Проєкт Наукова Книга

О.Л. РЕБЕНКО

МАТЕМАТИЧНІ ОСНОВИ СУЧАСНОЇ СТАТИСТИЧНОЇ МЕХАНІКИ

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ

О. Л. РЕБЕНКО

МАТЕМАТИЧНІ ОСНОВИ СУЧАСНОЇ СТАТИСТИЧНОЇ МЕХАНІКИ

ПРОЄКТ
«НАУКОВА КНИГА»

КИЇВ НАУКОВА ДУМКА 2024

https://doi.org/10.15407/978-966-00-1937-9
УДК 517.9

Монографія присвячена систематичному викладенню математичних основ сучасної статистичної механіки. Підхід ґрунтується на методах нескінченновимірного аналізу, які найбільш адекватно відповідають математичним потребам опису фізичних систем з великою кількістю елементів. Характерною ознакою опису є застосування нескінченновимірних інтегралів, що дає змогу уникнути громіздких комбінаторних формул і зробити доведення багатьох теорем і тверджень більш прозорим. Детально висвітлено питання взаємодії між точковими частинками, отримано нові критерії достатності для потенціалів, описано математичні проблеми термодинамічного граничного переходу для кореляційних функцій (звичайних, зв′язних, частково зв′язних) методами інтегральних рівнянь і методами кластерних розкладів. Вперше обґрунтовано квазіґратчасту апроксимацію для термодинамічних і кореляційних функцій неперервних систем у рамках так званої моделі коміркового газу. Описано системи іонів і диполів. Коротко розглянуто квантові неперервні системи з точки зору техніки кластерних розкладів для редукованої матриці щільності.

Для студентів старших курсів, аспірантів і науковців, які прагнуть поглибити розуміння математичних проблем статистичної механіки.

Рецензенти:
академік НАН України Л. А. ПАСТУР
член-кореспондент НАН України $\boxed{\text{О. А. БОЙЧУК}}$
доктор фізико-математичних наук, професор М. С. ГОНЧАР

Рекомендовано до друку вченою радою
Інституту математики НАН України
(протокол № 9 від 17.10.2023 р.)

Оригінал-макет виготовлено за кошти Цільової комплексної програми НАН України «Наукові основи функціонування та забезпечення умов розвитку науково-видавничого комплексу НАН України»

Науково-видавничий відділ природничо-технічної літератури

Редактор *О.А. Микитенко*

ISBN 978-966-00-1937-9

Передмова

На сьогодні у світі налічується велика кількість праць, в яких висвітлено основні фізичні й математичні питання статистичної механіки. Але і фізична, і математична науки стрімко розвиваються, саме це спонукає до пошуку адекватнішого опису фізичних законів та явищ, які є предметом їх розгляду.

З огляду на це пропонована праця є прикладом математичних напрямів, який з одного боку продовжує і розвиває підходи, запропоновані раніше, а з іншого, на думку автора, пропонує сучасніші математичні методи їх опису. Отже основною метою монографії є нове математичне формулювання вже відомих підходів і результатів та нових результатів, які з'явились у другій половині XX ст. і в перші десятиліття XXI ст.

Такий підхід ґрунтується на методах нескінченновимірного аналізу, які найбільш адекватно відповідають математичним потребам опису фізичних систем з великою кількістю елементів. При цьому громіздкі комбінаторні співвідношення замінюються інтегральними за мірою на просторах конфігурацій. Це значно полегшує не тільки запис складних аналітичних виразів, а й спрощує доведення багатьох тверджень і теорем.

Важливою мотивацією для автора є також суттєве збільшення застосувань математичних методів нескінченновимірного аналізу не тільки до фізичних систем, які є предметом класичної та квантової теорії поля і статистичної механіки, а й до екологічних, економічних, соціальних та інших модельних систем (див., наприклад, [75, 78, 94–96, 181] та численні посилання в цих працях).

У монографії розглядаються здебільшого класичні системи і лише один розділ присвячено квантовим моделям.

Зауважимо, що опис охоплює передусім рівноважні статистичні системи, для яких математичний апарат, що розглядається в монографії, є більш розвинутим. Про узагальнення математичного апарату на нерівноважні системи йдеться в підрозділі 5.6.

На жаль, так само, як і в передмові Рюеля до його класичної монографії [43], мусимо констатувати, що основна проблема опису рівноважних систем – проблема побудови моделі, в якій було б строго доведено існування фазових переходів для неперервних систем, залишається невирішеною, за винятком деяких екзотичних моделей типу Відома-Роулінсона [222] (див. [67]). Ця проблема була вирішена для моделі *ґратчастого газу* на ґратці $\mathbb{Z}^2$ у працях $[2, 12, 79, 118, 124]$. Щоб якось наблизитись до вирішення цієї важливої проблеми, в монографії детально розглядається модель так званого *коміркового газу*, яку було запропоновано в [203], і яка в свою чергу спираєтьсяь на результати праць [206], [207] і [32]. Комірковий газ – це неперервна система взаємодіючих точкових частинок, рух яких у евклідовому просторі $\mathbb{R}^d$ відбувається таким чином, що для довільного розбиття простору $\mathbb{R}^d$ на елементарні комірки (d-вимірні гіперкубики з ребром a) кожна непорожня комірка містить тільки одну частинку.

Для певного класу надстійких взаємодій фізичні характеристики коміркового газу, такі, як тиск (див. [206]), вільна енергія (див. [63]), а також кореляційні функції, будуть як завгодно близькими до відповідних характеристик звичайного газу і збігатимуться до їх значень при $a \to 0$. Введенням апроксимації потенціалу взаємодії комірковий газ перетворюється на ґратчастий газ на ґратці $a\mathbb{Z}^d$. Це дає певні підстави для оптимізму у вирішенні проблеми опису фазових переходів.

Перелік умовних позначень

Формули, теореми, леми та твердження нумерують трьома цифрами, що розділяються крапками. Перші дві цифри – номери розділу та підрозділу, а третя – номер відповідної формули, теореми, леми або твердження у розділі. Зауваження, рисунки та означення нумерують двома цифрами: перша – розділ, друга – відповідний номер зауваження, рисунка чи означення.

1. Скорочення

ББГКІ – Боголюбов–Борн–Грін–Кірквуд–Івон (BBGKY);

БС – статистика Больцмана (BS);

ҐГ – ґратчастий газ (LG);

ГНЦ – Георгії–Нгуєн–Цессін (GNZ);

ДЛР – Добрушин–Ленфорд–Рюель (DLR);

ЕМГ – евклідова міра Гіббса (EGM);

ЕСГ – евклідів стан Гіббса (EGS);

ЗКФ – зв’язні кореляційні функції (TCF);

ІГ – ідеальний газ (PG);

КАС – канонічні антикомутаційні співвідношення (CAR);

КГ – комірковий газ (CG);

КЗ – Кірквуд–Зальцбург (KS);

ККС – канонічні комутаційні співвідношення (CCR);

КС – квантова статистика (QS);

РМЩ – редукована матриця щільності (RDM);

РР – рівняння Рюеля (RE);

ЧЗКФ – частково-зв'язні кореляційні функції (PTCF);

$(x)_k^m := (x_k, \dots, x_m)$, $m > k$; $(x)_1^k := (x)_k$;

$\{x\}_k^m := \{x_k, \dots, x_m\}$, $m > k$; $\{x\}_1^m := \{x\}_m$;

$\int_{X^m} (dx)^m (...) := \int_X dx_1 \cdots \int_X dx_m (...)$.

2. Позначення основних просторів та множин

$\mathbb{R}^d$ – d-вимірний евклідів простір;

$\mathbb{Z}^d$ – d-вимірний евклідів простір з цілочисельними координатами;

Γ – простір конфігурацій частинок у $\mathbb{R}^d$;

Γ_0 – простір скінченних конфігурацій частинок у $\mathbb{R}^d$;

Γ_Λ – простір конфігурацій частинок у $\Lambda, \Lambda \in \mathcal{B}_c(X)$;

$\mathcal{P}_n$ – група перестановок з n елементів;

$L^0(X)$ – простір вимірних функцій на X;

$C(X)$ – простір неперервних обмежених функцій на X;

$C_0(X)$ – простір обмежених функцій з компактним носієм на X;

$C^\infty(X)$ – простір нескінченно диференційовних функцій на X;

$\mathcal{F}(\mathcal{H})$ – простір Фока, побудований за гільбертовим простором $\mathcal{H}$;

$\mathcal{F}_B$ – простір Фока симетричних функцій – простір бозонів;

$L^2(X, \mu)$ – гільбертів простір функцій, квадратично інтегровних на X за мірою μ;

$L^p(X, \mu)$ – банахів простір функцій, інтегровних у степені p на X за мірою μ;

$\mathcal{B}(X)$ – борелівська σ-алгебра відкритих множин у X;

$\mathcal{B}_c(X)$ – борелівська σ-алгебра відкритих обмежених множин у X;

$|A|$ – кількість точок у множині A;

$\partial\Lambda$ – межа множини Λ;

$\overline{\Delta}_a$ – розбиття простору $\mathbb{R}^d$ на гіперкубики $\Delta_a(r)$;

$\Lambda_a \cong \overline{\Delta}_{a,\Lambda}$ – мінімальне покриття Λ гіперкубиками $\Delta \in \overline{\Delta}_a$.

3. Позначення і величини деяких основних сталих

z – активність частинок системи $z = e^{\beta\mu}\left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{d/2}$;

T – температура системи;

β – обернена температура в енергетичних одиницях: $\beta = \frac{1}{k_B T}$;

k_B – стала Больцмана, $k_B = 1,38 \cdot 10^{23}$ Дж/К;

h – стала Планка $\left(\hbar = \dfrac{h}{2\pi} = 1,055 \cdot 10^{-34} \text{ Дж·с}\right)$;

$e = |q_{\text{ел}}|, \qquad q_{\text{ел}} = -1,60219 \cdot 10^{-19}$ К — заряд електрона;

λ – довжина хвилі де Бройля $\lambda = \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{-1/2}$.

4. Позначення мір та вектор-функцій

σ – міра Лебега в $\mathbb{R}^d$;

π_σ – міра Пуассона на Γ;

λ_σ – міра Лебега–Пуассона на Γ_0;

$e(f)$ – когерентний вектор у просторі Фока $\mathcal{F}_{\mathcal{B}}$;

$e_{\lambda_\sigma}(f)$ – когерентний вектор у просторі $L^2(\Gamma_0, \lambda_\sigma)$;

$e_{\pi_\sigma}(f)$ – когерентний вектор у просторі $L^2(\Gamma, \pi_\sigma)$;

$1\!\!1_A(\cdot)$ – вектор-індикатор множини A.

5. Статистичні та термодинамічні величини

$\Omega_\Lambda(E_0, N)$ – статистична сума мікроканонічного ансамблю;

$Z_\Lambda(N, \beta)$ – статистична сума канонічного ансамблю;

$\Xi_\Lambda(z, \beta)$ – статистична сума великого канонічного ансамблю;

$Q_\Lambda(N, \beta)$ – конфігураційний інтеграл;

U – потенціальна енергія;

S – ентропія;

F – вільна енергія Гельмгольца.

Вступ

Статистична механіка виникла в кінці XIX – на початку XX ст. завдяки дослідженням Больцмана, Гіббса, Максвелла. Метою цієї, на той час нової, науки було створення математичного апарату для дослідження систем, що складаються з надзвичайно великої кількості елементів. Такі фізичні системи моделюють гази, рідини, кристали, а також можуть описувати взаємодії у великих біологічних, екологічних, економічних системах тощо.

Звичайно, на перший погляд, усі відомі системи, які ми намагаємося вивчити, є скінченними. Наприклад, газ у колбі має скінченну кількість атомів чи молекул. Але з елементарної фізики відомо, що в одному *молі* будь-якої речовини міститься приблизно $6 \cdot 10^{23}$ молекул (закон Авогадро). Отже, навіть у невеликому об'ємі 1 см^3 міститься 10^{23}–10^{25} молекул. Тому інтуїтивно зрозуміло, що слідкувати за такою кількістю частинок те саме, що слідкувати за нескінченною їх кількістю.

Отже, нескінченні системи є деякою математичною ідеалізацією великих скінченних систем, яку зручно застосувати у ході вивчення реальних великих систем.

Реальна фізична система в кожний момент часу t займає якусь конфігурацію $\widetilde{\gamma}(t)$ фазового простору $\widetilde{\Gamma}$. Під впливом внутрішніх або ще й зовнішніх взаємодій така система перебуває в постійному русі, тобто кожна частинка описує якусь неперервну траєкторію, а мікроскопічний стан усієї системи визначається усіма такими траєкторіями. Але для дослідження системи необхідно знати не мікроскопічну поведінку, а макроскопічні наслідки такої поведінки, тобто деякі макроскопічні характеристики: тиск, енергію, теплоємність тощо. Такі фізичні характеристики називають *спостережуваними величинами.* Спостережувані величини описують вимірними функціями на фазовому просторі, тобто для нескінченних систем це функції від нескінченної кількості змінних. Про те, яким чином будувати такі функції, йтиметься далі. Нехай $F(\widetilde{\gamma}(t))$ є такою функцією, яка описує деяку спостережувану величину. Тоді макроскопічна характеристика, яка їй відповідає і яку можемо спостерігати експериментально, є середнім значенням цієї величини. Його розраховують за відомою формулою

$$\overline{F} := \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T F(\widetilde{\gamma}(t))dt, \qquad (0.0.1)$$

якою практично неможливо скористатись для реальної системи.

На початку XX ст. американський фізик-теоретик Джозайя Віллард Гіббс запропонував замість однієї системи ввести ансамбль тотожних систем, які кожної миті з якоюсь імовірністю займають ту чи іншу конфігурацію. Такі однакові екземпляри систем називають *ансамблями Гіббса.*

Основним постулатом Гіббса є існування деякої ймовірнісної міри μ на фазовому просторі $\widetilde{\Gamma}$:

$$\int_{\widetilde{\Gamma}} \mu(d\widetilde{\gamma}) \ = \ 1,$$

такої, що

$$\overline{F} =< F(\cdot) >_\mu = \int_{\widetilde{\Gamma}} F(\widetilde{\gamma})\mu(d\widetilde{\gamma}). \qquad (0.0.2)$$

Таким чином, замість детерміністичного опису однієї системи розглядаємо статистичний опис поведінки ансамблів ідентичних систем. Фізичне обґрунтування вигляду такої міри в обмеженому об’ємі запропонував Гіббс ще в 1902 р. [109].

Перша половина XX ст. — епоха народження квантової механіки. Дослідження зі статистичної механіки були досить спонтанними і в більшій мірі стосувалися практичних застосувань. Серед результатів, які можна віднести саме до розвитку фундаментальних досліджень статистичної механіки, варто відзначити появу праці Фовлера [101] та виведення ББГКІ (BBGKY)-ієрархії [3, 65, 143, 224]. Математичні обґрунтування наявних на той час досліджень зі статистичної механіки були висвітлені в монографії Хінчіна [48]. Надзвичайно важливими для теорії ґратчастих моделей були праці Ізінга [134], Пайерлса [186] та Онзагера [180], які на декілька десятиліть наперед визначили напрями досліджень у цій сфері та сприяли появі моделі *ґратчастого газу* [161, 162].

У 1946 р. у монографії Боголюбова [3] були намічені шляхи математичного обґрунтування термодинамічного граничного переходу в рамках формалізму канонічного ансамблю Гіббса, а також розроблено загальний метод знаходження граничних m-частинкових функцій розподілу у вигляді формальних рядів за степенями густини частинок. Строге обґрунтування збіжності таких рядів для випадку додатного парного потенціалу взаємодії опубліковано у праці [5] (див. детальне доведення в [46, 47]). В 1963 р. Рюель [210] запропонував подібний метод, який базувався на дослідженні рівнянь Кірквуда–Зальцбурга (КЗ) для кореляційних функцій великого канонічного ансамблю. Відзначимо також працю [211], в якій проблему термодинамічної границі вирішено для термодинамічних потенціалів і яка фактично узагальнювала дослідження ван–Хова [130] і Лі та Янга [161] на випадок загальніших потенціалів взаємодії. Ці праці були значним поштовхом для математичних досліджень нескінченних розріджених систем статистичної механіки. Їх детально викладено в [43], де подано значну бібліографію праць інших авторів (див. також лекції Мінлоса [173] та монографію [34] і посилання, що містяться в них).

Результати, отримані Боголюбовим і Хацетом у рамках канонічного ансамблю, узагальнені у праці Боголюбова, Петрини і Хацета [62] на випадок парних стійких потенціалів взаємодії (див., також працю [194], до якої повернемось у розд. 4). Але побудова стану в розумінні ідеї Гіббса для нескінченної системи залишалась відкритою проблемою. Вперше цю проблему розглянули у 1967 р. незалежно Мінлос [29, 30] і Рюель [212]. Якщо в Рюеля це був алгебраїчний підхід, що базувався на модних на той час ідеях Сігала, Хаага, Кастлера і був більш абстрактним, то Мінлос побудував сім'ю гіббсових мір на циліндричних множинах нескінченновимірного конфігураційного простору і визначив гіббсів стан (гіббсову міру) як граничну міру. Ця міра будувалась як продовження цієї сім'ї на всю σ-алгебру нескінченновимірного простору конфігурацій. У серії праць Добрушина [13–17, 80] наведено більш загальне визначення гіббсової міри за допомогою умовних розподілів.

Практично в той самий час майже аналогічний підхід запропонували Ленфорд і Рюель [159]. Критерієм гіббсовості міри на просторі нескінченних конфігурацій є умова, що вона задовольняє рівняння Добрушина–Ленфорда–Рюеля (ДЛР). Ключовою у цьому підході була праця Рюеля [213], в якій визначено систему з надстійкою взаємодією та встановлено, що граничні кореляційні функції такої системи задовольняють нерівності

$$\rho_m(x_1, ..., x_m) \ \leq \xi^m, \ \ \xi = \xi(z, \beta) \tag{0.0.3}$$

за довільних значень густини частинок у системі й довільної температури. Це дає змогу довести, що нескінченна послідовність кореляційних функцій $\rho = (\rho_m)_{m \geq 1}$ задовольняє систему рівнянь КЗ, а відповідна міра Гіббса задовольняє рівняння ДЛР. Для розріджених систем (тобто за малих значень густини частинок у системі) рівняння КЗ мають єдиний розв'язок, якому відповідає єдиний гіббсів стан. Взагалі, умова (0.0.3) не є необхідною. У праці [163] Ленард показав, що для існування відповідної міри достатньо виконання слабкішої умови:

$$\rho_m(x_1, ..., x_m) \ \leq \xi^m m^{2m}. \tag{0.0.4}$$

У [163–165] Ленард детально проаналізував зв'язки довільної міри μ на просторі нескінченних конфігурацій з її кореляційною мірою ρ, яка визначається на просторі скінченних конфігурацій. Деякі аспекти цього аналізу та його узагальнення продовжено в [144].

Основна мета цієї праці – продемонструвати глибокий зв'язок математичного опису нескінченних систем статистичної механіки та методів нескінченновимірного аналізу на фазових просторах таких систем. Важливим кроком вперед була поява нових технічних інструментів для побудови кластерних і полімерних розкладів у статистичній механіці. Так, у [199] було помічено, що використання властивості нескінченноподільності міри Пуассона в побудові кластерних розкладів для кореляційних функцій значно спрощує саму побудову та оцінювання коефіцієнтів розкладу. Цю властивість використано в працях [110, 111, 147, 202, 205]. У [201] запропоновано нові розклади за щільністю конфігурацій. Якщо розбити простір $\mathbb{R}^d$ на маленькі гіперкубики, то для кожної конфігурації весь простір розіб'ється на області, в яких у кожному кубику міститься дві й більше точок конфігурації (*щільні конфігурації*), та області, в яких є тільки одна точка в кожному кубику або їх зовсім немає (*розріджені конфігурації*). Звичайно, це досить умовне розбиття, бо якщо розміри кубиків є досить маленькі, то навіть області з розрідженими конфігураціями будуть мати щільну множину точок.

Якщо потенціал взаємодії має сильну позитивну сингулярність у нулі, то ймовірність щільних конфігурацій є малою. Цей елементарний факт використано для побудови розкладів. За допомогою таких розкладів вдалося значно спростити доведення суперстійкої оцінки Рюеля (0.0.3) і навіть трохи її поліпшити (див. також [156,189,190]). Виявилося, що для розрахунків основних термодинамічних потенціалів і кореляційних функцій нескінченних систем достатньо розглядати ці функції лише на розріджених конфігураціях (див. [32, 206, 208]), розглядаючи їх як апроксимацію відповідних функцій неперервних нескінченних систем класичної статистичної механіки з посилено надстійкою взаємодією [207]. Це в свою чергу дає можливість розглядати нескінченну систему частинок, конфігураційний простір якої складається з розріджених конфігурацій, як самостійну модель *коміркового газу* [203], яку описано в розд. 6. Така модель є проміжною між моделями *ґратчастих газів* і моделями неперервних систем статистичної механіки.

Нові математичні методи були також запропоновані для описування систем заряджених частинок. Це дало змогу математично строго обґрунтувати теорію Дебая–Хюкеля та відомий ефект колективної взаємодії *дебаївського екранування.* Огляд цих результатів і об'ємний перелік посилань наведено в [72]. Головні положення цих методів коротко описано в розд. 7.

Завершує цю працю короткий опис побудови рівноважних станів для квантових рівноважних систем. Ключовими для розвитку техніки, яка є основою викладення розд. 1–7, були праці Жинібра [112–114, 117]. У них було розроблено основний технічний інструмент – застосування функціональних інтегралів Вінера і побудова граничних виразів для $\widetilde{\rho}^{\Lambda}((x)_m;(y)_m)$ при $\Lambda \nearrow \mathbb{R}^d$. Такий технічний прийом полягає в поданні $\widetilde{\rho}^{\Lambda}$ кореляційними функціоналами $\rho^{\Lambda}(\omega)_m$, які є аналогами класичних кореляційних функцій. За аналогією до класичних систем функції $\rho^{\Lambda}(\omega)_m$ задовольняють рівняння типу КЗ, які мають (рівномірно за Λ) розв'язки в деякому банаховому просторі, за малих значень активність z і граничні функції задовольняють рівняння КЗ.

Маючи граничні функції $\rho((x)_m;(y)_m)$ та враховуючи їхні властивості, можна реконструювати стан Гіббса (8.0.1) у термодинамічній границі для деякого класу специфікацій міри Пуассона на конфігураційному просторі петель Вінера (броунівських локальних спостережуваних). У праці [147] запропоновано деякий нетрадиційний підхід для опису неперервних систем квантової статистичної механіки в рамках статистики Больцмана (БС). Він базується на понятті евклідового стану Гіббса (ЕСГ) і побудові відповідної евклідової міри Гіббса (ЕМГ) як мости, що не є локально компактним простором. Для побудови гіббсових станів у термодинамічній границі запропоновано новий тип локалізації "точок конфігурації", що відрізняється від традиційної (див., наприклад, [112–114, 117] або [69]), і сенс якого зводився до локалізації лише початкових точок петель Вінера. Цей факт дав змогу зробити заявку на побудову граничного стану методом кластерних розкладів, які запропоновано в [199] для класичних систем.

Розділ 1

Фазові простори систем статистичної механіки

Розглянемо системи частинок, що знаходяться в евклідовому просторі $\mathbb{R}^d$ ($d \geq 1$) і наділені певною кількістю фізичних характеристик(імпульсом, зарядом, спіном тощо). Сукупність цих характеристик усіх частинок системи визначає її *мікроскопічний стан*, а множина їх числових значень утворює так званий ***фазовий простір*** системи. Отже, $\widetilde{\gamma} = \{\widetilde{x}_1, \widetilde{x}_2, \ldots\} \in \widetilde{\Gamma}$, де $\widetilde{x}_i = (x_i, p_i, q_i, s_i, \ldots)$ називають точкою цього фазового простору $\widetilde{\Gamma}$, якій відповідає один і тільки один мікроскопічний стан системи. Згідно з законами фізики усі частинки системи перебувають у постійному русі, тому ця точка є функцією часу $t \in \mathbb{R}$. Але фізичний стан системи характеризують макроскопічні параметри, які спостерігають в експериментах над системою. Це тиск, об'єм, густина тощо. Сукупність таких характеристик визначає *макроскопічний стан систтеми* . Кожному мікроскопічному стану відповідає один макроскопічний стан, але кожному макроскопічному стану відповідає нескінченна кількість мікроскопічних станів. На відміну від мікроскопічного стану, який змінюється кожної миті, макроскопічний стан може не змінюватись протягом певного часу. У цьому випадку кажуть, що система перебуває у рівновазі, а системи, в яких термодинамічні характеристики не залежать від часу, називають *рівноважними системами.*

Будемо розглядати системи точкових частинок, тому простір, який утворюють точки $\gamma = \{x_1, x_2, \ldots\}$, що фіксують тільки координати частинок системи, називатимемо *конфігураційним простором* і позначатимемо літерою Г.

Математичний опис та побудова аналізу на просторах конфігурацій були розпочаті, мабуть, у працях Вершика, Гельфанда і Граєва [221] та Ісмагілова [22]. У більш пізніх працях Альбаверіо, Кондратьєва і Рьокнера [54, 55] був зроблений детальний теоретико-множинний аналіз цих просторів і введені структури диференціальної геометрії. Саме там читач може знайти детальну бібліографію праць за цією тематикою та її застосування в математичній фізиці.

1.1. Простори конфігурацій систем статистичної механіки

У цій книзі буде розглядатися нескінченна система тотожних точкових частинок у просторі $\mathbb{R}^d$. Ми не будемо детально описувати теоретико-множинну та топологічну структуру просторів конфігурації, відсилаючи читача до вже згаданих праць [54,55,144,164,165,173,221], а лише наведемо необхідні визначення та деякі основні властивості цих просторів.

1.1.1. Простори нескінченних конфігурацій

Нехай σ – це міра Лебега в $\mathbb{R}^d$. Позначимо через $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$, борелівську σ-алгебру відкритих множин в $\mathbb{R}^d$, а через $\mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ усі підмножини, що мають компактне замикання. *Конфігураційний простір* $\Gamma := \Gamma_{\mathbb{R}^d}$ буде складатися з усіх локально скінченних підмножин простору $\mathbb{R}^d$, тобто

$$\Gamma = \Gamma_{\mathbb{R}^d} := \left\{ \gamma \subset \mathbb{R}^d \middle| \; |\gamma \cap \Lambda| < \infty, \text{ для всіх } \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d) \right\}, \tag{1.1.1}$$

де $|A|$ – число, що означає кількість точок у множині A. Це досить природне визначення з точки зору застосувань, оскільки в обмеженому об'ємі не може знаходитися нескінченна кількість частинок.

З визначення (1.1.1) зрозуміло, що Γ не є лінійним простором. Але Γ можна зробити топологічним нелінійним простором:

кожний елемент $\gamma \in \Gamma$ можна ототожнити з невід'ємною мірою Радона:

$$\Gamma \ni \gamma \mapsto \sum_{x\in\gamma} \delta_x \in \mathcal{M}^+(\mathbb{R}^d), \tag{1.1.2}$$

де δ_x – міра Дірака:

$$\delta_x(f) = f(x), \ \ f \in C_0(\mathbb{R}^d), \tag{1.1.3}$$

де $C_0(\mathbb{R}^d)$ – простір неперервних функцій з компактним носієм, а $\mathcal{M}^+(\mathbb{R}^d)$ – простір невід'ємних мір Радона на $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$. Відповідна диференціальна міра

$$\gamma(d\sigma) = \sum_{x\in\gamma} \delta_x d\sigma, \ \ d\sigma = \sigma(dx) = dx. \tag{1.1.4}$$

Простір Γ можна наділити топологією, яка індукована грубою (*vague*) топологією в $\mathcal{M}^+(\mathbb{R}^d)$, що визначається як найслабша топологія, відносно якої відображення

$$\Gamma \ni \gamma \mapsto < \gamma, f > = \int_{\mathbb{R}^d} f(x)\gamma(d\sigma) = \sum_{x\in\gamma} f(x) \tag{1.1.5}$$

є неперервним для кожної $f \in C_0(\mathbb{R}^d)$. Тоді простір Γ стає польським простором, тобто сепарабельним, метризованим в цій топології (див. детальніше [146]). Позначимо також через $\mathcal{B}(\Gamma)$ відповідну борелівську σ-алгебру на Γ.

Можна навести еквівалентний (можливо, більш прозорий) опис цієї топології на мові збіжності послідовності конфігурацій $(\gamma_n)_{n\in\mathbb{N}}$ до конфігурації $\gamma \in \Gamma$.

Означення 1.1. *Послідовність* γ_n *збігається до* $\gamma \in \Gamma$ *тоді і тільки тоді, коли для будь-якого* $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$, *такого що для* $\gamma \cap \partial\Lambda = \emptyset$

$$\lim_{n\to\infty} |\gamma_n \cap \Lambda| = |\gamma \cap \Lambda|, \tag{1.1.6}$$

де $\partial\Lambda$ *– це межа* Λ.

Передбазою в цій топології є множини вигляду

$$\{\gamma \in \Gamma \mid \ |\gamma_\Lambda| = N,\ \gamma_{\partial\Lambda} = \emptyset,\ \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d),\ N \in \mathbb{N}_0\}.$$

$\mathcal{B}(\Gamma)$ – найменша σ-алгебра на Γ, відносно якої усі відображення

$$N_\Lambda\colon\ \Gamma \mapsto \mathbb{N}_0 := \mathbb{N} \cup \{0\}\ ;\ \gamma \mapsto |\gamma \cap \Lambda|$$

є вимірними для будь-якого $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$.

Для довільної підмножини $Y \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$, але $Y \notin \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$, визначимо простір нескінченних конфігурацій Γ_Y:

$$\Gamma_Y = \{\gamma \in \Gamma \mid \gamma \cap Y^c = \varnothing,\ Y^c := \mathbb{R}^d \setminus Y\}.$$

Відповідна σ-алгебра є

$$\mathcal{B}(\Gamma_Y)\ :=\ \sigma(\{N_\Lambda \restriction \Gamma_Y \mid \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)\}).$$

Ця σ-алгебра є ізоморфною до

$$\mathcal{B}_Y(\Gamma)\ :=\ \sigma(\{N_\Lambda \mid \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d),\ \Lambda \subset Y\}).$$

Для $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$

$$\Gamma_\Lambda\ :=\ \Big\{\gamma \in \Gamma \mid \ |\gamma \cap \mathbb{R}^d \setminus \Lambda| = 0\Big\}$$

буде простором конфігурацій в обмеженому об'ємі Λ. З визначення (1.1.1) випливає, що усі конфігурації у просторі Γ_Λ є скінченними. Щоб зрозуміти ізоморфізм σ-алгебр $\mathcal{B}(\Gamma_\Lambda)$ і $\mathcal{B}_\Lambda(\Gamma)$, визначимо проєктор

$$p_\Lambda\ :\ \Gamma \mapsto \Gamma_\Lambda\ ;\ \gamma \mapsto \gamma \cap \Lambda := \gamma_\Lambda. \tag{1.1.7}$$

Отже, кожному $\gamma_\Lambda \in \mathcal{B}(\Gamma_\Lambda)$ ставиться у відповідність цілий клас $\{\gamma \in \Gamma \mid \gamma \cap \Lambda = \gamma_\Lambda\}$.

На завершення зауважимо, що якщо частинки системи не мають інших характеристик (крім координат, в яких вони зосереджені), то *фазовий простір* системи збігається з конфігураційним простором Γ. Якщо ж кожна частинка системи має ще інші характеристики, такі як імпульс, спін, заряд тощо, тоді фазовим простором є так званий *маркований конфігураційний простір* $\widetilde{\Gamma}$ (див., наприклад, [107, 108, 126]).

Розглянемо найпростіший фазовий простір класичного точкового газу, кожна частинка якого в точці $x \in \gamma \subset \mathbb{R}^d$ має імпульс $p_x = mv_x \in \mathbb{R}^d$. Кожна точка $\widetilde{\gamma} \in \widetilde{\Gamma}$ – це нескінченна множина пар (x, p_x), в яких $x \in \gamma \in \Gamma$, а $p_x \in \mathbb{R}^d$:

$$\widetilde{\Gamma} := \left\{\widetilde{\gamma} = \{(x, p_x)\} \mid x \in \gamma \in \Gamma,\ p_x \in \mathbb{R}^d\right\}. \tag{1.1.8}$$

Метричні та топологічні структури маркованих конфігураційних просторів $\widetilde{\Gamma}$ детально висвітлені в працях [76, 107]).

1.1.2. Простори скінченних конфігурацій

Позначимо множину всіх скінченних конфігурацій простору Γ через Γ_0. Насправді Γ_0 є підмножиною Γ, але буде розглядатися як самостійний конфігураційний простір, в якому незалежним чином можна ввести власну топологію. Визначимо спершу конфігураційний простір з фіксованою кількістю точок:

$$\Gamma^{(n)} := \{\gamma \in \Gamma \mid |\gamma| = n,\ n \in \mathbb{N}\},\ \ \Gamma^{(0)} := \varnothing. \tag{1.1.9}$$

Якщо усі такі конфігурації знаходяться в деякій обмеженій множині $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$, то відповідний простір буде таким:

$$\Gamma_\Lambda^{(n)} := \left\{\gamma \in \Gamma^{(n)} \mid \gamma \subset \Lambda\right\}.$$

Тоді простори скінченних конфігурацій в $\mathbb{R}^d$ і в $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ можна подати у вигляді диз'юнктивних об'єднань:

$$\Gamma_0 := \coprod_{n=0}^{\infty} \Gamma^{(n)},\ \text{і}\ \Gamma_\Lambda := \coprod_{n=0}^{\infty} \Gamma_\Lambda^{(n)}. \tag{1.1.10}$$

Топологічну структуру в просторах $\Gamma_X^{(n)} (X \in \{\mathbb{R}^d, \Lambda\})$ можна ввести за допомогою відображення множин

$$\widetilde{X}^n := \{(x_1, ..., x_n) \in X^n \mid x_i \in X,\ x_i \neq x_j,\ \text{якщо}\ i \neq j\}$$

на простори $\Gamma_X^{(n)}$:

$$\begin{aligned} sym_X^n :\ \widetilde{X}^n &\to \Gamma_X^{(n)} \quad (n \in \mathbb{N}), \\ (x_1, ..., x_n) &\mapsto \{x_1, ..., x_n\}, \end{aligned} \tag{1.1.11}$$

тобто простір $\Gamma_X^{(n)}$ можна ототожнити з симетризацією $\widetilde{X}^n$.

Зауваження 1.1. *З наведених вище побудов випливає, що для будь-якого $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ простори $\Gamma_{0;\Lambda}$ і Γ_Λ збігаються як множини, але є різними топологічними просторами.*

Відповідні простори маркованих конфігурацій $\widetilde{\Gamma}_0$ і $\widetilde{\Gamma}_\Lambda$ визначаються аналогічно (1.1.8), але кількість точок конфігурації γ є скінченною і у випадку $\widetilde{x} \in \widetilde{\gamma} \in \widetilde{\Gamma}_0$ – координатна складова $x \in \mathbb{R}^d$, а у випадку $\widetilde{x} \in \widetilde{\gamma} \in \widetilde{\Gamma}_\Lambda$ – координатна складова $x \in \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$.

Обмежені множини в Γ_0. *Множину $A \in \mathcal{B}(\Gamma_0)$ називають обмеженою, якщо існує $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ і $N \in \mathbb{N}_0$ таке що*

$$A \subset \coprod_{n=0}^{N} \Gamma_\Lambda^{(n)}.$$

σ-Алгебра $\mathcal{B}_\Lambda(\Gamma)$ є дуже важливою математичною структурою у визначенні міри Гіббса на прсторі Γ, а їх об'єднання визначає *алгебру циліндричних множин*

$$\mathcal{B}_{cyl}(\Gamma) := \bigcup_{\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)} \mathcal{B}_\Lambda(\Gamma). \tag{1.1.12}$$

1.1.3. Простори щільних та розріджених конфігурацій

У дослідженні багатьох термодинамічних характеристик нескінченних систем важливе значення має розбиття простору $\mathbb{R}^d$ на елементарні гіперкубики з довжиною ребер $a > 0$ і центрами, розташованими в точках $r \in a\mathbb{Z}^d \subset \mathbb{R}^d$:

$$\Delta_a(r) := \{x \in \mathbb{R}^d \mid (r^i - a/2) \leq x^i < (r^i + a/2),\ i = 1, ..., d\}. \tag{1.1.13}$$

Замість $\Delta_a(r)$ запишемо Δ, якщо немає потреби вказувати, де знаходиться центр гіперкубика. Позначимо таке розбиття через $\overline{\Delta}_a$.

Для довільного $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ і довільного розбиття $\overline{\Delta}_a$ позначимо як

$$\Lambda_a \cong \overline{\Delta}_{a,\Lambda} := \{\Delta \in \overline{\Delta}_a \mid \Delta \cap \Lambda \neq \emptyset\} \tag{1.1.14}$$

мінімальне покриття Λ гіперкубиками $\Delta \in \overline{\Delta}_a$ так, що $\Lambda \subseteq \Lambda_a$ і $\lim_{a \to 0} \Lambda_a = \Lambda$. Розбиття (1.1.13) було застосовано Рюелем [213] для доведення обмеженості кореляційних функцій за довільних значень фізичних параметрів активності та температури систем із суперстійкою взаємодією. У розд. 5 наведено ідею більш прозорого і простішого доведення цього результату за допомогою кластерних розкладів, які запропоновані в [201]. Для побудови таких кластерних розкладів введемо два типи конфігурацій. Для довільного розбиття $\overline{\Delta}_a$ введемо простір *розріджених* конфігурацій:

$$\Gamma^{(dil)} = \Gamma^{(dil)}(\Delta) := \left\{ \gamma \in \Gamma \middle| \, |\gamma_\Delta| = 0 \vee 1, \text{для всіх } \Delta \in \overline{\Delta} \right\} \tag{1.1.15}$$

і простір *щільних* конфігурацій:

$$\Gamma^{(den)} = \Gamma^{(den)}(\Delta) := \left\{ \gamma \in \Gamma \middle| \, |\gamma_\Delta| \geq 2, \text{для всіх } \Delta \in \overline{\Delta} \right\}. \tag{1.1.16}$$

Для довільного $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ простори $\Gamma_\Lambda^{(dil)}$ і $\Gamma_\Lambda^{(den)}$ визначаються аналогічно згідно з формулами (1.1.2.), (1.1.10) та (1.1.15), (1.1.16).

Зрозуміло, що для $\Delta \in \overline{\Delta}_a$ простір $\Gamma_\Delta = \Gamma_\Delta^{(dil)} \cup \Gamma_\Delta^{(den)}$, але $\Gamma_\Lambda \neq \Gamma_\Lambda^{(dil)} \cup \Gamma_\Lambda^{(den)}$ для $\Lambda \neq \Delta$.

Щоб не складалося враження, що розріджені конфігурації описують фізичні системи розріджених газів, наведемо таке зауваження:

Зауваження 1.2. *Однією з найважливіших характеристик фізичного стану системи взаємодіючих частинок є густина, тобто кількість частинок в одиниці об'єму. Як завгодно велике значення цієї характеристики можна отримати і в рамках опису системи у просторі розріджених конфігурацій, вибираючи розмір a ребер гіперкубиків достатньо малим.*

Для довільного $\Delta \in \overline{\Delta}_a$ і довільного $0 < \varepsilon \leq 1$ визначимо також два важливі підпростори конфігураційного простору $\Gamma_{\Delta}^{(den)}$ відносно конфігурації η, такої, що $\eta \cap \Delta = \emptyset$, яка знаходиться на деякій відстані від Δ:

$$\Gamma_{\Delta}^{(>)}(\eta, \varepsilon) = \Gamma_{\Delta}^{(>)} := \left\{ \gamma \in \Gamma_{\Delta}^{den} \middle| \; |\gamma| > d_{\eta}^{\varepsilon}(\Delta) \right\} \tag{1.1.17}$$

і

$$\Gamma_{\Delta}^{(<)}(\eta, \varepsilon) = \Gamma_{\Delta}^{(<)} := \left\{ \gamma \in \Gamma_{\Delta}^{den} \middle| \; |\gamma| \leq d_{\eta}^{\varepsilon}(\Delta) \right\}, \tag{1.1.18}$$

а $d_{\eta}^{\varepsilon}(\Delta) = [\frac{dist(\eta,\Delta)}{b}]^{\varepsilon}$ з довільною сталою b, згідно з якою відношення в дужках є безрозмірним.

Очевидно, що $\Gamma_{\Delta}^{den} = \Gamma_{\Delta}^{(>)} \cup \Gamma_{\Delta}^{(<)}$. Таке розбиття буде використано в розд. 5.

1.2. Функції та міри на просторах конфігурацій

Різні простори функцій, що пов'язані з просторами конфігурацій Γ_0 і Γ та мірами, які на них визначають, утворюють надзвичайно великий розділ нескінченновимірного аналізу. Тому коротко опишемо деякі аспекти цього аналізу, які будуть безпосередньо задіяні в описі систем статистичної механіки, вказуючи за змоги посилання на їх детальніший опис.

1.2.1. Функції на просторах конфігурацій

У загальному випадку функція F на Γ_0 задається нескінченною послідовністю симетричних функцій зі зростаючою кількістю змінних, тобто для $\gamma = \{x_1, ..., x_n\} \in \Gamma^{(n)}$

$$F(\gamma) = F(\{x_1, ..., x_n\}) := F_n(x_1, ..., x_n), \; F_0 = F(\emptyset) = const.$$

На просторі нескінченних конфігурацій Γ важливим класом функцій є так звані циліндричні функції. Нехай $L^0(\Gamma, \mathcal{B}(\Gamma))$ – це простір усіх $\mathcal{B}(\Gamma)$-вимірних функцій. Тоді клас циліндричних функцій визначається формулою

$$\mathcal{F}L^0(\Gamma) = \bigcup_{\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)} L^0(\Gamma, \mathcal{B}_\Lambda(\Gamma)).$$

Область Λ називають областю циліндричності.

Функція $F \in L^0(\Gamma, \mathcal{B}_\Lambda(\Gamma))$ тоді і тільки тоді, коли

$$F \restriction \Gamma_\Lambda \in L^0(\Gamma, \mathcal{B}_\Lambda(\Gamma)) \text{ і } F(\gamma) = F(\gamma_\Lambda).$$

Довільну функцію на циліндричних множинах визначають наступним чином. Нехай $f \in C_0(\mathbb{R}^d)$ і $supp f = \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$. Тоді для довільного $\gamma \in \Gamma$

$$< f, \gamma >= \int_{\mathbb{R}^d} f(\gamma)\gamma(d\sigma) = \int_\Lambda f(x)\gamma(dx) \; = < f, \gamma_\Lambda > .$$

Нехай $f_1, ..., f_n \in C_0(\mathbb{R}^d)$ і $supp f_i \subset \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ і $F_n \in C(\mathbb{R}^n)$, тоді

$$F(\gamma) = F_n(< f_1, \gamma >, < f_2, \gamma >, ..., < f_n, \gamma >) \in \mathcal{F}L^0(\Gamma).$$

Основні простори функцій на Γ_0 і Γ розглянемо нижче. Визначимо для цього деякі базові міри на Γ_0 і Γ.

1.2.2. Міра Пуассона та міра Лебега–Пуассона

Стан ідеального газу в рівноважній статистичній механіці описується мірою *Пуассона* $\pi_{z\sigma}$ на конфігураційному просторі Γ, де $z > 0$ – це активність (фізичний параметр, пов'язаний з густиною частинок у системі). Математичні аспекти визначення міри

Пуассона можуть бути різні залежно від її застосування (див., наприклад, [7, 55, 136, 137]). Згідно з [55] побудуємо спершу міру на скінченних конфігураціях, яку інколи називають [54] мірою Лебега–Пуассона.

Міра Лебега–Пуассона. Нехай $X \in \{\mathbb{R}^d, \Lambda\}, \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$. Для будь якого $n \in \mathbb{N}$ визначимо міру $\sigma^{\otimes n}$ на $(X^n, \mathcal{B}(X^n))$. Як наслідок неатомарності міри Лебега σ маємо

$$\sigma^{\otimes n}(X^n \setminus \widetilde{X}^{(n)}) \;=\; 0.$$

Визначимо міру $\sigma_X^{(n)}$ на $\mathcal{B}(\Gamma_X^{(n)})$ за допомогою формули

$$\sigma_X^{(n)} \;:=\; \sigma_X^{\otimes n} \circ (sym_X^n)^{-1}, \;\; \sigma_X := \sigma \restriction X,$$

де права частина означає образ міри $\sigma^{\otimes n}$ відносно відображення (1.1.11).

Означення 1.2. *Мірою Лебега–Пуассона, що породжена мірою інтенсивності* σ, *називають сігма-скінченну міру на* $(\Gamma_0, \mathcal{B}(\Gamma_0))$, *яка визначається нескінченним рядом:*

$$\lambda_\sigma \;:=\; \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sigma_X^{(n)} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sigma^{(n)}, \;\; \sigma^{(0)}(\emptyset) := 1.$$

Для $\Lambda \in \mathcal{B}_c(X)$ визначимо обмеження λ_σ на $(\Gamma_\Lambda, \mathcal{B}(\Gamma_\Lambda))$ формулою

$$\lambda_\sigma^\Lambda := \lambda_\sigma \restriction \Gamma_\Lambda \;:=\; \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sigma_\Lambda^{(n)}.$$

Для $\mathcal{B}(\Gamma_0)$-вимірної функції F інтеграл за мірою λ_σ визначається формулою

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_{0,X}} F(\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma) \;&=\; \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_X \cdots \int_X F(\{x\}_1^n)\sigma(dx_1)\cdots\sigma(dx_n) = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_X \cdots \int_X F_n(x_1, ..., x_n) dx_1 \cdots dx_n. \end{aligned} \tag{1.2.19}$$

Міра Пуассона на Г. За допомогою міри λ_σ^Λ запишемомо ймовірнісну міру на $(\Gamma_\Lambda, \mathcal{B}(\Gamma_\Lambda))$:

$$\pi_\sigma^\Lambda \ := \ e^{-\sigma(\Lambda)}\lambda_\sigma^\Lambda. \tag{1.2.20}$$

Справедливе таке твердження:

Твердження 1.2.1. *Сім'я мір* $\{\pi_\sigma^\Lambda : \Lambda \in \mathcal{B}_c(X)\}$ *є попарно узгодженою, тобто для будь-яких* $\Lambda_1 \subsetneqq \Lambda_2$

$$\pi_\sigma^{\Lambda_2} \upharpoonright \Gamma_{\Lambda_1} \ = \ \pi_\sigma^{\Lambda_1}.$$

Доведення. Для цього достатньо довести, що для довільної циліндричної функції $F \in L^0(\Gamma, \mathcal{B}_{\Lambda_1}(\Gamma))$ справедлива формула

$$\int_{\Gamma_{\Lambda_2}} F(\gamma \cap \Lambda_1)\pi_\sigma^{\Lambda_2}(d\gamma) \ = \ \int_{\Gamma_{\Lambda_1}} F(\gamma \cap \Lambda_1)\pi_\sigma^{\Lambda_1}(d\gamma). \tag{1.2.21}$$

Скористаємося означенням (1.2.20) і формулою (1.2.19) та розпишемо ліву частину формули (1.2.21):

$$\begin{aligned}
&\int_{\Gamma_{\Lambda_2}} F(\gamma \cap \Lambda_1)\pi_\sigma^{\Lambda_2}(d\gamma) = \\
&= e^{-\sigma(\Lambda_2)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\int_{\Lambda_2} \sigma(dx) \right)^n F(\{x\}_1^n \cap \Lambda_1) = \\
&= e^{-\sigma(\Lambda_2)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\int_{\Lambda_1} \sigma(dx) + \int_{\Lambda_2 \setminus \Lambda_1} \sigma(dx) \right)^n F(\{x\}_1^n \cap \Lambda_1) = \\
&= e^{-\sigma(\Lambda_2)} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{k!(n-k)!} \left(\int_{\Lambda_1} \sigma(dx) \right)^k \times \\
&\times \left(\int_{\Lambda_2 \setminus \Lambda_1} \sigma(dx) \right)^{n-k} F(\{x\}_1^n \cap \Lambda_1) = \\
&= e^{-\sigma(\Lambda_2)} e^{\sigma(\Lambda_2 \setminus \Lambda_1)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\int_{\Lambda_1} \sigma(dx) \right)^k F_k(x_1, ..., x_k) = \\
&= \int_{\Gamma_{\Lambda_1}} F(\gamma \cap \Lambda_1)\pi_\sigma^{\Lambda_1}(d\gamma).
\end{aligned}$$

Для скорочення запису використано дещо нестандартне позначення для кратних інтегралів та формулу пересумування

$$\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{n}\frac{a_k}{k!}\frac{b_{n-k}}{(n-k)!}=\left(\sum_{k=0}^{\infty}\frac{a_k}{k!}\right)\left(\sum_{l=0}^{\infty}\frac{b_l}{l!}\right).$$

■

За теоремою Колмогорова [23] (див., наприклад, [185]) сім'я $\{\pi_\sigma^\Lambda : \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)\}$ єдиним чином визначає міру Пуассона π_σ на $(\Gamma, \mathcal{B}(\Gamma))$ так, що

$$\forall \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d), \quad \pi_\sigma^\Lambda \ = \ \pi_\sigma \circ (p_\Lambda)^{-1},$$

де p_Λ визначено в (1.1.7).

Деякі важливі характеристики мір λ_σ і π_σ. Важливою характеристикою міри $\pi_{z\sigma}$ є її перетворення Лапласа. Нехай функція $f \in C_0(\mathbb{R}^d)$ є такою, що існує $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$, таке що $supp f \subset \Lambda$. Тоді

$$\forall \gamma \in \Gamma, \quad <\gamma, f> = <p_\Lambda \gamma, f> .$$

За означенням перетворення Лапласа

$$\begin{aligned} l_{\pi_\sigma}(f) :&= \int_\Gamma e^{<\gamma,f>}\pi_\sigma(d\gamma) = \int_{\Gamma_\Lambda} e^{<\gamma,f>}\pi_\sigma^\Lambda(d\gamma) = \\ &= e^{-\sigma(\Lambda)}\int_{\Gamma_\Lambda} e^{<\gamma,f>}\lambda_\sigma^\Lambda(d\gamma) = e^{\int_{\mathbb{R}^d}(e^{f(x)}-1)\sigma(dx)}. \end{aligned} \tag{1.2.22}$$

Іншою важливою властивістю міри Пуассона є тотожність Мекке:

$$\int_\Gamma \sum_{x\in\gamma} H(x;\gamma)\pi_\sigma(d\gamma) \ = \ \int_\Gamma \int_{\mathbb{R}^d} H(x;\gamma\cup\{x\})\sigma(dx)\pi_\sigma(d\gamma) \tag{1.2.23}$$

для довільної $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \otimes \mathcal{B}(\Gamma)$-вимірної функції H. Цю формулу встановив Кемпбелл [73, 74], а Мекке [172] показав, що тотожність (1.2.23) є необхідною та достатньою умовою того, що π_σ є пуассонівською мірою з інтенсивностю σ. Формулу (1.2.23) легко довести для $H(x;\gamma) = h(x)e^{<\gamma,(\alpha h+\beta g)>}, \alpha, \beta \in \mathbb{C},\ h, g \in C_0(\mathbb{R}^d)$. Тоді

$$\int_\Gamma \sum_{x\in\gamma} h(x)e^{<\gamma,(\alpha h+\beta g)>}\pi_\sigma(d\gamma) = \int_\Gamma < \gamma, h > e^{<\gamma,(\alpha h+\beta g)>}\pi_\sigma(d\gamma) =$$
$$= \frac{d}{d\alpha}\int_\Gamma e^{<\gamma,(\alpha h+\beta g)>}\pi_\sigma(d\gamma) = \frac{d}{d\alpha}e^{\int_{\mathbb{R}^d}(e^{\alpha h(x)+\beta g(x)}-1)\sigma(dx)} =$$
$$= \int_\Gamma\int_{\mathbb{R}^d} h(x)e^{<\gamma\cup\{x\},(\alpha h+\beta g)>}\sigma(dx)\pi_\sigma(d\gamma).$$

Лінійна оболонка множини всіх експоненціальних векторів $\{e^{i<\gamma,f>} \mid f \in C_0(\mathbb{R}^d)\}$ є всюди щільною в $L^2(\Gamma, \pi_\sigma)($ [136], теорема 3), тому формулу (1.2.23) можна розширити на множину всіх $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \otimes \mathcal{B}(\Gamma)$-вимірні функції H.

Важливою характеристикою мір $\pi_{z\sigma}$ і $\lambda_{z\sigma}$ є також властивість нескінченно-подільності (див., наприклад, [7], розд. 4.4). На мові інтегралів цю властивість можна сформулювати у вигляді леми:

Лема 1.2.2. *Нехай $X_1 \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$, $X_2 \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ і $X_1 \cap X_2 = \emptyset$, $X_1 \cup X_2 = \Lambda$. Функції F_i, $(i = 1, 2)$ є $\mathcal{B}(\Gamma_{X_i})$-вимірні. Тоді*

$$\int_{\Gamma_\Lambda} F_1(\gamma)F_2(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \int_{\Gamma_{X_1}} F_1(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)\int_{\Gamma_{X_2}} F_2(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{1.2.24}$$

Доведення. За означенням (1.2.19)

$$\int_{\Gamma_\Lambda} F_1(\gamma)F_2(\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma) =$$
$$= \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{n!}\left(\int_{X_1}\sigma(dx) + \int_{X_2}\sigma(dx)\right)^n F_1(\{x\}_1^n \cap X_1)F_2(\{x\}_1^n \cap X_2) =$$
$$= \sum_{n=0}^\infty\sum_{k=0}^n \frac{1}{k!(n-k)!}\left(\int_{X_1}\sigma(dx)\right)^k\left(\int_{X_2}\sigma(dx')\right)^{n-k} \times$$
$$\times F_1(\{x\}_1^k)F_2(\{x'\}_1^{n-k}) = \int_{\Gamma_{X_1}} F_1(\gamma)\lambda_\sigma^{X_1}(d\gamma)\int_{\Gamma_{X_2}} F_2(\gamma)\lambda_\sigma^{X_2}(d\gamma).$$

■

Наведемо ще одну важливу технічну лему, яку будемо використовувати нижче.

Лема 1.2.3. *Для всіх вимірних функцій* $G : \Gamma_0 \mapsto \mathbb{R}$ *і* $H : \Gamma_0 \times \Gamma_0 \mapsto \mathbb{R}$, *для яких* $G(\xi \cup \gamma)H(\xi, \gamma) \in L^1(\Gamma_0 \times \Gamma_0, \lambda_\sigma \otimes \lambda_\sigma)$, *справедлива така рівність:*

$$\int_{\Gamma_0} G(\gamma) \sum_{\xi \subseteq \gamma} H(\xi, \gamma \backslash \xi) \lambda_\sigma(d\gamma) = \int_{\Gamma_0} \int_{\Gamma_0} G(\xi \cup \gamma) H(\xi, \gamma) \lambda_\sigma(d\gamma) \lambda_\sigma(d\xi). \tag{1.2.25}$$

Доведення. Нехай $\xi \restriction \Gamma_0^{(k)} = \{x\}_1^k$, а $\gamma \restriction \Gamma_0^{(m)} = \{x\}_{k+1}^{k+m}$. Тоді

$$\int_{\Gamma_0} \int_{\Gamma_0} G(\xi \cup \gamma) H(\xi, \gamma) \lambda_\sigma(d\gamma) \lambda_\sigma(d\xi) =$$

$$= \sum_{k,m=0}^{\infty} \frac{1}{k!m!} \int_{\mathbb{R}^{dk}} \int_{\mathbb{R}^{dm}} G(\{x\}_1^{k+m}) H(\{x\}_1^k, \{x\}_{k+1}^{k+m}) \sigma(dx)^{k+m} =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} \int_{\mathbb{R}^{\ltimes}} G(\{x\}_1^n) H(\{x\}_1^k, \{x\}_{k+1}^n) \sigma(dx)^n =$$

$$= \int_{\Gamma_0} G(\gamma) \sum_{\xi \subseteq \gamma} H(\xi, \gamma \setminus \xi) \lambda_\sigma(d\gamma).$$

■

1.3. Функціональні простри на прсторах конфігурацій

Базові міри λ_σ (міра Лебега–Пуассона на просторах скінченних конфігурацій Γ_0 і $\Gamma_\Lambda, \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$) та міра π_σ (міра Пуассона на прсторі нескінченних конфігурацій Γ) визначають вимірні простори $(\Gamma_0, \mathcal{B}(\Gamma_0), \lambda_\sigma)$, $(\Gamma_\Lambda, \mathcal{B}(\Gamma_\Lambda), \lambda_\sigma)$ і $(\Gamma, \mathcal{B}(\Gamma), \pi_\sigma)$, на яких будемо визначати основні простори функцій, що описують системи взаємодіючих частинок. Найбільш вживаними просторами для опису таких систем є гільбертові простори $L^2(\Gamma_0, \lambda_\sigma)$,

$L^2(\Gamma_\Lambda, \lambda_\sigma))$ і $L^2(\Gamma, \pi_\sigma)$. Наведені простори ізоморфні простору Фока симетричних функцій. Ізоморфізм задається унітарними операторами відображення I_λ і I_π, які будуть визначені нижче.

1.3.1. Простір Фока, побудований за гільбертовим простором

Нехай $\mathcal{H}$ – дійсний або комплексний сепарабельний гільбертів простір. За допомогою простору $\mathcal{H}$ побудуємо тензорний степінь $\mathcal{H}^{\otimes n}$, $n \in \mathbb{N}_0$, поклавши за означенням $\mathcal{H}^{\otimes 0} := \mathbb{C}$ (або $\mathcal{H}^{\otimes 0} = \mathbb{R}$). Тоді простір Фока $\mathcal{F}$ визначається як ортогональна сума:

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}(\mathcal{H}) := \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}^{\otimes n}$$

Простори такого вигляду застосовують у квантовій механіці, квантовій теорії поля та статистичній механіці для опису взаємодії нескінченного числа частинок. Але здебільшого використовують два найбільш важливі підпростори: це простір Фока бозонів $\mathcal{F}_B$ і простір Фока ферміонів $\mathcal{F}_F$ або їх тензорний добуток $\mathcal{F}_B \otimes \mathcal{F}_F$, якщо потрібно описати взаємодію бозонів і ферміонів. У випадку, коли розглядається взаємодія декількох сортів частинок, потрібно розглядати тензорний добуток усіх просторів Фока, кожний з яких відповідає певному сорту частинок (детальніше див., наприклад, [37]).

Так, розглянемо простір Фока, що відповідаю взаємодії бозонів одного сорту, тобто простір $\mathcal{F}_B$:

$$\mathcal{F}_B = \mathcal{F}_B(L^2(\mathbb{R}^d, \sigma)) := \bigoplus_{n=0}^{\infty} L^2\left((\mathbb{R}^d)^{\otimes_s n}, \sigma^{\otimes_s n}\right),$$

де $\otimes_s n$ означає симетричний тензорний степінь. Елементами простору $\mathcal{F}_B$ є послідовності-стовпчики:

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} F_0 \\ F_1 \\ F_2 \\ \vdots \end{pmatrix},$$

де $F_n = F_n(x_1, ..., x_n),\ x_j \in \mathbb{R}^d$, є симетричними функціями своїх аргументів:

$$F_n(x_1, ..., x_n) \ = \ F_n(x_{\pi(1)}, ..., x_{\pi(n)}), \pi \in \mathcal{P}_n.$$

При цьому $F \in \mathcal{F}_B$, якщо

$$\|F\| = \|F\|_{\mathcal{F}_B} = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \|F_n\|^2_{L^2\left((\mathbb{R}^d)^{\otimes_s n}, \sigma^{\otimes_s n}\right)} \right)^{1/2} < \infty. \qquad (1.3.26)$$

Важливим класом елементів простору $\mathcal{F}_B$ є множина **експонентціальних векторів** $e(f), f \in \mathcal{H}$:

$$e(f) := \begin{pmatrix} 1 \\ f \\ \frac{1}{\sqrt{2!}} f^{\otimes 2} \\ \vdots \\ \frac{1}{\sqrt{n!}} f^{\otimes n} \\ \vdots \end{pmatrix}. \qquad (1.3.27)$$

У застосуваннях до опису квантових станів систем взаємодіючих бозонів ці вектори описують **когерентні стани**. Згідно з (1.3.26)

$$\|e(f)\|^2_{\mathcal{F}_B} = e^{\|f\|^2_{\mathcal{F}}}.$$

Важливим для застосувань є така властивість:

Твердження 1.3.1. *Для довільної всюду щільної множини* $\mathcal{L} \subseteq \mathcal{H}$ *множина експонентціальних векторів* $\{e(f) : f \in \mathcal{L}\}$ *є тотальною в* $\mathcal{F}_B$.

Доведення та означення наведено, наприклад, у [1].

1.3.2. Ізоморфізм просторів $L^2(\Gamma_0, \lambda_\sigma), L^2(\Gamma, \pi_\sigma), \mathcal{F}_B$

Звичайно усі сепарабельні гільбертові простори є ізоморфними. Але побудувати такі ізоморфізми в явному вигляді є складною математичною проблемою.

Ізоморфізм просторів $L^2(\Gamma_0, \lambda_\sigma)$ та $\mathcal{F}_B$. Нехай $G : \Gamma_0 \mapsto \mathbb{C}$ – комплексно-значна функція на просторі скінченних конфігурацій Γ_0. Визначимо послідовність функцій $F_n, n = 0, 1, 2, ...$ так:

$$G(\eta) \restriction \Gamma_0^{(n)} = G(\{x_1, ..., x_n\}) = G_n(x_1, ..., x_n) := \sqrt{n!} F_n(x_1, ..., x_n). \tag{1.3.28}$$

Тоді за визначенням міри Лебега–Пуассона (1.2.19) маємо:

$$\int_{\Gamma_0} |G(\eta)|^2 \lambda_\sigma(d\eta) \ = \ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d} |G(\{x_1, ..., x_n\})|^2 dx_1 \cdots dx_n = \tag{1.3.29}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^d} \cdots \int_{\mathbb{R}^d} |F_n(x_1, ..., x_n)|^2 dx_1 \cdots dx_n = \|F\|^2_{\mathcal{F}_B}.$$

Виходячи з рівності (1.3.29), можна записати унітарний ізоморфізм I_λ так:

$$I_\lambda : L^2(\Gamma_0, \lambda_\sigma) \ni G \mapsto F \in \mathcal{F}_B, \ \ (I_\lambda G)_n \ = \ F_n. \tag{1.3.30}$$

З визначення (1.3.30) випливає, що фоківська експонента (1.3.27) переходить у вектор $e_\lambda(f) = I_\lambda^{-1} e(f)$, такий, що

$$e_\lambda(f; \eta) \restriction \Gamma_0^{(n)} = e_\lambda(f; \{x_1, ..., x_n\}) = \prod_{i=1}^{n} f(x_i), \ n \geq 1.,$$

Отже, відповідна експонента у просторі $L^2(\Gamma_0, \lambda_\sigma)$ визначається формулою:

$$e_\lambda(f; \eta) := \begin{cases} 1, & \eta = \emptyset, \\ \prod_{x \in \eta} f(x), & \eta \in \Gamma_0 \setminus \{\emptyset\}, \end{cases} \tag{1.3.31}$$

Вправа 1.1. *Довести, що*

$$\|e_\lambda(f; \cdot)\|^2_{L^2(\Gamma_0, \lambda_\sigma)} \ = \ e^{\|f\|^2_{L^2(\mathbb{R}^d, \sigma)}} \ = \ \|e(f)\|^2_{\mathcal{F}_B},$$

$$\int_{\Gamma_0} e_\lambda(f; \eta) \lambda_\sigma(d\eta) \ = \ e^{<f>_\sigma} \ = \ e^{\int_{\mathbb{R}^d} f(x) \sigma(dx)}.$$

Ізоморфізм просторів $L^2(\Gamma, \pi_\sigma)$ та $\mathcal{F}_B$. Перетворення Лапласа міри Пуассона визначається за формулою (1.2.22). Міру Пуассона можна також розглядати на лінійному просторі узагальнених функцій $\mathcal{D}'$, який включає в себе нелінійний простір нескінченних конфігурацій Γ, тоді

$$l_{\pi_\sigma}(f) = \int_{\mathcal{D}'} e^{<\omega, f>} \pi_\sigma(d\omega) = e^{\int_{\mathbb{R}^d}(e^{f(x)}-1)\sigma(dx)}. \qquad (1.3.32)$$

Простір $L^2(\mathcal{D}', \pi_\sigma)$ є добре вивченим об'єктом, а відповідний аналіз називають "poissonian white noise analysis"(див., наприклад, [136,137]. Щоб встановити розклад, подібний розкладу Вінера–Іто(див., наприклад, [1], розд. 2. 2. 2), у випадку простору $L^2(\mathcal{D}', \mu^G)$ розглянемо функціонал

$$e_\pi(f, \omega) \ = \ e^{<\omega, \ln(1+f)> - <f>_\sigma}. \qquad (1.3.33)$$

Цей функціонал можна розглядати як твірний функціонал так званих узагальнених мономів Шарле, які визначаються розкладом

$$e_\pi(f, \omega) \ = \ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} < C_n^\sigma(\omega), f^{\otimes n} > . \qquad (1.3.34)$$

Зауваження 1.3. *В одновимірному випадку ($x, z \in \mathbb{R}$) твірний функціонал звичайних поліномів Шарле має вигляд*

$$G(x; z) \ = \ e^{x \ln(1+z) \ - \ z} \ = \ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} C_n(x).$$

Справедливою є така лема:

Лема 1.3.2. *Для довільних $f, g \in \mathcal{D}_0$ виконується рівність*

$$\int_{\mathcal{D}'} < C_n^\sigma(\omega), f^{\otimes n} > < C_m^\sigma(\omega), g^{\otimes m} > \pi_\sigma(d\omega) = \qquad (1.3.35)$$

$$= \delta_{mn}(f^{\otimes n}, g^{\otimes n})_{L^2(X^{\otimes n}, \sigma^{\otimes n})}.$$

Доведення. Розглянемо для $f, g \in \mathcal{D}_0$ і $z_1, z_2 \in o(\mathbb{C})$ інтеграл

$$\int_{\mathcal{D}'} e_\pi(z_1 f, \omega) e_\pi(z_2 g, \omega) \pi_\sigma(d\omega) = \tag{1.3.36}$$

$$= e^{-z_1 < f >_\sigma - z_2 < g >_\sigma} \int_{\mathcal{D}'} e^{<\omega, \ln[(1+z_1 f)(1+z_2 g)]>} \pi_\sigma(d\omega) =$$

$$= e^{-z_1 < f >_\sigma - z_2 < g >_\sigma} e^{\int_X ((1+z_1 f)(1+z_2 g)-1)\sigma(dx)} =$$

$$= e^{z_1 z_2 (f,g)_{L^2(X,\sigma)}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z_1^n z_2^n}{n!} (f^{\otimes n}, g^{\otimes n})_{L^2(X^{\otimes n}, \sigma^{\otimes n})}.$$

Але, враховуючи (1.3.34), маємо

$$\int_{\mathcal{D}'} e_\pi(z_1 f, \omega) e_\pi(z_2 g, \omega) \pi_\sigma(d\omega) =$$

$$= \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{z_1}{\sqrt{n!}} \frac{z_2}{\sqrt{m!}} \int_{\mathcal{D}'} < C_n^\sigma(\omega), f^{\otimes n} >< C_m^\sigma(\omega), g^{\otimes m} > \pi_\sigma(d\omega). \tag{1.3.37}$$

Прирівнюючи в (1.3.36) і (1.3.37) коефіцієнти біля однакових степенів z_1 і z_2, отримаємо (1.3.35). ■

За допомогою мономів Шарле будується лінійний простір усіх вимірних поліномів:

$$\mathfrak{P}_n(\mathcal{D}') := \left\{ \mathcal{P} \mid \mathcal{P}(\omega) = \sum_{k=0}^{n} < C_k^\sigma(\omega), f_k >, \omega \in \mathcal{D}', f_k \in \mathcal{D}^{\otimes_s k} \right\}.$$

Унаслідок щільності поліномів $\mathfrak{P}_n(\mathcal{D}')$ в $L^2(\mathcal{D}', \pi_\sigma)$ для довільної функції $F \in L^2(\mathcal{D}', \pi_\sigma)$ існує послідовність $F_n \in L^2(X^{\otimes_s n}, \sigma^{\otimes_s n})$, $n \geq 0$ така, що

$$F(\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} < C_n^\sigma(\omega), F_n > \tag{1.3.38}$$

і

$$\|F\|^2_{L^2(\mathcal{D}', \pi_\sigma)} = \sum_{n=0}^{\infty} \|F_n\|^2_{L^2(X^{\otimes_s n}, \sigma^{\otimes_s n})}.$$

Це означає, що вектор

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} F_0 \\ F_1 \\ \vdots \\ F_n \\ \vdots \end{pmatrix} \in \mathcal{F}_B.$$

Розклад (1.3.38) задає унітарний ізоморфізм

$$I_\pi : \mathcal{F}_B \ni \hat{F} \mapsto F \in L^2(\mathcal{D}', \pi_\sigma), \ (I_\pi \hat{F})(\omega) \ = \ F(\omega).$$

1.4. Приклади деяких важливих функцій та інтегралів

У цьому підрозділі наведено приклади деяких важливих функцій на просторах конфігурацій, які будуть використовуватись далі.

1.4.1. Експонентціальне представлення деяких інтегралів

Тут встановлено формулу, на якій ґрунтується розклад Майєра для зв'язних кореляційних функцій(див. розд. 3).

Розглянемо функції на Γ_Λ, які мають таку структуру:

$$\Phi(\gamma) \ := \left\{ \begin{array}{l} 1, \ \gamma = \emptyset, \\ \sum\limits_{k=1}^{|\gamma|} \ \sum\limits_{\{\gamma_1,\dots,\gamma_k\}\subset\gamma}^{*} F(\gamma_1)F(\gamma_2)\cdots F(\gamma_k), \ |\gamma| \geq 1, \end{array} \right. \tag{1.4.39}$$

де сума, позначена зірочкою, є сумою за всіма можливими розбиттями множини γ на k непорожніх підмножин, які не перетинаються між собою, тобто

$$\bigcup_{j=1}^{k} \gamma_j = \gamma, \quad \gamma_i \bigcap \gamma_j \ = \ \emptyset \quad \text{для всіх } i \neq j, \ \ \gamma_i \neq \emptyset, \ \ i, j \in \{1, ..., k\}. \tag{1.4.40}$$

Справедлива така теорема:

Теорема 1.4.1. *Нехай функції* $F : \Gamma_\Lambda \mapsto \mathbb{R}$ *або* $F : \Gamma_0 \mapsto \mathbb{R}$ *є такими, що відповідні функції* F_n *задовольняють умови*

$$\int_\Lambda \dots \int_\Lambda F_n(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_n \ \ \leq \ \ c^n C_\Lambda n!, \tag{1.4.41}$$

де стала c *не залежить від* Λ. *Тоді*

$$\int_{\Gamma_\Lambda} \Phi(\gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma) \ = \ e^{\int_{\Gamma_\Lambda \setminus \{\emptyset\}} F(\gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma)} \tag{1.4.42}$$

для $0 < z < 1/2c$.

Доведення. Визначимо функцію

$$\Phi(\alpha; \gamma) \ := \left\{ \begin{array}{l} 1, \ \gamma = \emptyset, \\ \sum\limits_{k=1}^{|\gamma|} \frac{\alpha^k}{k!} \Phi_k(\gamma), \ \ |\gamma| \geq 1, \end{array} \right.$$

де $\alpha \in \mathbb{R}$,

$$\Phi_k(\gamma) \ = \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_k) \subset \gamma}^{*} F(\gamma_1) F(\gamma_2) \dots F(\gamma_k), \tag{1.4.43}$$

а відповідна функція F така сама, як у (1.4.41). На відміну від формули (1.4.39) у виразі(1.4.43) сумування виконується за всіма впорядкованими наборами розбиттів, які задовольняють (1.4.40). Зрозуміло, що $\Phi(\gamma) \ = \ \Phi(1; \gamma)$.

Нехай функція F в означенні (1.4.39) задовольняє умову (1.4.41). Тоді для довільного $\alpha \in \mathbb{R}$ функція $\Phi(\alpha;\cdot)$ є інтегровною на Γ_Λ за мірою $\lambda_{z\sigma}$ і, крім того, для $0 < z < c/2$ функція

$$I(\alpha) \;=\; \int_{\Gamma_\Lambda} \Phi(\alpha;\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma), \;\; \alpha \in \mathbb{R}, \tag{1.4.44}$$

є аналітичною і її можна подати рядом Маклорена за довільного $\alpha \in (-R, R)$, і $R > 0$.

Дійсно, легко обчислити, що

$$I^{(m)}(\alpha) = \frac{d^m I(\alpha)}{d\alpha^m} = \int_{\Gamma_\Lambda} 1\!\!1_{A_m}(\gamma) \sum_{k=m}^{|\gamma|} \frac{\alpha^{k-m}}{(k-m)!} \Phi_k(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \tag{1.4.45}$$

$$= \sum_{N=m}^{\infty} \frac{z^N}{N!} \sum_{k=m}^{N} \frac{\alpha^{k-m}}{(k-m)!} \int_{\Lambda^N} (dx)^N \times$$

$$\times \sum_{(\gamma_1,\ldots,\gamma_k)\subset\{x_1,\ldots,x_N\}}^{*} F(\gamma_1)F(\gamma_2)\ldots F(\gamma_k),$$

де $1\!\!1_{A_m}(\gamma)$ є індикатором множини

$$A_m \;:=\; \{\gamma \in \Gamma_\Lambda \mid |\gamma| \ge m\}.$$

Позначимо $|\gamma_j| = n_j,\; j = \overline{1,k}$. Тоді сума із зірочкою в (1.4.45) є сумою за всіма можливими розбиттями конфігурації $\{x_1, \ldots, x_N\}$ на k неперетинних підмножин з фіксованою кількістю елементів $n_1, \ldots, n_k$ і суми за всіма можливими значеннями $n_j \ge 1$ з умовою, що $n_1 + \cdots + n_k = N$. Це класична комбінаторна проблема: вона містить $N!/n_1! \cdots n_k!$ елементів, і

$$\sum_{\substack{\{n_1,\ldots,n_k\ge 1\} \\ n_1+\cdots+n_k=N}} 1 \;\le\; \sum_{\substack{\{n_1,\ldots,n_k\ge 0\} \\ n_1+\cdots+n_k=N}} 1 \;=\; C_{N+k-1}^{N} \;<\; 2^{N+k}.$$

Тоді, враховуючи (1.4.41), маємо

$$|I^{(m)}(\alpha)| \ \le \ \sum_{N=m}^{\infty}(2cz)^N \sum_{k=m}^{N}\frac{|\alpha|^{k-m}(2C_\Lambda)^k}{(k-m)!} \ < \qquad (1.4.46)$$

$$< \frac{(4czC_\Lambda R)^m}{(1-2cz)R^m}e^{2|\alpha|C_\Lambda} \ < \ M\frac{m!}{R^m},$$

з

$$M \ = \ M(R) \ = \ \frac{e^{2(1+2cz)RC_\Lambda}}{1-2cz}$$

і довільним $R > 0$.

З виразу (1.4.44) випливає, що $I(1)$ збігається з лівою частиною (1.4.42). Тому, щоб довести теорему, треба показати, що права частина (1.4.44) є експонентою при $\alpha = 1$. З рівності (1.4.45) знаходимо, що

$$I^{(m)}(0) \ = \ \int_{\Gamma_\Lambda} 1\!\!1_{A_m}(\gamma)\Phi_m(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \qquad (1.4.47)$$

Запишемо функцію $\Phi_m(\gamma)$ (див. (1.4.43)) у вигляді

$$\Phi_m(\gamma) \ = \ \sum_{\eta\subseteq\gamma} 1\!\!1_{A_1}(\eta)F(\eta)1\!\!1_{A_{m-1}}(\gamma\setminus\eta)\Phi_{m-1}(\gamma\setminus\eta). \qquad (1.4.48)$$

Зауважимо, що в (1.4.48) включено доданок, який відповідає порожній конфігурації $\eta = \emptyset$, але відповідний доданок дорівнює нулю, бо $1\!\!1_{A_1}(\emptyset) = 0$ за означенням.

Підставимо (1.4.48) у праву частину рівності (1.4.47) і скористаємося лемою 1.2.3 (тотожність (1.2.25)) з $G(\gamma) \ = \ 1\!\!1_{A_m}(\gamma)$ і $H(\eta,\gamma\setminus\eta) \ = \ 1\!\!1_{A_1}(\eta)F(\eta)1\!\!1_{A_{m-1}}(\gamma\setminus\eta)\Phi_{m-1}(\gamma\setminus\eta)$. Оскільки $1\!\!1_{A_m}(\gamma\cup\eta)1\!\!1_{A_1}(\eta)1\!\!1_{A_{m-1}}(\gamma) = 1\!\!1_{A_1}(\eta)1\!\!1_{A_{m-1}}(\gamma)$, отримуємо

$$I^{(m)}(0) = \int_{\Gamma_\Lambda} 1\!\!1_{A_1}(\eta)F(\eta)\lambda_{z\sigma}(d\eta)\int_{\Gamma_\Lambda} 1\!\!1_{A_{m-1}}(\gamma)\Phi_{m-1}(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma).$$

Враховуючи (1.4.47), для $I^{(m-1)}(0)$ одержуємо рекурентне співвідношення

$$I^{(m)}(0) \;=\; \left(\int_{\Gamma_\Lambda} 1\!\!1_{A_1}(\eta)F(\eta)\lambda_{z\sigma}(d\eta)\right) I^{(m-1)}(0). \qquad (1.4.49)$$

Нерівність (1.4.46) забезпечує аналітичність функції $I(\alpha)$ у крузі радіусом R (див., наприклад, [27], розд. 3). У нашому випадку треба вибрати $R > 1$. Це дає змогу записати функцію $I(\alpha)$ у вигляді ряду Маклорена:

$$I(\alpha) \;=\; \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^m}{m!} I^{(m)}(0), \;\; |\alpha| \;<\; R. \qquad (1.4.50)$$

Тоді з (1.4.49) і (1.4.50) при $\alpha = 1$ випливає доведення теореми 1.4.1. ■

1.4.2. Деякі узагальнені функції на просторах конфігурацій

У цьому підрозділі визначено деякі основні та узагальнені функції на просторах $(\Gamma_0, \mathcal{B}(\Gamma_0), \lambda_\sigma)$ і $(\Gamma_\Lambda, \mathcal{B}(\Gamma_\Lambda), \lambda_\sigma)$, які будуть використані у розд. 3, 4.

Для глибшого ознайомлення з теорією узагальнених функцій на нескінченновимірних просторах потрібно розглянути праці [145, 149] і посилання, наведені там.

Простір основних функцій $\mathcal{D}(\Gamma_0)$ визначимо наступним чином. Для довільного $G : \Gamma_0 \mapsto \mathbb{R}$ такого, що $G \in \mathcal{D}(\Gamma_0)$, і довільного $\gamma \in \Gamma_0^{(n)}$ $G(\gamma) \;=\; G_n(x_1, ..., x_n) \in C_0(\mathbb{R}^{dn})$.

Для довільного $j \in C_0(\mathbb{R}^d)$ і $|j| \leq 1$ функція $e_\lambda(j, \cdot) \in \mathcal{D}(\Gamma_0)$. Тоді для довільного $\eta \in \Gamma_0$ визначимо узагальнену функцію δ_η так, що

$$(\delta_\eta, G) \;:=\; \int_{\Gamma_0} \delta_\eta(\gamma)G(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) \;=\; z^{|\eta|}G(\eta). \qquad (1.4.51)$$

Це означає, що для множин $\eta = \{x_1, ..., x_m\}$ і $\gamma = \{y_1, ..., y_m\}$

$$\delta_\eta(\gamma) \;=\begin{cases} 0 & \text{для} \quad |\gamma|\neq|\eta|, \\ 1 & \text{для} \quad \gamma=\eta=\emptyset, \\ |\gamma|!\prod_{k=1}^m \delta(x_k-y_k) & \text{для} \quad \eta\cap\gamma=\emptyset. \end{cases}$$

Добуток в останньому рядку є прямим добутком δ-функцій. Тому у випадку $\eta_1 \cap \eta_2 \;=\; \emptyset$

$$\delta_{\eta_1}(\gamma)\delta_{\eta_2}(\gamma) \;:=\; 0$$

і

$$\sum_{\xi\subset\gamma\cup\eta_1} \delta_{\eta_2}(\xi) \;:=\; \sum_{\xi\subset\gamma}\delta_{\eta_2}(\xi).$$

Тоді для $\eta_i \cap \eta_j \;=\; \emptyset$, якщо $i \neq j$, можна визначити добуток

$$\prod_{i=1}^m \Delta_{(\alpha_i\eta_i)}(\gamma) \;:=\; \prod_{i=1}^m \left(1 \;+\; \alpha_i\sum_{\xi_i\subset\gamma}\delta_{\eta_i}(\xi_i)\right),\; \alpha_i\in\mathbb{C}. \qquad (1.4.52)$$

Будемо також користуватись рівністю (1.2.25) у сенсі узагальнених функцій:

$$\int_{\Gamma_0} G(\gamma)\sum_{\xi\subset\gamma}\delta_\eta(\xi)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \int_{\Gamma_0}\int_{\Gamma_0} G(\xi\cup\gamma)\delta_\eta(\xi)\lambda_{z\sigma}(d\xi)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) =$$

$$= z^{|\eta|}\int_{\Gamma_0} G(\eta\cup\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma), \qquad (1.4.53)$$

де застосовано рівняння (1.4.51). Формули (1.4.52) і (1.4.53) ми використаємо у розд. 4 для визначення твірного функціонала для ЧЗКФ (PTCF).

1.4.3. Міра Гаусса на функціональних просторах

Побудова і вивчення міри Гаусса на функціональних просторах (у тому числі і просторах узагальнених функцій) є досить нетривіальним розділом математичного аналізу (див., наприклад, [1]). Важливим прикладом застосування такого аналізу є застосування гауссових узагальнених полів у побудові евклідової теорії поля (див., наприклад, [37]). Іншим прикладом, який буде реалізований у цій книзі, є представлення щільності міри Гіббса в обмеженому об'ємі гауссовим інтегралом(так зване Sine-Gordon перетворення).

Спочатку для простоти викладення розглянемо випадок, коли система тотожних точкових частинок взаємодіє за допомогою парного потенціалу $\phi(x, y)$, який задовольняє такі умови:
1) умова позитивної визначеності

$$(f, f)_{E_\phi} := \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \overline{f(x)} \phi(x, y) f(y) dx dy \geq 0, \tag{1.4.54}$$

де E_ϕ – деякий ядерний простір зі скалярним добутком (1.4.54);
2) умова неперервності

$$\phi(x, x) < +\infty. \tag{1.4.55}$$

Тоді функціонал $\exp\left[-\frac{1}{2}(f, f)_{E_\phi}\right]$ буде характеристичним функціоналом, і за теоремою Мінлоса [28] існує така гауссова міра $d\mu(\varphi)$ на $(E_\phi^*, \Sigma_{E_\phi})$, що

$$\exp\left[-\frac{1}{2}(f, f)_{E_\phi}\right] = \int_{E_\phi^*} e^{i\varphi(f)} d\mu(\varphi), \tag{1.4.56}$$

де $\varphi(f) = \int \varphi(x) f(x) dx$ – узагальнене випадкове поле, коваріацією якого є потенціал ϕ:

$$\phi(x, y) = \int_{E^*} \varphi(x) \varphi(y) d\mu(\varphi). \tag{1.4.57}$$

Умова (1.4.55) дає можливість вибрати E^* як простір неперервних функцій на $\mathbb{R}^d$ (див. [105]). Тоді існує поле $\varphi(\delta(x - \cdot)$ і, записуючи формулу (1.4.56) для $f(x) = \beta^{1/2} \sum_{i=1}^n \delta(x - x_i)$, отримаємо представлення для гіббсової експоненти

$$e^{-\beta U(\gamma)} = e^{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \phi(x_i, x_i)} \int_{E^*} e^{i\beta^{1/2} \sum_{j=1}^n \varphi(x_j)} d\mu(\varphi), \tag{1.4.58}$$

де $\gamma = \{x_1, \ldots, x_n\}$.

Розділ 2

Опис взаємодій частинок статистичних систем

Термодинамічні характеристики систем залежать від характеру взаємодії, яка визначається поведінкою потенціалів взаємодії. У випадку нескінченної системи потенціали залежать тільки від відстані між частинками та їх сортами (їх додатковими фізичними характеристиками), тобто вони є трансляційно-інваріантними функціями координат частинок системи. У найбільш вживаному випадку, коли враховують тільки парні взаємодії, взаємодія між i-ю та j-ю частинками

$$V_2^{ij}(x, y) := \phi_{ij}(|x - y|),$$

або просто $\phi(|x - y|)$ у випадку системи тотожних частинок. У цьому випадку енергія N частинок конфігурації $\gamma \in \Gamma_0$ ($|\gamma| = N$)

$$U(\gamma) = U_N(x_1, \dots, x_N) := \sum_{1 \le i < j \le N} \phi(|x_i - x_j|).$$

У загальному випадку можна припустити[1], що існують взаємодії, які притаманні лише трьом, чотирьом і т.д. k частинкам з довільним $k \in \{2, 3, \dots\}$ і описуються потенціалами $V_k(x_1, \dots, x_k)$, ($x_i \in \mathbb{R}^d$). Потенціальна енергія частинок конфігурації $\gamma \in \Gamma_0$

$$U(\gamma) = \sum_{\substack{\eta \subseteq \gamma \\ |\eta| \ge 2}} V(\eta) = \sum_{k=2}^{|\gamma|} \sum_{\{x_1, \dots, x_k\} \subseteq \gamma} V_k(x_1, \dots, x_k).$$

---

[1] Таке припущення є не тільки теоретичною гіпотезою, а й базується на деяких спостереженнях (див., наприклад, [223]).

Зауважимо також, що інколи розглядаються системи, для яких $V_1(x_1) \neq 0$. Це означає, що вся система знаходиться в деякому зовнішньому полі, яке діє на кожну частинку системи.

Визначимо енергію взаємодії між конфігураціями γ і γ':

$$W(\gamma;\gamma') := \sum_{\substack{x\in\gamma\\ y\in\gamma'}} \phi(|x-y|), \tag{2.0.1}$$

а також повну енергію конфігурації γ, яка взаємодіє з деякою конфігурацією γ':

$$U(\gamma \mid \gamma') = U(\gamma) + W(\gamma;\gamma'). \tag{2.0.2}$$

Вигляд потенціалу взаємодії визначає модель, у рамках якої описують термодинамічні характеристики системи. Найважливішою характеристикою в такому описі є енергія $U(\gamma)$, яка повинна задовольняти певні умови залежно від проблеми, яку слід описати.

2.1. Умови на потенціальну енергію взаємодії частинок

Стійкість взаємодії (Stability) **(S)** є необхідною умовою для опису термодинамічних характеристик нескінченних статистичних систем. Цю умову записують за допомогою нескінченної системи нерівностей на потенціальну енергію взаємодії між довільними скінченними підсистемами, що налічують N частинок, які розташовані в точках $x_1, ..., x_N$ простору $\mathbb{R}^d$.

(S) *Стійкість. Існує стала* $B \geq 0$ *така, що*

$$U(x_1, ..., x_N) \geq -B\,N \tag{2.1.3}$$

для довільних $N \geq 2$ і $\{x_1, ..., x_N\}$.

Умова (2.1.3) і умова регулярності (2.2.11), про яку піде мова пізніше, є достатніми для побудови міри Гіббса нескінченної системи частинок у області регулярних значень параметрів $\beta = \frac{1}{k_B T}$ і z, де T — температура системи, а z — активність, яка безпосередньо пов'язана з густиною частинок (див., наприклад, [43, розд. 4]).

Щоб вирішити проблему побудови міри Гіббса для нескінченних систем за всіх додатних значень параметрів β і z, необхідно ввести більш обмежувальну умову на характер взаємодії між частинками. Такою умовою є умова *суперстійкості* (superstability) **(SS)** (див. [115, 213]). Для визначення суперстійкості скористаємось розбиттям $\overline{\Delta_a}$ (див. (1.1.13)) простору $\mathbb{R}^d$ на гіперкубики Δ, довжина ребер яких дорівнює a.

(SS) *Суперстійкість. Взаємодію називають суперстійкою, якщо існують сталі* $A > 0$, $B \geq 0$ *та розбиття* $\overline{\Delta_a}$ *такі, що для довільної конфігурації* $\gamma = \{x_1, \ldots, x_N\} \in \Gamma_0$ *виконується нерівність*

$$U(\gamma) \geq \sum_{\Delta \in \overline{\Delta_a}} \left[A|\gamma_\Delta|^2 - B|\gamma_\Delta| \right]. \tag{2.1.4}$$

Зауваження 2.1. *Дещо інше визначення запропоновано Жинібром (див. [115]):*
Взаємодія є суперстійкою, якщо існують дві дійсні сталі $B \geq 0$ *і* $A_1 \geq 0$ *такі, що для довільної конфігурації* $\gamma \in \Gamma_0$ *виконується така нерівність:*

$$U(\gamma) \geq A_1 \frac{|\gamma|^2}{\xi^d} - B|\gamma|, \tag{2.1.5}$$

де $\xi = \max_{\{x,y\} \subset \gamma} |x - y|$. *Нехай обмежений контейнер* Λ *об'ємом* $V = \sigma(\Lambda)$ *такий, що* $\gamma \subset \Lambda$. *Тоді умову* (2.1.5) *можна записати у вигляді*

$$U(\gamma) \geq A_\Lambda \frac{|\gamma|^2}{V} - B|\gamma|, \tag{2.1.6}$$

де стала A_Λ *не залежить від об'єму* V *заданої форми, але може залежати від цієї форми. Легко побачити, що якщо розглядати* Λ *як об'єднання кубиків* Δ, *визначених у* (1.1.13) *і він включає в себе хоча б одну точку конфігурації* γ, *то, використовуючи* *нерівність Коші–Шварца, можна записати таку нерівність:*

$$|\gamma|^2 = \left(\sum_{\Delta \in \overline{\Delta_a}} |\gamma_\Delta| \right)^2 \leq \sum_{\Delta \in \overline{\Delta_a} \cap \gamma} 1 \cdot \sum_{\Delta \in \overline{\Delta_a}} |\gamma_\Delta|^2 = \frac{V}{a^d} \sum_{\Delta \in \overline{\Delta_a}} |\gamma_\Delta|^2.$$

Таким чином, умова (2.1.6) *випливає прямо з* (2.1.4), *де* $A_\Lambda = Aa^d$.

Інформацію про деякий клас суперстійких потенціалів наведено у праці [167].

Існує більш сильна умова на взаємодію, ніж (2.1.4).

(SSS) *Посилена суперстійкість (Strong superstability). Взаємодію називають посилено суперстійкою, якщо існують сталі* $A > 0$, $B \geq 0$, $p \geq 2$ *та розбиття* $\overline{\Delta_{a_0}}$ *такі, що для довільної конфігурації* $\gamma = \{x_1, \ldots, x_N\} \in \Gamma_0$ *виконується така нерівність:*

$$U(\gamma) \geq \sum_{\Delta \in \overline{\Delta_{a_0}}} \left[A|\gamma_\Delta|^p - B|\gamma_\Delta| \right]. \tag{2.1.7}$$

Парк (див. [184]) використав умову (2.1.7) з $p > 2$ для доведення обмеженості експоненти від оператора кількості частинок квантових систем Бозе-газу, що взаємодіє.

У зв'язку з умовами (2.1.3), (2.1.4), (2.1.7) виникає проблема опису поведінки потенціалів взаємодії, які забезпечать стійкість, суперстійкість і посилену суперстійкість відповідних статистичних систем.

2.2. Умови на потенціали взаємодії

Покладаючи в (2.1.3) $N = 2$, можна стверджувати, що потенціал ϕ має бути обмеженим знизу:

$$\phi(|x|) \geq -2B.$$

Інформацію про деякі класи стійких сингулярних потенціалів наведено у працях [98, 226].

Ще однією важливою умовою є *умова інтегровності потенціалів на безмежності*, яка фізично пов'язана з достатньо швидким зменшенням взаємодії.

(T) *Помірність. Для довільного $a > 0$*

$$\sup_{x_k \in \mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}_a^{d(k-1)}} |V_k(x_1, \ldots, x_k)|\, dx_1 \cdots dx_{k-1} =: v_k^{(a)} < +\infty, \quad (2.2.8)$$

де

$$\mathbb{R}_a^{d(k-1)} := \Big\{ (x_1, \ldots, x_k) \in \mathbb{R}^{dk} \Big| |x_i - x_j| \geq a, \text{ для всіх, } i \neq j \Big\} \quad (2.2.9)$$

і

$$\sum_{k \geq 2}^{\infty} v_k^{(a)} =: C_V^{(a)} < +\infty,$$

а для парного потенціалу

$$\int_{|x| \geq a} \phi(|x|)\, dx < +\infty. \quad (2.2.10)$$

Умову (2.2.10) формулюють також як умову *регулярності* (Regularity) **(R)** взаємодії:

$$\int_{\mathbb{R}^d} |e^{-\beta\phi(|x|)} - 1|\, dx = C(\beta) < \infty. \quad (2.2.11)$$

Крім того, Добрушин (див. [12]) запропонував *необхідну* умову стійкості взаємодії:

$$\int_{\mathbb{R}^d} \phi(|x|)\, dx \geq 0,$$

тобто додатна частина потенціалу повинна бути достатньо великою. Міжмолекулярні потенціали здебільшого розглядають у вигляді, який наведено на Рис. 2.1. Вони відносяться до класу потенціалів Ленарда–Джонсона (див. [210], розд. 3).

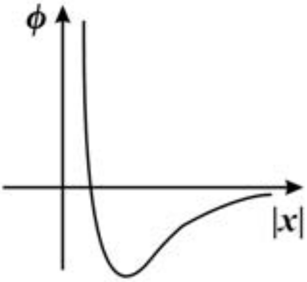

Рис. 2.1

У праці [210] Рюель запропонував умови, що забезпечують оцінки (2.1.4) (2.1.6) для систем, розташованих у кубі Λ об'ємом V. Він розглядав потенціал ϕ у такому вигляді:

$$\phi(|x|) = \phi_1(|x|) + \phi_2(|x|),$$

де ϕ_1 — вимірна за Лебегом функція зі значеннями в інтервалі $[0;\infty]$, яка задовольняє умову (2.2.8), а ϕ_2 — неперервна додатно визначена, тобто її Фур'є-перетворення є таким:

$$\tilde{\phi}_2(0) = \int_{\mathbb{R}^d} \phi_2(x)\,dx > 0. \tag{2.2.12}$$

Наведені вище умови та їх наслідок — нерівність (2.1.6) використано у праці [210] для доведення існування термодинамічної границі ($\Lambda \nearrow \mathbb{R}^d$) для вільної енергії (канонічний ансамбль) і тиску (великий канонічний ансамбль). Пізніше Фішер помітив (див. зауваження в [210]), що ці результати можна довести, використовуючи менш обмежувальні умови на потенціал ϕ:

$$\phi(|x|) \geq \frac{c}{|x|^{d+\varepsilon}} \text{ для } |x| < a_1, \tag{2.2.13}$$

$$\phi(|x|) \geq -w \text{ для } a_1 \leq |x| \leq a_2, \tag{2.2.14}$$

$$\phi(|x|) \geq -\frac{c'}{|x|^{d+\varepsilon'}} \text{ для } |x| > a_2, \tag{2.2.15}$$

де a_1, a_2, c, c', w, ε, ε' — деякі додатні сталі (див. також статтю [98] для системи частинок різних видів та “заряджених” систем). На думку авторів, умови (2.2.13) – (2.2.15) забезпечують стабільність системи, іншими словами виконується умова (2.1.3). Фактично ці умови гарантують також суперстійкість взаємодії. Проте таке поняття ще не було введено. Самостійно і в той самий час (1963 р.) Повзнер знайшов умови щодо потенціалу, який забезпечує існування оцінки (2.1.3) (і навіть оцінки (2.1.4)). Його аргументи наведено в праці [226], де їх було уточнено для аналізу стійкості класичних статистичних систем зі взаємодією, яка визначається високо сингулярними потенціалами. Пізніше Добрушин запропонував загальну умову на потенціал ϕ, який на відміну від (2.2.13) може також бути інтегровним потенціалом (див. [12], формула (2.2.13)). Модифікуючи умови Повзнера, він довів, що стійкість та існування граничних термодинамічних потенціалів випливає з цих умов. Для завершення цього короткого огляду згадаємо про критерій стійкості, який запропонував Басуєв [56]. Зауважимо, що він досить близький до умови Повзнера. Коротко його можна сформулювати наступним чином: починаючи з деякого моменту подальше збільшення позитивної частини потенціалу не веде до зменшення питомої енергії зв'язку. З огляду на використання умов (2.1.4), (2.1.6) важливо отримати оптимальні значення сталих A, B. У цьому разі важливою є праця [167], в якій для неперервних $L^1(\mathbb{R}^d)$-потенціалів, що задовольняють умову (2.2.12), доведено нерівність (2.1.6) з

$$A = \frac{1}{2}\left(\widetilde{\phi}(0) - \varepsilon\right), \; B = \frac{1}{2}\phi(0), \text{ і } V = V(\varepsilon) \tag{2.2.16}$$

для довільних $\varepsilon > 0$. Сталі A, B є непокращуваними.

Умови, розглянуті в цьому розділі, стосуються взаємодії точкових частинок. Для багатьох практичних задач інколи зручно розглядати частинки як абсолютно тверді кульки малого радіуса. Про потенціали з твердою серцевиною та катастрофічні потенціали йдеться у [43, розд. 4].

2.3. Умови, що випливають з теорії потенціалу

У цьому підрозділі, спираючись на працю [207], розглядаються нові достатні умови на парний потенціал взаємодії, що забезпечують стійкий, суперстійкий або посилено суперстійкий стан системи. Важливо зазначити, що зауваження про можливу поведінку сингулярних потенціалів, що забезпечує умову (2.1.7) для $p > 2$, спочатку запропонував Рюель (див. [43, розд. 3], формула (2.28)). На перший погляд це просто інтуїтивне припущення, яке можна розглядати на фізичному рівні строгості, якщо прийняти таку гіпотезу: конфігурація, яка мінімізує енергію N частинок, які знаходяться в кубі об'ємом V, є такою, що частинки в ній розподілені рівномірно. Це означає, що всі частинки розташовані у вузлах ґратки на відстані $\sim \left(\frac{V}{N}\right)^{\frac{1}{d}}$. Така оцінка енергії була також розрахована Добрушиним (див. [80], формули (4.1), (3.2)). Тому результати цього розділу можна розглядати як строге доведення гіпотези Рюеля [43]. Використано строгі результати праць [128, 129], [64, 153]) та деякі факти класичної теорії потенціалу (див., наприклад, [157]). Крім того, нижче встановлено точне значення сталих A і B у нерівностях (2.1.4), (2.1.7).

2.3.1. Деякі моменти з теорії потенціалу

Відповідно до праці [157] введемо кілька нових позначень. Нехай K — деякий компакт у $\mathbb{R}^d$. Для будь-якої конфігурації $\gamma_K(|\gamma_K| = N)$ з множини K визначимо енергію Рісса:

$$E_s^{(N)}(\gamma_K) := \sum_{\{x,y\}\subset\gamma_K} \frac{1}{|x-y|^s},\ s > 0. \tag{2.3.17}$$

У випадку $s < d$ розглянемо *інтеграл енергії*

$$I_s(\mu; K) := \frac{1}{2}\int\int\limits_{K\times K} \frac{1}{|x-y|^s}\,\mu(dx)\mu(dy), \tag{2.3.18}$$

де μ — деяка ймовірнісна міра, носієм якої є K ($\mu(K) = 1$). Одна з найважливіших проблем сучасної теорії потенціалу — це знайти міру μ^*, яка мінімізує інтеграл (2.3.18).

Відомо (див. [157, розд. 2]), що якщо конфігурація $\gamma_K^{min} = \{\xi_1, \dots, \xi_N\}$ мінімізує енергію (2.3.17), то послідовність мір

$$\mu_N(\cdot) := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta_{\xi_i}(\cdot),$$

де δ_{ξ_i} — точкова міра Дірака, яка збігається в слабкій топології до міри μ^* (мінімізуюча міра інтеграла (2.3.18)), а послідовність

$$e_{s,K}^{(N)} = \frac{E_s^{(N)}(\gamma_K^{min})}{N^2}$$

монотонно зростає і

$$\lim_{N\to\infty} e_{s,K}^{(N)} = I_s(\mu^*) < \infty. \tag{2.3.19}$$

Існують дві різні поведінки мінімізуючих конфігурацій у границі $N \to \infty$:
1) якщо $s \le d-2$, то $\operatorname{supp}\mu_N \subset \partial K$, $\operatorname{supp}\mu^* \subset \partial K$, де ∂K є межею компакта K;
2) якщо $d-2 < s < d$, то $\operatorname{supp}\mu^* \subset K$.

Нехай $K = \mathcal{B}^d(0;r)$ — d-вимірна куля радіуса r, а $\partial K = S^d(0;r)$ — поверхня відповідної сфери. Тоді у випадку 1 для $s \le d-2$ мінімізуюча міра розподілена на поверхні кулі $\mathcal{B}^d(0;r)$ і

$$\mu^*(dx;\mathcal{B}^d(0;r)) = \frac{m(dx)|_{S^d(0;r)}}{m(S^d(0;r))},\ m(S^d(0;r)) = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}r^{d-1};$$

у випадку 2 для $d-2 < s < d$

$$\mu^*(dx;\mathcal{B}^d(0;r) = \frac{A(d;s)}{(r^2-x^2)^{\frac{d-s}{2}}}m(dx),\ A(d;s) = \frac{\Gamma\left(1+\frac{s}{2}\right)}{\pi^{\frac{d}{2}}\Gamma\left(1-\frac{d-s}{2}\right)},$$

де $m(\cdot)$ — міра Лебега в $\mathbb{R}^d$. Відповідні значення інтеграла енергії (2.3.18) є такими:
1) для $s \le d-2$

$$I_s(\mu^*; \mathcal{B}^d(0;r)) = \frac{1}{r^s} \frac{2^{d-s-3}\,\Gamma\left(\frac{d-s-1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}{\sqrt{\pi}\,\Gamma\left(d-1-\frac{s}{2}\right)}; \qquad (2.3.20)$$

2) для $d-2 < s < d$

$$I_s(\mu^*; \mathcal{B}^d(0;r)) = \frac{1}{r^s} \frac{\Gamma\left(1+\frac{s}{2}\right)\ \Gamma\left(\frac{d-s}{2}\right)}{2\,\Gamma\left(1+\frac{d}{2}\right)}. \qquad (2.3.21)$$

Детальніше обчислення наведено у праці [157].

Випадки $s = d$ і $s > d$ істотно відрізняються від випадку $s < d$, який розглядається в класичній теорії потенціалу. Побудова мінімізуючої міри та оцінки мінімальної енергії конфігурації для $s \ge d$ запропоновані в [129], [128], [153] (див. також [64]). Сформулюємо найважливіші деталі:
1) інтеграл енергії $I_s(\mu) = +\infty$ для всіх імовірнісних мір на компакті $K \subset \mathbb{R}^d$;
2) для довільного компакта $K \subset \mathbb{R}^d$ виконується така границя:

$$\mu_N(\cdot) \to \frac{m(\cdot)|_K}{m(K)},$$

або, іншими словами, частинки асимптотично рівномірно розподілені;
3) для $s = d$, де K є d-вимірним кубиком із ребром a, існує границя:

$$C_d = \lim_{N\to\infty} \frac{E_s^{(N)}\left(\gamma_K^{min}\right)}{N^2 \ln N} = \frac{1}{a^s} \frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{d \cdot \Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}; \qquad (2.3.22)$$

4) якщо $s > d$, тоді

$$\lim_{N\to\infty} \frac{E_s^{(N)}\left(\gamma_K^{min}\right)}{N^{1+\frac{s}{d}}} = \frac{1}{a^s} \frac{C_{s,d}}{2}, \qquad (2.3.23)$$

а відповідні послідовності в (2.3.22) і (2.3.23) монотонно зростають. У випадку $d = 1$ і $K = [0,1]$ $C_{s,1} = 2\xi(s)$, де $\xi(s)$ є

класичною дзета-функцією Рімана;
5) якщо $s > d$, виконується така нерівність:

$$E_s^{(N)}(\gamma_K) \geq \frac{1}{a^s}\frac{1}{2^{2s+1}}\left(\frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{d \cdot \Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}\right)^{\frac{s}{d}} N^{1+\frac{s}{d}}. \tag{2.3.24}$$

2.3.2. Основні результати розділу

Сформулюємо умови на потенціал взаємодії, які дають змогу розглядати стійкі, суперстійкі та посилено суперстійкі системи.

(A): Умови на потенціал взаємодії. *Розглянемо загальний тип потенціалів ϕ, які є неперервними на $\mathbb{R}_+ \setminus \{0\}$ і для яких існують сталі $r_0 > 0$, $R > r_0$, $\phi_0 > 0$, $\phi_1 > 0$ та $\varepsilon_0 > 0$ такі, що*:

$$1)\, \phi(|x|) \equiv \phi^-(|x|) \geq -\frac{\phi_1}{|x|^{d+\varepsilon_0}} \text{ для } |x| \geq R,; \tag{2.3.25}$$

$$2)\, \phi(|x|) \equiv \phi^+(|x|) \geq \frac{\phi_0}{|x|^s},\ s \geq 0 \text{ для } |x| \leq r_0. \tag{2.3.26}$$

де

$$\phi^+(|x|) := \max\{0, \phi(|x|)\},\ \phi^-(|x|) := \min\{0, \phi(|x|)\}. \tag{2.3.27}$$

На відміну від [129], [157], ми розглядаємо випадок $s = 0$, який можливо є тривіальним з точки зору теорії потенціалів, але є важливим у нашому випадку (див. зауваження 2.3).

Сформулюємо таку теорему:

Теорема 2.3.1. *Нехай потенціал задовольняє умови* **(A)**. *Тоді для $0 \leq s < d$, довільної конфігурації $\gamma \in \Gamma_0$ і достатньо малого $\varepsilon > 0$ існує стала $B = B(\varepsilon)$ така, що виконується нерівність*

$$U(\gamma) \geq \sum_{\substack{\Delta \in \overline{\Delta_a}, \\ |\gamma_\Delta| \geq 2}} \left(I_s(\mu^*; \Delta)\phi_0 - \frac{\varphi_0}{2} - \varepsilon\phi_0\right)|\gamma_\Delta|^2 - B|\gamma|, \tag{2.3.28}$$

де

$$\varphi_0 = \varphi_0(a) := \sup_{x\in\mathbb{R}^d} \sum_{\Delta\in\overline{\Delta_a}} \sup_{y\in\Delta} \left|\phi^-(|x-y|)\right|. \qquad (2.3.29)$$

Зауваження 2.2. *З умови* (2.3.25) *випливає, що для* $\varepsilon < \varepsilon_0$

$$\varphi_\varepsilon = \varphi_\varepsilon(a) \ := \ \sup_{x\in\mathbb{R}^3} \sum_{\Delta\in\overline{\Delta_a}} \sup_{y\in\Delta} \phi^-(|x-y|)|x-y|^\varepsilon \ < \infty. \quad (2.3.30)$$

Зауваження 2.3. *У випадку* $0 \le s < d$ *потенціал* ϕ *забезпечує виконання умови* **(SS)** *(див.* (2.1.4)*), якщо виконується нерівність*

$$\left(I_s(\mu^*;\Delta) - \varepsilon\right)\phi_0 > \frac{\varphi_0}{2}. \qquad (2.3.31)$$

Зауваження 2.4. *Умову* (2.3.31) *можна записати в простішій формі, якщо врахувати, що мінімальна енергія Рісса конфігурації з фіксованою кількістю частинок* $|\gamma_\Delta|$ *у кубику* $\Delta \in \overline{\Delta_a}$ *завжди більша, ніж мінімальна енергія Рісса тієї самої кількості частинок у сфері радіусом* $r = \frac{\sqrt{d}a}{2}$*. Отже, можна підставити формули* (2.3.20), (2.3.21) *з* $r = \frac{\sqrt{d}a}{2}$ *для* $I_s(\mu^*;\Delta)$ *у ліву частину* (2.3.31) *(відповідно для випадку* $s \le d-2$, $d-2 < s < d$*). Праву частину* (2.3.31) *можна замінити на* $\frac{C}{a^d}$*, де стала* $C \approx \int_{\mathbb{R}^d} |\phi^-(|x|)|\, dx$ *для достатньо малого* a*. Тоді для заданої конфігурації в* d*-вимірному просторі й потенціалу, що задовольняє умову* (2.3.26)*, система є надстійкою, якщо існує таке* a *(іншими словами, таке розбиття* $\overline{\Delta_a}$ *простору* $\mathbb{R}^d$*), що умова* (2.3.31) *виконується. Множина потенціалів, які задовольняють умову* **(SS)***, не є порожньою, бо можна підібрати достатньо велике* φ_0*, щоб виконувалось* (2.3.31) *для довільного фіксованого* $a > 0$*. Для випадку* $s = 0$ $I_0(\mu^*;\Delta) = 1/2$.

Теорема 2.3.2. *Нехай потенціал взаємодії* ϕ *задовольняє умови* **(A)***. Тоді для* $s = d$*, довільного* $\gamma \in \Gamma_0$ *і достатньо малого* $\varepsilon > 0$ *існує стала* $B = B(\varepsilon)$ *така, що виконується нерівність*

$$U(\gamma) \ge \sum_{\substack{\Delta\in\overline{\Delta_a},\\ |\gamma_\Delta|\ge 2}} \left((C_d - \varepsilon)\,\phi_0 \ln|\gamma_\Delta| - \frac{\varphi_0}{2} \right) |\gamma_\Delta|^2 - B|\gamma|, \qquad (2.3.32)$$

де (див. [129])

$$C_d = \frac{1}{a^d} \frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{d\,\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}.$$

Теорема 2.3.3. *Нехай потенціал взаємодії ϕ задовольняє умови* **(A)**. *Тоді для $s > d$ і довільного $\gamma \in \Gamma_0$ існує стала $B = B(\varepsilon)$ така, що виконується нерівність*

$$U(\gamma) \geq \sum_{\substack{\Delta \in \overline{\Delta_a}, \\ |\gamma_\Delta| \geq 2}} \left(C_{s,d}\,\varphi_0\,|\gamma_\Delta|^{1+\frac{s}{d}} - \frac{v_0}{2}|\gamma_\Delta|^2 \right) - B|\gamma|, \qquad (2.3.33)$$

де (див. [129])

$$C_{s,d} = \frac{1}{a^s} \frac{1}{2^{2s+1}} \left(\frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{d\,\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} \right)^{\frac{s}{d}}. \qquad (2.3.34)$$

Зауваження 2.5. *При $s = d$ система частинок є суперстійкою* **(SS)** *для всіх розбиттів $\overline{\Delta_a}$, оскільки за довільних $\varepsilon > 0$ і φ_0 знайдеться $N_0 \geq 2$ і $B = B(N_0)$ такі, що для $N > N_0$*

$$(C_d - \varepsilon)\, \phi_0 \ln N > \frac{\varphi_0}{2}.$$

У випадку $s > d$ система частинок є посилено суперстійкою **(SSS)**, *оскільки завжди можна вибрати достатньо мале $a > 0$ і деяке $A = A(a)$ такі, що*

$$C_{s,d}\,\phi_0|\gamma_\Delta|^{1+\frac{s}{d}} - \frac{\varphi_0}{2}|\gamma_\Delta|^2 \geq A|\gamma_\Delta|^{1+\frac{s}{d}}$$

для $|\gamma_\Delta| \geq 2$.

2.3.3. Доведення теореми 2.3.1

Для довільного $\gamma \in \Gamma_0$ і довільного розбиття $\overline{\Delta_a}$ побудуємо розклад

$$U(\gamma) = \sum_{\{x,y\}\subset\gamma} \phi(|x-y|) =$$
$$= \sum_{\Delta\in\overline{\Delta}_a:|\gamma_\Delta|\geq 2} U(\gamma_\Delta) + \sum_{\{\Delta,\Delta'\}\subset\overline{\Delta}_a} \sum_{\substack{x\in\gamma_\Delta \\ y\in\gamma_{\Delta'}}} \phi(|x-y|). \tag{2.3.35}$$

Враховуючи умови **(A)** на потенціал взаємодії, визначення (2.3.17) і нерівність $|\gamma_\Delta|\,|\gamma_{\Delta'}| \leq \frac{1}{2}\left(|\gamma_\Delta|^2 + |\gamma_{\Delta'}|^2\right)$, з розкладу (2.3.35) отримуємо таку оцінку:

$$U(\gamma) \geq \sum_{\Delta\in\overline{\Delta_a}:|\gamma_\Delta|\geq 2} \left[E_s^{(|\gamma_\Delta|)}(\gamma_\Delta^{\min})\phi_0\right] - \frac{1}{2}M,$$

де

$$M = \sum_{\{\Delta,\Delta'\}\subset\overline{\Delta}_a} \left(|\gamma_\Delta|^2 + |\gamma_{\Delta'}|^2\right) \sup_{x\in\Delta}\sup_{y\in\Delta'} \left|\phi^-(|x-y|)\right|. \tag{2.3.36}$$

Переупорядковуючи доданки в сумі (2.3.36) і враховуючи означення (2.3.29), одержуємо нерівність

$$M = \sum_{\Delta\subset\overline{\Delta}_a} |\gamma_\Delta|^2 \sup_{x\in\Delta} \sum_{\Delta'\subset\overline{\Delta}_a:\Delta'\neq\Delta} \sup_{y\in\Delta'} \left|\phi^-(|x-y|)\right| \leq \sum_{\Delta\subset\overline{\Delta}_a} |\gamma_\Delta|^2 \varphi_0.$$

Виділивши в останній сумі всі доданки з $|\gamma_\Delta| = 1$, маємо оцінку

$$M \leq \sum_{\Delta\in\overline{\Delta_a}:|\gamma_\Delta|\geq 2} \varphi_0|\gamma_\Delta|^2 + \varphi_0|\gamma|.$$

Остаточна оцінка енергії взаємодії конфігурації γ є такою:

$$U(\gamma) \geq \sum_{\Delta\in\overline{\Delta_a}:|\gamma_\Delta|\geq 2} \left[E_s^{(|\gamma_\Delta|)}(\gamma_\Delta^{\min})\phi_0 - \frac{\varphi_0}{2}|\gamma_\Delta|^2\right] - \frac{\varphi_0}{2}|\gamma|. \tag{2.3.37}$$

Для заданого фіксованого $\varepsilon > 0$ визначимо N_0 так, щоб $I_s(\mu^*;\Delta) - e_{s,\Delta}^{(N)} > \varepsilon$, якщо $N < N_0$ (див. визначення I_s формулою (2.3.18), а $N = |\gamma_\Delta|$) і $I_s(\mu^*;\Delta) - e_{s,\Delta}^{(N)} < \varepsilon$, якщо $N \geq N_0$ (див. (2.3.19)). Визначимо також послідовність

$$B_N = \begin{cases} \left(e_{s,\Delta}^{(N_0)} - e_{s,\Delta}^{(N)}\right) \cdot N_0,\ N \leq N_0; \\ 0,\ N > N_0. \end{cases}$$

Для $N \leq N_0$: $e_{s,\Delta}^{(N)} - e_{s,\Delta}^{(N_0)} \leq 0$, а $N^2 \leq NN_0$. Як наслідок маємо

1) якщо $N \leq N_0$, то

$$\left(e_{s,\Delta}^{(N)} - e_{s,\Delta}^{(N_0)}\right) N^2 \geq \left(e_{s,\Delta}^{(N)} - e_{s,\Delta}^{(N_0)}\right) N_0\, N = -B_N\, N;$$

2) якщо $N > N_0$, то

$$e_{s,\Delta}^{(N)}\, N^2 \geq e_{s,\Delta}^{(N_0)}\, N^2.$$

Тоді для довільного $N \geq 2$

$$e_{s,\Delta}^{(N)} \cdot N^2 \geq e_{s,\Delta}^{(N_0)} \cdot N^2 - B_N \cdot N, \tag{2.3.38}$$

Оскільки $B_2 > B_N$ для довільного $N \geq 2$, з (2.3.38) випливає, що для всіх $N \geq 2$

$$\begin{aligned} &e_{s,\Delta}^{(N)}\, N^2 \geq e_{s,\Delta}^{(N_0)}\, N^2 - B_2 N = \\ =&I_s(\mu^*,\Delta)N^2 + \left(e_{s,\Delta}^{(N_0)} - I_s(\mu^*,\Delta)\right) \cdot N^2 - B_2 N \geq \\ \geq &\left(I_s(\mu^*,\Delta) - \varepsilon\right) \cdot N^2 - B_2 N. \end{aligned} \tag{2.3.39}$$

Нерівність (2.3.39) доводить теорему 2.3.1 для розбиття $\overline{\Delta_a}$ такого, що для заданого $\gamma \in \Gamma_0$ існує хоча б один кубик з $N = |\gamma_\Delta| \geq 2$. У цьому випадку

$$B = B_2(\varepsilon)\phi_0\ +\ \frac{\varphi_0}{2}. \tag{2.3.40}$$

Для $\gamma \in \Gamma_0$ з $|\gamma_\Delta| = 1$ чи 0 зрозуміло, що $B_2 = \varphi_0/2$. Отже, можна вибрати B, яке задається рівнянням (2.3.40).

Це завершує доведення теореми 2.3.1. ■

2.3.4. Доведення теореми 2.3.2 і теореми 2.3.3

У цьому разі K — це d-вимірний кубик Δ з ребром a. Так само, як і в попередньому випадку, почнемо з розкладу (2.3.35) і нерівності (2.3.37). Для фіксованого $\varepsilon > 0$ визначимо N_0 так, що

$$\left| C_d - \frac{E_s^{(N)}\left(\gamma_K^{min}\right)}{N^2 \ln N} \right| > \varepsilon,$$

якщо $N < N_0$, і

$$\left| C_d - \frac{E_s^{(N)}\left(\gamma_K^{min}\right)}{N^2 \ln N} \right| < \varepsilon,$$

якщо $N \geq N_0$ (стала C_d визначається рівнянням (2.3.22)).

Використовуючи (2.3.35), (2.3.37), (2.3.22) і нехтуючи в (2.3.35) частиною енергії взаємодії:

$$\sum_{\substack{\Delta \in \overline{\Delta_\lambda}, \\ |\gamma_\Delta| < N_0}} U(\gamma_\Delta),$$

оцінку повної енергії взаємодії системи запишемо в такому вигляді:

$$U(\gamma) \geq \sum_{\substack{\Delta \in \overline{\Delta_a}, \\ |\gamma_\Delta| \geq 2}} \left[(C_d - \varepsilon)\phi_0 \ln|\gamma_\Delta| - \frac{\varphi_0}{2} \right] |\gamma_\Delta|^2 - \frac{v_0}{2}|\gamma| -$$
$$- \sum_{i=2}^{N_0-1} \sum_{\substack{\Delta \in \overline{\Delta_a}, \\ |\gamma_\Delta| = i}} \left[C_d \ - \varepsilon \right] \phi_0 |\gamma_\Delta|^2 \ln|\gamma_\Delta|. \tag{2.3.41}$$

Кількість кубиків з $|\gamma_\Delta| = i$ не більша ніж $\frac{|\gamma|}{i}$. Тому

$$\sum_{i=2}^{N_0-1} \sum_{\substack{\Delta \in \overline{\Delta_\lambda}, \\ |\gamma_\Delta| = i}} \left[C_d \ - \varepsilon \right] \phi_0 |\gamma_\Delta|^2 \ln|\gamma_\Delta| \ \leq |\gamma| \sum_{i=2}^{N_0-1} \frac{\left[C_d \ - \varepsilon \right] \phi_0 i^2 \ln i}{i}. \tag{2.3.42}$$

Як наслідок можна записати, що

$$B = \frac{\varphi_0}{2} + \sum_{i=2}^{N_0-1} \left[C_d - \varepsilon\right] \phi_0 i \ln i. \qquad (2.3.43)$$

Це й завершує доведення теореми 2.3.2.

Доведення теореми 2.3.3 аналогічне. Згідно з (2.3.26) мінімальну енергію $|\gamma_\Delta|$ частинок, які розташовані в d-вимірному кубику $\Delta \in \overline{\Delta}_a$, можна оцінити знизу нерівністю (2.3.24) (див. [128] і [64]), домноженою на ϕ_0. Підставляючи цю нерівність у (2.3.37), отримуємо (2.3.33) з $B = \frac{\varphi_0}{2}$. ■

Розділ 3

Термодинамічний опис спостережуваних величин

Як зазначалося у Вступі, статистична система в кожний момент часу t займає якусь конфігурацію $\widetilde{\gamma}(t)$ фазового простору $\widetilde{\Gamma}$. Під впливом внутрішніх або ще й зовнішніх взаємодій така система перебуває в постійному русі, тобто кожна частинка описує якусь неперервну траєкторію, а мікроскопічний стан усієї системи визначається усіма такими траєкторіями.

Для системи, яка складається з N точкових частинок, що взаємодіють у області $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$, траєкторії $\{x_i(t)\}_1^N$ є розв'язком системи диференціальних рівнянь

$$\frac{dx_i^{(\alpha)}}{dt} = \frac{\partial H(\widetilde{\gamma})}{\partial p_i^{(\alpha)}}, \quad \frac{dp_i^{(\alpha)}}{dt} = -\frac{\partial H(\widetilde{\gamma})}{\partial x_i^{(\alpha)}}, \quad i \in \{1, ..., N\},\ \alpha \in \{1, ..., d\}, \tag{3.0.1}$$

та певних граничних співвідношень на межі $\partial\Lambda$ області Λ.

Для консервативної системи значення функції Гамільтона H під час еволюції (3.0.1) повинно зберігатись, тобто

$$H(\widetilde{\gamma}(t)) \ = \ H(\widetilde{\gamma}(0)) \ = \ E_0 \ = \ const.$$

Ураховуючи, що значення N є дуже великим, практично знайти розв'язок системи (3.0.1) неможливо[1]. Отже, мікроскопічні стани в класичній статистичній механіці визначаються сукупністю неперервних траєкторій у фазовому просторі. Але для дослідження системи необхідно знати фізичні характеристики, тобто спостережувані величини.

---

[1] Проблему існування розв'язків навіть для нескінченних систем розглядали, наприклад, у працях [103, 158].

3.1. Термодинамічні стани. Спостережувані величини

Якщо у спостережуваної деякий тривалий час системи не змінюються її макроскопічні характеристики, то кажуть, що система перебуває у стані *термодинамічної рівноваги.* Термодинамічна рівновага є деяким усередненням нерівноважної поведінки мікроскопічних станів, кожен з яких можна вважати випадковим явищем і має свою відповідну ймовірність появи. *Термодинамічний стан* фізичної системи — "функціонал усереднення, визначений на множині спостережуваних величин цієї системи" [43]. Отже, під термодинамічним станом треба розуміти сукупність значень фізичних величин, що характеризують макроскопічні властивості систем. Ці властивості описуються так званими *термодинамічними функціями* (інколи їх називають *термодинамічними потенціалами*) (див., наприклад, [152]), які залежать від *термодинамічних параметрів* температури T, питомого (або молярного) об'єму v тощо. Інколи термодинамічні функції відіграють роль термодинамічних параметрів. Треба також зауважити, що в математичній літературі стан системи ототожнюють з мірою Гіббса.

Спостережувані величини є функціями конфігураційних змінних. Природно, що ця залежність повинна бути тільки від деякої локальної кількості змінних, бо можна спостерігати тільки обмежену область системи. Математично визначити локальну спостережувану величину можна так:

Означення 3.1. *Будь-яку вимірну функцію F_B, визначену на конфігураційному просторі Γ, називають локальною спостережуваною, якщо вона залежить лише від частини конфігурації частинок, що міститься в області $B \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$, тобто*

$$F_B(\gamma) = f(\gamma \cap B) = f(\gamma_B)$$

є циліндричною функцією.

Її середнє значення визначається з допомогою ймовірнісного розподілу за формулою

$$< F_B >_\mu = \int_\Gamma F_B(\gamma) d\mu(\gamma). \tag{3.1.2}$$

З усіх фізичних величин (тобто функцій, введених на множині конфігурацій Γ фізичної системи) частіше всього зустрічаються так звані *суматорні величини.*

Означення 3.2. *Величину $F(\cdot)$ називають суматорною величиною k-го порядку, якщо її можна подати у вигляді*

$$F_B(\gamma) = \sum_{\{x_1,\ldots,x_k\}\subset\gamma} f_{B;k}(x_1, \ldots, x_k),$$

де $f_{B;k}(x_1, \ldots, x_k)$ — деякі симетричні функції своїх змінних.

У загальному випадку локальну спостережувану величину можна записати так:

$$F_B(\gamma) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\{x_1,\ldots,x_k\}\subset\gamma} f_{B;k}(x_1, \ldots, x_k) \ := \sum_{\eta\Subset\gamma} f_B(\eta). \tag{3.1.3}$$

Остання сума означає сумування за усіма можливими скінченними конфігураціями η нескінченної конфігурації γ.

3.1.1. Гіббсові ансамблі та їх імовірнісні міри

Залежно від складності систем, які розглядаються, існує велика кількість гіббсових ансамблів і відповідних мір Гіббса. Розглянемо системи, які виникли у фізиці і ґрунтуються на ідеях Больцмана, Гельмгольца і Гіббса.

Побудуємо таку міру на прикладі класичного газу тотожних точкових частинок. Ця побудова не є математично строгою, і її можна розглядати лише як обґрунтування постулату Гіббса. Незважаючи на те, що нашою метою є побудова такої міри для нескінченної системи, спершу побудуємо за Гіббсом таку міру для дуже великої скінченної макросистеми. До побудови цих великих систем можна підійти по-різному, спираючись на різні види таких систем у природі.

Мікроканонічний (ансамбль) розподіл Гіббса. Вважатимемо, що система є замкнутою ізольованою системою, яка знаходиться в деякій дуже великій посудині Λ об'ємом V $(\sigma(\Lambda) = V)$, містить фіксовану кількість частинок N і має фіксовану енергію E_0. Зауважимо, що оскільки за реальних фізичних спостережень забезпечити такі умови неможливо, тому наступні викладки цього підрозділу треба розглядати як зручний математичний прийом, який дає змогу зробити аналітичні розрахунки. (Радимо також прочитати перший розділ праці [43].)

З точки зору класичної термодинаміки система протягом тривалого часу ізольована від зовнішнього середовища, тобто знаходиться у стані теплової рівноваги. Це означає, що рівняння

$$H(\widetilde{\gamma}) = E_0$$

є рівнянням гіперповерхні у фазовому просторі $\widetilde{\Gamma}$, на якій відбуваються усі фізичні процеси в системі. Визначимо функцію

$$D^{\Lambda}_{mc}(\widetilde{\gamma}) = C_\Lambda \delta\Big(\frac{H(\widetilde{\gamma})}{E_0} - 1\Big). \tag{3.1.4}$$

Тут δ — узагальнена функція Дірака, C_Λ — стала нормування, яка задовольняє рівняння

$$C_\Lambda \int_{\mathbb{R}^{2dN}} \delta\Big(\frac{H(\widetilde{\gamma})}{E_0} - 1\Big)\frac{d\widetilde{\gamma}}{N!h^{dN}} = C_\Lambda \int_{\widetilde{\Gamma}^{(N)}_\Lambda} \delta\Big(\frac{H(\widetilde{\gamma})}{E_0} - 1\Big)\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) = 1, \tag{3.1.5}$$

де

$$\widetilde{\Gamma}^{(N)}_\Lambda = \Gamma^{(N)}_\Lambda \otimes \mathbb{R}^{3N},\ N = |\gamma|,\ d\widetilde{\gamma} = \prod_{x\in\gamma} dxdp_x,$$

а міра інтенсивності $\widetilde{\sigma}$ — це міра Лебега у просторі координат та імпульсів $\mathbb{R}^{2d}$, нормована на сталу h^d. Тоді (3.1.4) буде щільністю шуканої ймовірнісної міри μ^{Λ}_{mc} відносно міри Лебега–Пуассона, яку визначили в підрозд. 1.2.2. Цю міру називають *мірою Гіббса*, що відповідає мікроканонічному ансамблю, або просто *мікроканонічним розподілом.* Відповідні середні

$$\overline{F} =< F >_{\mu}= C_{\Lambda} \int_{\widetilde{\Gamma}_{\Lambda}^{(N)}} F(\widetilde{\gamma})\delta\Big(\frac{H(\widetilde{\gamma})}{E_0}\ -\ 1\Big)\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}).$$

Стала C_{Λ} залежить від E_0 і N, а обернену величину C_{Λ}^{-1} називають *статистичною сумою* мікроканонічного ансамблю:

$$C_{\Lambda}^{-1} = \Omega_{\Lambda}(E_0, N) = \int_{\widetilde{\Gamma}_{\Lambda}^{(N)}} \delta\Big(\frac{H(\widetilde{\gamma})}{E_0}\ -\ 1\Big)\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}).$$

Постійна h має розмірність *дії* й, таким чином, робить статистичну суму безрозмірною.

Зауваження 3.1. *Насправді введення сталої h має більш глибокий фізичний зміст, бо h є сталою Планка і узгоджує введення мікроканонічного ансамблю у випадку квантових систем, для яких h^{dN} дорівнює фазовому об'єму квантового стану, а вираз $d\Omega = \frac{d\widetilde{\gamma}}{h^{dN}}$ — це кількість квантових станів, що знаходяться в гіперкубиках $dx_i dp_i$, тобто h^{dN} — це об'єм елементарної фазової комірки у фазовому просторі $\widetilde{\Gamma}_{\Lambda}$. Множник $1/N!$ у класичному підході вводиться, щоб уникнути парадоксу Гіббса (див., наприклад, [49, розд. 7, § 6]). Це в свою чергу допомагає зрозуміти визначення ентропії системи N частинок у $2d$-вимірному фазовому просторі $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$.*

Зауваження 3.2. *Визначення мікроканонічного розподілу формулами* (3.1.4) *і* (3.1.5) *відповідає класичним уявленням, бо для квантових частинок повинен виконуватись принцип невизначеності Гайзенберга, який не дає змоги точно визначити енергію експериментально, а величина її невизначеності пов'язана з часовим проміжком T_E спостереження за системою, тобто $E_0 < H(\widetilde{\gamma}) < E_0 + \delta E$, а $\delta E \sim h/T_E$.*

Можливо, більш зрозумілі фізичні обґрунтування можна знайти у відповідних підручниках і монографіях (див., наприклад, [20, 25, 42, 49, 151]).

Щоб мати уявлення про метод розрахунку середніх у мікроканонічному ансамблі, обрахуємо статистичну суму класичного ідеального газу. У цьому випадку $U(\widetilde{\gamma}) = U(x_1, ..., x_N) = 0$, а інтеграл за координатними змінними дає множник $(V/h^d)^N$. Тоді

$$\Omega_\Lambda^{PG}(E_0, N) = \frac{V^N}{h^{dN}} \frac{1}{N!} \int_{\mathbb{R}^{dN}} \delta\Big(\frac{1}{E_0} \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} \ - \ 1\Big) dp_1 \cdots dp_N.$$

Перейдемо у просторі $\mathbb{R}^{dN}$ до сферичної системи координат. Тоді (див. [10], формула (4.642))

$$\Omega_\Lambda^{PG}(E_0, N) = \frac{2\pi^{dN/2}}{\Gamma(\frac{dN}{2})} \frac{V^N}{h^{dN}} \frac{1}{N!} \int_0^\infty \delta\left(\frac{P^2}{2mE_0} - 1\right) P^{dN-1} dP.$$

Скориставшись відомою формулою з теорії узагальнених функцій:

$$\delta(f(P)) \ = \ \sum_i \frac{1}{|f'(P_i)|} \delta(P - P_i), \quad f(P_i) = 0, \qquad (3.1.6)$$

отримаємо вираз

$$\Omega_\Lambda^{PG}(E_0, N) = \frac{1}{N!} \frac{\pi^{dN/2}}{\Gamma(\frac{dN}{2})} \frac{V^N}{h^{dN}} (2mE_0)^{dN/2}. \qquad (3.1.7)$$

Канонічний (ансамбль) розподіл Гіббса. Канонічним розподілом описують системи, які у стані рівноваги мають фіксовану температуру, фіксовану густину частинок і можуть обмінюватись тепловою енергією з навколишнім середовищем. Система, що займає область Λ $(\sigma(\Lambda) = V)$, знаходиться в так званому *термостаті* Λ_t — деякій іншій значно більшій системі, що має об'єм V_t, однакову фіксовану температуру T і являє собою ідеальний газ молекул з координатами $\mathbf{Q}_i$, імпульсами $\mathbf{P}_i$, $i = 1, ..., N_t$. Фазовим простором системи є простір $\widetilde{\Gamma}_\Lambda^{(N)}$. Вважається, що система+термостат $(s+t)$ є замкнутою системою, в якій встановилася рівновага. У цьому випадку в термодинамічній границі, що виконується за змінними термостата

$$V_t \to \infty, \quad N_t \to \infty,$$

щільність міри розподілу канонічного ансамблю у скінченному об'ємі відносно міри $\lambda_{\widetilde{\sigma}}$ визначається за формулою

$$D_c^{\Lambda}(\widetilde{\gamma}) = D_c^{\Lambda}(\widetilde{\gamma}, N, \beta) = \frac{e^{-\beta H(\widetilde{\gamma})}}{Z_{\Lambda}(N, \beta)}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}. \tag{3.1.8}$$

Тут β — обернена температура, яка завдяки сталій Больцмана k_B виражається в енергетичних одиницях. Величину

$$Z_{\Lambda}(N, \beta) \ = \ \frac{Q_{\Lambda}(N, \beta)}{N!}, \, Q_{\Lambda}(N, \beta) := \int_{\widetilde{\Gamma}_{\Lambda}^{(N)}} e^{-\beta H(\widetilde{\gamma})} \frac{d\widetilde{\gamma}}{h^{dN}} \tag{3.1.9}$$

називають *канонічною статистичною сумою*, а $Q_{\Lambda}(N, \beta)$ *конфігураційним інтегралом*. Формулу (3.1.8) можна вважати постулатом, який обґрунтований на фізичному рівні строгості. Для того, щоб не виникало відчуття незавершеності, наведемо коротко ці евристичні міркування.

Унаслідок ізольованості повної системи $(s+t)$ можна застосувати формулу для щільності мікроканонічного розподілу:

$$D_{s+t}^{\Lambda}(\widetilde{\gamma}, \mathbf{P}, \mathbf{Q}) = C_{s+t} \delta \left(\frac{1}{E_{s+t}^0} \left(\sum_{i=1}^{N_t} \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} + H(\widetilde{\gamma}) \right) - 1 \right).$$

Вартою уваги є тільки система. Тому за змінними термостата можна проінтегрувати і записати щільність імовірності розподілу для системи у вигляді

$$D_s^{\Lambda}(\widetilde{\gamma}) = C_{s+t} \frac{V_t^{N_t}}{h^{dN_t}} \int \delta \left(\frac{1}{E_{s+t}^0} \left(\sum_{i=1}^{N_t} \frac{\mathbf{P}_i^2}{2m} + H(\widetilde{\gamma}) \right) - 1 \right) (d\mathbf{P})^{N_t}.$$

Далі так само, як і під час розрахунку мікроканонічної статистичної суми ідеального газу, після застосування формули (3.1.6) одержуємо вираз

$$D_s^{\Lambda}(\widetilde{\gamma}) = \frac{1}{2} C_{s+t} \frac{V_t^{N_t}}{h^{dN_t}} (2m)^{dN_t/2} E_{s+t}^0 \Big(E_{s+t}^0 \ - \ H(\widetilde{\gamma}) \Big)^{\frac{dN_t}{2} - 1}.$$

Припускаючи, що енергія термостата набагато більша за енергію системи, і враховуючи, що для ідеального газу на кожен ступінь вільності припадає по $1/2k_BT$ енергії, приймаємо, що

$$E^0_{s+t} \approx \left(\frac{dN_t}{2} - 1\right) k_BT.$$

Тоді у виразі для середніх, для функцій, які залежать тільки від змінних системи, можна виконати перший термодинамічний перехід $V_t \to \infty$, $N_t \to \infty$, враховуючи, що

$$\left(1 - \frac{H(\widetilde{\gamma})}{\left(\frac{dN_t}{2} - 1\right) k_BT}\right)^{\frac{dN_t}{2} - 1} \to e^{-\frac{H(\widetilde{\gamma})}{k_BT}},$$

а сталі, які прямують до нескінченності, у виразі для середнього скоротяться. Як наслідок отримуємо розподіл (3.1.8) для щільності канонічного розподілу в скінченному об'ємі за правильного вибору сталої нормування.

У випадку класичного ідеального газу інтеграл у правій частині формули (3.1.9) визначається точно. Отримуємо вираз для статистичної суми канонічного ансамблю:

$$Z^{PG}_{\Lambda}(N,\beta) \;=\; \frac{V^N}{N!}\left(\frac{2\pi m}{h^2\beta}\right)^{\frac{dN}{2}}, \; V = \sigma(\Lambda). \tag{3.1.10}$$

Великий канонічний (ансамбль) розподіл Гіббса. Цей випадок буде відрізнятись від попереднього тим, що стінки посудини, які відокремлюють систему від термостата, будуть проникні для частинок. З точки зору реальних фізичних систем це більш природно. У цьому разі рівновага системи та термостата буде означати рівність хімічних потенціалів системи та термостата. *Хімічний потенціал* системи μ — це величина, яка характеризує зміну внутрішньої енергії системи за зміни кількості частинок системи на одну частинку, тому у формулі для щільності до повної енергії треба додати величину μN. Розглядаючи систему і термостат з $V_t \gg V$ і $N_t \gg N$ у рамках канонічного ансамблю $N_t + N$ частинок, нехтуючи при цьому взаємодією між частинками системи і термостата та враховуючи деякі термодинамічні співвідношення, вираз для щільності (відносно міри Лебега в $\mathbb{R}^{2dN}$) можна записати так:

$$D^{\Lambda}_{gc}(\widetilde{\gamma}, N, \beta, \mu) = \frac{e^{\beta\mu N}}{N!}\frac{e^{-\beta P_{\Lambda}V-\beta H(\widetilde{\gamma})}}{h^{dN}}, \quad N = |\widetilde{\gamma}|, \ V = \sigma(\Lambda), \tag{3.1.11}$$

де P_{Λ} — тиск у системі. Введемо позначення:

$$e^{\beta P_{\Lambda}V} \ = \ \Xi_{\Lambda}(\beta, \mu). \tag{3.1.12}$$

Тоді вираз

$$D^{\Lambda}_{gc}(\widetilde{\gamma}) \ = \ D^{\Lambda}_{gc}(\widetilde{\gamma}, N, \beta, \mu) = \frac{e^{-\beta H(\widetilde{\gamma})+\beta\mu N}}{\Xi_{\Lambda}(\beta, \mu)} \tag{3.1.13}$$

розглядають як щільність міри Гіббса у великому канонічному ансамблі відносно міри Лебега–Пуассона $\lambda_{\widetilde{\sigma}}$, а сталу нормування $\Xi_{\Lambda}(\beta, \mu)$ називають *великою статистичною сумою* і виражають формулою

$$\Xi_{\Lambda}(\beta, \mu) = \sum_{N\geq 0}\frac{1}{N!}\int_{\widetilde{\Gamma}^{(N)}_{\Lambda}} e^{\beta\mu N-\beta H(\widetilde{\gamma})}\frac{d\widetilde{\gamma}}{h^{dN}} = \int_{\widetilde{\Gamma}_{\Lambda}} e^{-\beta H(\widetilde{\gamma})}\lambda_{z_0\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}), \tag{3.1.14}$$

де $z_0 = e^{\beta\mu}$ — *абсолютна активність*. Детальніше фізичне обґрунтування формул (3.1.11)–(3.1.14) наведено, наприклад, у працях [25, розд. 3], [42, розд. VI, § 62, 63].

Конфігураційні розподіли Гіббса. У випадку рівноважних систем спостережувані фізичні величини $F(\widetilde{\gamma}) = F(\gamma)$, $\gamma \in \Gamma_{\Lambda}$, тобто не залежать від імпульсних змінних, а відповідні щільності ймовірнісних мір (розподілів) їх конфігураційних змінних отримують інтегруванням за змінними $p_1, \ldots, p_N$. Для канонічного ансамблю

$$D^{\Lambda}_{c}(\gamma, N, \beta) = \int_{\mathbb{R}^{dN}} D^{\Lambda}_{c}(\widetilde{\gamma})(\frac{dp}{h^d})^N = \frac{1}{Z_{\Lambda}(N, \beta)}\frac{1}{N!}\left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{\frac{dN}{2}} e^{-\beta U(\gamma)}, \tag{3.1.15}$$

де $N = |\gamma|$ і

$$\begin{aligned} Z_\Lambda(N,\beta) &= \frac{1}{N!}\left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{dN/2}\int_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} e^{-\beta U(\gamma)}d\gamma = \\ &= \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{dN/2}\int_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_\sigma(d\gamma) = \\ &= \int_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\gamma), \quad \widetilde{\sigma} := \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{d/2}\sigma, \end{aligned} \tag{3.1.16}$$

а для великого канонічного ансамблю

$$D_{gc}^\Lambda(\gamma,\mu,\beta) = \frac{e^{-\beta U(\gamma)+\beta\mu N}}{\Xi_\Lambda}, \tag{3.1.17}$$

$$\Xi_\Lambda = \Xi_\Lambda(\beta,z) = \int_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{3.1.18}$$

Тут скористалися визначенням міри Лебега–Пуассона (1.2.19), а сталу

$$z = \frac{e^{\beta\mu}}{h^d}\int_{\mathbb{R}^d} e^{-\frac{p^2}{2m}}dp = e^{\beta\mu}\left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{d/2}$$

називають *активністю* системи.

Зауваження 3.3. *У фізичній літературі існує певний різнобій у визначенні активності (див. [25, підрозд. 8в]). Безрозмірну величину $z_0 = e^{\beta\mu}$ прийнято називати абсолютною активністю, тому $z = \lambda^{-d}z_0$, де $\lambda = \left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{-1/2}$ — довжина хвилі де Бройля (див. [25, підрозд. 7г]), називатимемо просто активністю.*

Зауваження 3.4. *Розподіли* (3.1.4), (3.1.8), (3.1.13) *відповідають скінченним системам. Щоб отримати вираз для мір Гіббса, що відповідають нескінченним системам, треба у виразах для середніх значень спостережуваних величин перейти до термодинамічної границі $\Lambda \nearrow \mathbb{R}^d$, яку строго визначено у підрозд. 3.1.2. У разі виконання термодинамічної границі вирази для щільностей мір Гіббса втрачають математичний зміст. Але* *відповідні міри на фазових просторах безмежних систем можна визначити для певного класу взаємодій між частинками. На цьому зупинимося в наступному підрозділі.*

Для системи класичного ідеального газу інтеграл у (3.1.18) легко розраховується:

$$\Xi_{\Lambda}^{PG}(\beta, z) \;=\; e^{zV}, \;\; V \;=\; \sigma(\Lambda). \tag{3.1.19}$$

3.1.2. Існування граничних мір Гіббса

Термодинамічний граничний перехід $N \to \infty$, $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^d$ є необхідною операцією під час вивчення макроскопічних властивостей фізичних систем. Це зумовлено передусім тим, що за скінченних значень об'ємів $V = \sigma(\Lambda)$ поведінка термодинамічних функцій є регулярною (аналітичною). Тому точку фазового переходу на строго математичному рівні не можна виявити. У зв'язку з цим введемо поняття *термодинамічного граничного переходу.*

Нехай Λ_n — це послідовність об'ємів таких, що $\Lambda_1 \subset \Lambda_2 \subset \ldots \ldots \subset \Lambda_n \subset \ldots$, і $\cup_{n=1}^{\infty} \Lambda_n \;=\; \mathbb{R}^d$, а відповідна кількість частинок N_n зростає так, щоб існувала границя

$$\lim_{n \to \infty} \frac{V_n}{N_n} \;=\; v, \;\; V_n \;=\; \sigma(\Lambda_n). \tag{3.1.20}$$

Отже, з точки зору фізичних міркувань важливою математичною проблемою є строге доведення існування границі у виразах для середніх спостережуваних величин:

$$\overline{F} = \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{R}^d} \int_{\Gamma_{\Lambda}} F(\gamma) \mu_{\Lambda}(d\gamma).$$

Проте з погляду строгого підходу до математичної проблеми побудови теорії зовсім небезпідставно з'ясувати, чи існує міра Гіббса на просторі нескінченних конфігурацій Γ. Звичайно з визначень (3.1.4), (3.1.8), (3.1.13) видно, що щільності цих мір не витримують граничного переходу, тобто не можна записати їх аналітичний вигляд. Але міра, яка не є абсолютно неперервною відносно $d\gamma$ чи якоїсь іншої міри, пов'язаної з мірою Лебега σ, може існувати.

Як уже відмічено у вступі, вперше цю проблему розглянули у 1967 р. незалежно Мінлос [29, 30] (див. також [173]) і Рюель [212]. Мінлос побудував сім'ю гіббсових мір на циліндричних множинах $S_{\Lambda;A}$ (див. визначення (1.1.12)) нескінченновимірного конфігураційного простору Γ і визначив гіббсовий стан (гіббсову міру) як граничну міру. Іншими словами, для довільної послідовності об'ємів $\Lambda_1, \ldots \Lambda_k, \ldots$, які прямують до $\mathbb{R}^d$, і довільного обмеженого $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ знайдеться таке $k(\Lambda)$, що $\Lambda \subset \Lambda_k$ для всіх $k > k(\Lambda)$. Тоді, якщо для кожного $S_{\Lambda;A}$ існує границя

$$\lim_{k\to\infty} \mu_{\Lambda_k}(S_{\Lambda;A}) = \mu(S_{\Lambda;A})$$

і виконано умови узгодженості

$$\mu_{\Lambda_1}(S_{\Lambda;A}) = \mu_{\Lambda_2}(S_{\Lambda;A}) \text{ for } \Lambda_1 \subset \Lambda_2,$$

тоді виконується така теорема:

Теорема 3.1.1. *[29] Нехай на алгебрі циліндричних множин у $\mathcal{B}(\Gamma)$ визначено скінченно-адитивну ймовірнісну міру μ, причому таку, що її обмеження на будь-яку підалгебру $\mathcal{B}_\Lambda(\Gamma) \subset \subset \mathcal{B}(\Gamma)$ є цілком адитивною мірою. Тоді цю міру можна продовжити єдиним чином до цілком адитивної міри на всю σ-алгебру $\mathcal{B}(\Gamma)$.*

У праці [29] встановлено існування такої міри у великому канонічному ансамблі для регулярних значень параметрів z, β. Теорема 3.1.1 є аналогом відомої теореми Колмогорова [23] про продовження скінченновимірних імовірнісних розподілів до зліченно-адитивної міри на функціональному просторі (див., також, [185]). У [30] встановлені ергодичність та властивість сильного перемішування граничної міри для регулярних значень параметрів (β, v).

У серії праць Добрушина [13–17, 80] як для ґратчастих, так і для неперервних нескінченних класичних систем наведено більш загальне визначення гіббсової міри за допомогою умовних розподілів. Практично в той самий час майже аналогічний підхід також запропонували Ленфорд і Рюель [159]. Наведемо коротко основну ідею цього підходу. Міра Гіббса μ визначається на Γ за допомогою сім'ї умовних імовірнісних розподілів, щільність яких знаходиться за похідною Радона–Нікодима:

$$\hat{D}^{\Lambda}_{gc}(\gamma|\,\bar{\gamma}_{\Lambda^c}) \;=\; \frac{d\mu_\Lambda}{d\lambda_{z\sigma}}(\gamma|\,\bar{\gamma}_{\Lambda^c}) \;=\; \frac{\exp\{-\beta U(\gamma|\,\bar{\gamma}_{\Lambda^c})\}}{\Xi_\Lambda(\bar{\gamma}_{\Lambda^c})}, \qquad (3.1.21)$$

де

$$\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d),\ \Lambda^c = \mathbb{R}^d \setminus \Lambda,\ \gamma \in \Gamma_\Lambda,\ \bar{\gamma} \in \Gamma,$$

а

$$U(\gamma|\bar{\gamma}_{\Lambda^c}) := U(\gamma) + W(\gamma;\bar{\gamma}_{\Lambda^c}), \qquad (3.1.22)$$

і які з точністю до множника $z^{|\gamma|}/|\gamma|!$ збігаються з щільностями (3.1.17) при $\bar{\gamma}_{\Lambda^c} = \emptyset$. Тут конфігурація $\bar{\gamma} \in \Gamma$ відіграє роль фіксованих граничних умов, за яких реалізується випадкова конфігурація $\gamma \in \Gamma_\Lambda$ з імовірністю (3.1.21), а визначення мір Гіббса формулами (3.1.8) і (3.1.13) відповідають порожнім граничним умовам. При цьому враховується лише енергія конфігурації γ та її взаємодія з конфігурацією $\bar{\gamma}_{\Lambda^c}$, а відповідна статистична сума є такою:

$$\Xi_\Lambda(\bar{\gamma}_{\Lambda^c}) = \int_{\Gamma_\Lambda} \exp\{-U(\gamma|\,\bar{\gamma}_{\Lambda^c})\}\lambda_{z\sigma}(d\gamma).$$

Імовірність події $A \in \mathcal{B}(\Gamma)$ визначається формулою

$$\Pi_\Lambda(A,\bar{\gamma}_{\Lambda^c}) = \int_{\Gamma_\Lambda} 1\!\!1_A(\bar{\gamma}_{\Lambda^c} \cup \gamma)\mu_\Lambda(d\gamma|\bar{\gamma}_{\Lambda^c}).$$

Тоді μ називають мірою Гіббса, якщо її умовний розподіл збігається з Π_Λ, тобто

$$E_\mu\left[1\!\!1_A \mid \mathcal{B}(\Gamma_{\Lambda^c})\right](\cdot) \;=\; \Pi_\Lambda(A \mid \cdot) \quad \mu - a.e.,\ A \in \mathcal{B}(\Gamma).$$

За означенням умовного математичного сподівання

$$\mu(\Pi_\Lambda(A,\cdot)) \;=\; \int_\Gamma \Pi_\Lambda(A \mid \gamma)\mu(d\gamma) \;=\; \mu(A) \qquad (3.1.23)$$

для довільного $A \in \mathcal{B}(\Gamma)$ і $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$. Формулу (3.1.23) називають рівнянням Добрушина–Ленарда–Рюеля (ДЛР). Якщо міра μ задовольняє рівняння ДЛР, тоді це є необхідною та достатньою умовою того, що μ є мірою Гіббса.

Більш прозорим з аналітичної точки зору є рівняння, яке запропонував Рюель (РР) у [213]. Для будь-якої позитивної $\mathcal{B}(\Gamma)$-вимірної функції F і $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ виконується рівність

$$\int_{\Gamma} F(\gamma)\mu(d\gamma) \; = \; \int_{\Gamma_\Lambda} \left[\int_{\Gamma_{\Lambda^c}} F(\eta \cup \gamma) e^{-\beta U(\eta|\gamma)} \mu(d\gamma) \right] \lambda_{z\sigma}(d\eta). \tag{3.1.24}$$

Необхідно також навести ще одне рівняння, запропоноване в працях [106, 178], це рівняння Георгії–Нгуєна–Цессіна (ГНЦ). Для довільної позитивної $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \otimes \mathcal{B}(\Gamma)$-вимірної функції H виконується формула

$$\int_{\Gamma} \sum_{x \in \gamma} H(x; \gamma)\mu(d\gamma) \; = \; z \int_{\Gamma} \int_{\mathbb{R}^d} H(x; \gamma \cup \{x\}) e^{-\beta W(\{x\};\gamma)} \sigma(dx)\mu(d\gamma). \tag{3.1.25}$$

Рівняння (3.1.23), (3.1.24), (3.1.25) є еквівалентним інструментом опису міри Гіббса. Сформулюємо твердження цього факту у вигляді такої теореми:

Теорема 3.1.2. *Нехай $\mu \in \mathcal{G}_V$, де $\mathcal{G}_V := \mathcal{G}(\phi, z, \beta)$ – множина усіх мір Гіббса, які відповідають потенціалу ϕ, активності z і оберненій температурі β. Тоді рівняння ДЛР* (3.1.23), *рівняння РР* (3.1.24) *і рівняння ГНЦ* (3.1.25) *є еквівалентними.*

Детальне *доведення* подано в праці [154].

3.2. Термодинамічні параметри та термодинамічні функції

Макроскопічні властивості рівноважних станів вивчає термостатика, тобто рівноважна термодинаміка, яка є, по суті, феноменологічною наукою і яка тільки починаючи з середини XX ст.

набула вирішального наукового значення завдяки впливу статистичної фізики, як класичної, так і квантової. Тому з математичної точки зору важливо отримати вирази основних макроскопічних характеристик у термінах розподілів Гіббса. Ці характеристики називають *термодинамічними параметрами*, або *термодинамічними функціями* термодинамічних параметрів. Очевидно, що ці поняття не можна чітко розділити, бо вони пов'язані рівняннями стану та можуть у одному випадку бути параметрами, які є сталими для системи, що знаходиться в заданій рівновазі, а в іншому — функціями інших термодинамічних параметрів. До таких параметрів належить передусім температура системи або її обернене значення β (формула (3.1.8)), а також питомий об'єм v (середній об'єм, що припадає на одну частинку (див. (3.1.20)), або густина частинок у системі $\varrho = 1/v$, тиск і т.п. Для нерівноважних систем ці параметри можуть ставати невизначеними. Термодинамічна рівновага визначається лише відносно достатньо великої групи параметрів, але питання їх кількості є складним і залежить від задачі конкретного дослідження. Для детальнішого розуміння радимо звернутися, наприклад, до праці [36].

З погляду побудови математично строгої теорії статистичних систем найбільшої уваги заслуговують термодинамічні функції енергії, тиску, ентропії, теплоємності для неперервних систем і намагніченість, поляризація для електромагнітних явищ та багато інших. Важливо також зауважити, що побудова математично строгої теорії реальних фізичних явищ потребує створення моделей, які б ґрунтувалися на результатах спостереження цих явищ і давали б нову картину бачення (див. [81]).

3.2.1. Енергія

Важливою характеристикою статистичної системи є *вільна енергія*, яку інколи називають *вільною енергією Гельмгольца* (на відміну від вільної енергії Гіббса, яку визначено нижче) і яку в канонічному ансамблі визначають формулою

$$F(T,V,N) \;=\; -kT\ln Z_\Lambda(N,\beta),\ \beta = 1/kT,\ V = \sigma(\Lambda). \qquad (3.2.26)$$

У термодинамічних позначеннях (див. [152], [36])

$$F = U - TS.$$

Ця величина залежить від розміру системи, тому в термодинамічній границі зручно ввести її питомі значення, які припадають на одну частинку:

$$f(v, \beta) = \lim_{\substack{N \to \infty, \\ V/N \to v}} \frac{F(T, V, N)}{N} \tag{3.2.27}$$

або на одиницю об'єму системи:

$$g(\rho, \beta) = \lim_{\substack{V \to \infty, \\ N/V \to \rho}} \frac{F(T, V, N)}{V} = v^{-1} f(v, \beta), \quad \varrho = \frac{1}{v}.$$

Доведення існування границі (3.2.27) започатковане ще у праці ван-Хова [130], але містило деякі прогалини. Мабуть, уперше строге доведення існування границі (3.2.27) навів Рюель [211], а пізніше Фішер [97], користуючись методом Рюеля, узагальнив його результат на ширший клас потенціалів. І, нарешті, в праці Добрушина [12] подано загальні умови існування скінченної границі, які в деякому сенсі є також необхідними.

Зауваження 3.5. *У всіх згаданих вище працях встановлено також властивості функції $f(v, \beta)$. В усіх інтервалах, де вона набуває скінченних значень, функція $f(v, \beta)$ є монотонно неспадною опуклою неперервною функцією змінної v.*

Для наочності наведемо також вигляд цих функцій для системи класичного ідеального газу.

Підставивши вираз для статистичної суми (3.1.10) у визначення (3.2.26), маємо

$$F^{PG}(T, V, N) = -kTN \left\{ 1 + \ln \left[\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{d/2} \right] \right\}$$

і відповідний вираз для питомої вільної енергії в термодинамічній границі:

$$f^{PG}(v,\beta)=\lim_{\substack{N\to\infty,\\ V/N\to v}}\frac{F^{PG}(T,V,N)}{N}=-kT\left\{1+\ln\left[v\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{\frac{d}{2}}\right]\right\}.$$

Середнє значення повної енергії розраховується за формулою (0.0.2):

$$E=\frac{1}{N!Z_\Lambda(N,\beta)}\int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda^{(N)}}H(\widetilde{\gamma})e^{-\beta H(\widetilde{\gamma})}\frac{d\widetilde{\gamma}}{h^{dN}}=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_\Lambda(N,\beta).$$

Відповідною питомою термодинамічною енергією є границя

$$e(v,\beta)\;=\;-\lim_{\substack{N\to\infty,\\ V/N\to v}}\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{\ln Z_\Lambda(N,\beta)}{V},\tag{3.2.28}$$

або у великому канонічному ансамблі

$$e(\mu,\beta)\;=\;-\lim_{V\to\infty}\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{\ln\Xi_\Lambda(\mu,\beta)}{V},\tag{3.2.29}$$

звичайно за умови, що обидві границі існують.

З означень (3.2.28), (3.2.26) і (3.2.27) випливає зв'язок питомої термодинамічної енергії з вільною питомою енергією Гельмгольца:

$$e(v,\beta)\;=\;\frac{\beta}{v}\frac{\partial f(v,\beta)}{\partial\beta}.$$

У випадку великого канонічного ансамблю всі термодинамічні функції можна виразити через граничну функцію величини $V^{-1}\ln\Xi_\Lambda$, тобто функцію

$$\chi(\mu,\beta)\;=\;\lim_{V\to\infty}\frac{\ln\Xi_\Lambda(\mu,\beta)}{V},\tag{3.2.30}$$

яку інколи називають питомою вільною енергією Гіббса. Існування і властивості функції χ вперше були описані Лі і Янгом [161] для системи частинок, що взаємодіють за допомогою потенціалу твердих кульок. У [211] ці результати узагальнено Рюелем для систем з обмеженим потенціалом взаємодії. Відомо також (див. [173]), що функція $\chi(\mu, \beta)$ є увігнутою за парою змінних μ, β.

Відповідно з (3.2.29), (3.2.30) маємо зв'язок:

$$e(\mu, \beta) \;=\; -\frac{\partial \chi(\mu, \beta)}{\partial \beta}. \tag{3.2.31}$$

3.2.2. Ентропія

Перехід від класичного детерміністичного опису в класичній механіці до ймовірнісного, прийнятого в статистичній фізиці, призводить до втрати точної інформації про стан системи. Мірою таких втрат і є деяка функція параметрів термодинамічного стану, яку називають *ентропією*. Логічно вважати, що вона дорівнює нулю, коли опис є повністю детермінований, і досягає свого максимального значення, коли система з якоюсь імовірністю перебуває в деякому можливому мікроскопічному стані. У статистичній механіці ентропія тісно пов'язана з кількістю мікроскопічних конфігурацій, які визначаються макроскопічними величинам, що характеризують систему. У 1877 р. Людвіг Больцман постулював зв'язок між ентропією системи та кількістю можливих мікроскопічних станів, якими може реалізуватися макроскопічний стан із заданими властивостями. Для мікроканонічного ансамблю цей зв'язок подається у вигляді такого співвідношення:

$$S_\Lambda(E_0, N) := k_B \ln \Omega_\Lambda(E_0, N), \tag{3.2.32}$$

де стала $k_B \;=\; 1,38 \cdot 10^{23}$ Дж/К відома як стала Больцмана, а $\Omega_\Lambda(E_0, N)$ — статистична сума мікроканонічного ансамблю, яка визначає кількість елементарних комірок у фазовому просторі, який заповнює контейнер Λ. Ентропія — це так звана *екстенсивна* величина, а саме, якщо макроскопічна система складається з двох макроскопічних підсистем, ентропіями яких є відповідно S_1 і S_2, то порядок ентропії всієї системи повинен бути $S_1 \;+\; S_2$ за значень N, що відповідають макроскопічним системам. Цю властивість легко перевірити на прикладі системи ідеального газу. Дійсно, підставивши в означення (3.2.32) вираз для статистичної суми мікроканонічного ансамблю (3.1.7) і враховуючи, що за великих значень N можна скористатись наближеними формулами:

$$\ln \Gamma\left(\frac{dN}{2}\right) \approx \frac{dN}{2}\left(\ln\left(\frac{dN}{2}\right) - 1\right), \quad N! \approx \left(\frac{N}{e}\right)^N ,$$

а також значенням енергії $E_0 = \frac{d}{2}Nk_BT$, отримаємо вираз для ентропії:

$$S_\Lambda^{PG}(T,N) = k_BN\left\{\frac{d+2}{2} + \ln\left[\frac{V}{N}\left(\frac{2\pi mk_BT}{h^2}\right)^{d/2}\right]\right\}.$$

Легко бачити, що якщо змішати два однакові гази, які мають відповідно кількість молекул N_1 і N_2 і займають відповідно об'єми V_1 і V_2, то ентропія суміші $S = S_1 + S_2$, оскільки

$$\frac{V_1}{N_1} = \frac{V_2}{N_2} = \frac{V_1+V_2}{N_1+N_2}.$$

Визначення (3.2.32) дає ймовірнісне тлумачення другого закону термодинаміки (див., наприклад, відповідні міркування в [195]).

Вирази для ентропії в канонічному та великому канонічному ансамблях записують у такому вигляді:

$$S_\Lambda(N,\beta) := -\int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda^{(N)}} D_c^\Lambda(\widetilde{\gamma},N,\beta)\ln D_c^\Lambda(\widetilde{\gamma},N,\beta)\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}), \ N = |\gamma|, \tag{3.2.33}$$

$$S_\Lambda(z,\beta) := -\int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda} D_{gc}^\Lambda(\widetilde{\gamma},z,\beta)\ln D_{gc}^\Lambda(\widetilde{\gamma},z,\beta)\lambda_{z_0\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}), \tag{3.2.34}$$

де щільності задані формулами (3.1.8), (3.1.13). Підставивши їх у формули (3.2.33), (3.2.34), одержимо відомі термодинамічні співвідношення для ентропії через статистичні аналоги відповідних термодинамічних потенціалів.

Для дослідження ентропії в термодинамічній границі треба визначити її питомі значення на одиницю об'єму. Для мікроканонічного ансамблю

$$s(\varepsilon_0, \rho) \ = \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{R}^d} \frac{S_\Lambda(E_0, N)}{V}, \ V = \sigma(\Lambda).$$

Умови існування і властивості цієї границі детально описані в праці [43, розд. 3.3].

З формул (3.2.33), (3.1.8) та визначень (3.2.28), (3.2.27) і (3.2.26) випливає, що

$$s(v, \beta) \ = \ \beta e(v, \beta) \ - \ \frac{\beta}{v} f(v, \beta) = \frac{\beta^2}{v} \frac{\partial f(v, \beta)}{\partial \beta} \ - \ \frac{\beta}{v} f(v, \beta).$$

Підставивши (3.1.13) в (3.2.34) і поділивши обидві частини рівності на V, отримаємо співвідношення

$$s(\mu, \beta) \ = \ -\beta \frac{\partial \chi(\mu, \beta)}{\partial \beta} - \mu \frac{\partial \chi(\mu, \beta)}{\partial \mu} + \chi(\mu, \beta). \tag{3.2.35}$$

3.2.3. Тиск. Рівняння стану

Тиск є одним з найважливіших термодинамічних параметрів, який разом з іншими термодинамічними величинами визначають фізичний стан системи частинок, що взаємодіють. Рівняння, яке пов'язує між собою тиск, об'єм і температуру, називають *рівнянням стану*. Найпростішим таким рівнянням є *рівняння Клапейрона*, яке описує поведінку ідеальних газів. Системи реальних газів, які перебувають у розрідженому стані та мають невисокий тиск, описують феноменологічним *рівнянням Ван дер Ваальса*. Для довільних значень цих параметрів і для систем, які розглядаються, таким співвідношенням є формула (3.1.12), введена для опису розподілу Гіббса великого канонічного ансамблю. Запишемо його у такому вигляді:

$$P_\Lambda V \ = \ kT \ln \Xi_\Lambda(\beta, \mu). \tag{3.2.36}$$

Наприклад для системи ідеального газу $\Xi_\Lambda(\beta, z)$ має вигляд (3.1.19), а рівняння (3.2.36) запишемо так:

$$P_\Lambda \;=\; kTz.$$

Враховуючи, що для ідеального газу $z \;=\; N/V$, отримуємо рівняння Клапейрона.

Рівняння (3.2.36) та існування граничної функції $\chi(\mu,\beta)$ у (3.2.30), яке було доведене в [161], [211], фактично визначає тиск у термодинамічній границі $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^d$ $(V \to \infty)$:

$$p(\mu,\beta) \;=\; kT \lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d} \frac{\ln \Xi_\Lambda(\mu,\beta)}{V} \;=\; \frac{1}{\beta}\chi(\mu,\beta). \tag{3.2.37}$$

У праці Рюеля [213] для надстійких потенціалів взаємодії встановлено неперервну залежність тиску від густини ϱ, яка в свою чергу у великому канонічному ансамблі теж визначається через потенціал $\chi(\mu,\beta)$ за допомогою формули

$$\begin{aligned}\varrho(\mu,\beta) &= \lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d} \frac{1}{\Xi_\Lambda(\mu,\beta)} \int_{\Gamma_\Lambda} \frac{N}{V} e^{\mu N - H(\widetilde{\gamma})} \lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) \;= \qquad (3.2.38)\\ &= \lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d} \frac{\partial}{\partial\mu} \frac{\ln \Xi_\Lambda(\mu,\beta)}{V} = \frac{\partial\chi(\mu,\beta)}{\partial\mu},\; N = |\widetilde{\gamma}|,\; V = \sigma(\Lambda).\end{aligned}$$

Зауваження 3.6. *Існування похідних* $\frac{\partial\chi(\mu,\beta)}{\partial\mu}$*,* $\frac{\partial\chi(\mu,\beta)}{\partial\beta}$ *у формулах* (3.2.31)*,* (3.2.35) *та* (3.2.38) *випливає з увігнутості функції* $\chi(\mu,\beta)$ *за кожною змінною, за винятком, можливо, зліченної кількості точок зламу.*

Тиск також можна визначити в рамках канонічного ансамблю, базуючись на термодинамічному співвідношенні

$$P \;=\; -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T,$$

яке в термодинамічній границі (див. (3.2.26), (3.2.27)) записують так:

$$p(v,\beta) \;=\; \frac{1}{\beta}\frac{\partial f(v,\beta)}{\partial v}. \tag{3.2.39}$$

У праці Добрушина та Мінлоса [18] встановлено, що похідна в (3.2.39) існує для всіх $v > v_0$, $0 < \beta < \infty$. Крім того, в довільній замкненій обмеженій області S площини (v, β), що лежить усередині області $(v > v_0,\ \beta > 0)$, вона задовольняє умову Ліпшиця зі сталою L, яка може залежати від S. Це означає, що друга похідна $\partial^2 f/\partial v^2$ існує й є рівномірно обмеженою.

3.3. Кореляційні функції мір Гіббса

Кореляційні функції були вперше введені на початку XX ст. Орштейном і Церніке для дослідження критичних флуктуацій. Математичні дослідження кореляційних функцій, мабуть, почалися з праці Івона [224] і незалежних досліджень Боголюбова [3], Кірквуда [143] та Борна–Гріна [65]. Їх зв'язок зі статистичним станом (тобто відповідною мірою Гіббса) коротко обговорювався у працях Рюеля [43, 213]. Але, ймовірно, в загальнішому вигляді це питання висвітлене у працях Ленарда [163–165], які в свою чергу були дещо осучаснені з погляду аналізу, який розвивається в цій монографії, та детальніше викладені в [144, 154]. У наступному підрозділі наведено деякі основні моменти цього аналізу.

3.3.1. Кореляційні міри та кореляційні функції

Кореляційні функції є в певному сенсі аналогом моментів міри, тобто інтегралів за мірою Гіббса від добутку пуассонівських полів, про які йтиметься в наступному підрозділі. Розглянемо аналог моментів на просторі конфігурацій Γ.

Передусім зауважимо, що кожну конфігурацію γ можна ототожнити з узагальненою функцією (див. (1.1.2), (1.1.3), (1.1.5)). Але у просторі узагальнених функцій операція множення (зведення у степінь) не є визначеною. У гауссовому аналізі (тобто на просторах функцій, які інтегровні за мірою Гаусса) вводять так звану віківську регуляризацію. Так само можна зробити і у випадку пуассонівського аналізу. Детальніше це питання обговоримо в наступному підрозділі з точки зору узагальнених пуассонівських функціоналів [135–137].

Перший степінь знаходять звичайним чином за визначенням узагальненої функції. Нехай G є функцією на просторі конфігурацій Γ_0 ($G : \Gamma_0 \rightarrowtail \mathbb{R}$) такою, що

$$G \upharpoonright \Gamma_0^{(n)} \ = \ G^{(n)}(\{x_1, ..., x_n\}) \ := \ G_n(x_1, ..., x_n), \ \ G_n \in C_0(\mathbb{R}^{dn}). \tag{3.3.40}$$

Тоді

$$< G^{(1)}, \gamma > := \sum_{x_1 \in \gamma} < G^{(1)}, \delta_{x_1} > = \sum_{x_1 \in \gamma} G_1(x_1). \tag{3.3.41}$$

Степінь n визначають формулою

$$< G^{(n)}, : \gamma^{\otimes n} :> := \sum_{\{x_1,...,x_n\} \subset \gamma} G_n(x_1, ..., x_n). \tag{3.3.42}$$

Тоді аналогом формули моментів є вираз

$$\int_\Gamma < G^{(n)}, : \gamma^{\otimes n} :> \mu(d\gamma) := \int_{\mathbb{R}^{dn}} G_n(x_1, ..., x_n) \rho^{(n)} \left(dx_1, ..., dx_n\right). \tag{3.3.43}$$

Функцію $\rho^{(n)}$ будемо називати кореляційною мірою міри μ на $\Gamma^{(n)}$. Якщо кореляційна міра $\rho^{(n)}$ є абсолютно неперервною відносно міри Лебега в $\mathbb{R}^{dn}$, то її щільність визначає відповідну кореляційну функцію

$$\rho^{(n)} \left((\sigma(dx_1), ..., \sigma(dx_n)\right) := \frac{1}{n!} \rho_n(x_1, ..., x_n) \sigma(dx_1) \cdots \sigma(dx_n),$$
$$\rho_n(x_1, ..., x_n) := \rho(\eta) \upharpoonright \Gamma^{(n)}, \ \eta = \{x_1, ..., x_n\} := \{(x)_1^n\}. \tag{3.3.44}$$

З урахуванням (3.3.42) формулу (3.3.43) можна записати у вигляді

$$\int_\Gamma \sum_{\{x_1,...,x_n\} \subset \gamma} G_n(x_1, ..., x_n) \mu(d\gamma) = \tag{3.3.45}$$
$$= \int_{\mathbb{R}^{dn}} G_n(x_1, ..., x_n) \rho^{(n)} \left((\sigma(dx_1), ..., \sigma(dx_n)\right).$$

Кореляційну міру тепер можна визначити на просторі усіх скінченних конфігурацій Γ_0, просумувавши рівність (3.3.45) за всіма $n \geq 0$. Тоді з (3.3.45) отримуємо формулу

$$\int_\Gamma \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{(x)_1^n\}\subset\gamma} G_n(x)_1^n \mu(d\gamma) := \int_\Gamma \sum_{\eta\Subset\gamma} G(\eta)\mu(d\gamma) = \int_{\Gamma_0} G(\eta)\rho(d\eta), \tag{3.3.46}$$

а у випадку (3.3.44)

$$\int_\Gamma \sum_{\eta\Subset\gamma} G(\eta)\mu(d\gamma) = \int_{\Gamma_0} G(\eta)\rho(\eta)\lambda_\sigma(d\eta), \tag{3.3.47}$$

де значок $\eta \Subset \gamma$ означає сумування за усіми скінченними підмножинами η нескінченної конфігурації γ. Підставивши в (3.3.46) $G = 1\!\!1_A$, $A \in \mathcal{B}(\Gamma_0)$, отримуємо вигляд кореляційної міри на $\mathcal{B}(\Gamma_0)$:

$$\rho_\mu(A) = \rho(A) \ = \int_\Gamma \sum_{\eta\Subset\gamma} 1\!\!1_A(\eta)\mu(d\gamma). \tag{3.3.48}$$

Щоб знайти вираз для кореляційних функцій, як у просторі Γ_0, так і в Γ_Λ, $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$, введемо нове поняття для міри μ, яка є мірою Гіббса, побудованою за потенціалом V ($\mu \in \mathcal{G}_V$).

Означення 3.3. *Міру μ називають локально абсолютно неперервною відносно міри $\lambda_{z\sigma}$, якщо для будь-якого $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ міра $\mu^\Lambda = \mu \circ p_\Lambda^{-1}$ є абсолютно неперервною відносно міри $\lambda_{z\sigma}^\Lambda$, тобто існує похідна Радона–Нікодима:*

$$\frac{d\mu^\Lambda}{d\lambda_{z\sigma}^\Lambda}(\gamma).$$

Наступна лема визначає цю похідну для $\mu \in \mathcal{G}_V$:

Лема 3.3.1. *Нехай $\mu \in \mathcal{G}_V$. Тоді вона є локально абсолютно неперервною відносно $\lambda_{z\sigma}$ і*

$$\frac{d\mu^\Lambda}{d\lambda_{z\sigma}^\Lambda}(\eta) \ = \int_{\Gamma_{\Lambda^c}} e^{-\beta U(\eta)-\beta W(\eta;\gamma)}\mu(d\gamma). \tag{3.3.49}$$

Доведення. Нехай F є додатною $\mathcal{B}_\Lambda(\Gamma)$-вимірною функцією. Тоді існує $\mathcal{B}(\Gamma_\Lambda)$-вимірна функція f така, що $F = f \circ p_\Lambda$ ($F(\gamma) = f(\gamma_\Lambda)$). За означенням проєкції міри

$$\int_\Gamma F(\gamma)\mu(d\gamma) \;=\; \int_{\Gamma_\Lambda} f(\eta)\mu^\Lambda(d\eta).$$

Скористаємося тим, що міра μ є гіббсовою і задовольняє рівняння Рюеля (3.1.24). Тоді

$$\begin{aligned}\int_\Gamma F(\gamma)\mu(d\gamma) &= \int_{\Gamma_\Lambda}\left[\int_{\Gamma_{\Lambda^c}} F(\eta\cup\gamma)e^{-\beta U(\eta|\gamma)}\mu(d\gamma)\right]\lambda_{z\sigma}(d\eta) = \\ &= \int_{\Gamma_\Lambda} f(\eta)\left[\int_{\Gamma_{\Lambda^c}} e^{-\beta U(\eta)-\beta W(\eta;\gamma)}\mu(d\gamma)\right]\lambda_{z\sigma}(d\eta).\end{aligned} \tag{3.3.50}$$

Враховуючи, що за визначенням похідної Радона–Нікодима

$$\int_{\Gamma_\Lambda} f(\eta)\mu^\Lambda(d\eta) \;=\; \int_{\Gamma_\Lambda} f(\eta)\frac{d\mu^\Lambda}{d\lambda^\Lambda_{z\sigma}}(\eta)\lambda_{z\sigma}(d\eta), \tag{3.3.51}$$

і, порівнюючи (3.3.51) з (3.3.50), отримуємо (3.3.49). ■

Сформулюємо основну лему цього підрозділу.

Лема 3.3.2. *Нехай* $\mu \in \mathcal{G}_V$ *і для будь-якого* $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ *існує стала* $C_\Lambda > 0$ *така, що*

$$\frac{d\mu^\Lambda}{d\lambda^\Lambda_{z\sigma}}(\eta) \;=\leq C_\Lambda^{|\eta|}.$$

Тоді кореляційна міра (3.3.48) *є абсолютно неперервною відносно міри* $\lambda_{z\sigma}$*, а її щільність виражається кореляційним функціоналом такого вигляду:*

$$\rho(\eta) \;=\; z^{|\eta|}\int_\Gamma e^{-\beta U(\eta)-\beta W(\eta;\gamma)}\mu(d\gamma). \tag{3.3.52}$$

Доведення. Передусім зауважимо, що для будь-якого $A \in \mathcal{B}_c(\Gamma_0)$ існує $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ таке, що функція $\sum_{\eta\subset\gamma} 1\!\!1_A(\eta)$ є $\mathcal{B}_\Lambda(\Gamma_0)$-вимірною, а

$$\rho(A) = \int_{\Gamma_\Lambda} \sum_{\eta\subset\gamma} 1\!\!1_A(\eta)\mu^\Lambda(d\gamma) = \int_{\Gamma_\Lambda} \sum_{\eta\subset\gamma} 1\!\!1_A(\eta)\frac{d\mu^\Lambda}{d\lambda^\Lambda_{z\sigma}}(\gamma)\lambda^\Lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{3.3.53}$$

Застосувавши до правої частини (3.3.53) лему 1.2.3 (рівність (1.2.25)) з

$$G(\gamma) = \frac{d\mu^\Lambda}{d\lambda^\Lambda_{z\sigma}}(\gamma),\ H(\eta, \gamma \setminus \eta)) = 1\!\!1_A(\eta)1\!\!1_{\Gamma_\Lambda}(\gamma \setminus \eta),$$

отримуємо

$$\rho(A) = \int_{\Gamma_\Lambda}\int_{\Gamma_\Lambda} 1\!\!1_A(\eta)\frac{d\mu^\Lambda}{d\lambda^\Lambda_{z\sigma}}(\eta\cup\gamma)\lambda^\Lambda_{z\sigma}(d\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\eta).$$

Тоді з (3.3.46)–(3.3.47) для $G = 1\!\!1_A$, $A \in \mathcal{B}(\Gamma_\Lambda)$

$$\rho(\eta) = z^{|\eta|}\int_{\Gamma_\Lambda} \frac{d\mu^\Lambda}{d\lambda^\Lambda_{z\sigma}}(\eta\cup\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{3.3.54}$$

Підставимо в (3.3.54) вираз (3.3.49). Тоді

$$\rho(\eta) = z^{|\eta|}\int_{\Gamma_\Lambda}\int_{\Gamma_{\Lambda^c}} e^{-\beta U(\eta\cup\gamma)-\beta W(\eta\cup\gamma;\xi)}\mu(d\xi)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \tag{3.3.55}$$
$$= z^{|\eta|}\int_{\Gamma_\Lambda}\int_{\Gamma_{\Lambda^c}} e^{-\beta U(\eta)-\beta W(\eta;\gamma\cup\xi)}e^{-\beta U(\gamma)-\beta W(\gamma;\xi)}\mu(d\xi)\lambda_{z\sigma}(d\gamma).$$

Застосовуючи в останньому виразі (3.3.55) РР (3.1.24), одержуємо (3.3.52). ■

На завершення наведемо вираз для кореляційних функцій, що відповідають умовному розподілу Гіббса (див. (3.1.21)–(3.1.22)) в обмеженому об'ємі Λ та фіксованих граничних конфігураціях $\bar\gamma \in \Gamma_{\Lambda^c}$:

$$\rho_\Lambda(\eta \mid \bar\gamma) = \frac{z^{|\eta|}}{\Xi_\Lambda(\bar\gamma)}\int_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\eta\cup\gamma|\bar\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma),\ \rho_\Lambda(\eta) = \rho_\Lambda(\eta \mid \{\emptyset\}), \tag{3.3.56}$$

тобто замість $\mu(d\gamma)$ у (3.3.52) треба підставити умовну міру

$$d\mu_\Lambda(\gamma \mid \bar{\gamma}_{\Lambda^c}) = \frac{e^{-\beta U(\gamma|\bar{\gamma}_{\Lambda^c})}}{\Xi_\Lambda(\bar{\gamma}_{\Lambda^c})}\lambda_{z\sigma}(d\gamma).$$

3.3.2. Пуассонівські поля та їх регуляризація

У теорії евклідових квантованих полів (див., наприклад, [37, розд. 29.2]) поля визначаються операторнозначними узагальненими функціями на просторі Шварца $\mathcal{S}(\mathbb{R}^4)$. Вільне евклідове скалярне поле можна також визначити як узагальнений гауссовий процес, індексований функціями $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^4)$ [176]. Віківську регуляризацію розглядають як процедуру ортогоналізації мономів вільного евклідового (або гауссового) поля [177] (див. також [1]).

За аналогією з гауссовим полем можна ввести поняття *пуассонівського* поля як лінійного неперервного функціонала на просторі $C_0(\mathbb{R}^d)$. Розглянемо відображення

$$\gamma = \{x_1, \ldots, x_n, \ldots\} \mapsto \gamma(x) = \sum_{i=1}^{\infty} \delta(x - x_i). \qquad (3.3.57)$$

Тоді

$$< \gamma, f > := \gamma(f) = \int_{\mathbb{R}^d} f(x)\gamma(x)dx = \sum_{x\in\gamma} f(x). \qquad (3.3.58)$$

Відповідно до праці [135] введемо перетворення функцій $F \in \in L^2(\Gamma, \pi_\sigma)$ за формулою

$$(UF(\cdot))(f) := l_{\pi_\sigma}(f)^{-1} \int_\Gamma e^{i<\gamma,f>} F(\gamma)\pi_\sigma(d\gamma),\ f \in C_0(\mathbb{R}^d),$$

де $l_{\pi_\sigma}(f)$ визначено формулою (1.2.22), а точка означає місце аргументу функції F, за яким у правій частині виконується інтегрування за мірою π_σ. Наприклад, для функції $F(\gamma) = = \exp[< \gamma, \log(1 + g) >]$, яку визначено для довільних функцій

$g \in C_0(\mathbb{R}^d)$ з $|g| < 1$, функцію UF легко розрахувати, використовуючи формулу (1.2.22):

$$\left(U \exp[< \cdot, \log(1+g) >]\right)(f) = \exp\left[\int_{\mathbb{R}^d} e^{if(x)} g(x)dx\right].$$

Унаслідок щільності лінійної оболонки експоненціальних векторів $\{e^{i<\gamma,f>} \mid f \in C_0(\mathbb{R}^d)\}$ у $L^2(\Gamma, \pi_\sigma)$ ([136, теорема 3]) з рівності $UF = 0$ випливає, що $U \equiv 0$, тобто існування оберненого перетворення U^{-1}, яке на функціоналах вигляду $G[f] = \exp[\int_{\mathbb{R}^d} e^{if(x)} g(x)dx]$, де $f, g \in C_0(\mathbb{R}^d)$, а $|g| < 1$, задається формулою

$$\left(U^{-1} G[\cdot]\right)(\gamma) = \exp[< \gamma, \log(1+g) >]. \tag{3.3.59}$$

Якщо тепер визначити функцію F так, що $G[f] = F(e^f)$, то віківську регуляризацію визначають [135] за формулою

$$: F(\gamma) : := \left(U^{-1} F(e^{i\cdot}\right)(\gamma). \tag{3.3.60}$$

З формул (3.3.59) і (3.3.60) та визначень функцій G і F випливає, що

$$: e^{<\gamma, g>} : = \exp[< \gamma, \log(1+g) >]. \tag{3.3.61}$$

З цієї формули можна отримати вираз для віківських мономів. Виберемо для цього функцію g у вигляді $g = \sum_{j=1}^k \alpha_j g_j$ і $g_j \in C_0(\mathbb{R}^d)$ та з достатньо малими α_j, $j = 1, \ldots, k$, для того, щоб $|g| < 1$. Тоді

$$: \prod_{j=1}^k < \gamma, g_j > := \frac{\partial^k}{\partial \alpha_1 \cdots \partial \alpha_k} \exp[< \gamma, \log(1 + \sum_{j=1}^k \alpha_j g_j) >]|_{\alpha_1 = \ldots = \alpha_k = 0}. \tag{3.3.62}$$

Легко перевірити, що таке визначення віківських мономів збігається з визначенням за формулою (3.3.42), в якій треба вибрати функцію G у вигляді

$$G_n(x_1, ..., x_n) = \sum_{\pi \in \mathcal{P}_n} g_1(x_{\pi(1)}) \cdots g_n(x_{\pi(n)}).$$

Формулу Кемпбелла–Мекке (1.2.23) (див. [73, 74, 172]) для функцій F, $G \in L^2(\Gamma, \pi_\sigma)$ можна записати так:

$$\int_\Gamma :<\gamma,\varphi>G(\gamma):F(\gamma)\pi_\sigma(d\gamma) \ = \tag{3.3.63}$$
$$= \int_\Gamma \int_{\mathbb{R}^d} \varphi(x) :G(\gamma): F(\gamma \cup \{x\})\sigma(dx)\pi_\sigma(d\gamma),\ \varphi \in C_0(\mathbb{R}^d).$$

Доведення для функцій вигляду $F(\gamma) = e^{i<\gamma,f>}, f \in C_0(\mathbb{R}^d)$ і $G(\gamma) = e^{i<\gamma,g>}, g \in C_0(\mathbb{R}^d)$ виконується аналогічно з використанням формул (3.3.61), (1.2.22). Скористаємося формулою (3.3.63), зробивши заміни: $\pi_\sigma \to \lambda_{z\sigma}$, $\Gamma \to \Gamma_\Lambda$, $:<\gamma,\varphi> G(\gamma) : F(\gamma) \to$ $\to: \prod_{j=1}^m <\gamma, g_j>: \Xi_\Lambda^{-1}\exp[-\beta U(\gamma)]$. Тоді кореляційну функцію $\rho_\Lambda(\eta) = \rho_\Lambda(\{x_1,\ldots,x_m\}) := \rho_m^\Lambda(x_1,\ldots,x_m)$ (див. (3.3.56)) можна записати у вигляді віківських моментів пуассонівських полів (3.3.57):

$$\rho_m^\Lambda(x_1,\ldots,x_m) \ = \ \frac{1}{\Xi_\Lambda}\int_{\Gamma_\Lambda} :\gamma(x_1)\cdots\gamma(x_m): e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{3.3.64}$$

3.3.3. Локальні спостережувані та кореляційні функції

Локально спостережувані величини визначено в підрозд. 3.1.1.

Ураховуючи формули (3.3.46), (3.3.47), вираз (3.1.2) для середніх від функцій (3.1.3) можна записати у вигляді

$$<F_B>_\mu = \int_\Gamma F_B(\gamma)\mu(d\gamma) = \int_{\Gamma_0} f_B(\eta)\rho(\eta)\lambda_\sigma(d\eta). \tag{3.3.65}$$

Отже, знаючи вираз для кореляційної функції, можна обчислити середні спостережуваних величин, обраховуючи інтеграли за мірою Лебега–Пуассона.

Зауваження 3.7. *Визначення кореляційних функцій, яке наведено вище формулами* (3.3.43), (3.3.44)*, належить Ленарду*

[163–165]. Таке визначення істотно мотивоване виглядом спостережуваних величин (3.1.3)*. Ленард також визначив оператор S як відображення функцій G (див.* (3.3.40)*) на Γ_0 у функції SG на Γ:*

$$(SG)(\gamma) = \sum_{\eta \Subset \gamma} G(\eta).$$

Таке відображення дало поштовх до створення гармонійного аналізу на просторах локально скінченних конфігурацій [144] (див. також [154]) за аналогією до співвідношення гільбертового простору квадратично інтегровних функцій на $\mathbb{R}^1$ та простору l_2 квадратично сумовних послідовностей, який можна розглядати як відповідний простір коефіцієнтів Фур'є.

3.3.4. Степеневі розклади для кореляційних функцій

Виходячи з вигляду кореляційних функцій для системи, що знаходиться в обмеженому об'ємі Λ, тобто з (3.3.56) за порожніх граничних умов $\bar{\gamma} = \emptyset$, побудуємо передусім розклад для великої статистичної суми Ξ_Λ. Фактор Больцмана запишемо у вигляді

$$e^{-\beta U(\gamma)} = \begin{cases} 1 & \text{для } |\gamma| = 0 \vee 1, \\ \prod_{\{x,y\} \subset \gamma} (C_{xy} + 1) & \text{для } |\gamma| \geq 2, \end{cases} \tag{3.3.66}$$

де $C_{xy} := e^{-\beta \phi_{xy}} - 1$, $\phi_{xy} := \phi(|x-y|)$.

Добуток у (3.3.66) можна записати як суму внесків графів, вершинами яких є точки (координати) конфігурації γ. Аналітичним внеском вершини є одиниця, а внеском лінії $l = l_{xy}$, що з'єднує вершини $x, y \in \gamma$, є функція C_{xy}. Тому внесок довільного графа можна записати як добуток функцій $C_{l_{xy}} = C_{xy}$, що відповідають множині $\mathcal{L}(\mathcal{G})$ усіх внутрішніх ліній графа G. Зрозуміло, що для кожної конфігурації $\gamma \in \Gamma_\Lambda$ добуток у (3.3.66) включає в себе $2^{N(N-1)/2}$ графів, де $N = |\gamma|$. Якщо позначити довільний граф літерою $G = G(\gamma)$, а всю множину графів літерою $\mathcal{G}(\gamma)$, фактор Больцмана можна записати так:

$$e^{-\beta U(\gamma)} = \sum_{G \in \mathcal{G}(\gamma)} \prod_{\{x,y\} \in \mathcal{L}(G)} C_{xy}. \tag{3.3.67}$$

Кожний граф G можна представити як композицію k графів $G_i^T(i \in \{1, \ldots, k\})$, які є зв'язними графами:

$$G = G_1^T * \cdots * G_k^T.$$

Число k називають *порядком незв'язності* графа G ($1 \leq k$, $N = |\gamma|$). Графи з порядком незв'язності $k = 1$ є зв'язними графами. Внесок довільного графа G є добутком k внесків графів G_i^T, $i = \overline{1, k}$. З кожним графом $G \in \mathcal{G}$ можна пов'язати розбиття конфігурації γ на підмножини (підконфігурації) $\{\gamma_1, \ldots, \gamma_k\}$, які задовольняють умови (1.4.40), для кожного розбиття існує багато графів G з однаковим порядком незв'язності k.

У сумі (3.3.67) виконаємо наступне пересумування. Розіб'ємо суму (3.3.67) на $N = |\gamma|$ груп, кожна з яких має фіксований порядок незв'язності. Тоді множина графів з фіксованим k в свою чергу ділиться на групи-множини, графи кожної з яких мають вершини, що відповідають розбиттю конфігурації γ на k підконфігурацій $\{\gamma_1, \ldots, \gamma_k\}$. Останній крок у цьому пересумуванні такий. Спершу просумуємо усі графи, які мають однаковий внесок, що відповідає розбиттю $\{\gamma_2, \ldots, \gamma_k\}$, і різні внески, які відповідають γ_1. Як наслідок отримуємо суму внесків, кожен з яких має однаковий множник:

$$\Phi^T(\gamma_1) = \begin{cases} 0 & \text{для } \gamma_1 = \emptyset, \\ 1 & \text{для } |\gamma_1| = 1, \\ \sum_{G^T \in \mathcal{G}^T(\gamma_1)} \prod_{\{x,y\} \in \mathcal{L}(G^T)} C_{xy} & \text{для } |\gamma_1| \geq 2, \end{cases} \tag{3.3.68}$$

де $\mathcal{G}^T(\gamma_1)$ — внесок усіх зв'язних графів з вершинами в точках конфігурації γ_1. Функції $\Phi^T(\gamma)$ називають *функціями Урсела* (див. [43, підрозд. 4.4.2]). Далі просумувавши усі внески графів з однаковими множниками, що відповідають розбиттю $\{\gamma_3, \ldots, \gamma_k\}$ і різним внескам, що відповідають γ_2 і т.д., одержимо вираз

$$e^{-\beta U(\gamma)} = \sum_{k=1}^{|\gamma|} \sum_{\{\gamma_1, \ldots, \gamma_k\} \subset \gamma}^{*} \Phi^T(\gamma_1) \cdots \Phi^T(\gamma_k), \tag{3.3.69}$$

де суму з зірочкою визначено в (1.4.39). А для великої статистичної суми будемо мати

$$\Xi_\Lambda(z,\beta) := \int_{\Gamma_\Lambda} \sum_{k=1}^{|\gamma|} \sum_{\{\gamma_1,\dots,\gamma_k\}\subset\gamma}^{*} \Phi^T(\gamma_1)\cdots\Phi^T(\gamma_k)\lambda_{z\sigma}(d\gamma).$$

Щоб застосувати теорему 1.4.1 з $F(\gamma) = \Phi^T(\gamma)$, необхідно встановити оцінку для $\Phi^T(\gamma)$. Таку оцінку наведено в праці Рюеля [43, розд. 4, підрозд. 4.4.6]:

$$\int_\Lambda \cdots \int_\Lambda |\Phi^T(x)_1^n| dx_2 \cdots dx_n \ \le\ (n-1)! e^{-2\beta B} \left(e^{2\beta B+1} C(\beta) \right)^{n-1}.$$

Застосувавши теорему 1.4.1 з $C_\Lambda = \sigma(\Lambda) C(\beta)^{-1} e^{-4\beta B-1}$ і $c = e^{2\beta B+1} C(\beta)$, запишемо велику статистичну суму:

$$\Xi_\Lambda(z,\beta) \ =\ e^{\int_{\Gamma_\Lambda} \Phi^T(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)}. \tag{3.3.70}$$

Щоб записати аналогічний вираз для кореляційних функцій $\rho_\Lambda(\eta)$, подамо енергію $U(\eta\cup\gamma)$ так:

$$U(\eta\cup\gamma) \ =\ U(\eta) \ +\ W(\eta;\gamma) \ +\ U(\gamma)$$

і скористаємось тим, що з рівняння (3.3.69) випливає

$$e^{-\beta W(\eta;\gamma)} e^{-\beta U(\gamma)} \ =\ \sum_{k=1}^{|\gamma|} \sum_{\{\gamma_1,\dots,\gamma_k\}\subset\gamma}^{*} \widetilde{\Phi}_\eta^T(\gamma_1)\cdots\widetilde{\Phi}_\eta^T(\gamma_k)$$

з $\widetilde{\Phi}_\eta^T(\gamma_i) = e^{-\beta W(\eta;\gamma_i)} \Phi^T(\gamma_i)$. Тоді, застосувавши ту саму теорему, отримаємо вираз

$$\rho_\Lambda(\eta) \ =\ z^{|\eta|} e^{-\beta U(\eta)} e^{\int_{\Gamma_\Lambda} \Phi^T(\gamma)\left(e^{-\beta W(\eta;\gamma)}-1\right)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)} := z^{|\eta|} e^{-\beta U(\eta)} e^{I_\Lambda(\Phi)}.$$

Урахуємо тепер, що

$$e^{-\beta W(\eta;\gamma)} - 1 \ =\ \sum_{\xi\subseteq\gamma} \widetilde{K}(\eta;\xi),$$

де

$$\widetilde{K}(\eta;\xi) := \begin{cases} \prod_{y\in\xi}(e^{-\beta W(\eta;y)}-1), |\xi|\geq 1, \\ 0,\ \xi=\emptyset. \end{cases}$$

Тоді

$$I_\Lambda(\Phi) = \int_{\Gamma_\Lambda} \Phi^T(\gamma)\sum_{\xi\subseteq\gamma}\widetilde{K}(\eta;\xi)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)$$

і згідно з тотожністю (1.2.25) маємо

$$I_\Lambda(\Phi) = \int_{\Gamma_\Lambda}\int_{\Gamma_\Lambda} \Phi^T(\xi\cup\gamma)\widetilde{K}(\eta;\xi)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\xi). \qquad (3.3.71)$$

Оскільки $\widetilde{K}(\eta;\emptyset)=0$, то у виразі (3.3.71) можна перейти до границі $\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d$ за малих значень z, β. Питання існування термодинамічного граничного переходу детально досліджуватиметься в наступних розділах.

3.3.5. Фізичні кореляції між частинками та функції, що їх описують

Насправді кореляційні функції є щільностями кореляційних мір (див. (3.3.43)–(3.3.44)). Справжні кореляції між частинками повинні зникати, якщо відстані між ними прямуватимуть до безмежності. Тоді 2-частинкова кореляційна функція перетвориться на добуток двох одночастинкових, тобто функція

$$\rho^T(\{x_1,x_2\}) = \rho_2^T(x_1,x_2) := \rho_2(x_1,x_2) - \rho_1(x_1)\rho_1(x_2)$$

буде описувати справжню кореляцію між частинками, що взаємодіють. Її називають *зв'язною* парною кореляційною функцією. У випадку 3-, 4- і т.д. n-частинок ці функції визначаються такими рекурентними співвідношеннями:

$$\rho^T(\eta) = \rho(\eta) - \sum_{k=2}^{|\eta|}\sum_{\{\eta_1,\ldots,\eta_k\}\subset\eta}^{*}\rho^T(\eta_1)\rho^T(\eta_2)\cdots\rho^T(\eta_k), \quad (3.3.72)$$

що встановлюють залежність ρ^T від ρ:

$$\rho^T(\eta) \;=\; \sum_{k=1}^{|\eta|}(-1)^{k-1}(k-1)! \sum^{*}_{\{\eta_1,\ldots,\eta_k\}\subset\eta} \rho(\eta_1)\rho(\eta_2)\cdots\rho(\eta_k), \tag{3.3.73}$$

яку називають *оберненим перетворенням Мьобіуса* (див., наприклад, [26, розд. 6.2]), а іноді — *семіінваріантами* (див., наприклад, [61]).

Зв'язок між функціями $\rho(\eta)$ і $\rho^T(\eta)$ зручно задати за допомогою твірних функціоналів для цих функцій.

3.3.6. Алгебра твірних функціоналів

Твірний функціонал функцій $\psi(\eta)$, $\eta \in \Gamma_0$, є таким:

$$\begin{aligned} F_\psi(j) \;&=\; \sum_{N=0}^{\infty}\frac{1}{N!}\int_{\mathbb{R}^{dN}}(dx)^N j(x_1)\cdots j(x_N)\psi(x_1,\ldots,x_N) = \\ &=\; \int_{\Gamma_0} e_\lambda(j;\gamma)\psi(\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma), \end{aligned} \tag{3.3.74}$$

де функцію

$$e_\lambda(j;\emptyset) \;=\; 1,\;\; e_\lambda(j;\eta) := \prod_{x\in\eta} j(x),\;\; |\eta|\geq 1, \tag{3.3.75}$$

називають когерентним станом у просторі $L^2(\Gamma_0,\lambda_\sigma)$ (див., наприклад, [154]), бо

$$\int_{\Gamma_0} e_\lambda(j;\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma) \;=\; e^{<j,\sigma>},\;\; <j,\sigma>=\int j(x)dx.$$

Легко перевірити, використовуючи знову тотожність (1.2.25), що звичайний добуток

$$F_{\psi_1}(j)F_{\psi_2}(j) \;=\; F_{\psi_1*\psi_2}(j), \tag{3.3.76}$$

де $\psi_1 * \psi_2$ є добутком ψ_1 на ψ_2 у комутативній алгебрі $\mathcal{A}$, яку ввів Рюель (див. [43, розд. 4]):

$$(\psi_1 * \psi_2)(\gamma) = \sum_{\xi \subseteq \gamma} \psi_1(\xi)\psi_2(\gamma \setminus \xi).$$

Тому формула (3.3.76) встановлює відповідність між алгеброю твірних функціоналів (3.3.74) і алгеброю $\mathcal{A}$.

Визначимо оператор

$$\widehat{D}_\eta F_\psi(j) := \int_{\Gamma_0} e_\lambda(j;\gamma)\psi(\eta \cup \gamma)\lambda_\sigma(d\gamma) \; = \; F_{D_\eta \psi}(j),$$

де $D_\eta = \prod_{x \in \eta} D_x$, а D_x — рюелівський оператор диференціювання в алгебрі $\mathcal{A}$. Зрозуміло, що

$$\psi(\eta) \; = \; \widehat{D}_\eta F_\psi(j)|_{j=0}.$$

Підставляючи у формулу (3.3.74) з $\psi = \rho$ вираз ρ через функції ρ^T з (3.3.72) і знову застосовуючи теорему 1.4.1, отримуємо

$$F_\rho(j) \; = \; e^{F_{\rho^T}(j)}. \tag{3.3.77}$$

3.3.7. Розклад Майєра для зв'язних кореляційних функцій

Підставимо у формулу (3.3.74) з $\psi = \rho_\Lambda$ вираз ρ_Λ (3.3.56) з $\bar{\gamma} = \emptyset$, тобто

$$\rho_\Lambda(\eta) \; = \; \frac{z^{|\eta|}}{\Xi_\Lambda} \int_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\eta \cup \gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{3.3.78}$$

Тоді

$$F_{\rho_\Lambda}(j) \; = \; \int_{\Gamma_\Lambda} e_\lambda(j;\eta) \frac{z^{|\eta|}}{\Xi_\Lambda} \int_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\eta \cup \gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma)\lambda_\sigma(d\eta).$$

Застосувавши до правої частини тотожність (1.2.25) з $G(\eta \cup \gamma) = z^{|\eta \cup \gamma|} e^{-\beta U(\eta \cup \gamma)}$ і $H(\eta, \gamma) = e_\lambda(j;\eta)\mathbb{1}_\Lambda(\gamma)$ і врахувавши, що

$$\sum_{\eta \subseteq \gamma} e_\lambda(j;\eta) = \sum_{\eta \subseteq \gamma} \prod_{x \in \eta} j(x) = \prod_{x \in \gamma} (1 + j(x)) = e_\lambda(1 + j;\gamma),$$

отримаємо вираз

$$F_{\rho_\Lambda}(j) \;=\; \frac{1}{\Xi_\Lambda}\int_{\Gamma_\Lambda} e_\lambda(1+j;\gamma)e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \qquad (3.3.79)$$

Замість експоненти підставимо праву частину формули (3.3.69), а функцію e_λ запишемо так:

$$e_\lambda(1+j;\gamma) \;=\; \prod_{l=1}^{k} e_\lambda(1+j;\gamma_l).$$

Знову застосуємо теорему 1.4.1 з функцією

$$F(\gamma) \;=\; e_\lambda(1+j;\gamma)\Phi^T(\gamma).$$

Тоді (3.3.79) набуде вигляду

$$F_{\rho_\Lambda}(j) \;=\; \frac{1}{\Xi_\Lambda}e^{\int_{\Gamma_\Lambda} e_\lambda(1+j;\gamma)\Phi^T(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)}.$$

Ураховуючи (3.3.57) і (3.3.77), отримуємо

$$F_{\rho^T_\Lambda}(j) \;=\; \int_{\Gamma_\Lambda} e_\lambda(1+j;\gamma)\Phi^T(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) \;-\; \int_{\Gamma_\Lambda}\Phi^T(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma).$$

Використаємо знову тотожність

$$e_\lambda(1+j;\gamma) = \sum_{\eta\subseteq\gamma} e_\lambda(j;\eta)$$

та формулу (1.2.25). Як наслідок, маємо

$$F_{\rho^T_\Lambda}(j) \;=\; \int_{\Gamma_\Lambda\backslash\emptyset} e_\lambda(j;\eta)\left[\int_{\Gamma_\Lambda}\Phi^T(\eta\cup\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)\right]\lambda_{z\sigma}(d\eta).$$

Ураховуючи означення твірного функціонала (3.3.74), для функцій ρ^T_Λ остаточно одержуємо розклад

$$\rho^T_\Lambda(\eta) \;=\; z^{|\eta|}\int_{\Gamma_\Lambda}\Phi^T(\eta\cup\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma),$$

де функцію Урсела Φ^T визначено формулою (3.3.68).

3.3.8. Розклад Бріджеса–Федербуша для систем з посилено надстійкою взаємодією

У цьому підрозділі наведено ще один варіант розкладів, який запропонували Бріджес і Федербуш [70]. Особливістю методу є нова форма запису коефіцієнтів розкладу, аналітичний вигляд яких описується внесками від графів-дерев на відміну від майєрівських графів. Аналітичним внеском кожної лінії, що з'єднує дві вершини $x \in \mathbb{R}^d$ і $y \in \mathbb{R}^d$ такого графа, є парний потенціал взаємодії $\phi(|x-y|)$, який повинен бути інтегровним. У методі Бріджеса–Федербуша значно спрощується доведення збіжності рядів у області малих значень параметра активності.

Розглянемо системи точкових частинок, які взаємодіють з неінтегровним в околі нуля потенціалом. Оскільки потенціали таких взаємодій не є інтегровними, то безпосередньо застосувати метод Бріджеса–Федербуша до таких систем не можна. У праці [70] запропоновано ідею побудови такого розкладу, коли потенціал складається зі стійкого інтегровного потенціалу та деякого неінтегровного додатного швидко спадного потенціалу, але самі розклади не було побудовано. Посилено надстійкі потенціали, які розглядаються, не задовольняють ці вимоги. Тому потрібно застосувати деякі проміжні технічні конструкції, щоб коректно побудувати цей розклад. Тут пророблено цю технічну роботу та доведено збіжність побудованих розкладів (див., також, [6]).

Представимо велику статистичну суму $\Xi_\Lambda = \Xi_\Lambda(z,\beta)$ у вигляді

$$\Xi_\Lambda = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Z_\Lambda(N). \tag{3.3.80}$$

Тут

$$Z_\Lambda(N) = \int_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} e^{-\beta U_\phi(\gamma)} \lambda_\sigma(d\gamma) = \frac{1}{N!}\int_{\Lambda^N} (dx)^N e^{-\beta U_\phi^{(N)}}, \tag{3.3.81}$$

де для $\gamma = \{x_1, ..., x_N\}$, $|\gamma| = N$, а

$$U_\phi^{(N)} := U_\phi(\{x_1, ..., x_N\}) = \sum_{1\le i<j\le N} \phi(|x_i - x_j|) := \sum_{1\le i<j\le N} \phi_{ij}.$$

Перш ніж побудувати розклад Бріджеса–Федербуша, зробимо деяке проміжне розбиття потенціалу ϕ. Нехай v — інтегровний позитивний потенціал, такий що

$$w(|x|) \;:=\; \phi^{+}(|x|) \;-\; v(|x|) \;\geq 0, \text{ для всіх } x \in \mathbb{R}^d,$$

а потенціал

$$\varphi \;=\; v \;+\; \phi^{-}$$

є стійким, тобто

$$U_{\varphi}(\gamma) \;=\; \sum_{\{x,y\}\subset\gamma} \varphi(|x-y|) \;\geq\; -B_1|\gamma| \tag{3.3.82}$$

з деякою сталою $B_1 \geq 0$. Тоді

$$\phi \;=\; w \;+\; \varphi,\; U(\gamma) \;=\; U_{\phi}(\gamma) \;=\; U_w(\gamma) \;+\; U_{\varphi}(\gamma).$$

Введемо параметри інтенсивності взаємодії. Нехай s_k $(0 \leq$ $\leq s_k \leq 1)$ характеризує інтенсивність взаємодії перших k частинок з рештою $N-k$ частинками.

Спершу підставимо параметр s_1 у вираз для $U_{\varphi}^{(N)}$ так, щоб при $s_1 = 0$ взаємодія 1-ї частинки з іншими $N-1$ частинками виключалася, а при $s_1 = 1$ зберігалася повна енергія взаємодії всіх N частинок. Тоді при $0 < s_1 < 1$ енергію $U_{\varphi}^{(N)}$ позначимо як

$$V_1^{(N)}(s_1) = (1-s_1)V_0^{(N),(1)} + s_1 V_0^{(N)}, \tag{3.3.83}$$

де

$$V_0^{(N),(1)} = U_{\varphi}^{(1)} + U_{\varphi}^{(N-1)},\; V_0^{(N)} = U_{\varphi}^{(N)}. \tag{3.3.84}$$

Далі в цей вираз підставимо параметр s_2, відокремлюючи 1-шу і 2-гу частинки від $N-2$ частинок, що залишилися. Як наслідок, отримаємо вираз

$$V_2^{(N)}(s_1,s_2) = (1-s_2)V_1^{(N),(2)}(s_1) + s_2 V_1^{(N)}(s_1), \tag{3.3.85}$$

де

$$V_1^{(N-2),(2)}(s_1) = V_1^{(N)}(s_1) + U_{\varphi}^{(N-2)}. \tag{3.3.86}$$

Після k-го кроку одержимо рекурентне співвідношення:

$$V_k^{(N)}(s_1,...,s_k) = (1-s_k)V_{k-1}^{(N),(k)}(s_1,...,s_{k-1}) + s_k V_{k-1}^{(N)}(s_1,...,s_{k-1}). \tag{3.3.87}$$

Тут $V_{k-1}^{(N),(k)}(s_1,...,s_{k-1}) \ := \ V_{k-1}^{(k)}(s_1,...,s_{k-1}) + U_{\varphi}^{(N-k)}$, а при $k = N-1$

$$V_{N-1}^{(N)}(\sigma_{N-1}) \ := \ V^{(N)}(\sigma_{N-1}) = \sum_{1\le i<j\le N} s_i s_{i+1}\cdots s_{j-1}\varphi_{ij}, \tag{3.3.88}$$

де для скорочення запису введено позначення

$$\sigma_{N-1} \ := \ (s_1,...,s_{N-1}) \ := \ (s)_{N-1}.$$

Відповідну послідовність для потенціала w означимо так:

$$W^{(N)}(\sigma_{N-1}) = -\frac{1}{\beta}\sum_{1\le i<j\le N}\ln(1+s_i\dots s_{j-1}u_{ij}), \tag{3.3.89}$$

де

$$u_{ij} = e^{-\beta w_{ij}} - 1. \tag{3.3.90}$$

При $s_1 = \ldots = s_{N-1} = 1$

$$W^{(N)}((1)_{N-1}) \ = \ U_w \ = \ \sum_{1\le i<j\le N} w_{ij}. \tag{3.3.91}$$

Вигляд енергії (3.3.89) виникає після підстановки параметра s не перед потенціалом w, як у виразі для U_φ, а заміною експоненти $\exp[-\beta w_{ij}]$ на вираз $1 + su_{ij}$, який при $s = 1$ збігається з експонентою $\exp[-\beta w_{ij}]$, а при $s = 0$ взаємодія між i-ю та j-ю частинками зникає.

Повну потенціальну енергію N-частинок з введенними параметрами інтенсивності позначимо так:

$$U^{(N)}(\sigma_{N-1}) \ := \ V^{(N)}(\sigma_{N-1}) \ + \ W^{(N)}(\sigma_{N-1}). \tag{3.3.92}$$

З рекурентних співвідношень (3.3.83)–(3.3.88), умови (3.3.82) й очевидної нерівності

$$0 \ < \ 1 + s_i\dots s_{j-1}u_{ij} \ < \ 1 \tag{3.3.93}$$

випливає, що

$$U^{(N)}(\sigma_{N-1}) \geq U_{\varphi}^{(N)}(\sigma_{N-1}) \geq -B_1 N. \tag{3.3.94}$$

Введемо додаткові позначення, що будуть використовуватися:

$$\varphi_{ij}^{'} = \varphi_{ij} - \frac{1}{\beta} \frac{u_{ij}}{1 + s_i \dots s_{j-1} u_{ij}}, \tag{3.3.95}$$

$$K_l^{\Lambda} = \frac{1}{l} \int\limits_{\Lambda^l} (dx)^l J^{(l)}(x)_l, \tag{3.3.96}$$

де

$$\begin{aligned} J^{(1)}(x)_1 = J^{(1)}(x_1) \ &= \ 1, \\ J^{(l)}(x)_l = (-\beta)^{l-1} \int\limits_0^1 d\sigma_{l-1} e^{-\beta U(\sigma_{l-1})} \prod_{j=2}^{l} [s_1 \dots s_{j-2} \varphi_{1j}^{'} + & \qquad (3.3.97) \\ + s_2 \dots s_{j-2} \varphi_{2j}^{'} + \dots + s_{j-2} \varphi_{(j-2)j}^{'} + \varphi_{(j-1)j}^{'}], \ l \geq 2, & \end{aligned}$$

$$Z_{\Lambda}(N-l) = \frac{1}{(N-l)!} \int\limits_{\Lambda^{N-l}} (dx)^{N-l} \prod_{l+1 \leq i < j \leq N} e^{-\beta(w_{ij} + \varphi_{ij})},$$

$$\int\limits_0^1 d\sigma_{N-1} = \int\limits_0^1 ds_1 \int\limits_0^1 ds_2 \dots \int\limits_0^1 ds_{N-1}.$$

Перетворимо функціонал $Z_{\Lambda}(N)$ наступним чином. Передусім відокремимо взаємодію першої частинки від решти, ввівши параметр інтенсивності взаємодії s_1 і використовуючи тотожність

$$e^{f(1)} \ = \ e^{f(0)} \ + \ \int\limits_0^1 ds_1 f^{'}(s_1) e^{f(s_1)}.$$

Тоді вираз (3.3.81) набуде вигляду

$$Z_\Lambda(N) = \frac{1}{N!}\int\limits_{\Lambda^N}(dx)^N \prod_{2\le i<j\le N} e^{-\beta(w_{ij}+\varphi_{ij})}\times \qquad (3.3.98)$$

$$\times\,[1+\int\limits_0^1 ds_1\frac{d}{ds_1}[\prod_{j=2}^{N} e^{-\beta s_1\varphi_{1j}}(1+s_1u_{1j})]],$$

де u_{1j} визначено в (3.3.90). В інтегралі за змінною s_1 виконаємо диференціювання та скористаємося симетричністю підінтегральної функції відносно перестановки змінних $x_1,\dots,x_N$. Як наслідок, отримаємо рівність з урахуванням позначення (3.3.96), (3.3.97) для $l=1$:

$$Z_\Lambda(N) = \frac{1}{N}K_1^\Lambda Z_\Lambda(N-1)+$$

$$+\frac{(-\beta)}{(N-2)!N}\int\limits_{\Lambda^N}(dx)^N\prod_{2\le i<j\le N}e^{-\beta(w_{ij}+\varphi_{ij})}\times \qquad (3.3.99)$$

$$\times\int\limits_0^1 ds_1\varphi_{12}^{'}\prod_{j=2}^{N}e^{-\beta s_1\varphi_{1j}}(1+s_1u_{1j}),$$

де $\varphi_{12}^{'}$ визначено формулою (3.3.95). Проробляючи усі операції, як і на першому кроці, та продовжуючи цей процес доти, доки не вичерпаємо всі змінні, отримаємо розклад

$$Z_\Lambda(N) = \sum_{l=1}^{N}\frac{l}{N}K_l^\Lambda Z_\Lambda(N-l). \qquad (3.3.100)$$

Підставимо праву частину цієї тотожності у вираз для статистичної суми (3.3.80) і продиференціюємо за змінною z, припускаючи, що ряд $\sum_{n\ge1} nz^{n-1}K_n^\Lambda$ рівномірно збігається в деякому околі точки $z=0$ (це буде доведено нижче). Тоді отримаємо просте рівняння:

$$\frac{d\Xi_\Lambda}{dz} = \left(\sum_{n=1}^{\infty} nz^{n-1}K_n^\Lambda\right)\Xi_\Lambda, \qquad (3.3.101)$$

і остаточно статистична сума набуде вигляду

$$\Xi_\Lambda \;=\; \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} z^n K_n^\Lambda\right), \tag{3.3.102}$$

а враховуючи означення (3.2.37)

$$b_n(\beta) \;=\; \lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d} \frac{1}{\sigma(\Lambda)} K_n^\Lambda. \tag{3.3.103}$$

Доведення збіжності. Збіжність розкладу Майєра завершує така теорема.

Теорема 3.3.3. *Нехай потенціал взаємодії* ϕ *задовольняє умови* **(A)** *(див.* (2.3.25)–(2.3.27)*). Тоді існує границя*

$$\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d} \frac{1}{\sigma(\Lambda)} \log \Xi_\Lambda(z,\beta) \;=\; \beta p(z,\beta) \;=\; \sum_{n=1}^{\infty} b_n(\beta) z^n$$

для достатньо малих значень активності z*, які визначаються нерівністю*

$$z\beta e^{\beta B_1+1}(\|\varphi\|_1 \;+\; \|u\|_1) \;<\; 1,$$

де

$$\|f\|_1 \;:=\; \int_{\mathbb{R}^d} |f(x)|dx \;<\infty. \tag{3.3.104}$$

Доведення. Запишемо тепер добуток сум у $J^{(n)}(x)_n$ (див. формулу (3.3.97)) у вигляді суми добутків. Тоді

$$J^{(n)}(x)_n = \sum_{\eta_T} J^{(n)}_{\eta_T}(x)_n, \tag{3.3.105}$$

де

$$J^{(n)}_{\eta_T}(x)_n = (-\beta)^{n-1} \int\limits_0^1 d\sigma_{n-1} f(\eta_T,\; \sigma_{n-1}) \left(\prod_{i=2}^{n} \varphi'_{\eta_T(i)i}\right) e^{-\beta U^{(n)}(\sigma_{n-1})}, \tag{3.3.106}$$

а η_T — відображення

$$\eta_T \; : \; \{2, 3, ..., n\} \; \mapsto \; \{1, 2, ..., n-1\}, \; \eta_T(i) \; < \; i, \qquad (3.3.107)$$

тобто $\eta_T(k)$ може набувати значень тільки у множині $\{1, 2, ..., k-1\}$. Добуток у (3.3.106) можна розглядати як внесок графа-дерева з вершинами в точках $\{x_1, ..., x_n\}$, а кожній лінії, що з'єднує вершину $x_{\eta_T(i)}$ і вершину x_i, відповідає фактор $\varphi^{'}_{\eta_T(i)i}$. З визначення відображення (3.3.107) випливає, що кожний граф-дерево побудовано так, що кожна k-та вершина x_k (починаючи з другої) приєднується до вершини $x_{\eta_T(k)}$ графа, що складається з $(k-1)$ вершини. Зрозуміло, що всіх таких графів у (3.3.105) буде $(n-1)!$. Але цей факторіал контролюватиметься інтегралом від функції $f(\eta_T, \; \sigma_{n-1})$, яка має такий вигляд:

$$f(\eta_T, \; \sigma_{n-1}) \; := \left\{ \begin{array}{l} 1, \text{ якщо } n = 2, \\ \prod\limits_{i=2}^{n-1} s_{\eta_T(i)} \cdots s_{i-1}, \text{ якщо } n > 2, \end{array} \right.$$

який випливає безпосередньо з побудови розкладу. Легко переконатись (див. [70]), що

$$\sum_{\eta_T} \int\limits_0^1 d\sigma_{n-1} f(\eta_T, \; \sigma_{n-1}) \; \leq \; e^{n-1}.$$

Ураховуючи цю оцінку, легко довести наступне твердження.

Твердження 3.3.4. *Нехай потенціал взаємодії ϕ задовольняє умови* **(A)** *(див.* (2.3.25)–(2.3.27)*). Тоді*

$$|K_n^\Lambda| \; \leq \; \beta^{n-1}(\|\varphi\|_1 \; + \; \|u\|_1)^{n-1} e^{n(\beta B_1 + 1) - 1} \sigma(\Lambda). \qquad (3.3.108)$$

Доведення випливає з нерівності (3.3.93), внаслідок якої

$$|\varphi^{'}_{\eta_T(i)i}(1 + s_{\eta_T(i)} \ldots s_{i-1} u_{\eta_T(i)i})| \; \leq \; |\varphi_{\eta_T(i)i}| \; + \; |u_{\eta_T(i)i}|, \; (3.3.109)$$

трансляційної інваріантності добутку у правій частині (3.3.106) за змінними $x_1, \ldots, x_n$, умови (3.3.94) та визначень (3.3.89)–(3.3.97) і (3.3.104)–(3.3.106).

Оцінка (3.3.108) забезпечує існування границі (3.3.103) і доведення теореми 3.3.3. ■

3.3.9. Полімерні розклади

Ще одним потужним інструментом для доведення збіжності розкладів Майєра та віріальних розкладів є перехід до ансамблів абстрактних полімерних систем. Ці методи були започатковані в працях [125,150]. Більш детальну інформацію можна знайти, наприклад, у [175]. Елементами такого переходу є перегрупування усіх графів Майєра в поданні експоненти (3.3.67) за допомогою внесків зв'язних графів у формулі (3.3.69).

Розділ 4

Кореляційні функції в термодинамічній границі. Метод інтегральних рівнянь

У розд. 3 визначені кореляційні функції та встановлено їх зв'язок з мірою Гіббса (див. формули (3.3.52) і (3.3.56)). Основною проблемою подальших досліджень є побудова цих об'єктів для заданих потенціалів взаємодії. Безпосередній розрахунок інтеграла (3.3.52) за мірою Гіббса на множині конфігурацій Γ є дуже важкою задачею. Тому треба спершу будувати кореляційні функції на скінченних конфігураціях обмежених об'ємів $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$, а потім робити термодинамічний граничний перехід $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^d$. Існують два потужні методи вирішення цієї проблеми. Це побудова розкладів для кореляційних функцій, визначених для обмежених Λ, і почленний перехід до нескінченного об'єму, або виведення рівнянь для кореляційних функцій (ρ_Λ або ρ) і запис їх розв'язків у вигляді, який дає змогу виконати термодинамічний граничний перехід. Почнемо з рівнянь Кірквуда–Зальцбурга. Але, на відміну від найпоширенішого викладу (див. [43, розд. 4]), скористаємося методом розв'язання цих рівнянь, який запропонували Мінлос і Погосян у [174]. Визначимо для цього деякі функціонали

$$\rho_j(\eta) \;=\; \frac{z^{|\eta|}}{\Xi_j} \int_{\Gamma_0} e_\lambda(j;\eta\cup\gamma)e^{-\beta U(\eta\cup\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma), \tag{4.0.1}$$

де

$$\Xi_j \;=\; \int_{\Gamma_0} e_\lambda(j;\gamma)e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma), \qquad (4.0.2)$$

функціонал $e_\lambda(j;\gamma)$ визначено в (3.3.75), а $j:\mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}_+$ — обмежена невід'ємна фінітна функція. Якщо $j = 1\!\!1_\Lambda$, тобто індикатор множини Λ, то вираз (4.0.1) збігається з виразом для кореляційних функцій в обмеженому об'ємі Λ з порожніми граничними розподілами, тобто з виразом (3.3.78). Достатньою умовою існування кореляційних функцій (4.0.1) є умова стійкості енергії U (див. формулу (2.1.3)). Ця умова дає змогу отримати оцінки:

$$1 \;\le\; \Xi_j \;\le\; \exp\{ze^{\beta B}\int_{\mathbb{R}^d} j(x)dx\}$$

і

$$0 \;\le\; \rho_\Lambda(\eta) \;\le\; \Xi_j^{-1}\left(ze^{\beta B}\right)^{|\eta|}\exp\{ze^{\beta B}\int_{\mathbb{R}^d} j(x)dx\}, \qquad (4.0.3)$$

де для зручності вибираємо $j \le 1$.

Ці оцінки є наслідком умови (2.1.3) і визначення інтеграла за мірою Лебега–Пуассона (1.2.19). Але оцінка (4.0.3) не дає підстав зробити висновок, що послідовність функцій $\rho_j(\eta)$ має термодинамічну границю $j \to 1$, яка еквівалентна граничному переходу $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^d$.

4.1. Рівняння Кірквуда–Зальцбурга. Великий канонічний ансамбль

4.1.1. Виведення рівнянь Кірквуда–Зальцбурга

Треба отримати рівняння для функцій ρ і знайти їх розв'язок. Одержимо спершу такі рівняння для функцій ρ_j, тобто у скінченному об'ємі, який збігається з носієм функції j. Виділимо для цього в конфігурації η деяку точку $x \in \eta$ і введемо позначення:

$$\eta' := \eta \setminus \{x\}. \qquad (4.1.4)$$

Тоді вираз (3.3.78) можна записати у вигляді

$$\rho_j(\eta)=z^{|\eta|}\frac{e^{-\beta W(x;\eta')}}{\Xi_j}j(x)\int_{\Gamma_0}e_\lambda(j;\eta'\cup\gamma)e^{-\beta W(x;\gamma)}e^{-\beta U(\eta'\cup\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{4.1.5}$$

Поки що точка $x\in\eta$ є довільною, але пізніше повернемося до її вибору. Для довільного $\xi\in\Gamma_0$ визначимо ядра:

$$K(x;\xi) := \left\{\begin{array}{l}\prod_{y\in\xi}(e^{-\beta\phi(|x-y|)}-1), |\xi|\geq 1,\\ 1,\ \xi=\emptyset.\end{array}\right. \tag{4.1.6}$$

Тоді вираз (4.1.5) можна подати так:

$$\rho_j(\eta)=z^{|\eta|}\frac{e^{-\beta W(x;\eta')}}{\Xi_j}j(x)\int_{\Gamma_0}\sum_{\xi\subseteq\gamma}K(x;\xi)e_\lambda(j;\eta'\cup\gamma)e^{-\beta U(\eta'\cup\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{4.1.7}$$

Застосуємо до правої частини (4.1.7) лему 1.2.3 (рівність (1.2.25)) з

$$\begin{aligned} G(\gamma) &= e_\lambda(j;\eta'\cup\gamma)e^{-\beta U(\eta'\cup\gamma)}, \qquad (4.1.8)\\ H(\xi,\gamma\setminus\xi)) &= K(x;\xi)\equiv K(x;\xi)1\!\!1_{\Gamma_\Lambda}(\gamma\setminus\xi).\end{aligned}$$

Тоді

$$\begin{aligned}\rho_j(\eta) \ = \ & z^{|\eta|}\frac{e^{-\beta W(x;\eta')}}{\Xi_j}j(x)\int_{\Gamma_\Lambda}\int_{\Gamma_\Lambda}K(x;\xi)e_\lambda(j;\eta'\cup\gamma)\times\\ & \times e^{-\beta U(\eta'\cup\xi\cup\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\xi). \qquad (4.1.9)\end{aligned}$$

Використовуючи означення кореляційного функціонала (3.3.78), отримаємо остаточне співвідношення:

$$\begin{aligned}\rho_j(\eta) \ &= \ ze^{-\beta W(x;\eta')}j(x)\int_{\Gamma_0}K(x;\xi)\rho_j(\eta'\cup\xi)\lambda_\sigma(d\xi),\ |\eta|\geq 1,\\ \rho_j(\emptyset) \ &= \ 1. \qquad (4.1.10)\end{aligned}$$

Тут в інтегралі використано рівність

$$\int_{\Gamma_0}z^{-|\xi|}f(\xi)\lambda_{z\sigma}(d\xi)=\int_{\Gamma_0}f(\xi)\lambda_\sigma(d\xi),$$

яка випливає з означення інтеграла за мірою Лебега–Пуассона.

Формально таке саме рівняння можна записати і для нескінченної системи в усьому просторі $\mathbb{R}^d$:

$$\rho(\eta) \ = \ ze^{-\beta W(x;\eta')} \int_{\Gamma_0} K(x;\xi)\rho(\eta' \cup \xi)\lambda_\sigma(d\xi). \tag{4.1.11}$$

Зауваження 4.1. *Функція* $\rho(\eta) \ = \ \rho(\{x_1, \ldots, x_{|\eta|}\})$ *є симетричною функцією своїх змінних. Тому у правій частині рівності* (4.1.10), *в якій змінна* x *є виділеною, інваріантність відносно перестановки змінної* x *з будь-якою іншою змінною конфігурації* η *є "прихованою".*

4.1.2. Розв'язок рівняння (4.1.10)

Будемо шукати розв'язок рівнянь (4.1.10) у такому вигляді:

$$\rho_j(\eta) \ = \ e_\lambda(j;\eta) \int_{\Gamma_0} T(\eta|\gamma)e_\lambda(j;\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma), \tag{4.1.12}$$

де $e_\lambda(j;\eta)$ визначено формулою (1.3.31), а $T(\eta|\gamma)$ — вимірна функція на $\Gamma_0 \times \Gamma_0$, яка повинна бути λ_σ-інтегровною за змінною γ. Функцію $T(\eta|\gamma)$ будемо називати *ядром Урсела*, а розклад (4.1.12) є фактично іншим поданням розкладів Майєра для кореляційних функцій (див. [43, розд. 4]).

Для оптимальної оцінки експоненти перед інтегралом у (4.1.10) необхідно вибрати змінну $x \in \eta$, яку виділено в розкладі енергії $U(\eta \cup \gamma)$ у правій частині виразу (4.1.5). Для потенціалів, що задовольняють умову стійкості, кожна конфігурація $\eta \in \Gamma_0$ обов'язково містить точку, для якої $W(x;\eta \setminus \{x\}) \ \geq -2B$ (доведення від супротивного). Нехай π — відображення, яке відображає конфігурацію η в таку точку, тобто

$$W(\pi(\eta);\eta \setminus \{\pi(\eta)\}) \ \geq -2B. \tag{4.1.13}$$

Підставимо в рівняння (4.1.10) відповідні вирази функцій $\rho_j(\eta))$ і $\rho_j(\eta' \cup \xi)$ та застосуємо до правої частини формулу (1.2.25) з $G(\gamma \cup \xi) = e_\lambda(j;\gamma \cup \xi)$ і $H(\xi,\gamma) = K(\pi(\eta);\xi)T(\eta \setminus \{\pi(\eta)\} \cup \xi|\gamma)$.

Оскільки рівність інтегралів у правій і лівій частинах рівності (4.1.10) виконується за довільних функцій $j \in C_0(\mathbb{R}^d)$, можна прирівняти підінтегральні вирази. Отримаємо співвідношення

$$T(\eta|\gamma) \;=\; ze^{-\beta W(\pi(\eta);\eta\setminus\{\pi(\eta)\})}\sum_{\xi\subseteq\gamma} K(\pi(\eta);\xi)T(\eta\setminus\{\pi(\eta)\}\cup\xi|\gamma\setminus\xi) \tag{4.1.14}$$

та дві додаткові умови, які є наслідком того, що $\rho_j(\emptyset) \;=\; 1$:

$$T(\emptyset|\emptyset) \;=\; 1,\;\; T(\emptyset|\gamma) \;=\; 0,\;\; \text{якщо}\;\; \gamma\neq\emptyset. \tag{4.1.15}$$

Можна також накласти *умову несумісності перетинних конфігурацій*:

$$T(\eta|\gamma) \;=\; 0,\; \text{якщо}\;\; \gamma\cap\eta\neq\emptyset. \tag{4.1.16}$$

Зауважимо, що ця умова автоматично виконується, якщо потенціал взаємодії $\phi(0) = +\infty$. Співвідношення (4.1.14) збігається з рекурентним співвідношенням (4.26) у [43, розд. 4]. Рекурентність співвідношення (4.1.14) за кількістю змінних $|\eta| + |\gamma|$ забезпечує єдиність його розв'язку. Але, щоб довести існування розв'язків рівнянь (4.1.10), треба мати λ_σ-інтегровність ядер $T(\eta|\gamma)$ за змінною γ.

Побудуємо для цього нові ядра, які проіндексуємо деяким числом h і деякою обмеженою інтегровною додатною функцією $\nu(x) : \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}_+$. Нехай таке ядро $Q_{h,\nu}(\eta|\gamma)$ однозначно визначаються рекурентним співвідношенням

$$Q_{h,\nu}(\eta|\gamma) \;=\; h\sum_{\xi\subseteq\gamma} K_\nu(\pi(\eta);\xi)Q_{h,\nu}(\eta\setminus\{\pi(\eta)\}\cup\xi|\gamma\setminus\xi),\; |\eta|\geq 1, \tag{4.1.17}$$

де

$$K_\nu(x;\xi) \;:=\; \begin{cases} \prod_{y\in\xi}\nu(x-y),\; |\xi|\geq 1, \\ 1,\; \xi=\emptyset, \end{cases} \tag{4.1.18}$$

і задовольняє ті самі умови (4.1.15), (4.1.16):

$$Q_{h,\nu}(\emptyset|\emptyset) \;=\; 1,\;\; Q_{h,\nu}(\emptyset|\gamma) \;=\; 0,\;\; \text{якщо}\;\; \gamma\neq\emptyset, \tag{4.1.19}$$

$$Q_{h,\nu}(\eta|\gamma) \ = \ 0, \text{ якщо } \ \gamma \cap \eta \neq \emptyset. \qquad (4.1.20)$$

Розв'язок рівняння (4.1.17) можна записати через вирази аналітичних внесків графів-лісів, які будуються наступним чином. На кожній конфігурації можна побудувати граф, з'єднавши певні точки (вершини) конфігурації лініями (ребрами). Окрему точку конфігурації будемо вважати також графом, що складається з однієї вершини (*зрублене дерево* або *пеньок*). Якщо є граф f на конфігурації $\gamma \in \Gamma^{(n)}$, то його порядок визначається потужністю конфігурації $|f| = |\gamma| = n$. Через $E(f)$ позначимо множину ребер графа f.

Розглянемо m-зв'язний граф ($m \geq 1$), кожна зв'язна складова якого є поміченим кореневим графом-деревом. Корені відповідних зв'язних компонент цього графа утворюють конфігурацію $\eta = \{x_1, \ldots, x_m\} \in \Gamma^{(m)}$. Усі інші вершини утворюють деяку конфігурацію $\gamma = \{y_1, \ldots, y_n\}$, $n = 0, 1, ...$ Будь-яка підмножина точок з γ, які належать одному дереву з коренем x_k, не може належати іншому дереву з коренем x_l, $l \neq k$. Випадок $n = 0$ означає, що m-зв'язний граф f складається з m точок-вершин. У випадку $m = 1$ граф f є поміченим графом-деревом з $n + 1$-ю вершиною і з n ребрами. Такі графи називають *поміченими кореневими лісовими графами* (*rooted labeled graph-forest*). Множину всіх таких лісів із заданою конфігурацією коренів η і вершин γ позначимо $\mathfrak{F}_{\eta;\gamma}$. Топологічно графи, які розрізняються довжинами своїх ребер і можуть бути зведені один до одного евклідовими перетвореннями координат їх вершин, вважаються однаковими.

Важливим елементом розгляду є аналітичні внески графів, які введено наступним чином. Кожній вершині припишемо деяку сталу h, а кожному ребру, яке з'єднує точки x і y, — деяку функцію $\nu(x - y)$.

Аналітичним внеском довільного графа з множини $f \in \mathfrak{F}_{\eta,\gamma}$ буде такий вираз:

$$G(f) \ = \ h^{|\eta|+|\gamma|} \prod_{(x,y)\in E(f)} \nu(x - y). \qquad (4.1.21)$$

Головний результат базується на такій тотожності:

Твердження 4.1.1. *Для довільного* $x \in \eta$ *виконується формула*

$$\sum_{f \in \mathfrak{F}_{\eta;\gamma}} \prod_{(x,y) \in E(f)} \nu(x-y) = \sum_{\xi \subseteq \gamma} \prod_{(y \in \xi)} \nu(x-y) \sum_{f \in \mathfrak{F}_{\eta' \cup \xi; \gamma \setminus \xi}} \prod_{(u,v) \in E(f)} \nu(u-v), \tag{4.1.22}$$

де η' *визначено формулою* (4.1.4).

Доведення. Ліва частина рівняння (4.1.22) є сумою внесків усіх граф-лісів множини $\mathfrak{F}_{\eta;\gamma}$. Права частина — та сама сума, в якій записані її члени в такому порядку. Спочатку запишемо суму внесків усіх графів, в яких вершина x не пов'язана з жодною іншою вершиною. З правого боку — це сума всіх внесків графів з $\mathfrak{F}_{\eta';\gamma}$, тобто $\xi = \emptyset$. Наступна група членів включає графи, в яких вершина x з'єднана однією лінією з вершинами $y \in \gamma$. Отже, всі ξ є одноточковими множинами з γ. Решта груп сум відповідають графам, в яких вершина x приєднана до точок підмножини ξ з γ за допомогою $|\xi|$ ребер. ■

Лема 4.1.2. *Розв'язок рівняння* (4.1.17) *можна записати у вигляді*

$$Q_{h,\nu}(\eta|\gamma) = \sum_{f \in \mathfrak{F}_{\eta,\gamma}} G(f), \tag{4.1.23}$$

де $G(f)$ *визначено в* (4.1.21).

Доведення випливає з того факту, що тотожність (4.1.22) збігається з рекурентним співвідношенням (4.1.17), якщо її домножити на $h^{|\eta|+|\gamma|}$ і врахувати (4.1.21). ■

На рис. 4.1 наведено приклади графів-лісів з розкладу ядра $\mathfrak{F}_{\eta,\gamma}$ для випадку $\eta = \{x_1, x_2\}$ і $\gamma = \{y_1, y_2\}$ (усього графів-лісів для цього ядра $N(m|n) = 8$, де $n = |\gamma| = 2$, $m = |\eta| = 2$).

Оскільки кожна точка $x \in \eta$ є кореневою вершиною дерева, то кількість ребер у кожному графі-лісі буде збігатися з кількістю змінних $y \in \gamma$, тобто $n = |\gamma|$. Структура дерева та графа-

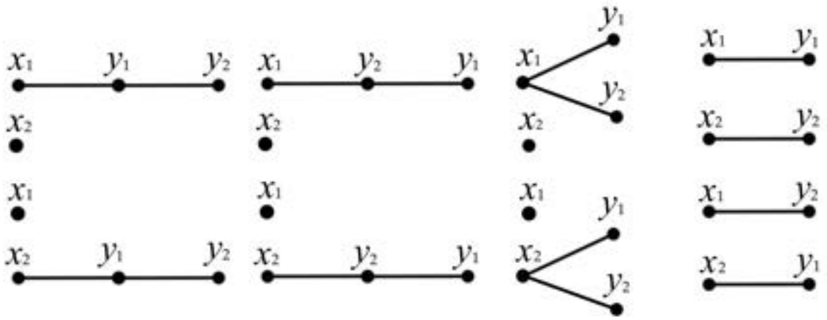

Рис. 4.1.

лісу дає змогу записати таку рівність:

$$\int_{\mathbb{R}^{dn}} \left(\prod_{(x,y)\in E(f)} \nu(x-y) \right) dy_1 \cdots dy_n \;=\; (C_\nu)^n, \;\; C_\nu = \int_{\mathbb{R}^d} \nu(y)dy, \tag{4.1.24}$$

яку легко отримати послідовним інтегруванням за змінними $y \in \gamma$, починаючи з кінцевих вершин графа f. Для того щоб довести λ_σ-інтегровність ядра $Q(\eta;\gamma)$ за змінною γ, треба знати кількість графів-лісів для заданих значень змінних η, γ. Цю кількість встановлює така лема:

Лема 4.1.3. *Кількість графів-лісів у виразі* (4.1.23), *який є розв'язком рекурентного співвідношення* (4.1.17) *із заданими значеннями $n = |\gamma|, m = |\eta|$, виражаються формулою*

$$N(m|n) \;=\; m(m+n)^{n-1}, \;\; n \geq 0. \tag{4.1.25}$$

Доведення. З виразу (4.1.23) випливає, що при $h = \nu = 1$ ядро $Q_{1,1}(\eta|\gamma) = N(m|n)$, а розклад рекурентного співвідношення (4.1.17) свідчить, що $N(m|n)$ задовольняє таке саме співвідношення:

$$N(m|n) = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} N(m+k-1|n-k). \tag{4.1.26}$$

За індукцією за індексом $m+n$ вважатимемо, що формула (4.1.25) виконується для $N(m+k-1|n-k)$ при $k=0,1,\dots,n$. Тоді, підставляючи у праву частину (4.1.25) значення $N(m+k-1|n-k) = (m+k-1)(m+n-1)^{n-k-1}$, отримаємо рівність

$$\sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} (m+k-1)(m+n-1)^{n-k-1} = M_1 \ + \ M_2, \qquad (4.1.27)$$

де

$$\begin{aligned} M_1 \ := m \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} (m+n-1)^{n-k-1} = \\ = m(m+n-1)^{-1} \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} (m+n-1)^{n-k} = \\ = m(m+n-1)^{-1}(m+n)^n, \end{aligned} \qquad (4.1.28)$$

а

$$\begin{aligned} & M_2 := \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} (k-1)(m+n-1)^{n-k-1} = \\ & = n \sum_{k=1}^{n} \binom{n-1}{k-1} (m+n-1)^{n-k-1} - \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} \frac{(m+n-1)^{n-k}}{(m+n-1)} = \\ & = n(m+n-1)^{-1}(m+n)^{n-1} - (m+n-1)^{-1}(m+n)^n = \\ & = -m(m+n-1)^{-1}(m+n)^{n-1}. \end{aligned} \qquad (4.1.29)$$

Як наслідок, маємо $M_1 + M_2 \ = \ m(m+n)^{n-1}$, що й завершує доведення. ■

Зауваження 4.2. *Легко помітити, що* $N(1|n) = (n+1)^{n-1}$. *Ця формула є відомою формулою Келі кількості помічених графів-дерев з n вершинами (див. [41]).*

Проаналізувавши властивості ядер $Q_{h,\nu}(\eta|\gamma)$ (формули (4.1.23)–(4.1.27)), можна сформулювати таку лему.

Лема 4.1.4. *Нехай* $|j(x)| \leq 1,\ x \in \mathbb{R}^d$, *і*

$$hC_\nu e \ < \ 1,$$

тоді

$$\int_{\Gamma_0} Q_{h,\nu}(\eta|\gamma) e_\lambda(j;\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma) \leq (eh)^{|\eta|}(1 - hC_\nu e)^{-1}.$$

Доведення. За означенням інтеграла Лебега–Пуассона (1.2.19)

$$\int_{\Gamma_0} Q_{h,\nu}(\eta|\gamma) e_\lambda(j;\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^{dn}} Q_{h,\nu}(\eta|\{y_1, \ldots, y_n\}) \times \\ \times \prod_{y \in \gamma} j(y) dy_1 \ldots dy_n.$$

Ураховуючи (4.1.23), (4.1.21) та (4.1.24), отримаємо нерівність

$$\int_{\Gamma_0} Q_{h,\nu}(\eta|\gamma) e_\lambda(j;\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma) \leq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{N_n(|\eta|)}{n!} h^{|\eta|+n} C_\nu^n.$$

Завершує доведення оцінка

$$\frac{N(|\eta||n)}{n!} = \frac{m(m+n)^{n-1}}{n!} < \frac{m(m+n)^{n-1}}{n^n e^{-n}\sqrt{2\pi n}} = \\ = \frac{m}{m+n} \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} e^n (1 + \frac{m}{n})^n < e^{m+n},$$

в якій введено позначення $|\eta| = m$, враховано лему 4.1.3 і використано формулу Стірлінга.

■

Інтегровність ядра $T(\eta|\gamma)$ забезпечується інтегровністю ядра $Q_{h,\nu}(\eta|\gamma)$, яка випливає з такої леми:

Лема 4.1.5. *Нехай параметри* $\beta > 0$, $z > 0$ *і потенціал взаємодії* ϕ *такі, що*

$$ze^{2\beta B} \leq h, \ \ |e^{-\beta\phi(|x|)} \ - \ 1| \ \leq \nu(x), x \in \mathbb{R}^d,$$

тоді

$$|T(\eta|\gamma)| \ \leq \ Q_{h,\nu}(\eta|\gamma). \tag{4.1.30}$$

Доведення. Унаслідок (4.1.13) з рекурентного співвідношення (4.1.14) випливає, що

$$|T(\eta|\gamma)| \ \le \ ze^{2\beta B}\sum_{\xi\subseteq\gamma}|K(\pi(\eta);\xi)||T(\eta\setminus\{\pi(\eta)\}\cup\xi|\gamma\setminus\xi)|. \quad (4.1.31)$$

Тоді нерівність (4.1.30) встановлюється за індукцією за числом $|\eta|+|\gamma|$ з рекурентної нерівності (4.1.31) для ядра $T(\eta;\gamma)$ і рекурентної формули (4.1.17) для ядра $Q_{h,\nu}(\eta|\gamma)$. ■

Основний результат цього підрозділу сформулюємо у вигляді такої теореми:

Теорема 4.1.6. *Нехай потенціал взаємодії ϕ задовольняє умови стійкості* (2.1.3) *і регулярності* (2.2.11). *Тоді існує єдиний розв'язок рівняння Кірквуда–Зальцбурга* (4.1.11) *в термодинамічній границі $j\to 1$, який можна записати у вигляді інтеграла Лебега–Пуассона:*

$$\rho(\eta) \ = \ \rho(\eta;z,\beta) \ = \ \int_{\Gamma_0} T(\eta|\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma), \quad (4.1.32)$$

де ядра $T(\eta|\gamma)$, $\eta,\gamma\in\Gamma_0$, є мономами за змінною z, а інтеграл (4.1.32) *є збіжним за умови*

$$|z| \ < e^{-2\beta B-1}C(\beta)^{-1}. \quad (4.1.33)$$

Аналітичний вираз ядер $T(\eta|\gamma) \ = \ T(\{x_1,\ldots,x_l\}|\{y_1,\ldots,y_n\})$ можна записати за допомогою графів-лісів, але, крім того, треба записати додаткові функції Больцмана $e^{-\beta\phi(|x-y|)}$ між окремими вершинами, які не з'єднані лініями графа:

$$T(\eta|\gamma) \ = \ \sum_{f\in\mathfrak{F}_{\eta,\gamma}} G_C(f), \quad (4.1.34)$$

$$G_C(f) \ = \ z^{|\eta|+|\gamma|}e^{-\beta U(\eta)}e^{-\beta\widetilde{W}_f(\eta;\gamma)}\prod_{(x,y)\in E(f)} C_{xy}\prod_{(y,y')\in E'} e^{-\beta\phi(|y-y'|)}, \quad (4.1.35)$$

де $E(f)$ *— множина всіх ліній графа* f,

$$\widetilde{W}_f(\eta;\gamma) \;=\; \sum_{i=1}^{l} W(x_i;\widetilde{\gamma}_f(x_i)), \tag{4.1.36}$$

$\widetilde{\gamma}_f(x_1) = \emptyset$, *а для* $i > 1$

$$\widetilde{\gamma}_f(x_i) = \{y \in \gamma |\, \text{які з'єднані у графі } f \text{ з вершинами } x_1,\ldots,x_{i-1}\}, \tag{4.1.37}$$

f^* *— максимальний граф, який будується з графа Келі* f *домальовуванням ребер за процедурою Пенроуза [188], і кожному такому ребру зіставляється фактор Больцмана* $e^{-\beta\phi(|y-y'|)}$. *Множина цих ребер* $E' = E(f^*) \setminus E(f)$.

Доведення ґрунтується на лемі 4.1.5 і лемі 4.1.3 та оцінках леми 4.1.4. Формули (4.1.35)–(4.1.37) та єдиність розв'язку є наслідком рекурентних співвідношень (4.1.14). ■

Зауваження 4.3. *Зазначимо ще одну перевагу розв'язків у вигляді* (4.1.12). *У праці [82] таким способом знайдено розв'язки більш складного рівняння для частково зв'язних кореляційних функцій, які описують взаємодію кластерів. Ці рівняння та їх розв'язки описані у підрозд. 4.3.*

4.1.3. Про зв'зок з операторним методом Рюеля

У праці [43] рівняння (4.1.11) записують у банаховому просторі E_ξ (див. [43, розд. 4]):

$$\rho \;=\; z\hat{K}\rho \;+\; \rho_0,\; \rho_0(x_1) = z,\; \rho_0(x_1,\ldots,x_l) = 0 \text{ для } \; l \geq 2.$$

Оператор $\hat{K}$ діє на функцію $f \in E_\xi$ таким чином:

$$(\hat{K}f)(x_1) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^{\rtimes}} (dy)^n K(x_1;\{y_1,\ldots,y_n\}) f(y_1,\ldots,y_n),$$

$$(\hat{K}f)(x_1,\ldots,x_l) = e^{-\beta W(x_1;x_2,\ldots,x_l)} \Big[f(x_2,\ldots,x_l) + \tag{4.1.38}$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\mathbb{R}^{\rtimes}} (dy)^n K(x_1;\{y_1,\ldots,y_n\}) f(x_2,\ldots,x_l,y_1,\ldots,y_n) \Big].$$

Зв'язок цих двох підходів встановлює наступна лема (див. іще в [40]).

Лема 4.1.7. *Для довільних n і $l \le n+1$*

$$\frac{1}{(n-l+1)!}\int (dy)^{n-l+1} T(\{x_1,\dots,x_l\}|\{y_1,\dots,y_{n-l+1}\}) = \tag{4.1.39}$$

$$= z^n(\hat{K}^n\rho_0)(x_1,\dots,x_l).$$

Доведення за індукцією. Вираз (4.1.39) легко перевірити для $l+n=1,2,3$, використовуючи формули (4.1.14), (4.1.38). Позначимо ліву частину рівності (4.1.39) через $J_{l,n-l+1}$. Припустимо, що для довільних $k \le n-l+1$, що відповідає умові леми з $n-1$ замість n і $l+k-1$ замість l, бо $l+k-1 < (n-1)+1$, виконується рівність

$$\frac{1}{(n-l-k+1)!}\int (dy)^{n-l-k+1} T(\eta' \cup \{y_1',\dots,y_k'\}|\{y_1,\dots,y_{n-l+1}\}) =$$

$$= z^{n-1}(\hat{K}^{n-1}\rho_0)(\eta' \cup \{y_1',\dots,y_k'\}), \tag{4.1.40}$$

де $\eta' = \eta \setminus \{x_1\}$, $\eta = \{x_1,\dots,x_l\}$. Доведемо рівність (4.1.39).

Запишемо ліву частину рівності (4.1.39), використавши визначення інтеграла Лебега–Пуассона (1.2.19):

$$J_{l,n-l+1} = \int_{\Gamma_0^{(n-l+1)}} T(\eta|\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma) = \int_{\Gamma_0} \mathbb{1}_{\{\Gamma_0^{(n-l+1)}\}}(\gamma)T(\eta|\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma).$$

Ядро $T(\eta|\gamma)$ задовольняє рекурентне співвідношення (4.1.14) з $\pi(\eta) = x_1$, тому

$$J_{l,n-l+1} = ze^{-\beta W(x_1;\eta')} \int_{\Gamma_0} \mathbb{1}_{\{\Gamma_0^{(n-l+1)}\}}(\gamma) \times \tag{4.1.41}$$

$$\times \sum_{\xi \subseteq \gamma} K(x_1;\xi)T(\eta' \cup \xi|\gamma \setminus \xi)\lambda_\sigma(d\gamma).$$

Застосуємо до правої частини формулу (1.2.25) з $G(\gamma) = \mathbb{1}_{\{\Gamma_0^{(n-l+1)}\}}(\gamma)$ і $H(\xi, \gamma \setminus \xi) = K(x_1; \xi) T(\eta' \cup \xi | \gamma \setminus \xi)$. Тоді

$$
\begin{aligned}
&J_{l,n-l+1} = \\
&= z e^{-\beta W(x_1;\eta')} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \delta_{k+m,n-l+1} \int_{\mathbb{R}^{dk}} (dy')^k K(x_1; \{(y')_1^k\}) \times \\
&\times \int_{\mathbb{R}^{dm}} (dy)^m T(\eta' \cup \{(y')_1^k\} | \{(y)_1^m\}) = \\
&= z e^{-\beta W(x_1;\eta')} \sum_{k=0}^{n-l+1} \frac{1}{k!} \int_{\mathbb{R}^{dk}} (dy')^k \frac{K(x_1; \{(y')_1^k\})}{(n-l-k+1)!} \times \\
&\times \int_{\mathbb{R}^{d(n-l-k+1)}} (dy)^{(n-l-k+1)} T(\eta' \cup \{(y')_1^k\} | \{y_1, \ldots, y_{n-l-k+1}\}).
\end{aligned}
\tag{4.1.42}
$$

Враховуючи (4.1.40), маємо

$$
\begin{aligned}
J_{l,n-l+1} &= z^n e^{-\beta W(x_1;\eta')} \Big[(\hat{K}^{n-1} \rho_0)(\eta') + \\
&+ \sum_{k=1}^{n-l+1} \frac{1}{k!} \int_{\mathbb{R}^{dk}} (dy')^k K(x_1; \{(y')_1^k\}) (\hat{K}^{n-1} \rho_0)(\eta' \cup \{(y')_1^k\}) \Big] = \\
&= z^n (\hat{K}^n \rho_0)(\eta).
\end{aligned}
\tag{4.1.43}
$$

Остання рівність виконується, оскільки для $k > n - l + 1$ $(\hat{K}^{n-1} \rho_0)(\eta' \cup \{y'_1, \ldots, y'_k\}) = 0$ і суму можна поширити до нескінченності. Тоді права частина рівності (4.1.43) збігається з виразом дії оператора $\hat{K}$ на функцію $(\hat{K}^{n-1} \rho_0)$. ■

4.2. Рівняння для кореляційних функцій. Канонічний ансамбль

Міра Гіббса рівноважних систем у обмеженому об'ємі $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ у канонічному ансамблі є абсолютно неперервною відносно міри Лебега та для системи, що складається з N однакових точкових частинок, її щільність визначається формулою (3.1.15). У 1946 р. Боголюбов (див. [3, 4]) увів у розгляд функції розподілу $F_\Lambda^{(N)}(\eta)$ так, що вираз $V^{-|\eta|}F_\Lambda^{(N)}(\eta)d\eta$ є ймовірністю того, що група з m частинок знаходиться в нескінченно малому фазовому об'ємі $d\eta$ поблизу точок з координатами $\eta = \{x_1, ..., x_m\}$, де $m = |\eta| < N$. Унаслідок такого визначення очевидно, що

$$F_\Lambda^{(N)}(\eta) = V^m \int_{\Gamma_\Lambda^{(N-m)}} D_\Lambda(\eta \cup \gamma)d\gamma,\ d\gamma = dx_{m+1} \cdots dx_N. \quad (4.2.44)$$

4.2.1. Рівняння типу Кірквуда–Зальцбурга

Вираз для кореляційних функцій канонічного ансамблю в обмеженому об'ємі $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ отримуємо з формули (3.3.48) з $\Gamma_\Lambda^{(N)}$ замість Γ і $A = \eta = \{x_1, ..., x_m\}$. Підставивши вираз для міри Гіббса на $\Gamma_\Lambda^{(N)}$ (див. (3.1.15)) і застосувавши лему 1.2.3 (формула (1.2.25)), отримаємо вираз (після скорочення на множник $\left(\frac{2\pi m}{\beta h^2}\right)^{dN/2}$):

$$\rho_\Lambda^{(N)}(\eta) \ := \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{Z_\Lambda(\beta,N)} \int_{\Gamma_\Lambda^{(N-m)}} \frac{d\gamma}{(N-m)!} e^{-\beta U(\eta\cup\gamma)},\ |\eta| = m \leq N, \\ 0,\ |\eta| = m\ >\ N, \end{array} \right. \quad (4.2.45)$$

де

$$Z_\Lambda(\beta, N) \ = \ \frac{1}{N!} \int_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} e^{-\beta U(\gamma)} d\gamma \quad (4.2.46)$$

є статистичною сумою. Зв'язок між кореляційними функціями і функціями розподілу встановлює формула

$$\rho_\Lambda^{(N)}(\eta) \ = \ \frac{N!}{(N-m)!} \frac{1}{V^m} F_\Lambda^{(N)}(\eta),\quad |\eta| = m.$$

У термодинамічній границі

$$\Lambda \uparrow \mathbb{R}^d,\ \lim_{\substack{V\to\infty \\ N\to\infty}} \frac{V}{N} = v,\ \ \frac{1}{v} = \varrho, \quad (4.2.47)$$

функції розподілу Боголюбова та кореляційні функції пов'язані співвідношенням

$$\rho(\eta) = \varrho^m F(\eta), \;\; m = |\eta|. \tag{4.2.48}$$

Запишемо праву частину (4.2.45) за допомогою інтеграла (1.2.19):

$$\rho_{\Lambda}^{(N)}(\eta) = \frac{1}{Z_{\Lambda}(\beta, N)} \int_{\Gamma_{\Lambda}} e^{-\beta U(\eta \cup \gamma)} 1\!\!1_{N-m}(\gamma) \lambda_{\sigma}(d\gamma), \; |\eta| \leq N, \tag{4.2.49}$$

де

$$1\!\!1_{N-m}(\gamma) := \left\{ \begin{array}{l} 1, \; |\gamma| = N - m, \\ 0, \; |\gamma| \neq N - m. \end{array} \right.$$

Рівняння для функцій розподілу $F(\eta)$ отримані в праці [62], виходячи з визначення (4.2.44), та пізніше в праці [194] безпосередньо в разі нескінченного об'єму, виходячи з інтегро-диференціальних рівнянь Боголюбова [3, 4]. Користуючись запропонованою вище технікою, коротко продемонструємо їх виведення.

Нехай у конфігурації $\eta = \{x_1, ..., x_m\}$ точка x_1 така, для якої виконується нерівність

$$W(x_1; \eta') = \sum_{k=2}^{m} \phi(|x_1 - x_k|) \; \geq \; -BN, \; B \geq 0,$$

де η' визначено формулою (4.1.4). Тоді запишемо

$$U(\eta \cup \gamma) = W(x_1; \eta') + W(x_1; \gamma) + U(\eta' \cup \gamma)$$

і

$$e^{-\beta W(x_1; \gamma)} = \prod_{y \in \gamma} \left[(e^{-\beta \phi(|x_1 - y|)} - 1) + 1 \right] = \sum_{\xi \subseteq \gamma} K(x_1; \xi), \tag{4.2.50}$$

де $K(x_1; \xi)$ визначено формулою (4.1.6). Тоді

$$\rho_{\Lambda}^{(N)}(\eta) = \frac{e^{-\beta W(x_1; \eta')}}{Z_{\Lambda}(\beta, N)} \int_{\Gamma_{\Lambda}} e^{-\beta U(\eta' \cup \gamma)} 1\!\!1_{N-m}(\gamma) \times \\ \times \sum_{\xi \subseteq \gamma} K(x_1; \xi) 1\!\!1_{\Lambda}(\gamma \setminus \xi) \lambda_{\sigma}(d\gamma). \tag{4.2.51}$$

Застосуємо до інтеграла в правій частині (4.2.51) лему 1.2.3 з

$$G(\gamma) = e^{-\beta U(\eta' \cup \gamma)} \mathbb{1}_{N-m}(\gamma) \;\; \text{і} \;\; H(\xi; \gamma \setminus \xi) = K(x_1; \xi) \mathbb{1}_{\Lambda}(\gamma \setminus \xi).$$

Тоді

$$\begin{aligned} \rho_{\Lambda}^{(N)}(\eta) \; = \; & \frac{e^{-\beta W(x_1;\eta')}}{Z_{\Lambda}(\beta, N)} \int_{\Gamma_\Lambda} \int_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\eta' \cup \xi \cup \gamma)} \times \\ & \times \mathbb{1}_{N-m}(\xi \cup \gamma) K(x_1; \xi) \mathbb{1}_{\Lambda}(\gamma) \lambda_\sigma(d\gamma) \lambda_\sigma(d\xi). \end{aligned} \tag{4.2.52}$$

Перепишемо праву частину в такому вигляді:

$$\rho_{\Lambda}^{(N)}(\eta) = e^{-\beta W(x_1;\eta')} \frac{Z_{\Lambda}(\beta, N-1)}{Z_{\Lambda}(\beta, N)} \int_{\Gamma_\Lambda} K(x_1; \xi) \times \tag{4.2.53}$$

$$\times \left[\frac{1}{Z_{\Lambda}(\beta, N-1)} \int_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\eta' \cup \xi \cup \gamma)} \mathbb{1}_{N-m-|\xi|}(\gamma) \lambda_\sigma(d\gamma) \right] \lambda_\sigma(d\xi).$$

Ураховуючи означення (4.2.49) ($N-m-|\xi| = N-1-(m-1+|\xi|)$), остаточно отримуємо

$$\rho_{\Lambda}^{(N)}(\eta) = e^{-\beta W(x_1;\eta')} a_N^{\Lambda} \int_{\Gamma_\Lambda} K(x_1; \xi) \rho_{\Lambda}^{(N-1)}(\eta' \cup \xi) \lambda_\sigma(d\xi), \tag{4.2.54}$$

де $|\eta| = m \;\; \eta = \{x_1, ..., x_m\}$, $1 < m < N$, а

$$a_N^{\Lambda} \; = \; \frac{Z_{\Lambda}(\beta, N-1)}{Z_{\Lambda}(\beta, N)}. \tag{4.2.55}$$

Крім того, треба пам'ятати, що

$$\rho_{\Lambda}^{(N-1)}(\eta' \cup \xi) = 0, \;\; \text{якщо} \;\; |\eta'| + |\xi| > N - 1. \tag{4.2.56}$$

Для $m = 1$

$$\rho_{\Lambda}^{(N)}(\{x_1\}) = a_N^{\Lambda} \int_{\Gamma_\Lambda} K(x_1; \xi) \rho_{\Lambda}^{(N-1)}(\xi) \lambda_\sigma(d\xi). \tag{4.2.57}$$

Зауважимо також, що

$$\rho_{\Lambda}^{(N)}(\eta) = 0, \;\; \text{якщо} \;\; |\eta| \; > \; N. \tag{4.2.58}$$

Аналогічним є співвідношення для $\rho_\Lambda^{(N-l)}$ з $0 \le l < N$:

$$\rho_\Lambda^{(N-l)}(\eta) = e^{-\beta W(x_1;\eta')} a_{N-l}^\Lambda \int_{\Gamma_\Lambda} K(x_1;\xi) \rho_\Lambda^{(N-l-1)}(\eta' \cup \xi) \lambda_\sigma(d\xi). \tag{4.2.59}$$

На відміну від великого канонічного ансамблю, співвідношення (4.2.54), (4.2.59) не є рівняннями для кореляційних функцій в обмеженому об'ємі. Для того щоб ці співвідношення перетворилися на рівняння, треба виконати граничний термодинамічний перехід (4.2.47). Про математично строге доведення існування граничних значень для величини a_N^Λ, $\rho_\Lambda^{(N)}(\eta)$ і $\rho_\Lambda^{(N-l)}(\eta)$ йдеться в наступних підрозділах. Термодинамічну границю відношення конфігураційних інтегралів розраховано у праці [3, розд. I, пар. 2]. Використовуючи цей результат, отримуємо (див. (3.1.9))

$$\lim_{\substack{V=N/\varrho \\ N\to\infty}} \frac{Z_\Lambda(\beta, N-1)}{Z_\Lambda(\beta, N)} = \lim_{\substack{V=N/\varrho \\ N\to\infty}} \frac{N Q_\Lambda(\beta, N-1)}{Q_\Lambda(\beta, N)} \;=\; \varrho a(\varrho), \;\; V = \sigma(\Lambda). \tag{4.2.60}$$

Нехай також величини $\rho_\Lambda^{(N)}(\eta)$ і $\rho_\Lambda^{(N-l)}(\eta)$ в якомусь сенсі витримують граничний перехід (4.2.47), унаслідок якого отримаємо величини $\rho(\eta)$ і $\rho^{(l)}(\eta)$.

Виконуючи формальний граничний перехід, запишемо рівняння для граничних функцій

$$\rho(\eta) \;=\; \varrho a(\varrho) e^{-\beta W(x_1;\eta')} \int_{\Gamma_0} K(x_1;\xi) \rho(\eta' \cup \xi) \lambda_\sigma(d\xi), \tag{4.2.61}$$

а, враховуючи (4.2.47)–(4.2.48), для функцій розподілу $F(\eta)$ маємо

$$F(\eta) \;=\; a(\varrho) e^{-\beta W(x_1;\eta')} \int_{\Gamma_0} K(x_1;\xi) F(\eta' \cup \xi) \lambda_{\varrho\sigma}(d\xi), \tag{4.2.62}$$

З умови $F(\{x_1\}) \;=\; F(\emptyset) \;=\; 1$ випливає, що

$$a(\varrho) = \frac{1}{\widetilde{Q}(F)}, \; \widetilde{Q}(F) \;=\; \int_{\Gamma_0} K(0;\xi) F(\xi) \lambda_{\varrho\sigma}(d\xi). \tag{4.2.63}$$

Виконання формул (4.2.60) і (4.2.63) є наслідком існування граничних функцій розподілу (4.2.44), які задовольняють рівняння (4.2.62). Такий нетривіальний результат був змістом праці [62], а саме доведення можна назвати *теоремою Боголюбова–Петрини–Хацета–Рюєля.* Основні моменти цього доведення можна знайти в більш прозорому огляді [35]. Цікавим є також більш загальний підхід до цих рівнянь, наведений у [225].

4.2.2. Виведення рівнянь (4.2.62) з рівнянь Боголюбова

Тут розглянемо рівняння (див. [194]), в яких значення фізичних параметрів температури і густини, за яких існує термодинамічна границя і граничні функції розподілу $F(\eta) = F(\{x_1, ...$ $..., x_m\}) = F_m(x_1, ..., x_m)$, є трансляційно-інваріантними, симетричними функціями, для яких виконується умова послаблення кореляцій:

$$\lim_{dist(\eta_1,\eta_2)\to\infty} F(\eta_1 \cup \eta_2) \;=\; F(\eta_1)F(\eta_2), \tag{4.2.64}$$

а рівняння Боголюбова для рівноважних функцій розподілу в просторі $\mathbb{R}^d$ мають вигляд

$$\frac{\partial F(\eta)}{\partial x_1^{(1)}} = -\beta\frac{\partial U(\eta)}{\partial x_1^{(1)}}F(\eta) - \beta\varrho\int dy\frac{\partial\phi(|x_1-y|)}{\partial x_1^{(1)}}F(\eta\cup\{y\}), \tag{4.2.65}$$

де $\eta = \{x_1, ..., x_m\}$.

Зауваження 4.4. *Умову* (4.2.64) *можна довести аналогічно до подібної властивості кореляційних функцій великого канонічного ансамблю (див. [82]).*

Введемо нову функцію заміною:

$$F(\eta) = e^{-\beta W(x_1;\eta')}C(x_1;\eta'), \;\; \eta' = \{x_2, ..., x_m\}, \tag{4.2.66}$$

для якої рівняння (4.2.65) буде таким:

$$\frac{\partial C(x_1;\eta')}{\partial x_1^{(1)}} = \varrho\int dy\frac{\partial f(|x_1-y|)}{\partial x_1^{(1)}}C(x_1;\eta'\cup\{y\}), \tag{4.2.67}$$

де

$$f(|x_1 - y|) = e^{-\beta\phi(|x_1 - y|)} - 1.$$

Позначимо через $x_1(z)$ вектор

$$x_1(z) := \ (x_1^{(1)}, ..., x_1^{(d)})|_{x_1^{(1)}=z}. \qquad (4.2.68)$$

Проінтегрувавши обидві частини рівняння (4.2.67) і враховуючи властивість (4.2.64), отримаємо інтегральне рівняння

$$\begin{aligned} C(x_1;\eta') &= \\ &= F(\eta') - \varrho \int_{x_1^{(1)}}^{\infty} dz_1 \int dy_1 \frac{\partial f(|x_1(z_1) - y_1|)}{\partial z_1} C(x_1(z_1); \eta' \cup \{y_1\}). \end{aligned} \qquad (4.2.69)$$

Запишемо таке саме співвідношення для функції $C(x_1(z_1); \eta' \cup \{y_1\})$ і підставимо його в (4.2.69). Як наслідок, маємо

$$\begin{aligned} C(x_1;\eta') = F(\eta') - \varrho \int_{x_1^{(1)}}^{\infty} dz_1 \int dy_1 \frac{\partial f(|x_1(z_1) - y_1|)}{\partial z_1} F(\eta' \cup \{y_1\}) + \\ + \varrho^2 \int_{x_1^{(1)}}^{\infty} dz_1 \int dy_1 \frac{\partial f(|x_1(z_1) - y_1|)}{\partial z_1} \times \qquad (4.2.70) \\ \times \int_{z_1}^{\infty} dz_2 \int dy_2 \frac{\partial f(|x_1(z_2) - y_2|)}{\partial z_2} C(x_1(z_2); \eta' \cup \{y_1, y_2\}). \end{aligned}$$

Продовжуючи цей процес до нескінченності, отримуємо

$$\begin{aligned} F(\eta) = e^{-\beta W(x_1;\eta')} \Big[F(\eta') + \\ + \sum_{n=1}^{\infty} (-\varrho)^n \int_{x_1^{(1)}}^{\infty} dz_1 \int dy_1 \frac{\partial f(|x_1(z_1) - y_1|)}{\partial z_1} ... \times \qquad (4.2.71) \\ \times ... \int_{z_{n-1}}^{\infty} dz_n \int dy_n \frac{\partial f(|x_1(z_n) - y_n|)}{\partial z_n} F(\eta' \cup \{y_1, ..., y_n\}) \Big]. \end{aligned}$$

Скористаємося такою лемою:

Лема 4.2.1. *Нехай потенціал ϕ задовольняє умову* (2.2.11), *а функції F — умову* (4.2.64). *Тоді вираз*

$$I_n = (-1)^n \int_{x_1^{(1)}}^{\infty} dz_1 \int dy_1 \frac{\partial f(|x_1(z_1) - y_1|)}{\partial z_1} ... \times \tag{4.2.72}$$

$$\times ... \int_{z_{n-1}}^{\infty} dz_n \int dy_n \frac{\partial f(|x_1(z_n) - y_n|)}{\partial z_n} F(\eta' \cup \{y_1, ..., y_n\})$$

задовольняє рекурентне співвідношення

$$I_n \ = \ -\sum_{k=1}^{n} I_{n-k} a_k \ + \ b_n, \tag{4.2.73}$$

де

$$a_k = \frac{1}{k!} \int dy_1 ... \int dy_k \prod_{i=1}^{k} f(|y_i|) F(\{y_1, ..., y_k\}), \tag{4.2.74}$$

$$b_n = \frac{1}{n!} \int dy_1 ... \int dy_n \prod_{k=1}^{n} f(|x_1 - y_k|) F(\eta' \cup \{y_1, ..., y_n\}). \tag{4.2.75}$$

Доведення ґрунтується на тому, що в останньому інтегралі за dz_n у виразі (4.2.72) можна виконати інтегрування, розглядаючи невласний інтеграл у границях від z_{n-1} до L, переходячи до границі $L \to \infty$ і знімаючи інтегрування з використанням формули

$$\int_{z}^{\infty} dz' \int dy_{n-k+1} \cdots dy_n \frac{\partial f(|x_1(z') - y_{n-k+1}|)}{\partial z'} f(|x_1(z') - y_{n-k+2}|) \cdots$$

$$\cdots f(|x_1(z') - y_n|) F(\eta' \cup \{y_1, ..., y_n\}) =$$

$$= F(\eta' \cup \{(y)_1^{n-k}\}) \frac{1}{k} \int dy_{n-k+1} \cdots dy_n \prod_{i=1}^{k} f(|y_{n-k+i}|) F(\{(y)_{n-k+1}^{n}\}) -$$

$$- \frac{1}{k} \int dy_{n-k+1} \cdots dy_n \prod_{i=1}^{k} f(|x_1(z) - y_{n-k+i}|) F(\eta' \cup \{y_1, ..., y_n\}), \tag{4.2.76}$$

отримаємо рівність (4.2.73). ■

Рекурентне співвідношення (4.2.73) означає (див. [10], формула (0.313)), що I_n — коефіцієнти розкладу за густиною $\varrho = \frac{1}{v}$, що виник як результат ділення двох нескінченних рядів:

$$\sum_{k=0}^{\infty} I_k \varrho^k \;=\; \frac{\sum_{k=0}^{\infty} b_k \varrho^k}{\sum_{k=0}^{\infty} a_k \varrho^k}.$$

З урахуванням цього факту остаточний вираз для рівняння (4.2.72) набуде вигляду

$$F(\eta) \;=\; \widetilde{Q}(F)^{-1} e^{-\beta W(x_1;\eta')} \int_{\Gamma_\Lambda} K(x_1;\xi) F(\eta' \cup \xi) \lambda_{\varrho\sigma}(d\xi), \quad (4.2.77)$$

тобто такого самого, як і (4.2.62) з $\widetilde{Q}(F)$, що має вигляд (4.2.63) (або (4.2.61) для кореляційних функцій $\rho(\eta)$).

4.2.3. Кореляційні функції в термодинамічній границі

Побудова граничних функцій для послідовності (4.2.45) методом інтегральних рівнянь є дещо складнішою, ніж у випадку великого канонічного ансамблю. Справа у тому, що співвідношення (4.2.54) і (4.2.59) не є рівняннями для функцій ρ_Λ^N і ρ_Λ^{N-l}, але якщо в термодинамічній границі існують їх граничні значення, тоді ці співвідношення в границі перетворюються на інтегральні рівняння типу Кірквуда–Зальзбурга. Тому в праці [62] згідно з розробленими в [5] (див. більш детально [46,47]) методами та симетризацією Рюеля [43] встановлено існування та єдиність такої границі для достатньо малих значень густини частинок ϱ.

Вигляд рівнянь (4.2.61) такий самий, як і рівнянь для кореляційних функцій великого канонічного ансамблю. Відмінність у тому, що замість активності z фігурує функція $\varrho a(\varrho)$, яка внаслідок (4.2.63) залежить від $F(\eta)$, а отже, і від $\rho(\eta)$. Це означає, що насправді рівняння (4.2.61) є нелінійними. Але, якщо $\varrho a(\varrho)$ набуває значень у околі нуля, то можна застосувати такі самі методи, як і в [43]. Але отриманий розклад не буде розкладом за параметром густини.

Розглядатимемо це рівняння у банаховому просторі $E_\xi \ni f$ з нормою

$$||f|| := \sup_{\emptyset \neq \eta \in \Gamma_0} \xi^{-|\eta|} |f(\eta)|. \tag{4.2.78}$$

Введемо також простір $E_\xi^{(n)}$ — банахів простір, що складається зі стовпців f, у яких $f_k = 0$ для $k > n$, з нормою (4.2.78). Цей простір є технічним елементом у доведенні деяких тверджень.

Теорема Боголюбова–Петрини–Хацета–Рюеля. Визначимо оператор

$$\begin{aligned} (Kf)(x_1) &= 0, \\ (Kf)(\eta) &= e^{-\beta W(x_1;\eta')} \int_{\Gamma_0} K(x_1;\xi) f(\eta' \cup \xi) \lambda_\sigma(d\xi), \ |\eta| \geq 2. \end{aligned} \tag{4.2.79}$$

Систему рівнянь (4.2.61) за допомогою оператора K та введення згідно з Рюелем оператора симетризації Π можна подати так:

$$\rho \ = \ \varrho a(\varrho) \Pi K \rho \ + \ \rho^0, \tag{4.2.80}$$

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_1(x_1) \\ \vdots \\ \rho_N(x_1, ..., x_N) \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \rho^0 = \begin{pmatrix} \varrho \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{4.2.81}$$

Питання розв'язків встановлює така теорема:

Теорема 4.2.2. *Рівняння* (4.2.80) *у просторі* E_ξ *має єдиний розв'язок у вигляді ряду*

$$\rho \ = \ \sum_{n=0}^{\infty} \left(\varrho a(\varrho) \Pi K \right)^n \rho^0, \tag{4.2.82}$$

який є рівномірно збіжним, якщо

$$|a(\varrho)| < 2, \ \ |\varrho| \ < \ \left(2e^{2B+1} C(\beta) \right)^{-1}. \tag{4.2.83}$$

Існування граничних кореляційних функцій. Розглянемо співвідношення (4.2.54)–(4.2.59) у банаховому просторі E_ξ.

Для доведення існування кореляційних функцій у термодинамічній границі доведемо таку лему:

Лема 4.2.3. *Нехай потенціал* ϕ *задовольняє умови стійкості* (2.1.3) *та регулярності* (2.2.11). *Тоді має місце наступна нерівність:*

$$\frac{Z_\Lambda(\beta, N-1)}{Z_\Lambda(\beta, N)} < \frac{\varrho}{1-\varrho C(\beta)}. \tag{4.2.84}$$

Доведення. З означення (3.1.9)

$$\begin{aligned} Q_\Lambda(\beta,N) &= \int_{\Lambda^{N-1}} (dx)^{N-1} e^{-\beta U(\gamma\setminus\{x_N\})} \int_\Lambda dx_N e^{-\beta W(x_N;\gamma\setminus\{x_N\})} = \\ &= \int_{\Lambda^{N-1}} (dx)^{N-1} e^{-\beta U(\gamma\setminus\{x_N\})} \int_\Lambda dx_N \prod_{i=1}^{N-1} (C_{x_i,x_N}+1) \geq \\ &\geq Q_\Lambda(\beta,N-1)\left(V-(N-1)C(\beta)\right). \end{aligned} \tag{4.2.85}$$

Тут використана нерівність $\prod_{i=1}^{N-1}(1+a_i) \geq \sum_{i=1}^{N-1}|a_i|$, якщо $1+a_i \geq 0$ і з $a_i = C_{x_i,x_N} = e^{-\beta\phi(|x_i-x_N|)}-1$. ■

Наслідок 4.2.1. *З нерівності* (4.2.84) *випливає, що за умови* $\varrho < 1/2C(\beta)$ *послідовність обмежена числом 2. Це означає, що існує підпослідовність* N_i *така, що* $\lim_{N_i\to\infty} a^\Lambda_{N_i} = \varrho a(\varrho)$, *якщо* $V = N_i/\varrho$.

Визначимо також оператор K_m, що діє на довільний елемент простору E_ξ згідно з формулами

$$(K_m f)(\eta) := \begin{cases} (\Pi K f)(\eta), \text{якщо } \eta \in \Gamma^{(m)}, \\ 0, \text{якщо } \eta \in \Gamma^{(n)}, n \neq m. \end{cases} \tag{4.2.86}$$

У позначеннях (4.2.81)

$$\rho^N_\Lambda = \begin{pmatrix} \rho_1(x_1;\Lambda) \\ \vdots \\ \rho_N(x_1,\ldots,x_N;\Lambda) \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \rho^0 = \begin{pmatrix} a^\Lambda_N \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

Визначимо також у E_ξ оператор K_m^{N-l} за формулою

$$\begin{aligned}(K_m^{(N-l)}f)(\eta) \ &= a_{N-l}^{\Lambda}\Pi e^{-\beta W(x_1;\eta')}\int_{\Gamma_\Lambda} K(x_1;\xi)(1-\delta_{0,|\eta'\cup\xi|})\times \\ &\times \mathbb{1}_{|\xi|+m-1\leq N-l-1}(\xi)f(\eta'\cup\xi)\lambda_\sigma(d\xi),\end{aligned}$$

де $|\eta| = m$ і оператори

$$K^{(N-l)} = K_1^{(N-l)} + K_2^{(N-l)} + \cdots + K_{(N-l)}^{(N-l)},$$

$$K_{[n]}^{(N-l)} = K_1^{(N-l)} + K_2^{(N-l)} + \cdots + K_n^{(N-l)},\ n < N-l,$$

$$K_{[n]} = K_1 + K_2 + \cdots + K_n.$$

Ці оператори діють з простору E_ξ у простір $E_\xi^{(n)}$, а їх норма менша за одиницю. Їх визначено для доведення проміжних оцінок основних теорем.

Лема 4.2.4. *Нехай виконуються нерівності* (4.2.83). *Тоді*

$$\lim_{\substack{V=N/\varrho \\ N\to\infty}} ||\chi_\Lambda\left(\varrho a(\varrho)K_m \ - \ K_m^{(N-l)}\right)|| \ = \ 0,\ \ V = \sigma(\Lambda).$$

Доведення легко провести, використовуючи формули дії операторів K_m та $K_m^{(N-l)}$ і записуючи міру $\lambda_\sigma(d\xi)$ у (4.2.79) так:

$$\lambda_\sigma(d\xi) = \mathbb{1}_{|\xi|+m-1\leq N-l-1}(\xi)\lambda_\sigma(d\xi) + \mathbb{1}_{|\xi|+m-1>N-l-1}(\xi)\lambda_\sigma(d\xi).$$

Більш детальну інформацію наведено в [62] та в огляді [35]. ■

Зауваження 4.5. *На відміну від операторів леми 4.2.4, для операторів $\chi_\Lambda\left(a(\varrho)K - K^{(N-l)}\right)$ така лема не виконується. Дійсно, оператор $\chi_\Lambda K^{(N-l)}$, що діє з простору E_ξ у простір $E_\xi^{(N-l)}$ і на тих елементах $f \in E_\xi$, в яких $f_m = 0$ при $m \leq N-l$, $\chi_\Lambda K^{(N-l)}f = 0$. Тому для будь-якого великого N завжди знайдеться такий елемент f, що $\chi_\Lambda K^{(N-l)}f = 0$, а $\chi_\Lambda a(v)Kf \neq 0$ і норма цього елемента є скінченною.*

За допомогою введених операторів $K^{(N-l)}$ і стовпців $\rho^{(N-1)}$ співвідношення (4.2.59) можна компактно записати в такій формі:

$$\rho^{(N-l)} = K^{(N-l)}\rho^{(N-l-1)} + \rho^{0(N-l)}.$$

Ітерацією цього співвідношення отримано таке представлення:

$$\begin{aligned} \rho^{(N-l)} &= K^{(N-l)}K^{(N-l-1)}\cdots K^{(3)}\rho^{(2)}+ \\ &+ \sum_{i=0}^{N-l-1}\left(\prod_{j=0}^{N-l-1} K^{N-l-j}\right)\rho^{0(N-l-j-1)} + \rho^{0(N-l)}. \end{aligned} \tag{4.2.87}$$

Це співвідношення дає змогу довести таку теорему:

Теорема 4.2.5. *Для довільного фіксованого* $l > 0$ *і параметра* ϱ *з околу* $|\varrho| < \left(2e^{2B+1}C(\beta)\right)^{-1}$ *послідовність* $\chi_\Lambda\left(\rho^{(N-l)} - \rho^{(l)}\right)$ *прямує до нуля за нормою простору* E_ξ *при* $N \to \infty$, $V = N/\varrho$ *і* $V = \sigma(\Lambda)$.

Доведення ґрунтується на розкладі (4.2.87) й аналогічному розкладі для функцій $\rho^{(l)}$:

$$\rho^{(l)} = \sum_{i=0}^{\infty}\prod_{j=0}^{i}(a_{l+j})(\Pi K)^i\rho^{(0)},$$

який виникає у процесі ітерації рівняння

$$\rho^{(l)} \;=\; a_l(\varrho)\Pi K\rho^{(l)} \;+\; a_l(\varrho)\rho^0.$$

Деталі доведення наведено в [62]. ■

Наслідок 4.2.2. *З теореми 4.2.5 випливає, що послідовності* $\rho_\Lambda^{(N)}(\eta)$ *і* $\rho_\Lambda^{(N-l)}(\eta)$ *збігаються до функції* $\rho(\eta)$*, яка задовольняє рівняння* (4.2.61)*, єдиний розв'язок якого за теоремою 4.2.2 задається рядом* (4.2.82)*.*

4.2.4. Існування розв'язків нелінійних рівнянь

Рівняння (4.2.77) можна розглядати як нелінійне операторне рівняння в E_ξ:

$$F = AF, \ \ F \ = \ F(\eta) \ = \ F(\{x_1, ..., x_m\}) = F_m(x_1, ..., x_m),$$

а нелінійний оператор A діє на вектор $\varphi \in E_\xi$ таким чином:

$$\begin{aligned}(A\varphi)(x_1) = 1, \ (A\varphi)_m(x_1, ..., x_m) = \\ = \widetilde{Q}(\varphi)^{-1}(K\varphi)_m(x_1, ..., x_m), \ m \geq 2,\end{aligned} \tag{4.2.88}$$

де K — лінійний оператор у E_ξ:

$$\begin{aligned}(K\varphi)(x_1) = 0, \ (K\varphi)(\eta) = \\ = e^{-\beta W(x_1;\eta')} \int_{\Gamma_\Lambda} K(x_1;\xi)\varphi(\eta' \cup \xi)\lambda_{\varrho\sigma}(d\xi).\end{aligned} \tag{4.2.89}$$

Діючи оператором симетризації Π на рівняння (4.2.89), отримуємо нелінійне операторне рівняння в E_ξ:

$$F = \Pi AF, \ \ F \ = \ F(\eta) \ = \ F(\{x_1, ..., x_m\}) = F_m(x_1, ..., x_m). \tag{4.2.90}$$

Сформулюємо таку теорему;

Теорема 4.2.6. *Нехай для фізичних параметрів β і ϱ існує таке ξ, щоб виконувалися такі умови:*

$$e^{\xi\varrho C(\beta)} \ - \ 1 \ < \ \xi$$

і

$$A_{\mathfrak{S}} = \frac{\exp[2\beta B + \xi\varrho C(\beta)]}{\xi + 1 - e^{\xi\varrho C(\beta)}} < 1.$$

Тоді рівняння (4.2.90) *має єдиний розв'язок у просторі E_ξ.*

Доведення. Розглянемо в E_ξ множину $\mathfrak{S}$ вигляду

$$\mathfrak{S} \ = \ \left\{\varphi : \varphi_1(x_1) = 1, \ |\varphi_m(x_1, ..., x_m)| \leq \xi^{m-1}, \ m \geq 2\right\}.$$

Тоді для $\varphi \in \mathfrak{S}$ отримаємо оцінки

$$|\left(\Pi K\varphi\right)(x_1,...,x_m)| \leq \xi^{m-2}e^{2\beta B+\varrho C(\beta)\xi},\ |\widetilde{Q}(\varphi)| \geq \frac{\xi+1-e^{\varrho C(\beta)\xi}}{\xi}, \tag{4.2.91}$$

з яких випливає, що

$$|\left(\Pi A\varphi\right)(x_1,...,x_m)| \leq A_{\mathfrak{S}}\xi^{m-1}\ <\ \xi^{m-1}. \tag{4.2.92}$$

Отже, $\left(\Pi A\varphi\right)(x_1,...,x_m) \subset \mathfrak{S}$.

Множина $\mathfrak{S}$ є замкнутою й опуклою, тобто вона містить разом із двома довільними векторами φ_1 і φ_2 їх лінійну комбінацію: $\varphi(\alpha) = \alpha\varphi_1 + (1-\alpha)\varphi_2, 0 \leq \alpha \leq 1$.

Визначимо природним чином відстань в $\mathfrak{S}$: $d(\varphi_1,\varphi_2) = ||\varphi_1 - -\varphi_2||_\xi$ і візьмемо два нескінченно близькі вектори $\varphi_1 = \varphi$ і $\varphi_2 = = \varphi + \delta\varphi$ з $||\delta\varphi||_\xi < \varepsilon$. Тоді для достатньо малого ε, враховуючи, що $\widetilde{Q}(\varphi+\delta\varphi) = \widetilde{Q}(\varphi) + \widetilde{Q}(\delta\varphi)$ (див. (4.2.63)) і оцінки (4.2.91), отримаємо нерівність

$$d\left(\Pi A\varphi_1, \Pi A\varphi_2\right) \leq a_\varphi||\delta\varphi||_\xi = a_\varphi d\left(\varphi_1,\varphi_2\right) \tag{4.2.93}$$

з $a_\varphi < 1$. Таким чином, ΠA є стискальним на $\mathfrak{S}$. Як наслідок із теореми про нерухому точку (див., наприклад, [50, вправа 3.1]) випливає, що рівняння (4.2.90) має єдиний розв'язок у $\mathfrak{S}$, який визначається як границя послідовності

$$F = \lim_{n\to\infty} F^{(n)},\ \ F^{(n)}\ =\ \Pi A F^{(n-1)}, \tag{4.2.94}$$

де $F^{(0)}$ можна взяти довільним вектором з $\mathfrak{S}$. ■

Наступним кроком є оптимальний вибір ξ, тобто простору E_ξ так, щоб для заданого β густина системи ϱ була максимальною.

4.3. Побудова розкладів для кореляційних функцій за параметром густини ϱ

Побудуємо розклад за параметром густини ϱ, виходячи з рівняння (4.2.61) як нелінійного рівняння. Ідея побудови розкладу полягає в тому, щоб записати ліву частину рівняння (4.2.61) у вигляді добутку двох твірних функціоналів, надавши виразам для $\widetilde{Q}(\rho_j)$ і $\rho_j(\eta)$ такого самого вигляду, та прирівняти аргументи правої й лівої частин утворених твірних функціоналів.

Скористаємось для цього формулами (3.3.74)–(3.3.76) і перепишемо рівняння (4.2.61), (4.2.63) у термінах твірних функціоналів.

4.3.1. Рекурентне співвідношення для ядра

Рівняння (4.2.61), (4.2.63) запишемо так:

$$\widetilde{Q}(\rho_j)\rho_j(\eta) = \varrho e^{-\beta W(x_1;\eta')} j(x_1) \int_{\Gamma_0} K(x_1;\xi)\rho_j(\eta' \cup \xi)\lambda_\sigma(d\xi), \tag{4.3.95}$$

$$\widetilde{Q}(\rho_j) = \int_{\Gamma_0} K(x_1;\xi)\rho_j(\xi)\lambda_\sigma(d\xi). \tag{4.3.96}$$

Згідно з [174] розглянемо рівняння КЗ для неперервного функціонала $\rho_j(\eta)$, де вводиться додатна обмежена функція $j : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}_+$, така що $\rho(\eta) = \rho_j(\eta)|_{j=1}$, а розв'язок шукатимемо у вигляді

$$\rho_j(\eta) = e_\lambda(j;\eta) \int_{\Gamma^0} T(\eta|\gamma) e_\lambda(j;\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma). \tag{4.3.97}$$

Підставляючи в (4.3.96) відповідний вираз для $\rho_j(\xi)$, отримуємо

$$\widetilde{Q}(\rho_j) = \int_{\Gamma_0}\int_{\Gamma_0} e_\lambda(j;\xi\cup\gamma) K(x_1;\xi) T(\xi|\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma)\lambda_\sigma(d\xi). \tag{4.3.98}$$

Застосуємо до інтеграла в правій частині (4.3.98) лему 1.2.3 з

$$G(\xi\cup\gamma) = e_\lambda(j;\xi\cup\gamma) \text{ і } H(\xi;\gamma) = K(x_1;\xi)T(\xi|\gamma).$$

Тоді

$$\widetilde{Q}(\rho_j) = \widetilde{F}_{\psi_1}(j) = \int_{\Gamma_0} e_\lambda(j;\gamma)\psi_1(\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma)$$

з

$$\psi_1(\gamma) \;=\; \sum_{\xi\subseteq\gamma} K(x_1;\xi)T(\xi|\gamma\setminus\xi).$$

Запишемо (4.3.97) у вигляді твірного функціонала:

$$\rho_j(\eta) \;=\; \widetilde{F}_{\psi_2}(j) \;=\; \int_{\Gamma_0} e_\lambda(j;\gamma)\psi_2(\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma)$$

з

$$\psi_2(\gamma) \;=\; e_\lambda(j;\eta)T(\eta|\gamma).$$

Ліву частину (4.3.95) можна записати у вигляді

$$\widetilde{Q}(\rho_j)\rho_j(\eta) \;=\; \widetilde{F}_{\psi_1*\psi_2}(j) \;=\; \int_{\Gamma_0} e_\lambda(j;\gamma)(\psi_1*\psi_2)(\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma), \tag{4.3.99}$$

де

$$(\psi_1*\psi_2)(\gamma) = \sum_{\xi\subseteq\gamma}\psi_1(\xi)\psi_2(\gamma\setminus\xi) = \sum_{\xi\subseteq\gamma}\psi_2(\gamma\setminus\xi)\psi_1(\xi) =$$
$$= e_\lambda(j;\eta)\sum_{\xi\subseteq\gamma}T(\eta|\gamma\setminus\xi)\sum_{\zeta\subseteq\xi}K(x_1;\zeta)T(\zeta|\xi\setminus\zeta).$$

Права частина (4.3.95) після підстановки $\rho_j(\eta'\cup\xi)$ у вигляді (4.3.97) набуває вигляду

$$\varrho e^{-\beta W(x_1;\eta')}e_\lambda(j;\eta)\int_{\Gamma_0}\int_{\Gamma_0} e_\lambda(j;\xi\cup\gamma)K(x_1;\xi)T(\eta'\cup\xi|\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma)\lambda_\sigma(d\xi).$$

Знову використаємо лему 1.2.3 з

$$G(\xi\cup\gamma) = e_\lambda(j;\xi\cup\gamma) \;\text{ і }\; H(\xi;\gamma) = K(x_1;\xi)T(\eta'\cup\xi|\gamma).$$

Тоді права частина (4.3.95) матиме вигляд

$$\varrho e^{-\beta W(x_1;\eta')}e_\lambda(j;\eta)\int_{\Gamma_0} e_\lambda(j;\gamma)\sum_{\xi\subseteq\gamma}K(x_1;\xi)T(\eta'\cup\xi|\gamma\setminus\xi)\lambda_\sigma(d\gamma). \tag{4.3.100}$$

Прирівняємо вирази біля $e_\lambda(j;\gamma)$ під інтегралами виразів (4.3.99) і (4.3.100) і, скорочуючи множники $e_\lambda(j;\eta)$, отримаємо співвідношення

$$\begin{aligned}\sum_{\xi\subseteq\gamma} T(\eta|\gamma\setminus\xi)\sum_{\zeta\subseteq\xi} K(x_1;\zeta)T(\zeta|\xi\setminus\zeta) &= \\ = \varrho e^{-\beta W(x_1;\eta')}\sum_{\xi\subseteq\gamma} K(x_1;\xi)T(\eta'\cup\xi|\gamma\setminus\xi). & \qquad (4.3.101)\end{aligned}$$

Виділимо член з $\xi = \emptyset$ у лівій частині (4.3.101) і, врахувавши, що $T(\emptyset|\emptyset) = 1$ та $T(\emptyset|\gamma) = 0$, якщо $\gamma \neq \emptyset$, одержимо нелінійне рекурентне співвідношення:

$$\begin{aligned}T(\eta|\gamma) = \varrho e^{-\beta W(x_1;\eta')}\sum_{\xi\subseteq\gamma} K(x_1;\xi)T(\eta'\cup\xi|\gamma\setminus\xi) - \\ - \sum_{\substack{\xi\subseteq\gamma\\ \xi\neq\emptyset}} T(\eta|\gamma\setminus\xi)\sum_{\substack{\zeta\subseteq\xi\\ \zeta\neq\emptyset}} K(x_1;\zeta)T(\zeta|\xi\setminus\zeta). \qquad (4.3.102)\end{aligned}$$

Початкові умови є такими:

$$T(\emptyset|\emptyset) = 1, \quad T(\emptyset|\gamma) = 0, \text{ якщо } \gamma \neq \emptyset, \qquad (4.3.103)$$

$$T(\{\eta|\gamma) = 0, \text{ якщо } \eta\cap\gamma \neq \emptyset. \qquad (4.3.104)$$

4.3.2. Графічна інтерпретація розв'язків

Як і у випадку рівнянь Кірквуда–Зальцбурга для великого канонічного ансамблю (див. деталі в [40]), аналітичний вираз ядра $T(\eta|\gamma)$ можна подати за допомогою внесків графів-лісів. Кількість усіх графів-лісів $N(m|n)(m = |\eta|, n = |\gamma|)$ можна обчислити, розв'язавши таке рекурентне рівняння:

$$\begin{aligned}N(m|n) = \sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}N(m+k-1|n-k) + \\ + \sum_{k=1}^{n}\binom{n}{k}N(m|n-k)\sum_{l=1}^{k}\binom{k}{l}N(l|k-l).\end{aligned}$$

Якщо відкинути нелінійний доданок, рекурентне рівняння можна розв'язати точно: $N(m|n) = m(m+n)^{n-1}$ (див. лему 4.1.3). Ця формула дає змогу довести збіжність інтеграла (4.3.97) при $j = 1$ та малих значеннях густини. Але нелінійний член, очевидно, значно збільшує кількість лісових графів. Проте згідно з формулою (4.3.102) кожен внесок лісового графа, що містить дерево із внеском множника $K(x_1;\xi), \xi \in \gamma$, який з'являється у другій сумі в (4.3.102), включається зі знаком мінус. Таким є, наприклад, обчислення ядра $T(x_1|y)$:

$$T(x_1|y) \;=\; \varrho^2\,[K(x_1;y) \;-\; K(x_1;y)] = 0. \qquad (4.3.105)$$

Можна також довести таке твердження:

Твердження 4.3.1. *З початкових умов* (4.3.103)–(4.3.104) *випливає, що*

$$T(x_1|\emptyset) \;=\; \varrho,\;\; T(x_1|\gamma) \;=\; 0 \;\;\textit{для}\;\; \gamma \neq \emptyset,$$

що забезпечує рівність $\rho(x_1) \;=\; \varrho$. *Крім того,*

$$T(\eta|\emptyset) \;=\; \varrho^{|\eta|}\exp[-\beta U(\eta)].$$

Доведення випливає з (4.3.102) і (4.3.105) за індукцією. ■

Щоб продемонструвати скорочення аналітичних виразів треба виконати додаткові розклади експонент типу (4.3.106). Але така процедура еквівалентна перетворенню внеска від граф-дерева у внесок звичайного майєровського графа. Щоб описати цю процедуру визначимо множину графів $\mathcal{D}(\eta;\gamma)$.

Означення 4.1. *Множина* $\mathcal{D}(\eta;\gamma)$ *є множиною кореневих графів, зв'язні компоненти яких є 2-зв'язними графами відносно конфігурації* γ. *Будь-який граф* $G \in \mathcal{D}(\eta;\gamma)$ *має* $m = |\eta|$ *вершин конфігурації* η *і* $n = |\gamma|$ *вершин конфігурації* γ. *Кожна вершина з* η *може бути вільною від ліній або з'єднуватися тільки з вершинами у конфігурації* γ. *Кожна вершина* $y \in \gamma$ *з'єднується з вершинами* x *або* y *принаймні двома лініями. Якщо до експоненти* $\exp[-\beta U(\eta)]$ *застосувати розклад* (4.2.50), *то множина* $\exp[-\beta U(\eta)]\mathcal{D}(\eta;\gamma)$ *буде збігатися зі множиною* $\mathcal{D}(W;B)$ *з [140,* *розд. 2]. Роль коренів графа відіграє конфігурація η. Одноточковий граф $G \in \mathcal{D}(x_1;\emptyset)$. Внесок будь-якої вершини дорівнює ϱ. Внесок лінії $w(l_{xy})$, яка з'єднує дві вершини x та y або y_i та y_j, це $K(x;y)$.*

Зауваження 4.6. *Відповідно до* (4.3.97) *інтегрування виконується в точках конфігурації γ, а згідно з рівнянням* (4.3.102) *в ядрах $T(\theta;\xi)$ конфігурація $\xi \subseteq \gamma$ і конфігурація θ можуть містити обидві змінні від η і γ. Тому відповідні графи множин $\mathcal{D}(\theta;\xi)$ можуть містити лише вершини конфігурації γ.*

Основне твердження розділу таке (див. [204]):

Твердження 4.3.2. *Розв'язок рекурентного співвідношення* (4.3.102) *можна записати внесками від графів множини $\mathcal{D}(\eta;\gamma)$:*

$$T(\eta|\gamma) \;=\; \varrho^{|\eta|+|\gamma|}\exp[-\beta U(\eta)]\sum_{G\in\mathcal{D}(\eta;\gamma)} w_G(\eta,\gamma).$$

Доведення базується на процедурі індукції. Дуже легко побачити скорочення внесків відповідних графів, наприклад, для ядер $T(x_1,x_2|y_1)$ і $T(x_1,x_2|y_1,y_2)$. Після припущення справджуваності леми для $T(\eta'\cup\xi|\gamma\setminus\xi)$ $T(\eta|\gamma\setminus\xi)$ і $T(\zeta|\xi\setminus\zeta)$ необхідно відповідні експоненти подати у вигляді

$$e^{-\beta W(x_1;\eta')}e^{-\beta U(\eta'\cup\xi)} = e^{-\beta U(\eta)}e^{-\beta U(\xi)}\prod_{i=2}^{m}\prod_{j=1}^{k}\left[K(x_i;y_j)+1\right], \tag{4.3.106}$$

де $m=|\eta|$, $k=|\xi|$.

Для $k=0$ ($\xi=\emptyset$) у першому рядку формули (4.3.102) вираз $T(\eta'|\gamma)$ відповідає аналітичному внеску всіх графів $\mathcal{D}(\eta;\gamma)$, в яких вершина x_1 не має ребер. Для $k\geq 1(\xi\neq\emptyset)$ вершини ξ стають коренями в множині графів від $\mathcal{D}(\eta'\cup\xi \mid \gamma\setminus\xi)$. Деякі множини $\zeta\subseteq\xi$ (нехай $|\zeta|=l$) не мають ребер, а інші $\xi\setminus\zeta$ мають принаймні одне ребро з вершинами в $\gamma\setminus\xi$, і після інтегрування $\int(dy)^l K(x_1;\{y\}_1^l)$ така операція залишає цей граф у множині $\mathcal{D}(\eta;\gamma)$. Але вершини з першої групи отримують тільки одну лінію, яка з'єднує їх з вершиною x_1. Ці вершини не сполучаються між собою та вершинами $\xi \setminus \zeta$. Тому вони належать $\mathcal{D}(\zeta; \xi \setminus \zeta)$ і всім графам з $\mathcal{D}(\eta' \cup \xi | \gamma \setminus \xi)$, які мають структуру $w_{G_1}(\eta; \gamma \setminus \xi) K(x_1; \zeta) w_{G_2}(\zeta; \xi \setminus \zeta)$. Отже, такі графи не належать $\mathcal{D}(\eta; \gamma)$ і їх треба скоротити. Це забезпечується наявністю аналогічного внеску в другому рядку формули (4.3.102). Відповідно, застосовуємо такий самий розклад експоненти $e^{-\beta U(\xi)}$, що й у (4.3.106), і виконуємо сумування за всіма можливими $\zeta \subseteq \xi$. ■

4.3.3. Висновок про збіжність розкладу

Існування єдиного розв'язку нелінійного рівняння (4.2.61) як операторного рівняння в банаховому просторі E_ξ було доведено в [194] та коротко викладено в розд. 3. Узагальнену версію критерію збіжності Грюневелда для віріального розкладу та рекурентне співвідношення для твірних функціоналів 2-зв'язних графів описано у праці [140]. Тому тут не обговорюється це питання. Більш ґрунтовні дослідження статистичних систем у рамках канонічного ансамблю викладені в працях [140, 155] та в посиланнях у них.

4.4. Кореляція кластерів: частково зв'язні кореляційні функції та їх спадання

Під час вивчення термодинамічних властивостей статистичних систем важливим часто є опис взаємодії між групами частинок, які називають кластерами. Кореляції між кластерами описуються так званими *частково усіченими кореляційними функціями* (PTCF), або частково зв'язними кореляційними функціями (ЧЗКФ). Імовірно, вперше ця проблема виникла в праці [160]. Пізніше, в [83] було представлено та обговорено деякі "фізично розумні"гіпотези розпаду ЗКФ і ЧЗКФ. У наступних працях [84, 85] було доведено різні властивості сильного спадання для ЗКФ ґратчастих і неперервних систем у різних ситуаціях. У [131] наведено деякі загальні результати щодо сильних кластерних властивостей ЗКФ і ЧЗКФ для ґратчастих газів (насправді, доведення їхньої головної теореми включає в себе довгі технічні частини, отримані в неопублікованих працях одного з авторів). Треба також згадати працю [60], яка, мабуть, стосується з'ясування поведінки кореляційних функцій.

У цьому розділі розглядаються класичні неперервні системи точкових частинок. Виводяться рівняння типу КЗ для ЧЗКФ. Розв'язки цих рівнянь одержують у вигляді ряду внесків певних діаграм-лісів. Таке представлення дає змогу отримати сильні кластерні властивості для ЧЗКФ у зручній формі для виведення оцінок. Детальніший опис і строге доведення результатів наведені у праці [82].

4.4.1. Частково зв'язні кореляційні функції

Частково усічені (зв'язні) кореляційні функції (ЧЗКФ) описують кореляції між кластерами частинок. Оцінки розпаду для цих кореляцій — важливий технічний інструмент для доведення багатьох фізичних гіпотез (наприклад, див. [67, eq. (4.2)]).

Дано $m \in \mathbb{N}$, розглянемо колекцію $(\eta_i)_{i=1}^m$ конфігурацій $\eta_i \in \in \Gamma_0 \setminus \emptyset$ (наприклад, у результаті розкладання заданого $\overline{\eta} \in \Gamma_0$ на m кластерів). Відповідні ЧЗКФ визначаються рекурсивно формулами:

$$\widetilde{\rho}^T(\eta_1) := \rho(\eta_1),$$

$$\widetilde{\rho}^T(\eta_1; \ldots ; \eta_m) := \rho(\cup_{i=1}^m \eta_i) - \sum_{k=2}^{m} \sum_{I_1,\ldots,I_k \subset \{1,\ldots,m\}}^{*} \prod_{l=1}^{k} \widetilde{\rho}^T(\widetilde{\eta}_l), \quad m \geq 2, \tag{4.4.107}$$

де, як і раніше, зірочка над сумою означає суму за всіма розбиттями $\{1, \ldots , m\}$ на k непорожніх неперетинних підмножин, і де

$$\widetilde{\eta}_l := \bigcup_{i \in I_l} \eta_i \quad \text{і} \quad \bigcup_{l=1}^{k} \widetilde{\eta}_l = \bigcup_{i=1}^{m} \eta_i.$$

Будемо інколи позначати $\widetilde{\rho}_m^T(\eta_1; \ldots ; \eta_m) = \widetilde{\rho}^T(\eta_1; \ldots ; \eta_m)$, щоб підкреслити кількість кластерів. Очевидно, що визначення (4.4.107) збігається з визначенням ЗКФ у (3.3.72), якщо всі конфігурації η_i складаються з однієї частинки. Аналогічно до (3.3.73), ЧЗКФ можна виразити через $\rho(\tilde{\eta}_i)$ як

$$\tilde{\rho}^T(\eta_1;\ldots;\eta_m) = \sum_{k=1}^{m}(-1)^{k-1}(k-1)! \sum_{I_1,\ldots,I_k\subset\{1,\ldots,m\}}^{*} \prod_{l=1}^{k}\rho(\tilde{\eta}_l). \tag{4.4.108}$$

Щоб отримати такий вираз для ЧЗКФ, визначаємо твірний функціонал, який є узагальненням твірного функціонала, введеного в [131] для спінових систем.

Для заданої не негативної функції $j \in C_0(\mathbb{R}^d)$ визначимо функціонал ρ_j виразом

$$\rho_j(\eta) = \rho_{j;1}(\eta) := \frac{z^{|\eta|}}{\Xi_j}\int_{\Gamma_0}\chi_j(\eta\cup\gamma)e^{-\beta U(\eta\cup\gamma)}\,\lambda_{z\sigma}(d\gamma), \quad \eta\in\Gamma_0, \tag{4.4.109}$$

де заради зменшення громіздкості змінюємо позначення: $\chi_j(\eta) = e_\lambda(j;\eta) : \Gamma_0 \to \mathbb{R}_+$, як і в (3.3.75), а

$$\Xi_j := \int_{\Gamma_0}\chi_j(\gamma)e^{-\beta U(\gamma)}\,\lambda_{z\sigma}(d\gamma).$$

Використовуючи визначення (1.4.51) і (1.4.52) з $(\alpha_i)_{i=1}^m$, покладемо

$$\widetilde{F}^T_{\rho_j}(\alpha,\eta)_1^m := \log(\Xi_j((\alpha_i,\eta_i)_{i=1}^m)), \tag{4.4.110}$$

де

$$\begin{aligned}\Xi_j((\alpha_i,\eta_i)_{i=1}^m) &:= \langle\prod_{i=1}^m\Delta_{(\alpha_i,\eta_i)},\chi_j e^{-\beta U}\rangle = \\ &= \int_{\Gamma_0}\prod_{i=1}^m\Delta_{(\alpha_i\eta_i)}(\gamma)\chi_j(\gamma)e^{-\beta U(\gamma)}\,\lambda_{z\sigma}(d\gamma).\end{aligned} \tag{4.4.111}$$

Тут (4.4.111) означає змішану статистичну суму для газу разом із m кластерами $\eta_1,\ldots,\eta_m$, які мають додаткові параметри активності α_i. Зауважимо, що використання функцій j (замість індикаторних функцій) забезпечує чітке визначення величини (4.4.111). У випадку $\alpha_i = 0$, $i = 1,\ldots,m$, можна покласти

$j(x) = 1\!\!1_\Lambda(x)$, де $1\!\!1_\Lambda$ позначає функцію-індикатор $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$, а (4.4.111) зводиться до статистичної суми в (3.1.18). Далі визначимо для $1 \leq r \leq m$

$$\widetilde{\rho}^T_{j;r}(\eta_1; \ldots ; \eta_r | (\alpha_i, \eta_i)^m_{i=r+1}) := (\prod_{i=1}^r \frac{\partial}{\partial \alpha_i})\widetilde{F}^T_{\rho_j}((\alpha_i, \eta_i)^m_{i=1})\big|_{\alpha_1=\cdots=\alpha_r=0}. \tag{4.4.112}$$

Будемо називати *r-точковими j-ЧЗКФ*, або просто *j-ЧЗКФ* коли $r = m$, такі функції:

$$\widetilde{\rho}^T_{j;r}(\eta_1; \ldots ; \eta_r) := \widetilde{\rho}^T_{j;r}(\eta_1; \ldots ; \eta_r | (\alpha_i, \eta_i)^m_{i=r+1})\big|_{\alpha_{r+1}=\cdots=\alpha_m=0}. \tag{4.4.113}$$

Завершимо підрозділ такою лемою:

Лема 4.4.1. *Для заданих $r, m \in \mathbb{N}$ таких, що $1 \leq r \leq m$, r-точкова j-ЧЗКФ асоціюється з набором $(\eta_i)^m_{i=1}$ конфігурацій $\eta_i \in \Gamma_0$, заданих виразом*

$$\widetilde{\rho}^T_{j;r}(\eta_1; \ldots ; \eta_r) = \sum_{k=1}^r (-1)^{k-1}(k-1)! \sum^{*}_{\{J_1,\ldots,J_k\}\subset\{1,\ldots,r\}} \prod_{l=1}^k \rho_j(\cup_{i\in J_l}\eta_i), \tag{4.4.114}$$

де друга сума в (4.4.114) *пробігає всі розбиття* $\{1, \ldots , r\}$ *на* k *непорожніх підмножин* $J_1, \ldots , J_k$ *з обмеженням* (1.4.40). *Наприклад, коли* $j(x) = 1\!\!1_\Lambda(x)$, *функції* (4.4.113) *відповідають ЧЗКФ в* Λ, *а коли* $j(x) = 1$, *вони є ЧЗКФ у* $\mathbb{R}^d$, *заданими в* (4.4.108).

Зауваження 4.7. *Легко показати за індукцією, що при* $r \geq 2$ $\widetilde{\rho}^T_{j;r}(\eta_1; \ldots ; \eta_r) = 0$, *якщо існує* $i_0 \in \{1, \ldots , r\}$, *така що* $|\eta_{i_0}| = 0$ *(див.* (4.4.114) *разом з* (4.4.109)*).*

Доведення. Для заданої $\Xi : \mathbb{R}^m \to (0, +\infty)$ ключовою є формула:

$$\left(\prod_{i=1}^k \frac{\partial}{\partial \alpha_i}\right) \log(\Xi((\alpha_i)^m_{i=1})) = \sum_{k=1}^r (-1)^{k-1}(k-1)! \times$$

$$\times \sum^{*}_{\{J_1,\ldots,J_k\}\subset\{1,\ldots,r\}} \prod_{l=1}^k \frac{1}{\Xi((\alpha_i)^m_{i=1})} \left(\prod_{i\in J_l} \frac{\partial}{\partial \alpha_i}\right) \Xi((\alpha_i)^m_{i=1}), \tag{4.4.115}$$

що легко випливає за індукцією. Водночас із (4.4.111) маємо

$$\left(\prod_{i\in J_l}\frac{\partial}{\partial\alpha_i}\right)\Xi_j((\alpha_i,\eta_i)_{i=1}^m) = z^{\sum\limits_{i\in J_l}|\eta_i|}\times$$
$$\times\sum_{I\subset\{1,\ldots,m\}\setminus J_l}\prod_{i\in I}(\alpha_i z^{|\eta_i|})\int_{\Gamma_0}\chi_j(\cup_{i\in J_l}\eta_i\cup_{i\in I}\eta_i\cup\gamma)\times$$
$$\times\, e^{-\beta U(\cup_{i\in J_l}\eta_i\cup_{i\in I}\eta_i\cup\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma).$$

Встановлюючи решту $\alpha_i = 0$, отримуємо лише порожній набір $I = \emptyset$. З огляду на (4.4.109)

$$\frac{1}{\Xi_j((\alpha_i,\eta_i)_{i=1}^m)}\left(\prod_{i\in J_l}\frac{\partial}{\partial\alpha_i}\right)\Xi_j((\alpha_i,\eta_i)_{i=1}^m)\big|_{\alpha_1=\cdots\alpha_m=0} = \rho_j(\cup_{i\in J_l}\eta_i). \tag{4.4.116}$$

Замінюючи $\Xi((\alpha_i)_{i=1}^m)$ на $\Xi_j((\alpha_i,\eta_i)_{i=1}^m)$ у (4.4.115), з (4.4.116) отримуємо (4.4.114). ■

Зокрема, переходячи до границі $j\to 1$ в (4.4.114) з $k = m$, отримаємо (4.4.108).

4.4.2. Рівняння Кірквуда–Зальцбурга для ЧЗКФ

Нехай $(\eta_i)_{i=1}^m$, $m\geq 2$, — сукупність конфігурацій у Γ_0, така що $\sum_{i=1}^m|\eta_i| > 0$. Почнемо з виведення рівнянь типу Кірквуда–Зальцбурга для 1-точкової j-ЧЗКФ. Припустимо, що $|\eta_1| > 0$ (можна змінити маркування кластера, якщо потрібно). З (4.4.113)–(4.4.112) (з $k = 1$) і (4.4.110)–(4.4.111) 1-точкову j-ЧЗКФ записують так:

$$\tilde\rho^T_{j;1}(\eta_1|(\alpha_i,\eta_i)_{i=2}^m) =$$
$$= \frac{1}{\Xi_j((\alpha_i,\eta_i)_{i=1}^m)}\frac{\partial}{\partial\alpha_1}\int_{\Gamma_0}\prod_{i=1}^m\Delta_{(\alpha_i\eta_i)}(\gamma)\chi_j(\gamma)e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma)\big|_{\alpha_1=0}. \tag{4.4.117}$$

З огляду на (3.3.91) нехай $x_1\in\eta_1$ таке, що

$$W(x_1;\eta_1^{'}) := W(\{x_1\};\eta_1^{'}) \geq -2B,$$

де $B \geq 0$. Існування такої точки в будь-якій конфігурації випливає з умови стійкості взаємодії (див. [43, розд. 4]). Розглянемо розклад

$$e^{-\beta U(\eta_1\cup\gamma)} = e^{-\beta W(x_1;\eta_1^{'})}e^{-\beta W(x_1;\gamma)}e^{-\beta U(\eta_1^{'}\cup\gamma)} =$$
$$= e^{-\beta W(x_1;\eta_1^{'})}\sum_{\xi\subseteq\gamma} K(x_1;\xi)e^{-\beta U(\eta_1^{'}\cup\gamma)}, \qquad (4.4.118)$$

де

$$K(x_1;\xi) := \prod_{y\in\xi} C_{x_1 y} = \prod_{y\in\xi}(e^{-\beta\phi(|x_1-y|)} - 1).$$

Підставляючи праву частину другої рівності (4.4.118) у (4.4.117), маємо

$$\widetilde{\rho}^{T}_{j;1}(\eta_1|(\alpha_i,\eta_i)_{i=2}^{m}) = \frac{z^{|\eta_1|}e^{-\beta W(x_1;\eta_1^{'})}}{\Xi_j((\alpha_i,\eta_i)_{i=2}^{m})}\int_{\Gamma_0}\sum_{\xi\subseteq\gamma} K(x_1;\xi)\times$$
$$\times\prod_{i=2}^{m}\Delta_{(\alpha_i\eta_i)}(\gamma)\chi_j(\eta_1\cup\gamma)e^{-\beta U(\eta_1^{'}\cup\gamma)}\,\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \qquad (4.4.119)$$

Покладаючи $\alpha_2 = \cdots = \alpha_m = 0$ у (4.4.119) та використовуючи (1.2.25) (розповсюджене на Γ_0) разом із тотожністю $\widetilde{\rho}^{T}_{j;1}(\eta_1^{'}\cup\gamma) = \rho_j(\eta_1^{'}\cup\gamma)$, отримуємо рівняння Кірквуда–Зальцбурга для 1-точкової j-ЧЗКФ:

$$\widetilde{\rho}^{T}_{j;1}(\eta_1) = \rho_j(\eta_1) = ze^{-\beta W(x_1;\eta_1^{'})}j(x_1)\int_{\Gamma_0} K(x_1;\xi)\rho_j(\eta_1^{'}\cup\xi)\,\lambda_\sigma(d\xi). \qquad (4.4.120)$$

Узагальнимо ці рівняння для m-точкової j-PTCF наступним чином. Так само, як під час виведення рівняння (4.4.120), виконаємо аналогічні викладки для функції $\rho_j(\eta_1\cup\eta)$:

$$\rho_j(\eta_1\cup\eta) = ze^{-\beta W(x_1;\eta_1^{'})}j(x_1)\sum_{\xi\subseteq\eta}\int_{\Gamma_0} K(x_1;\xi\cup\gamma)\rho_j(\eta_1^{'}\cup\eta\cup\gamma)\,\lambda_\sigma(d\gamma), \qquad (4.4.121)$$

де в розкладі (4.4.118) використано тотожність

$$\sum_{\xi\subseteq\gamma\cup\eta} K(x_1;\xi) = \sum_{\xi\subseteq\eta}\sum_{\varsigma\subseteq\gamma} K(x_1;\xi\cup\varsigma). \tag{4.4.122}$$

Підставивши (4.4.121) у (4.4.114) (замість ρ_j, який містить η_1) і позначивши $I_1 := J_1 \setminus \{1\}$, маємо

$$\widetilde{\rho}^{T}_{j;m}(\eta_1;\ldots;\eta_m) = ze^{-\beta W(x_1;\eta_1^{'})} j(x_1)\sum_{k=1}^{m}(-1)^{k-1}(k-1)!\times$$

$$\times \sum_{I_1\subset\{2,\ldots,m\}}\ \sideset{}{^*}\sum_{\{I_2,\ldots,I_k\}\subset\{2,\ldots,m\}\setminus I_1}\ \sum_{\xi}\int_{\Gamma_0} K(x_1;\xi\cup\gamma)\rho(\eta_1^{'}\cup_{i\in I_1}\eta_i\cup\gamma)\times$$

$$\times\prod_{l=2}^{k}\rho(\cup_{i\in I_l}\eta_i)\,\lambda_\sigma(d\gamma).$$

Зауважимо, що у другій сумі множина I_1 може набувати значення $I_1 = \emptyset$ на відміну від $I_2,\ldots,I_k$ у 3-й сумі, в якій $\xi\subseteq\cup_{i\in I_1}\eta_i$. Змінюючи порядок підсумовування за індексами I і за множинами ξ, можна записати

$$\widetilde{\rho}^{T}_{j;m}(\eta_1;\ldots;\eta_m) = ze^{-\beta W(x_1;\eta_1^{'})} j(x_1)\times$$

$$\times\sum_{\xi\subseteq\cup_{i\in I_1}\eta_i}\int_{\Gamma_0}\lambda_\sigma(d\gamma)\,K(x_1;\xi\cup\gamma)\sum_{k=1}^{m-|I_0(\xi)|}(-1)^{k-1}(k-1)!\times$$

$$\times\sum_{I_1\subset\{2,\ldots,m\}}\ \sideset{}{^*}\sum_{\{I_2,\ldots,I_k\}\subset\{2,\ldots,m\}\setminus(I_0(\xi)\cup I_1)}\rho(\eta_1^{'}\cup_{i\in(I_0(\xi)\cup I_1)}\eta_i\cup\gamma)\times$$

$$\times\prod_{l=2}^{k}\rho(\cup_{i\in I_l}\eta_i),$$

де встановлюємо $I_0(\xi) := \{i\geq 2 : \xi\cap\eta_i\neq\emptyset\}$. Покладаючи $\eta_{\{2,\ldots,m\}\setminus I} := (\eta_{i_2};\ldots;\eta_{i_{m-|I|}})$, якщо $\{2,\ldots,m\}\setminus I = \{i_2,\ldots,i_{m-|I|}\}$, отримуємо

$$\widetilde{\rho}^{T}_{j;m}(\eta_1;\ldots;\eta_m) = ze^{-\beta W(x_1;\eta_1^{'})}j(x_1)\times$$
$$\times \sum_{\xi\subseteq\cup_{i=2}^{m}\eta_i}\int_{\Gamma} K(x_1;\xi\cup\gamma)\widetilde{\rho}^{T}_{m-|I_0(\xi)|}(\eta_1^{'}\cup_{i\in I_0(\xi)}\eta_i\cup\gamma;\eta_{\{2,\ldots,m\}\setminus I_0(\xi)})\lambda_\sigma(d\gamma).$$

Остаточним є такий вигляд ключового рівняння:

$$\widetilde{\rho}^{T}_{j;m}(\eta_1;\ldots;\eta_m) = ze^{-\beta W(x_1;\eta_1^{'})}j(x_1)\times$$
$$\times \sum_{I\subset\{2,\ldots,m\}} \sideset{}{^*}\sum_{\xi\subseteq\cup_{i\in I}\eta_i} \int_{\Gamma_0} K(x_1;\xi\cup\gamma)\times$$
$$\times\, \widetilde{\rho}^{T}_{j;m-|I|}(\eta_1' \cup_{i\in I}\eta_i\cup\gamma;\eta_{\{2,\ldots,m\}\setminus I})\,\lambda_\sigma(d\gamma), \tag{4.4.123}$$

де зірочка означає, що для всіх $i\in I$, для яких $\xi\cap\eta_i\neq\emptyset$. Зауважимо, що ці рівняння виконуються за умови, що $|\eta_1|>0$. Вони виражають m-точкову j-ЧЗКФ $\widetilde{\rho}^{T}_{j;m}$ через r-точкові j-ЧЗКФ $\widetilde{\rho}^{T}_{j;r}$, $r\leq m$. Тому вони визначають $\widetilde{\rho}^{T}_{j;m}$ однозначно, якщо оператор

$$f\mapsto z\,e^{-\beta W(x_1;\eta^{'})}\chi_j(\eta)(1-\delta_0(\eta))\int_{\Gamma_0}K(x_1;\gamma)f(\gamma\cup\eta\setminus\{x_1\})\,\lambda_\sigma(d\gamma)$$

має $L^1(\Gamma_0,\lambda_\sigma)$-норму менше ніж 1. Тут $\delta_0(\eta):=1$, якщо $|\eta|=0$, $\delta_0(\eta):=0$ — в іншому випадку.

Зауваження 4.8. *Зазначимо, що* (4.4.123) *можна альтернативно отримати, взявши похідні від* (4.4.119) *відносно* $(\alpha)_2^m$ *(див.* (4.4.112)–(4.4.113)*), а також за допомогою* (4.4.114) *разом із* (4.4.122).

4.4.3. Розв'язок у термодинамічній границі

Відповідно до стратегії, використаної в [174], шукаємо розв'язок рівняння (4.4.123) у формі

$$\widetilde{\rho}^{T}_{j;m}(\eta_1;\ldots;\eta_m) = \int_{\Gamma_0}\chi_j(\cup_{i=1}^{m}\eta_i\cup\gamma)T_m(\eta_1;\ldots;\eta_m\mid\gamma)\,\lambda_\sigma(d\gamma), \tag{4.4.124}$$

де $T_m(\eta_1;\ldots;\eta_m \mid \gamma)$, $m \geq 2$ і $\gamma \in \Gamma_0$, — сім'я ядер, таких що

$$T_m(\eta_1;\ldots;\eta_m \mid \gamma) = 0 \text{ якщо } \gamma \cap \overline{\eta} \neq \emptyset, \quad \overline{\eta} := \bigcup_{i=1}^{m} \eta_i.$$

Підставивши вираз (4.4.124) для $\widetilde{\rho}^{T}_{j;m}$ і $\widetilde{\rho}^{T}_{j;m-|I|}$ в обидві частини (4.4.123), а потім застосувавши лему 1.2.3 (розширену на простір конфігурації Γ_0), одержуємо такі рекурентні співвідношення для T_m з огляду на довільність функції j:

$$T_m(\eta_1;\ldots;\eta_m \mid \gamma) = z e^{-\beta W(x_1;\eta_1^{'})} \times$$
$$\times \sum_{\xi \subset \gamma} \sum_{I \subset \{2,\ldots,m\}} \sum_{\eta \subseteq \overline{\eta}_I}^{*} K(x_1;\eta \cup \xi) T_{m-|I|}(\eta_1' \cup \overline{\eta}_I \cup \xi; \eta_{\{2,\ldots,m\}\setminus I} \mid \gamma \setminus \xi), \tag{4.4.125}$$

де поклали $\overline{\eta}_I := \bigcup_{i \in I} \eta_i$. За умови дотримання початкових умов:

$$\begin{aligned} T_m(\eta_1;\ldots;\eta_m \mid \gamma) = 0, \text{ якщо } \gamma \neq \emptyset, \text{ а } \eta_i = \emptyset \\ \text{для } i \in \{1,\ldots,m\}, \ m > 1, \\ T_1(\emptyset \mid \emptyset) = 1, \ T_1(\emptyset \mid \gamma) = 0, \text{ якщо } \gamma \neq \emptyset, \end{aligned} \tag{4.4.126}$$

рівняння (4.4.125) має єдиний розв'язок унаслідок своєї рекурентної структури. Ці умови випливають із того, що $\rho_j(\emptyset) = 1$ і $\widetilde{\rho}^{T}_{j;m}(\eta_1;\ldots;\eta_m) = 0$, якщо $\eta_i = \emptyset$ для деяких $i \in \{1,\ldots,m\}$ (див. зауваження 4.7). Основним результатом цього розділу є результат єдиності розв'язку в нескінченному об'ємі (тобто, коли $j = 1$).

Теорема 4.4.2. *Припустимо, що потенціал взаємодії ϕ задовольняє* (2.2.11). *Для заданого $m \in \mathbb{N}$, $m \geq 2$, для всіх $\beta > 0$ існує єдиний розв'язок рівняння* (4.4.123) *у термодинамічній границі $j = 1$, який можна записати у вигляді*

$$\widetilde{\rho}^{T}_{m}(\eta_1;\ldots;\eta_m) = \int_{\Gamma_0} T_m(\eta_1;\ldots;\eta_m \mid \gamma)\, \lambda_\sigma(d\gamma), \tag{4.4.127}$$

де сім'я ядер $T_m(\eta_1;\ldots;\eta_m \mid \gamma)$, $\gamma \in \Gamma_0$, *обмежена зверху степеневим рядом за активністю* z *(з інтегровними коефіцієнтами), який збігається в області*

$$ze^{2\beta B+2}C(\beta) < 1. \tag{4.4.128}$$

Схема доведення теореми 4.4.2 аналогічна до доведення та побудови розв'язку рівняння (4.1.10), описаного в підрозд. 4.1.2. Щоб довести, що (4.4.124)–(4.4.126) є розв'язком рівняння (4.4.123) при $j = 1$, необхідно показати, що ядра $T_m(\eta_1;\ldots;\eta_m \mid \gamma)$ є інтегровними відносно змінної γ за мірою λ_σ.

Для цього для заданого $h > 0$ і будь-якої обмеженої невід'ємної функції $\nu : \mathbb{R}^d \to [0,+\infty)$ введемо нову сім'ю ядер

$$Q_{h\nu}^{(m)}\left((\eta)_1^m \mid \gamma\right) := Q_m(\eta_1;\ldots;\eta_m \mid \gamma), \tag{4.4.129}$$

які єдиним чином визначаються рекурентними співвідношеннями:

$$Q_m(\{\eta_i\}_1^m \mid \gamma) = h\sum_{\xi\subset\gamma}\ \sum_{I\subset\{2,\ldots,m\}}\ \sum_{\eta\subseteq\overline{\eta}_I}^{*} K_\nu(x_1;\eta\cup\xi)\times$$
$$\times\, Q_{m-|I|}(\eta_1'\cup\overline{\eta}_I\cup\xi;\eta_{\{2,\ldots,m\}\setminus I} \mid \gamma\setminus\xi) \tag{4.4.130}$$

з початковими умовами

$$Q_m(\eta_1;\ldots;\eta_m|\gamma) = 0,\ \text{якщо}\ \gamma\neq\emptyset,\ \text{а}\ \eta_i=\emptyset\ \text{для}\ i\in\{(k)_1^m\},\ m{>}1, \tag{4.4.131}$$
$$Q_1(\emptyset \mid \emptyset) = 1,\ Q_1(\emptyset \mid \gamma) = 0,\ \text{якщо}\ \gamma\neq\emptyset,$$

а $K_\nu(x_1;\xi)$ визначено в (4.1.18).

Тоді завдяки стійкості взаємодії з виразу (4.4.125) випливає нерівність

$$|T_m(\eta_1;\ldots;\eta_m \mid \gamma)| \le ze^{2\beta B}\times$$
$$\times\sum_{\xi\subset\gamma}\ \sum_{I\subset\{2,\ldots,m\}}\ \sum_{\eta\subseteq\overline{\eta}_I}^{*}|K(x_1;\eta\cup\xi)||T_{m-|I|}(\eta_1'\cup\overline{\eta}_I\cup\xi;\eta_{\{2,\ldots,m\}\setminus I}|\gamma\setminus\xi)|. \tag{4.4.132}$$

Якщо в (4.4.132) визначити

$$ze^{2\beta B} = h \quad \text{і} \quad |e^{-\beta\phi(|x-y|)} - 1| = \nu(x-y), \qquad (4.4.133)$$

то для заданих $m \in \mathbb{N}$, $m \geq 2$ і $\gamma \in \Gamma_0$ виконується така нерівність:

$$|T_m(\eta_1; \ldots; \eta_m \mid \gamma)| \leq Q_m(\eta_1; \ldots; \eta_m \mid \gamma). \qquad (4.4.134)$$

Це випливає з рекурентності співвідношень (4.4.132), (4.4.130) за індукцією. Отже, для оцінки ядер T_m треба знайти розв'язки (4.4.130).

Розв'язок $Q_m(\eta_1; \ldots; \eta_m \mid \gamma)$ рівняння (4.4.130) з умовами (4.4.131) можна записати за допомогою *графів-лісів*. Для кожного набору кластерів $\{\eta_1; \ldots; \eta_m\}$ з $\eta_j \in (\Gamma_0 \setminus \emptyset)$ і кожної конфігурації $\gamma \in \Gamma_0$ визначаємо набір графів-лісів $\mathfrak{S}(\eta_1; \ldots; \eta_m \mid \gamma)$ наступним чином. Зв'язні компоненти графів $\widetilde{f} \in \mathfrak{S}(\eta_1; \ldots; \eta_m \mid \gamma)$ є графами-деревами з вершинами, заданими точками $\bigcup_{i=1}^{m} \eta_i \cup \gamma$, і такими, що немає ребер (або ліній), які з'єднують вершини одного кластера η_i (для $i = 1, \ldots, m$). Кожне дерево містить точку в $\bigcup_{i=1}^{m} \eta_i$ і, якщо i_0 є найнижчим індексом, так що η_{i_0} містить точку дерева, то ця точка єдина (*корінь* дерева). Крім того, для кожної іншої вершини z дерева існує шлях $z_1, \ldots, z_k$ такий, що $z_k = z$, й існує ребро між коренем x_0 і z_1 та між кожною парою z_p і z_{p+1}, такою, що якщо $z_p \in \eta_{i_p}$, то, якщо $z_{p+1} \in \eta_{i_{p+1}}$, z_p є єдиною точкою в η_{i_p}, з'єднаною з точкою в $\eta_{i_{p+1}}$ ребром *у лісі*, тоді якщо $z_{p+1} \in \gamma$, то z_p є єдиною точкою в η_{i_p}, з якою він з'єднаний ребром у графі-лісі. Зауважимо, що одна точка $x \in \bigcup_{i=1}^{m} \eta_i$ також є деревом (*зрублене дерево* або *пеньок*) з аналітичним внеском h. Нарешті, якщо всі точки конфігурацій η_i (для кожного $i = 1, \ldots, m$) об'єднати в одну вершину (а відповідні ребра — в одне ребро), то лісовий граф $\widetilde{f} \in \mathfrak{S}(\eta_1; \ldots; \eta_m \mid \gamma)$ зводиться до зв'язного деревоподібного графа з $m + n$ вершинами, де $n = |\gamma|$.

На рис. 4.2 показано типові приклади лісових графів. Ліс на верхньому графіку складається з двох дерев і трьох пеньків: перше має корінь у η_1, а друге — в η_2. Зауважимо, що одна точка в η_i може бути пов'язана з декількома точками в η_j (від однієї до l_j, а кількість графів $2^{l_j} - 1$). Окрім того, наприклад, лише перша точка η_2 з'єднана з η_3. Ліс на нижньому графіку ілюструє той факт, що на шляху $z_1, \ldots, z_p$, якщо $z_p \in \eta_{i_p}$ і $z_{p+1} \in \eta_{i_{p+1}}$, то можливо, що $i_p > i_{p+1}$ за умови, коли корінь знаходиться в η_i з $i < i_{p+1}$. Наприклад, друга вершина η_2 і перша вершина η_3 мають корінь у η_1.

За допомогою наведених вище позначень сформулюємо три леми, на яких ґрунтується доведення теореми 4.4.2:

Лема 4.4.3. *Розв'язок рівняння* (4.4.130) *з умовами* (4.4.131) *можна записати як*

$$Q_m(\eta_1; \ldots; \eta_m \mid \gamma) = \sum_{\widetilde{f} \in \mathfrak{S}(\eta_1; \ldots; \eta_m \mid \gamma)} G_\nu(\widetilde{f}). \tag{4.4.135}$$

Тут аналітичний внесок лісового графа $\widetilde{f} \in \mathfrak{S}(\eta_1; \ldots; \eta_m \mid \gamma)$, *позначений* $G_\nu(\widetilde{f})$, *має вигляд*

$$G_\nu(\widetilde{f}) = G_\nu(\widetilde{f}; \eta_1; \ldots; \eta_m \mid \gamma) = h^{l+|\gamma|} \prod_{(x,y) \in E(\widetilde{f})} \nu(x-y), \tag{4.4.136}$$

де $E(\widetilde{f})$ *позначає множину ребер* $\widetilde{f}$ *і*

$$l := \sum_{i=1}^{m} l_i \quad \text{з} \quad l_i := |\eta_i|, \quad i = 1, \ldots, m. \tag{4.4.137}$$

Індивідуальні аналітичні внески легко оцінити з таких лем.

Лема 4.4.4. *Нехай є сталі*

$$\nu_0 := \max_{x \in \mathbb{R}^d} \nu(x) = \max_{x \in \mathbb{R}^d} |e^{-\beta\phi(|x|)} - 1| < +\infty, \tag{4.4.138}$$

$$\nu_1 := \int_{\mathbb{R}^d} |e^{-\beta\phi(|x|)} - 1| \, dx < +\infty. \tag{4.4.139}$$

Тоді для заданого графа-лісу $\widetilde{f} \in \mathfrak{S}(\eta_1; \ldots; \eta_m \mid \gamma)$ *з* $|\gamma| = n \in \mathbb{N}$

$$\int_{\mathbb{R}^{\ltimes}} G_\nu(\widetilde{f}; \eta_1; \ldots; \eta_m \mid \{y_1, \ldots, y_n\}) \, dy_1 \cdots dy_n \le h^{l+n} \nu_0^{|E_{\overline{\eta}}(\widetilde{f})|} \nu_1^n, \tag{4.4.140}$$

де l визначено в (4.4.137), *а*

$$|E_{\overline{\eta}}(\widetilde{f})| \le l - l_1, \quad \overline{\eta} := \bigcup_{i=1}^{m} \eta_i,$$

позначає кількість ребер, в яких один або два кінці належать множині $\bigcup_{i=1}^{m} \eta_i$.

Залишається оцінити кількість графів-лісів за фіксованих конфігурацій $\bigcup_{i=1}^{m} \eta_i \cup \gamma$. Позначимо це число через $N_n^{(m)}(l_1, \dots, l_m)$, $l_i := |\eta_i|$, і доведемо таку комбінаторну лему:

Лема 4.4.5. *Нехай $n \in \mathbb{N}_0$ і $m \in \mathbb{N}$, $m \ge 2$. Покладемо $L_i :=$ $:= 2^{l_i} - 1$ для $i = 2, \dots, m$. Тоді*

$$N_n^{(m)}(l_1; \dots; l_m) = l_1 (\prod_{i=2}^{m} L_i) \left(\sum_{i=1}^{m} l_i + n \right)^{m+n-2}. \qquad (4.4.141)$$

Зауваження 4.9. *Зазначимо, що* (4.4.141) *є узагальненням (добре відомої) формули Келі для кількості графів-дерев з $n \ge 2$ вершинами:*

$$K_n = n^{n-2}$$

для випадку графів-лісів системи m кластерів $(\eta_i)_{i=1}^{m}$ і n одиничних вершин з $l_i = |\eta_i|$, $n = |\gamma|$.

Доведення теореми 4.4.2. Нехай $\beta > 0$ і $z > 0$ задовольняють нерівність (4.4.128). Зважаючи на (4.4.138)–(4.4.139), введемо

$$\widetilde{\nu}_0(\beta) := \begin{cases} 1, & \text{якщо } \nu_0(\beta) \le 1, \\ \nu_0(\beta), & \text{якщо } \nu_0(\beta) > 1. \end{cases}$$

Сталу $C(\beta) > 0$ визначено в (2.2.11). З (4.4.134) разом з (4.4.135) маємо

$$|T_m(\eta_1; \dots; \eta_m \mid \gamma)| \le Q_m(\eta_1; \dots; \eta_m \mid \gamma) = \sum_{\widetilde{f} \in \mathfrak{S}(\eta_1; \dots; \eta_m | \gamma)} G_\nu(\widetilde{f}),$$

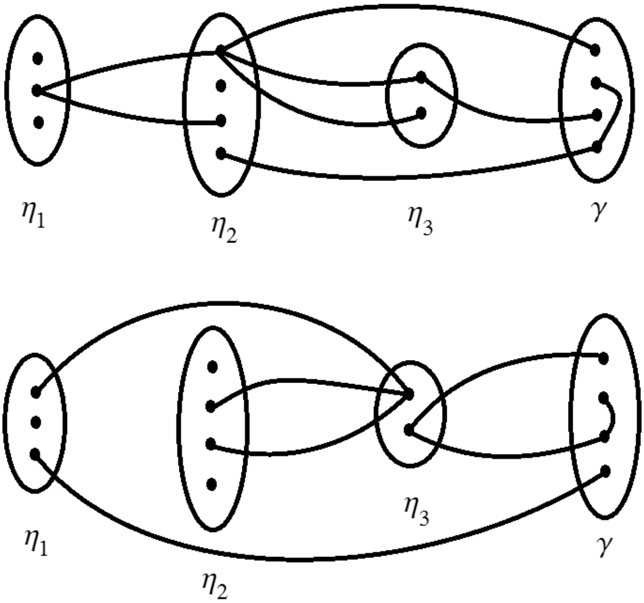

Рис. 4.2.

де $G_\nu(\widetilde{f})$ — моном за z степенем $l+n$. Ураховуючи оцінку (4.4.140) і (4.4.141), отримуємо

$$|\widetilde{\rho}^T_m(\eta_1;\ldots;\eta_m)| \leq$$
$$\leq \left(2ze^{2\beta B}\right)^l (\widetilde{\nu}_0(\beta))^{l-l_1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(l+n)^{m+n-2}}{n!} \left(ze^{2\beta B}C(\beta)\right)^n .$$

Застосовуючи формулу Стірлінга $n! > n^n e^{-n}\sqrt{2\pi n}$, маємо

$$|\widetilde{\rho}^T_m(\eta_1;\ldots;\eta_m)| \leq$$
$$\leq \left(2ze^{2\beta B+1}\right)^l (\widetilde{\nu}_0(\beta))^{l-l_1}\, l^{m-2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(ze^{2\beta B+2}\nu_1(\beta)\right)^n .$$

Також ураховано оцінку $(1+\frac{n}{l})^{m-2} \leq e^n$, бо $l \geq m-2$. ■

Зауваження 4.10. *Аналогічно до* (4.4.135)–(4.4.136) *існує аналітичний вираз для ядер* $T_m(\eta_1;\dots;\eta_m \mid \gamma)$ *у термінах графів-лісів:*

$$T_m(\eta_1;\dots;\eta_m \mid \gamma) = \sum_{\widetilde{f}\in\mathfrak{S}(\eta_1;\dots;\eta_m|\gamma)} G_C(\widetilde{f}), \tag{4.4.142}$$

$$G_C(\widetilde{f};\eta_1;\dots;\eta_m \mid \gamma) = z^{l+n} \prod_{(x,y)\in E(\widetilde{f})} C_{xy} \prod_{(x,y)\in(E(f^*)\setminus E(\widetilde{f}))} e^{-\beta\phi(|x-y|)}, \tag{4.4.143}$$

де f^* *позначає максимальний граф-ліс, побудований з* $\widetilde{f}$ *додаванням ребер, що з'єднують усі точки в кожному кластері* η_i, $i = 1,\dots,m$, *а потім додаванням ребер з використанням процедури Пенроуза в [188].*

Зауваження 4.11. *Очевидно, що звичайні усічені (зв'язані) кореляційні функції є окремим випадком, отриманим шляхом вибору* $\eta_1 = \{x_1\},\dots,\eta_m = \{x_m\}$ *у* (4.4.142) *та* (4.4.143). *У цьому випадку кожен член розкладу є сумою внесків зв'язаних графів-дерев, а сам розклад збігається з тим, що отримав Пенроуз у праці [188] (див. також [93, eq. (4.4)]).*

4.4.4. Доведення лем 4.4.3, 4.4.4 і 4.4.5

Доведення леми 4.4.3. Доведення виконується індукцією за $n = |\gamma|$. Розглянемо спочатку випадок

$$Q_m(\eta_1;\dots;\eta_m \mid \emptyset) =$$
$$= h \sum_{I\subset\{2,\dots,m\}} \sum_{\eta\subseteq\overline{\eta}_I}^{*} K_\nu(x_1;\eta) Q_{m-|I|}(\eta_1' \cup \overline{\eta}_I; \eta_{\{2,\dots,m\}\setminus I} \mid \emptyset). \tag{4.4.144}$$

Зокрема, $Q_1(\eta_1 \mid \emptyset) = hQ_1(\eta_1' \mid \emptyset)$, так що $Q_1(\eta_1 \mid \emptyset) = h^{|\eta_1|}$. Це узгоджується з (4.4.135), оскільки єдине дозволене дерево складається з окремих точок $x \in \eta_1$. Тепер проведемо індукцію за m і $l_1 = |\eta_1|$. Для $m = 1$ вже маємо, що $Q_1(\eta_1 \mid \emptyset) = h^{l_1}$.

Припускаючи, що $Q_1 \ldots, Q_{m-1}$ задано сумою внесків лісу, коли $\gamma = \emptyset$, члени в (4.4.144) відповідають побудові лісу на $\bigcup_{i=1}^{m} \eta_i$ таким чином. Точка x_1 з’єднана з набором точок η поза η_1. Якщо I — це набір таких індексів, що $\eta \cap \eta_i \neq \emptyset$, то в $Q_{m-|I|}(\eta_1' \cup \overline{\eta}_I; \eta_{I^c} \mid \emptyset)$ більше немає зв’язків у межах $\eta_1' \cup \overline{\eta}_I$, тобто між будь-якими іншими точками η_1 і точками $\overline{\eta}_I$ або між двома точками $\overline{\eta}_I$. У $Q_{m-|I|}$ або $m - |I| < m$, або $I = \emptyset$, у цьому випадку перша підмножина η_1' і $|\eta_1'| < |\eta_1|$. Отже, згідно з індукційною гіпотезою внески відповідних графів є лісовими графами з вершинами в $\eta_1' \cup \bigcup_{i=2}^{m} \eta_i$, так що кожне дерево містить щонайбільше одну точку $\eta_1' \cup \overline{\eta}_I$. Це означає, що коли зв’язки з x_1 додаються, результуючий граф усе ще складається з окремих дерев.

Позначимо отриманий лісовий граф на $\bigcup_{i=1}^{m} \eta_i$ через $\widetilde{f}$. Якщо $x \neq x_1$ є вершиною в $\widetilde{f}$, то згідно з гіпотезою індукції існує послідовність точок $z_0 \in \eta_1' \cup \bigcup_{i=2}^{m} \eta_i$, $z_1, \ldots, z_k \in \overline{\eta}_{I^c}$ так, що $z_k = x$, і якщо $z_p \in \eta_{i_p}$ $(p = 0, \ldots, k)$, то z_p — єдина точка в η_{i_p}, з’єднана з точкою в $\eta_{i_{p+1}}$ ребром у $\widetilde{f}$ (зверніть увагу, що $z_0 = x$, якщо $x \in \eta_1' \cup \overline{\eta}_I$). Якщо $z_0 \in \eta_1'$ або $z_0 \in \eta_i \setminus \eta$, то це корінь дерева в $\widetilde{f}$. Якщо $z_0 \in \eta_i \cup \eta$, то x_1 є коренем дерева, що містить x, і немає іншої точки $x' \in \eta_1'$, з’єднаної з точкою в η_i ребром у $\widetilde{f}$.

Згортаючи точки $\{x_1\} \cup \eta$ до однієї точки, ліс скорочують до лісу на $\eta_1' \cup \overline{\eta}_I$ і $\bigcup_{i \in \{2,\ldots,m\} \setminus I} \eta_i$, оскільки більше немає ребер у $\widetilde{f}$ між точками $\eta_1 \cup \overline{\eta}_I$. Отриманий ліс є одним із внесків у $Q_{m-|I|}(\eta_1' \cup \overline{\eta}_I; \eta_{I^c} \mid \emptyset)$. Якщо кожен η_i звести до точки, отриманий графік зв’язується індукцією за винятком, можливо, випадку, коли $\eta_1 = \{x_1\}$ і $\eta = \emptyset$. Але в цьому випадку, якщо $m > 1$, внесок $Q_m(\eta_1'; \eta_2; \ldots; \eta_m | \emptyset) = 0$, оскільки $\eta_1' = \emptyset$.

Залишається провести індукцію за n. Доданок з $\xi = \emptyset$ дає внесок

$$h \sum_{I \subset \{2,\ldots,m\}} \sum_{\eta \subseteq \overline{\eta}_I}^{*} K_\nu(x_1; \eta) Q_{m-|I|}(\eta_1' \cup \overline{\eta}_I; \eta_{\{2,\ldots,m-k\} \setminus I} \mid \gamma).$$

Це схоже на випадок $\gamma = \emptyset$ і відповідає випадку, коли x_1 пов’язане лише з точками в $\bigcup_{i=2}^{m} \eta_i$, а дерево, що залишилося після згортання — точки $\{x_1\} \cup \overline{\eta}_I$, робить такий внесок за індукцією, оскільки або $m - |I| < m$, або $|\eta_1'| < |\eta_1|$. Ще раз внесок $I = \emptyset$ дорівнює нулю, якщо $\eta_1 = \{x_1\}$. Інші умови складніші. Тепер x_1 пов'язане з набором точок $\xi \subset \gamma$, а також набором точок $\eta \subset \bigcup_{i=2}^m \eta_i$.

Збираючи точки $\{x_1\} \cup \xi \cup \eta$ в одну вершину, відповідний ліс є лише внеском у $Q_{m-|I|}(\eta_1' \cup \overline{\eta}_I \cup \xi; \eta_{I^c} \mid \gamma \setminus \xi)$ за індукцією, оскільки $|\gamma \setminus \xi| < n$. Для $y \in \xi$ більше немає ребер між іншими точками η_1 і y. Крім того, більше немає ребер, що приєднують $x \in \overline{\eta}_I$ до іншої точки η_1.

Залишається показати, що після згортання точок кожного η_i до однієї вершини отриманий граф є зв'язним деревом. Це складніше.

Спочатку доведемо зв'язність. Припустимо, що існує набір індексів $J \subset \{1, \dots, m\}$ (з $1 \in J$) і підмножина $\zeta \subset \gamma$ такі, що $J \neq \{1, \dots, m\}$ або $\zeta \neq \gamma$ і немає ребер між точками $\overline{\eta}_J \cup \zeta$ і точками в доповненні. Зрозуміло, що $I \subset J$, оскільки точки η пов'язані з x_1 (через фактор $K_\nu(x_1; \xi \cup \eta)$) і $\eta \cap \eta_i \neq \emptyset$ для $i \in I$. Також $\xi \subset \zeta$ з тієї самої причини.

Відповідно до гіпотези індукції для $Q_{m-|I|}(\eta_1' \cup \overline{\eta}_I \cup \xi; \eta_{I^c} \mid \gamma \setminus \xi)$, немає множин $J' \supset I$ і $\zeta' \subset \gamma \setminus \xi$ без зовнішніх ребер, крім тривіальних $J' = \emptyset$ і $\zeta' = \emptyset$ або $J' = I \cup I^c$ і $\zeta' = \gamma \setminus \xi$. Тому $J \supset \{2, \dots, m\}$ і $\gamma \setminus \xi \subset \zeta$, або $J \cap \{2, \dots, m\} = \emptyset$ і $\zeta \subset$ $\subset \gamma \setminus \xi$. У першому випадку $J = \{1, \dots, m\}$ і $\zeta = \gamma$, що суперечить початковому припущенню. У другому випадку $J = \{1\}$ і $\xi = \emptyset$, а оскільки $I \subset J$, то $I = \emptyset$. Відповідний внесок дорівнює нулю, як зазначено вище, тому $\eta_1' \cup \overline{\eta}_I \cup \xi = \emptyset$.

Щоб переконатися, що результуючий графік є деревом, зауважимо, що в будь-якому лісі, що відповідає $Q_{m-|I|}(\eta_1' \cup \xi \cup \overline{\eta}_I; \eta_{I^c} \mid \gamma \setminus \xi)$, є лише одне ребро між точкою $\eta_1' \cup \xi \cup \overline{\eta}_I$ і деревом на $\eta_{I^c} \cup \gamma \setminus \xi$. Фактор $K_\nu(x_1; \xi \cup \eta)$ дає ребра між x_1 і точками $\xi \cup \eta$, а отже, лише до однієї точки цього дерева. ■

Доведення леми 4.4.4. Наведемо лише головні аргументи. Якщо y_i є кінцевою вершиною дерева в лісі $\widetilde{f}$, то виникає внесок із залученням фактора ν_1. Те саме правильно, якщо від y_i назовні є лише вершини y_k, оскільки можна їх інтегрувати послідовно. У випадку, коли y_i лежить між точками x_i і x_k у $\bigcup_{i=1}^m \eta_i$, спочатку використовуємо нерівність $\nu(y_i - x_k) \le \nu_0$. ■

Доведення леми 4.4.5. З (4.4.130) випливає, що $N_n^{(m)}(l_1;\ldots;l_m)$ задовольняє рекурентні співвідношення

$$N_n^{(m)}(l_1;\ldots;l_m) = \\ = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} \sum_{I\subset\{2,\ldots,m\}} L_I N_{n-k}^{(m-|I|)}(l_1 + l_I + k - 1; l_{i_2};\ldots;l_{i_{m-|I|}}), \tag{4.4.145}$$

де позначено $L_I := \prod_{i\in I} L_i$, $l_I := \sum_{i\in I} l_i$ (з умовою $l_\emptyset := 0$) і $\{i_2,\ldots,i_{m-|I|}\} := \{2,\ldots,m\} \setminus I$, а також $l := \sum_{i=1}^{m} l_i$. Введемо нові числа $\tilde{N}_n^{(m)}(l_1;\ldots;l_m)$ так, що

$$N_n^{(m)}(l_1;\ldots;l_m) = (\prod_{i=2}^{m} L_i)\tilde{N}_n^{(m)}(l_1;\ldots;l_m).$$

Тоді рекурентні рівняння (4.4.145) можна записати так:

$$\tilde{N}_n^{(m)}(l_1;\ldots;l_m) = \\ = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} \sum_{I\subset\{2,\ldots,m\}} \tilde{N}_{n-k}^{(m-|I|)}(l_1 + l_I + k - 1; l_{i_2};\ldots;l_{i_{m-|I|}}). \tag{4.4.146}$$

Доведемо, що за початкової умови $\tilde{N}_0^{(1)}(l_1) = 1$

$$\tilde{N}_n^{(m)}(l_1;\ldots;l_m) = l_1(\sum_{i=1}^{m} l_i + n)^{m+n-2} \tag{4.4.147}$$

є розв'язком рекурентних співвідношень (4.4.146). Підставляючи ідентифікатор

$$\tilde{N}_{n-k}^{(m-|I|)}(l_1 + l_I + k - 1; l_{i_2};\ldots;l_{i_{m-|I|}}) = \\ = (l_1 + l_I + k - 1)(l + n - 1)^{m+n-k-|I|-2}$$

у праву частину (4.4.146), отримуємо

$$\tilde{N}_n^{(m)}(l_1;\ldots;l_m)=\sum_{i=1}^{3}M_i,$$

де

$$\begin{aligned}
M_1 &:= \sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}(l+n-1)^{n-k-1}\sum_{I\subset\{2,\ldots,m\}} l_1(l+n-1)^{m-|I|-1},\\
M_2 &:= \sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}(l+n-1)^{n-k-1}\sum_{I\subset\{2,\ldots,m\}} l_I(l+n-1)^{m-|I|-1},\\
M_3 &:= \sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}(l+n-1)^{n-k-1}\sum_{I\subset\{2,\ldots,m\}} (k-1)(l+n-1)^{m-|I|-1}.
\end{aligned}$$

У M_2 спершу сумуємо за множиною I з $|I|=p$, скориставшись

$$\sum_{\substack{I\subset\{2,\ldots,m\}\\|I|=p}} l_I=\binom{m-2}{p-1}\sum_{i=2}^{m}l_i=\binom{m-2}{p-1}(l-l_1).$$

У двох інших сумах це підсумовування виконати легко. Як наслідок,

$$M_1 = l_1 \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} (l+n-1)^{n-k-1} \sum_{p=0}^{m-1} \binom{m-1}{p} (l+n-1)^{m-p-1} =$$
$$= l_1 \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} (l+n-1)^{n-k-1} (l+n)^{m-1} = \frac{l_1 (l+n)^{m+n-1}}{l+n-1},$$
$$M_2 =$$
$$= (l-l_1) \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} (l+n-1)^{n-k-1} \sum_{p=1}^{m-1} \binom{m-2}{p-1} (l+n-1)^{m-p-1} =$$
$$= (l-l_1)(l+n-1)^{-1}(l+n)^{m+n-2},$$
$$M_3 =$$
$$= \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} (l+n-1)^{n-k-1} \sum_{p=0}^{m-1} \binom{m-1}{p} (k-1)(l+n-1)^{m-p-1} =$$
$$= \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} (k-1)(l+n-1)^{n-k-1} (l+n)^{m-1} = -\frac{l(l+n)^{m+n-2}}{l+n-1},$$

де використано тотожність

$$\sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} (k-1)(l+n-1)^{n-k-1} \ = \ -l(l+n-1)^{-1}(l+n)^{n-1}.$$

Дійшли до висновку, що $\sum_{i=1}^{3} M_i = l_1(l+n)^{m+n-2}$, що завершує індукцію. Це підтверджує (4.4.147). ■

4.4.5. Характер послаблення кореляцій

Тут наведемо основну теорему, яка визначає властивість спадання кореляцій залежно від того, як розташовані групи частинок (кластери) $\eta_1, ..., \eta_m$.

Теорема 4.4.6. *Нехай потенціал взаємодії* ϕ *задовольняє умови стійкості* (2.1.3) *та регулярності* (2.2.11) *і для заданого*

$\beta > 0$ існує стала $C_1 = C_1(\beta)$ така, що для $\alpha > d$

$$|e^{-\beta\phi(|x|)} - 1| \leq \frac{C_1}{1 + |x|^\alpha}.$$

Тоді за умови, що

$$ze^{2\beta B}\left[C(\beta) + \overline{\nu}_1(\beta)(e + 2^{1+\alpha})\right] < 1, \;\; \overline{\nu}_1(\beta) = C_1 \int_{\mathbb{R}^d} \frac{dx}{1 + |x|^\alpha},$$

для заданого $m \geq 2$ існують сталі $A_{m,\sigma}(\beta, z, \alpha)$ такі, що для ЧЗКФ виконується оцінка

$$|\tilde{\rho}_m^T(\eta_1; \ldots; \eta_m)| \leq \sum_{\sigma=1}^{m} A_{m,\sigma} \max_{T_m \in \mathcal{T}} \overline{\nu}_{T_m},$$

де $\mathcal{T}$ — множина дерев на m точках, а

$$\overline{\nu}_{T_m} := \prod_{(i,j)\in T_m} \max_{x_i \in \eta_i; x_j \in \eta_j} \overline{\nu}(x_i - x_j).$$

Доведення теореми досить складне, його детальне викладення наведено у праці [82]. Характер поведінки кореляцій можна побачити на прикладі 2-ЧЗКФ.

Доведення теореми для $m = 2$.

Спочатку встановимо два технічні результати (див. нижче лему 4.4.7 і твердження 4.4.8).

Лема 4.4.7. *Нехай $\overline{\nu}$ — ядро в* (4.4.144) *з $\alpha > d$. Тоді для всіх $p \in \mathbb{N}$, $p \geq 2$ і $x_1, \ldots, x_p \in \mathbb{R}^d$*

$$\int_{\mathbb{R}^d} \prod_{r=1}^{p} \overline{\nu}(x_r - y)\, dy \leq 2^{\alpha(p-1)} \overline{\nu}_1 \sum_{r=1}^{p} \prod_{\substack{k=1\\k\neq r}}^{p} \overline{\nu}(x_k - x_r). \qquad (4.4.148)$$

Доведення. Розіб'ємо інтеграл за y на області, де $|y - x_r| < < \max_{k\neq r} |y - x_k|$. Тоді $|x_k - y| > \frac{1}{2}|x_k - x_r|$, а нерівність (4.4.148) випливає з

$$\frac{1}{|x_k - y|^\alpha + 1} < \frac{1}{(\frac{1}{2}|x_k - x_r|)^\alpha + 1} < \frac{2^\alpha}{|x_k - x_r|^\alpha + 1}. \qquad \blacksquare$$

Щоб підрахувати можливі графи, спочатку виділимо частину, що складається з дерев із вершинами в γ за винятком, можливо, однієї кінцевої точки. Це можна зробити наступним чином.

Визначимо

$$\begin{aligned}
&Q_2(\eta_1;\eta_2 \mid 0) := Q_2(\eta_1;\eta_2 \mid \emptyset),\\
&Q_2(\eta_1;\eta_2 \mid n) := \int_{\mathbb{R}^{dn}} Q_2(\eta_1;\eta_2 \mid \{y_1,\dots,y_n\})\, dy_1 \cdots dy_n, \ n \in \mathbb{N},
\end{aligned} \tag{4.4.149}$$

де сім'я ядер $Q_2(\eta_1;\eta_2 \mid \gamma)$ і $\gamma \in \Gamma_0$ задані в (4.4.130) з умовами (4.4.131). Вони задовольняють такі рекурентні рівняння:

$$\begin{aligned}
&Q_2(\eta_1;\eta_2 \mid n) = hK^{(0)}(x_1;\eta_2)\times\\
&\times\sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}\int_{\mathbb{R}^{dk}}\prod_{j=1}^{k}K_\nu(x_1;y_j)Q_1(\eta_1'\cup\eta_2\cup\{y_1,\dots,y_k\}\,|\,n-k)\,dy_1\cdots dy_k,
\end{aligned} \tag{4.4.150}$$

де член з $k=0$ у сумі зводиться до $Q_1(\eta_1' \cup \eta_2 \mid n)$, а

$$\begin{aligned}
&K^{(0)}(x_i;\emptyset) := 1, \quad i \in \{1,2\},\\
&K^{(0)}(x_i;\eta_2) := \sum_{\eta\subset\overline{\eta}_I}^{*} K_\nu(x_i;\eta) = \sum_{\eta\subset\overline{\eta}_I}^{*}\prod_{x\in\eta}\nu(x_i - x), \quad I \subset \{1,2\}\setminus\{i\}.
\end{aligned} \tag{4.4.151}$$

Тоді маємо таке твердження:

Твердження 4.4.8. *Дано* $n \in \mathbb{N}_0$ *і розв'язок рекурсійного відношення* (4.4.150) *можна виразити як*

$$Q_2(\eta_1;\eta_2 \mid n) = h^l\sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}k!N_{n-k}^{(2)}(l+k)(h\nu_1)^{n-k}\widetilde{Q}_2(\eta_1;\eta_2 \mid k), \tag{4.4.152}$$

де $l = |\eta_1| + |\eta_2|$, ν_1 *визначено в* (4.4.139), $N_{k'}^{(2)}$ *з* $0 \le k' \le n$ *заданого в* (4.4.141), *а* $\widetilde{Q}_2(\eta_1;\eta_2 \mid k)$ *складається зі внесків усіх лісових графів у* $\mathfrak{G}(\eta_1;\eta_2 \mid \{y_1,\dots,y_k\})$, *в яких усі вершини* y_i γ *приєднані принаймні до двох інших вершин.*

Доведення за індукцією з формули (4.4.150).

Це також легко зрозуміти графічно наступним чином. Дано граф-ліс у $\mathfrak{S}(\eta_1;\eta_2 \mid \{y_1,\ldots,y_n\})$. Розглянемо точки $\gamma = \{y_1,\ldots,y_n\}$, які з'єднані лише з однією іншою вершиною (кінцевими точками). Це частини дерев на γ з єдиною базовою точкою в γ або в $\bigcup_{i=1}^{2}\eta_i$. Починаючи з кінцевих точок, відповідні точки y_i можна легко проінтегрувати, отримуючи множники $h\nu_1$. У графі, що залишився, кожна точка γ з'єднана принаймні з двома іншими вершинами.

Позначимо внесок цього графа через $\widetilde{Q}_2(\eta_1;\eta_2 \mid k)$, де k — кількість вершин, що залишилися в γ. І навпаки, подано граф-ліс в $\mathfrak{S}(\eta_1;\eta_2 \mid \{y_1,\ldots,y_k\})$, в якому кожна точка y_i $(i = 1,\ldots,k)$ з'єднана принаймні з двома іншими вершинами. Отримуємо внесок від графів у $\mathfrak{S}(\eta_1;\eta_2 \mid \{y_1,\ldots,y_n\})$ з $n \geq k$, що містять цей граф і так, що всі інші точки $y_{k+1},\ldots,y_n$ знаходяться в деревах з єдиною базовою точкою, підрахунком кількості можливостей приєднання дерев до заданого дерева із загальною кількістю вершин $n-k$. Але це число визначається точно:

$$\binom{n}{k} k! N^{(2)}_{n-k}(l+k)(h\nu_1)^{n-k}.$$

Дійсно, можна вибрати, яка з n точок належить вихідному графу $\binom{n}{k}$ способами та впорядкувати їх $k!$ способами. Тоді кількість способів формування дерев із $n-k$ точок, що залишилися, визначається як $N^{(2)}_{n-k}(l+k)$, оскільки для цього можна розглянути всі точки вихідного графа як такі, що належать до одного кластера, бо їх не можна з'єднати один з одним. Очевидно, що існує $l+k$ таких точок, які потрібно з'єднати з наступними $n-k$ зовнішніми точками. За лемою 4.4.5 це можна зробити $N^{(2)}_{n-k}(l+k)$ способами.

Є дві можливості: або між η_1 і η_2 у лісі є хоча б одне ребро, або його немає. У першому випадку обмеження лісу на γ розбивається на окремі дерева, кожне з яких пов'язане з однією точкою η_1 або η_2. У другому випадку обмеження на γ також розбивається на окремі дерева, але одне з них пов'язане з однією точкою η_1, а також з однією або кількома точками η_2. Інші знову приєднано до однієї точки η_1 або η_2. Дерева, пов'язані з однією точкою, легко інтегруються, створюючи фактори ν_1. Якщо існує дерево, що з'єднує η_1 і η_2, то одна точка y_1 цього дерева в γ з'єднана з точкою η_1 і однією точкою $y_2 \in \gamma$ та з однією або кількома точками η_2 (y_1 може дорівнювати y_2). У цьому випадку існує єдиний шлях у дереві, що з'єднує y_1 з y_2. Інша частина дерева складається з окремих дерев, з'єднаних з окремими точками цього шляху (або точками $\eta_1 \cup \eta_2$). Їх можна інтегрувати, задаючи множники ν_1, як і раніше. Отже справедливе твердження 4.4.8 з

$$\widetilde{Q}_2(\eta_1;\eta_2 \mid k) := \sum_{x_1 \in \eta_1} K^{(k)}(x_1;\eta_2), \quad 0 \le k \le n,$$

де $K^{(0)}(x_i;\eta_j)$, $x_i \in \eta_i$ і $i \neq j$ задано в (4.4.151) і $K^{(k)}(x_i;\eta_j)$, $x_i \in \eta_i$, а $i \neq j$ визначено як $(k \geq 1)$

$$K^{(k)}(x_i;\eta_j) := h^k \int_{\mathbb{R}^{dk}} \nu(x_i - y_1) \prod_{r=1}^{k-1} \nu(y_r - y_{r+1}) K^{(0)}(y_k;\eta_j)\, dy_1 \cdots dy_k.$$

■

Припустимо тепер, що ν поліноміально обмежений, тобто $\nu(x) \le C\overline{\nu}(x)$ для деякої сталої $C > 0$ і $\alpha > d$. Інтегруючи точки на шляху від y_1 до y_{k-1}, з леми 4.4.7 одержуємо множники $2^{1+\alpha}C\overline{\nu}_1$:

$$K^{(k)}(x_1;\eta_2) \le (hC)^k (2^{1+\alpha}\overline{\nu}_1)^{k-1} \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\nu}(x_1 - y) K^{(0)}(y;\eta_2)\, dy, \;\; k \ge 1. \tag{4.4.153}$$

Тут також враховано, що $\overline{\nu} \le 1$. Інтеграл у (4.4.153) можна оцінити наступним чином. З (4.4.151) маємо

$$\begin{aligned} K^{(0)}(y;\eta_i) &\le \sum_{x_i \in \eta_i} \sum_{\eta' \subset (\eta_i \setminus \{x_i\})} C^{|\eta'|+1} \overline{\nu}(y - x_i) \le \\ &\le C(1+C)^{l_i - 1} \sum_{x_i \in \eta_i} \overline{\nu}(y - x_i). \end{aligned} \tag{4.4.154}$$

Підставляючи (4.4.154) у (4.4.153) і користуючись лемою 4.4.7, отримуємо

$$K^{(k)}(x_1;\eta_2) \le (h\overline{\nu}_1 2^{1+\alpha}C)^k C(1{+}C)^{l_2-1} \sum_{x_2\in\eta_2} \overline{\nu}(x_1{-}x_2),\ \ 0\le k\le n.$$

Під час підсумовування за деревами, пов'язаними з однією точкою такого шляху, кількість вершин у цих деревах необмежена. Це означає, що можна розглядати ці дерева окремо, маючи базові точки на $k+l$ точках шляху від η_1 до η_2, які містять n_i+1 точок $(i=1,\ldots,k+l)$. Є $(n_i+1)^{n_i-1}$ таких дерев для кожного i, тож тепер загалом

$$|\widetilde{\rho}_2^T(\eta_1;\eta_2)| \le C(1+C)^{l_2-1}h^l \sum_{x_1\in\eta_1}\sum_{k=0}^{\infty}(h\overline{\nu}_1 2^{1+\alpha}C)^k\times$$
$$\times \sum_{n_1,\ldots,n_{k+l}=0}^{\infty}\prod_{i=1}^{k+l}\frac{(n_i+1)^{n_i-1}(h\nu_1)^{n_i}}{n_i!}\sum_{x_2\in\eta_2}\overline{\nu}(x_1-x_2).$$

Тут є фактор $\frac{n!}{k!n_1!\ldots n_{k+l}!}$ для кількості способів розподілу вершин у γ за окремими деревами та рештою k точок γ і коефіцієнт $k!$ для кількість способів упорядкування вершин на шляху, що з'єднує два кластери, а також коефіцієнт $\frac{1}{n!}$ з визначення кореляційної функції. Використовуючи тепер $(k+1)^{k-1}\le k!e^k$ при $k\ge 1$, отримуємо

$$|\widetilde{\rho}_2^T(\eta_1;\eta_2)| \le l_1l_2C(1+C)^{l_2-1}h^l\sum_{k=0}^{\infty}\left(h\overline{\nu}_1 2^{1+\alpha}C\right)^k\left(\sum_{n=0}^{\infty}(h\nu_1 e)^n\right)^{k+l}\times$$
$$\times \max_{x_1\in\eta_1;\, x_2\in\eta_2}\overline{\nu}(x_1-x_2)$$

у припущенні, що $h(\nu_1 e+\overline{\nu}_1 2^{1+\alpha}C)<1$. Теорему 4.4.6 у випадку $m=2$ доведено встановленням залежності

$$A_{2,1}=A_{2,2}:=\frac{1}{2}l_1l_2C(1{+}C)^{l_2-1}\left(\frac{h}{1-h\nu_1 e}\right)^l\frac{1-h\nu_1 e}{1-h\nu_1 e-h\overline{\nu}_1 2^{1+\alpha}C}. \tag{4.4.155}$$

■

Розділ 5

Кореляційні функції за довільних активностей і температур

Питання термодинамічного граничного переходу для кореляційних функцій в області регулярних значень параметрів z, β, для яких існує єдина міра Гіббса $\mu \in \mathcal{G}_V$, добре висвітлено в літературних джерелах (див., наприклад, [34, 43]). Для довільних значень z, β вирішальною є оцінка (0.0.3), отримана в праці [213]. Доведення цієї рівності в [213] є досить громіздким (див. детальніше [34]). У [201] запропоновано інше, більш прозоре, доведення, яке спирається на використанні властивостей інтегралів за мірою Пуассона. Це доведення дуже подібне до методу, описаного в розд. 1–4, тому тут у скороченому вигляді наведемо це доведення. Воно ґрунтується на розкладі кореляційних функцій $\rho_\Lambda(\eta)$, які визначаються інтегралом (3.3.56), в ряд, кожний член якого також представляється подібними інтегралами, але інтегрування в них виконується окремо у щільних конфігураціях (1.1.16) і окремо в розріджених конфігураціях (1.1.15). У праці [201] розглянуто випадок фінітного потенціалу взаємодії, а у [189] — узагальнення на випадок довільного надстійкого потенціалу.

5.1. Розклад кореляційних функцій за щільностями конфігурацій

Нехай $X \subseteq \Lambda$ — об'єднання кубиків Δ, в яких знаходиться дві або більше частинок. Внесок щільності міри Гіббса $\exp\{-\beta U(\gamma)\}$ з $\gamma \in \Gamma_X^{(den)}$ відіграє роль малого параметра, бо $\exp\{-\beta\phi(|x-y|)\} \simeq \exp\{-\beta\frac{c}{a^s}\}$, $c > 0$, $s \geq d$, якщо $x, y \in \Delta \subset X$ і a достатньо мале. Головна ідея полягає в тому, щоб відокремити інтегрування у щільних конфігураціях від інтегрувань у розріджених конфігураціях. Щоб це зробити, введемо функцію-індикатор для розріджених та щільних конфігурацій. Для розріджених конфігурацій таку функцію визначимо формулою

$$\chi_-^{\Delta}(\gamma) = \begin{cases} 1, & \text{якщо } |\gamma_\Delta| = 0 \vee 1, \\ 0 & \text{в іншому випадку}, \end{cases} \tag{5.1.1}$$

а для *щільних* конфігурацій — формулою

$$\chi_+^{\Delta}(\gamma) = 1 - \chi_-^{\Delta}(\gamma). \tag{5.1.2}$$

Щоб побудувати такий розклад, запишемо розклад одиниці для $\gamma \in \Gamma_\Lambda$:

$$1 = \prod_{\Delta\in\Lambda_a} [\chi_-^{\Delta}(\gamma) + \chi_+^{\Delta}(\gamma)] = \sum_{n=0}^{N_\Lambda} \sum_{X_n\subseteq\Lambda_a} \prod_{\Delta\in X_n} \chi_+^{\Delta}(\gamma) \prod_{\Delta\in\Lambda_a\setminus X_n} \chi_-^{\Delta}(\gamma) :=$$

$$:= \sum_{\emptyset\subseteq X\subseteq\Lambda_a} \widetilde{\chi}_+^{X}(\gamma)\widetilde{\chi}_-^{\Lambda_a\setminus X}(\gamma), \tag{5.1.3}$$

де N_Λ — кількість кубів Δ у покритті Λ_a (див. (1.1.14)), $X_n := \cup_{i=1}^{n}\Delta_i$ і

$$\widetilde{\chi}_\pm^{X}(\gamma) = \prod_{\Delta\in X} \chi_\pm^{\Delta}(\gamma).$$

Підставляючи (5.1.3) у вираз для кореляційної функції $\rho_\Lambda(\eta)$ (3.3.56), отримуємо розклад

$$\rho_\Lambda(\eta) = \frac{z^{|\eta|}}{\Xi_\Lambda} \sum_{\emptyset\subseteq X\subseteq\Lambda_a} \int_{\Gamma_\Lambda} \widetilde{\chi}_+^{X}(\gamma)\widetilde{\chi}_-^{\Lambda_a\setminus X}(\gamma)e^{-\beta U(\eta\cup\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{5.1.4}$$

Визначимо потенціал "твердих" кубиків:

$$\chi^{cor}(\Delta_1, ..., \Delta_n) \; = \begin{cases} 1, & \text{якщо } \Delta_i \cap \Delta_j = \emptyset \text{ для всіх } i \neq j, \\ 0 & \text{в інших випадках.} \end{cases}$$

Тоді (5.1.4) можна записати у вигляді

$$\rho_\Lambda(\eta) \; = \; \frac{z^{|\eta|}}{\Xi_\Lambda} \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!} \sum_{(\Delta_1, ..., \Delta_n) \subset \Lambda_a} \chi^{cor}(\Delta_1, ..., \Delta_n) \times$$

$$\times \int_{\Gamma_\Lambda} \widetilde{\chi}_+^{X_n}(\gamma) \widetilde{\chi}_-^{\Lambda_a \backslash X_n}(\gamma) e^{-\beta U(\eta \cup \gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma), \qquad (5.1.5)$$

де $(\Delta_1, ..., \Delta_n)$ — послідовність кубиків на відміну від множини кубиків у формулі (5.1.4). Сумування за кожним Δ_i у (5.1.5) виконується незалежно для кожного кубика.

Наступним кроком є подання експоненти в (5.1.5) таким чином:

$$e^{-\beta U(\eta \cup \gamma)} \; = \; e^{-\beta U(\eta)} \prod_{i=1}^{n} e^{-\beta U(\gamma_{\Delta_i}) - \beta W(\eta; \gamma_{\Delta_i})} \prod_{1 \leq i < j \leq n} e^{-\beta W(\gamma_{\Delta_i}; \gamma_{\Delta_j})} \times$$

$$\times e^{-\beta W(\eta; \gamma_{\Lambda_a \backslash X_n})} e^{-\beta U(\gamma_{\Lambda_a \backslash X_n})} \prod_{i=1}^{n} e^{-\beta W(\gamma_{\Delta_i}; \gamma_{\Lambda_a \backslash X_n})}. \qquad (5.1.6)$$

Використовуючи розклад (5.1.6) і властивість (1.2.24), отримуємо

$$\rho_\Lambda(\eta) \; = \; \frac{z^{|\eta|}}{\Xi_\Lambda} \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n!} \widetilde{\rho}_n^\Lambda(\eta). \qquad (5.1.7)$$

Тут

$$\widetilde{\rho}_n^\Lambda(\eta) \; = \sum_{(\Delta_1, ..., \Delta_n) \subset \Lambda_a} \chi^{cor}(\Delta_1, ..., \Delta_n) e^{-\beta U(\eta)} \times \qquad (5.1.8)$$

$$\times \prod_{i=1}^{n} \left(\int_{\Gamma_{\Delta_i}^{(den)}} \lambda_\sigma(d\gamma_{\Delta_i}) e^{-\beta U(\gamma_{\Delta_i} | \eta)} \right) \prod_{1 \leq i < j \leq n} e^{-\beta W(\gamma_{\Delta_i}; \gamma_{\Delta_j})} \times$$

$$\times \int_{\Gamma_{\Lambda_a \backslash X_n}^{(dil)}} \lambda_\sigma(d\gamma_{\Lambda_a \backslash X_n}) e^{-\beta U(\gamma_{\Lambda_a \backslash X_n} | \eta)} \prod_{i=1}^{n} e^{-\beta W(\gamma_{\Delta_i}; \gamma_{\Lambda_a \backslash X_n})},$$

де $U(\gamma_{\Delta_i}|\eta) = U(\gamma_{\Delta_i}) + W(\gamma_{\Delta_i};\eta)$. Враховуючи розбиття (1.1.17)–(1.1.18) з $b = 1$, розіб'ємо кожний інтеграл у першому добутку формули (5.1.8) на два інтеграли:

$$\int_{\Gamma^{(den)}_{\Delta_i}} \lambda_\sigma(d\gamma_{\Delta_i})(...) \;=\; \int_{\Gamma^{(>)}_{\Delta_i}} \lambda_\sigma(d\gamma_{\Delta_i})(...) + \int_{\Gamma^{(<)}_{\Delta_i}} \lambda_\sigma(d\gamma_{\Delta_i})(...). \tag{5.1.9}$$

З цієї формули випливає, що суму за всіма можливими положеннями $(\Delta_1, ..., \Delta_n) \subset \Lambda_a$ можна розбити на 2^n членів, у кожному з яких сума за $(\Delta_1, ..., \Delta_n)$ розбивається на суму за $(\Delta_1, ..., \Delta_k)$, де інтегрування виконується за конфігураціями $\gamma_{\Delta_i} \in \Gamma^{(<)}_{\Delta_i}$, і суму за $(\Delta^{'}_1, ..., \Delta^{'}_{n-k}) \subset \Lambda_a$, де інтегрування виконується за конфігураціями $\gamma_{\Delta^{'}_i} \in \Gamma^{(>)}_{\Delta^{'}_i}$, а k змінюється від $k = 0$ до $k = n$. Тоді вираз (5.1.7) можна записати у вигляді

$$\rho_\Lambda(\eta) \;=\; \frac{z^{|\eta|}}{\Xi_\Lambda} \sum_{n\geq 0} \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{k!\,(n-k)!}\, \widetilde{\rho}^{\Lambda}_{n;k}(\eta), \tag{5.1.10}$$

де

$$\widetilde{\rho}^{\Lambda}_{n;k}(\eta) \;=\; \sum_{(\Delta_1,...,\Delta_k)\subset\Lambda_a} \; \sum_{(\Delta^{'}_1,...,\Delta^{'}_{n-k})\subset\Lambda_a} \chi^{cor}(\Delta_1, ..., \Delta_k, \Delta^{'}_1, ..., \Delta^{'}_{n-k})\times$$
$$\times \prod_{i=1}^{k}\left(\int_{\Gamma^{(<)}_{\Delta_i}} \lambda_\sigma(d\gamma_{\Delta_i}) e^{-\beta U(\gamma_{\Delta_i}|\eta)}\right) \prod_{1\leq i<j\leq k} e^{-\beta W(\gamma_{\Delta_i};\gamma_{\Delta_j})}\times$$
$$\times \prod_{i=1}^{n-k}\left(\int_{\Gamma^{(>)}_{\Delta^{'}_i}} \lambda_\sigma(d\gamma_{\Delta^{'}_i}) e^{-\beta U(\gamma_{\Delta^{'}_i}|\eta)}\right) e^{-\beta U(\eta)} \prod_{1\leq i<j\leq n-k} e^{-\beta W(\gamma_{\Delta^{'}_i};\gamma_{\Delta^{'}_j})}\times$$
$$\times \prod_{i=1}^{k}\prod_{j=1}^{n-k} e^{-\beta W(\gamma_{\Delta_i};\gamma_{\Delta^{'}_j})} \int_{\Gamma^{(dil)}_{\Lambda_a\setminus X_n}} \lambda_\sigma(d\gamma_{\Lambda_a\setminus X_n}) e^{-\beta W(\eta;\gamma_{\Lambda_a\setminus X_n})}\times$$
$$\times \left(\prod_{j=1}^{n-k} e^{-\beta W(\gamma_{\Delta^{'}_j};\gamma_{\Lambda_a\setminus X_n})}\right)\left(\prod_{i=1}^{k} e^{-\beta W(\gamma_{\Delta_i};\gamma_{\Lambda_a\setminus X_n})}\right) e^{-\beta U(\gamma_{\Lambda_a\setminus X_n})}, \tag{5.1.11}$$

а $X_n = (\bigcup\limits_{i=1}^{k} \Delta_i) \cup (\bigcup\limits_{j=1}^{n-k} \Delta_j^{'})$.

Зауваження 5.1. *У тих кубиках, які перетинають межу області* Λ *(тобто* $\Delta \cap \Lambda \neq \Delta$, *але* $\Delta \cap \Lambda \neq \emptyset$*), інтегрування виконується за конфігураціями* $\Gamma^{(sign)}_{\Delta\cap\Lambda}, sign \in \{dil, >, <\}$.

5.2. Обмеженість кореляційних функцій

Використовуючи розклад (5.1.10)–(5.1.11), встановимо нерівність, з якої буде випливати нерівність (0.0.3). Сформулюємо результат у вигляді теореми.

Теорема 5.2.1. *Нехай потенціал взаємодії* ϕ *задовольняє умови* **A***(див.* (2.3.25)–(2.3.27)*). Тоді для довільного* $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ *і довільних* $\beta, z \geq 0$ *існує стала* $\xi = \xi(\beta, z)$ *(що не залежить від* Λ*) така, що кореляційні функції* $\rho^{\Lambda}(\eta)$ *задовольняють таку нерівність:*

$$\rho_\Lambda(\eta) \leq \xi^{|\eta|} e^{-\delta\beta U_{\phi^+}(\eta)} \tag{5.2.12}$$

для довільного $0 < \delta < 1$.

Перш ніж викласти доведення теореми 5.2.1, сформулюємо дві допоміжні леми.

Лема 5.2.2. *Нехай* $\phi(|x|)$ *задовольняє умови* **A**, $\gamma_{\Delta_i} \in \Gamma^{(<)}_{\Delta_i}$, *а* $\gamma_{\Delta_j^{'}} \in \Gamma^{(>)}_{\Delta_j^{'}}$, *тоді для* $\varepsilon < \varepsilon_0$ *буде виконуватись така нерівність:*

$$-\beta \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n-k} W_{\phi^-}(\gamma_{\Delta_i}; \gamma_{\Delta_j^{'}}) \leq \beta \sum_{j=1}^{n-k} |\gamma_{\Delta_j^{'}}|(\varphi_\varepsilon + (|\gamma_{\Delta_j^{'}}| + 1)\varphi_0). \tag{5.2.13}$$

Доведення. Для скорочення запису введемо позначення:

$$\sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n-k} (...) := \sum_{i,j=1}^{k,n-k} (...). \tag{5.2.14}$$

Тоді

$$-\beta\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{n-k}W_{\phi^-}(\gamma_{\Delta_i};\gamma_{\Delta_j^{'}}) = \beta\sum_{i,j=1}^{k,n-k}\sum_{\substack{x\in\gamma_{\Delta_i}\\ y\in\gamma_{\Delta_j^{'}}}}\phi^-(|x-y|) \le$$

$$\le \beta\sum_{i,j=1}^{k,n-k}|\gamma_{\Delta_i}||\gamma_{\Delta_j^{'}}|\sup_{\substack{x\in\Delta_i\\ y\in\Delta_j^{'}}}\phi^-(|x-y|) \le$$

$$\le \beta\sum_{i,j=1}^{k,n-k}|\gamma_{\Delta_j^{'}}|\sup_{\substack{x\in\Delta_i\\ y\in\Delta_j^{'}}}\phi^-(|x-y|)|x-p|^{\varepsilon},$$

де $p\in\eta$. Ця нерівність випливає з того, що $|\gamma_{\Delta_i}|\le d_{\eta}^{\varepsilon}(\Delta_i)\le|x-p|^{\varepsilon}$ для будь яких $x\in\Delta_i$ і $p\in\eta$. Далі використаємо аналог нерівності трикутника:

$$|x-p|^{\varepsilon}\le|x-y|^{\varepsilon}+|y-p|^{\varepsilon}$$

$\forall\,\varepsilon\in[0;1]$, $\forall\,x,y,p\in\mathbb{R}^d$. Тоді для довільного $y\in\Delta_j^{'}$ з $\gamma_{\Delta_j^{'}}\in\Gamma_{\Delta_j^{'}}^{(>)}$

$$\beta\sum_{i,j=1}^{k,n-k}|\gamma_{\Delta_j^{'}}|\sup_{\substack{x\in\Delta_i\\ y\in\Delta_j^{'}}}\phi^-(|x-y|)|x-p|^{\varepsilon} \le$$

$$\le \beta\sum_{i,j=1}^{k,n-k}|\gamma_{\Delta_j^{'}}|\sup_{\substack{x\in\Delta_i\\ y\in\Delta_j^{'}}}\phi^-(|x-y|)|x-y|^{\varepsilon} +$$

$$+ \beta\sum_{i,j=1}^{k,n-k}|\gamma_{\Delta_j^{'}}|\sup_{\substack{x\in\Delta_i\\ y\in\Delta_j^{'}}}\phi^-(|x-y|)|y-p|^{\varepsilon} \le$$

$$\leq \beta \sum_{i,j=1}^{k,n-k} |\gamma_{\Delta'_j}| \sup_{\substack{x \in \Delta_i \\ y \in \Delta'_j}} \phi^-(|x-y|)|x-y|^\varepsilon +$$

$$+ \beta \sum_{i,j=1}^{k,n-k} |\gamma_{\Delta'_j}| \sup_{\substack{x \in \Delta_i \\ y \in \Delta'_j}} \phi^-(|x-y|)(|\gamma_{\Delta'_j}|+1) \leq$$

$$\leq \beta \sum_{j=1}^{n-k} |\gamma_{\Delta'_j}|(\varphi_\varepsilon + (|\gamma_{\Delta'_j}|+1)\varphi_0).$$

Другий доданок у передостанній нерівності виникає, бо для $y \in \gamma_{\Delta'_j}$ і $p \in \eta$, а також достатньо малого $a < \frac{1}{\sqrt{d}}$ виконується нерівність

$$|y-p|^\varepsilon \leq d^\varepsilon_\eta(\Delta'_j) + (a\sqrt{d})^\varepsilon \leq |\gamma_{\Delta'_j}| + 1.$$

Остання нерівність, яка випливає з визначень величин φ_ε і φ_0 (див. (2.3.30)), завершує доведення. ■

Лема 5.2.3.

$$\sum_{\Delta' \subset \Lambda} e^{-\delta''\beta\, d^\varepsilon_\eta(\Delta')} = |\eta|\, K_2(a, \beta, \varepsilon) = |\eta|\, K_2,$$

де K_2 *— стала, яка залежить від* a, β, ε *і не залежить від* Λ.

Доведення. Нехай $\eta = \{x_1, ..., x_m\}$. Розкладемо Λ на області (об'єднання кубиків) $\Lambda_1, ..., \Lambda_m$ так, що якщо $\Delta' \subset \Lambda_k$, то $d^\varepsilon_\eta(\Delta') = d^\varepsilon_{x_k}(\Delta')$. Тоді

$$\sum_{\Delta' \subset \Lambda} e^{-\delta''\beta\, d^\varepsilon_\eta(\Delta')} = \sum_{\Delta' \subset \Lambda_1} e^{-\delta''\beta\, d^\varepsilon_{x_1}(\Delta')} + \ldots + \sum_{\Delta' \subset \Lambda_m} e^{-\delta''\beta\, d^\varepsilon_{x_m}(\Delta')} \leq$$

$$\leq |\eta| \sum_{\Delta' \subset \Lambda} e^{-\delta''\beta\, d^\varepsilon_{x_0}(\Delta')} = |\eta|\, K_2(a, \beta, \varepsilon),$$

де $d_{x_0}(\Delta')$ — відстань від фіксованої точки $x_0 \in \mathbb{R}^d$ до Δ'. ■

Доведення теореми 5.2.1. Щоб довести теорему, використаємо розклад (5.1.10)–(5.1.11). Це дає змогу записати інтеграл (3.3.56) за всіма можливими конфігураціями Γ_Λ у вигляді розкладу, кожний член якого містить інтеграли, в яких інтегрування виконується в окремих кубиках в одному з просторів $\Gamma_\Delta^{(<)}$, $\Gamma_\Delta^{(>)}$ або $\Gamma_\Delta^{(dil)}$. Враховуючи визначення (2.3.30), отримуємо оцінку

$$-\beta\sum_{i=1}^{k} W(\eta;\gamma_{\Delta_i}) \;\le\; \beta\,|\eta|\,\sup_{x\in\eta}\sum_{i=1}^{k}\sup_{y\in\gamma_{\Delta_i}}\;\phi^-(|x-y|)|\gamma_{\Delta_i}| \;\le\; \beta\,|\eta|\,\varphi_\varepsilon. \tag{5.2.15}$$

Ця нерівність виконується, оскільки $\gamma_{\Delta_i}\in\Gamma_{\Delta_i}^{(<)}$. Таким чином,

$$|\gamma_{\Delta_i}| \;\le\; d_\eta^\varepsilon(\Delta_i) \;\le\; |x-y|^\varepsilon,$$

де $\varepsilon<\varepsilon_0$. Оцінка (5.2.15) дає можливість оцінити перший добуток у (5.1.11):

$$\prod_{i=1}^{k}\left(\int_{\Gamma_{\Delta_i}^{(<)}}\lambda_\sigma(d\gamma_{\Delta_i})e^{-\beta U(\gamma_{\Delta_i}|\eta)}\right)\le e^{\beta\varphi_\varepsilon|\eta|}\prod_{i=1}^{k}\int_{\Gamma_{\Delta_i}^{(<)}}\lambda_\sigma(d\gamma_{\Delta_i})e^{-\beta U(\gamma_{\Delta_i})}.$$

Ураховуючи, що $\gamma_\Delta\in\Gamma_\Delta^{(dil)}$, $|\gamma_{\Delta_i}|\le 1\;\forall\,\Delta\in\Lambda_a\setminus X_n$, отримаємо, що для довільного $\xi\in\Gamma_0$

$$-\beta W(\xi\,;\,\gamma_{\Lambda_a\setminus X_n})\le\beta\,|\xi|\,\varphi_0,$$

що забезпечує виконання таких нерівностей:

$$e^{-\beta W(\eta;\gamma_{\Lambda_a\setminus X_n})}\le e^{\beta|\eta|\varphi_0},\;\; e^{-\beta W(\gamma_{\Delta'_j};\gamma_{\Lambda_a\setminus X_n})}\le e^{\beta|\gamma_{\Delta'_j}|\varphi_0}$$

для відповідних експонент у (5.1.11).

Умови **A** (див. (2.3.25)–(2.3.27)) дають змогу розбити потенціал ϕ на дві частини:

$$\phi \;=\; \delta\phi^+ + \phi_\delta^{st},\;\; \phi_\delta^{st} := (1-\delta)\phi^+ + \phi^-.$$

Так само, як отримали оцінку (2.3.35) за допомогою (2.3.37), маємо

$$U_{\phi_\delta^{st}}(\gamma) \geq \sum_{\Delta\in\overline{\Delta}_\lambda : |\gamma_\Delta|\geq 2} \left[\frac{(1-\delta)\phi_0}{4(\sqrt{d}a)^s} - \frac{\varphi_0}{2}\right] |\gamma_\Delta|^2 - \frac{\varphi_0}{2}|\gamma|. \quad (5.2.16)$$

Для того щоб значення виразу у квадратних дужках було додатним, треба вибрати достатньо мале значення параметра a. Виберемо деяке максимальне значення $a = a_*(\delta)$, для якого зберігається умова стійкості:

$$U_{\phi_\delta^{st}}(\gamma) \ \geq\ -B_\delta|\gamma|,\ B_\delta = \frac{\varphi_0(a_*)}{2}. \quad (5.2.17)$$

Застосуємо цю нерівність до відповідних експонент в (5.1.11), виділяючи стійку частину відповідних виразів для енергії:

$$\sum_{i=1}^{n-k}\Big(U_{\phi_\delta^{st}}(\gamma_{\Delta_i'}) + W_{\phi_\delta^{st}}(\eta;\gamma_{\Delta_i'})\Big) + U_{\phi_\delta^{st}}(\eta) +$$

$$+ \sum_{1\leq i<j\leq n-k} W_{\phi_\delta^{st}}(\gamma_{\Delta_i'};\gamma_{\Delta_j'}) \ \geq\ -B_\delta\,(\,|\eta| + \sum_{i=1}^{n-k}|\gamma_{\Delta_j'}|). \quad (5.2.18)$$

Урахуємо також, що внаслідок додатності ϕ^+

$$e^{-\beta\sum\limits_{i=1}^{n-k} W_{\delta\phi^+}(\eta;\gamma_{\Delta_j'})} \ \leq\ 1, \quad e^{-\beta\sum\limits_{1\leq i<j\leq n-k} W_{\delta\phi^+}(\gamma_{\Delta_i'};\gamma_{\Delta_j'})} \ \leq\ 1 \quad (5.2.19)$$

і

$$e^{-\beta\sum\limits_{i=1}^{k}\sum\limits_{j=1}^{n-k} W_{\phi^+}(\gamma_{\Delta_i};\gamma_{\Delta_j'})} \ \leq\ 1. \quad (5.2.20)$$

Для того щоб проконтролювати збіжність інтегралів на просторах $\Gamma_{\Delta_i'}^{(>)}$, $i = 1, ..., n-k$, і сум за кубиками $(\Delta_1', ..., \Delta_{n-k}') \subset \Lambda_a$, розіб'ємо енергію $U_{\delta\phi^+}(\gamma_{\Delta_i'}) = \delta U_{\phi^+}(\gamma_{\Delta_i'})$ на дві частини, вибравши $\delta = \delta' + \delta''$ з деякими додатними малими сталими δ', δ''. Використовуючи умову (2.3.26) і те, що для $\gamma_{\Delta'} \in \Gamma_{\Delta'}^{(>)}$ кількість точок $|\gamma_{\Delta'}| > d_\eta^\varepsilon(\Delta')$ (див. (1.1.17)), можна записати таку нерівність:

$$U_{\delta\phi^+}(\gamma_{\Delta_i^{'}}) \geq \frac{1}{2}\delta' \, \frac{\phi_0}{(\sqrt{d}a)^s} \, |\gamma_{\Delta_i^{'}}| \, (|\gamma_{\Delta_i^{'}}| - 1) + \delta'' \, \frac{\phi_0}{(\sqrt{d}a)^s} \, d_\eta^\varepsilon(\Delta_i^{'}). \tag{5.2.21}$$

Нарешті, враховуючи оцінку (5.2.13) леми 5.2.2 та елементарну оцінку

$$\chi^{cor}(\Delta_1, ..., \Delta_k, \Delta_1^{'}, ..., \Delta_{n-k}^{'}) \leq \chi^{cor}(\Delta_1, ..., \Delta_k),$$

розклад (5.1.10)–(5.1.11) можна записати у вигляді

$$\rho_\Lambda(\eta) \; = \; \frac{z^{|\eta|} e^{-\beta\delta U_{\phi_+}}}{\Xi_\Lambda} \sum_{n\geq 0} \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{k! \, (n-k)!} \, \widetilde{\rho}_{n;k}^{\Lambda}(\eta), \tag{5.2.22}$$

$$\begin{aligned}
\widetilde{\rho}_{n;k}^{\Lambda}(\eta) \leq e^{\beta(B_\delta + \varphi_0 + \varphi_\varepsilon)\,|\eta|} & \sum_{(\Delta_1, ..., \Delta_k) \subset \Lambda \setminus X_{n-k}^{'}} \chi^{cor}(\Delta_1, ..., \Delta_k) \times \\
& \times \int_{\Gamma_{X_k}} \lambda_\sigma(d\gamma_{X_k}) \, e^{-\beta U(\gamma_{X_k})} \times \\
& \times \sum_{(\Delta_1^{'}, ..., \Delta_{n-k}^{'}) \subset \Lambda} \; \int_{\Gamma^{(dil)}_{(\Lambda \setminus X_{n-k}^{'}) \setminus X_k}} \lambda_\sigma(d\gamma_{(\Lambda \setminus X_{n-k}^{'}) \setminus X_k}) \times \\
& \times e^{-\beta U(\gamma_{(\Lambda \setminus X_{n-k}^{'}) \setminus X_k} | \gamma_{X_k})} \times \\
& \times \prod_{\Delta \subset X_{n-k}^{'}} \left(\int_{\Gamma_\Delta^{den}} \lambda_\sigma(d\gamma_\Delta) e^{E_1(\gamma_\Delta)} e^{E_2(\gamma_\Delta)} \right),
\end{aligned} \tag{5.2.23}$$

де $X_{n-k}^{'} = \bigcup\limits_{i=1}^{n-k} \Delta_i^{'}$, $X_k = \bigcup\limits_{j=1}^{k} \Delta_j$ і

$$E_1(\gamma_\Delta) = -\frac{1}{2}\delta'\beta \frac{\phi_0}{(\sqrt{d}a)^s} |\gamma_\Delta| (|\gamma_\Delta| - 1),$$

$$E_2(\gamma_\Delta) = \beta(B + v_0(2 + |\gamma_\Delta|) + \varphi_\varepsilon)|\gamma_\Delta| - \delta''\beta \frac{\phi_0}{(\sqrt{d}a)^s} d^\varepsilon_\eta(\Delta).$$

Перший доданок оцінки (5.2.21) забезпечує збіжність інтеграла

$$\int_{\Gamma^{(>)}_\Delta} \lambda_{z\sigma}(d\gamma_\Delta)\, e^{-\frac{1}{2}\beta\delta'\, \frac{\phi_0}{(\sqrt{d}a)^s}\, |\gamma_{\Delta'_i}|\, (|\gamma_{\Delta'_i}| - 1) + \beta\, (B_\delta + \varphi_0\, (2+|\gamma_\Delta|) + \varphi_\varepsilon)|\gamma_\Delta|} = \\ = \; K_1(a, z, \beta, \phi) \tag{5.2.24}$$

для достатньо малого a. Враховуючи другий доданок оцінки (5.2.21) і лему 5.2.3, можна записати таку нерівність:

$$\sum_{(\Delta'_1,\ldots,\Delta'_{n-k}) \subset \Lambda_a} \prod_{\Delta' \in \Lambda_a} e^{-\delta'' \frac{\phi_0}{(\sqrt{d}a)^s} d^\varepsilon_\eta(\Delta'_i)} \leq (|\eta| K_2(a, \beta, \varepsilon))^{n-k}\,. \tag{5.2.25}$$

Позначимо як $X^{(max)}_{n-k}$ об'єднання всіх кубиків $\Delta'_1 \cup \ldots \cup \Delta'_{n-k} = X'_{n-k}$, в яких інтеграл (5.1.11) за конфігураціями в $\Lambda_a \setminus X_n$ набуває максимального значення. Тоді отримаємо оцінку

$$\begin{aligned} \rho_\Lambda(\eta) &\leq \frac{1}{\Xi_\Lambda}\, e^{-\delta\beta U_{\phi^+}(\eta)}\, \bar{\xi}^{|\eta|} \sum_{n=0}^{N_\Lambda} \sum_{k=0}^{n} \frac{(|\eta| K)^{n-k}}{k!(n-k)!}\, \widetilde{\rho}_k^{\Lambda_a \setminus X^{(max)}_{n-k}}(\emptyset) \; = \\ &= \; \frac{1}{\Xi_\Lambda}\, e^{-\delta\beta U_{\phi^+}(\eta)}\, \bar{\xi}^{|\eta|} \sum_{l=0}^{N_\Lambda} \frac{(|\eta| K)^l}{l!} \sum_{k=0}^{N_\Lambda - l} \frac{1}{k!} \widetilde{\rho}_k^{\Lambda_a \setminus X^{(max)}_l}(\emptyset) \; = \\ &= e^{-\delta\beta U_{\phi^+}(\eta)}\, \bar{\xi}^{|\eta|} \sum_{l=0}^{N_\Lambda} \frac{(|\eta| K)^l}{l!} \frac{\Xi_{\Lambda \setminus X^{(max)}_l}}{\Xi_\Lambda}, \end{aligned}$$

де $K = K_1 K_2$ (див. (5.2.24), (5.2.25)), $\bar{\xi} := z e^{\beta(B_\delta + \varphi_0 + v_\varepsilon)}$, і $\widetilde{\rho}_k^{\Lambda \setminus X^{(max)}_l}(\emptyset)$ визначається формулою (5.1.8). З того факту, що $\Xi_{\Lambda_1} \leq \Xi_{\Lambda_2}$ для $\Lambda_1 \subset \Lambda_2$, випливає (5.2.12) з $\xi = \bar{\xi} e^K$. ■

Зауваження 5.2. *У нерівностях* (5.2.17)–(5.2.25) *сталі* φ_ε, φ_0, B_δ, K_1, K_2 *залежать від параметра* a, *тому* ξ *залежить від* *a, який є фіксованим. Але* $\Delta \in \overline{\Delta}_a$ *повинні бути такими, щоб взаємодія двох частинок в одному кубику була додатною, тобто* $a < r_0$. *Це забезпечує виконання нерівності* (5.2.16).

Зауважимо також, що методи, які були викладені в підрозділах 5.1 і 5.2, були узагальнені у праці [156] на випадок багаточастинкових посилено стійких потенціалів взаємодії.

5.3. Кореляційні функції та міра Гіббса в термодинамічній границі

Побудова граничних виразів для кореляційних функцій (3.3.56) для регулярних значень параметрів z, β є завершеною задачею. Можна виділити два методи її розв'язання: метод інтегральних рівнянь, який у свою чергу можна розбити на операторний (див. посилання в монографіях [43], [34]) і аналітичний у вигляді розкладів (див. [174]), та методи полімерних та кластерних розкладів, посилання на які заняло б декілька сторінок. Щодо методів, які тут обговорюються, властивість нескінченноподільності міри $\lambda_{z\sigma}$ (див. лему 1.2.2) вперше застосовано в праці [199], а в [201] вона була ключовим технічним моментом для простішого доведення обмеженості кореляційних функцій за довільних значень параметрів z, β.

Основні властивості граничних кореляційних функцій та тиску викладено тут на основі праці Рюеля [43] (див. також [34] для детальнішого опису).

5.3.1. Термодинамічна границя для кореляційних функцій

Нерівності (0.0.3) і (5.2.12) забезпечують існування граничних кореляційних функцій при $\Lambda_n \nearrow \mathbb{R}^d$, $n \to \infty$, але границя не є єдиною за тих значень параметрів β і z, які не лежать в області регулярності. Основний результат можна сформулювати такою теоремою [213]:

Теорема 5.3.1. *Нехай потенціал взаємодії ϕ задовольняє умовам* **A** *(див.* (2.3.25)–(2.3.27)*). Нехай $\Lambda_n \nearrow \mathbb{R}^d$, $n \to \infty$, є послідовністю обмежених об'ємів такою, що для кожної обмеженої області $X \subset \mathbb{R}^d$ існує n_X таке, що $X \subset \Lambda_n$ якщо $n \geq n_\Delta$. Тоді можна вибрати підпослідовність Λ_{n_k} таку, що*

$$\rho(\eta) \;=\; \lim_{k\to\infty} \rho_{\Lambda_{n_k}}(\eta)$$

рівномірно на $\Gamma_X^{(m)}(m = |\eta|)$, а граничні функції $\rho(\eta)$ задовольняють рівняння Кірквуда–Зальцбурга (4.1.11)*.*

Доведення цієї теореми детально викладено в [34] (див. теорему 17.3).

Зауваження 5.3. *Треба також зауважити, що якщо кореляційні функції задовольняють рівняння Кірквуда–Зальцбурга, то відповідна міра задовольняє рівняння ДЛР, тобто є мірою Гіббса (див. [213] або [34] (теореми 18.1, 18.2)).*

5.3.2. Міра Гіббса в термодинамічній границі

Існування граничної міри або станів Гіббса безпосередньо випливає з нерівності (0.0.3), встановленої в [213] або (5.2.12) цього розділу (див. також зауваження 5.3).

Наведемо інші аргументи з праці [156], які базуються на нерівності (5.2.12) і теоремі Прохорова.

Позначимо як $\mathcal{G}(\phi, z, \beta)$ множину мір Гіббса, що відповідають взаємодії ϕ, активності z і температурі $T = 1/k\beta$.

Як наслідок теореми 5.2.1 виконується така теорема:

Теорема 5.3.2. *Нехай потенціал взаємодії ϕ задовольняє умови* **A** *(див.* (2.3.25)–(2.3.27)*). Тоді для довільних $z \geq 0$ і $\beta \geq 0$*

$$\mathcal{G}(\phi, z, \beta) \neq \emptyset.$$

Доведення. Існування відповідного стану Гіббса випливає з аргументів, які базуються на наступному спостереженні. Нехай $\psi \in L^1(\mathbb{R}^d) \cap C(\mathbb{R}^d)$ — будь-яка додатна функція така, що $\psi \leq 1$, і нехай $\alpha(t)$, $t \in \mathbb{R}_+$ — будь-яка неперервна спадна функція з такими умовами:

(1) $\alpha_0 := \lim_{t\to 0+} \alpha(t) = +\infty$;

(2) $\alpha_+ := \lim_{t\to +\infty} \alpha(t) \geq 1$.

Визначимо

$$\Gamma^{\alpha,\psi} = \left\{ \gamma \in \Gamma \;\middle|\; \sum_{\{x,y\}\subset\gamma} \psi(x)\alpha(|x-y|)\psi(y) < \infty \right\}$$

і

$$E^{\alpha,\psi}(\gamma) = \sum_{\{x,y\}\subset\gamma} \psi(x)\alpha(|x-y|)\psi(y),\ \gamma \in \Gamma^{\alpha,\psi}.$$

Як показано в [146], для довільних $0 < D < \infty$ множина

$$\Big\{ \gamma \in \Gamma \mid |E^{\alpha,\psi}(\gamma)| \leq D \Big\}$$

є передкомпактною в Γ, який є польським простором.

Розглянемо деяку неперервно спадну функцію α, таку , що

$$\alpha(|x-y|) \leq e^{\frac{1}{2}\phi^+(|x-y|)}.$$

Використовуючи (3.3.47) з $G(\eta) = 2\psi(x)\alpha(|x-y|)\psi(y)1\!\!1_{\{x,y\}}(\eta)$ і теорему 5.2.1, для довільних Λ маємо

$$\int_\Gamma E^{\alpha,\psi}(\gamma)d\mu_\Lambda(\gamma) = \int_{\mathbb{R}^{\nvDash}} \psi(x)\alpha(|x-y|)\psi(y)\rho^{(2)}_\Lambda(\{x,y\})dxdy < C,$$

де $C \in \mathbb{R}_+$ — деяка стала.

Тому за теоремою Прохорова сім'я мір

$$\{\mu_\Lambda \,|\, \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)\}$$

є передкомпактною, що передбачає існування принаймні однієї граничної міри μ, коли $\Lambda \nearrow \mathbb{R}^d$. Доведемо, що відповідна гранична міра є гіббсовою. Нехай μ_{Λ_n}, $n \geq 1$, де $\Lambda_n \nearrow \mathbb{R}^d$, $n \to \infty$, є послідовністю, яка збігається (у значенні теореми Прохорова) до міри μ, і нехай ρ_{Λ_n} та ρ є відповідними кореляційними функціями. Відомо (див. [106, 107]), що міра μ на Γ є гіббсовою тоді й тільки тоді, коли μ задовольняє рівняння *ГНЦ*, тобто для всіх додатних $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{B}(\Gamma)$-вимірних функцій H виконується рівність (3.1.25). Окрім того, використовуючи формулу Мекке, можна показати, що рівняння (3.1.25) задовольняє будь-яка міра μ_{Λ_n}, $n \geq 1$ (див. деталі доведення в [156]). ■

5.3.3. Обмеженість тиску як функції z і β

Теорема 5.3.3. *Нехай потенціал взаємодії ϕ задовольняє умови* **A** *(див.* (2.3.25)–(2.3.27)*). Тоді для довільних $z \geq 0$ і $\beta \geq 0$ існують сталі p_{min} і p_{max} такі, що*

$$p_{min} \leq p(z, \beta) \leq p_{max} \tag{5.3.26}$$

Доведення. Почнемо з верхньої межі. Враховуючи умову стійкості (2.1.3), з формули (3.1.18) отримуємо нерівність

$$\Xi_\Lambda(\beta, z) \;\leq\; \int_{\Gamma_\Lambda} e^{\beta B|\gamma|} \lambda_{z\sigma}(d\gamma) \;=\; e^{ze^{\beta B}V},\; V \;=\; \sigma(\Lambda).$$

Тоді з визначення тиску (3.2.37) в обмеженому об'ємі

$$p_\Lambda(\beta, z) \;\leq\; \frac{z}{\beta} e^{\beta B}. \tag{5.3.27}$$

Щоб отримати обмеження знизу, введемо потенціал абсолютно твердих куль діаметром a:

$$\phi_a^{cor}(|x-y|) \;= \begin{cases} +\infty, & \text{якщо } |x-y| < a \\ 0 & \text{в іншому випадку.} \end{cases} \tag{5.3.28}$$

Визначимо також потенціал

$$\phi^{(a)}(|x-y|) \;= \begin{cases} \phi(|x-y|), & \text{якщо } |x-y| \geq a \\ 0 & \text{в іншому випадку.} \end{cases} \tag{5.3.29}$$

З цих означень випливає, що для довільної конфігурації $\gamma \in$ Γ_0

$$U(\gamma) \;\leq\; U_a^{cor}(\gamma) \;+\; U^{(a)}(\gamma), \tag{5.3.30}$$

де

$$U_a^{cor}(\gamma) \ = \sum_{\{x,y\}\subset\gamma} \phi_a^{cor}(|x-y|)$$

і

$$U^{(a)}(\gamma) \ = \sum_{\{x,y\}\subset\gamma} \phi^{(a)}(|x-y|) := \sum_{\eta\Subset\gamma} V_2^{(a)}(\eta)1\!\!1_{\{x,y\}}(\eta). \quad (5.3.31)$$

Застосуємо нерівність (5.3.30) для оцінки статсуми (3.1.18). Отримаємо нерівність

$$\begin{aligned}\Xi_\Lambda(\beta,z) \geq \int_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U_a^{cor}(\gamma)} e^{-\beta U^{(a)}(\gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \\ = \Xi_\Lambda^{cor}(a) \int_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U^{(a)}(\gamma)} \mu_{z,a}^{cor}(d\gamma),\end{aligned} \quad (5.3.32)$$

де міра

$$\mu_{z,a}^{cor}(d\gamma) \ = \ \frac{1}{\Xi_\Lambda^{cor}(a)} e^{-\beta U_a^{cor}(\gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma)$$

є мірою Гіббса в обмеженому об'ємі Λ взаємодії (5.3.28), а $\Xi_\Lambda^{cor}(a)$ є її великою статсумою. Ця міра є ймовірнісною на Γ_Λ, тому до інтеграла правої частини (5.3.32) можна застосувати нерівність Йенсена. Тоді

$$\Xi_\Lambda(\beta,z) \ \geq \ \Xi_\Lambda^{cor}(a) e^{-\beta \int_{\Gamma_\Lambda} U^{(a)}(\gamma) \mu_{z,a}^{cor}(d\gamma)}.$$

Використаємо в останньому інтегралі формулу (3.3.47):

$$\begin{aligned}\int_{\Gamma_\Lambda} U^{(a)}(\gamma)\mu_{z,a}^{cor}(d\gamma) = \int_{\Gamma_\Lambda} \sum_{\eta\subset\gamma} V_2^{(a)}(\eta) 1\!\!1_{\{x,y\}}(\eta) \mu_{z,a}^{cor}(d\gamma) = \\ = \int_{\Gamma_\Lambda} V_2^{(a)}(\eta) \rho_\Lambda^{cor}(\eta) 1\!\!1_{\{x,y\}}(\eta) \lambda_{z\sigma}(d\eta),\end{aligned}$$

де

$$\rho_\Lambda^{cor}(\eta) \ = \ \frac{z^{|\eta|}}{\Xi_\Lambda^{cor}(a)} \int_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U_a^{cor}(\eta\cup\gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma) \quad (5.3.33)$$

є кореляційними функціями системи абсолютно твердих куль діаметром a. Враховуючи означення тиску (3.2.37) і нерівності (5.3.27), (5.3.32), отримуємо оцінки

$$p_\Lambda^{cor}(a) - \frac{1}{\beta V} \int_{\Gamma_\Lambda} V_2^{(a)}(\eta) \rho_\Lambda^{cor}(\eta) 1\!\!1_{\{x,y\}}(\eta) \lambda_{z\sigma}(d\eta) \leq p_\Lambda(z, \beta) \leq \frac{z}{\beta} e^{\beta B}.$$

З огляду на те, що при $V \uparrow \infty$ кореляційна функція $\rho_\Lambda^{cor}(x_1, x_2)$ буде прямувати до трансляційно-інваріантної функції, яка згідно з визначенням (5.3.33) не перевищує значення z^2, границя функції тиску задовольнятиме такі нерівності:

$$p^{cor}(a) - \frac{C(d)}{2\beta} z^2 \int_a^{+\infty} \phi^{(a)}(r) r^{d-1} dr \ \leq \ p(z, \beta) \ \leq \ \frac{z}{\beta} e^{\beta B}, \quad (5.3.34)$$

які завершують доведення теореми з

$$p_{min} = p^{cor}(a) - \frac{C(d)}{2\beta} z^2 \int_a^{+\infty} \phi^{(a)}(r) r^{d-1} dr, \ p_{max} = \frac{z}{\beta} e^{\beta B}. \quad (5.3.35)$$

■

Зауваження 5.4. *Оцінка* (5.3.34) *буде оптимальною для заданих z і β, коли ліва частина* (5.3.34) *буде додатною і досягне максимального значення.*

5.4. Про нерівноважні класичні системи

5.4.1. Еволюція нескінченних класичних систем: рівняння ББГКІ

Для того щоб записати рівняння для кореляційних функцій нерівноважної системи частинок,що взаємодіють, треба розглянути їх в конфігураційному просторі маркованих конфігурацій $\widetilde{\Gamma}$, визначеному в (1.1.8). Для довільної конфігурації $\widetilde{\gamma} \in \widetilde{\Gamma}$ з $\gamma \in \Gamma_0$ гамільтоніан складається з кінетичної енергії частинок конфігурації та потенціальної енергії їх взаємодії:

$$H(\widetilde{\gamma}) \;=\; E_k(\widetilde{\gamma}) \;+\; U(\gamma), \;\; E_k(\widetilde{\gamma}) \;=\; \sum_{x\in\gamma} \frac{p_x^2}{2m}. \tag{5.4.36}$$

Розглянемо спершу систему в деякій обмеженій області $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$. Важливою характеристикою системи є поведінка частинок поблизу границі $\partial\Lambda$ посудини Λ. Задамо такі граничні умови за допомогою деякого зовнішнього поля $u^\Lambda(x)$, $x \in \Lambda$:

$$u^\Lambda(x) \;:=\; \begin{cases} +\infty, \text{ якщо } x \in \partial\Lambda, \\ 0, \text{ якщо } x \in \Lambda_\delta, \end{cases} \tag{5.4.37}$$

де область Λ_δ містить точки $x \in \Lambda$, які знаходяться на відстані $d \geq \delta > 0$ від $\partial\Lambda$. В області $\Lambda \setminus \Lambda_\delta$ функція $u^\Lambda(x)$ є гладкою додатною функцією. Гамільтоніан такої системи має вигляд

$$H^\Lambda(\widetilde{\gamma}) \;=\; E_k(\widetilde{\gamma}) \;+\; U^\Lambda(\gamma),\; U^\Lambda(\gamma) := U(\gamma) \;+\; \sum_{x\in\gamma} u^\Lambda(x),\; \gamma \in \Gamma_\Lambda. \tag{5.4.38}$$

Виведення рівнянь ББГКІ. Еволюція щільності міри Гіббса (див., наприклад, [34]) описується рівнянням Ліувіля:

$$\frac{\partial}{\partial t} D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma}) = \left\{H^\Lambda \widetilde{\gamma}, D(t;\widetilde{\gamma})\right\}_P = \tag{5.4.39}$$

$$= \sum_{x\in\gamma} \left[\nabla_x H^\Lambda(\widetilde{\gamma}) \cdot \nabla_{p_x} D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma}) - \nabla_{p_x} H^\Lambda(\widetilde{\gamma}) \cdot \nabla_x D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma})\right],$$

де $\{\cdot,\cdot\}_P$ – це дужки Пуассона, які визначаються другим рядком рівняння (5.4.39), а ∇_x (∇_{p_x}) – градієнт за змінною x (p_x). Потрібно також задати початковий розподіл:

$$D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma})|_{t=0} = D^0_\Lambda(\widetilde{\gamma}).$$

Виходячи з вигляду гамільтоніана (див. (5.4.36)–(5.4.38)), граничні умови для функцій $D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma})$ можна записати так:

$$D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma})|_{\forall x\in\gamma, x\in\partial\Lambda} = D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma})|_{\forall x\in\gamma, p_x^{(\alpha)}=\pm\infty, \alpha=\overline{1,d}} = 0. \tag{5.4.40}$$

Еволюцію початкової функції розподілу $D^0_\Lambda(\widetilde{\gamma})$ описують рівнянням Ліувіля (5.4.39). Вона визначається еволюцією початкової конфігурації $\gamma = \{\widetilde{x}_1, \ldots, \widetilde{x}_N\}$, $N = |\gamma|$. На мові пуассонівських полів

$$\widetilde{\gamma}(\widetilde{x}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\widetilde{x} - \widetilde{x}_i) = \sum_{i=1}^{N} \delta(x - x_i)\delta(p_x - p_{x_i}).$$

Стан системи частинок у момент часу t визначатиметься конфігурацією

$$\widetilde{\gamma}_t(\widetilde{x}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\widetilde{x} - \widetilde{x}_i(t), \ \widetilde{x}_i(t) = \widetilde{x}_i(t, \widetilde{\gamma}), \tag{5.4.41}$$

де точки конфігурації $\widetilde{x}_i(t)$ задовольняють систему рівнянь Гамільтона:

$$\frac{dp_{x_i}(t)}{dt} = -\frac{\partial H^\Lambda(\widetilde{\gamma}_t)}{\partial x_i(t)}, \ \frac{dx_i(t)}{dt} = \frac{\partial H^\Lambda(\widetilde{\gamma}_t)}{\partial p_{x_i}(t)}. \tag{5.4.42}$$

Позначимо як T_t оператор зсуву вздовж траєкторій частинок. Тоді

$$T_t\widetilde{\gamma} = \widetilde{\gamma}_t.$$

Твердження 5.4.1. *Нехай* $\widetilde{\Gamma}_\Lambda$ *з* $\Lambda \in \mathcal{B}_c$ *є фазовим простором системи частинок, еволюцію яких описує система рівнянь Гамільтона* (5.4.42) *з гамільтоніаном* (5.4.38). *Тоді міра*

$$\mu^t_{D_\Lambda}(d\widetilde{\gamma}) := D_\Lambda(t; \widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}), \ \ t \geq 0,$$

є інваріантною відносно зсувів T_t *у сенсі (див. [215])*

$$\int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda} F(\widetilde{\gamma})\mu^t_{D_\Lambda}(d\widetilde{\gamma}) = \int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda} F(T_t\widetilde{\gamma})\mu^0_{D_\Lambda}(d\widetilde{\gamma}) \tag{5.4.43}$$

для функцій F*, для яких інтеграли в* (5.4.43) *набувають скінченного значення.*

Доведення є наслідком відомої теореми Ліувіля (див., наприклад, [34]) та визначення міри $\lambda_{\widetilde{\sigma}}$.

Кореляційні функції, які відповідають нерівноважній динаміці, визначаються аналогічно до рівноважного випадку (3.3.56):

$$\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta}) \;=\; \int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda} D_\Lambda(t;\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}), \tag{5.4.44}$$

де $\widetilde{\sigma}$ – міра Лебега в $\mathbb{R}^d\otimes\mathbb{R}^d$, тобто $d\widetilde{\sigma} = dxdp_x$. Продиференціюємо рівняння (5.4.44). Враховуючи рівняння Ліувіля та співвідношення

$$\nabla_x H^\Lambda(\widetilde{\gamma}) \;:=\; \left\{ \begin{array}{l} \nabla_x U^\Lambda(\eta) \;+\; \nabla_x W(\eta;\gamma),\ \text{якщо},\ x\in\eta, \\ \nabla_x U^\Lambda(\gamma) \;+\; \nabla_x W(\eta;\gamma),\ \text{якщо},\ x\in\gamma, \end{array} \right. \tag{5.4.45}$$

$$\nabla_{p_x} H^\Lambda(\widetilde{\gamma}) \;=\; \frac{1}{m}\mathbf{p}_x,\ x\in\eta\cup\gamma, \tag{5.4.46}$$

отримуємо

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta}) \;=\; & \sum_{x\in\eta}\left[\nabla_x U^\Lambda(\eta)\cdot\nabla_{p_x}\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta}) - \frac{1}{m}\mathbf{p}_x\cdot\nabla_x\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta})\right] + \\ & + \sum_{x\in\eta}\int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}\sum_{y\in\gamma}\nabla_x\phi(|x-y|)\cdot\nabla_{p_x}D_\Lambda(t;\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) + \\ & + \int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}\sum_{x\in\gamma}\nabla_x H^\Lambda(\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma})\cdot\nabla_{p_x}D_\Lambda(t;\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) - \\ & - \int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}\sum_{x\in\gamma}\nabla_{p_x} H^\Lambda(\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma})\cdot\nabla_x D_\Lambda(t;\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}). \end{aligned} \tag{5.4.47}$$

Застосуємо до 2-го, 3-го і 4-го доданків рівняння (5.4.47) формулу Мекке (1.2.23), яка справджується також на просторі $\widetilde{\Gamma}_\Lambda$ для міри $\lambda_{\widetilde{\sigma}}$. Ураховуючи означення (5.4.44) і граничні умови (5.4.40), отримуємо рівняння ББГКІ:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta}) &= \sum_{x\in\eta}\left[\nabla_x U^\Lambda(\eta)\cdot\nabla_{p_x}\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta}) - \frac{1}{m}\mathbf{p}_x\cdot\nabla_x\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta})\right] + \\ &+ \sum_{x\in\eta}\int_\Lambda\int_{\mathbb{R}^d}\nabla_x\phi(|x-y|)\cdot\nabla_{p_x}\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta}\cup\{(y,p_y)\})dydp_y.\end{aligned} \tag{5.4.48}$$

5.4.2. Подання розв'язку рівнянь ББГКІ

Щоб отримати формулу, подібну до формули (3.3.78), запишемо спершу твірний функціонал для послідовності функцій $\rho_n^\Lambda(t;\widetilde{x}_1,\ldots,\widetilde{x}_n)$:

$$\begin{aligned}F_\Lambda(t;j) &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\int_{\Lambda^n}\int_{\mathbb{R}^{dn}}(d\widetilde{x})^n\rho_n^\Lambda(t;\widetilde{x}_1,\ldots,\widetilde{x}_n)j(\widetilde{x}_1)\cdots j(\widetilde{x}_n) = \\ &= \int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta})\prod_{\widetilde{x}\in\widetilde{\eta}}j(\widetilde{x})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\eta}).\end{aligned} \tag{5.4.49}$$

Підставимо у цю формулу визначення (5.4.44) і застосуємо рівність (1.2.25), яка справедлива і для міри $\lambda_{\widetilde{\sigma}}$ на просторі $\widetilde{\Gamma}_\Lambda$ маркованих конфігурацій $\widetilde{\gamma}$ з $X = \Lambda\otimes\mathbb{R}^d$, $G(\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma}) = D_\Lambda(t,\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma})$ і $H(\widetilde{\eta},\widetilde{\gamma}) = (\prod_{\widetilde{x}\in\widetilde{\eta}}j(\widetilde{x}))1\!\!1_\Lambda(\gamma)$. Як наслідок отримуємо

$$\begin{aligned}F_\Lambda(t;j) &= \int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma})\sum_{\widetilde{\eta}\subseteq\widetilde{\gamma}}\prod_{\widetilde{x}\in\widetilde{\eta}}j(\widetilde{x})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) = \\ &= \int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma})e^{<\widetilde{\gamma},\log(1+j)>}\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) = \\ &= \int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma}) : e^{<\widetilde{\gamma},j>} : \lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}),\end{aligned} \tag{5.4.50}$$

де використано формулу (3.3.61). Врахуємо формулу (5.4.43). Тоді остаточно отримуємо таке представлення твірного функціонала:

$$\begin{aligned} F_\Lambda(t;j) &= \int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda} :e^{<\widetilde{\gamma}_t,j>}: D_\Lambda(0;\widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) = \\ &= \int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda} \exp[<\gamma_t, \log(1+j)>] D_\Lambda(0;\widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) \end{aligned}$$

і автоматично для кореляційних функцій:

$$\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta}) = \int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda} : \prod_{\widetilde{x}\in\widetilde{\eta}} \widetilde{\gamma}_t(\widetilde{x}) : D_\Lambda(0;\widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}), \tag{5.4.51}$$

де віківський добуток треба обраховувати за допомогою формули (3.3.62).

Залишається з'ясувати, як визначити еволюцію пуассонівського поля, тобто функцію $\widetilde{\gamma}_t$ (див. (5.4.41)).

Для цього виконаємо диференціювання за змінною t функціонала $F_\Lambda(t;j)$ у формулі (5.4.50), підставляючи праву частину рівняння Ліувіля (5.4.39). Застосуємо знову формулу (1.2.25) і скористаємося формулами (5.4.45), (5.4.46), (3.1.22):

$$\begin{aligned} &\frac{\partial F_\Lambda(t;j)}{\partial t} = \\ &= \int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}\int_\Lambda\int_{\mathbb{R}^d} \left[\nabla_x W_x^\Lambda(\gamma)\cdot\nabla_{p_x} D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma}\cup x)\right] : e^{<\widetilde{\gamma}\cup x,j>} : d\widetilde{x}\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) - \\ &- \int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}\int_\Lambda\int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{m}\mathbf{p}_x\cdot\nabla_x D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma}\cup\{x\})\right] : e^{<\widetilde{\gamma}\cup\{x\},j>} : d\widetilde{x}\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}), \end{aligned} \tag{5.4.52}$$

де $W_x^\Lambda(\gamma) := W(x;\gamma) + u^\Lambda(x)$. Ураховуючи граничні умови (5.4.40), виконаємо інтегрування за частинами за змінною p_x у першому доданку і за змінною x – у другому доданку, діючи відповідними операторами ∇_{p_x} і ∇_x на фактор $: \exp[<\widetilde{\gamma}\cup\{x\}, j>] :$. Далі знову застосуємо формулу (1.2.23), повертаючись до сумування за точками конфігурації $\widetilde{\gamma}$ і заміняючи це сумування введенням інтеграла від пуассонівського поля $\widetilde{\gamma}(\widetilde{x})$ подібно до формул (3.3.57), (3.3.58). Після цього виконаємо ще раз інтегрування за частинами в цих інтегралах у сенсі узагальнених функцій, тобто перекидаючи оператори ∇_{p_x} і ∇_x на пуассонівські поля. Тоді остаточно отримуємо таке рівняння:

$$\begin{aligned}\frac{\partial F_\Lambda(t;j)}{\partial t} = &-\int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda} \lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma}) \int_\Lambda \int_{\mathbb{R}^d} d\widetilde{x}\Big(\frac{1}{m}\mathbf{p}_x \cdot \nabla_x \widetilde{\gamma}(\widetilde{x}) - \\ &- :\nabla_{p_x}\widetilde{\gamma}(\widetilde{x}) \int_\Lambda \int_{\mathbb{R}^d} d\widetilde{x'}\widetilde{\gamma}(\widetilde{x'}) :\cdot(\nabla_x \phi(|x-x'|) + \\ &+ \nabla_x u^\Lambda(x))\Big)\frac{\delta}{\delta j(x)} : e^{<\widetilde{\gamma},j>} :,\end{aligned} \tag{5.4.53}$$

де

$$:\widetilde{\gamma}(\widetilde{x})\widetilde{\gamma}(\widetilde{x'}): = \ \widetilde{\gamma}(\widetilde{x})\widetilde{\gamma}(\widetilde{x'}) \ - \ \delta(\widetilde{x}-\widetilde{x'}),$$

що усуває доданок $\nabla_x \phi(|x-x'|)$ при $x - x' = 0$. Аналогічно, диференціюючи $F_\Lambda(t;j)$ у формулі (5.4.52), одержимо вираз, який після застосування рівності (5.4.43) збігатиметься з правою частиною (5.4.53), якщо функція $\widetilde{\gamma}_t(\widetilde{x})$ буде задовольняти рівняння Власова:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \widetilde{\gamma}_t(\widetilde{x})}{\partial t} \ &= \ -\frac{1}{m}\mathbf{p}_x \cdot \nabla_x \widetilde{\gamma}_t(\widetilde{x}) + \\ &+ :\nabla_{p_x}\widetilde{\gamma}_t(\widetilde{x}) \int_\Lambda \int_{\mathbb{R}^d} d\widetilde{x'}\widetilde{\gamma}_t(\widetilde{x'}) :\cdot(\nabla_x \phi(|x-x'|) + \nabla_x u^\Lambda(x))\end{aligned} \tag{5.4.54}$$

у сенсі узагальнених функцій. Використовуючи це рівняння, легко безпосередньо перевірити, що вираз (5.4.51) задовольняє рівняння (5.4.48) (див., також, [200]).

Зауважимо, що питання, розглянуті у цьому підрозділі, з дещо інших позицій висвітлені у праці [170].

Розділ 6

Квазінеперервна апроксимація. Модель коміркового газу

Квазінеперервну апроксимацію класичної статистичної механіки було запропоновано в праці [206] для дослідження нескінченних систем точкових частинок, що взаємодіють за допомогою двочастинкового (парного) посилено надстійкого потенціалу. Суть такої апроксимації полягає у тому, що в інтегралах Лебега–Пуассона за усіма можливими конфігураціями інтегрування виконується тільки за такими конфігураціями, в яких для заданого розбиття простору $\mathbb{R}^d$ на неперетинні гіперкубики (*комірки*) об'ємом a^d знаходиться не більше ніж одна точка (частинка) у кожному кубику розбиття. Кореляційні функції та основні термодинамічні характеристики системи, визначені таким чином, збігаються поточково (при $a \to 0$) до відповідних величин, в яких інтегрування виконується за усіма можливими конфігураціями, якщо потенціал взаємодії є достатньо сингулярним у точці початку координат. Точніше, коли потенціал не є локально інтегровним у будь-якій обмеженій області простору $\mathbb{R}^d$, яка містить точку початку координат. Цей факт хоч і є передбачуваним з точки зору фізичних міркувань, але є досить несподіваним з математичної точки зору, бо множина таких конфігурацій має міру нуль щодо міри Пуассона чи міри Гіббса для нескінченної системи.

Проте визначені таким чином системи легко апроксимувати системами *ґратчастих газів*, вивчення яких значно спрощується. Особливо важливим перехід від неперервних систем до ґратчастих газів може виявитись під час дослідження критичної поведінки нескінченних неперервних систем в області фазових переходів. У праці [206] показано, що для довільних додатних значень температури системи T (або оберненої температури $\beta = 1/kT$) та активності z апроксимований тиск системи $p^{(-)}(z, \beta; a)$ прямує до справжнього тиску $p(z, \beta)$ при $a \to 0$. У [31] цей результат узагальнено для систем з багаточастинковою взаємодією. Пізніше, в [208] такий самий результат отримано для сім'ї кореляційних функцій, але тільки в області достатньо малих значень параметра z, значення якого обмежувались радіусом збіжності розкладів Кірквуда–Зальцбурга для кореляційних функцій системи.

У [32] результат праці [208] узагальнено на випадок довільних значень параметрів β, z. Використовуючи розклад кореляційних функцій за так званими *щільними* конфігураціями, який запропоновано в [201] для потенціалів фінітної дії та в [189] для потенціалів з нескінченним радіусом взаємодії, встановлено, що сім'я апроксимованих кореляційних функцій $\rho_{\Lambda}^{(-)}(z, \beta; a)$ для системи в обмеженому об'ємі $\Lambda \Subset \mathbb{R}^d$ є рівномірно обмеженою сталою, яка не залежить від параметра апроксимації a і об'єму Λ та поточково збігається до кореляційних функцій $\rho(z, \beta)$ при $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^d$ і $a \to 0$ за довільних значень оберненої температури β та активності z. Цей результат встановлено як для парних потенціалів посилено надстійкого типу, так і для багаточастинкових посилено суперстійких взаємодій. У праці [63] розглянуто апроксимацію вільної енергії неперервного газу та встановлено аналогічний результат для будь-яких значень оберненої температури $\beta > 0$ і питомого об'єму $v > 0$.

У цьому розділі детально описано основні результати наведених вище праць і введено модель неперервної системи точкових частинок, що взаємодіють, яку в праці [203] названо *комірковим газом.*

6.1. Апроксимація тиску

Дуже важливою термодинамічною характеристикою статистичної системи є тиск. У рамках великого канонічного ансамблю тиск визначається формулою (3.2.37). Для побудови апроксимації тиску введемо таку статистичну суму:

$$\begin{aligned}\Xi_\Lambda^{(-)} = \Xi_\Lambda^{(-)}(z,\beta;a) &= \int_{\Gamma_\Lambda^{(dil)}} e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \\ &= \int_{\Gamma_\Lambda} \prod_{\Delta\in\Lambda_a} \chi_-^\Delta(\gamma) e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma),\end{aligned} \tag{6.1.1}$$

де $\chi_-^\Delta(\gamma)$ визначено формулою (5.1.1). Відповідний вираз для тиску визначається стандартним чином:

$$p^{(-)}(z,\beta;a) = \lim_{V\to\infty} p_\Lambda^{(-)}(z,\beta;a) := \frac{1}{\beta}\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\log\Xi_\Lambda^{(-)}. \tag{6.1.2}$$

Сформулюємо основний результат цього підрозділу.

Теорема 6.1.1. *Нехай потенціал взаємодії ϕ задовольняє умови* **A** *(див.* (2.3.25)–(2.3.27)*). Тоді для довільного $\varepsilon > 0$ існує $a = a(z,\varepsilon) > 0$ таке, що*

$$|p(z,\beta) - p^{(-)}(z,\beta;a)| < \varepsilon$$

для всіх додатних z, β.

Доведення. Підставимо у праву частину (3.1.18) розклад одиниці (5.1.3):

$$\Xi_\Lambda = \sum_{\emptyset\subseteq X_+\subseteq\Lambda}\int_{\Gamma_\Lambda} \widetilde{\chi}_+^{X_+}(\gamma)\widetilde{\chi}_-^{X_-}(\gamma)e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{6.1.3}$$

Неважко помітити, що перший член у (6.1.3) (при $X_+ = \emptyset$) збігається з $\Xi_\Lambda^{(-)}(a)$ (див. (6.1.1)). Використовуючи нескінченно подільну властивість міри Лебега–Пуассона (див. (1.2.2)) маємо

$$\Xi_\Lambda = \Xi_\Lambda^{(-)}\left[1 + \sum_{\emptyset\not\subseteq X_+\subseteq\Lambda}\int_{\Gamma_{X_+}} \rho^{(-)}_{X_-}(\gamma;a)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)\right] = \Xi_\Lambda^{(-)}(a)\Xi_\Lambda^{(+)}(a). \tag{6.1.4}$$

Тут

$$\rho^{(-)}_{X_-}(\gamma_{X_+};a) = \frac{e^{-\beta U(\gamma_{X_+})}}{\Xi_\Lambda^{(-)}(a)}\int_{\Gamma_{X_-}} \widetilde{\chi}^{X_-}_{-}(\gamma')e^{-\beta U(\gamma_{X_+}|\gamma')}\lambda_\sigma(d\gamma'),$$

де $U(\gamma_{X_+} \mid \gamma') := W(\gamma_{X_+};\gamma') + U(\gamma')$. Отже, використовуючи визначення (3.2.37) і (6.1.2), можна записати

$$p_\Lambda(z,\beta) = p_\Lambda^{(-)}(z,\beta;a) + p_\Lambda^{(+)}(z,\beta;a).$$

Існування термодинамічної границі для $p_\Lambda(z,\beta)$, $p_\Lambda^{(-)}(z,\beta;a)$, і $p_\Lambda^{(+)}(z,\beta;a)$ для потенціалу, який розглядається, є очевидним. Для доведення теореми потрібно оцінити величину $p^{(+)}(z,\beta;a)$.

Передусім, використовуючи **SSS** припущення (2.1.7), можна записати

$$e^{-\beta U(\gamma_{X_+})} \le \prod_{\Delta\in\overline{\Delta}_a\cap X_+} e^{-\beta A|\gamma_\Delta|^p + B|\gamma_\Delta|}. \tag{6.1.5}$$

Ураховуючи (2.3.30), маємо

$$e^{-\beta W(\gamma_{X_+};\gamma'_{X_-})} \le \prod_{\Delta\in\overline{\Delta}_a\cap X_+} e^{\beta\varphi_0|\gamma_\Delta|}. \tag{6.1.6}$$

З огляду на(6.1.5)і (6.1.6), легко отримати таку нерівність

$$\int_{\Gamma_{X_+}} \rho^{(-)}_{X_-}(\gamma;a)\lambda_\sigma(d\gamma) \le$$

$$\le \prod_{\Delta\in\overline{\Delta}_a\cap X_+}\int_{\Gamma_\Delta} e^{-\beta A|\gamma_\Delta|^p + B|\gamma_\Delta| + \varphi_0|\gamma_\Delta|}\chi^\Delta_+(\gamma_\Delta)\lambda_\sigma(d\gamma_\Delta)\frac{\Xi^{(-)}_{X_-}}{\Xi^{(-)}_\Lambda}.$$

З визначення міри λ_σ і з урахуванням нерівності (2.3.37) одержуємо

$$\int_{\Gamma_\Delta} \lambda_\sigma(d\gamma_\Delta)\, e^{-\beta\, A\, |\gamma_\Delta|^p + \beta\,(B + \varphi_0\, |\gamma_\Delta|)} \ \le$$

$$\le\ \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(a^d\, z)^n}{n!}\, e^{-\frac{1}{4}\beta\, b\, n^p + 2\beta\, \varphi_0\, n} \ \le\ \epsilon(a),$$

з $b = b(a) := \inf_{\{x,y\}\subset\Delta} \phi^+(|x-y|) = \frac{\phi_0}{(\sqrt{d}a)^s}$ і

$$\epsilon(a) \ =\ \frac{1}{2}\, z^2 a^{2d}\, e^{-\beta\,(1/4b - 2\varphi_0)}\ \exp\{za^d\, e^{-\beta\,(3/4b-2\varphi_0)}\}. \qquad (6.1.7)$$

З означень N_Λ, $\Xi_\Lambda^{(+)}$ (див. (5.1.3) і (6.1.4)) і наведених вище оцінок маємо

$$\log \Xi_\Lambda^{(+)}\ \le\ \log\left[1 + \sum_{\emptyset\not\subseteq X_+ \subseteq \Lambda} \epsilon(a)^{N_{X_+}}\right]\ =$$

$$=\ \log\left[1 + \sum_{k=1}^{N_\Lambda} \frac{N_\Lambda!}{k!(N_\Lambda - k)!}\epsilon(a)^k\right]\ =\ \frac{V}{a^d}\log\left[1 + \epsilon(a)\right]. \quad (6.1.8)$$

Як наслідок,

$$p_+(z,\beta;a)\ \le\ \frac{1}{\beta a^d}\log\left[1+\epsilon(a)\right].$$

Таким чином, оскільки $\epsilon(a) \sim a^{2d}$ (див. (6.1.7)), то

$$\lim_{a\to 0} p^{(+)}(z,\beta;a) = 0.$$

■

6.2. Апроксимація вільної енергії

У цьому підрозділі встановлено подібний результат для вільної енергії системи. У канонічному ансамблі її задають формулами (3.2.26)–(3.2.27).

Квазіґратчаста апроксимація вільної енергії визначається за тими самими формулами, але за допомогою статистичної суми

$$Z_{\Lambda}^{(-)}(N, \beta, a) \;=\; \int_{\Gamma_{\Lambda}^{(N)}} \prod_{\Delta \in \overline{\Delta}_{a,\Lambda}} \chi_{-}^{\Delta}(\gamma) e^{-\beta U(\gamma)} \lambda_{\sigma}(d\gamma).$$

Тоді відповідна функція $f_{\Lambda}^{(-)}(N, \beta, a)$ та її термодинамічна границя $f^{(-)}(v, \beta, a)$ задовольняють такі теореми:

Теорема 6.2.1. *Нехай потенціал взаємодії* ϕ *задовольняє умови* **A** *(див.* (2.3.25)–(2.3.27)*). Тоді існує деяке* $0 \leq v_0 < \infty$*, таке що для* $v > v_0$ *існує границя*

$$f^{(-)}(v, \beta, a) \;=\; \lim_{\substack{N \to \infty \\ \Lambda \uparrow \mathbb{R}^d}} f_{\Lambda}^{(-)}(N, \beta, a) \;:=\; \lim_{\substack{N \to \infty \\ \Lambda \uparrow \mathbb{R}^d}} \frac{1}{N} \log Z_{\Lambda}^{(-)}(N, \beta, a) \tag{6.2.9}$$

для довільного $v > v_0$*. Функція* $f^{(-)}(v, \beta, a)$ *є монотонно неспадною увігнутою функцією змінної* v*.*

Теорема 6.2.2. *Нехай потенціал взаємодії* ϕ *задовольняє умови* **A** *(див.* (2.3.25)–(2.3.27)*). Тоді для довільного* $\varepsilon > 0$ *існує* $a_1 = a_1(v, \varepsilon) > 0$*, таке, що нерівність*

$$|f(v, \beta) - f^{(a)}(v, \beta)| < \varepsilon$$

виконується для усіх додатних v*,* β *і* $0 \leq a < a_1$*.*

Доведення теореми 6.2.1 є таким самим, як і відповідне доведення теореми для функції $f(v, \beta)$ у праці [12]. Єдине зауваження полягає в тому, що побудова допоміжного розбиття на кубики в [12] повинно узгоджуватись з розбиттям $\overline{\Delta}_a$. ■

Доведення теореми 6.2.2. Щоб довести теорему підставимо розбиття одиниці (5.1.3) у вираз (3.1.16). Тоді

$$Z_\Lambda(N,\beta) \ = \ \sum_{X\subseteq\Lambda_a} \int_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} \widetilde{\chi}_+^X(\gamma)\widetilde{\chi}_-^{\Lambda_a\setminus X}(\gamma)e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\gamma). \qquad (6.2.10)$$

Виділяючи парший член розкладу, який відповідає значенню $X = \emptyset$, можна (6.2.10) записати у вигляді

$$Z_\Lambda(N,\beta) \ = \ Z_\Lambda^{(-)}(N,\beta)Z_\Lambda^{(+)}(N,a,\beta), \qquad (6.2.11)$$

де

$$Z_\Lambda^{(+)}(N,a,\beta) = 1 + \frac{1}{Z_\Lambda^{(-)}(N,\beta)}\times \qquad (6.2.12)$$
$$\times \sum_{\emptyset\neq X\subseteq\Lambda_a} \int_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} \widetilde{\chi}_+^X(\gamma)\widetilde{\chi}_-^{\Lambda_a\setminus X}(\gamma)e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\gamma).$$

З означень (3.2.26)–(3.2.27), (6.2.9) та рівняння (6.2.11) отримуємо співвідношення

$$f_\Lambda(N,\beta) \ = \ f_\Lambda^{(-)}(N,\beta) \ + \ f_\Lambda^{(+)}(N,\beta), \qquad (6.2.13)$$

$$f_\Lambda^{(+)}(N,\beta) \ := \ \frac{1}{N}\log Z_\Lambda^{(+)}(N,a,\beta).$$

Щоб оцінити другий член у (6.2.13), запишемо енергію $U(\gamma)$ у кожному доданку суми (6.2.12):

$$U(\gamma) \ = \ U(\gamma_X) \ + \ W(\gamma_X;\gamma_{\Lambda\setminus X}) \ + \ U(\gamma_{\Lambda\setminus X}).$$

Скористаємося нерівністю (2.1.7) і визначенням (2.3.30), тоді

$$e^{-\beta U(\gamma_X)}e^{-\beta W(\gamma_X;\gamma_{\Lambda\setminus X})} \ \le \ \prod_{\Delta\in\overline{\Delta}_{a,X}} e^{-\beta A(a)|\gamma_\Delta|^m \ + \ \beta C(a)|\gamma_\Delta|} \ := \ E_X, \qquad (6.2.14)$$

де

$$C(a) \ = \ B(a) \ + \ \varphi_0(a). \qquad (6.2.15)$$

Позначимо інтеграл у (6.2.12) (після виконання оцінки (6.2.14)) як I_X і запишемо вираз для $I'_X = I_X N!/\sigma_0^N$ (σ_0 визначено в (3.1.16)) в такій формі:

$$\begin{aligned} I'_X = &\left(\int_X dx_1 + \int_{\Lambda\setminus X} dx_1\right)\dots\left(\int_X dx_N + \int_{\Lambda\setminus X} dx_N\right) E_X \times \\ &\times \widetilde{\chi}_+^X(\gamma_X) e^{-\beta U(\gamma_{\Lambda\setminus X})} \widetilde{\chi}_-^{\Lambda_a\setminus X}(\gamma_{\Lambda\setminus X}). \end{aligned} \tag{6.2.16}$$

Кожна множина X є об'єднанням k кубиків $\Delta_1, ..., \Delta_k$, $k \in \{1, ..., N_\Lambda\}$. Принаймні дві змінні конфігурації $\gamma = \{x_1, ..., x_N\}$ є в кожному кубику Δ_j, $j \in \{1, ..., k\}$. Позначаємо кількість змінних у кубиках $\Delta_1, ..., \Delta_k$ так: $M = m_1 + \cdots + m_k$. Зрозуміло, що $M \in \{2k, ..., N\}$ і $m_j \geq 2$, $j \in \{1, ..., k\}$. Серед усіх 2^N членів, які з'являються в правій частині (6.2.16), не зникають лише ті члени, в яких інтегрування виконується за змінними $\{x_1, ..., x_M\}$ в області $X_k = \cup_{i=1}^k \Delta_i$, а за змінними $\{x_{M+1}, ..., x_N\}$ в області $\Lambda \setminus X_k = \cup_{i=k+1}^N \Delta_i$. Завдяки симетрії інтеграла відносно перестановок змінних $\{x_1, ..., x_N\}$ кількість членів у I_X, які відповідають фіксованому M, становить $N!/(N-M)!M!$. Так само кожен інтеграл по області X_k можна подати як суму інтегралів по кубиках $\Delta_1, ..., \Delta_k$. Далі враховуємо, що змінні $\{x_1, ..., x_M\}$ можуть бути розміщені в k кубиках, так що кожен кубик Δ_j має рівно m_j змінних, $M!/m_1! \cdots m_k!$ способами. Як наслідок маємо

$$\begin{aligned} Z_\Lambda^{(+)}(N, a, \beta) \ \leq \ & 1 + \sum_{k=1}^{N_\Lambda} \sum_{\{\Delta_1, ..., \Delta_k\} \subset \Lambda_a} \sum_{M=2k}^{N} a^{dM} e^{\beta C(a) M} \times \\ & \times \sum_{\substack{m_1, ..., m_k : m_j \geq 2 \\ m_1 + \cdots + m_k = M}} \left(\prod_{j=1}^{k} \frac{e^{-\beta A(a) m_j^m}}{m_j!}\right) \frac{Z_{\Lambda\setminus X_k}^{(-)}(N-M, \beta)}{Z_\Lambda^{(-)}(N, \beta)}. \end{aligned} \tag{6.2.17}$$

Щоб оцінити відношення статистичних сум в (6.2.17), скористаємось такою лемою:

Лема 6.2.3. *Нехай потенціал взаємодії* ϕ *задовольняє умови* **А** *(див.* (2.3.25)–(2.3.27)*). Тоді існує стала* $K > 0$*, така що*

$$\frac{Z^{(-)}_{\Lambda\setminus X_k}(N-M,\beta)}{Z^{(-)}_{\Lambda}(N,\beta)} \;\le\; K^M$$

для довільного $\beta > 0$*,* $v > 0$ *і достатньо великого* Λ*.*

Тепер *доведення* теореми 6.2.2 випливає з тривіальних оцінок комбінаторних сум у (6.2.17). Нехай для простоти $p = 2$ у припущенні SSS (2.1.7). З умови $m_1 + \cdots + m_k = M$ можна отримати, що $m_1^2 + \cdots + m_k^2 \ge M^2/k$. Отже, маємо

$$\begin{aligned} Z^{(+)}_{\Lambda}(N,\beta,a) \;&\le\; 1 + \sum_{k=1}^{N_\Lambda} \sum_{\{\Delta_1,\dots,\Delta_k\}\subset\Lambda_a} (ea^{2d})^k e^{-4\beta(A(a)-\frac{1}{2}C(a))k} \times \\ &\times \sum_{M'=0}^{\infty} a^{dM'} e^{-4\beta(A(a)-\frac{1}{2}C(a))M'} \;\le\; (1\;+\;\epsilon(a))^{N_\Lambda} \end{aligned}$$

з

$$\epsilon(a) \;:=\; 2ea^{2d} e^{-4\beta(A(a)-\frac{1}{2}C(a))}.$$

З рівнянь (2.3.34), (2.3.30), (6.2.15) зрозуміло, що

$$\lim_{a\to 0} \frac{1}{a^d} \log(1\;+\;\varepsilon(a)) \;=\; 0.$$

Це завершує доведення теореми. ■

Доведення леми 6.2.3. Зафіксуємо деяке $\overline{v} > 0$ і досить великий кубик Λ таким чином, щоб $\sigma(\Lambda)/N \ge \overline{v}$. Як і в праці праці [18], введемо допоміжний потенціал:

$$\phi_{\overline{a}}(|x|) \;=\; \begin{cases} 0 & \text{для } |x| \le \overline{a}, \\ \phi(|x|) & \text{для } |x| > \overline{a} \end{cases} \tag{6.2.18}$$

з довільним $a < \overline{a} < r_0$ (див. (2.3.25)). Доведення леми 6.2.3 випливає з оцінки відношення конфігураційних інтегралів (див. також [18], лема 3$'$):

$$\frac{Q^{(-)}(N+1,\Lambda,\beta,a)}{Q^{(-)}(N,\Lambda,\beta,a)} \;\ge\; k\sigma(\Lambda) \tag{6.2.19}$$

з $k = k(\overline{a}, \overline{v})$. Щоб довести (6.2.19) запишемо $Q^{(-)}(N+1, \Lambda, \beta, a)$ так:

$$Q^{(-)}(N{+}1, \Lambda, \beta, a) = \int_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} e^{-\beta U(\gamma)} d\gamma \int_\Lambda dx e^{-\beta W(x;\gamma)} \prod_{\Delta \in \Lambda_a} \chi_-^\Delta(\gamma \cup x),$$

де $\gamma = \{x_1, ..., x_N\}$, $d\gamma = dx_1 \cdots dx_N$. Визначимо область

$$\widetilde{\Lambda}_{\overline{a}}(\gamma) \ := \ \{x \in \Lambda \mid \ |x - x_j| \geq \overline{a}, \ x_j \in \gamma, \ \gamma \in \Gamma_\Lambda^{(N)}\}$$

і виберемо Λ достатньо великим та $\overline{a}$ достатньо малою щоб задовольняли нерівність

$$\sigma(\widetilde{\Lambda}_{\overline{a}}(\gamma)) \ \geq \ \frac{1}{2}\sigma(\Lambda). \qquad (6.2.20)$$

Тоді, враховуючи, що для $x \in \widetilde{\Lambda}_{\overline{a}}(\gamma)$

$$\prod_{\Delta \in \Lambda_a} \chi_-^\Delta(\gamma \cup \{x\}) = \prod_{\Delta \in \Lambda_a} \chi_-^\Delta(\gamma)$$

і

$$W(x;\gamma) \ = \ W_{\overline{a}}(x;\gamma) \ = \ \sum_{y \in \gamma} \phi_{\overline{a}}(|x - y|),$$

отримуємо

$$I_\Lambda(\gamma) \ := \ \int_\Lambda dx e^{-\beta W(x;\gamma)} \ \geq \ \int_{\widetilde{\Lambda}_{\overline{a}}(\gamma))} dx e^{-\beta W_{\overline{a}}(x;\gamma)}. \qquad (6.2.21)$$

З нерівності Гелдера в (6.2.21) з мірою $dx/\sigma(\widetilde{\Lambda}_{\overline{a}}(\gamma))$ одержуємо нерівність

$$I_\Lambda(\gamma) \ \geq \ \sigma(\widetilde{\Lambda}_{\overline{a}}(\gamma)) e^{\frac{-\beta}{\sigma(\widetilde{\Lambda}_{\overline{a}}(\gamma))} \int_{\widetilde{\Lambda}_{\overline{a}}(\gamma)} W_{\overline{a}}(x;\gamma) dx}.$$

З умови (2.2.10) і визначення (6.2.18) маємо

$$\int_{\widetilde{\Lambda}_{\overline{a}}(\gamma)} W_{\overline{a}}(x;\gamma) dx \ \leq \ N \int_{\mathbb{R}^d} |\phi_{\overline{a}}(|x|)| dx \ := \ N \|\phi_{\overline{a}}\|_{L_1}.$$

Використовуючи цю нерівність і враховуючи, що $N\overline{v} \le \sigma(\Lambda)$ і (6.2.20), одержуємо (6.2.19) з $k = 1/2e^{-\frac{2\beta}{\overline{v}}\|\phi_{\overline{a}}\|_{L_1}}$.

Якщо врахувати, що $Z^{(-)}_{\Lambda\setminus X_k}(a) < Z^{(-)}_{\Lambda}(a)$, маємо

$$\frac{Z^{(-)}_{\Lambda\setminus X_k}(N-M,\beta,a)}{Z^{(-)}_{\Lambda}(N,\beta,a)} \le \frac{Z^{(-)}_{\Lambda}(N-1,\beta,a)}{Z^{(-)}_{\Lambda}(N,\beta,a)} \cdots \tag{6.2.22}$$

$$\cdots \frac{Z^{(-)}_{\Lambda}(N-M,\beta,a)}{Z^{(-)}_{\Lambda}(N-M+1,\beta,a)} \le K^M$$

з $K = 1/k\overline{v}$. ■

6.3. Апроксимація кореляційних функцій

З визначення розріджених конфігурацій (1.1.14)–(1.1.15) сім'я апроксимованих кореляційних функцій $\rho^{(-)}_{\Lambda}(z,\beta;a)$ для системи в обмеженому об'ємі $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ визначають так:

$$\rho^{(-)}_{\Lambda}(\eta;z,\beta,a) := \frac{1}{\Xi^{(-)}_{\Lambda}(z,\beta,a)} \int_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\eta\cup\gamma)} \prod_{\Delta\in\Lambda_a} \chi^{\Delta}_{-}(\eta\cup\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma), \tag{6.3.23}$$

$$\Xi^{(-)}_{\Lambda}(z,\beta,a) := \int_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\gamma)} \prod_{\Delta\in\Lambda_a} \chi^{\Delta}_{-}(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma), \tag{6.3.24}$$

де

$$\chi^{\Delta}_{-}(\gamma) = \begin{cases} 1 & \text{для } \gamma \text{ з } |\gamma_\Delta| = 0 \vee 1, \\ 0 & \text{в інших випадках,} \end{cases}$$

а Λ_a визначено перед формулою (1.1.14).

У підрозд. 5.2 (теорема 5.2.1) встановлено рівномірну за Λ обмеженість кореляційних функцій $\rho_\Lambda(z,\beta)$(нерівність (5.2.12)).

Аналогічна нерівність справедлива і для функцій $\rho_\Lambda^{(-)}(\eta; z, \beta, a)$. Сформулюємо цей результат такою лемою:

Лема 6.3.1. *Нехай потенціал взаємодії* ϕ *задовольняє умови* **A**(*див.* (2.3.25)–(2.3.27)). *Тоді для довільного* $\eta \in \Gamma_\Lambda$ *існує деяка додатна стала* ξ_-, *яка не залежить від* Λ *і* a, *така що*

$$\rho_\Lambda^{(-)}(\eta; z, \beta, a) \leq \xi_-^{|\eta|} e^{-\beta U_\delta^+(\eta)}. \tag{6.3.25}$$

Доведення так само, як і в ході доведення теореми 5.2.1, базується на розкладі кореляційних функцій за щільними конфігураціями, тільки розбиття (5.1.3) треба побудувати з $\Delta \in \overline{\Delta}_{a_*}$, де a_* таке, що $a_*/a \in \mathbb{N}$, тобто в кожному кубику розбиття $\overline{\Delta}_{a_*}$ вкладалось ціле число кубиків розбиття $\overline{\Delta}_a$. Не обмежуючи загальність, виберемо $a_* = 2a$. Тоді в кожному гіперкубику $\Delta^{'} \in \overline{\Delta}_{a_*}$, що належать множинам X_n у розкладі може бути від двох до 2^d гіперкубиків $\Delta \in \overline{\Delta}_a$. Крім того, треба врахувати нерівність

$$\chi_+^{\Delta'}(\gamma) \prod_{\Delta \in \Delta'} \chi_-^{\Delta}(\gamma) \ \leq \ \prod_{\Delta \in \Delta'} \chi_-^{\Delta}(\gamma),$$

яка забезпечує появу в розкладі типу (4.3.102) для $\rho_\Lambda^{(-)}(\eta; z, \beta, a)$ відношення статистичних сум $\Xi^{(-)}_{\Lambda \backslash X_l^{(max)}} / \Xi^{(-)}_\Lambda$.

■

Нерівності (5.2.12) і (6.3.25) забезпечують існування термодинамічних границь для функцій $\rho_\Lambda(\eta; z, \beta, a)$ і $\rho_\Lambda^{(-)}(\eta; z, \beta, a)$.

Розглянемо послідовність (Λ_l) обмежених вимірних областей простору $\mathbb{R}^d$:

$$\Lambda_1 \subset \Lambda_2 \subset \ldots \subset \Lambda_n \subset \ldots, \ \ \underset{l}{\cup} \Lambda_l \ = \ \mathbb{R}^d,$$

де послідовність (Λ_l) прямує до $\mathbb{R}^d$ у сенсі Фішера (див. [43], розд. 2).

Добре відомо, що для довільної конфігурації $\eta \in \Gamma_0$ і довільної послідовності (5.1.3) такої, що $\eta \subset \Lambda_1$ існує підпослідовність $(\Lambda_k^{'})$ послідовності (Λ_l) така, що

$$\lim_{k \to \infty} \rho_{\Lambda_k^{'}}(\eta; z, \beta) = \rho(\eta; z, \beta) < \infty$$

для довільних додатних z, β рівномірно на $\mathcal{B}(\Gamma_0)$. Цей результат є наслідком рівномірної обмеженості кореляційних функцій. Тоді так само, як і вище, існує підпослідовність (Λ''_m) послідовності (Λ_l) така, що існує границя

$$\rho^{(-)}(\eta; z, \beta, a) \;=\; \lim_{m\to\infty} \rho^{(-)}_{\Lambda''_m}(\eta; z, \beta, a) < \infty. \tag{6.3.26}$$

Зауваження 4.1.*Граничні функції* $\rho(\eta; z, \beta)$ *і* $\rho^{(-)}(\eta; z, \beta, a)$ *в* (5.1.4) *та* (6.3.26) *можуть бути різними для різних підпослідовностей* Λ'_k *і* Λ''_m*. Тому для того щоб функція* $\rho^{(-)}(\eta; z, \beta, a)$ *була апроксимацією функції* $\rho(\eta; z, \beta)$*, треба вибрати підпослідовність* Λ''_m *у граничному переході* (6.3.26) *як підпослідовність послідовності* Λ'_k.

Тепер можна сформулювати основний результат такою теоремою:

Теорема 6.3.2. *Нехай потенціал взаємодії* ϕ *задовольняє умови* **A***(див.* (2.3.25)–(2.3.27)*). Тоді для довільного* $\varepsilon > 0$*, довільних додатних* z *і* β *і довільної конфігурації* $\eta \in \Gamma_0$ *існує* $a = a(z, \beta, \varepsilon) > 0$ *таке, що*

$$|\rho(\eta; z, \beta) - \rho^{(-)}(\eta; z, \beta, a)| < \varepsilon, \tag{6.3.27}$$

де $\rho(\eta; z, \beta)$ *і* $\rho^{(-)}(\eta; z, \beta, a)$ *– граничні значення функцій* $\rho_{\Lambda''_m}(\eta; z, \beta)$ *і* $\rho^{(-)}_{\Lambda''_m}(\eta; z, \beta, a)$ *відповідно з тією самою підпослідовність послідовності* (Λ_l) *(див. зауваження 4.1.)*

Доведення ґрунтується на існуванні границь (5.1.4), (6.3.26) і такій лемі:

Лема 6.3.3. *Нехай потенціал взаємодії* ϕ *задовольняє умови* **A***(див.* (2.3.25)–(2.3.27)*). Тоді для довільної послідовності* Λ_l *вигляду* (5.1.3)

$$\lim_{a\to 0} \rho^{(-)}_{\Lambda_l}(\eta; z, \beta, a) = \rho_{\Lambda_l}(\eta; z, \beta).$$

Звідси випливає, що для довільного $\varepsilon > 0$ *існує* $a < a_*$ *таке, що виконується нерівність*

$$|\rho^{(-)}_{\Lambda_l}(\eta; z, \beta, a) - \rho_{\Lambda_l}(\eta; z, \beta)| \leq \frac{\varepsilon}{3}. \tag{6.3.28}$$

Унаслідок існування границь (5.1.4) і (6.3.26) для довільного $\varepsilon > 0$ $\exists K_1 \in \mathbb{N}$ таке, що для $k \geq K_1$ справедлива нерівність

$$|\rho_{\Lambda''_m}(\eta; z, \beta) - \rho(\eta; z, \beta)| \leq \frac{\varepsilon}{3} \qquad (6.3.29)$$

і $\exists K_2 \in \mathbb{N}$, таке що для $k \geq K_2$ виконується нерівність

$$|\rho^{(-)}_{\Lambda''_m}(\eta; z, \beta, a) - \rho^{(-)}(\eta; z, \beta, a)| \leq \frac{\varepsilon}{3}. \qquad (6.3.30)$$

Тоді твердження теореми 6.1.1 випливає з (6.3.28) при $\Lambda_l \equiv \Lambda''_m$ і нерівностей (6.3.29), (6.3.30):

$$\begin{aligned}
&|\rho(\eta; z, \beta) - \rho^{(-)}(\eta; z, \beta, a)| = \\
&= |\rho(\eta; z, \beta) - \rho_{\Lambda''_m}(\eta; z, \beta) + \\
&+ \rho_{\Lambda''_m}(\eta; z, \beta) - \rho^{(-)}_{\Lambda''_m}(\eta; z, \beta, a) + \\
&+ \rho^{(-)}_{\Lambda''_m}(\eta; z, \beta, a) - \rho^{(-)}(\eta; z, \beta, a)| \leq \\
&\leq \frac{\varepsilon}{3} + \frac{\varepsilon}{3} + \frac{\varepsilon}{3} = \varepsilon.
\end{aligned}$$

■

Як наслідок, нерівність (6.3.27) забезпечує існування границі

$$\lim_{a \to 0} \rho^{(-)}(\eta; z, \beta, a) = \rho(\eta; z, \beta)$$

для довільних додатних $z, \beta > 0$ і $\eta \in \Gamma_0$.

У випадку двочастинкових потенціалів у області достатньо малих значень активності z існування єдиної поточкової границі було доведено в праці [208].

6.3.1. Доведення леми 6.3.3

Підставимо розбиття (5.1.3) (але з кубиками, що мають довжину ребер a замість a_* і з аргументом $\eta \cup \gamma$ у кожній функції $\chi^{\Delta}_{\pm}$) в (3.3.56). Отримуємо розклад

$$\begin{aligned}
\rho_\Lambda(\eta; z, \beta) \ = \ & \frac{z^{|\eta|}}{\Xi_\Lambda(z, \beta)} \sum_{X \subseteq \Lambda} \int_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\eta \cup \gamma)} \times \\
& \times \widetilde{\chi}^X_+(\eta \cup \gamma) \widetilde{\chi}^{\Lambda \setminus X}_-(\eta \cup \gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma).
\end{aligned} \qquad (6.3.31)$$

Виділимо перший член розкладу при $X = \emptyset$ і, враховуючи означення (6.3.23)–(6.3.24), запишемо (6.3.31) у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \rho_\Lambda(\eta; z, \beta) &= \frac{\Xi_\Lambda^{(-)}(z, \beta, a)}{\Xi_\Lambda(z, \beta)} \rho_\Lambda^{(-)}(\eta; z, \beta, a) + R^\Lambda(\eta; z, \beta, a), \\ R^\Lambda(\eta; z, \beta, a) &= \frac{z^{|\eta|}}{\Xi_\Lambda(z, \beta)} \sum_{\emptyset \neq X \subseteq \Lambda} \int_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\eta \cup \gamma)} \widetilde{\chi}_+^X(\eta \cup \gamma) \times \\ &\times \widetilde{\chi}_-^{\Lambda \setminus X}(\eta \cup \gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma). \qquad (6.3.32) \end{aligned}$$

Доведення леми 6.3.3 ґрунтується на двох технічних лемах:

Лема 6.3.4. *Нехай потенціал взаємодії ϕ задовольняє умови* **A** *(див.* (2.3.25)–(2.3.27)*). Тоді для довільного фіксованого* $\Lambda \in \mathbb{B}(\mathbb{R})$ *і довільної конфігурації* $\eta \in \Gamma_0$ *справедливою є границя*

$$\lim_{a \to 0} R^\Lambda(\eta; z, \beta, a) = 0.$$

(див. детальне *доведення* в [32], лема 5.1). ■

Лема 6.3.5. *Нехай потенціал взаємодії ϕ задовольняє умови* **A** *(див.* (2.3.25)–(2.3.27)*). Тоді для довільного фіксованого* $\Lambda \in \mathbb{B}(\mathbb{R})$ *виконується границя*

$$\lim_{a \to 0} \frac{\Xi_\Lambda(z, \beta)}{\Xi_\Lambda^{(-)}(z, \beta, a)} = 1. \qquad (6.3.33)$$

Доведення. З рівняння (6.1.4) і нерівності (6.1.8) випливає, що

$$1 \le \frac{\Xi_\Lambda(z, \beta)}{\Xi_\Lambda^{(-)}(z, \beta, a)} \le (1 + \epsilon(a))^{N_\Lambda} = (1 + \epsilon(a))^{\frac{V}{a^d}}.$$

Ураховуючи (6.1.7), отримуємо (6.3.33). ■

6.4. Модель коміркового газу

З теорем 6.1.1, 6.2.2, 6.3.2 випливає висновок, що для системи з **SSS** взаємодією (див. визначення (2.1.7))вплив щільних конфігурацій є незначним, незважаючи на те, що це є множина повної міри принаймні для міри Пуассона $\pi_{z\sigma}$ (див. твердження 6.4.1). Як наслідок, з'являється ідея опису фізичних властивостей системи, яку розглядаємо, використовуючи модель з конфігураційним простором $\Gamma^{(dil)}$. Таку модель назвемо *моделлю коміркового газу.*

6.4.1. Визначення моделі

Означення 6.1. *Для заданого розподілу* $\overline{\Delta}_a$ *простору* $\mathbb{R}^d$ *визначимо систему коміркового газу (КГ) як систему точкових частинок, простором конфігурацій яких є*

$$\widetilde{\Gamma}^{(a)} = \widetilde{\Gamma}_{\overline{\Delta}_a} := \left\{\gamma \in \Gamma |\, |\gamma_\Delta| = 0 \vee 1 \text{ for all } \Delta \in \overline{\Delta}_{\rm a} \right\}.$$

Твердження 6.4.1. *Простір* $\widetilde{\Gamma}^{(a)}$ *– це підмножина в* Γ *міри нуль відносно міри Пуассона:*

$$\pi_{z\sigma}(\widetilde{\Gamma}^{(a)}) \;=\; 0.$$

Доведення. Запишемо індикатор множини $\widetilde{\Gamma}^{(a)}$:

$$1\!\!1_{\widetilde{\Gamma}^{(a)}}(\gamma) \;=\; \prod_{\Delta\in\overline{\Delta}_a} \chi_-^{\Delta}(\gamma) \tag{6.4.34}$$

Тоді, враховуючи властивість нескінченноподільності міри Пуассона $\pi_{z\sigma}$ (див. (1.2.24)), отримаємо

$$\pi_{z\sigma}(\widetilde{\Gamma}^{(a)}) \;=\; \int_\Gamma \prod_{\Delta\in\overline{\Delta}_a} \chi_-^{\Delta}(\gamma)\pi_{z\sigma}(d\gamma) \;=\; \prod_{\Delta\in\overline{\Delta}_a} \int_\Delta \chi_-^{\Delta}(\gamma)\pi_{z\sigma}^{\Delta}(d\gamma).$$

Ураховуючи визначення міри $\lambda_{z\sigma}$, (1.2.19) і визначення функції χ_-^{Δ} (6.4.34), можна продовжити це обчислення:

$$\pi_{z\sigma}(\widetilde{\Gamma}^{(a)}) \;=\; \prod_{\Delta\in\overline{\Delta}_a} e^{-z\sigma(\Delta)}\left(1+z\sigma(\Delta)\right) = 0,$$

оскільки $e^{-z\sigma(\Delta)}\left(1+z\sigma(\Delta)\right) < 1$ і набуває однакових значень для всіх $\Delta \in \overline{\Delta}_a$. ■

6.4.2. Вимірна структура простору $\widetilde{\Gamma}^{(a)}$

Для опису вимірних множин конфігураційного простору $\widetilde{\Gamma}^{(a)}$ перевизначимо простір $\widetilde{\Gamma}^{(a)}$ як простір *маркованих конфігурацій*:

$$\widetilde{\Gamma}^{(a)} := \left\{ \widetilde{\gamma} = \{(\Delta_1, x_1), ..., (\Delta_n, x_n), ...\} | \, x_i \in \Delta_i, \Delta_i \in \overline{\Delta}_a \right\}.$$

Отже, $\widetilde{\Gamma}^{(a)}$ можна подати як дискретний набір обмежених неперервних "спінів"(див., наприклад, [107], [108]).

Як і в неперервному випадку, позначаємо через $\widetilde{\Gamma}_0^{(a)}$ множину скінченних конфігурацій простору $\widetilde{\Gamma}^{(a)}$:

$$\widetilde{\Gamma}_0^{(a)} \; = \; \bigsqcup_{n \in \mathbb{N}_0} \widetilde{\Gamma}^{(a;n)},$$

де $\widetilde{\Gamma}^{(a;n)}$ — простір скінченних послідовностей $\widetilde{\gamma} \in \widetilde{\Gamma}_0^{(a)}$ з n кубиками $\{\Delta_1, ..., \Delta_n\} \subset \overline{\Delta}_a$.

Так само, як і в (5.1.3) і (5.1.6), позначимо як $\overline{X}_n$ множину кубиків $\Delta_j \in \overline{\Delta}_a$ і як $X_n \subset \mathbb{R}^d$ об'єднання таких кубиків. Нехай також $\mathfrak{X}_{\Delta_j}$ — борелівська множина $\mathcal{B}(\Delta_j) \, := \, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \restriction \Delta_j$, $\Delta_j \in \overline{\Delta}_a$. Тоді циліндричну множину в $\widetilde{\Gamma}^{(a;n)}$ і в $\widetilde{\Gamma}_0^{(a)}$ можна визначити за допомогою деякої фіксованої множини Λ_N і послідовності множин $\mathfrak{X}_{\Delta_j} \in \mathcal{B}(\Delta_j)$, $j = \overline{1, N}$, так ($n \leq N$):

$$\widetilde{X}_N^{(n)}(\overline{\Lambda}_N, \overline{\mathfrak{X}}_N) = \left\{ \{(\Delta_1, x_1), ..., (\Delta_n, x_n)\} \in \widetilde{\Gamma}^{(a;n)} \; | \, , \; x_j \in \mathfrak{X}_{\Delta_j} \right\} \tag{6.4.35}$$

і

$$\widetilde{X} := \bigcup_{N \in \mathbb{N}} \; \bigcup_{\overline{\Lambda}_N \subset \overline{\Delta}_a} \; \bigcup_{\overline{\mathfrak{X}}_N} \; \bigsqcup_{n=0}^{N} \widetilde{X}_N^{(n)}(\overline{\Lambda}_N, \overline{\mathfrak{X}}_N) \in \mathcal{B}(\widetilde{\Gamma}_0^{(a)}),$$

де $\overline{\mathfrak{X}}_N = \{\mathfrak{X}_{\Delta_1}, ..., \mathfrak{X}_{\Delta_N}\}$.

6.4.3. Міри на просторі конфігурацій коміркового газу

Щоб побудувати аналог міри *Лебега–Пуассона* на $\widetilde{\Gamma}_0^{(a)}$, визначимо міру $\widetilde{\sigma}^{(n)}$ на множинах (6.4.35):

$$\sigma^{(n)}(\widetilde{X}_N^{(n)}(\overline{\Lambda}_N,\overline{\mathfrak{X}}_N)) \;=\; \begin{cases} 1 & \text{для}\, n=0, \\ \sum\limits_{\overline{\Lambda}_n\subseteqq\overline{\Lambda}_N} \sigma(\mathfrak{X}_{\Delta_1})\cdots\sigma(\mathfrak{X}_{\Delta_n}) & \text{для}\, 1\le n\le N, \\ 0 & \text{для}\, n>N. \end{cases}$$

Тоді легко знайти, що для $1\le n\le N$

$$\sigma^{(n)}(\widetilde{X}_N^{(n)}(\overline{\Lambda}_N,\overline{\mathfrak{X}}_N)) \;=\; \frac{1}{n!}\int_{\mathfrak{X}_N} dx_1\cdots\int_{\mathfrak{X}_N} dx_n\prod_{i=1}^{N}\chi_{-}^{\Delta_i}(\{x_1,...,x_n\}), \tag{6.4.36}$$

де $\mathfrak{X}_N \;:=\; \cup_{i=1}^{N}\mathfrak{X}_{\Delta_i}$ і $dx_i=\sigma(dx_i)$. Тоді

$$\lambda_\sigma^{(a)} \;:=\; \sum_{n=0}^{\infty}\sigma^{(n)}$$

є мірою Лебега–Пуассона на $\widetilde{\Gamma}_0^{(a)}$ і $\widetilde{\Gamma}_{\overline{\Lambda}_N}^{(a)}$.

Означення 6.2. *Міру* $\lambda_\sigma^{(a)}$ *називатимемо* Δ*- нескінченно подільною, якщо рівність* (1.2.24) *у лемі 1.2.2 виконуватиметься за умови, що множини* X_1 *і* X_2 *є об'єднаннями кубиків* $\Delta\in\overline{\Delta}_a$.

Лема 6.4.2. *Міра* $\lambda_\sigma^{(a)}$ *є* Δ*-нескінченноподільною на* $\widetilde{\Gamma}_0^{(a)}$ *і на* $\widetilde{\Gamma}_{\overline{\Lambda}_N}^{(a)}$*, а*

$$\lambda_\sigma^{(a)}(\widetilde{\Gamma}_{\overline{\Lambda}_N}^{(a)}) \;=\; (1\;+\;a^d)^N.$$

Доведення. З (6.4.36) випливає, що для $F\in L^1(\Gamma_0,\lambda_\sigma)$

$$\int_{\widetilde{\Gamma}_0^{(a)}} F(\widetilde{\gamma})\lambda_\sigma^{(a)}(d\widetilde{\gamma}) \;=\; \int_{\Gamma_0} F(\gamma)\prod_{\Delta\in\overline{\Delta}_a}\chi_{-}^{\Delta}(\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma). \tag{6.4.37}$$

Як наслідок, нескінченно подільність міри $\lambda_\sigma^{(a)}$ випливає з нескінченно подільності міри λ_σ. У випадку, коли усі $\mathfrak{X}_{\Delta_i} \equiv \Delta_i$ (тобто $\mathfrak{X}_N \equiv \Lambda_N,\ N = \sigma(\Lambda_N)/a^d$), маємо

$$\begin{aligned}\lambda_\sigma^{(a)}(\widetilde{\Gamma}^{(a)}_{\overline{\Lambda}_N}) &= \int_{\Gamma_{\Lambda_N}} \prod_{\Delta\in\overline{\Delta}_a} \chi_-^{\Delta}(\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma) = \\ &= \prod_{\Delta\in\overline{\Lambda}_N} \int_{\Gamma_\Delta} \chi_-^{\Delta}(\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma) = (1 + a^d)^N.\end{aligned}$$

■

Тепер можемо розглянути сім'ю ймовірнісних мір на $\widetilde{\Gamma}^{(a)}_{\overline{\Lambda}_N}$:

$$\pi_\sigma^{(a;N)} := (1 + a^d)^{-N}\lambda_\sigma^{(a)}, \quad N \in \mathbb{N}. \tag{6.4.38}$$

Ця сім'я є узгодженою, тобто для будь-яких N і $N+k,\ k \in \mathbb{N}$ $(\overline{\Lambda}_N \subset \overline{\Lambda}_{N+k})$,

$$\pi_\sigma^{(a;N+k)} \restriction \widetilde{\Gamma}^{(a)}_{\overline{\Lambda}_N} = \pi_\sigma^{(a;N)},$$

бо для довільної циліндричної функції $F(\widetilde{\gamma} \cap \overline{\Lambda}_N)$

$$\int_{\widetilde{\Gamma}^{(a)}_{\overline{\Lambda}_{N+k}}} F(\widetilde{\gamma} \cap \overline{\Lambda}_N)\pi_\sigma^{(a;N+k)}(d\widetilde{\gamma}) = \int_{\widetilde{\Gamma}^{(a)}_{\overline{\Lambda}_N}} F(\widetilde{\gamma})\pi_\sigma^{(a;N)}(d\widetilde{\gamma}).$$

Тоді знову за теоремою Колмогорова існує єдина ймовірнісна міра і в якомусь сенсі це є апроксимацією міри Пуассона на Г. Дійсно, обчислюючи перетворення Лапласа

$$l_{\pi_\sigma^{(a;N)}}(f) := \int_{\widetilde{\Gamma}^{(a)}_{\overline{\Lambda}_N}} e^{<\widetilde{\gamma},f>}\pi_\sigma^{(a;N)}(d\widetilde{\gamma})$$

з урахуванням (6.4.38) і (1.2.24), одержуємо

$$l_{\pi_\sigma^{(a;N)}}(f) = \frac{\prod_{j=1}^N \left(1 + \int_{\Delta_j} e^{f(x)} dx\right)}{(1+a^d)^N} =$$
$$= \prod_{j=1}^N \left(1 + \frac{1}{1+a^d} \int_{\Delta_j} (e^{f(x)} - 1) dx\right) =$$
$$= \exp\left[a^d \sum_{j=1}^N \log\left(1 + \frac{1}{1+a^d} \int_{\Delta_j} (e^{f(x)} - 1) dx\right)^{\frac{1}{a^d}}\right].$$

Якщо тепер a попрямує до нуля, а N – до безмежності так, щоб $Na^d = \sigma(\Lambda) = const$, отримаємо

$$\lim_{\substack{N\to\infty \\ a\to 0}} l_{\pi_\sigma^{(a;N)}}(f) \ = \ \exp\left[\int_\Lambda \left(e^{f(x)} - 1\right) dx\right],$$

тобто маємо перетворення Лапласа міри Пуассона.

Визначення міри Гіббса $\mu^{(a)}$ на $\widetilde{\Gamma}^{(a)}$ є таким самим, як визначення μ на Γ, тобто щільність умовної міри Гібса $\mu^{(a)}_{\overline{\Lambda}}(\cdot \mid \cdot)$ визначається аналогічно, але відносно міри $\lambda^{(a)}_{z\sigma}$. Іншими словами, похідні Радона–Нікодима від міри μ_Λ та $\mu^{(a)}_{\overline{\Lambda}}$ відносно $\lambda_{z\sigma}$ і $\lambda^{(a)}_{z\sigma}$ будуть однаковими. І нарешті, з огляду на формулу (6.4.37) велика статистична сума та кореляційні функції будуть визначатись тими самими формулами (6.3.24) і (6.3.23).

6.4.4. Ґратчаста апроксимація системи коміркового газу

Теореми 6.1.1 та 6.3.2 стверджують, що модель коміркового газу це квазінеперервна система, яка з будь-якою заздалегідь заданою точністю є наближенням звичайної неперервної системи з посилено надстійкою взаємодією. У цьому підрозділі покажемо, що можна визначити відповідну систему ґратчастого газу на $a\,\mathbb{Z}^d$ так, що їх кореляційні функції при $a \to 0$ збігаються в границі.

Введемо кусково-сталу функцію потенціалу взаємодії:

$$\phi_{\overline{\Delta}_a}(|x-y|) = \begin{cases} \phi(|x^c_\Delta - y^c_{\Delta'}|) := \phi_{\Delta\Delta'} \text{ для } x \in \Delta, y \in \Delta', \\ +\infty \text{ для } x, y \in \Delta \in \overline{\Delta}_a, \Delta \cap \Delta' = \emptyset, \end{cases} \tag{6.4.39}$$

де x^c_Δ означає координату центра гіперкубика Δ.

Лема 6.4.3. *Для будь-якого стійкого потенціалу взаємодії ϕ зі сталою B (див.* (2.1.3)*) потенціал взаємодії $\phi_{\overline{\Delta}_a}$ також стабільний з тією самою сталою B.*

Доведення наведене в праці [203].

■

Твердження 6.4.4. *Для довільних $x, y \in \mathbb{R}^d$ і $\overline{\Delta}_a$ таких, що $x \in \Delta$, $y \in \Delta'$ і $\Delta \cap \Delta' = \emptyset$*

$$\lim_{a\to 0} \phi_{\overline{\Delta}_a}(|x-y|) \ = \ \phi(|x-y|).$$

Доведення є тривіальним. Очевидним є також таке:

Твердження 6.4.5. *Система частинок коміркового газу, які взаємодіють за потенціалом* (6.4.39)*, перетворюється на модель ґратчастого газу.*

Доведення. Запишемо велику статистичну суму моделі коміркового газу для енергії взаємодії

$$U_{\overline{\Delta}_a}(\widetilde{\gamma}) \ = \sum_{1\le i<j\le k} \phi_{\overline{\Delta}_a}(|x_i - x_j|)$$

конфігурації $\widetilde{\gamma} = \{x_1, \ldots, x_k\}$ у такому вигляді:

$$\Xi^{LG}_{\overline{\Lambda}}(\beta, z, a) = \int_{\widetilde{\Gamma}^{(a)}_{\overline{\Lambda}}} e^{-\beta U_{\overline{\Delta}_a}(\widetilde{\gamma})} \lambda^{(a)}_{z\sigma}(d\widetilde{\gamma}). \tag{6.4.40}$$

Якщо N_Λ– це кількість гіперкубиків у $\overline{\Lambda}$, то з визначення $\lambda^{(a)}_{z\sigma}$

маємо

$$\Xi_{\overline{\Lambda}}^{LG}(\beta, z, a) \ = \ \sum_{k=0}^{N_\Lambda} z^k \sum_{\{\Delta_1,\ldots,\Delta_k\}\subseteq\overline{\Lambda}_N} \int_{\Delta_1} dx_1 \cdots \int_{\Delta_k} dx_k e^{-\beta U_{\overline{\Delta}_a}(\widetilde{\gamma})} =$$

$$= \sum_{\substack{n_1,\ldots,n_{N_\Lambda}:\\ n_j\in\{0,1\}}} z^{n_1+\cdots+n_{N_\Lambda}} \int_{\Delta_1(n_1)} dx_1 \cdots \int_{\Delta_{N_\Lambda}(n_\Lambda)} dx_{N_\Lambda} e^{-\beta\sum_{i,j=1}^{k} n_i\phi_{\Delta_i\Delta_j}n_j},$$

де $\phi_{\Delta_i\Delta_j}$ визначено в (6.4.39),

$$\Delta_j(n_j) \ = \ \begin{cases} \emptyset & \text{для } \ n_j \ = \ 0, \\ \Delta_j & \text{для } \ n_j \ = \ 1, \end{cases}$$

а

$$\int_{\Delta_j(n_j)} dx_j \ = \ a^{n_j d}, \ \ j = \overline{1, N_\Lambda}. \qquad (6.4.41)$$

Оскільки потенціал взаємодії є кусково-сталою функцією, то всі інтеграли можна розрахувати за формулою (6.4.41), а саме:

$$\Xi_{\overline{\Lambda}}^{LG}(\beta, z, a) = \sum_{n_1,\ldots,n_{N_\Lambda}:n_j\in\{0,1\}} z_a^{n_1+\cdots+n_{N_\Lambda}} e^{-\beta\sum\limits_{1\le i<j\le k} n_i\phi_{\Delta_i\Delta_j}n_j},$$

де $z_a \ := za^d$ або в термінах вузлів $j\in a\,\mathbb{Z}^d$ для $\widetilde{\Lambda}\Subset a\,\mathbb{Z}^d$:

$$\Xi_{\overline{\Lambda}}^{LG}(\beta, z, a) \ = \ \sum_{n_j\in\{0,1\},j\in\widetilde{\Lambda}} \prod_{j\in\widetilde{\Lambda}} z_a^{n_j} e^{-\beta\sum\limits_{\{i,j\}\subset\widetilde{\Lambda}} n_i\phi_{\Delta_i\Delta_j}n_j} =$$

$$= \sum_{n_j\in\{0,1\},j\in\widetilde{\Lambda}} e^{-\beta\sum\limits_{\{i,j\}\subset\widetilde{\Lambda}} n_i\phi_{\Delta_i\Delta_j}n_j+\mu_a\sum\limits_{j\in\widetilde{\Lambda}} n_j},$$

де $\mu_a = \log z_a$ – хімічний потенціал.

Сім'ю кореляційних функцій можна записати, підставляючи у рівняння (6.3.23) і (6.3.24) потенціал взаємодії $\phi_{\overline{\Delta}_a}$ замість потенційного ϕ, так:

$$\rho_{\overline{\Lambda}}^{LG}(\widetilde{\eta}; \beta, z, a) = \frac{z^{|\widetilde{\eta}|}}{\Xi_{\overline{\Lambda}}^{LG}(\beta, z, a)} \int_{\widetilde{\Gamma}_{\overline{\Lambda}}^{(a)}} e^{-\beta U_{\overline{\Delta}_a}(\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma})} \lambda_{z\sigma}^{(a)}(d\widetilde{\gamma}),$$

яке також можна виразити через змінні ґратчастого газу:

$$\rho^{LG}_{\overline{\Lambda}}(\widetilde{\eta};\beta,z,a)=\frac{z^{|\widetilde{\eta}|}}{\Xi^{LG}_{\overline{\Lambda}}(\beta,z,a)}\sum_{n_j\in\{0,1\}}e^{-\beta\sum\limits_{\{i,j\}\subset\widetilde{\Lambda}}n_i\phi_{\Delta_i\Delta_j}n_j+\mu_a\sum\limits_{j\in\widetilde{\Lambda}\setminus\widetilde{\eta}}n_j}, \tag{6.4.42}$$

де $\widetilde{\eta}=\{i_1,...,i_{|\widetilde{\eta}|}\}\subset\widetilde{\Lambda}$ і $n_{i_1}=\cdots=n_{i_{|\widetilde{\eta}|}}=1$ у сумі експоненти правої частини рівняння (6.4.42).

■

Покажемо, що для $\Lambda\in\mathcal{B}_c(\overline{\Delta}_a)$ статсуми ґратчастого газу та комірковаго газу збігаються в границі $a\to 0$.

Лема 6.4.6. *Для довільного* $\overline{\Lambda}\in\mathcal{B}_c(\overline{\Delta}_a)$*, довільних додатних значень* β,z *і довільної конфігурації* $\widetilde{\eta}\in\widetilde{\Gamma}^{(a)}_{\overline{\Lambda}}$

$$\lim_{a\to 0}|\Xi^{LG}_{\overline{\Lambda}}(\beta,z,a)\ -\ \Xi^{(a)}_{\overline{\Lambda}}(\beta,z)|\ =\ 0, \tag{6.4.43}$$

$$\lim_{a\to 0}|\rho^{LG}_{\overline{\Lambda}}(\widetilde{\eta};\beta,z,a)\ -\ \rho^{a}_{\overline{\Lambda}}(\widetilde{\eta};\beta,z)|\ =\ 0. \tag{6.4.44}$$

Доведення. Почнемо, наприклад, з рівняння (6.4.43). Використовуючи представлення (6.3.24), (6.4.40) та (6.4.37), запишемо

$$\Xi^{LG}_{\overline{\Lambda}}(\beta,z,a)-\Xi^{(a)}_{\overline{\Lambda}}(\beta,z)=\int_{\widetilde{\Gamma}^{(a)}_{\overline{\Lambda}}}\left(e^{-\beta U_{\overline{\Delta}_a}(\widetilde{\gamma})}\ -\ e^{-\beta U(\widetilde{\gamma})}\right)\lambda^{(a)}_{z\sigma}(d\widetilde{\gamma})=$$
$$=\int_{\Gamma_\Lambda}\left(e^{-\beta U_{\overline{\Delta}_a}(\gamma)}\ -\ e^{-\beta U(\gamma)}\right)\prod_{\Delta\in\overline{\Delta}_a}\chi^{\Delta}_{-}(\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma). \tag{6.4.45}$$

Тепер доведення випливає із властивості стійкості взаємодій $U_{\overline{\Delta}_a}$ та U, нерівності $\chi^{\Delta}_{-}\leq 1$, твердження 6.4.4 та теореми про мажорантну збіжність. Доведення рівняння (6.4.44) таке саме.

■

Очевидно, що сім'я кореляційних функцій $\rho^{LG}_{\overline{\Lambda}}(\widetilde{\eta};\beta,z,a)$ задовольняє нерівності (6.3.25) й існують граничні функції в сенсі (6.3.26). Далі, використовуючи ті самі аргументи, що і в підрозд. 6.3, можна сформулювати аналог теореми 6.3.2 для функції $\rho^{LG}(\widetilde{\eta};\beta,z,a)$.

6.5. Висновок

Таким чином, використовуючи теореми 6.1.1 та 6.3.2 для систем, в яких взаємодія задовольняє припущення **(A)**, середні значення фізичних спостережуваних величин та термодинамічні функції неперервних класичних систем з будь-якою попередньо заданою точністю можна наблизити відповідними значеннями моделі коміркового газу. Наступним кроком є апроксимація взаємодії потенціалом (6.4.39), яка перетворює неперервну систему на ґратчасту на $a\,\mathbb{Z}^d$. Основна мета подальших досліджень полягає у встановленні результатів, отриманих в працях [2] і [79] для систем на ґратці $\mathbb{Z}^d$.

Розділ 7

Системи заряджених частинок

7.1. Основи статистичного опису кулонівських систем

Системи заряджених частинок є надзвичайно важливим об'єктом з точки зору фізики. Але спроби застосувати стандартні математичні методи, описані в попередніх розділах, наштовхуються на нестандартні математичні проблеми. Передусім це пов'язано з дальнодіючим характером кулонівської взаємодії та проблемою нестійкості кулонівських систем (див. (2.1.3)). Проте унаслідок великого радіуса взаємодії виникла гіпотеза, що система заряджених частинок виявляє колективну поведінку, результатом якої є ефект екранування кулонівських взаємодій. Початком теоретичного дослідження колективних явищ у системах заряджених частинок прийнято вважати працю Дебая–Хюккеля [77], в якій автори обґрунтували гіпотезу про екранування міжіонних взаємодій та отримали порівняно задовільну теорію розчинів слабких електролітів (див., наприклад, [25, розд. 9к]). Застосування методів статистичної механіки в теорії кулонівських систем пов'язане з виходом монографії Боголюбова [3] (див. також [4]), в якій вперше запропоновано систему рівнянь для кореляційних функцій та отримано розв'язок у вигляді ряду за степенями плазмового параметра, а результат Дебая–Хюккеля було отримано з перших принципів статистичної фізики.

Багато праць присвячено питанням стійкості кулонівських систем та доведенню існування термодинамічної границі. (Див., наприклад, [88–90, 98, 130, 166, 168, 169, 171, 179, 182].)

Справжнім прогресом у дослідженні систем заряджених частинок стало відкриття тісного зв'язку між модельними системами квантової теорії поля та статистичною механікою. У різних аспектах цей зв'язок обговорювався в [39, 51, 88, 91, 99, 102, 191, 217]. Введення в статистичну механіку евклідових полів (див. [127]) та застосування перетворення синус-Ґордона (sine-Gordon) [44, 87] дало можливість застосувати для дослідження кулонівських систем методи кластерних розкладів і контурну техніку [104, 119, 186], що у свою чергу дало змогу Бріджесу [68] вперше строго обґрунтувати існування дебаївського екранування в ґратчастій системі кулонівського газу. Незабаром Бріджес і Федербуш довели аналогічний результат для неперервних кулонівських систем [71]. Методи, розвинені в [68, 71], були узагальнені на випадок інших систем з електростатичною взаємодією. Зокрема, у праці [133] розглядалася система типу "желе", коли заряди виділеного сорту частинок $e_s \to 0$, а їх активності $z_s \to \infty$ так, що $e_s z_s$ було фіксованим. У [38, 197] результати праці [71] були перенесені на систему йонів та диполів для специфічного виду потенціалу короткодіючих сил. Було доведено, що у присутності йонів екрануються також диполь-дипольні взаємодії. Цей результат цікавий у зв'язку з працею Парка [183], в якій строго встановлено відсутність екранування в системі чисто дипольних частинок. У [142] розглядалося питання про граничний перехід до теорії Дебая–Хюккеля. У низці праць [92, 138, 139, 192, 193, 218] обговорювалися питання, пов'язані зі впливом різних поверхонь на ефект дебаївського екранування.

У цьому розділі розглядаються математичні засади сучасного підходу до теорії рівноважних класичних систем заряджених частинок у просторі $\mathbb{R}^3$, викладені в оригінальних працях [39, 68, 71, 166, 197, 198]. Читач, який цікавиться різними фізичними аспектами теорії кулонівських систем, може звернутися до праць [59, 169].

7.1.1. Проблема стійкості систем з електростатичними взаємодіями

У разі класичного опису потрібно вводити додаткову взаємодію на близьких відстанях між частинками (короткодіючі сили). Мабуть, вперше це питання обговорювалося в праці [179]. Для точкових частинок, що взаємодіють за допомогою кулонівського потенціалу, умову (2.1.3) буде порушено, бо енергія взаємодії двох протилежно заряджених частинок, що знаходяться нескінченно близько одна від одної, дорівнюватиме $-\infty$. Щоб подолати ці труднощі, в [179] запропонували розглядати заряджені частинки як абсолютно пружні кульки радіуса a_i з рівномірною щільністю заряду на поверхні. Надалі проблема стійкості класичних і квантових систем обговорювалася в різних аспектах багатьма авторами. Повний список праць читач може знайти в [59, 168].

Нехай система складається з M сортів іонів $e_i, i \in \{1, \ldots, M\}$. Тут наведемо доведення нерівності (2.1.3) для такої системи, яка містить N іонів зі значеннями зарядів $q_i, i \in \{1, \ldots, N\}$. Кожна частинка являє собою сферу радіуса a_i з постійною щільністю заряду на поверхні. Сформулюємо результат у вигляді теореми.

Теорема 7.1.1. *Якщо система складається з N рівномірно заряджених твердих сфер радіусів a_i і зарядів q_i з координатами центрів $x_i \in \mathbb{R}^3$, $i \in \{1, \ldots, N\}$, то*

$$\sum_{1 \le i < j \le N} \frac{q_i q_j}{4\pi |x_i - x_j|} \ge -BN, \quad B = \max_{i \in \{1, \ldots, N\}} \frac{q_i^2}{8\pi a_i}. \tag{7.1.1}$$

Доведення. Потенціал, що утворює деяке заряджене тіло з поверхнею S_i, визначається інтегралом:

$$\phi_i(x) = \int_{S_i} \frac{\sigma_i(y)}{4\pi |x - y|} ds_y,$$

де поверхнева густина заряду $\sigma_i(y) = \frac{q_i}{4\pi a_i^2}$. Тоді потенціал, що утворюють N сфер, визначається за формулою

$$\phi(x) = \sum_{i=1}^{N} \frac{q_i}{4\pi a_i^2} \int_{S_i} \frac{1}{4\pi |x - y|} ds_y.$$

Повну енергію електростатичного поля визначають так:

$$W = \frac{1}{8\pi}\int_{\mathbb{R}^3} dx|\nabla^0\phi(x)|^2 = \frac{1}{8\pi}\int_{\mathbb{R}^3} dx\phi(x)(-\Delta_0\phi(x) \geq 0.$$

З огляду на співвідношення

$$-\Delta_0\frac{1}{4\pi|x-y|} = \delta(x-y), \;\; x,y \in \mathbb{R}^3$$

маємо

$$-\Delta_0\phi(x) = \sum_{i=1}^{N}\frac{q_i}{4\pi a_i^2}\int_{S_i}\delta(x-y)ds_y$$

і

$$W = \frac{1}{32\pi^2}\sum_{i,j=1}^{N} q_iq_j\int_{S_i}\frac{ds_{y'}}{4\pi a_i^2}\int_{S_j}\frac{ds_y}{4\pi a_j^2}\frac{1}{|y'-y|}. \tag{7.1.2}$$

Розрахувавши інтеграли в правій частині (7.1.2) для різних сфер $(i \neq j)$ таких, що $S_i \cap S_j = \emptyset$, і для однієї кулі $(i = j)$, отримаємо нерівність

$$W = \frac{1}{32\pi^2}\sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^{N}\frac{q_iq_j}{|x_i-x_j|} + \frac{1}{32\pi^2}\sum_{i=1}^{N}\frac{q_i^2}{a_i} \geq 0,$$

з якої випливає (7.1.1) ■

Зауваження 7.1. *Аналогічну нерівність легко довести і для змішаної системи йонів і диполів, потенціал парної взаємодії якої між будь-якими двома частинками можна подати у формі, що узагальнює звичайну кулонівську взаємодію:*

$$\phi_{ij}(x,y) = Q_i(\nabla_x^0)Q_j(\nabla_y^0)\frac{1}{4\pi|x-y|} + \phi_{ij}^s(x,y),$$

де ϕ_{ij}^s *— енергія короткодіючих сил, що містить потенціал твердих сфер, а* $Q_i(\nabla_x^0)$ *— узагальнені операторнозначні заряди:*

$$Q_i(\nabla^0) := \begin{cases} q_i & \text{для іонів,} \\ (\mathbf{m_i}\cdot\nabla^\mathbf{0}) & \text{для диполів.} \end{cases}$$

7.1.2. Математичні особливості опису кулонівських систем у термодинамічній границі

Отже, розглянемо багатосортну систему заряджених частинок із зарядами e_i $(i = 1, ..., M)$, розташовану в посудині $\Lambda \subset \mathbb{R}^3$ за фіксованої температури T. Для простоти вважатимемо, що частинки розташовані у вакуумі і є досить простими, щоб можна було знехтувати внутрішніми ступенями вільності, а взаємодія двох ізольованих частинок, розташованих далеко від межі посудини $\partial\Lambda$, визначається кулонівським потенціалом, тобто енергія взаємодії між двома зарядженими частинками має вигляд

$$U_{i_l,i_2}(x_1,x_2) = \Phi^{(c)}_{i_l,i_2}(x_1,x_2) = \frac{e_{i_1}e_{i_2}}{4\pi|x_1-x_2|}, \tag{7.1.3}$$

та певними граничними співвідношеннями на межі $\partial\Lambda$ області Λ.

Наявність межі змінює вигляд потенціалу (7.1.3) поблизу $\partial\Lambda$. Ці зміни залежать від матеріалу, з якого зроблено посудину, і можуть бути враховані відповідним вибором граничних умов, які визначимо пізніше.

Відповідно до формалізму великого канонічного ансамблю всю термодинаміку системи можна описати за допомогою великої статистичної суми (див. [25, розд. 8]):

$$\Xi_\Lambda \;=\; \left(\prod_{i=1}^{M}\int_{\overline{\Gamma}_\Lambda} \lambda_{z_i\sigma}(d\overline{\gamma})\right) e^{-\beta U(\overline{\gamma})},$$

де $U(\overline{\gamma})$ включає в себе взаємодію n_1 частинок 1-го сорту, n_2 частинок 2-го сорту,..., n_M частинок M-го сорту. Використовуючи формулу пересумування, вираз (7.1.2.) зручно записати так:

$$\Xi_\Lambda \;=\; \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\sum_{i=1}^{M} z_i\right)^n \int_{\Lambda^n}(dx)^n e^{-\beta U(\widetilde{\gamma})},$$

де конфігурація $\widetilde{\gamma}$ — так звана маркована конфігурація (див. розд. I):

$$\widetilde{\gamma} = \{(x_1,i_1),\ldots,(x_n,i_n)\},$$

вираз для енергії якої має вигляд

$$U(\widetilde{\gamma}) = \sum_{1\le j\le k\le n} \Phi^{(c)}_{i_j,i_k}(x_j, x_k) = \sum_{\substack{\widetilde{\eta}\subseteq\widetilde{\gamma}\\ |\widetilde{\eta}|=2}} \Phi^{(c)}(\widetilde{\eta}),$$

а кореляційні функції

$$\rho^{\Lambda}(\widetilde{\eta}) \;=\; \frac{z_{i_1}\cdots z_{i_m}}{\Xi_\Lambda}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\sum_{i_{m+1},\dots,i_{m+n}} z_{i_{m+1}}\dots z_{i_{m+n}}\right)\times$$
$$\times\int_{\Lambda^n}(dy)^n e^{-\beta U(\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma})}, \quad (7.1.4)$$

де конфігурації

$$\widetilde{\eta} = \{(x_1, i_1), \dots, (x_m, i_m)\},\ \widetilde{\gamma} = \{(y_1, i_{m+1}), \dots, (y_n, i_{m+n})\}.$$

Термодинамічну границю для великого канонічного ансамблю визначають як границю $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^3$ за фіксованої густини

$$\rho = \lim_{\Lambda\to\mathbb{R}^3}\frac{< N >_\Lambda}{\sigma(\Lambda)},$$

де $< N >_\Lambda$ — середня кількість частинок в Λ.

Густина та тиск є функціями температури T і хімічних потенціалів μ_i і визначають рівняння стану системи. Таким чином, у термодинамічній границі природно очікувати існування граничних значень густини та тиску, а також граничних кореляційних функцій, через які можна записати інші важливі фізичні характеристики.

Для систем з досить швидко спадним потенціалом побудова граничних значень для ρ і P здійснюється методами, які описано вище. Для цього потенціал парних взаємодій повинен задовольняти такі дві умови: 1) умову регулярності (2.2.11); 2) умову стійкості (2.1.3).

Неважко помітити, що потенціал кулонівської взаємодії (7.1.3) не задовольняє ці умови. Отже, традиційні майєрівські розкладання будуть розбіжними. Порушення цих умов пов’язане з дальнодіючим характером кулонівських взаємодій та з сингулярною поведінкою потенціалу на початку координат (тобто при $|x| = 0$). Перша складність усувається за допомогою гіпотези Дебая, яка стверджує, що дві заряджені частинки, що знаходяться в оточенні інших заряджених частинок, взаємодіють ефективним потенціалом юкавського типу:

$$\Phi^{(eff)}_{i_l,i_2}(x_1,x_2) \simeq \frac{\exp\left[-\frac{1}{l_D}|x_1-x_2|\right]}{4\pi|x_1-x_2|},$$

де $l_D = (e^2\beta z)^{-1/2}$ — дебаївська кореляційна довжина в разі однакової активності z усіх частинок.

Завдання полягає в тому, щоб знайти адекватний математичний апарат для підтвердження цієї гіпотези та побудови розкладів, що збігаються для кореляційних функцій, густини ρ і тиску P. Обговоренню цих проблем присвячено цей розділ. Питання стійкості кулонівських систем вирішується в рамках квантових систем ([86, 89, 90, 166, 168]). У разі класичного опису потрібно вводити додаткову взаємодію на близьких відстанях між частинками (короткодіючі сили) [179]. Цьому питанню буде присвячено наступний підрозділ.

На завершення сформулюємо завдання термодинамічного граничного переходу для систем, що розглядаються. Особливість цього переходу полягає в тому, що його необхідно здійснити спочатку за короткодіючими силами, а потім за кулонівськими. Технічно це здійснюється в такий спосіб. Нехай об'єм Λ' включає в себе об'єм Λ, в якому частинки взаємодіють за допомогою кулонівського потенціалу, модифікованого поблизу межі $\partial\Lambda$. Потенціал короткодіючих сил $\Phi^{(s)}(x,y)$ модифікуємо в об'ємі Λ' так:

$$\Phi^{(s)}_{i_l,i_2}(x_1,x_2;\Lambda') = 1\!\!1_{\Lambda'}(x_1)\Phi^{(s)}_{i_l,i_2}(x_1,x_2)1\!\!1_{\Lambda'}(x_2).$$

Отже, частинки, що знаходяться в об'ємі Λ, будуть взаємодіяти за допомогою парного потенціалу:

$$\Phi_{i_l,i_2}(x_1,x_2;\Lambda,\Lambda') = \Phi^{(c)}_{i_l,i_2}(x_1,x_2;\Lambda) + \Phi^{(s)}_{i_l,i_2}(x_1,x_2;\Lambda'), \qquad (7.1.5)$$

а в об'ємі $\Lambda' \setminus \Lambda$ — за допомогою потенціалу $\Phi^{(s)}_{i_l,i_2}(x_1,x_2;\Lambda')$. Визначимо тепер велику статистичну суму $\Xi_{\Lambda,\Lambda'}$ і кореляційні функції $\rho^{\Lambda,\Lambda'}(\widetilde{\eta})$ за допомогою формул (7.1.2.) і (7.1.4) з потенціалом $\Phi_{i_l,i_2}(x_1,x_2;\Lambda,\Lambda')$ замість потенціалу $\Phi^{(c)}_{i_l,i_2}(x_1,x_2;\Lambda)$. Основне завдання граничного термодинамічного переходу формулюється таким чином. Нехай $\Xi_{0,\Lambda'}$ — велика статистична сума, побудована лише за короткодіючим потенціалом $\Phi^{(s)}_{i_l,i_2}(x_1,x_2;\Lambda,\Lambda')$. Нехай $A(\widetilde{\eta})$ — довільна обмежена функція з компактним носієм і

$$< A >_{\Lambda,\Lambda'} = \sum_{i_1,\ldots,i_m} \int_{\mathbb{R}^{\nVdash >}} (dx)^m A_{(i)_m}(x)_m \rho^{\Lambda,\Lambda'}_{(i)_m}((x)_m), \qquad (7.1.6)$$

де $(a)_m := a_1,...,a_m$. Необхідно довести існування та єдиність таких граничних переходів:

$$\Xi_\Lambda = \lim_{\Lambda'\to\mathbb{R}^3} \frac{\Xi_{\Lambda,\Lambda'}}{\Xi_{0,\Lambda'}},$$

$$< A >_\Lambda = \lim_{\Lambda'\to\mathbb{R}^3} < A >_{\Lambda,\Lambda'},$$

$$< A > = \lim_{\Lambda\to\mathbb{R}^3} < A >_\Lambda \, . \qquad (7.1.7)$$

Введення двох об'ємів Λ, Λ' і поетапний перехід до термодинамічної границі не тільки пов'язані з математичними конструкціями, за допомогою яких здійснюється цей перехід, а й призводить до правильних фізичних наслідків. Відповідні аргументи наведено в праці [132].

7.2. Граничний перехід $\Lambda' \uparrow \mathbb{R}^3$

7.2.1. Представлення гауссовими інтегралами

Позначимо коваріацію, що відповідає кулонівському потенціалу:

$$u_0(x_1,x_2) = \frac{1}{4\pi|x_1-x_2|} = (-\Delta_0)^{-1}(x_1-x_2), \qquad (7.2.8)$$

де Δ_0 — оператор Лапласа в $\mathbb{R}^3$. Виберемо на межі $\partial\Lambda$ нульові умови Діріхле. Фізично це означає, що посудина Λ є металевою. Енергія електростатичної взаємодії двох ізольованих частинок у такій посудині матиме вигляд

$$U^{c,\Lambda}_{i_l,i_2}(x_1,x_2) = e_{i_1}e_{i_2}u^{\Lambda}_0(x_1,x_2) = (-\Delta)^{-1}(x_1,x_2), \tag{7.2.9}$$

де Δ — оператор Лапласа з граничними умовами Діріхле на $\partial\Lambda$.

Неважко помітити, що і для (7.2.8), і для (7.2.9) не виконується умова (1.4.55), тому не можна безпосередньо застосувати формулу (1.4.56) для гіббсової експоненти, що відповідає кулонівському потенціалу. Дотримуючись праці [71], введемо деяку проміжну регуляризацію:

$$u_\lambda(x_1,x_2) = \frac{1-\exp\left[-\frac{1}{\lambda l_D}|x_1-x_2|\right]}{4\pi|x_1-x_2|},$$

де λ — безрозмірний параметр регуляризації. Відповідно, враховуючи умови Діріхле, маємо

$$u^{\Lambda}_{\lambda} = (-\Delta)^{-1} - \left(-\Delta + \frac{1}{\lambda^2 l_D^2}\right)^{-1}. \tag{7.2.10}$$

Відповідний короткодіючий потенціал

$$\Phi^{(s,\lambda)}_{i_l,i_2}(x_1,x_2;\Lambda') = \Phi^{(s)}_{i_l,i_2}(x_1,x_2;\Lambda') + \\ + e_{i_1}e_{i_2}\mathbb{1}_{\Lambda'}(x_1)\frac{\exp\left[-\frac{1}{\lambda l_D}|x_1-x_2|\right]}{4\pi|x_1-x_2|}\mathbb{1}_{\Lambda'}(x_2). \tag{7.2.11}$$

Тоді повний регуляризований потенціал

$$\Phi^{(\lambda)}_{i_l,i_2}(x_1,x_2;\Lambda,\Lambda') = e_{i_1}e_{i_2}u^{\Lambda}_{\lambda}(x_1,x_2) + \Phi^{(s,\lambda)}_{i_l,i_2}(x_1,x_2;\Lambda') \tag{7.2.12}$$

разом з (7.1.5) будуть поточково прямувати при $\Lambda' \uparrow \mathbb{R}^3$ і $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^3$ до того самого виразу.

Враховуючи тепер те, що поточкова границя $\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^3} u^{\Lambda}_{\lambda}(x,y) = u_\lambda(x,y)$, для якої $u_\lambda(x,x) = (4\pi\lambda l_D)^{-1} < +\infty$, зрозуміло, що і $u_\lambda^\Lambda(x,x) < +\infty$. Тому можна записати для експоненти $\exp[-\frac{1}{2}\beta\sum_{j,k=1}^n e_{i_j}e_{i_k}u_\lambda^\Lambda(x_j,x_k)]$ формулу (1.4.56). Тоді отримаємо вирази для великої статистичної суми і кореляційних функцій:

$$\Xi_{\Lambda,\Lambda'} = \int d\mu(\varphi)\Xi_{\Lambda'}^{(s,\lambda)}(\varphi), \tag{7.2.13}$$

$$\rho_{(i)_m}^{\Lambda,\Lambda'}(x)_m = \int d\mu(\varphi)\rho_{(i)_m}^{(s,\lambda)}((x)_m;\varphi,\Lambda')\frac{\Xi_{\Lambda'}^{(s,\lambda)}(\varphi)}{\Xi_{\Lambda,\Lambda'}}, \tag{7.2.14}$$

а $\Xi_{\Lambda'}^{(s,\lambda)}(\varphi)$ і $\rho_{(i)_m}^{(s,\lambda)}((x)_m;\varphi,\Lambda')$ визначаються формулами (7.1.2.) і (7.1.4) з

$$U_{(i)_n}(x)_n = U_{(i)_n}^{(s,\lambda)}(x)_n + \frac{1}{i\beta^{1/2}}\sum_{k=1}^n e_{i_k}\varphi(x_k)$$

та

$$\widetilde{z}_i(x) = z_i e^{\frac{\beta}{2}e_i^2 u_\lambda^\Lambda(x,x)}.$$

Отже, тепер основні термодинамічні величини: статистична сума і кореляційні функції записані у вигляді (7.2.13)–(7.2.14), в якому вони є інтегралами від таких самих об'єктів. Ці нові об'єкти описують таку саму систему, яка знаходиться в обмеженому об'ємі Λ', але взаємодія частинок системи така, що всередині деякого $\Lambda \subset \Lambda'$ її описують потенціалом $\Phi_{i_l,i_2}^{(s,\lambda)}(x_1,x_2;\Lambda')$ і деяким випадковим полем φ, яке зникає зовні Λ. Це дає змогу застосувати для побудови термодинамічної границі $\Lambda' \uparrow \mathbb{R}^3$ математичні методи, які висвітлено в попередніх розділах.

7.2.2. Побудова майєрівських розкладів

Щоб скоротити викладення, введемо допоміжний функціонал

$$F^{\Lambda'}(y;j) = \sum_{N=0}^{\infty} y^N F_N^{\Lambda'}(j),\ 0 \le y \le 1,\ j = (j_i)_{i=1}^{i=M},\ 0 \le j_i(x) \le 1,$$

$$F_N^{\Lambda'}(j) = \frac{1}{N!}\int_{\Lambda'^N}(dx)^N\left(\sum_{i=1}^{M}\widetilde{z}_i\right)^N \times$$
$$\times \prod_{k=1}^{N} j_{i_k}(x_k) e^{-\beta U_{(i)_N}^{(s,\lambda)}(x)_N} e^{i\beta^{1/2}\sum_{k=1}^{N} e_{i_k}\varphi(x_k)}.$$

Тоді

$$\Xi_{\Lambda'}^{(s,\lambda)}(\varphi) \;=\; F^{\Lambda'}(1;1),$$
$$\rho_{(i)_m}^{(s,\lambda)}((x)_m;\varphi,\Lambda') = \Xi_{\Lambda'}^{-1}(\varphi)\frac{\delta^m F(1;j)}{\delta j_{i_1}(x_1)\cdots\delta j_{i_m}(x_m)}|_{j=1}. \qquad (7.2.15)$$

Потенціальна енергія (7.2.11) має дві частини. Першу частину — $\Phi_{i_l,i_2}^{(s)}(x_1,x_2;\Lambda') := w_{i_l,i_2}(x)$ — вибираємо додатною й такою, що включає в себе потенціал абсолютно твердих кульок радіусом a, а друга частина $v_{i_l,i_2}(x)$ є інтегровною й такою, що задовольняє умову стійкості.

Використовуючи техніку, детально описану в підрозд. 3.3.8,отримуємо, що (див. детальніше в [39, 198])

$$F^{\Lambda'}(1;j) = \exp\left[\sum_{n=1}^{\infty} K_n^{\Lambda'}(j;\varphi)\right] := \exp\left[\widetilde{F}(j)\right], \qquad (7.2.16)$$

$$K_n^{\Lambda'}(j;\varphi) = \frac{1}{n}\sum_{(i)_n}\int_{\Lambda'^n}(dx)^n\prod_{k=1}^{n} j_{i_k}(x_k)e^{i\beta^{1/2}\sum_{k=1}^{N} e_{i_k}\varphi(x_k)} J_{(i)_n}(x)_n,$$

$$J_{(i)_n}(x)_n = \sum_{\eta_T} J_{(i)_n}^{(\eta_T)}(x)_n,$$

$$J_{(i)_n}^{(\eta_T)}(x)_n \;=\; (-\beta)^{n-1}\int_0^1 d\sigma_{n-1}\prod_{k=2}^{n-1} s_{k-1}\cdots s_{\eta_T(k+1)} \times$$
$$\times \prod_{k=2}^{n} v'_{i_k i_{\eta_T(k)}} e^{-\beta U(\sigma_{n-1})}, \; (7.2.17)$$

$$v'_{i_l i_k}(x) = v_{i_l i_k} - \frac{1}{\beta}\frac{u_{i_l i_k}}{1 + s_l\cdots s_{k-1}u_{i_l i_k}}, \; u_{lk}(x) = e^{-\beta w_{lk}(x)} - 1,$$

$$U(\sigma_{n-1}) = V(\sigma_{n-1}) + W(\sigma_{n-1}),$$

$$V(\sigma_{n-1}) = \sum_{1 \le l < k \le n} s_l \cdots, s_{k-1} v_{i_l i_k}(x_l - x_k),$$

$$W(\sigma_{n-1}) = -\frac{1}{\beta} \sum_{1 \le l < k \le n} \log(1 + s_l \cdots, s_{k-1} u_{i_l i_k}).$$

Ураховуючи (7.2.2.) і (7.2.15), маємо

$$\rho^{(s,\lambda)}_{(i)_m}((x)_m; \varphi, \Lambda') = \sum_{k=1}^{m} \sum_{m_1 + \cdots + m_k = m} \sum_{\pi_k} \widetilde{\rho}^{(s,\lambda)}_{(i_\pi)_{m_1}}((x_\pi)_{m_1}; \varphi, \Lambda')...$$
$$...\widetilde{\rho}^{(s,\lambda)}_{(i_\pi)_{m_k}}((x_\pi)_{m_k}; \varphi, \Lambda'),$$

$$\widetilde{\rho}^{(s,\lambda)}_{(i)_m}((x)_m; \varphi, \Lambda') =$$
$$= \sum_{\substack{n \ge m \\ (i)_{n-m}}} \frac{(\widetilde{z}_i)^n}{n} \sum_{\eta_T} \sum_{S^{(n)}_m} \int_{\Lambda'} (dx)^{n-m} e^{i\beta^{1/2} e_i \varphi(x)} J^{(\eta_T)}_{(i)_n}(x)_n, \quad (7.2.18)$$

де сума за π_k — це сума за всіма можливими розбиттями $x_1, \ldots, x_m$ на k підмножин, а сума за $S^{(n)}_m$ у (7.2.18) — це сума за різними перестановками змінних $x_1, ..., x_m$, яка виникає внаслідок застосування варіаційних похідних (див. (7.2.15)) до експоненти (7.2.16).

Щоб краще зрозуміти граничний перехід $\Lambda' \uparrow \mathbb{R}^3$, перейдемо до змінних
$$\varepsilon_i = e^{i\beta^{1/2} e_i \varphi(x)} - 1.$$

Тоді підставляючи ± 1 у добутки експонент, отримуємо вирази, в яких інтегрування за Λ' можна замінити інтегруванням за Λ, бо $\varphi(x) = 0$, якщо $x \in \Lambda^c$. Деталі доведення збіжності розкладів подано в [198]. Наведемо остаточні вирази для статистичної суми і кореляційних функцій після граничного переходу $\Lambda' \uparrow \mathbb{R}^3$:

$$\Xi_\Lambda = \int d\mu_0(\varphi) e^{\sum_i \rho_i \int \varepsilon_i(x) dx} e^{E(\varphi)}, \ \rho_i = \widetilde{\rho}_i(x), \qquad (7.2.19)$$

$$\rho^{\Lambda}_{(i)_m}(x)_m = \Xi_{\Lambda}^{-1}\int d\mu_0(\varphi)\rho^{(s,\lambda)}_{(i)_m}((x)_m;\varphi)e^{\sum_i \rho_i \int \varepsilon_i(x)dx}e^{E(\varphi)}, \tag{7.2.20}$$

де

$$E(\varphi) = \sum_{m=2}^{\infty}\frac{1}{m!}\sum_{(i)_m}\int (dx)^m \varepsilon_{i_1}(x_1)\cdots\varepsilon_{i_m}(x_m)\widetilde{\rho}^{\Lambda}_{(i)_m}((x)_m).$$

7.3. Перехід до екранованого потенціалу. Розклади Пайєрлса

Зробимо додаткові обмеження на систему, що розглядається. Насамперед дослідимо нейтральні системи, тобто такі, які задовольняють умову нейтральності:

$$\sum_{i=1}^{M}\rho_i e_i \;=\; 0. \tag{7.3.21}$$

Умова (7.3.21) надалі відіграватиме вирішальну роль у доведенні найважливіших технічних лем. Якщо система не задовольняє умову (7.3.21), то з погляду фізики слід очікувати на витіснення надлишків зарядів одного знака до поверхні $\partial\Lambda$ та в термодинамічній границі відновлення умови (7.3.21) з деяким новим "перенормованим" значенням щільності ρ_i' (див. міркування у праці [133]). Математично еквівалентною процедурою є комплексний зсув контуру інтегрування $\varphi \to \varphi + i\varphi_0$, що у свою чергу призводить до значного ускладнення доведення основних нерівностей (див. [92]). Головна мета виконаних у цьому підрозділі розкладів полягає в необхідності переходу в інтегралах (7.2.19)–(7.2.20) від коваріації $u_\lambda(x,y)$, що характеризує кулонівську взаємодію, до нової коваріації, яка враховує колективну взаємодію частинок, що описується потенціалом Дебая. Формально цей перехід можна здійснити, розкладаючи головний член

$$-S(\varphi) =: \sum_i \rho_i \int \varepsilon_i(x)dx = \sum_i \rho_i \int [\exp[i\beta^{1/2}e_i\varphi(x)] \;-\; 1]$$

у виразах (7.2.19)–(7.2.20) у ряд за φ. Тоді, враховуючи умову (7.3.21), яка забезпечує рівність нулю лінійного члена, а також вводячи нову кореляційну довжину за формулою

$$\widetilde{l}_D^{-2} = \sum_{i=1}^{M} \beta\rho_i e_i^2, \tag{7.3.22}$$

отримуємо, що

$$-S(\varphi) = -\frac{1}{2\widetilde{l}_D^2}\int \varphi^2(x)dx + \mathcal{O}(\beta/\widetilde{l}_D^2\varphi^3). \tag{7.3.23}$$

У виразах (7.2.19)–(7.2.20) можна ввести нову міру

$$Nd\mu(\varphi) = d\mu_0(\varphi)e^{-\frac{1}{2\widetilde{l}_D^2}\int\varphi^2(x)dx}, \tag{7.3.24}$$

де N — нормувальний множник. Неважко перевірити, що коваріація нової міри

$$C(x,y) = \int \varphi(x)\varphi(y)d\mu(\varphi) \tag{7.3.25}$$

задовольняє рівняння

$$C(x,y) = u_\lambda(x,y) - \frac{1}{\widetilde{l}_D^2}\int_\Lambda u_\lambda(x,z)C(z,y)dz. \tag{7.3.26}$$

У границі $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^3$ це рівняння легко розв'язати, а за відсутності регуляризації ($\lambda = 0$) воно збігається з дебаївським потенціалом (7.2.10). Отже, враховуючи тільки квадратний член розкладу (7.3.23), слід очікувати результатів Дебая–Хюккеля [77]. Інші члени розкладу повинні давати поправки до цієї теорії. Це питання досліджується в наступному підрозділі. Тут потрібно обґрунтувати перехід (7.3.24), використовуючи ідеї методу Пайєрлса. Умова (7.3.21) разом з вимогою кратності всіх зарядів, що розглядаються, забезпечує існування зліченного числа локальних мінімумів головного члена $\exp[-S(\varphi)]$. Це в свою чергу дає можливість розкласти його у околі таких мінімумів у ряд, використовуючи наближену формулу ($g >> 1$):

$$\exp[g^2(\cos x - 1)] \simeq \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp[-\frac{g^2}{2}(x - 2\pi n)^2].$$

Для цього зафіксуємо масштаб, вважаючи одиничною кореляційною довжиною довжину $\widetilde{l}_D$, що визначається формулою (7.3.22). Нехай Λ є об'єднанням одиничних кубиків. Введемо нове розбиття Λ на кубики Ω_α з ребрами L так, щоб кожен одиничний кубик містив ціле число L-кубиків, тобто $\frac{\widetilde{l}_D}{L}$ ціле. Нехай далі τ — найменший загальний період $\exp[i\beta^{1/2}e_i\varphi]$. Визначимо на розбитті Ω_α сім'ю функцій

$$h(x) = \tau n_\alpha,\ x \in \Omega_\alpha,\ n_\alpha \in \mathbb{Z}\,.$$

Ідея, яка використовується для побудови пайєрлсівського розкладу, фактично зводиться до застосування апроксимації (7.3.23) у кожному кубику Ω_α і записується у вигляді тотожності

$$\begin{aligned} e^{-S(\varphi)} &= e^G \prod_\alpha \left(\sum_{n_\alpha=-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2\widetilde{l}_D^2} \int_{\Omega_\alpha} dx(\varphi(x) - n_\alpha\tau)^2 \right] \right) = \\ &= \sum_h e^G \exp\left[-\frac{1}{2\widetilde{l}_D^2} \int dx(\varphi(x) - h(x))^2 \right]. \qquad (7.3.27) \end{aligned}$$

Експонента e^G характеризує відхилення від обраної апроксимації. Використовуючи (7.3.27), зручно виразити e^G через відхилення поля $\varphi(x)$ від їх середнього значення на кубиках Ω_α. Визначимо для цього таке відхилення формулою

$$\delta(x) := \varphi(x) - A,\ A = A_\alpha = \frac{1}{L^3} \int_{\Omega_\alpha} dx\varphi(x),\ \ x \in \Omega_\alpha. \qquad (7.3.28)$$

Тоді, використовуючи (7.3.21), (7.3.22) і рівність нулю інтеграла від флуктуації в кожному Ω_α, отримаємо

$$G = G_1 + G_2,\ e^{G_1} = \prod_\alpha r(A_\alpha),$$

$$r(A) = \frac{\exp\left[\sum_i \rho_i (e^{i\beta^{1/2} e_i A} \ - \ 1) L^3\right]}{\sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2\widetilde{l}_D^2}(A - n\tau)^2 L^3\right]},$$

$$G_2 = \sum_i \rho_i \int \left[e^{i\beta^{1/2} e_i \delta} - 1 - i\beta^{1/2} e_i \delta + \frac{1}{2}\beta e_i^2 \delta^2\right] +$$

$$+ \sum_i \rho_i \int \left[e^{i\beta^{1/2} e_i A} - 1\right] \left[e^{i\beta^{1/2} e_i \delta} - 1 - i\beta^{1/2} e_i \delta\right]. \quad (7.3.29)$$

Враховуючи (7.3.27), запишемо (7.2.20) в такому вигляді ($\widetilde{l}_D = 1$):

$$\rho^{\Lambda}_{(i)_m}(x)_m = \Xi_{\Lambda}^{-1} \sum_h \int d\mu_0(\varphi) \rho^{(s,\lambda)}_{(i)_m}((x)_m; \varphi) e^{-\frac{1}{2\widetilde{l}_D^2} \int dx (\varphi - h)^2} e^G e^{E(\varphi)}. \quad (7.3.30)$$

У (7.3.30) переставлено місцями інтегрування за $d\mu_0(\varphi)$ і суму за h у припущенні збіжності розкладів, яка встановлена в праці [71]. Тепер у (7.3.30) можна перейти до нової коваріації $C(x, y)$ згідно з формулами (7.3.24), (7.3.25), виділивши в експоненті виразу (7.3.30) квадратичний за φ член. Однак під інтегралом залишиться член $\exp[\int dx h(x) \varphi(x)]$, який лінійний за φ і набуває як завгодно великих значень. Щоб зменшити вплив цього члена в інтегралі (7.3.30), здійснимо зсув поля φ на деяку функцію $g(x) = g(x; h)$, вибір якої буде зроблено нижче. Після заміни (див., наприклад, [8, ч. II, підрозд. 9.1], [1, підрозд. 2. 4])

$$\varphi(x) = \psi(x) + g(x) \quad (7.3.31)$$

і переходу до нової міри (7.3.30) остаточний вираз для ρ^{Λ} матиме вигляд

$$\rho^{\Lambda}_{(i)_m}(x)_m = \Xi_{\Lambda}^{-1} \sum_h N \int d\mu(\psi) \rho^{(s,\lambda)}_{(i)_m}((x)_m; \varphi) e^R e^G e^{E(\varphi)}, \quad (7.3.32)$$

$$\Xi_{\Lambda} = \sum_h N \int d\mu(\psi) e^R e^G e^{E(\varphi)}, \quad (7.3.33)$$

$$R = -F_1 - F_2, \tag{7.3.34}$$

$$F_1 = -\frac{1}{2\widetilde{l}_D^2}\int dx(g(x) - h(x))^2 + \frac{1}{2}\int dx g(x) u^{-1} g(x), \tag{7.3.35}$$

$$F_2 = \int dx \psi(x) C^{-1}\left(g(x) - g_c(x)\right), \tag{7.3.36}$$

$$C^{-1} = u_\lambda^{-1} + \frac{1}{\widetilde{l}_D^2}, \tag{7.3.37}$$

$$g_c(x) = \frac{1}{\widetilde{l}_D^2}\int C(x,y)h(y)dy. \tag{7.3.38}$$

7.3.1. Побудова кластерних розкладів

Для модельних систем статистичної механіки, для яких групові розклади Майєра не мають сенсу, кластерні розклади є єдиним засобом, який не тільки дає змогу зробити граничний перехід $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^3$, а й детально вивчити властивості аналізованих систем у термодинамічній границі. Елементарні оцінки у виразі (7.3.32) свідчать, що і чисельник, і знаменник (7.3.32) розбігаються експоненційно зі збільшенням Λ. При $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^3$ виникає невизначеність типу ∞/∞. З цього погляду кластерний розклад виразу (7.3.32) є конструктивним математичним прийомом для розкриття цієї невизначеності. Розглянемо середнє значення деякої локально спостережуваної величини $\mathcal{A} = \mathcal{A}(X_0, \psi) := \mathcal{A}(\psi)$, яка описується функцією, що зосереджена в обмеженій області $X_0 \subset \Lambda$, вигляду

$$\mathcal{A}(\psi) = \sum_{(i)_k}\int\prod_{j=1}^{k} dx_j f_{i_j}^{(j)}(x_j)\exp[1/2 e_{i_j}\varphi(x_j)], \quad \varphi(x) = \psi(x) + g(x). \tag{7.3.39}$$

$$< \mathcal{A} >= \Xi_\Lambda^{-1}\sum_h N\int d\mu(\psi)\mathcal{A}(\psi; X_0)e^R e^G e^{E(\varphi)}. \tag{7.3.40}$$

Середні (7.1.6) можна записати у вигляді збіжного ряду цих середніх.

Перш ніж приступити до побудови розкладів для виразу (7.3.40), зробимо ще одне спрощення, яке сприятиме більш прозорому викладенню самого методу. Покладемо $E = 0$. З погляду аналізованої системи це відповідає тому, що частинки взаємодіють за допомогою регуляризованого потенціалу $\Phi^{(c,\lambda)}_{i_l,i_2}(x_1, x_2; \Lambda')$, а короткодіюча частина $\Phi^{(s,\lambda)}_{i_l,i_2}(x_1, x_2; \Lambda') = 0$ (див. формули (7.2.11), (7.2.12)). Випадок $E \neq 0$ не вносить додаткових проблем, а лише робить викладення надзвичайно громіздкими. Читач може звернутись до оригінальної праці [71] або для більш прозорого опису до огляду [39]. Наприкінці розділу коротко розглянемо випадок $E \neq 0$.

Ідея розкладання тепер полягатиме в наступному. Розіб'ємо Λ на області, що не перетинаються: $Y_n, \Lambda = \cup_n Y_n$, так, щоб $X_0 \subset \subset Y_1$. Кожна з Y_n буде об'єднанням $\widetilde{l}_D$-кубиків. Y_1 буде фіксовано. Інші Y_n, $n > 1$, будуть пробігати множини $\Lambda \setminus X_{n-1}$, $X_k = \cup_{j=1}^k Y_j$ залежно від кроку розкладання. Нехай тепер $0 \leq s_1 \leq 1$ — параметр увімкнення взаємодії між частинками, що знаходяться в областях $Y_1 = X_1$ і $\Lambda \setminus X_1$, тобто якщо $s_1 = 0$, то частинки, що знаходяться в X_1, не взаємодіють з частинками, які знаходяться в $\Lambda \setminus X_1$. При $s_1 = 1$ усі частки в Λ взаємодіють за допомогою потенціалу $C(x, y)$, і, нарешті, при $0 < s_1 < 1$ частинки в X_1 взаємодіють за допомогою $C(x, y)$ (аналогічно в X_1^c), а частинки з X_1 взаємодіють з частинками з X_1^c за допомогою потенціалу $s_1 C(x, y)$. Повний потенціал має вигляд

$$C(x, y; s_1) = p(x, y; s_1) C(x, y), \tag{7.3.41}$$

де

$$\begin{aligned} p(x, y; s_1) = \mathbb{1}_{Y_1}(x)\mathbb{1}_{Y_1}(y) + \mathbb{1}_{X_1^c}(x)\mathbb{1}_{X_1^c}(y) + \\ + s_1 \left[\mathbb{1}_{Y_1}(x)\mathbb{1}_{X_1^c}(y) + \mathbb{1}_{X_1^c}(x)\mathbb{1}_{Y_1}(y)\right]. \end{aligned}$$

Перший крок розкладання полягає в застосуванні до чисельника виразу (7.3.40) формули Ньютона–Лейбніца:

$$f_\Lambda := \Xi_\Lambda < \mathcal{A}_\Lambda > = \sum_h N \int d\mu_0(\psi)\mathcal{A}(\psi)e^{-S(\Lambda;h)} +$$
$$+ \sum_h \int_0^1 ds_1 \frac{d}{ds_1} N \int d\mu_{s_1}(\psi)\mathcal{A}(\psi)e^{-S(\Lambda;h)}, \qquad (7.3.42)$$

де $-S(\Lambda;h) = R + G$, а $d\mu_0(\psi)$ і $d\mu_{s_1}(\psi)$ — гауссові міри, побудовані за допомогою коваріацій відповідно $C(x,y;0)$ і $C(x,y;s_1)$. Перший член у (7.3.42) факторизується, а до другого члена застосуємо формулу

$$\frac{d}{ds}\int d\mu_s(\psi)F(\psi) = \frac{1}{2}\int dx \int dy \frac{d}{ds}C(x,y;s)\frac{\delta^2 F(\psi)}{\delta\psi(x)\delta\psi(y)}. \qquad (7.3.43)$$

Цю формулу легко отримати, увівши дискретну апроксимацію гауссової міри $d\mu_s(\psi)$, диференціюючи за s під знаком інтеграла та виконуючи двічі інтегрування за частинами (див., наприклад, [8, ч. II, підрозд. 9.1]). Використовуючи (7.3.41), остаточно отримуємо

$$f_\Lambda = \sum_h \Xi_{X_1^c}(h)\int d\mu_0(\psi)\mathcal{A}(\psi)e^{-S(X_1;h)} +$$
$$+ \sum_{Y_2}\sum_h \int_0^1 ds_1 \int d\mu_{s_1}(\psi)\Delta_1(X_1,Y_2;s_1)\mathcal{A}(\psi)e^{-S(\Lambda;h)}, \quad (7.3.44)$$

де

$$\Delta_1(X_1,Y_2;s_1) = \int_{X_1} dx \int_{Y_2} dy \frac{d}{ds_1}C(x,y;s_1)\frac{\delta^2}{\delta\psi(x)\delta\psi(y)}.$$

Область Y_2 пробігає об'єм $X_1^c = \Lambda \setminus X_1$. Вибір області Y_2 поки що не фіксуємо.

Наступний крок розкладання здійснюємо у другому члені виразу (7.3.44). У кожному члені суми за Y_2 зафіксуємо область $X_2 = Y_1 \cup Y_2$. Нехай $0 \le s_2 \le 1$ — параметр увімкнення взаємодії між частинками, що знаходяться в X_2, і частинками, що знаходяться в X_2^c. Зрозуміло, що частинки з $X_1 = Y_1$ взаємодіють з частинками Y_2 з інтенсивністю s_1, частинки з X_1 взаємодіють з частинками з X_2^c з інтенсивністю $s_1 s_2$, а частинки з Y_2 взаємодіють з частинками з X_2^c з інтенсивністю s_2. Виконуючи перетворення, подібні до перетворень у формулах (7.3.42)–(7.3.44), отримуємо наступний член розкладу. Продовжимо цей процес доти, доки не вичерпаємо весь об'єм Λ, тобто за деякого $n = n_\Lambda$, $X_{n_\Lambda} = \Lambda$, залишковий член $R_{n_\Lambda} = 0$, оскільки містить оператор

$$\Delta_k(X_k, Y_{k+1}; (s)_k) = \int_{X_k} dx \int_{Y_{k+1}} dy \frac{d}{ds_k} C(x, y; (s)_k) \frac{\delta^2}{\delta\psi(x)\delta\psi(y)}, \tag{7.3.45}$$

$(s)_k := s_1, ..., s_k$, який при $k = n_\Lambda$ містить коваріацію $C(x, y; (s)_{n_\Lambda})$ з $y \in Y_{n_\Lambda+1}$ і обертається на нуль, бо y не лежить у Λ.

Остаточний вираз для f_Λ матиме вигляд

$$f_\Lambda = \sum_{n=1}^{n_\Lambda} \sum_{\overline{y}, h} \Xi_{X_n^c}(h) \int (ds)^{n-1} \int d\mu_s \prod_{k=1}^{n-1} \Delta_k(X_k, Y_{k+1}; (s)_k) \widetilde{\mathcal{A}}(\psi, h), \tag{7.3.46}$$

де $\overline{y} := \{Y_2, ..., Y_n\}$, $\widetilde{\mathcal{A}}(\psi, h) = \mathcal{A}(\psi) e^{-S(X_n; h)}$, а

$$C(x, y; (s)_n) = p(x, y; (s)_n) C(x, y), \tag{7.3.47}$$

$$\begin{aligned} p(x, y; (s)_n) = &\sum_{j=1}^{n+1} \mathbb{1}_{Y_j}(x) \mathbb{1}_{Y_j}(y) + \\ &+ \sum_{1 \le i < j \le n} s_i \cdots s_{j-1} \left[\mathbb{1}_{Y_i}(x) \mathbb{1}_{Y_j}(y) + (x \leftrightarrow y) \right]. \end{aligned} \tag{7.3.48}$$

Після підстановки коваріацій (7.3.47), (7.3.48) у (7.3.45) добуток операторів у (7.3.46) запишеться як сума добутків, кожен з яких відповідає відображенню T, яке аналогічне відображенню η_T (див. (3.3.107)) або (7.2.18), (7.2.17). Тоді розклад для середніх

$< \mathcal{A} >_\Lambda$ запишемо у вигляді

$$< \mathcal{A} >_\Lambda = \sum_{n,h,\overline{y},T} \frac{\Xi_{X_n^c}(h)}{\Xi_\Lambda} \int d\sigma q(s,T) \int d\mu_s \Delta_C(\overline{y},T) \mathcal{A}(\psi) e^{-S(X_n;h)}, \tag{7.3.49}$$

де

$$q(s,T) = \prod_{k=1}^{n-1} \frac{d}{ds_k}(s_{T(k+1)} \cdots s_k),$$

$$\Delta_C(\overline{y},T) = \prod_{k=1}^{n-1} \int_{Y_{T(k+1)}} dx \int_{Y_{k+1}} dy C(x,y) \frac{\delta^2}{\delta\psi(x)\delta\psi(y)}.$$

Для того щоб застосувати розклад (7.3.49), оберемо множини Y_n відповідно до вигляду функції $h(x)$ у кожному члені суми за h. Для заданого h через Σ позначимо замкнену множину, що складається з граней кубиків ґратки Ω_α, на яких функція h зазнає стрибка; Σ називають контуром Пайєрлса для h. Введемо множину $\widehat{\Sigma}$ — об'єднання одиничних кубиків в Λ таких, що їх відстань від Σ менша ніж L' ($L' >> L$). Далі, нехай $\widetilde{Y}$ — множина елементів, які є або зв'язними компонентами з $\widehat{\Sigma}$, або одиничними кубиками з $\Lambda \backslash \widehat{\Sigma}$. Нехай тепер Y_1 буде найменшим об'єднанням множин з $\widetilde{Y}$ таких, що $X_0 \subset Y_1$, а Y_n для $n > 1$ будуть елементи з Y. Тоді для середнього (7.3.49) треба зробити останній крок — пересумування за h. Необхідно виконати пересумування за h у виразі окремо в області X_n та в області X_n^c. Згідно з побудовою h завжди можна записати у вигляді

$$h(x) = h_{X_n}(x) + h_{X_n^c}(x).$$

Тому можливість підсумування залежатиме від вибору функції $g(x;h)$ у формулах (7.3.32)–(7.3.38) і після заміни (7.3.31).

Читач може прослідкувати за деталями цього технічного вибору, наприклад, у праці [68] (див. також [39,198]), який дає змогу сформулювати таку лему:

Лема 7.3.1. *Величини G, R і $\mathcal{A}$ з вибраною функцією g задовольняють такі співвідношення:*

$$\begin{gathered}G(X_n, h) = G(X_n, h_{X_n}),\, G(X_n^c, h) = G(X_n^c, h_{X_n^c}),\\ R(X_n, h) = R(X_n, h_{X_n}),\, R(X_n^c, h) = R(X_n^c, h_{X_n^c}),\\ \mathcal{A}(X_0, h) = \mathcal{A}(X_0, h_{X_n}).\end{gathered}$$

Доведення легко виконати, використовуючи явний вигляд факторів G, R, $\mathcal{A}$ та періодичність $\exp[i\beta^{1/2}e_i\varphi]$. Остаточний вигляд кластерного розкладу визначається формулою

$$< \mathcal{A} >_\Lambda = \sum_{n=1}^{n_\Lambda} \sum_{\overline{y}, T, \Delta', \Delta} \frac{\Xi_{X_n^c}}{\Xi_\Lambda} \int d\sigma q(s, T) \int d\mu_s \Delta_C(\Delta', \Delta, T) \mathcal{A}(\psi) e^R e^G. \tag{7.3.50}$$

Оператор $\Delta_C(\Delta', \Delta, T)$ і додаткові суми Δ', Δ з'являються з представлення

$$\Delta_C(\overline{y}, T) = \prod_{k=1}^{n-1} \sum_{\Delta'_{k+1}, \Delta_{k+1}} \int_{\Delta'_{k+1}} dx \int_{\Delta_{k+1}} dy C(x, y) \frac{\delta^2}{\delta\psi(x)\delta\psi(y)}.$$

Проблема існування термодинамічної границі зводиться до знаходження границі послідовності $\widetilde{f}_\Lambda = \Xi_{X_n^c}/\Xi_\Lambda$ і доведення збіжності ряду (7.3.50) при $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^3$. На завершення запишемо розклад (7.3.50) у компактнішому вигляді:

$$< \mathcal{A} >_\Lambda = \sum_{X, X_0 \subset X} \mathcal{K}(X) f_\Lambda(X^c),\ X^c = \Lambda \setminus X. \tag{7.3.51}$$

Зауваження 7.2. *Зазначимо, що з побудови кластерних розкладів у випадку $E \neq 0$ величина $E(\Lambda)$ не задовольняє властивості $E(\Lambda_1 \cup \Lambda_2) = E(\Lambda_1) + E(\Lambda_2)$ при $\Lambda_1 \cup \Lambda_2 = \Lambda$ і $\Lambda_1 \cap \Lambda_2 = \emptyset$. Щоб подолати цю проблему, Бріджес та Федербуш [71] запропонували вводити на кожному етапі розкладання параметри включення взаємодії не тільки в коваріацію $C(x, y)$, а й у $E(\Lambda)$, так, щоб при $s_n = 0$*

$$E(\Lambda; s_1 ..., s_{n-1}, 0) = E(X_n; s) + E(X_n^c).$$

Як наслідок, отримаємо розклад аналогічний до (7.3.50) *з тією різницею, що під час диференціювання за* s_k *у формулі* (7.3.50) *виникає додатковий член* $\frac{d}{ds_k}E(\Lambda; s_1, ..., s_k)$. *(Детальніше див. [39, 71].)*

7.3.2. Про збіжність кластерних розкладів

Проаналізуємо структуру членів (7.3.50) і виділимо фактори, що забезпечують збіжність. Внесок у суму за n в (7.3.50) будуть давати такі фактори: 1) оцінка сум за $\overline{y}$, T, Δ', Δ та інтегралів за s, 2) оцінка числа та величини членів, що виникають внаслідок застосування варіаційного оператора $\Delta_C(\overline{y}, T)$ до виразу $\mathcal{A}(\psi)e^R e^G$, 3) оцінка гауссових інтегралів, 4) оцінка відношення статистичних сум $\widetilde{f}_\Lambda(X_n^c) = \frac{\Xi_{X_n^c}}{\Xi_\Lambda}$. Головними величинами, які пригнічують зростаючі множники, що виникають з 1)–4), будуть сталі $(c\beta^\alpha)^n$, $\exp[-F_1(X_n)]$ та добуток коваріацій в (7.3.50)

Нагадаємо, що одиничними кубиками називають кубики, ребра яких дорівнюють $\widetilde{l}_D$. Тоді $|X_n|$ — це кількість кубиків у $X_n = \cup_{k=1}^n Y_k$. Для дерева T (див. (7.3.49)) визначимо величину

$$d(T, \overline{y}) = \sum_{k=1}^{n-1} dist(\Delta_{k+1}, \Delta'_{k+1}),\ \Delta_{k+1} \subset Y_{k+1},\ \Delta'_{k+1} \subset Y_{T(k+1)}.$$

Ураховуючи ці означення, перш ніж оцінити суму за T у виразі (7.3.50), підставимо одиницю $1 = \prod_{k=1}^{n-1} |Y_{T(k+1)}||Y_{T(k+1)}|^{-1}$ і так само, як у [70] без факторів $|Y_{T(k+1)}|$, отримаємо оцінку

$$\sum_T \int dsq(s, T) \prod_{k=1}^{n-1} |Y_{T(k+1)}| \leq e^{|X_n|} \tag{7.3.52}$$

(див. також лему 7.2 у [198]). Сума за h (див. лему 7.1 у [198])

$$\sum_h e^{-f_1 F_1(X_n, h)} \leq e^{c_1 L^{-3}|X_n|} \tag{7.3.53}$$

з деякою сталою c_1 для довільної f_1.

Лема 7.3.2 (див. лему 7.3 в [198]). *Для довільних δ_1 і $c_2 > 6\log 6$ знайдуться сталі C_1 і C_2 такі, що*

$$\sum_{\overline{y}} \sum_{(\Delta,\Delta')} \prod_{k=1}^{n-1} |Y_{T(k+1)}|^{-1}(...) \leq (C_1C_2)^{n-1} \sup_{\overline{y},\Delta,\Delta'} e^{\delta_1 d(T,\overline{y})} e^{c|X_n|}(...).$$

Лема 7.3.2 дає змогу записати для середнього $< \mathcal{A} >_\Lambda$ таку оцінку (з урахуванням також (7.3.52)):

$$\begin{aligned} | < \mathcal{A} >_\Lambda | \leq & \sum_{n=1}^{n_\Lambda} (C_1C_2)^{n-1} \sup_{\overline{y},h,s,\Delta,\Delta'} e^{\delta_1 d(T,\overline{y})} e^{(1+c_1L^{-3}+c_2)|X_n|} \times \\ & \times e^{-(1-f_1)F_1(X_n,h)} f_\Lambda(X_n^c) \times \\ & \times \left| \int d\mu_s(\psi) \Delta_C(\Delta', \Delta, T) \mathcal{A}(\psi) e^{-F_2(X_n,h)} e^{G(X_n)} \right| . \end{aligned}$$

Зауваження 7.3. *Оцінюючи комбінаторні множники, використовували аргументи праці [18] (див. також [26]), а саме, що кількість можливих виборів зв'язних об'єднань N одиничних кубиків, які містять фіксований кубик Δ, не перевищує 6^{6N}.*

Після виконання операцій функціонального диференціювання, які породжують додаткові суми та додаткові комбінаторні множники, інтеграла за мірою $d\mu_s$, а також оцінки коваріацій C:

$$C(x, y; s) \leq C(x, y) \leq c/\lambda \exp\left[-\frac{1}{\widetilde{l}_D}(1 - \frac{\delta}{2})|x - y| \right], \qquad (7.3.54)$$

$$\prod_{j=1}^{n-1} \prod_{\substack{x'_j \in \Delta'_{j+1} \\ x_j \in \Delta_{j+1}}} C(x'_j, x_j) \leq \left(\frac{c}{\lambda}\right)^{n-1} e^{-\frac{1}{\widetilde{l}_D}(1-\frac{\delta}{2})d(T,\overline{y})}, \qquad (7.3.55)$$

отримуємо нову оцінку

$$|<\mathcal{A}>_\Lambda| \leq C(\mathcal{A}) \sum_{n=1}^{n_\Lambda} (\delta_0)^{n-1} \sup_{\overline{y},h} e^{-\frac{1}{\widetilde{l}_D}(1-\delta')d(T,\overline{y})} e^{c|X_n|} e^{-(1-f_1)F_1(X_n,h)}$$

(7.3.56)

з $\delta' = \delta/2 + \delta_1 + \delta_2$. Стала c перед множником $|X_n|$ включає в себе c_0, що виникає з нерівності (див. додаток 4 в [71])

$$|\widetilde{f}_\Lambda(X_n^c)| \leq e^{c_0|X_n|}$$

та оцінок інтеграла за мірою $d\mu_s$ (див. лему 7.9 у [198]), а також нерівність (7.3.53). Стала δ_0 пропорційна оберненій температурі β, яка виникає внаслідок дії функціональних похідних на відповідні експоненти (див., наприклад, (7.3.29)). Для достатньо малих β (високих температур) збіжність забезпечує можливість вибрати $e^c\delta_0 < 1$.

Зауваження 7.4. *Важливо також зауважити роль експоненціального спадання коваріацій (див.* (7.3.54)–(7.3.55)*), яка забезпечує необхідну оцінку кількісних факторів від дії функціональних похідних:*

$$\prod_{\Delta}(n(\Delta)!)^p e^{-\delta'' d(T,\Delta)} \leq C(\delta'', p)^n, \ \delta'' < \delta/2. \qquad (7.3.57)$$

7.4. Теорія дебаївського екранування

Механізм дебаївського екранування полягає в тому, що деякий пробний заряд e_i за умов рівноваги оточений хмарою зарядів протилежного знака, що зумовлює нейтралізацію заряду e_i. Як наслідок, взаємодія заряду e_i із зарядом e_j, розташованим поза "хмарами" , буде описуватися не далекодіючим кулонівським потенціалом, а деяким короткодіючим потенціалом. Як вже йшлося первісне пояснення цього явища було подано в праці [77] методом середнього поля. Сучасні математичні обґрунтування наведено також у [100, 121, 122, 142]. Ці міркування дали змогу визначити тип ефективної взаємодії (див. формулу (7.2.10)). Методи, розвинені в розд. 7, дають можливість математично строго довести гіпотезу екранування та отримати у межі малих значень плазмового параметра $\varepsilon = e^2\beta/l_D$ теорію Дебая–Хюккеля. Якщо заряджені частинки знаходяться в деякому молекулярному середовищі, скажімо, в розчині електроліту, то їх взаємодія з молекулами середовища повинна робити певний внесок у ефекти екранування. Спробуємо врахувати ці взаємодії лише на рівні дипольного наближення. Облік вищих мультипольних наближень на фізичному рівні строгості було зроблено в працях [21,45]. На завершення обговоримо також вплив граничного матеріалу на ефект дебаївського екранування.

7.4.1. Обґрунтування теорії Дебая–Хюккеля

Як уже йшлося, теорія Дебая–Хюккеля порівняно добре описує високотемпературну плазму або електроліти низької концентрації. Нестрогі розрахунки, пов'язані з лінійним наближенням рівняння Пуассона–Больцмана, дають можливість передбачити експонентний характер взаємодії між двома іонами. Для бінарної кореляційної функції було отримано вираз

$$\rho_{i_1,i_2}(x_1,x_2)=\rho_{i_1}\rho_{i_2}\left[1-\beta e_{i_1}e_{i_2}\frac{e^{-\frac{1}{l_D}|x_1-x_2|}}{4\pi|x_1-x_2|}\right].$$

Кластерні розклади для кореляційних функцій дають змогу одержати результати Дебая–Хюккеля на строгому математичному рівні. Сформулюємо для цього лему, доведення якої фактично випливає зі збіжності кластерних розкладів.

Лема 7.4.1. *Для значень параметрів β, λ, $L, \ldots$, фіксованих вище, та з $\mathcal{A}$, заданого формулою* (7.3.39) *і локалізованого в $X_0 \subset X_1$, та деякої фіксованої області X_0' існують сталі $C(\mathcal{A})$ і C_* такі, що кластерний розклад* (7.3.51), *який містить тільки члени з $X_0 \subset X_n$ і $X_0' \cap X_n \neq \emptyset$, збігається та виконується оцінка*

$$\sum_{\substack{X, X_0 \subset X_n \\ X_0' \cap X_n \neq \emptyset}} |\mathcal{K}(X)| e^{c_0|X|} \leq C_* C(\mathcal{A}) e^{-\frac{1}{l_D}(1-\delta) dist(X_0, X_0')}. \qquad (7.4.58)$$

Доведення випливає з того факту, що ліва частина (7.4.58) задовольняє оцінку (7.3.56) з X_n, що містить X_0 та має непустий перетин з X_0'. Далі, з побудови кластерних розкладів

$$dist(X_0, X_0') \;\le\; |X_n| \;+\; d(T,\overline{y}), \tag{7.4.59}$$

тоді

$$e^{c|X_n|}e^{-(1-\delta')d(T,\overline{y})} \;\le\; e^{(c+1-\delta)|X_n|}e^{-(\delta-\delta')d(T,\overline{y})}e^{-(1-\delta)dist(X_0,X_0')}. \tag{7.4.60}$$

Підставляючи (7.4.60) у (7.3.56) і вибираючи $\delta' < \delta$ (δ з оцінки коваріації $C(x,y)$), отримуємо (7.4.58). ■

Сформулюємо основну теорему підрозділу.

Теорема 7.4.2. *Для значень параметрів, за яких виконується лема 7.4.1, та спостережуваних* $\mathcal{A}$ *і* $\mathcal{B}$*, які задані формулами типу* (7.3.39) *і локалізовані відповідно в* X_0 *і* X_0'*, існують сталі* $C(\mathcal{A},\mathcal{B})$ *і* C_**, незалежні від* z_i, β*, такі, що для досить малих* $\beta/\widetilde{l}_D$ *існує границя*

$$\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^3} < \mathcal{A} >_\Lambda = < \mathcal{A} >$$

і

$$|< \mathcal{A}\mathcal{B} > \;-\; < \mathcal{A} >< \mathcal{B} >| \;\le\; C_* C(\mathcal{A},\mathcal{B}) e^{-\frac{1}{\widetilde{l}_D}(1-\delta)dist(X_0,X_0')}.$$

Проаналізуємо, як можна скористатись кластерними розкладами для середніх $< \mathcal{A} >$, $< \mathcal{B} >$ і $< \mathcal{A}\mathcal{B} >$, щоб отримати праву частину нерівності (7.4.65). Якщо побудувати кластерний розклад для величини $< \mathcal{A}\mathcal{B} >$, вибравши $Y_1 = X_1 \supset X_0$, то в розкладі будуть члени, для яких $X_n \cap X_0' \ne \emptyset$, та члени, для яких X_0' повністю лежить у $X_n^c = \Lambda \setminus X_n$ ($X_n \cap X_0' = \emptyset$). Останні члени повинні скорочуватися з членами розкладу величини $< \mathcal{A} >< \mathcal{B} >$. Тоді отриманий розклад задовольнятиме лему 7.4.1, яка й забезпечить необхідну оцінку. Проте простежити за такими скороченнями складно, тому скористаємося деяким штучним прийомом, запропонованим Жінібром [116] (див. [24, с. 233]).

Доведення теореми 7.4.2. Нехай $d\mu_\sigma^*(\varphi^*)$ — це ізоморфна копія міри $d\mu_\sigma(\varphi)$ ($C^* \simeq C$). Визначимо теорію з мірою $d\widetilde{\mu}_\sigma = d\mu_\sigma^* \otimes d\mu_\sigma$, коваріацією $\widetilde{C} = C \otimes 1\!\!1 + 1\!\!1 \otimes C^*$ і полем $\varphi \otimes 1\!\!1 + 1\!\!1 \otimes \varphi^*$. Також визначимо міру

$$d\widetilde{q}(\widetilde{\varphi}) = \widetilde{\Xi}_\Lambda^{-1} e^{-V_\Lambda(\varphi)} e^{-V_\Lambda(\varphi^*)} d\widetilde{\mu}_\sigma, \tag{7.4.61}$$

де

$$V_\Lambda(\varphi) = G_\Lambda(\varphi) + R_\Lambda(\varphi), \ \widetilde{\Xi}_\Lambda = \Xi_\Lambda \cdot \Xi^*_\Lambda.$$

Розвинута теорія є інваріантною відносно симетрії $\varphi \leftrightarrow \varphi^*$ Це означає, що якщо деяка функція $F(\varphi)$ є антисиметричною відносно заміни $\varphi \to \varphi^*$ (тобто $F(\varphi^*) = -F(\varphi)$), то

$$\int F(\varphi) d\widetilde{q}(\widetilde{\varphi}) = 0. \tag{7.4.62}$$

Застосуємо техніку побудови кластерних розкладів, які описано вище, до виразу

$$\int (\mathcal{A} - \mathcal{A}^*)(\mathcal{B} - \mathcal{B}^*) d\widetilde{q}(\widetilde{\varphi}), \tag{7.4.63}$$

вибравши $supp(\mathcal{A} - \mathcal{A}^*) \subset X_0$, $supp(\mathcal{B} - \mathcal{B}^*) \subset X_0'$ і $X_0 \subset X_1$. Зрозуміло, що нові гауссові міри $d\widetilde{q}(\widetilde{\varphi})$ також інваріантні щодо зазначеної симетрії. Кластерний розклад містить члени, для яких $X_0' \cap X_n^c \neq \emptyset$, і члени, в яких $X_0' \subset X_n^c$. Члени, в яких $X_0 \subset X_n$, а $X_0' \subset X_n^c$, дорівнюють нулю внаслідок (7.4.62), бо $(\mathcal{A} - \mathcal{A}^*)$ і $(\mathcal{B} - \mathcal{B}^*)$ антисиметричні функції. Отже, кластерний розклад для (7.4.63) задовольняє умову леми 7.4.1, тобто виконується нерівність

$$|\int (\mathcal{A} - \mathcal{A}^*)(\mathcal{B} - \mathcal{B}^*) d\widetilde{q}(\widetilde{\varphi})| \ \leq \ C'_* C(\mathcal{A}\mathcal{B}) e^{-\frac{1}{\widetilde{l}_D}(1-\delta) dist(X_0, X_0')}. \tag{7.4.64}$$

Підінтегральний вираз у лівій частині (7.4.64) складається з чотирьох доданків і в кожному інтеграл за мірою $d\widetilde{q}$ (див. (7.4.61)) факторизується. Як наслідок, отримаємо нерівність

$$2|\int \mathcal{A}\mathcal{B} dq(\varphi) - \int \mathcal{A} dq(\varphi) \int \mathcal{B} dq(\varphi)| \leq C'_* C(\mathcal{A}\mathcal{B}) e^{-\frac{1}{\widetilde{l}_D}(1-\delta) dist(X_0, X_0')}$$

з $dq(\varphi) = \Xi_\Lambda^{-1} e^{-V_\Lambda(\varphi)} d\mu_\sigma$, що доводить теорему.

■

Результат теореми 7.4.2 та оцінки з підрозд. 7.3.2 дають змогу довести теорему, аналогічну до теореми 7.4.2 і для середніх (7.1.6).

Теорема 7.4.3. *Нехай* A *і* B *— середні типу* (7.1.6)*, локалізовані відповідно в* X_0 *і* X_0'*. Тоді для значень параметрів, за яких виконується теорема 7.4.2, існують сталі* C_A *і* C_B *такі, що існує границя*

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

і

$$| < AB > - < A >< B > | \le C_A C_B e^{-\frac{1}{\tilde{l}_D}(1-\delta)dist(X_0,X_0')}. \tag{7.4.65}$$

Для доведення потрібно подати середні $< A >_\Lambda$ у вигляді розкладів за середніми $< \mathcal{A} >$ та скористатися оцінкою факторів $\varepsilon_i(x)$. Нерівність (7.4.65) виражає факт експоненціальної кластеризації кореляційних функцій і цим доводить гіпотезу Дебая. Вираз (7.4.59) легко отримати, використовуючи кластерні розклади для $\rho_{i_1,i_2}(x_1,x_2)$ та міркування з праці [142].

7.4.2. Дебаївське екранування в іонно-дипольних системах

Під час розгляду систем заряджених частинок, що знаходяться в молекулярних середовищах, необхідно враховувати їх взаємодію з молекулами середовища. Здебільшого ця взаємодія враховується феноменологічно за допомогою постійного діелектричного середовища у формулі для кулонівського потенціалу.

Розглянемо статистичний підхід, що враховує молекулярні взаємодії в рамках дипольного наближення. Покажемо, що, обмежуючись нульовим наближенням (наближенням середнього поля), легко одержати результати феноменологічної теорії. Метод дає змогу обчислити поправки до нульового наближення. Будемо розглядати систему частинок, кожна з яких є сферою радіусом r_0 із постійною щільністю заряду на поверхні. Для дипольних частинок сумарна щільність заряду на поверхні частки дорівнює нулю. Взаємодія між частинками описується формулою (7.1.5) з електростатичною взаємодією

$$\Phi_{ij}^{(c)}(x,y) = Q_i(\nabla_x^0)Q_j(\nabla_y^0)\frac{1}{4\pi|x-y|},$$

де $Q_i(\nabla^0_x)$ — узагальнені операторнозначні заряди:

$$Q_i(\nabla^0) := \begin{cases} e_i & \text{для іонів,} \\ (\mathbf{m_i} \cdot \nabla^{\mathbf{0}}) & \text{для диполів.} \end{cases}$$

Для простоти вважатимемо, що в системі є один сорт диполів, які ми позначимо індексом $i = 0$. Різні сорти іонів позначатимемо індексом $i = 1, ..., M$. Для того щоб застосувати методи, розвинені у попередніх розділах, потрібно ввести регуляризацію, як це зроблено в підрозд. 7.2.1 (див. (7.2.10)–(7.2.12)):

$$\Phi^{c,\Lambda}_{i,j}(x_1, x_2; \Lambda) = Q_i(\nabla_x)Q_j(\nabla_y)u^{\Lambda}_{\lambda}(x, y),$$

$$u^{\Lambda}_{\lambda} = (-\Delta)^{-1} - c_1\left(-\Delta + \frac{1}{\lambda_1^2 l_D^2}\right)^{-1} + c_2\left(-\Delta + \frac{1}{\lambda_2^2 l_D^2}\right)^{-1}, \tag{7.4.66}$$

де $c_1 = \frac{\lambda_1^2}{\lambda_1^2 - \lambda_2^2}$, $c_2 = \frac{\lambda_2^2}{\lambda_1^2 - \lambda_2^2}$, $\lambda_1 > \lambda_2 > 0$,

$$\begin{aligned}\Phi^{(s,\lambda)}_{i,j}(x, y; \Lambda') = {}& \mathbb{1}_{\Lambda'}(x)Q_i(\nabla^0_x)Q_j(\nabla^0_y)\left[c_1\frac{\exp[-\frac{1}{\lambda_1 l_D}|x-y|]}{4\pi|x-y|}\right]\mathbb{1}_{\Lambda'}(y) - \\ & -\mathbb{1}_{\Lambda'}(x)Q_i(\nabla^0_x)Q_j(\nabla^0_y)\left[c_2\frac{\exp[-\frac{1}{\lambda_2 l_D}|x-y|]}{4\pi|x-y|}\right]\mathbb{1}_{\Lambda'}(y) + \\ & +\mathbb{1}_{\Lambda'}(x)\Phi^{(s)}_{i,j}(x, y)\mathbb{1}_{\Lambda'}(y),\ \nabla^0 \cdot \nabla^0 = -\Delta_0.\end{aligned}$$

Потенціал $\Phi^{(s)}_{i,j}(x, y)$ вибирають так, щоб він включав у себе потенціал твердих куль і щоб

$$\Phi^{(s)}_{i,j}(x, y) + Q_i(\nabla^0_x)Q_j(\nabla^0_y)\left[c_1\frac{e^{-\frac{1}{\lambda_1 l_D}|x-y|}}{4\pi|x-y|} - c_2\frac{e^{-\frac{1}{\lambda_2 l_D}|x-y|}}{4\pi|x-y|}\right] \geq 0.$$

Міру $d\mu_0$ будують за коваріацією u^{Λ}_{λ}, що задається формулою (7.4.66). Потрібно, однак, зауважити, що інтегрування за фазовим об'ємом дипольних частинок включає в себе інтегрування за різними орієнтаціями дипольного моменту, тобто

$$dx^i := \begin{cases} dx, \ i = 1, ..., M, & \text{для іонів}, \\ dx^0 = \frac{1}{4\pi} \sin\theta d\theta d\varphi dx & \text{для диполів}. \end{cases}$$

Розклад Пайєрлса будується абсолютно аналогічно, але з іонної частини дії $S(\varphi)$ (див. (7.3.23)), тобто

$$\exp[-S(\varphi)] = \exp[-S_I(\varphi)] \exp[-S_D(\varphi)].$$

Величину $\exp[-S_I(\varphi)]$ розкладаємо за формулою (7.3.27), а дипольну частину перетворюємо так:

$$\exp\left[\rho_0 \int_\Lambda dx^{(0)} \left(e^{i\beta^{1/2} e_i \varphi_0(x)} - 1\right)\right] = \exp\left[-\frac{1}{2}\beta\rho_0 \int_\Lambda \varphi_0^2 dx^{(0)}\right] \times$$
$$\times \exp\left[\rho_0 \int_\Lambda dx^{(0)} \left(e^{i\beta^{1/2} e_i \delta} - 1 - i\beta^{1/2} e_i \delta_0 + \frac{1}{2}\beta\delta_0^2\right)\right]. \quad (7.4.67)$$

Ця формула є тотожністю, оскільки середнє значення поля диполів у кубику Ω_α (див. (7.3.28)) дорівнює нулю і $\delta_0(x) = \varphi_0(x)$. Першу експоненту в правій частині (7.4.67) включимо до виразу для G_2 (див. (7.3.29)), тому підсумовування починається з $i = 0$. Друга експонента після інтегрування за орієнтаціями диполів набуде вигляду

$$\exp\left[-\frac{1}{2}\beta\rho_0 \int_\Lambda \varphi_0^2 dx^{(0)}\right] = \exp\left[-\frac{1}{2}(\varepsilon - 1) \int_\Lambda dx \varphi(x)(-\Delta)\varphi(x)\right],$$

де $\varepsilon = 1 + \frac{4\pi}{3}\rho\beta|\mathbf{m}|^2$ має сенс діелектричної проникності середовища. Цей член включимо в міру $d\mu_0(\varphi)$. Заміна, еквівалентна заміні (7.3.24), в цьому випадку буде такою:

$$N d\mu(\varphi) = d\mu_0(\varphi) \exp\left[-\frac{1}{2}(\varepsilon - 1) \int_\Lambda dx \varphi(x)(-\Delta)\varphi(x) - \frac{1}{2\widetilde{l}_D^2} \int_\Lambda \varphi^2\right]. \quad (7.4.68)$$

Обернений коваріаційний оператор матиме вигляд

$$C^{-1} = \lambda_1^2 \lambda_2^2 l_D^4 (-\Delta)^3 + (\lambda_1^2 + \lambda_2^2) l_D^2 (-\Delta)^2 + \varepsilon(-\Delta) + \widetilde{l}_D^{-2}. \quad (7.4.69)$$

Таким чином, екранування взаємодії дипольними частинками призводить до перенормування середовища на стале ε, як і у феноменологічній теорії. Побудова кластерних розкладів і доведення їх збіжності здебільшого аналогічні до вже розглянутих у попередньому підрозділі та містять лише окремі технічні проблеми. Як і у випадку іонних систем, для середніх типу (7.1.7) справджуються лема 7.4.1 і теореми 7.4.2 та 7.4.3, що у свою чергу доводить той факт, що за наявності іонів у системі взаємодія між дипольними частинками також матиме експонентний характер. Детальний опис системи й доведення поданих вище тверджень наведено в праці [197] та огляді [39].

7.4.3. Вплив діелектричного контакту на характер дебаївського екранування

Досі під час побудови кореляційних функцій в обмеженому об'ємі використовували граничні умови Діріхле, тобто вихідний кулонівський потенціал взаємодії двох зарядів обертався на нуль на межі $\partial\Lambda$. Це означає, що посудина Λ металева. Перевага такого підходу полягає в тому, що після заміни (7.3.24) екранований потенціал взаємодії з умовами Діріхле на $\partial\Lambda$ має таку саму асимптотику поблизу $\partial\Lambda$, як і далеко від $\partial\Lambda$. Тут розглядаються питання впливу межі, якою є діелектрик, на ефективну взаємодію між частинками. У праці [92] це завдання вивчалося для випадку, коли посудина Λ була діелектричною сферою радіусом R. У цьому випадку вплив межі дається взнаки тільки в обмеженому об'ємі і в разі переходу до термодинамічної границі $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^3$ поверхневі явища зникають. У працях [192, 193] досліджено властивості кластеризації кореляційних функцій системи заряджених частинок, що знаходяться між двома поверхнями концентричних сфер радіусами R_0 і $R >> R_0$, а область Ω_0, яку охоплює сфера радіусом R_0, заповнена діелектриком, діелектрична проникливість якого ε_0. У цьому випадку вплив діелектрика зберігається після переходу до термодинамічної границі $R \to \infty$. У випадку, коли R_0 є дуже великим, але набагато меншим за R, система є подібною до ситуації, коли простір $\mathbb{R}^3$ розділений площиною $x^{(3)} = 0$ на два напівпростори: $\mathbb{R}^3_+$, в якому знаходиться система заряджених частинок, і напівпростір $\mathbb{R}^3_-$, де розміщено діелектрик Ω_0. Нехай $\Lambda \subset \mathbb{R}^3_+$ і опирається на площину $x^{(3)} = 0$. У рамках описаного вище математичного підходу коротко опишемо характер спадання кореляцій між зарядженими частинками поблизу діелектрика.

Розглядатимемо систему заряджених частинок, вміщену в металеву посудину Λ, що знаходиться в середовищі з діелектричною проникністю ε, в якій розміщено макроскопічний діелектрик Ω_0 з діелектричною проникністю $\varepsilon_0 < \varepsilon$. З метою отримання більш наочних результатів розглянемо два випадки:
1)Ω_0 заповнює $\mathbb{R}^3_-$;
2)Ω_0 є сферою радіусом R_0 з центром у початку координат.

Відповідно до загальних принципів електростатики енергія взаємодії двох одиночних зарядів відрізняється від кулонівської через вплив поверхні діелектрика. За визначенням формулою (7.2.9) потенціал $u_0^\Lambda(x_1, x_2)$ є розв'язком наступної системи рівнянь:

$$\begin{aligned} -\varepsilon_0 \Delta u_0(x,x') &= 0, \;\; x \in \Omega_0 \; u_0 = u_0^-, \\ -\varepsilon \Delta u_0(x,x') &= \delta(x-x'), \; x \in \Lambda, \; u_0 = u_0^+, \\ u_0^-(x,x') &= u_0^+(x,x'), \;\; x \in \partial\Omega_0 \cap \Lambda, \\ \varepsilon_0 \frac{\partial u_0^-(x,x')}{\partial \mathbf{n}(x)} &= \varepsilon \frac{\partial u_0^+(x,x')}{\partial \mathbf{n}(x)}, \\ u_0(x,x') &= 0, \; x \in \partial\Lambda, \end{aligned} \tag{7.4.70}$$

де $x' \in \Lambda$, а $\mathbf{n}(x)$ — вектор нормалі до $\partial\Omega_0$ в точці x. Для розглядуваних випадків розв'язки можна знайти в [11, 182]. При $\Lambda = \mathbb{R}^3_+$, а $\Omega_0 = \mathbb{R}^3_-$ функція $u_0^+(x,x')$ має досить простий вигляд:

$$u_0^+(x,x') = \frac{1}{4\pi\varepsilon|x-x'|} + \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon + \varepsilon_0} \frac{1}{4\pi\varepsilon|x - \widetilde{x'}|}, \tag{7.4.71}$$

де $\widetilde{x} = (x^{(1)}, x^{(2)}, -x^{(3)})$. У загальному випадку припускаємо, що $u_0^+(x,x')$ завжди можна подати як

$$u_0 = (-\varepsilon\Delta)^{-1} + u^*, \tag{7.4.72}$$

де Δ — оператор Лапласа з умовами Діріхле на $\partial\Lambda$, а u^* — вплив поверхні $\partial\Omega_0$ і також зникає на $\partial\Lambda$. Короткодіючий потенціал залишиться тим самим, за винятком потенціалу Гіббса поблизу $\partial\Omega_0$, який характеризує непроникність діелектрика Ω_0 для заряджених частинок. Після регуляризації (7.2.10)–(7.2.12)

$$u_0 = (-\varepsilon\Delta)^{-1} - (-\varepsilon\Delta + 1/\lambda^2 l_D^2)^{-1} + u_\lambda^*.$$

Подальші побудови кластерних розкладів для кореляційних функцій переважно аналогічні до однорідного випадку, описаного вище. Проте доведення їх збіжності розрізнятиметься через поведінку коваріації $C(x, y)$. Як і в однорідному випадку, перейдемо до нової міри $d\mu(\varphi)$ (див. (7.3.25)), коваріація якої в наближенні середнього поля і є ефективним потенціалом взаємодії, що задовольняє рівняння (7.3.26). У випадку, коли $\Lambda = \mathbb{R}_+^3$ і $\lambda = 0$, рівняння (7.3.26) набуде вигляду

$$C_0(x, y) = u_0(x, y) - \frac{1}{\widetilde{l}_D^2}\int_{-\infty}^{\infty} dz^{(1)} \int_{-\infty}^{\infty} dz^{(2)} \int_0^{\infty} dz^{(3)} u_0(x, z) C_0(z, y). \tag{7.4.73}$$

Це рівняння можна розв'язати точно, переходячи до перетворення Фур'є за змінними $\bar{x} = (x^{(1)}, x^{(2)})$ [39]. Розв'язок є таким

$$\begin{aligned} C_0(x, y) = {} & \frac{\exp[-1/\widetilde{l}_D|x - y|]}{4\pi\varepsilon|x - y|} + \qquad (7.4.74) \\ & + \frac{1}{8\pi^2\varepsilon}\int d\bar{p} e^{i\bar{p}(\bar{x}-\bar{y})} \frac{\varepsilon - \varepsilon_0\mu(\bar{p})}{\varepsilon + \varepsilon_0\mu(\bar{p})} \frac{e^{-\omega(\bar{p})(x^{(3)}+y^{(3)})}}{\omega(\bar{p})}, \end{aligned}$$

де $\mu(\bar{p}) = |\bar{p}|/\omega(\bar{p})$, а $\omega(\bar{p}) = (\bar{p}^2 + \widetilde{l}_D^{-2})^{1/2}$. Безпосереднім обчисленням інтеграла (7.4.74) можна показати, що при $|x - y| > 1/\widetilde{l}_D$

$$|C_0(x, y)| \le C_1 \exp[-1/\widetilde{l}_D(1 - \frac{\delta}{2})|x - y|] + C_2 \frac{\exp[-1/\widetilde{l}_D(x^{(3)} + y^{(3)})]}{|\bar{x} - \bar{y}|^3}. \tag{7.4.75}$$

Це означає, що поблизу поверхні $\partial\Omega_0$ коваріація спадає експоненціально лише в напрямках, перпендикулярних до поверхні $\partial\Omega_0$, а вздовж поверхні $\partial\Omega_0$ спадання $\sim |x-y|^{-3}$. Ця обставина змінює характер доведення збіжності кластерних розкладів.

Оскільки ці зміни виражаються в дещо іншій стратегії доведення та технічно більш громіздкі, то пояснимо лише основну ідею, як подолати не експоненціальний характер спадання коваріації. Нагадаємо, що експоненціальне спадання (7.3.54) дає змогу оцінити будь-який степінь $(n(\Delta)!)^p$ (див. (7.3.57)). У праці [92] (див. також [193]) встановлено, що за такої поведінки коваріації, як (7.4.75), нерівність (7.3.57) буде виконуватися при $p = 1/2 - \delta'$ з деяким $0 < \delta' < 1$, а максимальний показник у кластерному розкладі дає оцінку $p = 3/2 - \delta'$. Але величина $\prod_\Delta n(\Delta)!$ оцінюється фактором $\prod_i d_T(i)$, де $d_T(i)$ — потужність множини $T^{-1}(\{i\})$, тобто кількість вершин у дереві T, для яких $T(j) = i$ $(j = 2, ..., n)$. Це дає можливість замість оцінки (7.3.52) використовувати оцінку Бетла та Федербуша [57, 58]:

$$\sum_T \int dsq(s,T) \prod_i d_T(i) \le 4^{n-1}. \qquad (7.4.76)$$

Усі інші оцінки, які не опираються на поведінку коваріації, залишаються незмінними. Для того щоб сформулювати основний результат цього підрозділу, введемо функцію

$$C(\Delta,\Delta') \le C_1 \sup_{\substack{x\in\Delta \\ y\in\Delta'}} \left[e^{-1/\widetilde{l}_D(1-\frac{\delta}{2})|x-y|} + C_2 \frac{e^{-1/\widetilde{l}_D(x^{(3)}+y^{(3)})}}{1+|\bar{x}-\bar{y}|^3} \right]. \qquad (7.4.77)$$

Доведено таку теорему:

Теорема 7.4.4. *Нехай A і B — середні типу* (7.1.6), *локалізовані відповідно в X_0 і X_0'. Тоді для значень параметрів, за яких виконується теорема 7.4.3, існує стала C_{AB} така, що існує границя*

$$\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^3} < A >_\Lambda = < A > \qquad (7.4.78)$$

і

$$| < AB > - < A >< B > | \le C_{AB} \sup_{\substack{\Delta\in X_0 \\ \Delta'\in X_0'}} C(\Delta,\Delta'). \qquad (7.4.79)$$

Розділ 8

Про квантові неперервні системи

У квантовій статистичній механіці скінченно-об'ємний стан Гіббса визначається на алгебрі локально-спостережуваних величин $\mathbb{U}_\epsilon(\Lambda), \Lambda \subset \mathbb{R}^d$ (див.,наприклад, [66]):

$$\omega_\Lambda^\beta(A) = \frac{Tr_{\mathcal{F}_\epsilon(\Lambda)}(e^{-\beta(H_\Lambda - \mu N_\Lambda)}A)}{Tr_{\mathcal{F}_\epsilon(\Lambda)}(e^{-\beta(H_\Lambda - \mu N_\Lambda)})}, \tag{8.0.1}$$

де $A \in \mathbb{U}_\epsilon(\Lambda)$, H_Λ – гамільтоніан взаємодії бозонів ($\epsilon = +1$) або ферміонів ($\epsilon = -1$) у просторі Фока $\mathcal{F}_\epsilon(\Lambda)$ з деякими самоспряженими граничними умовами на межі $\partial\Lambda$, який діє в N-частинковому підпросторі $\mathcal{F}_\epsilon^{(N)}(\Lambda)$ як оператор

$$H_\Lambda^{(N)} \ = \ -\frac{\hbar^2}{2m_0}\sum_{i=1}^{N}\Delta_{x_i}^\Lambda + U(x)_N, \quad (x)_N \equiv (x_1, ..., x_N),$$

а параметри β, μ, m_0 – відповідно обернена температура, хімічний потенціал і маса частинок.

У випадку операторів $a(f)$ з алгебр ККС або КАС (детальніше див. у [33, 66]) стани (8.0.1) можна виразити елементами РМЩ $\widetilde{\rho}^\Lambda((x)_m; (y)_m)$:

$$\begin{aligned} &\omega_\Lambda^\beta(a^*(f_1)...a^*(f_m)a(g_m)...a(g_1)) = \qquad (8.0.2)\\ &\quad = \int (dx)^m (dy)^m \bar{g}_1(y_1)...\bar{g}_m(y_m) f_1(x_1)...f_m(x_m)\widetilde{\rho}^\Lambda((y)_m; (x)_m). \end{aligned}$$

У цьому розділі встановлено зв'язок з підходом Жинібра [112–114, 117] і розвинуто методи кластерних розкладів, запропонованих у [199]. Визначено кореляційні функції ЕГМ і доведено, що, використовуючи визначення міри Пуассона на вінеровських траєкторіях, кореляційні функції для скінченного об'єму можна подати моментами Віка ЕГМ, а саме інтегралами за мірою Пуассона від мономів Віка петель Вінера і Больцман-фактора $\exp[-\beta U]$. Рівняння КЗ є прямим наслідком такого подання та добре відомої формули інтегрування за частинами для міри Пуассона [172]. Також дуже коротко повторено аналіз розв'язків рівнянь КЗ, але з дещо іншої точки зору. Справа в тому, що будь-яку квантову систему у великому канонічному ансамблі можна охарактеризувати трьома незалежними параметрами. Це температура системи T, хімічний потенціал μ і маса частинок m_0. Але альтернативно можна розглядати ще три незалежні параметри : $\beta = 1/kT$ – обернену температуру, $z = e^{\beta\mu}$ – активність і$\lambda = (2\pi\beta/m_0)^{1/2}$ – теплову довжину хвилі.

У працях Жинібра β і λ були зафіксовані, а z – малий параметр. У [147] z і $\lambda = 1$ були зафіксовані, а β – малий параметр. Тут досліджується випадок малої маси квантових частинок, оскільки в серії статей [52, 53, 214, 219, 220] досліджувались квантові ефекти для систем на ґратці. Суть цих праць полягає в доведенні відсутності будь-якої критичної поведінки квантових систем в області "сильної квантованості"(або в межі малих мас частинки). Тому потрібно проаналізувати цю проблему для неперервної системи з використанням методу Рюелля–Жинібра – методу КЗ рівнянь у деякому банаховому просторі. Насправді виконано перегляд оцінок Жинібра, щоб виділити новий малий параметр, а саме масу квантових частинок, і довести існування єдиного розв'язку цих рівнянь за досить малої маси частинок і будь-якої фіксованої температури. У праці [202] результат праці [147] був узагальнений на випадок статистики Бозе–Фермі.

8.1. Побудова міри Пуассона на просторі вінерівських траєкторій

8.1.1. Статистика Максвелла–Больцмана.

Для визначення евклідового стану Гіббса нагадаємо читачам деякі визначення.

Нехай $\Omega^\beta := C\big([0,\beta] \mapsto \mathbb{R}^d\big)$ – простір Банаха неперервних функцій $\omega : [0,\beta] \mapsto \mathbb{R}^d$. Позначимо підпростір петель $(\omega(0) = \omega(\beta))$ через $\widetilde{\Omega}^\beta$. Для кожної функції $\omega \in \Omega^\beta$ з $\omega(0) = x$ і $\omega(\beta) = y$ можна записати

$$\omega(\tau) \; = \; \widetilde{\omega}_x(\tau) + \frac{\tau}{\beta}(y - x),$$

де $\widetilde{\omega}_x \in \widetilde{\Omega}^\beta$.

Ця формула задає відображення

$$\Omega^\beta \ni \omega \mapsto (\omega(0), \omega(\beta)) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d,$$

яке дає змогу визначити однозначні відображення

$$\mathbb{R}^d \times \widetilde{\Omega}^\beta \ni (y, \widetilde{\omega}_x) \mapsto \omega \in \Omega^\beta$$

за допомогою сім'ї нелінійних операторів P_y,for $y \in \mathbb{R}^d$:

$$P_y : \widetilde{\Omega}^\beta \mapsto \Omega^\beta, \quad (P_y\widetilde{\omega})(\tau) \; = \; (P_y\widetilde{\omega}_x)(\tau) \; = \; \widetilde{\omega}_x(\tau) + \frac{\tau}{\beta}(y - x) \tag{8.1.3}$$

Позначимо як $W^{\beta,m}_{x,y}(d\omega)$ умовну вінерівську міру броунівських частинок з масою m на борелівській σ-алгебрі $\mathcal{B}(\Omega^\beta)$(тут і далі $\mathcal{B}(X)$ означає борелівську σ-алгебру елементів з X). Але в обох випадках БС або КС міра на вінерівських траєкторіях може бути редукована до міри на петлях. Щоб визначити міру на $\widetilde{\Omega}^\beta$, розглянемо відображення

$$\widetilde{\Omega}^\beta \ni \widetilde{\omega} \mapsto \widetilde{\omega}(0) \in \mathbb{R}^d, \tag{8.1.4}$$

яке задає подання довільного $\widetilde{\omega} \in \widetilde{\Omega}^\beta$ у вигляді

$$\widetilde{\omega} = \widetilde{\omega}(0) + \hat{\omega},$$

де $\hat{\omega} \in \widetilde{\Omega}_0^\beta$ і $\widetilde{\Omega}_0^\beta$ – простір вінерівських петель з $\hat{\omega}(0) = 0$. Визначимо міру Пуассона на $\widetilde{\Omega}^\beta$. У першу чергу слід вибрати правильну локалізацію, оскільки базовий простір $\widetilde{\Omega}^\beta$ не є локально компактним. Для будь-якого $\Lambda \subset \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ визначаємо множину

$$\widetilde{\Omega}_\Lambda^\beta := \left\{ \widetilde{\omega} \in \widetilde{\Omega}^\beta \mid \widetilde{\omega}(0) \in \Lambda \right\}, \qquad \Lambda \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$$

Згідно з [148] побудуємо міру Пуассона на конфігураційному просторі петель Вінера $\widetilde{\Omega}^\beta$ як марковану міру Пуассона на $\mathbb{R}^d \times \widetilde{\Omega}_0^\beta$. Для цього визначимо простір маркованих конфігурації таким чином:

$$\Gamma^\beta \ = \ \Gamma_{\widetilde{\Omega}^\beta}^\beta \ = \ \Gamma_{\mathbb{R}^d \times \widetilde{\Omega}_0^\beta}^\beta \ := \ \left\{ \gamma = (\widetilde{\gamma}, \widetilde{\omega}_{\widetilde{\gamma}}) \mid \widetilde{\gamma} \in \Gamma_{\mathbb{R}^d}, \widetilde{\omega}_{\widetilde{\gamma}} \in \widetilde{\Omega}_{\widetilde{\gamma}}^\beta \right\}.$$

Тут $\widetilde{\Omega}_{\widetilde{\gamma}}^\beta$ – множина всіх відображень $\widetilde{\gamma} \ni x \mapsto \widetilde{\omega}_x \in \widetilde{\Omega}^\beta$, $\Gamma_{\mathbb{R}^d}$ – множина локально скінченних конфігурацій $\widetilde{\gamma}$ в $\mathbb{R}^d$ (див. (1.1.1)).

Визначимо міру на $(\widetilde{\Omega}^\beta, \mathcal{B}(\widetilde{\Omega}^\beta))$ як образ добутку $W_{0,0}^{\beta,m}(d\widetilde{\omega}_0)dx$ відображення (8.1.4) за формулою

$$\sigma^\beta(d\widetilde{\omega}) \ = \ \sigma^{\beta,m}(d\widetilde{\omega}) \ = \ W_{x,x}^{\beta,m}(d\widetilde{\omega})dx,$$

де σ_Λ^β – обмеження міри σ^β на $\widetilde{\Omega}_\Lambda^\beta$.

Тоді міру Пуассона $\pi_\Lambda^{z,\beta} = \pi_{z\sigma_\Lambda^\beta}$ на $\left(\Gamma_\Lambda^\beta, \mathcal{B}(\Gamma_\Lambda^\beta)\right)$ з інтенсивністю $z\sigma_\Lambda^\beta$ визначатиме формула

$$\pi_\Lambda^{z,\beta}(\Delta) = e^{-z\sigma_\Lambda^\beta(\widetilde{\Omega}_\Lambda^\beta)} \sum_{n=0}^\infty \frac{z^n}{n!} (\sigma_\Lambda^\beta)^{\hat{\otimes} n}(\Delta \cap \Gamma_{\Lambda,n}^\beta), \qquad \Delta \in \mathcal{B}(\Gamma_\Lambda^\beta),$$

де $\sigma_\Lambda^\beta(\widetilde{\Omega}_\Lambda^\beta) = (m_0/2\pi\beta)^{d/2}\sigma(\Lambda)^1$.

Опускаємо деякі технічні деталі, відсилаючи читача до праці [147].

---

[1] Зазначимо, що в [147] стала $\lambda = (2\pi\beta/m_0)^{1/2} = 1$.

Для довільної множини $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ і $F \in L^1(\Gamma_\Lambda^\beta, \pi_\Lambda^{z,\beta}(d\gamma))$ інтеграл за мірою Пуассона визначаємо так:

$$\int_{\Gamma_\Lambda^\beta} F(\gamma)\pi_\Lambda^{z,\beta}(d\gamma) \;=\; e^{-z\sigma_\Lambda^\beta(\widetilde{\Omega}_\Lambda^\beta)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{(\widetilde{\Omega}_\Lambda^\beta)^n} F(\widetilde{\omega})_n (\sigma_\Lambda^\beta)^{\hat{\otimes} n}(d\widetilde{\omega})_n. \tag{8.1.5}$$

8.1.2. Статистика Бозе–Фермі.

У випадку квантової статистики схема побудови простору конфігурацій $\widehat{\Gamma}_\Lambda^\beta$ та міри Пуассона є такою самою, а їх аналітичний вираз легко отримати замінивши у формулах підрозд. 8.1.1 обернену температуру β на $j\beta$, де $1 \le j \in \mathbb{N}$. Крім того, міру $z\sigma_\Lambda^\beta$ у визначенні міри Пуассона треба замінити на

$$\widehat{\sigma}^{\beta,z}(\Delta) \;=\; \sum_{j\ge 1} \frac{\varepsilon^{j-1} z^j}{j} \sigma^{j\beta}(\Delta_j),$$

де $\Delta_j \in \Omega_\Lambda^{j\beta}$, $\Delta = \cup_{j\ge 1}\Delta_j$.

Міра Пуассона $\widehat{\pi}_\Lambda^{z,\beta}$ на $\big(\widehat{\Gamma}_\Lambda^\beta, \mathcal{B}(\widehat{\Gamma}_\Lambda^\beta)\big)$ з інтенсивністю $\widehat{\sigma}_\Lambda^{\beta,z}$ (для $0 < z < 1$) визначається формулою

$$\widehat{\pi}_\Lambda^{z,\beta}(\Delta) = e^{-\widehat{\sigma}_\Lambda^{\beta,z}(\widetilde{\Omega}_\Lambda)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \, (\hat{\sigma}_\Lambda^{\beta,z})^{\widehat{\otimes} n}(\Delta \cap \widehat{\Gamma}_{\Lambda,n}^\beta), \qquad \Delta \in \mathcal{B}(\widehat{\Gamma}_\Lambda^\beta),$$

де $\widehat{\sigma}_\Lambda^{\beta,z}(\widetilde{\Omega}_\Lambda) = (m_0/2\pi\beta)^{d/2}\sigma(\Lambda)\sum_{j\ge 1}\frac{z^j}{j^{1+d/2}}$ і $\widehat{\Gamma}_\Lambda^\beta \;=\; \bigcup_{j\ge 1}\Gamma_\Lambda^{j\beta}$.

Можна також визначити міру Пуассона $\widehat{\pi}^{z,\beta}$ для довільного z і в $\mathbb{R}^d$ замість Λ за допомогою перетворення Лапласа:

$$\int_{\Gamma^\beta} \widehat{\pi}^{z,\beta}(d\gamma) e^{<f,\gamma>} \;=\; e^{\int_{\widetilde{\Omega}} \widehat{\sigma}^{\beta,z}(d\widetilde{\omega})(e^{f(\widetilde{\omega})}-1)}$$

для довільного $f \in C_0(\widetilde{\Omega})$.

Для довільної обмеженої множини $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ і довільної функції $F \in L^1(\widehat{\Gamma}_\Lambda^\beta, \widehat{\pi}_\Lambda^{z,\beta}(d\gamma))$ наступна формула визначає інтеграл за мірою $\widehat{\pi}^{z,\beta}$:

$$\int_{\widehat{\Gamma}^{\beta}_{\Lambda}} F(\gamma)\widehat{\pi}^{z,\beta}_{\Lambda}(d\gamma) \;=\; e^{-\widehat{\sigma}^{\beta,z}_{\Lambda}(\widetilde{\Omega}_{\Lambda})} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{(\widetilde{\Omega}_{\Lambda})^{n}} F(\widetilde{\omega})_{n} (\widehat{\sigma}^{\beta,z}_{\Lambda})^{\hat{\otimes} n} (d\widetilde{\omega})_{n}.$$

Зауваження 8.1. *Унаслідок локалізації вінерівських траєкторій визначена пуассонівська міра є нескінченно подільною мірою відносно початкових точок у* Λ*, тобто для будь-яких* $\Lambda_1, \Lambda_2 \in \mathbb{R}^d$ *таких, що* $\Lambda_1 \cap \Lambda_2 = \emptyset$*, і будь-яких інтегровних функцій* $F_1(\gamma)$ *і* $F_2(\gamma)$ *виконується така рівність:*

$$\int_{\widehat{\Gamma}^{\beta}} F_1(\gamma)F_2(\gamma)\widehat{\pi}^{z,\beta}(d\gamma) \;=\; \int_{\widehat{\Gamma}^{\beta}_{\Lambda_1}} F_1(\gamma)\widehat{\pi}^{z,\beta}(d\gamma) \int_{\widehat{\Gamma}^{\beta}_{\Lambda_2}} F_2(\gamma)\widehat{\pi}^{z,\beta}(d\gamma)$$

Це безпосередньо випливає з формули перетворення Лапласа.

8.2. Побудова ЕСГ для квантових неперервних систем

8.2.1. Статистика Максвелла–Больцмана

Визначимо міру Гіббса для неперервної системи квантових частинок в $\mathbb{R}^d$ із взаємодією, описаною в розд. 2.

Означення 8.1. *Евклідів стан Гіббса для скінченного об'єму* $\Lambda \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ *з граничною умовою* γ *визначається мірою на* $\big(\Gamma^{\beta}, \mathcal{B}(\Gamma^{\beta})\big)$ *формулою*

$$G^{z,\beta}_{\Lambda}(\Delta \mid \gamma) = \varepsilon_{\gamma_{\Lambda^c}}(\Delta_{\Lambda^c}) \begin{cases} \frac{1}{\Xi_{\Lambda}(\gamma)} & \int\limits_{\Delta_{\Lambda}} e^{-U(\gamma'_{\Lambda}|\gamma_{\Lambda^c})}\pi^{z,\beta}(d\gamma'_{\Lambda}), \Xi_{\Lambda} < \infty, \\ 0 & \textit{в іншому випадку} \end{cases}$$

для довільного $\Delta \in \mathcal{B}(\Gamma^{\beta})$*, де* $\Lambda^c := \mathbb{R}^d \setminus \Lambda$*,* $\Delta_{\Lambda} := P_{\mathbb{R}^d,\Lambda}(\Delta)$*,* $\varepsilon_{\gamma}(\Delta) := \chi_{\Delta}(\gamma)$*,* $\gamma_{\Lambda} = (\widetilde{\gamma}_{\Lambda}, \widetilde{\omega}_{\widetilde{\gamma}_{\Lambda}})$*,*

$$U(\gamma' \mid \gamma) := \sum\nolimits^{*}_{\{\omega,\omega'\}\subset\gamma'} V(\omega,\omega') + \sum\nolimits^{*}_{\omega\in\gamma',\,\omega'\in\gamma} V(\omega,\omega'), \tag{8.2.6}$$

$$V(\omega,\omega') := \int_0^\beta \phi(\omega(t),\omega'(t))\,dt, \tag{8.2.7}$$

$$\Xi_\Lambda^{z,\beta}(\gamma_{\Lambda^c}) := \int_{\Gamma^\beta} \exp[-U(\gamma'_\Lambda,\gamma_{\Lambda^c})]\,\pi^{z,\beta}(d\gamma'_\Lambda).$$

Зірочка у сумі (8.2.6) *означає, що за означенням ряд дорівнює нескінченності, якщо він не є абсолютно збіжним.*

Легко бачити, що для довільних Λ,Λ', $\Lambda\subset\Lambda'$ і $\Delta\in\mathcal{B}(\Gamma^\beta)$,

$$\int_{\Gamma^\beta} G_\Lambda^{z,\beta}(\Delta \mid \gamma')G_{\Lambda'}^{z,\beta}(d\gamma' \mid \gamma) = G_{\Lambda'}^{z,\beta}(\Delta \mid \gamma).$$

Означення 8.2. *Імовірнісна міра* $G^{z,\beta}$ *на* $(\Gamma^\beta,\mathcal{B}(\Gamma^\beta))$ *називається евклідовим станом Гіббса, відповідної квантової неперервної системи з оберненою температурою* β, *активністю* z *і потенціалом взаємодії* ϕ, *якщо для будь-якої обмеженої борелівської множини* $\Lambda\subset\mathbb{R}^d$

$$\int_{\Gamma^\beta} G_\Lambda^{z,\beta}(\Delta \mid \gamma)G^{z,\beta}(d\gamma) = G^{z,\beta}(\Delta), \qquad \Delta\in\mathcal{B}(\Gamma^\beta).$$

Таким чином, сподіваємося, що стан Гіббса повинен задовольняти звичайне рівняння ДЛР [15, 159].

8.2.2. Статистика Бозе–Фермі.

Щоб визначити ЕСГ, слід зробити деякі зауваження.

Зауваження 8.2.1. *Для випадку Бозе* ($\varepsilon = +1$) *немає ніяких труднощів, крім технічних: це побудова енергії взаємодії* $\widetilde{U}(\gamma)$ *на конфігурації петель* $(\widetilde{\omega})_N$, *яку записуємо у вигляді*

$$\widetilde{U}(\widetilde{\omega})_N = \frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau \sum_{1\le i,k\le N} \widetilde{U}_{jk}(\widetilde{\omega}), \tag{8.2.8}$$

$$\widetilde{U}_{jk}(\widetilde{\omega}) = \sum_{s=1}^{j_i}\sum_{p=1}^{j_k}\widetilde{\phi}(|\omega_i(\tau+(s-1)\beta)-\omega_k(\tau+(p-1)\beta)|), \quad (8.2.9)$$

де $\widetilde{\phi}(x) = \phi(x)$, *якщо* $x \neq 0$, $\widetilde{\phi}(0) = 0$ *з умовою стійкості, яка має такий вигляд:*

$$\widetilde{U}(\widetilde{\omega})_N \geq -\beta B \sum_{k=1}^{N} j_k. \quad (8.2.10)$$

Зауваження 8.2.2. *Для випадку Фермі статистики (*$\varepsilon = -1$*) базову міру Гіббса не буде додатно-визначеною і апріорі незрозуміло, чи існує вона навіть у скінченому об'ємі. Але кластерні розклади, які побудовано в наступному підрозділі, дають можливість визначити її строго принаймні для малих значень параметрів* m_0*(або* β, z*). Щоб визначити її як недодатну специфікацію міри Пуассона, введемо функцію*

$$j(\widetilde{\omega}) \;=\; j, \qquad \text{якщо} \qquad \widetilde{\omega} \in \widetilde{\Omega}_{\Lambda}^{j\beta},$$

і для $\gamma \in \widehat{\Gamma}_{\Lambda}^{\beta}$

$$j(\gamma) \;=\; \sum_{\widetilde{\omega}\in\gamma}(j(\widetilde{\omega})-1), j(\widetilde{\omega}) = j_k, \quad \text{якщо} \quad \widetilde{\omega} \in \widetilde{\Omega}_{\Lambda}^{j_k\beta}.$$

Тоді від'ємний множник $\varepsilon^{j_{m+1}+\ldots+j_{m+n}-n}$ *у [112–114,117] можна записати як* $\exp[i\pi\theta(-\varepsilon)j(\gamma)]$, *де* $\theta(x) = 1$, *якщо* $x > 0$, *і* $\theta(x) = 0$, *якщо* $x < 0$.

Отже, маємо таке означення:

Означення 8.3. *Евклідів стан Гіббса для скінченного об'єму* $\Lambda \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ *з граничною умовою* γ *визначається як міра на* $\big(\widehat{\Gamma}^{\beta}, \mathcal{B}(\widehat{\Gamma}^{\beta})\big)$, *яка задається такою формулою:*

$$G_{\Lambda}^{z,\beta}(\Delta \mid \gamma) = \frac{\varepsilon_{\gamma_{\Lambda^c}}(\Delta_{\Lambda^c})}{\Xi_{\Lambda}(\gamma)} \int\limits_{\Delta_{\Lambda}} e^{-U(\gamma'_{\Lambda}|\gamma_{\Lambda^c})+i\pi\theta(-\varepsilon)j(\gamma'_{\Lambda})}\widehat{\pi}^{z,\beta}(d\gamma'_{\Lambda})$$

при $\Xi_\Lambda < \infty$ *для довільного* $\Delta \in \mathcal{B}(\widehat{\Gamma}^\beta)$, *де* $\Lambda^c := \mathbb{R}^d \setminus \Lambda$, $\Delta_\Lambda := P_{\mathbb{R}^d,\Lambda}(\Delta)$, $\varepsilon_\gamma(\Delta) := \chi_\Delta(\gamma)$, $\gamma_\Lambda = (\widetilde{\gamma}_\Lambda, \widetilde{\omega}_{\widetilde{\gamma}_\Lambda})$,

$$U(\gamma' \mid \gamma) := \sum_{\widetilde{\omega}' \in \gamma'} V(\widetilde{\omega}') + \sum_{\{\widetilde{\omega}, \widetilde{\omega}'\} \subset \gamma'}^{*} V(\widetilde{\omega}, \widetilde{\omega}') + \sum_{\widetilde{\omega}' \in \gamma', \widetilde{\omega} \in \gamma}^{*} V(\widetilde{\omega}, \widetilde{\omega}'), \tag{8.2.11}$$

$$V(\widetilde{\omega}) = \int_0^\beta d\tau \sum_{1 \le s < p \le j} \phi(|\widetilde{\omega}(\tau + (s-1)\beta) - \widetilde{\omega}(\tau + (p-1)\beta)|), \tag{8.2.12}$$

$$V(\widetilde{\omega}, \widetilde{\omega}') \ = \ \sum_{k=1}^{j} \sum_{k'=1}^{j'} \int_0^\beta d\tau \phi(|\widetilde{\omega}(\tau + (k-1)\beta) - \widetilde{\omega}'(\tau + (k'-1)\beta)|), \tag{8.2.13}$$

$$\Xi_\Lambda(\gamma_{\Lambda^c}) := \int_{\widehat{\Gamma}^\beta} \exp[-U(\gamma'_\Lambda \mid \gamma_{\Lambda^c}) + i\pi\theta(-\varepsilon) j(\gamma'_\Lambda)]\, \widehat{\pi}^{z,\beta}(d\gamma'_\Lambda).$$

8.3. Кореляційні функції квантових систем. Статистика Больцмана

За аналогією до класичної статистичної механіки визначимо евклідові кореляційні функції (класичні кореляційні функції на петлях Вінера) для порожніх граничних умов:

$$\rho^\Lambda(\widetilde{\omega})_m = Z_\Lambda^{-1} \sum_{n \ge 0} \frac{z^{m+n}}{n!} \int_{(\widetilde{\Omega}^\beta_\Lambda)^n} (\sigma^\beta_\Lambda)^{\hat{\otimes} n} (d\widetilde{\omega})_{m+n \setminus m} e^{-U(\widetilde{\omega})_{m+n}}, \tag{8.3.14}$$

де Z_Λ – такий самий ряд при $m = 0$,

$$U(\widetilde{\omega})_N = \sum_{1 \le i < j \le N} \int_0^\beta d\tau \phi(|\widetilde{\omega}_i(\tau) - \widetilde{\omega}_j(\tau)|)$$

і для довільної послідовності $(x_m, ..., x_N)$ використано позначення $(x)_{N \setminus m-1}$ $\quad (N \setminus 0 \equiv N)$.

Але ці кореляційні функції не відповідають тим, які були в конструкції РМЩ. Її потрібно дещо змінити. Для випадку БС це виправлення дуже просте. Потрібно розглянути функцію ρ^Λ не лише на петлях $\widetilde{\omega}$, а й функції траєкторій ω з $\omega(0) \neq \omega(\beta)$, тобто в просторі Ω^β. Це розширення можна побудувати за допомогою сім'ї лінійних операторів T_{y^m}, які визначаються через нелінійні оператори $P_{y_i}, i = 1, ..., m$ (див. (8.1.3)):

$$\rho^\Lambda_{BS}(\omega)_m \;=\; \left(T_{y^m}\rho^\Lambda\right)(\omega)_m \;=\; \rho^\Lambda(P_{y_1}\widetilde{\omega}_1, ..., P_{y_m}\widetilde{\omega}_m).$$

Тоді

$$\rho^\Lambda_{BS}(\omega)_m = Z_\Lambda^{-1}\sum_{n\geq 0}\frac{z^{m+n}}{n!}\int_{(\widetilde{\Omega}^\beta_\Lambda)^n}(\sigma^\beta_\Lambda)^{\hat{\otimes}n}(d\widetilde{\omega})_n e^{-U((\omega)_m,(\widetilde{\omega})_n)}. \tag{8.3.15}$$

Зауваження 8.3.3. *Кореляційні функції* (8.3.15) *дещо відрізняються від тих, які були введені Жинібром у [112–114, 117]. Були визначені кореляційні функції Жинібра для траєкторій, які набувають значень у* Λ*. Кореляційні функції* (8.3.15) *(а також інтеграл у* (8.3.14)*) визначено на траєкторіях, які набувають своїх значень у всіх* $\mathbb{R}^d$*, але їх початкові точки повинні бути в* Λ*. Проте в термодинамічній границі обидві послідовності кореляційних функцій повинні збігатися через єдиність розв'язку ланцюга КЗ рівнянь, розв'язками яких вони є.*

Зауваження 8.3.4. *Завдяки цим конструкціям можна досліджувати евклідові кореляційні функції* (8.3.14)*, а потім реконструювати функції* $\rho_{BS}(\omega^m)$ *за формулою* (8.3.15)*.*

Тепер, використовуючи (8.1.5), можна переписати (8.3.14) у вигляді інтеграла за мірою Пуассона на Γ^β_Λ:

$$\rho^\Lambda(\widetilde{\omega})_m \;=\; \Xi_\Lambda^{-1} z^m \int_{\Gamma^\beta_\Lambda}\pi^{z,\beta}_\Lambda(d\gamma)e^{-U((\widetilde{\omega})_m\cup\gamma)}, \tag{8.3.16}$$

де

$$\Xi_\Lambda \;=\; e^{-z\sigma^\beta_\Lambda(\widetilde{\Omega}^\beta_\Lambda)}Z_\Lambda$$

і

$$U((\widetilde{\omega})_m \cup \gamma) = U(\widetilde{\omega})_m + \sum_{j=1}^{m} \sum_{\widetilde{\omega} \in \gamma} V(\widetilde{\omega}_j, \widetilde{\omega}) + \sum_{\{\widetilde{\omega}, \widetilde{\omega}'\} \in \gamma} V(\widetilde{\omega}, \widetilde{\omega}'),$$

збігаються з (8.2.6)–(8.2.7) для порожніх граничних умов.

8.3.1. Моментне подання та рівняння КЗ

Покажемо, що кореляційні функції (8.3.16) можна записати у вигляді віківських моментів ЕГМ, тобто інтеграла за мірою $\pi_\Lambda^{z,\beta}$ від щільності міри Гіббса в обмеженому об'ємі і мономів Віка $:\gamma^{\otimes n}:$. Це дає змогу вивести рівняння КЗ для $\rho^\Lambda(\widetilde{\omega})_m$ з використанням формули інтегрування за частинами для міри Пуассона. Вважаємо цей висновок корисною вправою для розвитку аналізу конфігураційного простору Γ^β над $\widetilde{\Omega}^\beta$. Сформулюємо відому формулу інтегрування за частинами [172].

Лема 8.1. *Для довільного* $\Lambda \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$, $f \in C_0(\widetilde{\Omega}_\Lambda^\beta, \sigma_\Lambda^\beta)$ *і* $F \in L_2(\Gamma_\Lambda^\beta, \pi_\Lambda^{z,\beta}(d\gamma))$

$$\int_{\Gamma_\Lambda^\beta} \pi_\Lambda^{z,\beta}(d\gamma) \langle f, \gamma \rangle F(\gamma) = z \int_{\Gamma_\Lambda^\beta} \pi_\Lambda^{z,\beta}(d\gamma) \int_{\widetilde{\Omega}_\Lambda^\beta} \sigma_\Lambda^\beta(d\widetilde{\omega}) f(\widetilde{\omega}) F(\gamma \cup \widetilde{\omega}). \tag{8.3.17}$$

Визначимо моном Віка $\langle f^{(m)}, :\gamma^{\otimes m}: \rangle$ як функцію γ від Γ_Λ^β для будь-якої неперервної функції $f^{(m)}$ за формулою

$$\langle f^{(m)}, :\gamma^{\otimes m}: \rangle = \begin{cases} \sum_{\{\widetilde{\omega}\}_m \subset \gamma} \sum_{\pi \in \mathfrak{S}_m} f^{(m)}(\widetilde{\omega}_{\pi(1)}, \ldots, \widetilde{\omega}_{\pi(m)}), & m \le |\gamma|, \\ 0, & m > |\gamma|. \end{cases}$$

Щоб записати (8.3.16) через поліноми Віка, дещо узагальнимо лему 8.1.

Лема 8.2. *Для довільного* $f^{(m)} \in C_0((\widetilde{\Omega}_\Lambda^\beta)^{\otimes m}, (\sigma_\Lambda^\beta)^{\hat{\otimes} m})$ *і* $F \in L_2(\Gamma_\Lambda^\beta, \pi_\Lambda^{z,\beta}(d\gamma))$

$$\int_{\Gamma_\Lambda^\beta} \pi_\Lambda^{z,\beta}(d\gamma)\langle f^{(m)}, : \gamma^{\otimes m} :\rangle F(\gamma) \ = \tag{8.3.18}$$
$$= z^m \int_{\Gamma_\Lambda^\beta} \pi_\Lambda^{z,\beta}(d\gamma) \int_{(\widetilde{\Omega}_\Lambda^\beta)^m} (\sigma_\Lambda^\beta)^{\hat{\otimes} m}(d\widetilde{\omega})_m f^{(m)}(\widetilde{\omega})_m F(\gamma \cup (\widetilde{\omega})_m).$$

Доведення. Для довільної функції $f(\widetilde{\omega}) \in C_0$ і $\gamma \in \Gamma_\Lambda^\beta$ справедлива формула (3.3.61). Інтегруючи обидві частини за мірою $\pi_\Lambda^{z,\beta}(d\gamma)$ з функцією $f = \sum_{i=1}^m \alpha_i f_i$, $f_i \in C_0((\widetilde{\Omega}_\Lambda^\beta)^{\otimes m}, (\sigma_\Lambda^\beta)^{\hat{\otimes} m})$, диференціюючи обидві частини за $\alpha_1, ..., \alpha_m$ і застосовуючи (8.3.17), отримуємо (покладаючи $\alpha_1 = ... = \alpha_m = 0$) рівняння (8.3.18).

■

Використовуючи (8.3.18) з $F(\gamma) = \Xi_\Lambda^{-1} e^{-U(\gamma)}$ для довільного $f^{(m)} \in L_2((\widetilde{\Omega}_\Lambda^\beta)^{\otimes m}, \sigma_\Lambda^{\hat{\otimes} m})$ можна записати слабку форму (8.3.16) у вигляді віківських моментів евклідової міри Гіббса:

$$\left(f^{(m)}, \rho^\Lambda\right)_\sigma \ = \ \Xi_\Lambda^{-1} \int_{\Gamma_\Lambda^\beta} \pi_\Lambda^{z,\beta}(d\gamma)\langle f^{(m)}, : \gamma^{\otimes m} :\rangle e^{-U(\gamma)}. \tag{8.3.19}$$

Щоб вивести рівняння КЗ із (8.3.19), покладемо

$$f(\widetilde{\omega}) = f_{\widetilde{\omega}_1}(\widetilde{\omega}) = e^{-V(\widetilde{\omega}_1, \widetilde{\omega})} \ - \ 1.$$

З огляду на (3.3.61) маємо

$$e^{-\langle V(\widetilde{\omega}_1, \centerdot), \gamma\rangle} \ = : e^{\langle f_{\widetilde{\omega}_1}, \gamma\rangle} : .$$

Тепер розглянемо слабку форму (8.3.19) і розділимо експоненту в (8.3.19), витягаючи показник степеня, який залежить від траєкторії $\widetilde{\omega}_1$, і застосуємо ((8.3.18). Тоді для будь-якої функції

$f^{(m)} \in L_2((\widetilde{\Omega}^{\beta}_{\Lambda})^{\otimes m}, \sigma_{\Lambda}^{\hat{\otimes} m})$ отримаємо

$$\begin{aligned}
&\left(f^{(m)}, \rho^{\Lambda}\right)_{\sigma} = \\
&= z^m \int_{(\widetilde{\Omega}^{\beta}_{\Lambda})^m} (\sigma^{\beta}_{\Lambda})^{\hat{\otimes} m} (d\widetilde{\omega})_m e^{-\sum_{1\le i<j\le m} V(\widetilde{\omega}_i, \widetilde{\omega}_j)} \Xi_{\Lambda}^{-1} \int_{\Gamma^{\beta}_{\Lambda}} \pi^{z,\beta}_{\Lambda}(d\gamma) \times \\
&\qquad \times f^{(m)}(\widetilde{\omega})_m : e^{\langle f_{\widetilde{\omega}_1}, \gamma\rangle} : e^{-\sum_{j=2}^{m} \langle V(\widetilde{\omega}_j, \centerdot), \gamma\rangle - \frac{1}{2}\langle V, :\gamma^{\otimes 2}:\rangle} = \\
&= z \int_{(\widetilde{\Omega}^{\beta}_{\Lambda})^m} (\sigma^{\beta}_{\Lambda})^{\hat{\otimes} m} (d\widetilde{\omega})_m e^{-\sum_{j=2}^{m} V(\widetilde{\omega}_1, \widetilde{\omega}_j)} \frac{1}{\Xi_{\Lambda}} \sum_{n\ge 0} \frac{1}{n!} \int_{\Gamma^{\beta}_{\Lambda}} \pi^{z,\beta}_{\Lambda}(d\gamma) z^{m-1} \times \\
&\times f^{(m)}(\widetilde{\omega})_m \langle f^{\otimes n}_{\widetilde{\omega}_1}, : \gamma^{\otimes n} :\rangle e^{-\sum_{2\le i<j\le m} V(\widetilde{\omega}_i, \widetilde{\omega}_j) - \sum_{j=2}^{m} \langle V(\widetilde{\omega}_j, \cdot), \gamma\rangle - \frac{1}{2}\langle V, :\gamma^{\otimes 2}:\rangle}.
\end{aligned}$$

В останньому рівнянні експоненту $: e^{\langle f_{\widetilde{\omega}_1}, \gamma\rangle} :$ розкладемо в ряд і, користуючись формулою (8.3.18) та (8.3.19), отримуємо рівняння КЗ для евклідових кореляційних функцій:

$$\begin{aligned}
\rho^{\Lambda}(\widetilde{\omega})_m = z e^{-\sum_{j=2}^{m} V(\widetilde{\omega}_1, \widetilde{\omega}_j)} \times \\
\times \sum_{n\ge 0} \frac{1}{n!} \int_{(\widetilde{\Omega}^{\beta}_{\Lambda})^n} (\sigma^{\beta}_{\Lambda})^{\hat{\otimes} n} (d\widetilde{\omega}')_n K_n(\widetilde{\omega}_1; (\widetilde{\omega}')_n) \rho^{\Lambda}((\widetilde{\omega})^{\hat{1}}_m, (\widetilde{\omega}')_n),
\end{aligned} \tag{8.3.20}$$

де $(\widetilde{\omega})^{\hat{i}}_m = \widetilde{\omega}_1, ..., \widetilde{\omega}_{i-1}, \widetilde{\omega}_{i+1}, ..., \widetilde{\omega}_m$,

$$K_n(\widetilde{\omega}_1; (\widetilde{\omega}')_n) \;=\; \prod_{j=1}^{n} \left[e^{-V(\widetilde{\omega}_1, \widetilde{\omega}'_j)} - 1 \right].$$

і з першим доданком, що дорівнює 1 для $n = 0$ і $m = 1$ та $\rho^{\Lambda}(\widetilde{\omega})^{\hat{1}}_m$ для $n = 0$, $m > 1$.

8.3.2. Розв'язок рівняння КЗ за малої маси частинок у границі $\Lambda \nearrow \mathbb{R}^d$

Коротко обговоримо існування єдиного розв'язку рівнянь (8.3.20) у термодинамічній границі. Необхідні оцінки випливають з побудови та оцінок Жинібра, тому запишемо лише головні моменти та основні оцінки вилучення малого параметра маси. Визначимо послідовність

$$\hat{\rho}^{\Lambda} \;=\; (0, \rho^{\Lambda}(\widetilde{\omega}_1), \rho^{\Lambda}(\widetilde{\omega}_1, \widetilde{\omega}_2), ...).$$

Тоді систему рівнянь (8.3.20) можна записати у вигляді операторного рівняння:

$$\hat{\rho}^{\Lambda} \;=\; A_{\Lambda}(\zeta + K\hat{\rho}^{\Lambda}), \tag{8.3.21}$$

де

$$\zeta \;=\; (0, z, 0, 0, ...), \quad (A_{\Lambda}f)(\widetilde{\omega})_N \;=\; \alpha_{\Lambda}(\widetilde{\omega})_N f(\widetilde{\omega})_N,$$

а

$$\alpha_{\Lambda}(\widetilde{\omega}_i)_N = \begin{cases} 1, & \text{якщо } \widetilde{\omega}_i(0) \in \Lambda, \\ 0 & \text{в іншому випадку,} \end{cases}$$

тобто $\alpha_{\Lambda}(\widetilde{\omega})$ не дорівнює нулю лише коли початкова точка траєкторії $\widetilde{\omega}$ знаходиться в Λ. Оператор K визначається правою частиною рівняння (8.3.20), але до застосування умови стійкості (2.1.3) для норми оператора K потрібно спочатку симетризувати ці рівняння. Справа в тому, що не для будь-якої сім'ї неперервних петель Вінера $\widetilde{\omega}_1, ..., \widetilde{\omega}_m$ фактор у першій експоненті (8.3.20) можна оцінити як $F_1 = \sum_{j=2}^{m} V(\widetilde{\omega}_1, \widetilde{\omega}_j) \geq -2\beta B$, тобто отримати потрібну оцінку. Але з умови ((2.1.3) випливає, що

$$\sum_{j=1}^{m} F_j(\widetilde{\omega})_m \;\equiv\; 2U(\widetilde{\omega})_m \geq \; -2m\beta B$$

для кожної сім'ї $(\widetilde{\omega})_m$. Тому для кожної сім'ї $(\widetilde{\omega})_m$ існує принаймні один j, для якого $F_j \geq -2\beta B$. Тоді для кожної фіксованої сім'ї $(\widetilde{\omega})_m$ і такого j, для якого це правильно, можна вивести КЗ рівняння так само, але замість $f_{\widetilde{\omega}_j}(\widetilde{\omega})$ у (8.3.20) має бути $f_{\widetilde{\omega}_1}(\widetilde{\omega})$. А щоб мати однорідне зображення, потрібно використати трюк симетризації Рюеля. Це означає, що можна записати систему цих рівнянь як

$$\begin{aligned}(Kf)\,(\widetilde{\omega})_m \;=\; & z\sum_{i=1}^{m}\vartheta_i(\omega)_m e^{-\sum_{j\neq i}^{m}V(\widetilde{\omega}_i,\widetilde{\omega}_j)}\times\\ & \times\sum_{n\geq 0}\frac{1}{n!}\int_{(\widetilde{\Omega}_{\Lambda}^{\beta})^n}(\sigma_{\Lambda}^{\beta})^{\hat{\otimes} n}(d\widetilde{\omega}')_n K_n(\widetilde{\omega}_i;(\widetilde{\omega}')_n)f((\widetilde{\omega})_m^{\hat{i}},(\widetilde{\omega}')_n),\end{aligned}$$

де $\vartheta_i(\widetilde{\omega})_m$ — деякі функції з властивістю

$$\sum_{i=1}^{m}\vartheta_i(\widetilde{\omega})_m = 1,$$

для яких

$$\vartheta_i(\widetilde{\omega})_m e^{-\sum_{j\neq i}^{m}V(\widetilde{\omega}_i,\widetilde{\omega}_j)} \leq e^{2\beta B}\vartheta_i(\widetilde{\omega})_m, i = 1,...,m.$$

Тепер потрібно розв'язати рівняння (8.3.21) і знайти розв'язок у термодинамічній границі, а також вибрати деякий банахів простір, в якому норма оператора K рівномірно обмежена для деякого малого значення маси m з фіксованими $z, \beta,\ \|K\| < 1$.

Традиційний простір E_ξ у класичному випадку або в квантовому випадку для інтегровного потенціалу не вирішує цю проблему, оскільки для потенціалів, які не інтегруються в початку координат,

$$\sup_{\widetilde{\omega}_1}\int \sigma_{\Lambda}^{\beta}(d\widetilde{\omega})|K_1(\widetilde{\omega}_1;\widetilde{\omega})| = \infty \qquad \text{і} \qquad \|K\| = \infty$$

для довільних $\xi > 0$.

Для вирішення цієї проблеми Жинібр визначив деякий функціонал $\Delta(\widetilde{\omega})$, який задовольняє такі умови:

1) Δ неперервний на $\widetilde{\Omega}^\beta$, дійсний додатний і $\Delta(\widetilde{\omega}) > \Delta_0$,

2) Δ є інваріантним відносно $\widetilde{\omega}(\tau) \to \widetilde{\omega}(\tau) + x, x \in \mathbb{R}^d$,

3)Δ зростає досить повільно так, щоб бути інтегровним.

Ці вимоги будуть зрозумілі з розгляду, наведеного нижче.

Тепер можна визначити неперервний банахів простір G_Δ

послідовностей-функціоналів від траєкторій $\widetilde{\omega}$: $\phi = (\phi((\widetilde{\omega})_m))_{m=0}^{\infty}$ так, що

$$\|\phi\| = \sup_m \operatorname{ess.sup}_{\widetilde{\omega}} |\frac{\phi(\widetilde{\omega})_m}{\Delta(\widetilde{\omega})_m}| < +\infty,$$

де $\Delta(\omega)_m = \prod_{j=1}^m \Delta(\omega_j)$. Тоді легко отримати

$$|(K\phi)(\omega)_m| \leq |z|e^{2\beta B}\|\phi\| \sum_{i=1}^m \vartheta_i(\widetilde{\omega}_i)\frac{\Delta(\widetilde{\omega})_m}{\Delta(\widetilde{\omega}_i)} e^{\int \sigma^\beta(d\widetilde{\omega})|K_1(\widetilde{\omega}_i;\widetilde{\omega})|\Delta(\widetilde{\omega})}$$

і, якщо для деякого $\xi > 0$

$$\xi \exp\left[\int_{\widetilde{\Omega}^\beta} \sigma^\beta(d\widetilde{\omega})|K_1(\widetilde{\omega}_i, \widetilde{\omega})|\Delta(\widetilde{\omega})\right] \ \leq \ \Delta(\widetilde{\omega}_i),$$

тоді норма оператора K задовольняє нерівність

$$\|K\| \ \leq \ |z|e^{2\beta B}\xi^{-1}.$$

Аналіз нелінійної нерівності не є дуже простим. Це зроблено повністю в [117], (стаття 3, додаток 2). Дотримуючись точно оцінок Жинібра, дійшли висновку, що існує стала ξ_0:

$$0 \ < \ \xi_0 \ \leq \ (2\pi\beta/m)^{d/2}e^{-1}(v_0 + C'(\beta))^{-1},$$

де v_0 — об'єм кулі радіусом c (c — стала в припущенні Жинібра) і $C'(\beta) = \beta e^{\beta B}\int \phi_-(x)dx + \beta\int_{|x|\geq c}\phi_+(x)dx$ ($\phi_\pm$ додатні та від'ємні частини потенціалу взаємодії), так що для всіх $\xi < \xi_0$ має найменший додатний розв'язок $\Delta(\widetilde{\omega})$, отриманий ітерацією і задовольняє всі умови 1), 2), 3) з $\Delta_0 = \xi(v_0 + C'(\beta))(m/2\pi\beta)^{d/2})$. Вибравши, наприклад, $\xi = \xi_* = 1/2\xi_0$ і помітивши $\Delta(\widetilde{\omega}) = \Delta_*(\widetilde{\omega})$, можна зробити висновок, що оператор K рівномірно (в Λ) обмежений:

$$\|K\| \ \leq \ C(\beta, z)m^{\frac{d}{2}}$$

у банаховому просторі G_{Δ_*}. Тоді для досить малої маси частинок m (за будь-якого фіксованого β, z, але $m = m(\beta, z)$) можна отримати, що $\|K\| < 1$ і рівняння (8.3.21) має єдиний розв'язок $\hat{\rho}^\Lambda$ і границя існує:

$$\hat{\rho} \ = \ \lim_{\Lambda\nearrow\mathbb{R}^d} \hat{\rho}^\Lambda$$

принаймні у слабкій $*$-топології на G_{Δ_*} і $\hat{\rho}$ задовольняє рівняння

$$\hat{\rho} \;=\; \zeta + K\hat{\rho}.$$

8.4. Кореляційні функції для випадку квантової статистики

8.4.1. ЕСГ для КС у термодинамічній границі Рівняння КЗ

Побудуємо евклідові кореляційні функції для КС. Для цього визначимо простір $\Omega^{com}(\Omega_\Lambda^{com})$ складених траєкторій і простір $\widetilde{\Omega}^{com}(\widetilde{\Omega}_\Lambda^{com})$ складених петель:

$$\Omega^{com} \;=\; \bigcup_{j\in\mathbb{N}} \Omega^{j\beta}, \qquad \Omega^{j\beta} := C([0,j\beta]\to\mathbb{R}^d)$$

Простори Ω_Λ^{com} і $\widetilde{\Omega}_\Lambda^{com}$ визначаються таким же чином. Послідовність $(\omega)_m = (\omega_1, j_1; ...; \omega_m, j_m)$ називають m-складовою послідовністю траєкторії, якщо кожні $\omega_k \in \Omega^{j_k\beta}, k = 1, ..., m, j_k \in \mathbb{N}$.

З огляду на оригінальні праці Жинібра [112–114, 117], запишемо вирази для евклідових кореляційних функцій:

$$\rho^\Lambda(\widetilde{\omega})_m = \frac{z^q}{Z_\Lambda}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\sum_{j_{m+1}=1}^{\infty}\varepsilon^{j_{m+1}-1}\frac{z^{j_{m+1}}}{j_{m+1}}\int_{\widetilde{\Omega}_\Lambda^{j_{m+1}\beta}}\sigma_\Lambda^{j_{m+1}\beta}(d\widetilde{\omega}_{m+1})$$
$$\cdots\sum_{j_{m+n}=1}^{\infty}\varepsilon^{j_{m+n}-1}\frac{z^{j_{m+n}}}{j_{m+n}}\int_{\widetilde{\Omega}_\Lambda^{j_{m+n}\beta}}\sigma_\Lambda^{j_{m+n}\beta}(d\widetilde{\omega}_{m+n})e^{-\widetilde{U}(\widetilde{\omega})_{m+n}}, \tag{8.4.22}$$

де $q = j_1 + ... + j_m$, $\varepsilon = \pm 1$ – відповідно статистика Бозе та Фермі, а вираз $\widetilde{U}(\widetilde{\omega})_N$ має вигляд (8.2.8)–(8.2.9) і задовольняє нерівність (8.2.10).

Мета полягає не тільки в дослідженні цих рівнянь для малої маси частинок, а й для побудови інтегрального подання для ρ^Λ і виведення рівнянь за допомогою інтегруваня за частинами. Отже, будуємо міру в просторі $\widetilde{\Omega}_\Lambda^{com}$. Так само будуємо міру $\sigma_\Lambda^{j\beta}(d\widetilde{\omega})$ на просторі $\widetilde{\Omega}_\Lambda^{j\beta}$. Для будь-якого $\Delta \in \mathcal{B}(\widetilde{\Omega}_\Lambda^{com})$ можна визначити

$$\hat{\sigma}_\Lambda^{\beta,z}(\Delta) \; = \; \sum_{j\geq 1} \frac{z^j}{j} \sigma_\Lambda^{j\beta}(\Delta_j),$$

де $\Delta_j \subset \widetilde{\Omega}_\Lambda^{j\beta}$ і $\Delta = \cup_{j\geq 1}\Delta_j$ як міра на $\widetilde{\Omega}_\Lambda^{com}$. Зрозуміло, що

$$\hat{\sigma}_\Lambda^{\beta,z}(\widetilde{\Omega}_\Lambda^{com}) = \sum_{j\geq 1} \frac{z^j}{j} \sigma_\Lambda^{j\beta}(\widetilde{\Omega}_\Lambda^{j\beta}) =$$
$$= |\Lambda| \sum_{j\geq 1} \frac{z^j}{j} \int W_{0,0}^{j\beta,m}(d\widetilde{\omega}) = \frac{|\Lambda|}{\lambda^d} \sum_{j\geq 1} \frac{z^j}{j^{1+d/2}} < \infty$$

для $z \leq 1$. Нагадаємо, що $\lambda = (2\pi\beta)^{\frac{d}{2}} m_0^{-\frac{d}{2}}$.

Простір конфігурацій є таким:

$$\hat{\Gamma}^\beta \; = \; \bigcup_{j\geq 1} \Gamma^{j\beta}, \quad \hat{\Gamma}_\Lambda^\beta \; = \; \bigcup_{j\geq 1} \Gamma_\Lambda^{j\beta}.$$

Міру Пуассона $\hat{\pi}_\Lambda^{z,\beta} = \pi_{\hat{\sigma}_\Lambda^{z,\beta}}$ на $\mathcal{B}(\hat{\Gamma}_\Lambda^\beta)$ визначимо як

$$\hat{\pi}_\Lambda^{z,\beta}(\Delta) \; = \; e^{-\hat{\sigma}_\Lambda^{z,\beta}(\widetilde{\Omega}_\Lambda^{com})} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\hat{\sigma}_\Lambda^\beta)^{\otimes n}(\Delta \cap \hat{\Gamma}_{\Lambda,n}^\beta), \tag{8.4.23}$$

де

$$\hat{\Gamma}_{\Lambda,n}^\beta \; = \; \bigcup_{j\geq 1} \Gamma_{\Lambda,n}^{j\beta}.$$

Тепер можна переписати кореляційні функції для випадку КС так само, як (8.3.16), але з мірами $\hat{\sigma}_\Lambda^{z,\beta}$ замість $z\sigma_\Lambda^\beta$, енергією $\widetilde{U}(\widetilde{\omega})_{m+n}$ і множником $\exp\{i\pi\theta(-\varepsilon)\sum_{k=m+1}^{m+n}(j_k - 1)\}$. Отже, з огляду на те, що

$$j(\widetilde{\omega}) \; = \; j, \qquad \text{якщо} \qquad \widetilde{\omega} \in \widetilde{\Omega}_\Lambda^{j\beta},$$

і (8.4.23), зрозуміло, що (8.4.22) можна записати як

$$\rho^{\Lambda}(\widetilde{\omega})_m \;=\; \Xi_{\Lambda}^{-1} \int_{\hat{\Gamma}_{\Lambda}^{\beta}} \hat{\pi}_{\Lambda}^{z,\beta}(d\gamma) e^{-\widetilde{U}((\widetilde{\omega})_m \cup \gamma) + i\pi\theta(-\varepsilon) j(\gamma)}. \tag{8.4.24}$$

Тут

$$\widetilde{U}(\gamma) \;=\; \sum_{\widetilde{\omega}\in\gamma} \widetilde{V}(\widetilde{\omega}) + \sum_{\{\widetilde{\omega},\widetilde{\omega}'\}\subset\gamma} \widetilde{V}(\widetilde{\omega},\widetilde{\omega}'), \tag{8.4.25}$$

де

$$\widetilde{V}(\widetilde{\omega}) = \int_0^{\beta} d\tau \sum_{1\le s<p\le j} \hat{\phi}(\widetilde{\omega}(\tau+(s-1)\beta)-\widetilde{\omega}(\tau+(p-1)\beta)), \widetilde{\omega}\in\widetilde{\Omega}_{\Lambda}^{j\beta},$$

$$\widetilde{V}(\widetilde{\omega},\widetilde{\omega}') \;=\; \sum_{k=1}^{j}\sum_{k'=1}^{j'} \int_0^{\beta} d\tau \hat{\phi}(\widetilde{\omega}(\tau+(k-1)\beta)-\widetilde{\omega}'(\tau+(k'-1)\beta)),$$

де $\widetilde{\omega}\in\widetilde{\Omega}_{\Lambda}^{j\beta}, \widetilde{\omega}'\in\widetilde{\Omega}_{\Lambda}^{j'\beta}, j, j'\in\mathbb{N}$, і

$$j(\gamma) \;=\; \sum_{\widetilde{\omega}\in\gamma} (j(\widetilde{\omega})-1), j(\widetilde{\omega}) = j_k, \qquad \widetilde{\omega}\in\widetilde{\Omega}_{\Lambda}^{j_k\beta}.$$

Зауваження 8.4.5. *Враховуючи умову стійкості, яку для квантового випадку можна записати у формі*

$$\widetilde{U}(\widetilde{\omega}^m \cup \gamma) \;\ge\; -\beta B \sum_{k=1}^{m+|\gamma|} j_k = -\beta B \sum_{j\ge 1} j n_j,$$

де n_j *— кількість* j*-композитних циклів у конфігурації* $\widetilde{\omega}^m \cup \gamma$ *можна визначити, що формула правильна з* $ze^{\beta B} = e^{\beta(\mu+B)} < 1$. *Ця умова правильна для ідеального газу* ($\mu < 0, B = 0$).

Така конструкція дає змогу стверджувати, що для інтегрування за частини знову є формула (8.3.17), але з новою мірою інтенсивності $\hat{\sigma}_{\Lambda}^{z,\beta}$ замість $z\sigma_{\Lambda}^{\beta}$. Тому можна застосовувати ту саму техніку, щоб отримати наступне інтегральне рівняння для $\rho^{\Lambda}(\widetilde{\omega})_m$:

$$\begin{aligned}\rho^{\Lambda}(\widetilde{\omega})_m \;=\; & z^{j_1} e^{-\widetilde{V}(\widetilde{\omega}_1|(\widetilde{\omega})_k)} \times \\ & \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n}{n!} \int_{(\widetilde{\Omega}_{\Lambda}^{com})^n} (\hat{\sigma}_{\Lambda}^{\beta,\varepsilon})^{\hat{\otimes} n}(d\widetilde{\omega}')_n K_n(\widetilde{\omega}_1; (\widetilde{\omega}')_n) \rho^{\Lambda}((\widetilde{\omega})_m^{\hat{1}}, (\widetilde{\omega}')_n)\right],\end{aligned}$$

де

$$\widetilde{V}(\widetilde{\omega}_1 \mid (\widetilde{\omega})_k) \;=\; \widetilde{V}(\widetilde{\omega}_1) + \sum_{k=2}^{m} \widetilde{V}(\widetilde{\omega}_1, \widetilde{\omega}_k).$$

У випадку КС стикаємося з певною проблемою з відповідним вибором простору. Щоб пояснити це, слід поглянути на оцінку норми оператора K. Треба отримати нерівність $\|K\| < 1$(для ітераційної процедури рівняння (8.3.21)) за будь-яких фіксованих β і z (але для z з деяким обмеженням у випадку КС) і достатньо малої маси m потрібно вибрати $\xi \sim m^{-\alpha}$ з деяким $\alpha > 0$. Але в конструкції Жинібра ξ має бути достатньо маленьким, щоб забезпечити збіжність відповідного ряду за j ($\sum_{j \geq 1} \xi^j / j^{d/2} < \infty$), які фігурують у нормі оператора K. Тож слід дещо узагальнити вибір норми.

Використовуючи визначення міри Пуассона в Γ_{Λ}^{β} і вигляд кореляційних функцій Жинібра, можна визначити кореляційні функції ЕГМ:

$$\rho^{\Lambda}(\widetilde{\omega})_m \;=\; \Xi_{\Lambda}^{-1} \int_{\hat{\Gamma}_{\Lambda}^{\beta}} \hat{\pi}_{\Lambda}^{z,\beta}(d\gamma) e^{-\widetilde{U}((\widetilde{\omega})_m \cup \gamma) + i\pi\theta(-\varepsilon) j(\gamma)}, \qquad (8.4.26)$$

де

$$\Xi_{\varepsilon,\Lambda} \;=\; e^{-\hat{\sigma}_{\Lambda}^{\beta,z}(\widetilde{\Omega}_{\Lambda})} Z_{\varepsilon,\Lambda}.$$

Але ці кореляційні функції їм не відповідають у випадку побудови РМЩ. Їх потрібно дещо виправити. Це виправлення дуже просте. Потрібно розглянути функцію ρ^{Λ} не тільки на циклах

$\widetilde{\omega} \in \widetilde{\Omega}^{j\beta}$, а й як функції траєкторій ω з $\omega(0) \neq \omega(j\beta)$, тобто в просторі $\Omega^{j\beta}$. Це розширення можна побудувати за допомогою сім'ї лінійних операторів T_{y^m}, які визначаються через нелінійні оператори $P_{y_i}, i = 1, ..., m$:

$$\rho^{\Lambda}_{BS}(\omega)_m \;=\; \left(T_{y^m}\rho^{\Lambda}\right)(\omega)_m \;=\; \rho^{\Lambda}(P_{y_1}\widetilde{\omega}_1, ..., P_{y_m}\widetilde{\omega}_m),$$

Зауваження 8.4.6. *Кореляційні функції* (8.4.26) *дещо відрізняються від тих, що були введені Жинібром. Жинібр визначив функції для траєкторій, які набувають значень у* Λ. *Кореляційні функції* (8.4.26) *визначено на траєкторіях, які набувають свої значень у всьому просторі* $\mathbb{R}^d$, *але їх початкові точки повинні бути в* Λ. *Проте в термодинамічній границі обидві послідовності повинні збігатися через єдиність розв'язку ланцюга КЗ рівнянь, розв'язками яких вони є.*

8.4.2. ЕСГ для КС у термодинамічній границі. Кластерні розклади

Таким чином побудовано термодинамічну границю EGS для статистики Максвелла–Больцмана з використанням кластерного розкду. Загальна схема побудови кластерного розкду така сама, але у випадку КС слід ретельніше оцінювати кожен член у поданні графів-дерев. Проблема з'являється за рахунок додаткових факторіалів, які є наслідком додаткових сум.

Нехай $\mathcal{F}_M = \mathcal{F}_M(\widetilde{\Omega}^{\beta})$, що позначає клас усіх $\mathcal{B}(\widetilde{\Omega}^{\beta})$-вимірні функції

$$f \;: \widetilde{\Omega}^{\beta} \mapsto [-M, M],$$

такий, що $\operatorname{supp} f \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$.

Для будь-якого $f \in \mathcal{F}_M$, $M > 1$, такого, що $\operatorname{supp} f \subseteq \Lambda \in \L$, побудуємо перетворення Лапласа міри $G^{z,\beta}_{\Lambda}(\cdot \mid \varnothing)$:

$$L^{z,\beta}_{\Lambda}(f) := \int_{\hat{\Gamma}^{\beta}} e^{-\langle\gamma,f\rangle}\, G^{z,\beta}_{\Lambda}(d\gamma \mid \varnothing). \qquad (8.4.27)$$

Зауваження 8.4.7. *Для будь-якої* $\mathcal{B}(\widetilde{\Omega}^{\beta})$*-вимірної функції* $f_0 : \widetilde{\Omega}^{\beta} \mapsto [-M, M]$ *і будь-якого* $\Lambda \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ *функція*

$f(\widetilde{\omega}) = 1\!\!1_\Lambda(\widetilde{\omega}(0))f_0(\widetilde{\omega})$ належить $\mathcal{F}_M$. Отже, функції з $\mathcal{F}_M$ окремих точок у $\widetilde{\Omega}^\beta$, на яких перетворення Лапласа, міра ймовірності на яких $\hat{\Gamma}^\beta$ визначена однозначно, визначають міру.

Ураховуючи визначення стану Гіббса у скінченному об'ємі Λ, (8.4.27) можна записати так:

$$L_\Lambda^{z,\beta}(f) = \bigl(\Xi_\Lambda\bigr)^{-1} \int_{\hat{\Gamma}^\beta} \exp\Bigl[-\frac{1}{2}\,\widetilde{U}(\gamma_\Lambda; f)\Bigr]\,\hat{\pi}^{z,\beta}(d\gamma),$$

де

$$\widetilde{U}(\gamma; f) := 2\langle\gamma, f\rangle + \langle{:}\gamma^{\otimes 2}{:}, \widetilde{V}\rangle$$

і

$$\Xi_\Lambda := \Xi_\Lambda(\varnothing) = \int_{\Gamma^\beta} \exp\Bigl[-\frac{1}{2}\widetilde{U}(\gamma_\Lambda; 0)\Bigr]\hat{\pi}^{z,\beta}(d\gamma).$$

Сформулюємо основну теорему.

Теорема 8.1. *Нехай потенціал є таким, що умови (i) – (iv) у праці Жинібра виконано, тобто він є стійким, симетричним трансляційно-інваріантним й інтегровним. Тоді для будь-якого $0 < z < e^{-\beta B}$ і $\beta > 0$ існує $m_* > 0$ така, що для $m_0 < m_*$ існує термодинамічна границя, тобто евклідів стан Гіббса, що відповідає квантовим неперервним системам Бозе і Фермі з оберненою температурою β, активністю z і потенціалом $\hat{\phi}$.*

Доведення. Щоб довести теорему, покажемо, що $L_\Lambda^{z,\beta}(f)$ збігається при $\Lambda \nearrow \mathbb{R}^d$ до деякої функції $L^{z,\beta}(f)$, яка є Gâteaux-аналітичною в нулі.

Щоб довести збіжність $L_\Lambda^{z,\beta}(f)$, введемо функцію

$$\Phi_\Lambda^{z,\beta}(X; \delta f) := \begin{cases} (\Xi_\Lambda)^{-1} \int\limits_{\hat{\Gamma}^\beta} e^{-\frac{1}{2}\widetilde{U}(\gamma_{\Lambda\setminus X};\delta f)}\hat{\pi}^{z,\beta} \quad (d\gamma), & \text{якщо } X \subset \Lambda, \\ 0 & \text{в іншому випадку} \end{cases}$$

і покажемо, що поточково відносно X і рівномірно щодо

$$\delta \in O(\rho) := \{\delta \in \mathbb{C} \mid |\delta| < \rho\}$$

вона збігається до деякої функції $\Phi^{z,\beta}(\cdot;\delta f)$ для деяких $\rho > 0$. Оскільки функція $\Phi_\Lambda^{z,\beta}(X;\delta f)$ є аналітичною за δ, аналітичність функції $\Phi^{z,\beta}(X;\delta f)$ буде наслідком, бо

$$\Phi_\Lambda^{z,\beta}(\varnothing;f) = L_\Lambda^{z,\beta}(f).$$

Але спочатку потрібно побудувати кластерний розклад для функції $\Phi_\Lambda^{z,\beta}$. Для цього розглянемо розбиття $\mathfrak{D}$ простору $\mathbb{R}^d$, що складається з одиничних кубиків $\{\Delta\}$, які є напіввідкриті та напівзакриті, так, що вони не перетинаються. Для будь-якого $\widetilde{X} \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ підмножину в $\mathfrak{D}$, яка складається з кубиків, що знаходяться в $\widetilde{X}$, позначимо $\mathfrak{D}_{\widetilde{X}},$.

Для будь-якого $X \subset \Lambda$ і довільного $X_1 \in \mathfrak{D}_\Lambda$ визначимо $\Lambda' := \Lambda\backslash(X\backslash X_1) = (\Lambda\backslash X)\cup X_1$ і врахуємо всі можливі послідовності множин $\mathfrak{Y}_\mathfrak{n} = \{\mathfrak{Y}_1, \ldots, \mathfrak{Y}_\mathfrak{n}\}$ і $\mathfrak{X}_\mathfrak{n} = \{\mathfrak{X}_1, \ldots, \mathfrak{X}_\mathfrak{n}\}$, $n = 1, \ldots, |\Lambda'|$, які будуються так, що $Y_1 = X_1$ і

$$X_k = X_{k-1} \cup Y_k, \quad Y_k \in \mathfrak{D}_{\Lambda'\backslash X_{k-1}}, \qquad k = 2, \ldots, |\Lambda'|.$$

Тепер використовуючи стандартну техніку (див. розд. 3.) відключення (крок за кроком) взаємодії між X_k і $\Lambda\backslash X_k$(або $\widetilde{X}\backslash X_k$) і формулу (3.3.8.), отримуємо

$$\begin{aligned}\Phi_\Lambda^{z,\beta}(X \setminus X_1;\delta f) = {} & K_1(X_1;\delta f)\Phi_\Lambda^{z,\beta}(X \cup X_1;\delta f) + \\ & + \sum_{n=2}^{|\Lambda'|} \sum_{2,\ldots,n}^{\Lambda'} K_n(\mathfrak{X}_n;\delta f)\Phi_\Lambda^{z,\beta}(X \cup X_n;\delta f), \quad (8.4.28)\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}K_n(\mathfrak{X}_n;\delta f) = {} & (-1)^{n-1} \int_0^1 (ds)^{n-1} \int_{\hat{\Gamma}^\beta} \prod_{j=2}^{n} \Bigg(\sum_{i=1}^{j-1} s_i \cdots s_{j-2} \widetilde{U}(\gamma_{Y_i}, \gamma_{Y_j}) \Bigg) \times \\ & \times \exp\Big[-\frac{1}{2}\, \widetilde{U}_{X_n}(\gamma;\delta f;\mathfrak{X}_{n-1};(s)_{n-1}^1) \Big] \hat{\pi}^{z,\beta}(d\gamma)\end{aligned}$$

(8.4.29)

з

$$\widetilde{U}_{X_n}\big(\gamma;\delta f;\mathfrak{X}_{n-1};(s)^1_{n-1}\big) = \sum_{i=1}^{n}\widetilde{U}(\gamma_{Y_i};\delta f)+ \\ + \sum_{1\le i<j\le n} s_i\cdots s_{j-1}\widetilde{U}(\gamma_{Y_i},\gamma_{Y_j})$$

і

$$\widetilde{U}\big(\gamma_{Y_i};\gamma_{Y_j}\big) = \sum_{\widetilde{\omega}\in\gamma_{Y_i},\widetilde{\omega}'\in\gamma_{Y_j}} \widetilde{V}(\widetilde{\omega},\widetilde{\omega}').$$

У (8.4.28) використано таке позначення:

$$\sum_{2,\dots,k}^{\Lambda'} = \sum_{Y_k\in\mathfrak{D}_{\Lambda'\setminus X_{k-1}}} \cdots \sum_{Y_3\in\mathfrak{D}_{\Lambda'\setminus X_2}} \sum_{Y_2\in\mathfrak{D}_{\Lambda'\setminus X_1}}, \qquad 2\le k\le|\Lambda'|.$$

Змінюючи порядок додавання та множення в (8.4.29) цей вираз можна записати у формі зручнішій для подальших оцінок:

$$K_n(\mathfrak{X}_n;\delta f) = \sum_{\eta:|\eta|=n}(-1)^{n-1}\int_0^1 (ds)^{n-1}\prod_{i=2}^{n}(s_{\eta(i)}\cdots s_{i-2})\times \\ \times\int_{\hat{\Gamma}^\beta}\prod_{i=2}^{n}\widetilde{U}(\gamma_{Y_{\eta(i)}},\gamma_{Y_i})\exp\left[-\frac{1}{2}\,\widetilde{U}_{X_n}\big(\gamma;\delta f;\mathfrak{X}_{n-1};(s)^1_{n-1}\big)\right]\hat{\pi}^{z,\beta}(d\gamma),$$

де $\sum\limits_{\eta:|\eta|=n}$ означає підсумовування за усіма граф-деревами з n вершинами, тобто над усіма функціями $\eta:\{2,\dots,n\}\mapsto\{1,\dots,n-1\}$ так, що $\eta(i)<i$ для всіх $i=2,\dots,n$.

Стратегія доведення є наступною. Використання розкладу (8.4.28) дає можливість отримати для функції $\Phi_\Lambda^{z,\beta}(X;\delta f)$ операторне рівняння в деякому банаховому просторі. Потім, використовуючи таку саму процедуру що й для аналізу рівнянь КЗ, будуємо граничну функцію $\Phi^{z,\beta}(X) = \Phi^{z,\beta}(X;\delta f)$ як розв'язок цих рівнянь у термодинамічній границі

$$\Phi_\Lambda^{z,\beta}(X) = \frac{\Phi_\Lambda^{z,\beta}(X \setminus \Delta_X) - \sum\limits_{n=2}^{|\Lambda'|} \sum\limits_{2,\dots,n}^{\Lambda'} K_n(\mathfrak{X}_n;\delta f)\Phi_\Lambda^{z,\beta}(X \cup X_n)}{K_1(X_1;\delta f)}.$$

Визначимо оператор

$$(Q(\delta f)\Phi)(X) = \frac{\Phi(X \setminus \Delta_X) - \sum\limits_{n=2}^{\infty} \sum\limits_{2,\dots,n}^{\mathbb{R}^d \setminus X} K_n(\mathfrak{X}_n;\delta f)\Phi(X \cup X_n)}{K_1(\Delta_X;\delta f)},$$

якщо $X \neq \varnothing$ і $(Q(\delta f)\Phi)(\varnothing) = 0$.

У банаховому просторі $\mathcal{B}_\alpha$ функцій $\Phi = \Phi(X)$ з нормою

$$\|\Phi\|_\alpha = \sup_{X \subset \mathbb{R}^d} e^{-\alpha|X|}|\Phi(X)|$$

і $\alpha > 0$, які буде визначено далі, можна розглядати $\Phi_\Lambda^{z,\beta}(X;\delta f)$ як розв'язок такого операторного рівняння:

$$\Phi = \Phi_\Lambda^{z,\beta}(\varnothing;\delta f)\varkappa_\varnothing + \hat{\varkappa}_\Lambda Q(\delta f)\hat{\varkappa}_\Lambda \Phi, \qquad (8.4.30)$$

де для будь-якого $\widetilde{X} \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ – $\varkappa_{\widetilde{X}}$ означає характеристичну функцію всіх підмножин $\widetilde{X}$, тобто

$$\varkappa_{\widetilde{X}}(X) = \begin{cases} 1, & X \subset \widetilde{X}, \\ 0 & \text{в іншому випадку,} \end{cases}$$

а $\hat{\varkappa}_{\widetilde{X}}$ — оператор множення на $\varkappa_{\widetilde{X}}$.

Оцінимо норму $Q(\delta f)$ у $\mathcal{B}_\alpha$ і покажемо, що, вибираючи m_* і ρ достатньо малими і α достатньо великим, її можна зробити менше ніж деяка стала $C < 1$ для всіх $m_0 < m_*$ і $|\delta| < \rho$:

$$\|Q(\delta f)\| \leq \sup_{\|\Phi\|_\alpha = 1} \sup_{X \subset \mathbb{R}^d} \frac{e^{-\alpha|X|}}{|K_1(\Delta_X; \delta f)|} \Big[|\Phi(X \setminus \Delta_X)| +$$
$$+ \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{2,\ldots,n}^{\mathbb{R}^d \setminus X} |K_n(\mathfrak{X}_n; \delta f)| \, |\Phi(X \cup X_n)| \Big] \leq$$
$$\leq 2 \Big[e^{-\alpha} + \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{2,\ldots,n}^{\mathbb{R}^d} |K_n(\mathfrak{X}_n; \delta f)| e^{\alpha(n-1)} \Big].$$

Тут використано той факт, що внаслідок аналітичності $K_1(\Delta_X; \delta f)$ за δ і нерівності

$$K_1(\Delta_X; 0) = \int_{\hat{\Gamma}^\beta} e^{-\frac{1}{2} \langle \gamma_{\Delta_X}^{\otimes 2}, \widetilde{V} \rangle} \hat{\pi}^{z,\beta}(d\gamma) \geq e^{-c(z)\lambda^{-d}},$$

де

$$c(z) = \sum_{j \geq 1} \frac{z^j}{j^{d/2+1}} \quad i \quad \lambda = (\frac{m_0}{2\pi\beta})^{1/2},$$

завжди можна знайти (за фіксованними $\beta > 0$ і $z < 1$) достатньо малі ρ і m_0 такі, що $K_1(\Delta_X; \delta f) \geq 1/2$ для всіх $\delta \in O(\rho)$. Тоді маємо

$$\sum_{2,\ldots,n}^{\mathbb{R}^d} |K_n(\mathfrak{X}_n; \delta f)| \leq \sum_{\eta: |\eta| = n} \int_0^1 (ds)^{n-1} \prod_{i=2}^{n} (s_{\eta(i)} \cdots s_{i-2}) \times$$
$$\times \sum_{2,\ldots,n}^{\mathbb{R}^d} \int_{\hat{\Gamma}^\beta} \hat{\pi}_{X_n}^{z,\beta}(d\gamma) \prod_{i=2}^{n} |\widetilde{U}(\gamma_{Y_{\eta(i)}}, \gamma_{Y_i})| e^{-\frac{1}{2} \widetilde{U}_{X_n} \left(\gamma; (\Re\delta) f; \mathfrak{X}_{n-1}; (s)_{n-1}^1 \right)},$$

де $\Re\delta$ позначає дійсну частину $\delta \in \mathbb{C}$.

Зазначаючи, що для будь-якого $\widetilde{X} \supset X_n$ фактор $U_{\widetilde{X}}\big(\gamma; \delta f; \mathfrak{X}_n; (s)_n^1\big)$ рекурсивно задано формулою

$$\widetilde{U}_{\widetilde{X}}\big(\gamma; \delta f; \mathfrak{X}_n; (s)_n^1\big) = (1 - s_n)\big[\widetilde{U}_{X_n}\big(\gamma; \delta f; \mathfrak{X}_{n-1}; (s)_{n-1}^1\big) +$$
$$+ \widetilde{U}(\gamma_{\widetilde{X} \setminus X_n}; \delta f)\big] + s_n \widetilde{U}_{\widetilde{X}}\big(\gamma; \delta f; \mathfrak{X}_{n-1}; (s)_{n-1}^1\big),$$

де $\widetilde{U}_{X'}(\gamma;\delta f;\mathfrak{X}_0;s_0) := \widetilde{U}(\gamma_{X'};\delta f)$. Окрім того, враховуючи нерівність

$$\widetilde{U}_{X'}\big(\gamma;(\Re\delta)f\big) \geq -(2\beta B+\rho M)\sum_{\widetilde{\omega}\in\gamma} j(\widetilde{\omega})$$

для всіх $X' \in \text{Ł}$, $\delta \in O(\rho)$ і $f \in \mathcal{F}_M$, за індукцією виводимо, що

$$\widetilde{U}_{\widetilde{X}}\big(\gamma;(\Re\delta)f;\mathfrak{X}_{n-1};(s)_{n-1}^{1}\big) \geq -(2\beta B+\rho M)\sum_{\widetilde{\omega}\in\gamma} j(\widetilde{\omega}).$$

Використовуючи те, що для будь-яких $X', X'' \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ виконується нерівність

$$\big|\widetilde{U}(\gamma_{X'},\gamma_{X''})\big| = \big|\langle\gamma_{X'}\otimes\gamma_{X''},\widetilde{V}\rangle\big| \leq \langle\gamma_{X'}\otimes\gamma_{X''},|\widetilde{V}|\rangle,$$

отримуємо

$$\int_{\hat{\Gamma}^{\beta}}\hat{\pi}^{z,\beta}_{X_n}(d\gamma)\prod_{i=2}^{n}|\widetilde{U}(\gamma_{Y_{\eta(i)}},\gamma_{Y_i})|e^{-\frac{1}{2}\widetilde{U}_{X_n}(\gamma;(\Re\delta)f;\mathfrak{X}_{n-1};(s)_{n-1}^{1})} \leq$$

$$\leq e^{-nc(z)\lambda^{-d}}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\int_{(\widetilde{\Omega}^{com}_{X_n})^{\otimes k}}\prod_{l=1}^{k}(\hat{\sigma}^{\beta,z'}_{X_n}(d\widetilde{\omega}_l)\prod_{i=2}^{n}|\widetilde{U}(\gamma_{Y_{\eta(i)}},\gamma_{Y_i})| \leq$$

$$\leq \exp\big[n\lambda^{-d}\big(c(z')-c(z)\big)\big]\int_{\hat{\Gamma}^{\beta}_{X_n}}\hat{\pi}^{z',\beta}_{X_n}(d\gamma)\prod_{i=2}^{n}\langle\gamma_{Y_{\eta(i)}}\otimes\gamma_{Y_i},|\widetilde{V}|\rangle,$$

де $z' := ze^{\beta B+\rho M} < 1$ і для $\widetilde{U}(\gamma_{Y_{\eta(i)}},\gamma_{Y_i})$ у другому рядку зберігається те саме позначення, але воно означає таку суму:

$$\sum_{\widetilde{\omega}\in\widetilde{\Omega}^{com}_{Y_{\eta(i)}},\widetilde{\omega}'\in\widetilde{\Omega}^{com}_{Y_i}}\widetilde{V}(\widetilde{\omega},\widetilde{\omega}').$$

Як випливає з леми 2.3 праці [147]

$$\int_{\hat{\Gamma}^{\beta}_{X_n}}\hat{\pi}^{z',\beta}_{X_n}(d\gamma)\prod_{i=2}^{n}\langle\gamma_{Y_{\eta(i)}}\otimes\gamma_{Y_i},|\widetilde{V}|\rangle = \sum_{\xi}\mathbb{E}^{z',n}_{\widetilde{\omega}}(\xi)\Big[\prod_{i=2}^{n}|\widetilde{V}_{Y_{\eta(i)},Y_i}(\widetilde{\omega}_i,\widetilde{\omega}'_i)|\Big],$$

де для довільних $X', X'' \subset \Lambda$

$$\widetilde{V}_{X',X''}(\omega', \omega'') := \widetilde{V}(\omega', \omega'')\chi_{\Omega^{\beta}_{X'}}(\omega')\chi_{\Omega^{\beta}_{X''}}(\omega''),$$

ξ у сумі пробігає всі можливі комбінації ланцюгів, а $\mathbb{E}_{\widetilde{\omega}}^{z',n}(\xi)$ позначає інтегрування за мірою $\hat{\sigma}^{\beta,z'}(d\widetilde{\omega}_i)$. До $\widetilde{\omega}_i$-змінних, до яких приєднується комбінація ланцюжків ξ. Очевидно, будь-який ланцюжок з'єднання $\widetilde{\omega}_i$-змінних з різних $\widetilde{\Omega}^{\beta}_{Y_i}$-множин дасть нуль, тому підсумовування виконується фактично за всіма комбінаціями ланцюжків ξ', які з'єднують $\widetilde{\omega}_i$-змінні з тієї самої $\widetilde{\Omega}^{\beta}_{Y_i}$-множини:

$$\int_{\hat{\Gamma}^{\beta}_{X_n}} \hat{\pi}^{z',\beta}_{X_n}(d\gamma)\prod_{i=2}^{n}\langle\gamma^{\otimes 2}, |\widetilde{V}_{Y_{\eta(i)},Y_i}|\rangle = \sum_{\xi'}\mathbb{E}_{\widetilde{\omega}}^{z',n}(\xi')\left[\prod_{i=2}^{n}|\widetilde{V}_{Y_{\eta(i)},Y_i}(\widetilde{\omega}_i, \widetilde{\omega}'_i)|\right].$$

Насправді суми за ξ означають суму за всіма можливими моментами міри $\hat{\pi}^{z',\beta}(d\gamma)$. Моменти $\int \hat{\pi}^{z',\beta}(d\gamma)\langle\gamma_{Y_1}, f_1\rangle\langle\gamma_{Y_2}, f_2\rangle = 0$ для $Y_1 \cap Y_2 = \varnothing$ і з огляду на цей факт з'являється сума за ξ'. Як результат можна записати, що

$$\sum_{2,\dots,n}^{\mathbb{R}^d}|K_n(\mathfrak{X}_n;\delta f)| \le \sum_{\eta:|\eta|=n}\int_0^1\cdots\int_0^1 ds_1\cdots ds_{n-1}\prod_{i=2}^{n}(s_{\eta(i)}\cdots s_{i-2})\times$$
$$\times\, e^{n\lambda^{-d}[c(z')-c(z)]}\sum_{\xi'}\sum_{2,\dots,n}^{\mathbb{R}^d}\mathbb{E}_{\widetilde{\omega}}^{z',n}(\xi')\left[\prod_{i=2}^{n}|\widetilde{V}_{Y_{\eta(i)},Y_i}(\widetilde{\omega}_i, \widetilde{\omega}'_i)|\right]. \tag{8.4.31}$$

Тоді

$$\sum_{2,\dots,n}^{\mathbb{R}^d}\mathbb{E}_{\widetilde{\omega}}^{z',n}(\xi')\left[\prod_{i=2}^{n}|\widetilde{V}_{Y_{\eta(i)},Y_i}(\widetilde{\omega}_i, \widetilde{\omega}'_i)|\right] = \int_0^{\beta}\dots\int_0^{\beta} d\tau_2\cdots d\tau_n\times$$
$$\times\sum_{2,\dots,n}^{\mathbb{R}^d}\mathbb{E}_{(x,\hat{\omega})}^{z',n}(\xi')\left[\prod_{i=2}^{n}\chi_{Y_{\eta(i)}}(x_i)\chi_{Y_i}(x'_i)\Big|\sum_{k_i,k'_i}^{j_i,j'_i}\hat{v}(x_i - x'_i + \hat{\omega}_i(t_i^{k_i}) - \hat{\omega}'_i(t_i^{k'_i}))\Big|\right] \tag{8.4.32}$$

з $t_i^l = \tau_i + (l-1)\beta$. Враховуючи, що η є деревоподібним графом, для довільних $\tau_2, \ldots, \tau_n \in [0, \beta]$ і ξ' маємо

$$\sum_{2,\ldots,n}^{\mathbb{R}^d} \mathbb{E}_{(x,\hat{\omega})}^{z',n}(\xi') \left[X_2^n(x,x') \left| \sum_{k_i,k_i'}^{j_i,j_i'} V^{k_i,k_i'}(x_i,x_i') \right| \right] =$$

$$= \sum_{2,\ldots,n-1}^{\mathbb{R}^d} \mathbb{E}_{(x,\hat{\omega})}^{z',n}(\xi') \left[X_2^{n-1}(x,x') \left| \sum_{k_i,k_i'}^{j_i,j_i'} V^{k_i,k_i'}(x_i,x_i') \right| \times \right.$$

$$\left. \times \sum_{Y_n \in \mathfrak{D}_{\mathbb{R}} \setminus \mathbb{X}_{\ltimes - \nVdash}} X_n^n(x,x') \left| \sum_{k_i,k_i'}^{j_i,j_i'} V^{k_i,k_i'}(x_i,x_i') \right| \right] \leq$$

$$\leq \sum_{2,\ldots,n-1}^{\mathbb{R}^d} \mathbb{E}_{(x,\hat{\omega})}^{z',n-1}(\xi') \left[X_2^{n-1}(x,x') \left| \sum_{k_i,k_i'}^{j_i,j_i'} V^{k_i,k_i'}(x_i,x_i') \right| \right] \times$$

$$\times \int_{Y_n} dx_n \sum_{j_n' \geq 1} \frac{z'^{j_n'}}{j_n'} \sum_{k_n,k_n'}^{j_n,j_n'} \int_{\widetilde{\Omega}_0^{j_n'\beta}} W_{0,0}^{j_n'\beta,m}(d\hat{\omega}_n') \int_{\mathbb{R}^d} dx' \left| V^{k_i,k_i'}(x_i,x_i') \right|,$$

$$\|\hat{v}\|_{L^1} \sum_{2,\ldots,n-1}^{\mathbb{R}^d} \mathbb{E}_{(x,\hat{\omega})}^{z',n}(\xi') \left[X_2^{n-1}(x,x') \left| \sum_{k_i,k_i'}^{j_i,j_i'} V^{k_i,k_i'}(x_i,x_i') \right| \right] \times$$

$$\times j_{Y_{\eta(n)}}(\widetilde{\omega}_n) j_{Y_n}(\widetilde{\omega}_n') \leq \cdots \leq \left(\|\hat{v}\|_{L^1} \right)^{n-1} \mathbb{E}_{\widetilde{\omega}}^{z',n}(\xi') \left[\prod_{i=2}^{n} j_{Y_{\eta(i)}}(\widetilde{\omega}_i) j_{Y_i}(\widetilde{\omega}_i') \right],$$

де $X_l^k(x,x') := \prod_{i=l}^k \chi_{Y_{\eta(i)}}(x_i) \chi_{Y_i}(x_i')$,

$$V^{k_i,k_i'}(x_i,x_i') := \hat{v}(x_i - x_i' + \hat{\omega}_i(t_i^{k_i}) - \hat{\omega}_i'(t_i^{k_i'})),$$

$j_{Y_i}(\widetilde{\omega}) = \chi_{Y_i}(x) j(\widetilde{\omega}) = \chi_{Y_i}(x) j$ для $\widetilde{\omega} \in \widetilde{\Omega}^{j\beta}$ і використано позначення (5.2.14).

Зауваження 8.4.8. *Після підсумовування за Y_n у 6-му рядку знову підставили $1 = \int_{Y_n} \chi_{Y_n}(x_n') dx_n'$ з $Y_n \subset \widetilde{X} \setminus X_{n-1}$, $|Y_n| = 1$, і використали визначення міри $\hat{\sigma}_{Y_n}^{z',\beta}$, тобто*

$$\sum_{j\geq 1}\frac{z'^j}{j}\int_{Y_n}dx'_n\int_{\widetilde{\Omega}_0^{j\beta}}W^{j\beta}_{0,0}(d\hat{\omega}'_n)j\chi_{Y_n}(x'_n) \;=\; \int_{\widetilde{\Omega}^{com}_{Y_n}}\hat{\sigma}^{z',\beta}_{Y_n}(d\widetilde{\omega}_n)j_{Y_n}(\widetilde{\omega}_n).$$

Знову враховуючи лему 2.3 із [147], можна отримати оцінку, яку переписано у формі такій, що для $Y_i \subset \mathfrak{D}_{\widetilde{X}}$ з $Y_i \cup Y_j = \emptyset$ для $i \neq j$ і $X_n = \cup Y_i$:

$$\sum_{2,\dots,n}^{\mathbb{R}^d}\int_{\hat{\Gamma}^\beta}\hat{\pi}^{z,\beta}_{X_n}(d\gamma)\prod_{i=2}^{n}\left|\widetilde{U}(\gamma_{Y_{\eta(i)}},\gamma_{Y_i})\right| \leq$$

$$\leq \left(\beta\|\hat{v}\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}\right)^{n-1}\sum_{\xi'}\mathbb{E}^{z',n}_{\widetilde{\omega}}(\xi')\left[\prod_{i=2}^{n}j_{Y_{\eta(i)}}(\widetilde{\omega}_i)j_{Y_i}(\widetilde{\omega}_i)\right] =$$

$$= \left(\beta\|\hat{v}\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}\right)^{n-1}\prod_{i=1}^{n}\int\hat{\pi}^{z',\beta}_{Y_i}(d\gamma)\langle\gamma, j_{Y_i}\rangle^{d^*_\eta(i)},$$

де $d^*_\eta(1) = d_\eta(1)$, а $d^*_\eta(i) = d_\eta(i) + 1$ для $i \geq 2$, а для графа η позначимо $d_\eta(i)$ кількість ребер, які входять в i-ту вершину, тобто $d_\eta(i) := \#\{\eta^{-1}(i)\}$.

Для завершення оцінки норми доведемо таке твердження:

Твердження 8.4.1. *Для будь-якого* $Y \in \Lambda$, $|Y| = 1$, $z' < 1$, *і функції* $j_Y(\widetilde{\omega})$

$$M_k = \int\hat{\pi}^{z',\beta}_{Y}(d\gamma)\langle\gamma, j_Y\rangle^k \;\leq\; z'\lambda^{-d}\frac{1}{(1-z')^k}k!.$$

Доведення. За індукцією для $k = 1$

$$\int_{\widetilde{\Omega}^{com}_Y}\hat{\sigma}^{z',\beta}_Y(\widetilde{\omega})j_Y(\widetilde{\omega}) = \sum_{j\geq 1}\frac{z'^j}{j}\int_Y dx\int_{\widetilde{\Omega}^{j\beta}}W^{j\beta,m}_{x,x}(d\widetilde{\omega})j \leq \lambda^{-d}\frac{z'}{1-z'}.$$

Нехай нерівність правильна для $k = 2, \dots, n-1$. Тоді, виконуючи інтегрування за частинами, отримуємо

$$\begin{aligned} M_n &= \int \hat{\pi}_Y^{z'\beta}(d\gamma)\langle\gamma, j_Y\rangle^n = \\ &= \int \hat{\pi}_Y^{z',\beta}(d\gamma) \int_{\widetilde{\Omega}^{com}} \hat{\sigma}_Y^{\beta,z'}(d\widetilde{\omega}) j_Y(\widetilde{\omega}) \big[\langle\gamma\cup\widetilde{\omega}, j_Y\rangle\big]^{n-1} = \\ &= \int_{\widetilde{\Omega}^{com}} \hat{\sigma}_Y^{\beta,z'}(d\widetilde{\omega}) j_Y(\widetilde{\omega}) \big[\langle\gamma, j_Y\rangle + j_Y(\widetilde{\omega})\big]^{n-1} = \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(n-1)!}{k!(n-k-1)!} \widehat{j_Y^{n-k}} M_k, \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} \widehat{j_Y^l} &= \int \hat{\sigma}_Y^{\beta,z'}(d\widetilde{\omega})\big(j_Y(\widetilde{\omega})\big)^l = \\ &= \sum_{j\geq 1} \frac{z'^j}{j} j^l \int_Y dx \int_{\widetilde{\Omega}_Y^{j\beta}} W_{x,x}^{j\beta,m}(d\widetilde{\omega}) \leq \lambda^{-d}(l-1)! \frac{z'}{(1-z')^l}. \end{aligned} \tag{8.4.33}$$

Нехай припущення виконується для $k \leq n-1$, тоді розглянемо випадок $k = n$. Ураховуючи, що $\lambda = (2\pi\beta/m_0)^{1/2}$ і $\sum_i d_\eta(i) = n-1$, маємо

$$\begin{aligned} &\sum_{\xi'} \sum_{2,\ldots,n}^{\mathbb{R}^d} \mathbb{E}_{\widetilde{\omega}}^{z',n}(\xi') \Big[\prod_{i=2}^{n} |\widetilde{V}_{Y_{\eta(i)},Y_i}(\omega_i, \omega_i')| \Big] \leq \\ &\qquad \leq \prod_{i=1}^{n-1} d_\eta(i)! \left(\beta^{1-d/2} z'(1-z')^{-2} m_0^{d/2} \|\hat{v}\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}\right)^{n-1}. \end{aligned} \tag{8.4.34}$$

Використовуючи це і оцінку Бетла–Федербуша [57, 58]

$$\sum_{\eta:|\eta|=n} \int_0^1 \cdots \int_0^1 ds_1 \cdots ds_{n-1} \prod_{i=2}^{n} (s_{\eta(i)} \cdots s_{i-2}) \prod_{i=1}^{n-1} d_\eta(i)! \leq 4^n,$$

отримаємо оцінку

$$\begin{aligned}\|Q(\delta f)\| \le 2\Big[e^{-\alpha} + \sum_{n=2}^{\infty} \big(4\exp[(\frac{m}{2\pi\beta})^{d/2}\big(c(z') - c(z)\big)]\big)^{n} \times \\ \times \big(\beta^{1-d/2} z'(1-z')^{-2} m^{d/2} e^{\alpha} \|\hat{v}\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}\big)^{n-1}\Big]\end{aligned}$$

з $z' = ze^{\beta B + \rho M}$.

Таким чином, для фіксованих β і $z < e^{-\beta B}$, для $\alpha > log 4$ можна знайти достатньо малі $m_* > 0$ і $\rho > 0$ такі, що для всіх $m_0 < m_*$ норма $Q(\delta f))$ менша або дорівнює $C < 1$ рівномірно для всіх $\delta \in O(r)$.

Тоді очевидно, що $\|\hat{\varkappa}_\Lambda Q(\delta f)\hat{\varkappa}_\Lambda\| \le C$, тому

$$\begin{aligned}\Phi_\Lambda^{z,\beta}(X;\delta f) = \big((\mathbf{1} - \hat{\varkappa}_{\boldsymbol{\Lambda}}\mathbf{Q}(\delta\mathbf{f})\hat{\varkappa}_{\boldsymbol{\Lambda}})^{-\mathbf{1}}\boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{\Lambda}}^{\mathbf{z},\beta}(\varnothing;\delta\mathbf{f})\varkappa_\varnothing\big)(\mathbf{X}) = \\ = \sum_{n=0}^{\infty} \big(\hat{\varkappa}_\Lambda Q(\delta f)\hat{\varkappa}_\Lambda\big)^{n} \Phi_\Lambda^{z,\beta}(\varnothing;\delta f)\varkappa_\varnothing(X). \quad (8.4.35)\end{aligned}$$

Завершення доведення теореми 8.4.1 таке саме, як у [147]. ■

Зауваження 8.4.9. *Доведено, що для достатньо малих* z *і* m_0 *рівняння* (8.4.30) *має єдиний розв'язок, представлений рядом* (8.4.35) *і який є евклідовою мірою Гіббса, визначеною для будь-якого обмеженого об'єму* Λ, *і має термодинамічну границю. На сьогодні основною проблемою є доведення, що гранична міра знову є гіббсовою.*

Список літератури

[1] Березанский Ю. М., Кондратьев Ю. Г. Спектральные методы в бесконечномерном анализе. Київ: Наукова думка, 1988. 680 с. – English translation: Berezansky Y. M., Kondratiev Y. G. Spectral methods in infinite-dimensional analysis. Kluwer Academic, Dordrecht, 1995.

[2] Березин Ф. Л., Синай Я. Г. Существование фазового перехода у решётчатого газам с притяжением между частицами. Труды московского математического общества. 1967. Т. 17. С. 197–212.

[3] Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.: Гостехиздат, 1946. 120 с. – English translation: Bogoliubov N. N. Problems of a dynamical theory in statistical physics. In: de Boer J., Uhlenbeck G. E. (eds.) Studies in Statistical Mechanics. North-Holland, Amsterdam, 1962. Vol. 1. P. 1–118.

[4] Боголюбов. Н. Н. Избранные труды в трёх томах. Киев: Наукова думка, 1970.

[5] Боголюбов. Н. Н., Хацет Б. И. О некоторых математических вопросах теории статистического равновесия. Доклады Академии наук СССР. 1949. Т. 66, № 3. С. 321–324.

[6] Болух В. А. Розклад Бріджеса–Федербуша для систем з посилено надстійкою взаємодією. Збірник праць Інституту математики НАН України. 2014. Т. 11, № 1. С. 153–165.

[7] Гельфанд И. М., Виленкин Н. Я. Обобщённые функции. Вып. 4. Некоторые применения гармонического анализа. Оснащенные гильбертовы пространства. М.: Физматгиз, 1961. 471 с. – English translation: Gelfand I. M., Vilenkin N. Ya. Generalized Functions. Academic Press, New York, London, 1968.

[8] Глимм Дж., Джаффе А. Математические методы квантовой физики. Подход с использованием функциональных интегралов; пер. с англ.; под ред. Р. А. Минлоса. М.: Мир, 1984. 448 с.

[9] Глимм Дж., Джаффе А., Спенсер Т. Разложение в ряд, связанное с приближением среднего поля. I, II. В кн: Евклидова квантовая теория поля. Марковский подход; сборник статей; пер. с англ.; под ред. Р. А. Минлоса. М.: Мир, 1978. С. 65–131.

[10] Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Наука, 1971. 1108 с.

[11] Гринберг Г. А. Избранные вопросы математической теории электрических и магнитных явлений. М.: Изд-во АН СССР, 1948.

[12] Добрушин Р. Л. Исследование условий асимптотического существования конфигурационного интеграла распределения Гиббса. Теория вероятностей и ее применения. 1964. Т. 9, вып. 4. С. 626–643.

[13] Добрушин Р. Л. Гиббсовские поля для решетчатых систем с попарным взаимодействием. Функциональный анализ и его приложения. 1968. Т. 2, вып. 4. С. 31–43.

[14] Добрушин Р. Л. Задачи единственности гиббсовского случайного поля и проблема фазовых переходов Функциональный анализ и его приложения. 1968. Т. 2, вып. 4. С. 44–57.

[15] Добрушин Р. Л. Описание случайного поля при помощи условных вероятностей и условия его регулярности. Теория вероятностей и ее применения. 1968. Т. 13, вып. 2. С. 201–229.

[16] Добрушин Р. Л. Гиббсовские поля. Общий случай. Функциональный анализ и его приложения. 1969. Т. 3, вып. 1. С. 27–35.

[17] Добрушин Р. Л. Задание системы случайных величин при помощи условных распределений. Теория вероятностей и ее применения. 1970. Т. 15, вып. 3. С. 469–497.

[18] Добрушин Р. Л., Минлос Р. А. Существование и непрерывность давления в классической статистической физике. Теория вероятностей и ее применения. 1967. Т. 12, вып. 4. С. 595–618.

[19] Добрушин Р., Синай Я., Сухов Ю. Динамические системы статистической механики. Динамические системы-2. Итоги науки и техники. Серия «Современные проблемы математики. Фундаментальные направления». М.: ВИНИТИ, 1985. С. 235–284.

[20] Єрмолаєв О. М., Рашба Г. І. Вступ до статистичної фізики і термодинаміки: Навчальний посібник. Харків: ХНУ, 2004. 516 с.

[21] Загородний А. Г., Усенко А. С., Якименко И. П. Равновесные функции распределения для ограниченных плазменно-молекулярных систем. Киев: Препринт ИТФ. 86—161Р. 1986. 49 с.

[22] Исмагилов Р. С. Об унитарных представлениях группы диффеоморфизмов пространства $\mathbb{R}^n$, $n \geq 2$. Математический сборник. 1975. Т. 98, вып. 1. С. 55–71.

[23] Колмогоров А. Н. Основные понятия теории вероятностей. М.: ОНТИ, 1936. 210 с.

[24] Конструктивная теория поля: Сборник статей. М.: Мир, 1977. 197 с.

[25] Майер Дж., Гепперт-Майер М. Статистическая механика. М.: Мир, 1980. 544 с.

[26] Малышев В. А., Минлос Р. А. Гиббсовские случайные поля. Метод кластерных разложений. М.: Наука, 1985. 288 с. — English translation: Malyshev V. A., Minlos R. A. Gibbs Random Fields: Claster expansions. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht; Boston; London, 1991.

[27] Маркушевич А. И. Теория аналитических функций, т. I. М.: Наука, 1967. 486 с.

[28] Минлос Р. А. Обобщённые случайные процессы и их расширение до меры. Труды Московского математического общества. 1959. Т. 8. С. 497–518.

[29] Минлос Р. А. Предельное распределение Гиббса. Функциональный анализ и его приложения 1967. Т. 1, вып. 2. С. 60–73.

[30] Минлос Р. А. Регулярность предельного распределения Гиббса. Функциональный анализ и его приложения. 1967. Т. 1, вып. 3. С. 40–53.

[31] Петренко С. М. Квазінеперервна апроксимація статистичних систем з багаточастинковою взаємодією. Науковий вісник НЛТУ України. Збірник науково-технічних праць. 2008. Т. 18. С. 287–296.

[32] Петренко С. М., Ребенко О. Л., Тертичний М. В. Про квазінеперервну апроксимацію в класичній статистичній механіці. Український математичний журнал. 2011. Т. 63, № 3. С. 369–384.

[33] Петрина Д. Я. Математические основы квантовой статистической механики. Непрерывные системы. Киев: Институт математики НАН Украины, 1995. 624 с. — English translation: Petrina D. Ya. Mathematical Foundations of Quantum Statistical Mechanics. Springer Netherlands, 1995.

[34] Петрина Д. Я., Герасименко В. И., Малышев П. В. Математические основы классической статистической механики. Киев: Наукова думка, 1985. 262 с. — English translation: Petrina D. Ya., Gerasimenko V. I., Malyshev P. V. Mathematical foundation of classical statistical mechanics. Continuous Systems. Gordon and Breach Science, New York; London; Paris, 1989. 281 p.

[35] Погорелов Ю. Г., Ребенко О. Л. Про віріальні розклади кореляційних функцій. Канонічний ансамбль. Український математичний журнал. 2023. Т. 75, № 5. С. 650–668.

[36] Радушкевич Л. В. Курс термодинамики . М.: Просвещение, 1971. 288 с.

[37] Ребенко О. Л. Основи сучасної теорії взаємодіючих квантованих полів. Київ: Наукова думка, 2007. 539 с. — English translation: Alexei L. Rebenko. Theory of Interacting Quantum Fields. De Gruyter Studies in Mathematics 39, 2012.

[38] Ребенко А. Л. О существовании дебаевского экранирования в ионно-дипольных классических системах. Доклады Академии наук СССР. 1982. Т. 267, № 6. С. 1350–1352.

[39] Ребенко А. Л. Евклидовая теория поля и ионно-дипольные системы классической статистической механики. Физика многочастичных систем. Киев: Наукова думка, 1983. Вып. 3. С. 77–108.

[40] Ребенко О. Л. Про зв'язок деяких підходів до розв'язання рівнянь Кірквуда–Зальцбурга. Український математичний журнал. 2021. Т. 73, № 3. С. 93–106.

[41] Ребенко О. Л. Нове найпростіше доведення формули Келі та зв'язок із рівняннями Кірквуда–Зальцбурга. Український математичний журнал. 2022. Т. 74, № 10. С. 1441–1444.

[42] Румер Ю. Б., Рывкин М. Ш. Статистическая физика и кинетика. М.: Наука, 1977. 552 с.

[43] Рюэль Д. Статистическая механика. Строгие результаты. М.: Мир, 1971. 368 с. – Ruelle D. Statistical Mechanics. Rigorous results. W.A. Benjamin inc., New York; Amsterdam, 1969.

[44] Стратонович Р. Л. Об одном методе вычисления квантовых функций распределения. Доклады Академии наук СССР. 1957. Т. 115, № 6. С. 1097–1100.

[45] ЮхновскиЙ И. Р., Головко М. Ф., Совьяк Е. Н. Экранированные потенциалы пространственно-неоднородных ион-молекулярных систем. Общая методика решения. Киев, 1982. 18 с. (Препринт ИТФ-82-159Р).

[46] Хацет Б. И. Асимптотичні розклади за степенями густини функції розподілу систем в стані статистичної рівноваги. Наукові записки Житомирського педагогічного інституту, фізико-математична серія. 1956. Т. 3. С. 113–138.

[47] Хацет Б. И. Деякі властивості функції розподілу систем в стані статистичної рівноваги. Наукові записки Житомирського педагогічного інституту, фізико-математична серія. 1956. Т. 3. С. 139–157.

[48] Хинчин А. Я. Математические основания статистической механики. М.; Л.: Гостехиздат, 1943. 324 с.

[49] Хуанг К. Статистическая механика. М.: Мир, 1966. 520 с.

[50] Эдвардс Р. Функциональный анализ (теория и приложения). М.: Мир, 1969. 1072 с.

[51] Albeverio S., Hoegh-Krohn R. Uniqueness of the physical vacuum and the Wightman functions in the infinite volume limit for some non polynomial interactions. Communications in Mathematical Physics. 1973. Vol. 30. P. 171–200.

[52] Albeverio S., Kondratiev Y., Kozitsky Y. Suppression of Critical Fluctuations by Strong Quantum Effects in Quantum Lattice System. Communications in Mathematical Physics. 1998. Vol. 194. P. 493–512.

[53] Albeverio S., Kondratiev Y. G., Minlos R. A., Rebenko A. L. Small-Mass Behavior of Quantum Gibbs States for Lattice Models with Unbounded Spins. Journal of Statistical Physics. 1998. Vol. 92. P. 1153–1172.

[54] Albeverio S., Kondratiev Yu. G., Röckner M. Analysis and geometry on configuration spaces. Journal of Functional Analysis. 1998. Vol. 154, № 2. P. 444–500.

[55] Albeverio S., Kondratiev Yu. G., Röckner M. Analysis and geometry on configuration spaces: The Gibbsian case. Journal of Functional Analysis. 1998. Vol. 157, № 1. P. 242–291.

[56] Basuev A. G. Theorem on the minimal specific energy for classical systems. Theoretical and Mathematical Physics. 1978. Vol. 37. P. 923–926.

[57] Battle G. A. A new combinatoric estimate for cluster expansions. Communications in Mathematical Physics. 1984. Vol. 94, № 1. P. 133–139.

[58] Battle G. A., Federbush P. A note on cluster expansions, tree graph identities, extra $1/N$ factors. Letters in Mathematical Physics. 1984. Vol. 8, № 1. P. 55–57.

[59] Baus M., Hansen J. Statistical mechanics of simple Coulomb systems. Physics Reports. 1980. Vol. 59, № 1. P. 1–94.

[60] Benfatto G., Gruber Ch., Martin Ph. A. Exact decay of correlations for infinite range continuous systems. Helvetica Physica Acta. 1984. Vol. 57. P. 63–85.

[61] Berezin F. A. Relationships between the correlation functions in classical statistical physics. Theoretical and Mathematical Physics. 1971. Vol. 3. P. 386–394.

[62] Bogolyubov N. N., Petrina D. Y., Khatset B. I. Mathematical description of the equilibrium state of classical systems on the basis of the canonical ensemble formalism. Theoretical and Mathematical Physics. 1969. Vol. 1. P. 194–212.

[63] Boluh Vira, Rebenko Alexei. Cell gas free energy as an approximation of the continuous model. Journal of Modern Physics. 2015. Vol. 6, № 2. P. 168–175.

[64] Borodachov S. V., Hardin D. P., Saff E. B. Asymptotics for discrete weighted minimal Riesz energy problems on rectifiable sets. Transactions of the American Mathematical Society. 2008. Vol. 360. P. 1559–1580.

[65] Born M., Green H. S. A general kinetic theory of liquids. Proceedings of the Royal Society of London. Series A. 1947. Vol. 188. P. 168–201.

[66] Bratteli O., Robinson D. W. Operator algebras and Quantum Statistical Mechanics. Vol. 2 (second edition). Springer-Verlag, Berlin, 1996.

[67] Bricmont J., Kuroda K., Lebowitz J. L. First order phase transitions in lattice and continuous systems: Extension of Pirogov-Sinai theory. Communications in Mathematical Physics. 1985. Vol. 101(4). P. 501–538.

[68] Brydges D. C. A rigorous approach to Debye screening in dilute classical coulomb systems. Communications in Mathematical Physics. 1978. Vol. 58. P. 313–350.

[69] Brydges D. C., Federbush P. The claster expansion in statistical mechanics. Communications in Mathematical Physics. 1976. Vol. 49. P. 233–246.

[70] Brydges D.C., Federbush P. A new form of Mayer expansion in classical statistical mechanics. Journal of Mathematical Physics. 1978. Vol. 19, № 10. P. 2064–2067.

[71] Brydges D. C., Federbush P. Debye screening. Communications in Mathematical Physics. 1980. Vol. 73. P. 197–246.

[72] Brydges D. C., Martin P. A. Coulomb Systems at Low Density: A Review. Journal of Statistical Physics. 1999. Vol. 96. P. 1163–1330.

[73] Campbell N. R. The study of discontinuous problem. Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. 1909. Vol. 15. P. 117–136.

[74] Campbell N. R. Discontinuities in light emission. Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. 1909. Vol. 15. P. 310–328.

[75] Castellano Claudio, Fortunato Santo, Loreto Vittorio. Statistical physics of social dynamics. Reviews of Modern Physics. 2009. Vol. 81, № 2. P. 591–646.

[76] Conache D., Daletskii A., Kondratiev Yu., Pasurek T. Gibbs Measures on Marked Configuration Spaces: Existence and Uniqueness. (Preprint, arxiv.org/abs/1503.06349v2).

[77] Debye P., Huckel E. Zur Theorie der Elektrolyte. Physikalische Zeitschrift. 1923. Vol. 24, № 9. P. 185–206.

[78] Descombes Xavier, Minlos Robert, Zhizhina Elena. Object Extraction Using a Stochasstic Birth-and-Death Dynamics in Continuum. Journal of Mathematical Imaging and Vision. 2009. Vol. 33. P. 347–359.

[79] Dobrushin R. L. Existence of phase transitions in models of a lattice gas. Proceedings of the Fifth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability. 1967. Vol. 3. P. 73–87.

[80] Dobrushin R. L. Gibbsian random fields for particles without hard core. Theoretical and Mathematical Physics. 1970. Vol. 4. P. 705–719.

[81] Dorlas T. C. Statistical Mechanics. Fundamentals and Model Solutions (Second Edition). CRC Press, 2021. 323 p.

[82] Dorlas T. C., Rebenko A. L., Savoie B. Correlation of clusters: partially truncated correlation functions and their decay. Journal of Mathematical Physics. 2020. Vol. 61, № 3. P. 033301-30.

[83] Duneau M., Iagolnitzer D., Souillard B. Decrease properties of truncated correlation functions and analyticity properties for classical lattices and continuous systems. Communications in Mathematical Physics. 1973. Vol. 31(3). P. 191–208.

[84] Duneau M., Iagolnitzer D., Souillard B. Strong cluster properties for classical systems with finite range interaction. Communications in Mathematical Physics. 1974. Vol. 35(4). P. 307–320.

[85] Duneau M., Souillard B. Cluster properties of lattices and continuous systems. Communications in Mathematical Physics. 1976. Vol. 47(2). P. 155–166.

[86] Dyson F. J., Lenard A. Stability of matter 1. Journal of Mathematical Physics. 1967. Vol. 8, № 3. P. 423–434.

[87] Edwards S. F. The statistical thermodynamics of a gas with long and short-range forces. Philosophical Magazine. 1959. Vol. 4. P. 1171–1182.

[88] Edwards S. F., Lenard A. Exact statistical mechanics of a one-dimensional system with Coulomb forces. II. The method of functional integration. Journal of Mathematical Physics. 1962. Vol. 3, № 4. P. 778–792.

[89] Federbush P. A new approach to the stability of matter problem. I. Journal of Mathematical Physics. 1975. Vol. 16, № 2. P. 347–351.

[90] Federbush P. A new approach to the stability of matter problem. II. Journal of Mathematical Physics. 1975. Vol. 16, № 3. P. 706–709.

[91] Federbush P. The semi-euclidean approach in statistical mechanics. I, II. Journal of Mathematical Physics. 1976. Vol. 17, № 2. P. 200–203; 204–207.

[92] Federbush P., Kennedy T. Surface effects in Debye screening. Communications in Mathematical Physics. 1985. Vol. 102. P. 361–423.

[93] Fernandez R., Procacci A. Cluster expansion for abstract polymer models. New bounds from an old approach. Communications in Mathematical Physics. 2007. Vol. 274(1). P. 123–140.

[94] Finkelshtein D., Kondratiev Y., Kutoviy O. Statistical dynamics of continuous systems: perturbative and approximative approaches. Arabian Journal of Mathematics. 2015. Vol. 4. P. 255–300.

[95] Finkelshtein D., Kondratiev Y., Kutoviy O., Lytvynov E. Binary jumps in continuum. I. Equilibrium processes and their scaling limits. Journal of Mathematical Physics. 2011. Vol. 52. P. 063304:1–25.

[96] Finkelshtein D., Kondratiev Y., Kutoviy O., Lytvynov E. Binary jumps in continuum. II. Non-equilibrium process and a Vlasov-type scaling limit. Journal of Mathematical Physics. 2011. Vol. 52. P. 113301:1–27.

[97] Fisher M. E. The Free Energy of a Macroscopic System. Archive for Rational Mechanics and Analysis. 1964. Vol. 17. P. 377–410.

[98] Fisher M. E., Ruelle D. The Stability of Many-Partical Systems. Journal of Mathematical Physics. 1966. Vol. 7. P. 260–270.

[99] Fivel D. Construction of unitary covariant S-matrixes defined by convergent perturbation series. Physical Review D. 1971. Vol. 4, № 6. P. 1653–1662.

[100] Fontaine J. R. Debye-Huckel limit of quantum coulomb systems. Communications in Mathematical Physics. 1986. Vol. 103. P. 241–257.

[101] Fowler R. H. Statistical Mechanics. The Theory of the Properties of Matter in Equilibrium. Cambridge: Univ. Press, 1929. 588 p.

[102] Fradkin E. S. Application of functional methods in quantum field theory and quantum statistics. Nuclear Physics. 1963. Vol. 49, № 4. P. 624–640.

[103] Fritz J., Dobrushin R. L. Non-Equilibrium Dynamics of Two-dimensional Infinite Partical Systems with a Singular Interaction. Communications in Mathematical Physics. 1977. Vol. 57. P. 67–81.

[104] Frohlich J. Classical and quantum statistical mechanics in one and two dimensions: Two-component Yukawa and Coulomb systems. Communications in Mathematical Physics. 1976. Vol. 47. P. 233–268.

[105] Garsia A. M. Continuity properties of Gaussian processes with multidimensional time parameter. Proceedings of the Sixth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability. Vol. II. Univ. California Berkeley Press. Berkeley, CA, 1972. P. 369–374.

[106] Georgii H. O. Canonical and grand canonical Gibbs states for continuum systems. Communications in Mathematical Physics. 1976. Vol. 48. P. 31–51.

[107] Georgii H. O., Zessin H. Large deviations and the maximum entropy principle for marked point random fields. Probability Theory and Related Fields. 1993. Vol. 96. P. 177–204.

[108] Georgii H. O., Zagrebnov V. A. On the interplay of magnetic and molecular forces in Curie–Weiss ferrofluid models. Journal of Statistical Physics. 1998. Vol. 93, № 1/2. P. 79–107.

[109] Gibbs W. Elementary Principles in Statistical Mechanics. Yale Univ. Press, 1902.

[110] Gielerak R., Rebenko A. L. Poisson Field Representation in the Statistical Mechanics of Continuous Systems. Operator Theory: Advances and Applications. 1994. Vol. 70. P. 219–226.

[111] Gielerak R., Rebenko A. L. On the Poisson Integrals Representation in the Classical Statistical Mechanics of Continuous Systems. Journal of Mathematical Physics. 1996. Vol. 37. P. 3354–3374.

[112] Ginibre J. Reduced density matrices of quantum gases. I. Limit of infinite volume. Journal of Mathematical Physics. 1965. Vol. 6. P. 238–251.

[113] Ginibre J. Reduced density matrices of quantum gases. II. Cluster property. Journal of Mathematical Physics. 1965. Vol. 6. P. 252–262.

[114] Ginibre J. Reduced density matrices of quantum gases. III. Hard-core potentials. Journal of Mathematical Physics. 1965. Vol. 6. P. 1432–1446.

[115] Ginibre J. On the Asymptotic Exactness of the Bogoliubov Approximation for Many Boson Systems. Communications in Mathematical Physics. 1968. Vol. 8. P. 26–51.

[116] Ginibre J. General formulation of Griffith's inequalities. Communications in Mathematical Physics. 1970. Vol. 16, № 4. P. 310–328.

[117] Ginibre J. Some Applications of functional integration in Statistical Mechanics, and Field Theory. In: C. de Witt and R. Stora (Eds.). Gordon and Breach, New York, 1971. P. 327–427.

[118] Ginibre J., Grossmann A., Ruelle D. Condensation of Lattice Gases. Communications in Mathematical Physics. 1966. Vol. 3. P. 187–193.

[119] Glimm J., Jaffe A., Spencer T. Convergent Expansion about Mean Field Theory I, II. Annals of Physics. 1976. Vol. 101. P. 610–630; 631–669.

[120] Gonchar N. S. Correlation Functions of Some Continuous Model Systems and Description of Phase Transitions. Physics Reports. 1989. Vol. 172, № 5. P. 175–337.

[121] Gorunovich V. V. Debye-Huckel limit for charge-symmetric quantum-statistical Coulomb systems. Theoretical and Mathematical Physics. 1991. Vol. 88. P. 858–866.

[122] Gorunovich V. V., Skripnik V. I. Remark on the mean field limit for multicomponent Gibbs systems with neutrality condition. Theoretical and Mathematical Physics. 1991. Vol. 86. P. 178–181.

[123] Groeneveld J. Estimation methods for Mayer's graphical expansions. PhD diss., Holland-Breumelhof (Grote Wittenburgerstraat 97), 1967.

[124] Griffiths Robert B. Peierls Proof of Spontaneous Magnetization in a Two-Dimensional Ising Ferromagnet. Physical Review. 1964. Vol. 136, 2A. P. A437–A439.

[125] Gruber Ch., Kunz H. General properties of polymer systems. Communications in Mathematical Physics. 1971. Vol. 22(2). P. 133–161.

[126] Gruber Ch., Tamura H., Zagrebnov V. A. Berezinskii–Kosterlitz–Thouless order in two-dimensional O(2)-ferrofluid. Journal of Statistical Physics. 2002. Vol. 106, № 5/6. P. 875–893.

[127] Guerra F., Rosen L., Simon B. The $P(\varphi)_2$ Euclidean Quantum Field Theory as Classical Statistical Mechanics. Annals of Mathematics. 1975. Vol. 101, № 1. P. 111–189.

[128] Hardin D. P, Saff E. B. Discretizing Manifolds via Minimum Energy Points. Notices of the AMS. 2004. Vol. 51(10). P. 1186–1184.

[129] Hardin D. P, Saff E. B. Minimal Riesz energy point configurations for rectifiable d-dimensional manifolds. Advances in Mathematics. 2005. Vol. 193. P. 174–204.

[130] van Hove L. Quelques proprietes generales de l’integrale de configuration d’un system de particules avec interaction. Physica. 1949. Vol. 15, № 5. P. 951–961.

[131] Iagolnitzer D., Souillard B. On the analyticity in the potential in Classical Statistical Mechanics. Communications in Mathematical Physics. 1978. Vol. 60(2). P. 131–152.

[132] Idzik I. M., Kolomiets V. A., Yukhnovskii I. R. Liquid-gas critical point in the method of collective variables. Theoretical and Mathematical Physics. 1987. Vol. 73. P. 1204–1217.

[133] Imbrie T. Z. Debye screening for jellium and other Coulomb systems. Communications in Mathematical Physics. 1983. Vol. 87, № 4. P. 515–565.

[134] Ising E. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. Zeitschrift für Physik. 1925. Vol. 31. P. 253–258.

[135] Ito Y. On a generalization of non-linear Poisson functionals. Mathematics Reports, Toyama University. 1980. Vol. 3. P. 111–122.

[136] Ito Y. Generalized Poisson functionals. Probability Theory and Related Fields. 1988. Vol. 77. P. 1–28.

[137] Ito Y., Kubo I. Calculus on Gaussian and Poisson white noises. Nagoya Mathematical Journal. 1988. Vol. 111. P. 41–84.

[138] Jancovici B. Classical Coulomb systems near a plane wall: I, II. Journal of Statistical Physics. 1982. Vol. 28, № 1. P. 43–65; Vol. 29, № 2. P. 263–280.

[139] Jancovici B. Surface properties of a classical two-dimensional one-component plasma: exact results. Journal of Statistical Physics. 1984. Vol. 34, № 4. P. 803–815.

[140] Jansen S. Revisiting Groeneveld’s approach to the virial expansion. Journal of Mathematical Physics. 2021. Vol. 62(2). P. 023302-20.

[141] Kalman G. ed. Strongly coupled plasmas. New York: Plenum Press, 1979.

[142] Kennedy T. Debye-Huckel theory for charge symmetric Coulomb systems. Communications in Mathematical Physics. 1983. Vol. 92. P. 269–294.

[143] Kirkwood J. G. The statistical mechanical theory of transport processes. Journal of Chemical Physics. 1946. Vol. 14. P. 180–201; 1947. Vol. 15. P. 72–76.

[144] Kondratiev Yu. G., Kuna T. Harmonic analysis on configuration spaces. I. General theory. Infinite Dimensional Analysis, Quantum Probability and Related Topics. 2002. Vol. 5, № 2. P. 201–233.

[145] Kondratiev Yu. G., Kuna T., Oliveira M. J. Analytic aspects of Poissonian white noise analysis. Methods of Functional Analysis and Topology. 2002. Vol. 8(4). P. 15–48.

[146] Kondratiev Yu. G., Kutoviy O. V. On the metrical properties of the configuration space. Mathematische Nachrichten. 2006. Vol. 279, № 7. P. 194–215.

[147] Kondratiev Yu. G., Lytvynov E. W., Rebenko A. L., Röckner M., Shchepan'uk G. V. Euclidean Gibbs states for quantum continuous systems with Boltzmann statistics via cluster expansion. Methods of Functional Analysis and Topology. 1997. Vol. 3, № 1. P. 62–81.

[148] Kondratiev Yu. G., Silva J. L., Streit L. Differential geometry on compound Poisson space. Methods of Functional Analysis and Topology. 1998. Vol. 4. P. 32–58.

[149] Kondratiev Yu. G., Streit L., Westerkamp W., J. Yan. Generalized functions in infinite dimensional analysis. Hiroshima Mathematical Journal. 1998. Vol. 28, № 2. P. 213–260.

[150] Kotecký R., Preiss D. Cluster expansion for abstract polymer models. Communications in Mathematical Physics. 1986. Vol. 103(4). P. 491–498.

[151] Kubo R. Statistical Mechanics. Elsevier Science Publishers B.V., 1965. 424 p.

[152] Kubo R. Thermodynamics. Amsterdam; New York, 1968. 310 p.

[153] Kuijlaars A. B. J., Saff E. B. Asymptotics for minimal discrete energy on the sphere. Transactions of the American Mathematical Society. 1998. Vol. 350, № 2. P. 523–538.

[154] Kuna T. Studies in configuration space analysis and applications. PhD thesis. Bonner Mathematische Schriften Nr. 324, University of Bonn, 1999.

[155] Kuna T., Tsagkarogiannis D. Convergence of density expansions of correlation functions and the Ornstein–Zernike equation. Annales Henri Poincaré. 2018. Vol. 19(4). P. 1115–1150.

[156] Kutoviy O. V., Rebenko A. L. Existence of Gibbs state for continuous gas with many-body interaction. Journal of Mathematical Physics. 2004. Vol. 45, № 4. P. 1593–1605.

[157] Landkof N. S. Foundations of Modern Potential Theory. Springer-Verlag, Berlin, 1972.

[158] Lanford O. E. The classical mechanics of one-dimensional systems of infinitely many particles. Communications in Mathematical Physics. 1968. Vol. 9. P. 176–191.

[159] Lanford O. E., Ruelle D. Observables at infinity and states with short range correlations in statistical mechanics. Communications in Mathematical Physics. 1969. Vol. 13, № 3. P. 194–215.

[160] Lebowitz J. L. Bounds on the correlations and analyticity properties of ferromagnetic Ising spin systems. Communications in Mathematical Physics. 1972. Vol. 28(4). P. 313–321.

[161] Lee T. D., Yang C. N. Statistical theory of equations of state and phase transitions. I. Theory of condensation. Physical Review. 1952. Vol. 87. P. 404–409.

[162] Lee T. D., Yang C. N. Statistical theory of equations of state and phase transitions. II. Lattice gas and Ising model. Physical Review. 1952. Vol. 87. P. 410–419.

[163] Lenard A. Correlation functions and the uniqueness of the state in classical statistical mechanics. Communications in Mathematical Physics. 1973. Vol. 30. P. 35–44.

[164] Lenard A. States of classical statistical mechanical systems of infinitely many particles. I. Archive for Rational Mechanics and Analysis. 1975. Vol. 59. P. 219–239.

[165] Lenard A. States of classical statistical mechanical systems of infinitely many particles. II. Archive for Rational Mechanics and Analysis. 1975. Vol. 59. P. 241–256.

[166] Lenard A., Dyson F. T. Stability of matter. II. Journal of Mathematical Physics. 1968. Vol. 9, № 5. P. 698–711.

[167] Lewis J. T., Pulé J. V., de Smedt Ph. The Superstability of Pair-Potentials of Positive Type. Journal of Statistical Physics. 1984. Vol. 35. P. 381–385.

[168] Lieb E. H. The stability of matter. Reviews of Modern Physics. 1976. Vol. 48, № 4. P. 553–563.

[169] Lieb E. H., Lebowitz J. L. The constitution of matter: Existence of thermodynamics for systems composed of electrons and nuclei. Advances in Mathematics. 1972. Vol. 9, № 3. P. 316–398.

[170] Maslov V. P., Chebotarev A. M. On random fields corresponding to the BBGKY, Vlasov, and Boltzmann hierarchies. Theoretical and Mathematical Physics. 1983. Vol. 54. P. 48–55.

[171] Mayer J. E. The theory of ionic solutions. Journal of Chemical Physics. 1950. Vol. 18, № 11. P. 1426–1436.

[172] Mecke J. Eine charakteristische Eigenschaft der doppelt stochastischen Poissonschen Prozesse. Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und verwandte Gebiete. 1968. Vol. 11. P. 74–81.

[173] Minlos R. A. Lectures on Statistical Physics. Russian Mathematical Surveys. 1968. Vol. 23, № 1. P. 137–196.

[174] Minlos R. A., Pogosyan S. K. Estimates of Ursell functions, group functions, and their derivatives. Theoretical and Mathematical Physics. 1977. Vol. 31. P. 408–418.

[175] Morais T., Procacci A. Continuous particles in the Canonical Ensemble as an abstract polymer gas. Journal of Statistical Physics. 2013. Vol. 151, № 4. P. 830–849.

[176] Nelson E. Construction of quantum fields from Markoff fields. Journal of Functional Analysis. 1973. Vol. 12(1). P. 97–112.

[177] Nelson E. Probability theory and Euclidean field theory. In: Constructive Quantum Field Theory, 25. Springer-Verlag, Berlin; Heidelberg; New York, 1973.

[178] Nguyen X.X., Zessin H. Integral and differential characterization of the Gibbs process. Mathematische Nachrichten. 1979. Vol. 88. P. 105–115.

[179] Onsager L. Electrostatic interactions of molecules. Journal of Physical Chemistry. 1939. Vol. 43, № 2. P. 189–196.

[180] Onsager L. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. Physical Review. 1944. Vol. 65. P. 117–149.

[181] Ovaskainen O., Finkelshtein D., Kutoviy O., Cornell S., Bolker B., Kondratiev Y. A mathematical framework for the analysis of spatial temporal point processes. Theoretical Ecology, 2013.

[182] Panofsky W., Phillips M. Classical Electricity And Magnetism. Cambridge: Addison–Wesley Publishing Company, Inc., 1919–2007.

[183] Park Y. M. Lack of screening in the continuous dipol systems. Communications in Mathematical Physics. 1979. Vol. 70, № 1. P. 161–167.

[184] Park Y. M. Bounds on exponentials of local number operators in quantum statistical mechanics. Communications in Mathematical Physics. 1984. Vol. 94, № 1. P. 1–33.

[185] Parthasarathy K. R. Probability Measure on Metric Spaces. Probability and Mathematical Statistics. Academic Press, New York; London, 1967.

[186] Peierls R. Ising's model of ferromagnetism. Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. 1936. Vol. 32, № 3. P. 477–481.

[187] Penrose O. Convergence of fugacity expansions for fluids and lattice gases. Journal of Mathematical Physics. 1963. Vol. 4(10). P. 1312–1320.

[188] Penrose O. Convergence of Fugacity Expansions for Classical Systems. In: Statistical Mechanics: Foundations and Applications, Proceedings of the I.U.P.A.P. Meeting Copenhagen 1966, Thor A. Bak (Ed.). W.A. Benjamin, Inc., New York, 1967.

[189] Petrenko S. N., Rebenko A. L. Superstable criterion and superstable bounds for infinite range interaction I: two-body potentials. Methods of Functional Analysis and Topology. 2007. Vol. 13. P. 50–61.

[190] Petrenko S. N., Rebenko A. L. Superstable criterion and superstable bounds for infinite range interaction II: many-body potentials. Proceedings of the Institute of Mathematics, Ukrainian National Academy of Sciences. 2009. Vol. 6, № 1. P. 191–208.

[191] Petrina D. Y., Skripnik V. I. Kirkwood-Salzburg equations for the coefficient functions of the S matrix. Theoretical and Mathematical Physics. 1971. Vol. 8. P. 896–904.

[192] Pilyavskii A. I., Rebenko A. L. Debye screening in spatially inhomogeneous systems of charged particles. I. Model of spherical insulator. Theoretical and Mathematical Physics. 1986. Vol. 69. P. 1127–1136.

[193] Pilyavskii A. I., Rebenko A. L. Debye screening in spatially inhomogeneous systems of charged particles. Theoretical and Mathematical Physics. 1987. Vol. 70 P. 195–203.

[194] Pogorelov Y. G. Convergence of the virial expansion for the classical canonical ensemble. Theoretical and Mathematical Physics. 1975. Vol. 24. P. 808–812.

[195] Procacci A. Cluster expansion methods in rigorous statistical mechanics. 2005. (Preprint).

[196] Rebenko A. L. The distribution functions of a double electric layer of a concentrated electrolyte near a charge membrane. K.: Институт теоретической физики АН УССР, 1980. 46 p. (Препринт ИТФ-80-43E).

[197] Rebenko A. L. Cluster expansion for ion-dipole systems. Theoretical and Mathematical Physics. 1982. Vol. 53. P. 1224–1234.

[198] Rebenko A. L. Mathematical foundations of equilibrium classical statistical mechanics of charged particles. Russian Mathematical Surveys. 1988. Vol. 43(3). P. 65–116.

[199] Rebenko A. L. Poisson measure representations and cluster expansion in classical statistical mechanics. Communications in Mathematical Physics. 1993. Vol. 151. P. 427–435.

[200] Rebenko A. L. Poisson analysis and statistical mechanics. Condensed Matter Physics. 1996. № 8. P. 119–127.

[201] Rebenko A. L. New proof of Ruelle's superstability bounds. Journal of Statistical Physics. 1998. Vol. 91, № 3/4. P. 815–826.

[202] Rebenko A. L. Euclidean Gibbs states for quantum continuous systems via cluster expansion. II. Bose and Fermi statistics. Methods of Functional Analysis and Topology. 1999. Vol. 5, № 2. P. 86–100.

[203] Rebenko A. L. Cell gas model of classical statistical systems. Reviews in Mathematical Physics. 2013. Vol. 25, № 4. P. 1330006-1–28.

[204] Rebenko A. L. Virial expansions for correlation functions in canonical ensemble. Letters in Mathematical Physics. 2023. V. 113. P. 85.

[205] Rebenko A. L., Shchepan'uk G. V. The convergence of cluster expansions for continuous systems with many-body interactions. Journal of Statistical Physics. 1997. Vol. 88, № 3/4. P. 665–689.

[206] Rebenko A. L., Tertychnyi M. V. Quasi-continuous approximation of statistical systems with strong superstable interactions. Proceedings of the Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Ukraine. 2007. Vol. 4, № 3. P. 172–182.

[207] Rebenko A. L., Tertychnyi M. V. On stability, superstability and strong superstability of classical systems of statistical mechanics. Methods of Functional Analysis and Topology. 2008. Vol. 14. № 3. P. 287–296.

[208] Rebenko A. L., Tertychnyi M. V. Quasi-lattice approximation of statistical systems with strong superstable interactions. Correlation functions. Journal of Mathematical Physics. 2009. Vol. 50, № 3. P. 1–16.

[209] Reed M., Simon B. Methods of Modern Mathematical Physics. Vol. II. Academic Press, New York; San Francisko; London, 1975.

[210] Ruelle D. Correlation functions of classical gases. Annals of Physics. 1963. Vol. 25, № 1. P. 109–120.

[211] Ruelle D. Classical statistical mechanics of a system of particles. Helvetica Physica Acta. 1963. Vol. 36, № 2. P. 183–197.

[212] Ruelle D. States of classsical statistical mechanics. Journal of Mathematical Physics. 1967. Vol. 8, № 6. P. 1657–1668.

[213] Ruelle D. Superstable interactions in classical statistical mechanics. Communications in Mathematical Physics. 1970. Vol. 18, № 2. P. 127–159.

[214] Schneider T., Beck H., Stoll E. Quantum Effects in an n-component Vector Model for Structural Phase Transitions. Physical Review B. 1976. Vol. 13. P. 1123–1130.

[215] Spohn H. On the Vlasov hierarchy. Mathematical Methods in the Applied Sciences. 1981. Vol. 3. P. 445–454.

[216] Stell G. Cluster expansions for classical systems in equilibrium, The Equilibrium Theory of Classical Fluids. (H. L. Frisch and J. L. Lebowitz, eds.). Benjamin, New York, 1964. P. 171–261.

[217] Symanzik K. Euclidean quantum field theory. Proceeding of the International school of physics «Enrico Fermi». Ed. R. Jost. Varena Acad. Press, 1969. P. 152–226.

[218] Tegeback R., Usenko A. S., Jakimenko I. P., Zagorodny A. G. The test charge problem in the theory of bounded plasmas. Journal of Plasma Physics. 1977. Vol. 18, part 1. P. 113–125.

[219] Tibballs J. E., McIntyre G. J., Nelmes R. J. The Crystal Structure of Tetragonal KH_2PO_4 and KD_2PO_4 as a Function of Temperature and Pressure. Journal of Physics C: Solid State Physics. 1982. Vol. 15. P. 37–58.

[220] Verbeure A., Zagrebnov V. No–Go Theorem for Quantum Structural Phase Transitions. Journal of Physics A: Mathematical and General. 1995. Vol. 28. P. 5415–5421.

[221] Vershik A. M., Gel'fand I. M., Graev M. I. Representations of the group of diffeomorphisms. Russian Mathematical Surveys. 1975. Vol. 30, № 6. P. 1–50.

[222] Widom B., Rowlinson J. S. New model for the study of liquid-vapour phase transitions. Journal Chemical Physics. 1970. Vol. 52. P. 1270–1272.

[223] Yeomans J. M. Statistical mechanics of Phase Transitions. Oxford University Press, London, 1992.

[224] Yvon J. La Théorie, Statistique des Fluides et l'Équation d'État. Paris: 1935. 270 p.

[225] Zagrebnov V. A. A new proof and generalization of the Bogolyubov-Ruelle theorem. Theoretical and Mathematical Physics. 1982. Vol. 51. P. 570–579.

[226] Zagrebnov V. A., Pastur L. A. Singular interaction potentials in classical statistical mechanics. Theoretical and Mathematical Physics. 1978. Vol. 36. P. 784–797.

Предметний покажчик

Зміст

6 Квазінеперервна апроксимація. Модель коміркового газу 183

7 Системи заряджених частинок 207

Наукове видання

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ

РЕБЕНКО Олексій Лукич

МАТЕМАТИЧНІ ОСНОВИ СУЧАСНОЇ СТАТИСТИЧНОЇ МЕХАНІКИ

Художнє оформлення *Панасюк М. А.*
Художній редактор *Савицька І. П.*
Технічний редактор *Березяк Т. С.*

Оригінал-макет виготовлено
у НВП «Видавництво “Наукова думка” НАН України»
Свідоцтво про внесення суб’єкта видавничої справи
до Державного реєстру видавців, виготівників
і розповсюджувачів видавничої продукції
ДК № 2440 від 15.03.2006 р.
01601 Київ 1, вул. Терещенківська, 3

Підп. до друку 13.11.2024. Формат 60×90/16.
Гарн. Таймс. Ум. друк. арк. 18,75. Обл.-вид. арк. 17,50.
Тираж 100 прим. Зам. № 7463

Віддруковано ВД «Академперіодика» НАН України
вул. Терещенківська, 4, м. Київ, 01024
Свідоцтво суб’єкта видавничої справи ДК № 544 від 27.07.2001