) (зарядово-симетричний газ на гратці), Д. Бріджеса і П. Федербуша (P. Federbush) (неперервні системи), О.Л. Ребенка (іон-дипольні системи), а також Т. Імбрі (T. Imbrie) (системи типу желе). Ці результати пов`язані з відкриттям тісного зв`язку між модельними системами квантової теорії поля і статистичної механіки. Введення в статистичну механіку евклідових полів і використання Sine-Gordon - перетворення дало можливість подати вирази для функцій розподілу спочатку при скінченному об`ємі у вигляді функціональних інтегралів, а потім для дослідження їх при $\Lambda \nearrow R^3$

застосувати такі потужні методи як метод кластерних розкладів та контурну техніку (Глимм Дж., Джаффе А. Математические методы квантовой физики. Подход с использованием функциональных интегралов. - М.; Мир, 1984. - 448с.).

Особливе значння має розробка математично строгих методів описання нескінченних просторово-неоднорідних систем заряджених частинок, при наявності в середовищі великої кількості непроникних діелектричних включень або перешкод (так званої динамічної мембрани), коли виникають додаткові трудноші, пов`язані з необхідністю враховувати заряди, що індукуються на поверхнях розділу областей з різними діелектричними проникностями. Не менш важливим є також описання нескінченних систем заряджених частинок, що дифундують у рідині. Актуальність цих проблем зумовлена в першу чергу тим, що вони мають безпосереднє відношення до теорії процесу протікання розчинів електролітів через мембрани, дослідженню якого в останні роки приділяється все більше уваги і який відіграє важливу роль у природі та техніці.

Важливою є також задача розробки методів дослідження таких нескінченних квантових модельних систем заряджених частинок, які є точно розв`язувальними. Ця задача розглядається в роботі на прикладі модельної системи теорії надпровідності.

Мета роботи. Дослідити нескінченні просторово-неоднорідні та нерівноважні системи класичних заряджених частинок за допомогою узагальнення на такі системи методу кластерних розкладів, а також розробити методи для математично строгого описання нескінченних квантових модельних систем (модельної системи теорії надпровідності).

Методика дослідження. Застосовуються методи евклідової квантової теорії поля та теорії функціональних інтегралів.

Теоретична і практична цінність дослідження та його наукова новизна. Запропоновано ефективний метод визначення потенціалів електростатичних взаємодій як між частинками, так і між частинками і зарядами, індукованими на поверхнях перешкод. Важливою особливістю цього методу, в основі якого лежить віднімальна процедура, є те, що за перше наближення береться точний розв`язок задачі для випадку, коли перешкоди враховуються незалежно, а вплив перешкод одна на одну враховується методами теорії збурень.

Для перешкод сферичної форми отримані в явному вигляді потенціали електростатичної взаємодії між частинками і між частинками і зарядами, що індукуються на поверхнях перешкод. Проведено дослідження цих потенціалів при різних співвідношеннях між діелектричними проникностями середовища і перешкод.

За допомогою методів евклідової квантової теорії поля отримані і досліджені потенціали екранованих взаємодій між частинками і між частинками і зарядами, що індукуються на поверхнях перешкод.

Для функцій розподілу системи заряджені частинки-динамічна мембрана побудовані кластерні розклади і для достатньо високих значень температури доведено збіжність кластерних розкладів і існування функцій розподілу в границі $\Lambda \nearrow R^3$. Встановлено порушення експоненціальної кластеризації функцій розподілу. Доведено, що в напрямку перпендикулярному до мембрани функції розподілу експоненціально кластеризуються, а вздовж поверхні мембрани вони спадають степенево (в границі $\Lambda \nearrow R^3$).

Для нерівноважних кореляційних функцій системи заряджених частинок, що дифундують у рідині і взаємодіють через юкавівський потенціал, побудовані кластерні розклади, і для скінченного часового інтервалу і достатньо високих температур доведено їх збіжність в границі $\Lambda \nearrow R^3$. Доведено також експоненціальну кластеризацію (в границі $\Lambda \nearrow R^3$) кореляційних функцій.

Отримані результати можуть бути ефективо використані для розрахунків конкретних термодинамічних характеристик просторово-неоднорідних систем заряджених частинок, а також для описання, наприклад, явища оберненого осмосу.

Досліджено нескінченну квантову модельну систему типу БКШ-Боголюбова за допомогою методу функціонального інтегрування та техніки евклідових квантових полів. Це дозволило застосувати варіант принципу великих відхилень і отримати точний розв`язок, який був раніше отриманий методом апроксимуючого гамільтоніану.

Метод апроксимуючих гамільтоніанів узагальнено на нерівноважні квантові модельні системи з взаємодією, що розділяється. Це дозволило описати безпосередньо в термодинамічній границі еволюцію модельної системи типу БКШ-Боголюбова.

Практична значимість цих результатів в тому, що вони можуть бути використані для опису властивостей явища надпровідності.

Апробація результатів. Матеріали дисертації доповідались та обговорювались на VI Республіканській конференції з статистичної фізики (Львів, 1982 р.), Міжнародній школі з фізики іонної сольватації (Львів, 1983 р.), Міжнародному симпозіумі з вибраних проблем статистичної механіки (Дубна, 1985 р.), II Радянсько-Італійському симпозіумі з проблем статистичної фізики (Львів, 1985 р.), Всесоюзній школі "Динамічні системи і турбулентність" (Кацивелі, 1988 р.), IV Міжнародній школі з нелінійних і турбулентних процесів у фізиці (Київ, 1989), Міжнародній школі "Математичні методи в статистичній механіці" (Дубна, 1990 р.). X

Міжнародному конгресі з математичної фізики (Лейпціг, Німеччина, 1991 р.), 28 Зимовій школі з теоретичної фізики (Карпач, Польща, 1992 р.), III Міжнародній школі "Еволюційні стохастичні системи: теорія і застосування у фізиці і біології" (Кацивелі, 1992), I Українській конференції "Структура та фізичні властивості невпорядкованих систем" (Львів, 1993 р.), II Українсько-Американській конференції з диференціальних рівнянь і їх застосувань (Судак, 1993 р.), а також на семінарах відділу математичних методів в статистичній механіці Інституту математики НАН України (керівник - член-кореспондент НАН України Д.Я.Петрина), на семінарах в Інституті фізики конденсованих систем НАН України (керівник - професор М.Ф.Головко), Фізико-технічному інституті низьких температур НАН України, Інституті теоретичної фізики НАН України.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 21 друкована праця. Основні результати отримані автором самостійно. Вклад кожного з співавторів чітко виділено в дисертаційній роботі.

Об'єм та структура. Дисертація складається з вступу, шести глав, списку цитованої літератури, що містить 237 джерел, викладена на 247 сторінках і включає 3 рисунки.

Основний зміст роботи

У вступі подано короткий огляд по теорії нескінченних систем заряджених частинок, виділено математичні проблеми, що виникають при строгому описанні просторово-неоднорідних систем заряджених частинок, сформульовано задачі, що розв'язуються в дисертації, обгрунтовано актуальність виконаних досліджень, а також подано стислий виклад змісту роботи і основних результатів.

У першій главі визначається потенціальна енергія електростатичної взаємодії системи заряджених частинок і динамічної мембрани.

Результати глави отримані автором за методикою Д.Я.Петрини.

У §1 першої глави задача про визначення потенціальної енергії електростатичної взаємодії зводиться до системи інтегральних рівнянь для густин зарядів, індукованих на поверхнях перешкод.

Нехай у просторі R^3 задано шар T, який обмежений двома паралельними площинами Γ^+ і Γ^-. В шарі T виділимо область S, яка є об`єднанням однозв`язних областей S_a ($a = 1,2,\ldots$), що не перетинаються і обмежені гладкими поверхнями Ляпунова ∂S_a. Позначимо через Ω область $\Omega = R^3 \setminus S$, а через ε_1 та ε_2 відповідно діелектричні проникності області Ω і областей S_a. Область Ω будемо також називати середовищем, області S_a - перешкодами, або тілами в середовищі, а область S - динамічною мембраною. Нехай зовні тіл S_a у точках $q_{\alpha 1}, \ldots, q_{\beta N}$ розміщені N частинок M сортів з зарядами e_α, де α - сорт зарядів. Необхідно знайти потенціал електростатичної взаємодії між частинками $\Phi^c_{\alpha\beta}$. Потенціал $\Phi^c_{\alpha\beta}$ можна знайти, якщо відомий потенціал електростатичного поля $\psi(q)$, що створюється системою частинок і динамічною мембраною. В свою чергу, потенціал $\psi(q)$ можна подати у вигляді суми об`ємного потенціалу і суми потенціалів простого шару

$$\psi(q) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_1} \sum_{\alpha, i} \frac{e_\alpha}{|q - q_{\alpha i}|} + \frac{1}{4\pi\varepsilon_1} \sum_a \int_{\partial S_a} \frac{\sigma_a(y)}{|q - y|}\, dy. \qquad (1)$$

До того ж щільність простого шару σ_a задовольняє систему інтегральних рівнянь:

$$\sigma_a + \lambda \int_{\partial S_a} \sigma_a(y) \frac{\cos(x-y, n_{a\,x})}{2\pi|x-y|^2} dS_y +$$

$$+ \lambda \sum_{\substack{b \\ (b\neq a)}} \int_{\partial S_b} \sigma_b(y) \frac{\cos(x-y, n_{b\,x})}{2\pi|x-y|^2} dS_y = \qquad (2)$$

$$= \sum_{\alpha, l} \frac{e_\alpha}{2\pi|x-q_{\alpha\,l}|^2} \cos(x-q_{\alpha\,l}, n_{\alpha\,x}),$$

де $\lambda = \dfrac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}$, а $n_{a\,x}$ - зовнішня нормаль до ∂S_a у точці $x \in \partial S_a$.

У §2 проведено дослідження системи (2) в припущенні, що $|\lambda| < 1$ і всі тіла S_a -кулі одного і того ж діаметра d.

Теорема 1.2.1 *Система інтегральних рівнянь (2) для розподілів перешкод, що задовольняють умову*

$$\max_a \sum_b \frac{d^3}{r_{ab}^3} \leq C_0 \qquad (3)$$

де C_0 - деяка стала, а r_{ab} - відстань між a - ю та b - ю перешкодами, має єдиний розв'язок.

У дисертації наведено два приклади розподілів перешкод в області T, що задовольняють умову (3).

В §3 методом модифікованої теорії збурень побудовані розв'язки системи рівнянь (2).

Введемо величину ξ, що характеризує геометричну структуру і матеріал динамічної мембрани за формулою

$$\xi = \frac{|\lambda|}{1-|\lambda|} C_0 .$$

Теорема 1.3.1 *Якщо розподіл перешкод в області T задовольняє умову (3), то при $\xi < 1$ розв'язок системи рівнянь (2) можна подати у вигляді*

$$\sigma_a = \sigma_a^1 + \tilde{\sigma}_a \quad ,$$

де σ_a^1 - густина зарядів, які індукувалися б на кожній перешкоді у відсутності всіх інших перешкод у мембрані, а $\tilde{\sigma}_a$ - густина, що враховує ефект взаємного впливу перешкод. До того ж, густина σ_a^1 може бути знайдена точно, а $\tilde{\sigma}_a$ подається у вигляді збіжного ряду за степенями ξ і має порядок $O(\xi)$.

У §4 визначено потенціал $\psi(q)$.

Теорема 1.4.1 *Нехай розподіл перешкод у мембрані задовольняє умову (3). Тоді при $\xi < 1$ потенціал $\psi(q)$ можна подати у вигляді*

$$\psi = \psi_0 + \psi_1 + \tilde{\psi} \quad ,$$

де ψ_0 - потенціал системи частинок у однорідному середовищі;

ψ_1 - сума потенціалів тих зарядів, що індукувалися б на кожній перешкоді, за умови відсутності всіх інших перешкод у мембрані;

$\tilde{\psi}$ - потенціал, який враховує взаємний вплив перешкод одна на одну, подається збіжним рядом за степенями ξ і має порядок $O(\xi)$.

У §5 отримані у першому наближенні за ξ явні вирази для потенціалу $\Phi^c_{\alpha\beta}$, а також для потенціалу $\Phi^{c(im)}_\alpha$, який визначає ще одну важливу для описання системи заряджених частинок і динамічної мембрани величину - потенціал взаємодії частинки з зарядами, що індуковані на поверхні мембрани. Проведено дослідження одержаних виразів.

Твердження 1.5.1. *Потенціал* $\psi^{(1)} = \psi_0 + \psi_1$ *при* $x \notin \partial S_{\Lambda}$ *обмежений у* Ω .

Твердження 1.5.2. *При* $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$ $(\varepsilon_1 > \varepsilon_2)$ *мембрана притягує (відштовхує) частинки. До того ж при наближенні частинки до поверхні мембрани потенціал* $\Phi_a^{c(im)}$ *необмежено зростає (спадає).*

У §6 проаналізовано можливість покращення степені точності розв'язку системи рівнянь (2).

За допомогою віднімальної процедури запропоновано метод побудови розв'язків системи рівнянь (2) , який дозволяє послабити умову (3).

В <u>другій</u> главі побудовані вирази для кореляційних функцій просторово-неоднорідної системи заряджених частинок в скінченній області Λ $(\Lambda \subset R^3)$ у вигляді функціональних інтегралів і виконується термодинамічний граничний перехід по короткодіючих силах.

Були використані результати Д. Бріджеса і П. Федербуша (для однорідних іонних систем) та О.Л. Ребенка (для однорідних іонно-дипольних систем). Автору належить узагальнення цих результатів на просторово-неоднорідний випадок.

У §1 проаналізовано проблему термодинамічного граничного переходу у виразах для рівноважних кореляційних функцій $\rho^{\Lambda}_{(\alpha)_m}(x)_m$, які у формалізмі великого канонічного ансамблю мають вигляд:

$$\rho^{\Lambda}_{(\alpha)_m}(x)_m = \Xi_{\Lambda}^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\alpha)_n} z^{m+n}_{(\alpha)} \int_{\Lambda^n} (dx)_{m+n\setminus m} \exp\left(-\beta U_{(\alpha)_{m+n}}\right). \quad (4)$$

де Ξ_{Λ} - велика статистична сума

$$\Xi_\Lambda = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\alpha)_n} z^{n}_{(\alpha)} \int_\Lambda (dx)_0 \exp\left(-\beta U_{(\alpha)_n}\right), \tag{5}$$

яка є повною мірою фазового простору. Тут $\beta = (kT)^{-1}$, k - стала Больцмана, T - температура, $(\alpha)_n = \alpha_1,\ldots,\alpha_n$,

$(\alpha)_{n\backslash s} = \alpha_{s+1},\ldots,\alpha_n$, $U_{(\alpha)_n}$ - потенціальна енергія частинок сорту $\alpha_1,\ldots,\alpha_n$, яка є сумою парних потенціалів $\Phi^c_{\alpha\beta}$, $(dx)_n = dx_1\ldots dx_n$, $z^n_{(\alpha)} = z_{\alpha_1}\ldots z_{\alpha_n}$ - активності.

Потенціал кулонівської взаємодії $\Phi^c_{\alpha\beta}$ не задовольняє умови регулярності та стабільності. Ось чому виникає необхідність введення додаткової взаємодії на близьких відстанях між частинками (короткодіючі сили) і використання гіпотези Дебая (перейти у виразах (4) для кореляційних функцій до екранованого потенціалу юкавівського типу). Це, в свою чергу, надає певні особливості для термодинамічного граничного переходу. В цьому випадку його слід виконати спочатку по короткодіючих силах, а потім по кулонівських.

Реалізації першої частини цієї програми і присвячена глава 2.

У §2 вводиться короткодіюча взаємодія і виконується допоміжна регуляризація.

Введемо скінченний об'єм Λ' ($\Lambda \subset \Lambda' \subset R^3$). Будемо вважати, що в області $\Lambda \cap \Omega$ частинки взаємодіють через короткодіючу і кулонівську взаємодію, при цьому на $\partial\Lambda$ для кулонівської взаємодії задано умови Діріхле, а в області $\Lambda' \setminus \Lambda\cap\Omega$ частинки взаємодіють тільки через короткодіючий потенціал (потенціал твердих куль радіуса r_0). Модифікуємо кулонівську взаємодію поблизу

$\partial\Lambda$ і введемо регуляризовані потенціали $\Phi^{s\lambda}_{\alpha\beta}$ і $\Phi^{c\lambda}_{\alpha\beta}$ за формулами

$$\Phi^{s\lambda}_{\alpha\beta} = \chi_{\Lambda\setminus S}(x)\left[\Phi^{s}_{\alpha\beta}(x,y) + e_\alpha \frac{\exp\left(-\dfrac{|x-y|}{\lambda I_D}\right)}{4\pi|x-y|} e_\beta\right]\chi_{\Lambda\setminus S},$$

$$\Phi^{c\lambda}_{\alpha\beta} = e_\alpha U^{c\lambda} e_\beta = e_\alpha \{U(x,y) - \chi_{\Lambda\setminus S}(x)\left(-\varepsilon_1\Delta + \frac{1}{\lambda^2 I_D}\right)^{-1}(x,y)\chi_{\Lambda\setminus S}(y)\} e_\beta,$$

де $\chi_\Lambda(x)$ - характеристична функція області Λ, $I_D = \left(4\pi\sum_\alpha z_\alpha e_\alpha^2\beta\right)^{-\frac{1}{2}}$ - дебаєвський радіус системи, λ - параметр $(\lambda > 0)$, Δ - оператор Лапласа в області Λ з граничними умовами Діріхле на $\partial\Lambda$, *U(x,y)* - розв'язок задачі:

$$\Delta U(x,y) = -\frac{1}{\varepsilon_1}\delta(x-y), \quad x \in \Omega;$$

$$\Delta U(x,y) = 0, \quad x \in R^3 \setminus \Omega;$$

$$U_+(x) = U_-(x), \quad \varepsilon_1 \frac{\partial U_+}{\partial n} = \varepsilon_2 \frac{\partial U_-}{\partial n}, \quad x \in \partial S, \quad U|_{\partial\Lambda} = 0.$$

У §3, враховуючи, що далекодіючу частину гібсівського фактора, за теоремою Мінлоса (Минлос Р.А. Обобщенные случайные процессы и их продолжения до меры // Тр. Моск. мат. о-ва. -1959. -8. -С. 497-518), можна подати у вигляді функціонального інтегралу

$$\exp\left(-\beta U^{c\lambda}_{(\alpha)_n}\right) = \exp[-\frac{1}{2}\beta n^2 e^2 \Phi(0)] \int d\mu_0(\varphi) \prod_{j=1}^{n} \exp\{i\beta^{1/2} e_{\alpha_j} \varphi(x_j)\}.$$

статистична сума і кореляційні функції представляються у вигляді

$$\Xi_{\Lambda,\Lambda'} = \int d\mu_0(\varphi)\, \Xi_{\Lambda,\Lambda'}(\varphi), \tag{6}$$

$$\rho^{\Lambda,\Lambda'}_{(\alpha)_m}(x)_m = \int d\mu_0(\varphi)\ \frac{\Xi_{\Lambda,\Lambda'}(\varphi)}{\Xi_{\Lambda,\Lambda'}}\ \rho^{\Lambda,\Lambda'}_{(\alpha)_m}((x)_m;\varphi) \quad , \tag{7}$$

де

$$\Xi_{\Lambda,\Lambda'}(\varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{(\alpha)_n} \frac{z^n_{(\alpha)}}{n!} \int_{(\Lambda')^n} (dx)_n \ \cdot \tag{8}$$

$$\cdot\ \exp\{i\sum_{j=1}^{n} e_{\alpha_j}\sqrt{\beta}\,\varphi(x_j) - \beta\, U^{s\lambda}_{(\alpha)_n}\} \quad ,$$

$$\rho^{\Lambda,\Lambda'}_{(\alpha)_m}((x)_m;\varphi) = \Xi^{-1}_{\Lambda,\Lambda'}(\varphi) \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{(\alpha)_{m+n\setminus m}} \frac{z^{m+n}_{(\alpha)}}{n!} \int_{(\Lambda')^n} (dx)_{m+n\setminus m} \ \cdot \tag{9}$$

$$\exp\,[\, i\sum_{j=1}^{m+n} e_{\alpha_j}\sqrt{\beta}\,\varphi(x_j) - \beta\, U^{s\lambda}_{(\alpha)_{m+n\setminus m}}\,] \ .$$

Тут $U^{c,\lambda}_{(\alpha)}$ і $U^{s,\lambda}_{(\alpha)}$ - суми парних модифікованих потенціалів кулонівської $\Phi^{c\lambda}_{\alpha\beta}$ і короткодіючої $\Phi^{s\lambda}_{\alpha\beta}$ взаємодій відповідно. Якщо тепер виконати пересумування за короткодіючим потенціалом у виразах для $\Xi_{\Lambda,\Lambda'}$ і $\rho^{\Lambda,\Lambda'}_{(\alpha)_m}(x)_m$, то для достатньо малих значень β і λ можна перейти до границі $\Lambda \nearrow R^3$.

Зауваження. ***Ми розглядаємо в цілому електронейтральну систему. Тому ми вимагаємо виконання умови***

$$\sum_i \rho_i(x)\, e_i = 0 \quad .$$

У §4, переходимо у виразах (4) і (5) до екранованої взаємодії.

Розіб`ємо простір $R^3$ на куби з ребром $\tilde{l}_D$ ($\tilde{l}_D$ $(4\pi\sum_\alpha \rho_\alpha e^2_\alpha \beta)^{-\frac{1}{2}}$). Кожен з $\tilde{l}_D$ -кубів розіб`ємо на

елементарні кубики Ω_k з ребром L ($^{T_D}/_{L}$ - ціле). Позначимо через τ найбільший спільний період функції $\exp\{ i\sqrt{\beta}\, e_\alpha \varphi(x) \}$ і визначимо на L - кубах, які мають непорожній перетин з областю Λ_0 ($\Lambda_0 = \Lambda \setminus (H_0 \cup S)$, де H_0 - щар товщиною r_0 , що межує з ∂S в $\Lambda \setminus S$) , множину $\mathcal{H}$ кусочно-неперервних функцій $h(x) = \tau n_\alpha$, $n_\alpha \in Z^1, x \in \Omega_k$. Використаємо розклад типу Пайерлса:

$$\exp \{ \sum_\alpha \rho_\alpha \int \chi_{\Lambda_0}(x) [\exp(i\sqrt{\beta}\ e_\alpha \varphi(x)) - 1] \} = \tag{10}$$

$$= \exp \{ G \} \sum_h \exp \{ -\frac{1}{2} \int \chi_{\Lambda_0} (\varphi - h)^2 \} ,$$

де $\exp \{ G \}$ задає відхилення від вибраної апроксимації. Після пересумування виразів (4), (5) і заміни

$$\varphi(x) = \phi(x) + g(x) \tag{11}$$

перейдемо в них до нової міри

$$d\mu(\phi) = N^{-1} \exp \{ -\tfrac{1}{2} \int \phi^2 \chi_{\Lambda_0} \} d\mu_0(\phi) , \tag{12}$$

де N - нормуючий множник.

Зауваження. *Перетворення трансляції (11) і відповідний вибір функції g дозволяють суттєво зменшити вплив лінійного по φ члену і виконати пересумування по h .*

В результаті отримаємо:

$$\Xi_\Lambda = \sum_h N \int d\mu(\phi) \exp \{ \mathcal{F} \} , \tag{13}$$

$$\rho^{\Lambda}_{(\alpha)_m} = \Xi^{-1}_\Lambda \sum_h N \int d\mu(\phi)\, \rho^{\Lambda}_{(\alpha)_m}((x)_m;\phi) \exp \{ \mathcal{F} \} . \tag{14}$$

Коваріація нової міри $C(x,y)$ по суті і є екранованим потенціалом, який задовольняє таке інтегральне рівняння

$$C(x,y) = U(x,y) - \frac{1}{l_D^2}\int dz\, U(x,z)\, C(z,y) \quad . \tag{15}$$

У §5 у першому наближенні за ξ (параметр,що характеризує розподіл перешкод у мембрані) розв`язуємо рівняння (15) і знаходимо явний вираз для екранованого потенціалу $C(x,y)$. Суттєво, що коваріацію $C(x,y)$ можна подати у вигляді двох доданків (метод відображень)

$$C(x,y) = C_\Lambda(x,y) + C^*(x,y) \quad , \tag{16}$$

де $C_\Lambda(x,y)$ відповідає коваріації у відсутності мембрани, а $C^*(x,y)$ враховує вплив поверхні ∂S. Поклавши у виразі для $C^*(x,y)$ $x=y$, знаходимо потенціал $C^*(x)$ екранованої взаємодії окремого заряду з зарядами, індукованими на поверхні ∂S.

Параграф 6 присвячений дослідженню отриманих у § 5 виразів для $C(x,y)$.

Нехай Ω_0 - область, яку визначимо так: $\Omega_0 = R^3 \setminus (H_0 \bigcup S)$.

Теорема 2.6.1. *При виконанні умови (3) потенціали $C(x,y)$ і $C^*(x,y)$ обмежені в Ω_0.*

Теорема 2.6.2. *Нехай $|q_k - \rho_a| >> d$ ($k=\alpha,i$ або β,j). Тоді мають місце оцінки*

$$C^*(q_{\alpha i}, q_{\beta j}) \le C_1 \exp\{-\frac{1}{l_D}|q_k - \rho_a|_m\} \quad ,$$

$$C^*(q_{\alpha i}) \le C_2 \exp\{-\frac{1}{l_D}|q_{\alpha i} - \rho_a|\} \quad ,$$

де ρ_a - радіус-вектор центра а-ї перешкоди, C_1 і C_2 - деякі сталі, а

$$|q_k - \rho_a|_m = \max_a |q_k - \rho_a|$$

Твердження 2.6.1. *При $d \to \infty$*

$$C(x,y) \sim \frac{C_3}{(d \sin \frac{\theta}{2})^3} \exp\left\{ \frac{d}{l_D} - \frac{1}{l_D}(|x| + |y|) \right\}, \qquad (17)$$

де C_3 *- деяка стала.*

У главі 3 у виразах (13) і (14) виконується термодинамічний граничний перехід.

Доведення лем 3.4 - 3.6 дисертаційної роботи (6) належить О.Л.Ребенку.

У §1 формулюється основний результат.

Нехай $A_{(\alpha)_m}(x)_m$ **- деяка обмежена функція з** $supp\, A \subset X_A$ **(по кожній змінній). Тут** X_A **- деяка компактна область з** Λ **.**

Визначимо

$$\langle A \rangle_\Lambda = \sum_{(\alpha)_m} \int (dx)_m \, \rho^{\Lambda}_{(\alpha)_m}(x)_m \, A_{(\alpha)_m}(x)_m \; . \qquad (18)$$

Теорема 3.1.1. *Для достатньо малих значень параметрів* $\beta_0 = \frac{e^2}{4\pi \varepsilon_1 kT}$, r_0 , λ , *а також* $\frac{\beta_0}{r_0}$ *і* $\frac{\beta_0}{\lambda}$ *і достатньо великої області* S *існують абсолютні константи* C_1 *і* C_2 , $C > 0$, *а також константи* C_A *і* C_B , *що залежать тільки від функцій* $A_{(\alpha)_{m_1}}(x)_{m_1}$ *і* $B_{(\alpha)_{m_2}}(x)_{m_2}$ *такі, що існує границя*

$$\langle A \rangle = \lim_{\Lambda \uparrow R^3} \langle A \rangle_\Lambda \qquad (19)$$

і

$$|\langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle| \le \qquad (20)$$

$$C_A C_B \left\{ C_1 \exp\left(-\frac{d}{\tilde{l}_D}\right) + C_2 \frac{\exp[-(d_* - D_0)/\tilde{l}_D]}{1 + d_\varphi^3} \right\} .$$

Тут $d_- = dist\,(X_A, X_B)$, $d_+ = dist\,(X_A, \partial S') + dist\,(X_B, \partial S')$,

$d_\varphi = \min\limits_\rho\ dist_{\varphi,\rho}\,(X_A, X_B)$, *а* $dist_{\varphi,\rho}\,(X_A, X_B)$ *- довжина хорди між найближчими дотичними променями, які проведені з центра найближчої кулі до поверхонь областей* X_A *і* X_B .

Доведення теореми 3.1.1 виконується в декілька етапів. Перший етап (§2) - це побудова кластерних розкладів для таких середніх:

$$\langle A \rangle_\Lambda = \Xi_\Lambda^{-1} \sum_h N \int d\mu\ (\phi)\ A(\phi)\ \exp\{\mathcal{F}\} \quad , \tag{21}$$

де

$$A\,(\phi) = \sum_{(\alpha)_m} \int d(x)_m\ f_{(\alpha)_m}(x)_m \prod_{j=1}^{m}\ \exp\ \{\, i\,\sqrt{\beta}\, e_{\alpha_j}\, \phi\,(x_j)\} \quad , \tag{22}$$

$supp\, f \subset (\otimes X_0)^m$, тобто $A(\phi)$ локалізовано у деякій області X_0 .

Зміст кластерного розкладу полягає в тому, щоб на кожному кроці розкладу виразити середнє $\langle A \rangle_\Lambda$, що враховує взаємодію усіх точок області Λ , через деякі середні, які враховують взаємодію точок областей X_k і X_k^c окремо ($k = \overline{1, |\Lambda|}$).

Другий крок (§3) - це оцінка функціональних похідних в отриманих виразах.

Третій крок (§4) - оцінка гаусових інтегралів.

І, нарешті, останній крок (§5) - комбінаторні оцінки.

Результатом є така теорема.

Теорема 3.5.1. *Для довільної сталої* $c > 0$ *можна вибрати фіксовані значення параметрів* α, λ , ε , L, L' *такі, що для достатньо малих значень* β_0 *і середніх від функцій* $A(\phi)$ *і* $B(\phi)$ *, які задаються виразами (21), (22) з* $supp\ A \subset X_A$, $supp\ B \subset X_B$, *в границі* $\Lambda \nearrow R^3$ *виконується нерівність*

$$|\langle AB \rangle - \langle A \rangle\langle B \rangle| \le \tag{23}$$

$$\le \ C_A C_B \{ C_1 \ \exp(-\frac{d}{\tilde{l}_D}) + C_2 \ \frac{\exp[-(d_+ - 2R_0)/\tilde{l}_D]}{1+d_\varphi^{3-\varepsilon}} \} \ .$$

Нерівність (23) фактично означає, що експоненціальний характер спадання кореляцій зберігається тільки у радіальних напрямках до області S, а вздовж поверхні ∂S заряджені частинки взаємодіють як два диполі.

Наслідком теореми 3.5.1. є єдиність границі

$$< A > = \lim_{\Lambda \nearrow R^3} < A >_\Lambda$$

і, отже, теорема 3.1.1, оскільки кореляційні функції (7) легкб подати у вигляді абсолютно збіжних рядів за виразами типу (21).

У четвертій главі метод кластерних розкладів, використаний у третій главі для опису нескінченних рівноважних просторово-неоднорідних систем взаємодіючих частинок, узагальнюється на нескінченні нерівноважні системи, а саме для опису нескінченної системи класичних частинок, які дифундують у рідині.

При доведенні основних результатів цієї глави було використано представлення функцій розподілу за допомогою вінерівських інтегралів, яке вперше побудував В.І. Скрипник. Доведення технічної леми 5.1 (§ 5) було виконано спільно з О.Л. Ребенком.

Нескінченну систему дифундуючих у рідині частинок описуємо за допомогою нескінченної послідовності граничних кореляційних функцій, які є розв`язками задачі Коші для дифузійної ієрархії Боголюбова-Стрельцової

$$\frac{\partial \rho_s(t,(x)_s)}{\partial t} = \sum_{i=1}^{s} \sum_{\gamma=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_i^\gamma} \left\{ \frac{1}{\beta} \frac{\partial \rho_s(t,(x)_s)}{\partial x_i^\gamma} + \frac{\partial U_s(x)_s}{\partial x_i^\gamma} \rho_s(t,(x)_s) \right\} +$$

$$+ \sum_{i=1}^{s} \sum_{\gamma=1}^{3} \int dx_{s+1} \frac{\partial \Phi (|x_i - x_{s+1}|)}{\partial x_i^\gamma} \rho_{s+1} (t,(x)_{s+1}) , \qquad (24)$$

$$\rho_s (t,(x)_s)|_{t=0} = \rho_s^0 (x)_s . \qquad (25)$$

Нехай $\rho_0^\Lambda (t,(x)_m)$ - розв'язок задачі Коші в R^{3m} рівняння Смолуховського (рівняння (24) без інтегрального члена), при умові, що в початковий момент часу частинки знаходяться в компактній області Λ і границя цієї області $\partial \Lambda$ не впливає на рух дифундуючих частинок. Розглянемо кореляційні функції великого канонічного ансамблю:

$$\rho_z^\Lambda (t,(x)_s) = \Xi_\Lambda^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{n+s}}{n!} \int_{R^{3n}} \rho_0^\Lambda (t,(x)_n) (dx)_{s+n\setminus s} , \qquad (26)$$

$$\Xi_\Lambda = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{R^{3n}} \rho_0^\Lambda (t,(x)_n) (dx)_n . \qquad (27)$$

При достатньо слабких умовах на початковий розподіл функції $\rho_z^\Lambda (t,(x)_s)$ є узагальненим розв'язком ієрархії (24), (25). Отже, задача опису нескінченної системи дифундуючих частинок зводиться до термодинамічного граничного переходу у виразах (26), (27).

У §1 визначається система і формулюється основний результат глави.

Розглянемо симетричну двосортну систему, дифундуючих у рідині класичних частинок з зарядами e_α ($\alpha = +,-$; $e_+ = - e_- = e_0$) і однаковими активностями. Частинки взаємодіють через парний потенціал $\Phi_{\alpha\beta} (|x - y|)$, який має вигляд

$$\Phi_{\alpha\beta} (|x - y|) = \frac{e_\alpha e_\beta}{4\pi |x - y|} (\exp (- \frac{|x - y|}{\lambda_0}) -$$

$$(28)$$

$$- C_1 \exp\left(- \frac{|x-y|}{\lambda_1} \right) + C_2 \exp\left(- \frac{|x-y|}{\lambda_2} \right) \},$$

де сталі C_1 і C_2 відповідно дорівнюють

$$C_1 = \frac{\lambda_1^2 (\lambda_2^2 - \lambda_0^2)}{\lambda_0^2 (\lambda_2^2 - \lambda_1^2)}, \quad C_2 = \frac{\lambda_2^2 (\lambda_1^2 - \lambda_0^2)}{\lambda_1^2 (\lambda_2^2 - \lambda_1^2)}$$

Зауваження. *Сталі C_1 та C_2 вибрані так, щоб виконувалися такі умови для потенціалів:*

$$\Phi_{\alpha\beta}(0) = e_\alpha e_\beta \Phi(0) < \infty$$

$$(-\Delta\Phi)_{\alpha\beta}(0) = e_\alpha e_\beta \tilde{\Phi}_0 < \infty \tag{29}$$

$$\sum_{1 \le \alpha < \beta \le N} (-\Delta\Phi)_{\alpha\beta} (|x-y|) \ge - N e_0^2 \tilde{\Phi}_0$$

Тут Δ- оператор Лапласа в R^3. Початковий розподіл $\rho^0_{(\alpha)_m}$ - це локально збурений рівноважний стан, тобто

$$\rho^0_{(\alpha)_m}(x)_m = \chi_\Lambda(x)_m \exp\{ - \beta U_{(\alpha)_m} - \beta V_{(\alpha)_m} \}, \tag{30}$$

де

$$U_{(\alpha)_m}(x)_m = \sum_{1 \le l < j \le m} \Phi_{\alpha_l \alpha_j}(|x_l - x_j|)$$

$$V_{(\alpha)_m}(x)_m = \sum_{1 \le l < j \le m} v_{\alpha_l \alpha_j}(|x_l - x_j|)$$

і збурюючий потенціал $v_{\alpha_l \alpha_j}(|x_l - x_j|)$ задовольняє такі умови:

$$\sum_{1 \le l < j \le m} v_{\alpha_l \alpha_j}(|x_l - x_j|) \ge - m D, \qquad D = const$$

$$\tag{31}$$

$$\sup_\beta \sum_\alpha \int_{R^3} dx \, v_{\alpha\beta}(x) = const$$

Теорема 4.1.1. *Нехай*

1. $f_{(\alpha)_m}(x)_m \in \mathcal{S}(R^3)$, *де* $\mathcal{S}(R^3)$ *- простір Шварца основних функцій,* $supp\, f_{(\alpha)_m} \subset X_0 \subset \Lambda$ *(по кожній змінній* x_i*)*

2. $\rho_f^{\Lambda}(t, X_0) = \sum_{(\alpha)_m} \int_{R^{3m}} (dx)_m f_{(\alpha)_m} \rho_{(\alpha)_m}^{\Lambda}(t, (x)_m)$

Тоді для достатньо малих β *(* $z\beta = 1$ *) існують сталі* C *та* $C(t)$ *такі,*

що для $t \le C\beta$ *при необмеженому зростанні об'єму існує границя*

$$\lim_{\Lambda \nearrow R^3} \rho_f^{\Lambda}(t, X_0) = \rho_f(t, X_0)$$

і виконується нерівність

$$| \rho_f^{\Lambda}(t, X_0) - \rho_f(t, X_0') \rho_f(t, X_0'')| \le$$

$$\le C(t) \exp\{ - \frac{1}{\lambda}(1-\delta)\, dist(X_0', X_0'')\},$$

де

$$f_{(\alpha)_m}(x)_m = f'_{(\alpha)_{m_1}}(x)_{m_1} \cdot f''_{(\alpha)_{m_2}}(x)_{m_2},$$

$$X_0' \cup X_0 = \Lambda, \quad \lambda = \max\{\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2\}, \quad 0 < \delta < 1$$

і для довільного розбиття точок $x_{i_1}, \dots, x_{i_m}$ *на дві підгрупи* m_1 *та* m_2 $(m_1 + m_2 = m)$; $x_{i_1}, \dots, x_{i_{m_1}} \in X_0'$, $x_{i_{m_1+1}}, \dots, x_{i_{m_1+m_2}} \in X_0''$.

Як і в третій главі, **доведення теореми 4.1.1. розбивається на декілька етапів. Перший етап (§2) - це представлення кореляційних функцій функціональними інтегралами. Він виконується кількома** кроками. Перший - це використання формули Фейнмана-Каца і другий - використання теореми Мінлоса.

Наступний етап (§3) - це перетворення Бріджеса-Федербуша-Майера за "короткодіючим потенціалом" і доведення збіжності (при $\Lambda \nearrow R^3$) такого представлення.

Зауваження. *Отримані в цьому параграфі розклади суттєво відрізняються від аналогічних розкладів глави 3 тим, що тут за короткодіючий потенціал приймається, фактично, 3 - частинковий потенціал взаємодії. Це, в свою чергу, вимагає точніших оцінок.*

У §4 для отриманих в §3 відповідних виразів для кореляційних функцій будуються кластерні розклади.

У §5 з використанням техніки, описаної в третій главі, доводиться їх збіжність.

Якщо в попередніх главах розглядалися класичні системи, то у **п'ятій** главі розглядаються квантові системи статистичної механіки. Розвинуто метод дослідження, суть якого полягає в представленні функцій Гріна за допомогою функціональних інтегралів у вигляді середніх від евклідових Фермі-полів. На прикладі моделі Бардіна-Купера-Шріфера-Боголюбова, що описує явище надпровідності, використовуючи принцип великих відхилень, або точніше теореми Еліса - Розена (Ellis R. Entropy, Large Deviation and Statistical Mechanics. - Berlin, Heidelberg, New-York: Springer.- 1985.- 357 p.), знайдені точні розв'яки цієї моделі, які раніше були отримані методом апроксимуючого гамільтоніану, доводиться точна розв'язувальність цієї моделі.

Ідея введення евклідових фермі-полів (§ 2) належить О.Л. Ребенку.

У §1 визначені при скінченному об'ємі Λ температурні функції Гріна $G^{ij}_{\alpha\beta}$ подаються у вигляді функціональних інтегралів.

Модельний гамільтоніан типу БКШ-Боголюбова для скінченної системи електронів, що містяться у кубі $(\Lambda \subset R^3)$, має вигляд:

$$H^{\Lambda} = H_0^{\Lambda} + H_{\mathrm{int}}^{\Lambda} ,$$

$$H_0^{\Lambda} = \sum_{\sigma} \int_{\Lambda} dx\, \psi^{+}{}_{\sigma}(x) \left(-\frac{\Delta}{2m} - \mu \right) \psi_{\sigma}(x) , \qquad (32)$$

$$H_{\mathrm{int}}^{\Lambda} = -\frac{g}{|\lambda|} \int_{\Lambda} \ldots \int_{\Lambda} dx_1 \ldots dx_4\, \nu(x_1 - x_2)\nu(x_4 - x_3) \cdot$$

$$\psi^{+}{}_{\downarrow}(x_1)\psi^{+}{}_{\uparrow}(x_2)\psi(x_4)\psi(x_3) .$$

Тут Δ - оператор Лапласа в R^3; $(\sigma, \sigma) = +,-$; μ - хімічний потенціал, m - маса частинок, Λ - об`єм системи, оператори $\psi^{+}{}_{\sigma}(x)$ та $\psi_{\sigma}(x)$ задовольняють звичайні антикомутаційні співвідношення, $v(x) \in L^1$, g ($g > 0$) - стала. Розглянемо послідовність функцій $\alpha_{\varepsilon}(\tau,\tau')$ $(\tau,\tau' \in [0,\beta])$ таких, що

$$w - \lim_{\varepsilon \to 0} \alpha_{\varepsilon}(\tau,\tau') = \delta(\tau - \tau')$$

і послідовність гаусівських мір на просторі неперервних функцій з нульовим середнім і коваріацією $\alpha_{\varepsilon}(\tau,\tau')$:

$$\exp\left\{ -\frac{1}{\Lambda} \int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' f(\tau)\, \alpha_{\varepsilon}(\tau,\tau') f(\tau') \right\} =$$

$$= \int d\mu_{\Lambda}^{\varepsilon}(\varphi) \exp\left\{ i \int_0^{\beta} d\tau\, f(\tau)\, \varphi(\tau) \right\} ,$$

де $f(\tau)$ - оператор виду

$$f(\tau) = \exp(-\tau H_0^{\Lambda})\, f \exp(\tau H_0^{\Lambda}) ,$$

а f - лінійний обмежений оператор. Це дає можливість визначити температурні функції Гріна у вигляді функціонального інтегралу:

$$G^{ij}_{\alpha\beta}(x_1,\tau_1;x_2,\tau_2\,|\,\Lambda) = w - \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\Xi^{\varepsilon}_{\Lambda}} \int d\mu^{\varepsilon}_{\Lambda}(\eta)\int d\mu^{\varepsilon}_{\Lambda}(\eta^{*})\,\cdot$$

$$\cdot\, Tr\{\, T^{*}_{\tau}\; \psi^{(i)}_{\alpha}(x_1,\tau_1)\psi^{(j)}_{\beta}(x_2,\tau_2)\exp\,(\sqrt{g}\int_0^{\beta} d\tau\,\cdot$$

$$\cdot\int_{\Lambda}dx\int_{\Lambda}dy\; v(x-y)\,[\,\psi_{+}^{\;+}(x,\tau)\;\psi_{+}^{\;+}(y,\tau)\eta(\tau)+c.c.\,]\,)\exp\,(-\beta H^{\Lambda}_{0})\}.$$

Тут $i, j = 1, 2$ і $\psi^{(1)} = \psi^{+}$, $\psi^{(2)} = \psi$

$\psi(x,\tau) = exp\,(-\tau H^{\Lambda}_{0})\,\psi(x)\,exp\,(\tau H^{\Lambda}_{0})$,

$$\Xi^{\varepsilon}_{\Lambda} = \int d\mu^{\varepsilon}_{\Lambda}(\eta)\int d\mu^{\varepsilon}_{\Lambda}(\eta^{*})\cdot Tr\{\, T^{*}_{\tau}\,\exp\,(\sqrt{g}\int_0^{\beta} d\tau\,\cdot$$

$$\cdot\int_{\Lambda}dx\int_{\Lambda}dy\; v(x-y)\,[\,\psi^{+}_{+}(x,\tau)\;\psi^{+}_{+}(y,\tau)\,\eta(\tau)+c.c.\,]\,)\exp\,(-\beta H^{\Lambda}_{0})\,\}$$

і T^{*}_{τ} - оператор антихронологічного впорядкування.

У §2 температурні функції Гріна виражаються через евклідові Фермі-поля і подаються у вигляді

$$G^{ij}_{\alpha\beta}(x_1,\tau_1;x_2,\tau_2\,|\,\Lambda) = w - \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\Xi^{\varepsilon}_{\Lambda}} \int d\mu^{\varepsilon}_{\Lambda}(\eta)\int d\mu^{\varepsilon}_{\Lambda}(\eta^{*})\,\cdot$$

$$\cdot\,\tilde{G}^{ij}_{\alpha\beta}(x_1,\tau_1;x_2,\tau_2\,|\,\Lambda,\eta,\lambda)|_{\lambda=1}\cdot\exp\,\{\,|\,\lambda\,|\,F_{\Lambda}(\eta,\,\eta^{*})\,\}\;,$$

$$\Xi^{\varepsilon}_{\Lambda} = \int d\mu^{\varepsilon}_{\Lambda}(\eta)\int d\mu^{\varepsilon}_{\Lambda}(\eta^{*})\,\exp\,\{\,-\,|\,\lambda\,|\,F_{\Lambda}(\eta,\,\eta^{*})\,\}\;,$$

де

$$F_{\Lambda}(\eta,\eta^{*}) = -\frac{1}{|\,\lambda\,|}\int_0^1 d\lambda\int_0^{\beta} d\tau\int_{\Lambda}dx\int_{\Lambda}dy\, v(x-y)\,\cdot$$

$$\cdot\,[\eta(\tau)\tilde{G}^{11}_{+-}(x,\tau;y,\tau\,|\,\eta,\lambda,\Lambda) + \eta^{*}(\tau)\tilde{G}^{22}_{-+}(x,\tau;y,\tau\,|\,\eta,\lambda,\Lambda)\,]\,.$$

Використавши властивості функцій $\tilde{G}^{ij}_{\alpha\beta}$, одержимо систему рівнянь

$$\tilde{G}^{ij}_{\alpha\beta}(x_1,\tau_1;x_2,\tau_2\,|\,\eta,\lambda,\Lambda)=(1-\delta_{ij})\,\delta_{\alpha\beta}\,G^0_\Lambda(x_1,\tau_1;x_2,\tau_2)\;+$$

$$+\;\lambda\sum_{\gamma\in(-,+)}\gamma\,\delta_{j2}\,\delta_{\alpha,-\gamma}\int_0^\beta d\tau\int_\Lambda dx\int_\Lambda dy\;v(x-y)\,G^0_\Lambda(x,\tau;x_1,\tau_1)\;\cdot$$

$$\cdot\;\tilde{G}^{1j}_{\alpha\beta}(y,\tau;x_2,\tau_2\,|\,\eta,\lambda,\Lambda)\,\eta(\tau)\;+\;\lambda\sum_{\gamma\in(+,-)}\gamma\,\delta_{j1}\,\delta_{\alpha\gamma}\;\cdot \tag{33}$$

$$\cdot\int_0^\beta dt\int_L dx\int_L dy\;v(x-y)\,G^0_\Lambda(x,\tau;x_1,\tau_1)\;\;\tilde{G}^{1j}_{\alpha\beta}(y,\tau;x_2,\tau_2\,|\,\eta,\lambda,\Lambda)\,\eta(\tau)\,.$$

Тут $\delta_{\alpha\beta}\,G^0_\Lambda(x_1,\tau_1;x_2,\tau_2)$ вільні функції Гріна

$$\delta_{\alpha\beta}\,G^0_\Lambda(x_1,\tau_1;x_2,\tau_2)=\frac{Tr\{\,T^*_\tau\,[\,\psi_\alpha(x_1,\tau_1)\psi_\beta(x_2,\tau_2)\exp(-\beta\,H^\Lambda_0)\,]\,\}}{Tr\{\,\exp\,(-\beta\,H^\Lambda_0)\,\}}\,.$$

Твердження 5.2.1.

(I) Для довільних $\eta(\tau)\in C_{[O,\beta]}$ система рівнянь (33) має єдиний розв'язок.

(ii) Для $\eta(\tau)=const$ система рівнянь (33) розв'язується точно, і її розв'зок співпадає з відповідними функціями Гріна, що отримуются за допомогою методу апроксимуючих гамільтоніанів.

(iii) Для $\eta(\tau)=const$ граничні ($\Lambda\nearrow R^3$) функції Гріна $\tilde{G}^{ij}_{\alpha\beta}$ існують і співпадають з граничними функціями Гріна, отриманими за допомогою методу апроксимуючих гамільтоніанів.

У §3 за допомогою методу Лапласа виконано граничний ($\Lambda\nearrow R^3$) перехід у виразах для функцій Гріна $G^{ij}_{\alpha\beta}$ і для вільної енергії $f_\Lambda(H_{BCS})$:

$$f_\Lambda(H_{BCS})=\frac{1}{|\Lambda|}\ln\,\Xi_\Lambda.$$

Можливість застосування методу Лапласа легко бачити з виду формальних виразів для міри

$$d\mu(\eta)\, d\mu(\eta^*) = N^{-1} \exp\{-\frac{1}{2} \,|\Lambda| \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \eta(\tau) \alpha_\varepsilon(\tau;\tau') \eta^*(\tau')\}$$

$$\cdot \prod_{\tau \in [0,\beta]} d\eta(\tau)\, d\eta^*(\tau) \quad ,$$

де N - нормуючий множник.

Лема 5.3.1. *Існують числа $0 < b_1 < 1/2$ і $b_2 > 0$ такі, що для довільних $\eta(\tau) \in C_{[0,\beta]}$ і довільних достатньо великих величин $|\Lambda|$*

$$F_\Lambda(\eta, \eta^*) \le b_1 \int_0^\beta d\tau |\eta(\tau)|^2 + b_2 \quad ,$$

$$\lim_{\Lambda \nearrow R^3} F_\Lambda(\eta, \eta^*) \le b_1 \int_0^\beta d\tau |\eta(\tau)|^2 + b_2 \quad .$$

Теорема 5.3.1. *Нехай потенціал $v(x)$ задовольняє умову $v(x) \in L^1$. Тоді*

$$\lim_{\Lambda \nearrow R^3} \frac{1}{|\Lambda|} \ln \Xi_\Lambda^\varepsilon = \inf_{\eta(\tau) \in C_{[0,\beta]}} \Phi(\eta, \eta^*),$$

де

$$\Phi(\eta, \eta^*) = F_\Lambda(\eta, \eta^*) - \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \eta(\tau)\, \alpha_\varepsilon(\tau, \tau') \eta^*(\tau') \quad .$$

Відзначимо, що *inf* $\Phi(\eta, \eta^*)$ досягається на деяких функціях $\eta^\sim(\tau)$, які є розв'язком інтегрального рівняння

$$\eta^\sim(\tau) = \lim_{\Lambda \nearrow R^3} \int_0^1 d\lambda \int dx\, v(x)\, \tilde{G}^{11}_{+-}(x, \tau \,|\, \eta^\sim, \lambda) \quad ,$$

відомого в теорії надпровідності як рівняння самоузгодженості.

Теорема 5.3.2. *Нехай функція $\Phi(\eta, \eta^*)$ досягає мінімуму на множині точок $\{\eta^\sim_\alpha : \alpha = \overline{1, m}\}$ і кожна точка $\eta^\sim_\alpha$ невироджена. Тоді*

$$\lim_{\Lambda \nearrow R^3} G^{ij}_{\alpha\beta}(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2 \,|\, \Lambda) = \sum_{\alpha=1}^{m} \tilde{b}_\alpha \tilde{G}^{ij}_{\alpha\beta}(x_1, \tau_1; x_2, \tau_2 \,|\, \eta^\sim_\alpha, \lambda)|_{\lambda=1} ,$$

де

$$\tilde{b}_\alpha = w - \lim_{\varepsilon \to 0} \left[det\,(I + \sigma_\varepsilon \Phi^{*} (\eta^{\sim}_\alpha, \eta^{\sim *}_\alpha)) \right]^{-\frac{1}{2}}.$$

У шостій главі метод апроксимуючих гамільтоніанів, запропонований М.М.Боголюбовим для опису рівноважних модельних систем квантової статистичної фізики, узагальнюється для опису нескінченної нерівноважної квантової модельної системи типу БКШ-Боголюбова.

У §1 отримано ланцюжок рівнянь Боголюбова для нерівноважних статистичних операторів комплексів частинок безпосередньо в термодинамічній границі для певного класу модельних систем з взаємодією, що розділяється (цей клас включає і модельну систему типу БКШ-Боголюбова).

У §2 для цього класу модельних систем будуються апроксимуючі гамільтоніани і задача дослідження їх еволюції зводиться до дослідження систем з апроксимуючим гамільтоніаном. Процедура побудови апроксимуючих гмільтоніанів у нерівноважному випадку подібна процедурі побудови їх у рівноважному, проте вона має і суттєву особливість. Тепер вже у модельному гамільтоніані певні оператори замінюються не сталими числами, а певними функціями від часу.

У §3 за допомогою методу апроксимуючих гамільтоніанів отримані рівняння для квантових статистичних операторів комплексів частинок модельної системи типу БКШ-Боголюбова.

У § 4 показано, що при виконанні принципу послаблення кореляцій дослідження цих рівнянь можна звести до дослідження системи рівнянь для функцій

$g_{11}(t,p)$, $\tilde{g}_{11}(t,-p)$, $g_{0\,2}(t,p)$ і $g_{2\,0}(t,p)$, які є квантовостатистичними середніми за нерівноважною матрицею густини в термодинамічній границі від таких операторних виразів ($\overset{+}{a}(p)a(p)$), ($a(-p)\overset{+}{a}(-p)$) , ($\overset{+}{a}(p)\overset{+}{a}(-p)$) *і a(-p)a(p)* відповідно. Тут оператори $\overset{+}{a}(p)$ і $a(p')$ - фермі-оператори народження і знищення частинки з імпульсом $p, p' \in R^3$.

У § 5 доводиться існування і єдиність глобального розв`язку задачі Коші для цієї системи рівнянь в класі неперервних обмежених функцій.

Основні результати роботи

Для нескінченних систем класичних заряджених частинок

1. Запропоновано метод визначення потенціалів електростатичних взаємодій як між частинками, так і між частинками і зарядами, індукованими на поверхнях перешкод.
2. Знайдені явні вирази для потенціалів електростатичної взаємодії в припущенні, що мембрана складається з перешкод сферичної форми і розподіл перешкод в мембрані задовольняє певну умову.
3. Кореляційні функції просторово-неоднорідної системи заряджених частинок представлені у вигляді функціональних інтегралів.
4. Узагальнено на просторово-неоднорідний випадок метод кластерних розкладів Бріджеса-Федербуша-Ребенка, запропонованого ними для опису нескінченних просторово-однорідних систем заряджених частинок.

5. Знайдені явні вирази для потенціалів екранованої взаємодії як між частинками, так і між частинками і зарядами, індукованими на поверхнях перешкод сферичної форми.
6. Досліджено асимптотики потенціалів екранованої взаємодії.
7. Доведено існування і єдиність граничних ($\Lambda \nearrow R^3$) кореляційних функцій системи заряджених частинок і динамічної мембрани, а також їх експоненціальна кластеризація у напрямках, перпендикулярних до поверхні мембрани, і степенева вздовж поверхні мембрани.
8. Нерівноважні кореляційні функції системи частинок, що взаємодіють через потенціал Юкави і дифундують у рідині, представлено у вигляді функціонального інтегралу.
9. Доведено існування і єдиність граничних кореляційних функцій на скінченному часовому проміжку при умові, що початковий стан є локально збурений і в початковий момент часу частинки знаходяться в деякій компактній області Λ , границя якої не впливає на дифузію частинок.

Для квантової модельної системи типу БКШ-Боголюбова

1. Рівноважні функції Гріна і вільна енергія представлені у вигляді функціонального інтегралу.
2. Доведено існування граничних ($\Lambda \nearrow R^3$) рівноважних функцій Гріна та вільної енергії.
3. Узагальнено на нерівноважний випадок метод апроксимуючого гамільтоніану Боголюбова.
4. Отримані рівняння, що описують в термодинамічній границі еволюцію модельної системи типу БКШ-Боголюбова. Знайдено інтеграл руху і доведено існування і єдиність їх розв'язку в класі неперервних обмежених функцій.

Основні положення дисертації опубліковані в працях:

1. Петрина Д.Я., Герасименко В.И., Малышев П.В., Пилявский А.И. О процессе обратного осмоса как краевой задаче в областях с мелкозернистой структурой // Докл. АН УССР. Сер. А.-1980.- N.9.- С. 75-78.
2. Петрина Д.Я., Пилявский А.И. О потенциале электростатического поля системы заряженных частиц и динамической мембраны // Докл. АН УССР. Сер. А.- 1981.-N.7.- С. 61-63.
3. Пилявский А.И. О решении одного эволюционного уравнения теории сверхпроводимости // Докл. АН УССР. Сер. А.- 1982.- N.1.-С. 27-29.
4. Пилявский А.И., Ребенко А.Л. Функции распределения ионов и диполей вблизи сферической поверхности. Экранированные потенциалы // Докл. АН УССР. Сер. А.- 1984.- N. 7.- С. 59-62.
5. Петрина Д.Я., Пилявский А.И. Задачи электростатики в пространственно неоднородных средах и вычитательная процедура // Физика многочастичных систем.- 1985.- Вып. 7.- С. 82-96
6. Пилявский А.И., Ребенко А.Л. Дебаевское экранирование в пространственно-неоднородных системах заряженных частиц I. Модель сферического диэлектрика // Теорет. и мат. физика. - 1986.- 69, N. 2.- С. 245-258.
7. Пилявский А.И., Ребенко А.Л. Дебаевское экранирование в пространственно-неоднородных системах заряженных частиц. II. Доказательство сходимости кластерных раложений // Теорет. и мат. физика. 1987.- 70, N. 2.- С. 278-288.
8. Пилявский А.И., Ребенко А.Л. Об экранировании взаимодействий в ограниченных ионно-дипольных системах. Учет переходной области // Математические проблемы теории систем

заряженных частиц в неоднородных средах. Киев: - Ин-т математики АН УССР, 1988.- С. 28-49.

9. Пилявский А.И., Ребенко А.Л., Скрипник В.И. Об обобщенных решениях диффузионной иерархии Боголюбова в термодинамическом пределе. Кластерные разложения // Теорет. и мат. физика.-1992.- 93, N. 1.- С. 119-137.
10. Pilyavsky A.I, Rebenko A.L The Large Deviation Principle and BCS-Model // Journal of Statistical Physics. 1994.- 74, N. 5/6.- P. 1321-1322.
11. Пилявский А.И. Об эволюции одного класса модельных систем с многочастичным взаимодействием. Киев, 1979. -19 с.- (Препр. / АН УССР. Ин-т теорет.физики; 79-72 Р)
12. Пилявский А.И. Об эволюции модельной системы типа БКШ-Боголюбова в термодинамическом пределе. Киев, 1980.- 29 с. (Препр. / АН УССР. Ин-т теорет.физики; 80-44Р)
13. Петрина Д.Я., Герасименко В.И., Малышев П.В., Пилявский А.И. Диффузия ионов и протекание жидкости через мембраны как краевая задача в областях с мелкозернистой структурой. Киев, 1980.- 15 с. (Препр. / АН УССР. Ин-т теорет.физики; 80-30Р)
14. Петрина Д.Я., Пилявский А.И. О потенциале электростатического поля системы заряженных частиц и динамической мембраны. Киев, 1980.- 32 с. (Препр. / АН УССР. Ин-т теорет.физики; 80-141Р)
15. Пилявский А.И. Об экранировании взаимодействий в системе заряженные частицы-динамическая мембрана. Киев, 1982.- 36 с. (Препр. / АН УССР. Ин-т теорет.физики; 82-37Р)
16. Пилявский А.И. Функции распределения системы заряженные частицы-динамическая мембрана. Киев, 1982.- 22 с. (Препр. / АН УССР. Ин-т теорет.физики; 82-38Р)

17. Пилявский А.И., Ребенко А.Л. Функции распределения ионов и диполей вблизи сферической поверхности. Экранированные потенциалы. Киев, 1983.- 23 с. (Препр. / АН УССР. Ин-т. теорет. физики; 83-126Р)

18. Rebenko A.L., Pilyavsky A.I. Debye screening in space inhomogeneous systems. - Kiev, 1984.- 33 p. (Preprint / AS UkrSSR. Inst. Theoret. Phys.; 84-167E).

19. Pilyavsky A.I., Rebenko A.L., Skrypnik W.I. Cluster expansion for weak solution of the Bogolubov diffusion hierarghy. - Kiev, 1990.- 31 p. (Preprint / AS UkrSSR. Inst.Math.; 90.22).

20. Pilyavsky A.I, Rebenko A.L The large deviation principle and the BCS-model. - Kiev, 1993.- 20 p. (Preprint / AS UkrSSR. Inst. Math.; 93.4).

21. Пилявський А.І. Рівноважні властивості нескінченної системи заряджених частинок в присутності динамічної мембрани // Структура та фізичні властивості невпорядкованих систем: Тез. доп., Львів, 2-16 жовт. 1993 р. - Львів, 1993.- ч. 1. - С. 71.

Пилявский А.И. Исследование бесконечных систем заряженных частиц методом функционального интегрирования.

Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.01.03 - математическая физика, Институт математики АН Украины, Киев, 1995 г.

Защищается 21 научная работа, которые содержат теоретическое исследование бесконечной равновесной системы классических заряженных частиц в присутствии динамической мембраны, бесконечной неравновесной системы классических частиц, взаимодействующих посредством юкавовского потенциала, бесконечной квантовой модельной системы типа БКШ-Боголюбова. Установлено существование и единственность предельных функций рас-

пределения и их експоненциальная кластеризация в направлении перпендикулярном к мембране и степенная вдоль поверхности мембраны (классические системы), а также существование предельных функций Грина и свободной енергии (квантовые модельные системы).

Pilyavskii A.I. Investigation of infinite system of charged particles by the method of functional integration.

Thesis on search of the scientific degree of doctor of physical and mathematical sciences, specialty 01.01.03. - mathematical physics. Ukrainian Academy of Sciences, Institute of Mathematics, Kiev, 1995.

21 scientific papers containing the theoretical studies of infinite equilibrium system of classical charged particles near dynamical membrane, an infinite nonequilibrium system of classical particles interacting via the Yukawa potential and infinite quantum model system of the BCS-Bogolubov type are defended. We establish the existence and uniqueness of limiting distribution functions and prove that the decay exponentially in the direction normal to the membrane and according to a power law along the membrane surface. We also prove the existence of limiting Green's functions and free energy for quantum model systems.

Ключові слова:

заряджені частинки, динамічна мембрана, функції розподілу, статистичні оператори комплексів частинок, функції Гріна, вільна енергія, функціональне інтегрування, кластерні розклади, принцип великих відхилень, термодинамічна границя.

Підп. до друку 27.02.95. Формат 60x84/16. Папір друк. Офс. друк.

Ум. друк. арк. 2,09 . Ум. фарбо-відб. 2,09 . Обл.-вид. арк. 1,7.

Тираж 100 пр. Зам. 55 Безкоштовно.

Віддруковано в Інституті математики НАН України

252601 Київ 4, ГСП, вул. Терещенківська, 3.