Інститут математики Національної академії наук України

На правах рукопису

Болух Віра Андріївна

УДК 517.9, 517.987, 519.7

Поведінка кореляційних та термодинамічних функцій нескінченних статистичних систем

01.01.03 – математична фізика

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

Науковий керівник
Ребенко Олексій Лукич
доктор фізико-математичних наук,
професор

Київ – 2016

ЗМІСТ

Вступ

Актуальність теми. Дисертаційна робота присвячена дослідженню нескінченних систем класичної статистичної механіки. Статистична механіка виникла в кінці XIX — на початку XX століття в роботах Больцмана, Максвела, Гіббса. В той час вчені намагалися створити математичний апарат, який був би зручним 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.

На перший погляд усі відомі системи є скінченними. Наприклад, газ у колбі має скінченне число атомів чи молекул. Але з елементарної фізики відомо, що в одному молі будь-якої речовини міститься приблизно $6 \cdot 10^{23}$ молекул (закон Авогадро). Зрозуміло, що слідкувати за такою кількістю частинок це те ж саме, що слідкувати за нескінченною кількістю частинок. Отже, нескінченні системи є деякою математичною ідеалізацією великих скінченних систем, яку зручно застосовувати при вивченні реальних великих систем.

Реальна фізична чи біологічна система у кожний момент часу t займає деяку конфігурацію $\widetilde{\gamma}(t) = \{\widetilde{x}_1(t), ..., \widetilde{x}_n(t), ...\}$ фазового простору $\widetilde{\Gamma}$, який є множиною усіх допустимих конфігурацій, а змінною $\widetilde{x}(t)$ ми позначаємо усі фізичні характеристики частинки: координату, імпульс, спін, тощо. Більш детальне визначення для систем, які розглядаються в дисертації, ми наведемо нижче. Під впливом внутрішніх або ще й зовнішніх взаємодій така система перебуває у постійному русі, тобто кожна частинка описує якусь неперервну траєкторію, а мікроскопічний стан усієї системи визначається сукупністю таких траєкторій. Проте для дослідження системи необхідно знати не мікроскопічну поведінку, а її макроскопічні наслідки, що виражаються такими характеристиками, як тиск, енергія, теплоємність тощо. Такі фізичні характеристики називають спостережуваними величинами, які описують вимірними функціями на фазовому просторі. Нехай $F(\widetilde{\gamma}(t))$ — функція, що описує деяку спостережувану величину. Тоді макроскопічна характеристика, яка їй відповідає і яку ми можемо спостерігати на експерименті, є середнє значення цієї величини, яке обраховується за наступною формулою:

$$\overline{F} := \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int\limits_0^T F(\widetilde{\gamma}(t))dt. \tag{0.1}$$

Проте порахувати такий інтеграл для реальної системи неможливо, навіть у тому випадку, коли б були відомі усі траєкторії частинок.

Тому на початку XX століття американський фізик-теоретик Джозайя Віллард Гіббс запропонував замість однієї системи ввести ансамбль тотожних систем, які кожної миті з якоюсь ймовірністю займатимуть ту чи іншу конфігурацію.

Такі однакові екземпляри систем отримали назву ансамблів Гіббса.

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

$$\int\limits_{\widetilde{\Gamma}} \mu(d\widetilde{\gamma}) = 1 \tag{0.2}$$

такої, що:

$$\overline{F} =< F(\cdot) >_\mu = \int\limits_{\widetilde{\Gamma}} F(\widetilde{\gamma})\mu(d\widetilde{\gamma}). \tag{0.3}$$

Таким чином замість детерміністичного опису однієї системи розглядають статистичний опис поведінки ансамблів ідентичних систем.

Фізичне обґрунтування вигляду такої міри в обмеженому об'ємі було запропоновано Гіббсом ще у 1902 році [62].

Важливою характеристикою міри Гіббса є послідовність кореляційних функцій, які описують мікроскопічну поведінку фізичних систем. За допомогою кореляційних функцій зручно записувати середні значення спостережуваних величин.

Макроскопічну поведінку фізичних систем досліджують за допомогою так званих термодинамічних функцій (їх ще називають термодинамічними потенціалами), таких як тиск, вільна енергія, ентропія тощо. Тому дослідження кореляційних та термодинамічних функцій є надзвичайно актуальною задачею математичної фізики.

Актуальним питанням в дослідженні неперервних статистичних систем залишається доведення існування фазових переходів для стандартних взаємодій типу Ленарда—Джонса. Критична поведінка лише добре досліджена для ґратчастих систем, які моделюють спінові системи магнетиків та ангармонічних кристалів. Математично строге доведення цієї проблеми почалося ще в 60-ті роки минулого століття в роботах Лебовіца та Пенроуза (див., наприклад, [87]) для систем частинок, взаємодія яких описується міжмолекулярним потенціалом, запропонованим Кацом [72] в так званій Ван-дер-Ваальсівській границі. На сьогоднішній день ця проблема була вирішена для специфічних моделей типу Уідома—Роулінсона [123] (див., також, [118], [47]), моделі з Гамільтоніаном типу квантово-польових моделей [85] (див., також, лекції [100]). Необхідно відмітити роботи [115], [67], в яких було доведено існування фазових переходів, пов'язаних з орієнтаційними положеннями частинок в неперервних спінових моделях фероелектричних рідин, а також дослідження останніх років, які використовують методи великих відхилень (див. [101], [71]).

Запропонована дисертація є подальшим розвитком теоретичних досліджень нескінченних систем класичної статистичної механіки методами нескінченновимірного аналізу, а розділ 4 дисертації можна розглядати як підготовчу роботу до вирішення проблеми існування фазових переходів в модельних неперервних системах класичних частинок, які взаємодіють за допомогою парних потенціалів типу Ленарда—Джонса.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертацію виконано у відділі математичної фізики Інституту математики НАН України згідно з науково-дослідною темою "Дослідження спектральних характеристик та критичної поведінки складних систем математичної фізики"(номер державної реєстрації 0111U001030).

Мета і завдання дослідження. Метою дисертаційної роботи є дослідження поведінки термодинамічних та кореляційних функцій нескінченних статистичних систем.

Об'єктом дослідження є класичні неперервні статистичні системи з нескінченним числом частинок, що взаємодіють за допомогою двочастинкового потенціалу.

Предметом дослідження є побудова нових розкладів для термодинамічних потенціалів, зокрема тиску; апроксимація вільної енергії Гельмгольца в рамках моделі коміркового газу.

Завдання дослідження:

1. Описати основні методи нескінченновимірного аналізу в статистичній механіці, за допомогою яких значно спрощуються доведення деяких важливих теорем і формул статистичної механіки: теорема, що відображає властивості міри Лебега—Пуассона і є важливою у представленні великої статистичної суми у вигляді експоненти, що в свою чергу є необхідним для побудови термодинамічних потенціалів при переході до нескінченного об'єму; продемонструвати новий спосіб виведення рівнянь ББҐКІ та Кірквуда—Зальцбурга для кореляційних

функцій;

2. Отримати нові форми запису розкладів Майєра та довести їх збіжність;

3. Довести збіжність апроксимованої вільної енергії Гельмгольца моделі коміркового газу до відповідної вільної енергії неперервної системи.

Методи дослідження. Основними методами є методи нескінченновимірного аналізу та метод термодинамічного граничного переходу.

Наукова новизна одержаних результатів. У дисертації отримано нові теоретичні результати, основними з яких є такі:

1. Запропоновано новий метод доведення теореми про представлення деяких інтегралів за мірою Лебега—Пуассона у вигляді експоненти, а також розглянуто її застосування до термодинамічних потенціалів, зокрема тиску;

2. Запропоновано нові методи виведення рівнянь ББҐКІ та Кірквуда—Зальцбурга для кореляційних функцій методами нескінченновимірного пуассонівського аналізу;

3. Побудовано розклад Майєра у формі Бріджеса—Федербуша для системи точкових частинок, які взаємодіють за допомогою неінтегрованого потенціалу взаємодії, а також доведено збіжність такого розкладу;

4. Запропоновано нове виведення розкладу Майєра для зв'язних кореляційних функцій методами нескінченновимірного пуассонівського аналізу;

5. Побудовано новий розклад для термодинамічного потенціалу тиску, який дає можливість покращити результати попередніх досліджень;

6. Доведено, що вільна енергія коміркового газу $f^{(a)}(v, \beta)$ є монотонною, неперервною, вгнутою функцією від питомого об'єму v;

7. В рамках канонічного ансамблю доведено, що апроксимована вільна енергія моделі коміркового газу з будь-яким ступенем точності наближається до відповідної вільної енергії неперервної системи.

Практичне значення одержаних результатів. Результати і методи дисертаційної роботи мають теоретичний характер і можуть бути використані при подальших дослідженнях нескінченних систем взаємодіючих точкових частинок статистичної механіки, а також в статистичній фізиці для розрахунків середніх спостережуваних величин.

Особистий внесок здобувача. Визначення головних напрямків дослідження належить науковому керівнику д.фіз-мат. н. О. Л. Ребенку. За темою дисертації опубліковано 5 робіт, з них чотири [44],[35],[45], [36] у співавторстві з О. Л. Ребенком. Робота [9] написана здобувачем самостійно.

Зі спільних робіт на захист виносяться лише результати, отримані здобувачем особисто.

Апробація результатів дисертації. Основні результати дисертаційного дослідження доповідались та обговорювались на:

– IM Workshop on mathematical physics. Workshop on occasion of the 105th anniversary of academician M. M. Bogolubov (Київ, Інститут математики НАН України, 19 листопада 2014 р.);

– III Міжнародній науково-практичній конференції "Розвиток сучасної освіти і науки: результати, проблеми, перспективи" (Дрогобич, 26-27 березня 2015 року);

– XVI Міжнародній науковій конференції ім. акад. М. Кравчука (Київ, 14-15 травня 2015 року);

– Міжнародній конференції молодих математиків (Київ, 3-6 червня 2015 року);

– наукових семінарах відділу математичної фізики Інституту математики НАН України (керівники семінару — доктор фіз.-мат. наук, професор О. Л. Ребенко та доктор фіз.-мат. наук, професор В. Д. Кошманенко);

– об'єднаному семінарі з математичної фізики Інституту математики НАН України (керівники семінару — доктор фіз.-мат. наук Є. Д. Білоколос та доктор фіз.-мат. наук, чл. - кор. НАН України А. Г. Нікітін).

Публікації. Основні результати дисертаційного дослідження викладено у п'яти статтях [44], [35],[45], [36], [9], опублікованих у виданнях, що входять до переліку фахових видань, та додатково відображено у матеріалах конференцій [6], [7], [8]. Серед статей дві опубліковано в журналах, які входять до наукометричних баз даних (MathSciNet, Google Scholar).

Структура та обсяг дисертації. Дисертація складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних джерел, що містить 128 найменувань. Повний обсяг дисертації становить 127 сторінок друкованого тексту.

Висловлюю щиру та глибоку подяку своєму науковому керівнику доктору фізико-математичних наук Олексію Лукичу Ребенку за постановку задач, постійну увагу, корисні зауваження та поради щодо роботи.

РОЗДІЛ 1

Основи математичного підходу до опису великих статистичних систем

Метою першого розділу є введення понятійного апарату статистичної механіки, який буде використовуватись у другому, третьому та четвертому розділах, а також виклад короткого огляду попередніх наукових досліджень, що стосуються теми дисертаційної роботи.

1.1. Огляд літератури

Вивчення специфічних закономірностей фізичних систем, що складаються з надзвичайно великої кількості частинок, є одним із основних завдань статистичної механіки. Для математичного опису нескінченних систем взаємодіючих частинок ключовим є поняття стану. Оскільки поведінці таких систем притаманний ймовірнісний характер, то виникає потреба у побудові деякої ймовірнісної міри на фазовому просторі нескінченних систем. Для рівноважної скінченної системи такою ймовірнісною мірою є міра Гіббса, яку можна будувати в мікроканонічному, канонічному або великому канонічному ансамблі в залежності від потреб конкретної фізичної задачі.

В 1946 році в монографії М. М. Боголюбова [5] були намічені шляхи математичного обґрунтування термодинамічного граничного переходу в рамках формалізму канонічного ансамблю Гіббса, а також розроблено загальний метод відшукання граничних m-частинкових функцій розподілу (кореляційних функцій) у вигляді формальних рядів за степенями густини частинок у системі. Строге обґрунтування збіжності таких рядів для випадку позитивного парного потенціалу взаємодії було опубліковано в роботах [4], [39]. Узагальнення цих результатів на випадок парних стійких потенціалів взаємодії були зроблені М. М. Боголюбовим, Д. Я. Петриною та Б. І. Хацетом [3].

В 1963 році Д. Рюель [116] запропонував подібний метод, який базувався на дослідженні рівнянь Кірквуда—Зальцбурга для кореляційних функцій великого канонічного ансамблю. В роботі [116] проблема термодинамічної границі була вирішена для термодинамічних потенціалів, а також було узагальнено дослідження Ван-Хова [121] і Янга—Лі [125] на випадок більш загальних потенціалів взаємодії. Ці роботи стали значним поштовхом для математичних досліджень нескінченних розріджених систем статистичної механіки. Вони були детально викладені в монографії [37], а також в лекціях Мінлоса [22] та монографії Д. Я. Петрини, В. І. Герасименка і П. В. Малишева [32](див. переклад [99]).

Значення параметрів активності z та оберненого значення температури $\beta = 1/kT$, при яких існує єдиний гіббсівський стан, називають регулярним. Дослідження рівнянь Кірквуда-Зальцбурга в області регулярних значень параметрів z, β детально описано в монографіях [37], [32]. Вивченням спектру оператора Кірквуда—Зальцбурга займався також Л. А. Пастур [28], який показав, що спектр оператора Кірквуда—Зальцбурга для обмеженої системи збігається з нулями великої статистичної суми. В роботі [128] було встановлено структуру спектру оператора Кірквуда—Зальцбурга для обмеженої системи та встановлено його фредгольмів характер.

Крім рівнянь Кірквуда-Зальцбурга існують й інші рівняння, яким задовольняє кореляційний функціонал рівноважних систем статистичної механіки. Це рівняння Майєра—Монтролла(див. [37], розд. 4.2.5), рівняння Боголюбова, яке виводиться з еволюційних рівнянь ББҐКІ (Боголюбова—Борна—Ґріна—Кірквуда—Івона), рівняння Гончара [12] (див., також, [65]) та інші.

Але побудова стану в розумінні ідеї Гіббса для нескінченної системи ще залишилась відкритою проблемою. Вперше цю проблему розглянули у 1967 році незалежно Р. А. Мінлос [24],[25] і Д. Рюель [119]. Якщо у Рюеля це був алгебраїчний підхід, що опирався на ідеї Сігала, Хаага, Кастлера і тому був більш абстрактним, то Мінлос побудував сімейство гіббсових мір на циліндричних множинах нескінченновимірного конфігураційного простору і визначив гіббсову міру як граничну міру. Вона будувалась як продовження цього сімейства на всю σ-алгебру нескінченновимірного простору конфігурацій.

В серії робіт Добрушина [14],[16], [18], [13], [15] було приведене більш загальне визначення гіббсової міри за допомогою умовних розподілів. Практично в той же час майже аналогічний підхід був також запропонований Ленфордом і Рюелем [84]. Критерієм існування гіббсової міри на просторі нескінченних конфігурацій є умова, що міра задовольняє рівняння Добрушина-Ленфорда-Рюеля (ДЛР). Ключовою у цьому підході була робота Рюеля [120], в якій була визначена система з надстійкою взаємодією і встановлено, що граничні кореляційні функції такої системи задовольняють нерівності:

$$\rho_m(x_1, \ldots, x_m) \le \xi^m \tag{1.1}$$

при довільних значеннях густини частинок в системі і довільній температурі. Це дає змогу довести, що нескінченна послідовність кореляційних функцій $\rho = (\rho_m)_{m\geq 1}$ задовольняє систему рівнянь Кірквуда—Зальцбурга при довільних значеннях густини частинок в системі і довільній температурі, а відповідна міра Гіббса задовольняє рівняння

ДЛР. Для розріджених систем рівняння Кірквуда—Зальцбурга мають єдиний розв'язок, якому відповідає єдиний гіббсовий стан. Взагалі, умова (1.1) не є необхідною. В роботі [83] А. Ленард показав, що для існування відповідної міри достатньо виконання більш слабкої умови

$$\rho_m(x_1, \ldots, x_m) \le \xi^m m^{2m}. \tag{1.2}$$

В роботах [89], [90] Ленард детально проаналізував зв'язки довільної міри μ на просторі нескінченних конфігурацій з її кореляційною мірою ρ, що визначається на просторі скінченних конфігурацій. Деякі аспекти цього аналізу та його узагальнення були продовженні в роботах [80], [81].

Важливим напрямом вивчення класичних неперервних систем статистичної механіки є дослідження розв'язків еволюційних рівнянь ББҐКІ. Ланцюжок рівнянь Боголюбова визначає всі можливі стани системи. Окремий напрямок досліджень рівнянь ББҐКІ був створений Д. Я. Петриною та його учнями. Їм вдалося розробити новий підхід до еволюційних рівнянь Боголюбова, побудувати у явному вигляді еволюційний оператор та довести існування термодинамічної границі для нерівноважних станів класичних та квантових систем (див. [32], [99], [33]).

Для 80-90-х років минулого століття характерними є активні наукові дослідження Престона [34], Георгії [56], [57], [58], Альбеверіо—Кондратьєва—Рьокнера [41], [42], Білецького—Печерського[43], Кондратьєва і його учнів [77], [80], [78], [69], [70], [68], [79], [81], що стосувались вирішення проблем теорії міри Гіббса. Саме в цих роботах методи нескінченновимірного аналізу дозволили значно розвинути теорію мір Гіббса для класичних систем статистичної механіки.

В 1993 році і пізніше в 1998 році О. Л. Ребенко в своїх роботах [109], [106] вперше запропонував нові кластерні розклади, побудова яких базується на одній з фундаментальних властивостей точкових мір — властивості нескінченної подільності. Ці розклади дали можливість значно спростити доведення оцінок Рюеля [120] і отримати аналогічні результати для нескінченних точкових систем з багаточастинковими потенціалами взаємодії [82], [96], [97], [104], [113], [114]. А в роботі [126] ці методи були узагальнені на випадок квантових систем.

1.2. Простори конфігурацій систем статистичної механіки

Простори нескінченних конфігурацій. Нехай $\mathbb{R}^d$ — це d-вимірний евклідовий простір. 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, тобто систему всіх обмежених множин з $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$. Конфігураційний простір $\Gamma := \Gamma_{\mathbb{R}^d}$ буде складатися з усіх локально скінченних підмножин простору $\mathbb{R}^d$, тобто:

$$\Gamma = \Gamma_{\mathbb{R}^d} := \left\{ \gamma \subset \mathbb{R}^d \middle| \; |\gamma \cap \Lambda| < \infty \;\; \text{для} \quad \text{всіх} \;\; \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d) \right\}, \quad (1.3)$$

де для довільної множини $A \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ $|A|$ — кількість елементів в множині A. Це досить природне визначення з точки зору застосувань, оскільки в обмеженому об'ємі не може знаходитись нескінченна кількість частинок.

Простори скінченних конфігурацій. Позначимо множину усіх скінченних конфігурацій простору Γ через Γ_0. Насправді Γ_0 є підмножиною Γ, але вона буде розглядатися як самостійний конфігураційний простір. Визначимо спершу конфігураційний простір з фіксованою кількістю точок:

$$\Gamma^{(n)} := \{\gamma \in \Gamma | \;\; |\gamma| = n, \; n \in \mathbb{N}\}, \;\; \Gamma^{(0)} := \varnothing. \quad (1.4)$$

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

$$\Gamma_\Lambda^{(n)} := \{\gamma \in \Gamma^{(n)} | \gamma \subset \Lambda\}. \tag{1.5}$$

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

$$\Gamma_0 := \coprod_{n=0}^{\infty} \Gamma^{(n)}, \text{ і } \Gamma_\Lambda := \coprod_{n=0}^{\infty} \Gamma_\Lambda^{(n)}. \tag{1.6}$$

Простори щільних та розріджених конфігурацій. В дослідженні багатьох термодинамічних характеристик нескінченних систем важливе значення має розбиття простору $\mathbb{R}^d$ на елементарні гіперкубики з довжиною ребер $a > 0$, центри яких розташовані в точках $r \in a\mathbb{Z}^d \subset \mathbb{R}^d$:

$$\Delta_a(r) := \{x \in \mathbb{R}^d | (r^i - a/2) \le x^i < (r^i + a/2), \quad i = 1, \dots, d\}. \tag{1.7}$$

Будемо писати Δ замість $\Delta_a(r)$, якщо не має 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 через $\overline{\Delta}_{a,\Lambda} := \{\Delta \in \overline{\Delta}_a | \Delta \cap \Lambda \neq \emptyset\}$ мінімальне покриття Λ гіперкубиками $\Delta \in \overline{\Delta}_a$ таким чином, що

$$\Lambda \subseteq \Lambda_a \text{ і } \lim_{a \to 0} \Lambda_a = \Lambda. \tag{1.8}$$

Для довільного розбиття $\overline{\Delta}_a$ введемо простір розріджених конфігурацій:

$$\Gamma^{(dil)} = \Gamma^{(dil)}(\Delta) := \{\gamma \in \Gamma | \, |\gamma_\Delta| = 0 \vee 1, \text{ для всіх } \Delta \in \overline{\Delta}\} \tag{1.9}$$

і простір щільних конфігурацій:

$$\Gamma^{(den)} = \Gamma^{(den)}(\Delta) := \{\gamma \in \Gamma | \, |\gamma_\Delta| \ge 2, \text{ для всіх } \Delta \in \overline{\Delta}\}. \tag{1.10}$$

Для довільного $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ простори $\Gamma_\Lambda^{(dil)}$ і $\Gamma_\Lambda^{(den)}$ визначаються аналогічно до формул (1.5), (1.6) та (1.9), (1.10).

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

1.3. Умови на енергію взаємоємодії

В дисертаційній роботі будемо розглядати нескінченну систему тотожних точкових частинок у просторі $\mathbb{R}^d$, взаємодія між якими описується парним потенціалом $\phi(|x-y|)$, де $x, y \in \mathbb{R}^d$, $|x-y|$ — відстань між x та y d $\mathbb{R}^d$. При цьому потенціальна енергія взаємодії буде виражатись формулою:

$$U(x_1, \ldots, x_n) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} \phi(|x_i - x_j|),$$

що скорочено можна записати в такому вигляді:

$$U(\gamma) = \sum_{\{x,y\} \subset \gamma} \phi(|x-y|), \quad \gamma \in \Gamma_0. \tag{1.11}$$

Взаємодія між конфігураціями η і γ буде виражатись наступним чином:

$$W(\eta, \gamma) := \sum_{\substack{x \in \eta \\ y \in \gamma}} \phi(|x-y|). \tag{1.12}$$

Основними фундаментальними характеристиками системи взаємодіючих частинок є властивості стійкості, надстійкості та посиленої надстійкості взаємодії.

Умова стійкості може бути сформульована за допомогою системи нескінченного числа нерівностей, кожна з яких відповідає певній скінченій підсистемі, що складається з N частинок, які розташовані у точках $x_1, \ldots, x_N$ простору $\mathbb{R}^d$ [37].

1. Умова стійкості. Будемо називати потенціал ϕ стійким, якщо потенціальна енергія $U(\gamma)$ конфігурації $\gamma \in \Gamma_\Lambda$ задовольняє наступну нерівність:

$$U(\gamma) = \sum_{\{x,y\} \subset \gamma} \phi(|x-y|) \geq -B|\gamma|, \text{ для } |\gamma| \geq 2 \tag{1.13}$$

зі сталою величиною $B \geq 0$.

Зауважимо, що умова стійкості є необхідною для коректного опису статистичних систем з нескінченною кількістю частинок, існування граничних кореляційних функцій.

Для того, щоб побудувати міру Гіббса у випадку системи нескінченного числа частинок для будь-яких додатних значень параметрів β та z, необхідно накласти додаткові обмеження на взаємодію між частинками. Такою умовою є умова надстійкості, яку ввів Рюель в роботі [120].

2. Умова надстійкості. Потенціал ϕ називають надстійким, якщо існують константи $A > 0$, $B \geq 0$ та розбиття $\bar{\Delta}_a$ таке, що потенціальна енергія $U(\gamma)$ задовольняє нерівність:

$$U(\gamma) \geq A \sum_{\Delta \in \bar{\Delta}_a} |\gamma_\Delta|^2 - B|\gamma|, \quad \text{для довільної } \gamma \in \Gamma_0. \tag{1.14}$$

Якщо потенціал взаємодії не буде задовольняти умову стійкості, то, як наслідок, це може призвести до порушення термодинамічної поведінки системи. Адже умова стійкості є надзвичайно важливою при встановленні збіжності ряду, за допомогою якого визначена велика статистична сума (1.47). Слід зазначити, що для випадку парних взаємодій велика статистична сума буде розбіжною тоді і тільки тоді, коли умова стійкості не буде виконуватись.

В розділі 4 дисертаційної роботи ми будемо також використовувати поняття посилено надстійкої взаємодії, тому доцільно його ввести.

3. Умова посиленої надстійкості. Взаємодія називається посилено надстійкою, якщо існує $a_0 > 0$ та константи $A(a) > 0$, $B(a) \geq 0$ і $m \geq 2$ для всіх $0 < a \leq a_0$, а також для довільної конфігурації $\gamma \in \Gamma_0$ для потенціальної енергії буде виконуватись умова:

$$U(\gamma) \geq A(a) \sum_{\Delta \in \Delta_a : |\gamma_\Delta| \geq 2} |\gamma_\Delta|^m - B(a)|\gamma|. \tag{1.15}$$

Парк В. М. [94] був першим, хто застосував умову (1.15) з $m > 2$ при доведенні границі для експоненти локального числа оператора квантових систем взаємодії Бозе-газу. Зауважимо, що у Парка константи A та B не залежали від парамера a. В роботі [107] означення посилено надстійкої взаємодії було дещо змінено: включено випадок $m = 2$, але з константами, що залежать від параметра a. Посилено надстійкі потенціали включають всі потенціали взаємодії, що є неінтегровними поблизу нуля.

Іншою не менш важливою умовою, що накладають на потенціал взаємодії між частинками, є умова регулярності [37].

4. Умова регулярності. Двочастинковий потенціал ϕ називається регулярним, якщо він обмежений знизу та виконується умова

$$C(\beta) := \int\limits_{\mathbb{R}^d} |e^{-\beta\phi(|x|)} - 1| dx < \infty. \tag{1.16}$$

Умови стійкості, надстійкості та посиленої надстійкості накладають загальні умови на характер енергії взаємодії. В рамках наближення таких взаємодій двочастинковими (парними) потенціалами слід знайти найбільш оптимальні достатні умови їх виконання. Такі умови досліджувались багатьма вченими. Зокрема, О. Л. Ребенко спільно зі своїм учнем М. В. Тертичним опублікували роботу [107], присвячену детальному огляду попередніх результатів цієї проблеми та дослідженвнню нових умов, які б забезпечували посилену надстійкість для парних взаємодій.

Прикладом посилено надстійких взаємодій є потенціали, що задовольняють умови (**A**).

(A): Умови на потенціал взаємодії Розглянемо потенціали загального вигляду ϕ, які є неперервними функціями на $R_+ \backslash \{0\}$ і для яких існують константи $r_0 > 0$, $R > r_0$, $\varphi_0 > 0$, $\varphi_1 > 0$ і $\varepsilon_0 > 0$ такі, що:

$$1)\ \ \phi(|x|) \equiv -\phi^-(|x|) \geq -\frac{\varphi_1}{|x|^{d+\varepsilon_0}} \text{ для } |x| \geq R; \tag{1.17}$$

$$2)\ \ \phi(|x|) \equiv \phi^+(|x|) \geq \frac{\varphi_0}{|x|^s},\ \ s \geq d \text{ для } |x| \leq r_0, \tag{1.18}$$

де

$$\phi^+(|x|) := \max\{0; \phi(|x|)\},\ \ \phi^-(|x|) := -\min\{0, \phi(|x|)\}, \tag{1.19}$$

а

$$\phi(|x|) = \phi^+(|x|) - \phi^-(|x|). \tag{1.20}$$

Умова (1.17) описує поведінку потенціалу на нескінченності — коли відстань між частинками є достатньо великою, то потенціал спадає так, що є інтегровним. А умова (1.18) характеризує поведінку потенціалу поблизу початку координат — функція не є інтегровною в нулі.

В дисертаційній роботі ми будемо розглядати потенціали типу Ленарда—Джонса (див. рис. 1.1)

$$\phi(|x|) = \frac{C}{|x|^{12}} - \frac{D}{|x|^6},$$

де $C > 0$, $D > 0$ — деякі константи.

Область $0 < |x| < r_1$, на якій графік функції $\phi(|x|)$ спадає, називають областю відштовхування, а область $r_1 < |x| < \infty$, де графік функції $\phi(|x|)$ зростає, називають областю притягування.

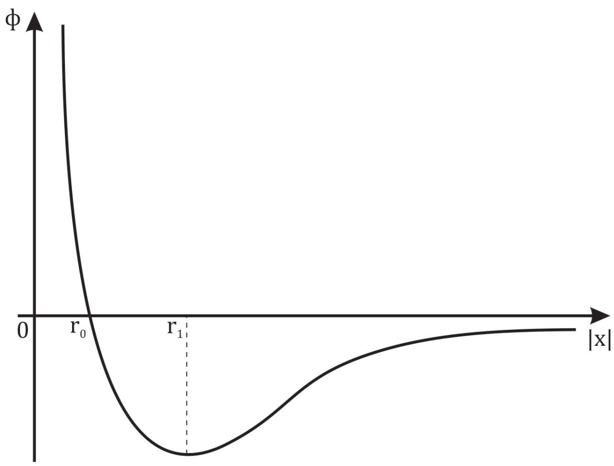

Рис. 1.1: Потенціал Ленарда—Джонса

Зауважимо також, що для потенціалів, які задовольняють умови **(A)** (див. формули (1.17)-(1.20)), відповідні константи $A(a)$ та $B(a)$ мають такий вигляд [111]:

$$A(a) = C_{s,d} - \frac{v_0}{2^{\frac{s}{d}}}, \quad B(a) = \frac{v_0}{2}, \quad m = 1 + \frac{s}{d},$$

$$C_{s,d} = \frac{1}{2^{2s+1}} \left(\frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{d\Gamma(\frac{d}{2})} \right)^{\frac{s}{d}} \frac{\varphi_0}{a^3}, \tag{1.21}$$

де

$$v_0(a) := \sum_{\Delta \in \bar{\Delta}} \sup_{x \in \Delta} \phi^-(|x|). \tag{1.22}$$

1.4. Міри на просторах конфігурацій

Міри Пуассона та Лебега-Пуассона. Нехай σ — це міра Лебега в d-вимірному евклідовому просторі $\mathbb{R}^d$. Стан ідеального газу в рівноважній статистичній механіці описується мірою Пуассона $\pi_{z\sigma}$ на конфігураційному просторі Γ, де $z > 0$ — це активність (фізичний параметр, який пов'язаний з густиною частинок в системі). Міру $\pi_{z\sigma}$ з мірою інтенсивності $z\sigma$ ми визначимо трохи нижче. Для цього спершу введемо так звану міру Лебега—Пуассона $\lambda_{z\sigma} = \lambda^{\Lambda}_{z\sigma}$ на просторі скінченних конфігурацій Γ_Λ, $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ (або Γ_0) за формулою:

$$\int\limits_{\Gamma_\Lambda} F(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) :=$$

$$:= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int\limits_{\Lambda} \cdots \int\limits_{\Lambda} F(\{x_1, \ldots, x_n\})\sigma(dx_1)\cdots\sigma(dx_n) =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int\limits_{\Lambda} \cdots \int\limits_{\Lambda} F_n(x_1, \ldots, x_n)dx_1\cdots dx_n, \tag{1.23}$$

для всіх вимірних функцій $F = \{F_n\}_{n\geq 0}$, $F_n \in L^\infty(\Lambda^n)$ (або $F_n \in L^1(\mathbb{R}^{dn})$).

Зазначимо, що нормуючий множник $n!$ у формулі (1.23) враховує той факт, що перестановки координат частинок не змінюють конфігурацію, тобто частинки вважаються ідентичними.

За допомогою міри $\lambda_{z\sigma}$ побудуємо сім'ю ймовірнісних мір

$$\pi^{\Lambda}_{z\sigma} := e^{-z\sigma(\Lambda)}\lambda^{\Lambda}_{z\sigma}, \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d). \tag{1.24}$$

Зауважимо, використовуючи означення (1.23), що сімейство мір $\{\pi^{\Lambda}_{z\sigma} \ : \ \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)\}$ буде попарно узгодженим, тобто для будь-яких $\Lambda_1 \subset \Lambda_2$ буде виконуватись $\pi^{\Lambda_2}_{z\sigma} \upharpoonright \Gamma_{\Lambda_1} = \pi^{\Lambda_1}_{z\sigma}$. За теоремою Колмогорова [95] існуватиме єдина ймовірнісна міра $\pi_{z\sigma}$ на конфігураційному просторі Γ, яка буде визначатись наступним чином:

$$\forall \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d), \ \ \pi^{\Lambda}_{z\sigma} = \pi_{z\sigma} \circ (\mathrm{p}_\Lambda)^{-1}, \ \ \mathrm{p}_\Lambda \ : \ \Gamma \mapsto \Gamma_\Lambda.$$

Міра Пуассона задовольняє так звану тотожність Мекке:

$$\int\limits_{\Gamma} \sum_{x\in\gamma} H(x;\gamma)\pi_\sigma(d\gamma) = \int\limits_{\Gamma} \int\limits_{\mathbb{R}^d} H(x; \gamma \cup \{x\})\sigma(dx)\pi_\sigma(d\gamma) \tag{1.25}$$

для довільної $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \otimes \mathcal{B}(\Gamma)$-вимірної функції H. Цю формулу встановив Н. Р. Кемпбелл [49], [50], а Дж. Мекке [88] показав, що тотожність

(1.25) є необхідною і достатньою умовою того, щоб π_σ була пуассонівською мірою з мірою інтенсивності σ.

Міра Лебега—Пуассона задовольняє властивість нескінченної подільності. Сформулюємо її у вигляді леми 1.1 (див. (13) в [109]). Окремо зазначимо, що аналогічна властивість буде також справедливою і для міри Пуассона.

Лема 1.1. *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*

$$\int\limits_{\Gamma_\Lambda} F_1(\gamma)F_2(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \int\limits_{\Gamma_{X_1}} F_1(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) \int\limits_{\Gamma_{X_2}} F_2(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{1.26}$$

Доведення. Скористаємось означенням міри Лебега—Пуассона (1.23):

$$\int\limits_{\Gamma_\Lambda} F_1(\gamma)F_2(\gamma)\lambda_\sigma(d\gamma) =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\Big(\int\limits_{\Lambda} \sigma(dx)\Big)^n F_1(\{x\}_1^n \cap X_1)F_2(\{x\}_1^n \cap X_2) =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\Big(\int\limits_{X_1} \sigma(dx) + \int\limits_{X_2} \sigma(dx)\Big)^n F_1(\{x\}_1^n \cap X_1)F_2(\{x\}_1^n \cap X_2) =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{n} \frac{1}{k!(n-k)!}\Big(\int\limits_{X_1} \sigma(dx)\Big)^k \Big(\int\limits_{X_2} \sigma(dx')\Big)^{n-k} F_1(\{x\}_1^k)F_2(\{x'\}_1^{n-k}) =$$

$$= \int\limits_{\Gamma_{X_1}} F_1(\gamma)\lambda_\sigma^{X_1}(d\gamma) \int\limits_{\Gamma_{X_2}} F_2(\gamma)\lambda_\sigma^{X_2}(d\gamma).$$

Лему доведено. $\square$

Наведемо ще одну важливу технічну лему, яка буде використана у дисертаційному дослідженні (див., наприклад, лему 2.1.3 в [81]).

Лема 1.2. *Для всіх позитивних вимірних функцій* $G : \Gamma_0 \mapsto \mathbb{R}$ *і* $H : \Gamma_0 \times \Gamma_0 \mapsto \mathbb{R}$ *на просторі* Γ_X*, де* $\Gamma_X \in \{\Gamma_0, \Gamma_\Lambda\}$ *(відповідно* $X \in \{\mathbb{R}^d, \Lambda\}$*), справедлива наступна рівність:*

$$\int\limits_{\Gamma_X} G(\gamma) \sum_{\eta \subseteq \gamma} H(\eta, \gamma \setminus \eta) \lambda_\sigma(d\gamma) =$$

$$= \int\limits_{\Gamma_X} \int\limits_{\Gamma_X} G(\eta \cup \gamma) H(\eta, \gamma) \lambda_\sigma(d\gamma) \lambda_\sigma(d\eta). \tag{1.27}$$

Доведення. Нехай $\eta \upharpoonright \Gamma_X^{(k)} = \{x_1, \ldots, x_k\} := \{x\}_1^k$,
$\gamma \upharpoonright \Gamma_X^{(m)} = \{x_{k+1}, \ldots, x_{k+m}\} := \{x\}_{k+1}^{k+m}$. Тоді отримуємо

$$\int\limits_{\Gamma_X} \int\limits_{\Gamma_X} G(\eta \cup \gamma) H(\eta, \gamma) \lambda_\sigma(d\gamma) \lambda_\sigma(d\eta) =$$

$$= \sum_{k,m=0}^{\infty} \frac{1}{k! m!} \int\limits_{X^k} \int\limits_{X^m} G(\{x\}_1^{k+m}) H(\{x\}_1^k, \{x\}_{k+1}^{k+m}) \sigma(dx)^{k+m} =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^{n} C_n^k \int\limits_{X^n} G(\{x\}_1^n) H(\{x\}_1^k, \{x\}_{k+1}^n) \sigma(dx)^n =$$

$$= \int\limits_{\Gamma_X} G(\gamma) \sum_{\eta \subseteq \gamma} H(\eta, \gamma \setminus \eta) \lambda_\sigma(d\gamma).$$

Лему доведено. □

Визначення міри Гіббса нескінченних систем. В рамках великого канонічного ансамблю система, що знаходиться в обмеженому об'ємі Λ, характеризується фіксованою температурою T та параметром μ, який називається хімічним потенціалом. Параметр μ відповідає за розподіл кількості частинок N в Λ. Для рівноважних систем вираз для міри Гіббса на просторі конфігурацій Γ_Λ можна подати у такому вигляді:

$$\mu_\Lambda(d\gamma) = \frac{1}{Z_\Lambda} e^{-\beta U(\gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma), \tag{1.28}$$

$$Z_\Lambda = \int\limits_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma), \tag{1.29}$$

де ми скористалися визначенням міри Лебега—Пуассона (1.23) для запису нормуючого множника великої статистичної суми.

Визначимо міру Гіббса на просторі нескінченних конфігурацій. Якщо у формулі (1.28) ми будемо безпосередньо переходити до нескінченного об'єму і розглядати $\gamma \in \Gamma$, то запропоноване співвідношення (1.28) втратить математичний зміст.

У випадку нескінченної системи в $\mathbb{R}^d$ у підході Добрушина—Ленфорда—Рюеля (див. [84], [42]) міра Гіббса μ визначається на Γ за допомогою сім'ї умовних ймовірнісних розподілів, щільність яких визначається похідною Радона—Нікодима

$$\frac{d\mu_\Lambda}{d\lambda_{z\sigma}}(\eta|\,\overline{\gamma}_{\Lambda^c}) = \frac{e^{-\beta U(\eta|\,\overline{\gamma}_{\Lambda^c})}}{Z_\Lambda(\overline{\gamma}_{\Lambda^c})}, \tag{1.30}$$

де

$$\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d),\ \Lambda^c = \mathbb{R}^d \backslash \Lambda,\ \eta \in \Gamma_\Lambda,\ \overline{\gamma} \in \Gamma.$$

Відповідні ймовірності визначаються формулою:

$$\Pi_\Lambda(A, \overline{\gamma}_{\Lambda^c}) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda} \mathbb{1}_A(\tilde{\gamma}_{\Lambda^c} \cup \eta)\mu_\Lambda(d\eta|\tilde{\gamma}_{\Lambda^c}),\ A \in \mathcal{B}(\Gamma), \tag{1.31}$$

де

$$U(\eta|\tilde{\gamma}_{\Lambda^c}) := U(\eta) + W(\eta; \overline{\gamma}_{\Lambda^c}), \tag{1.32}$$

де $U(\eta)$ — це енергія взаємодії усіх частинок конфігурації $\eta \subset \Lambda$, а $W(\eta; \overline{\gamma}_{\Lambda^c})$ — це енергія взаємодії між частинками конфігурації η і частинками конфігурацій $\overline{\gamma}_{\Lambda^c}$, що визначається формулою (1.12), а

$$Z_\Lambda(\overline{\gamma}_{\Lambda^c}) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda} e^{-U(\eta|\,\overline{\gamma}_{\Lambda^c})} \lambda_{z\sigma}(d\eta). \tag{1.33}$$

Тоді μ будемо називати мірою Гіббса, якщо

$$\mu(\Pi_\Lambda(A,\cdot)) = \int\limits_\Gamma \Pi_\Lambda(A \mid \gamma)\mu(d\gamma) = \mu(A) \tag{1.34}$$

для довільного $A \in \mathcal{B}(\Gamma)$ і $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$.

Формулу (1.34) називають рівнянням Добрушина—Ленарда—Рюеля (ДЛР). Якщо міра μ задовольняє рівняння ДЛР, тоді це є необхідною і достатньою умовою того, що μ є мірою Гіббса.

Зауважимо, що міра Гіббса також задовольняє і інші рівняння, серед яких рівняння Рюеля, запропоноване вченим в роботі [120] та рівняння Георгії—Нгуєна—Цессіна [56], [92]. Більш детальний опис міри Гіббса можна знайти в монографіях [56], [34], [57].

1.5. Кореляційні та термодинамічні функції мір Гіббса

Статистичні властивості нескінченних систем взаємодіючих частинок у практичному аспекті доцільно описувати, використовуючи кореляційні функції. З точки зору фізичних міркувань кореляційні функції були вперше введені ще на початку XX століття Орштейном і Церніке при дослідженні критичних флуктуацій. Математичні дослідження кореляційних функцій почалися з роботи Івона [127] і незалежних досліджень Боголюбова [5], Кірквуда [75] та Борна—Гріна [46]. З точки зору теорії міри кореляційні функції є в певному сенсі аналогом моментів міри.

Перш за все треба зауважити, що кожну конфігурацію γ можна ототожнити з узагальненою функцією. Але у просторі узагальнених функцій операція множення (зведення у степінь) не є визначеною. У гауссівському аналізі (тобто на просторах функцій, які інтегровані за мірою Гаусса) вводять так звану віківську регуляризацію. Так само можна зробити і у випадку пуассонівського аналізу [81], [70], [68].

Перша степінь визначається звичайним чином за визначенням узагальненої функції. Нехай G є функцією на просторі $\Gamma_0 (G : \Gamma_0 \to \mathbb{R})$, такою, що

$$G \restriction \Gamma_0^{(n)} = G^{(n)}(\{x_1, \dots, x_n\}) :=$$

$$:= G_n(x_1, \dots, x_n), \quad G_n \in C_0(\mathbb{R}^{dn}). \tag{1.35}$$

Тоді

$$< G^{(1)}, \gamma >:= \sum_{x_1 \in \gamma} < G^{(1)}, \delta_{x_1} >= \sum_{x_1 \in \gamma} G_1(x_1), \tag{1.36}$$

n-у ступінь визначимо формулою

$$< G^{(n)}, : \gamma^{\otimes n} :>:= \sum_{\{x_1, \dots, x_n\} \subset \gamma} G_n(x_1, \dots, x_n). \tag{1.37}$$

Тоді аналогом формули моментів є формула

$$\int_\Gamma < G^{(n)}, : \gamma^{\otimes n} :> \mu(d\gamma) := \tag{1.38}$$

$$:= \int_{\mathbb{R}^{dn}} G_n(x_1, \dots, x_n) \rho^{(n)}((\sigma(dx_1), \dots, \sigma(dx_n))).$$

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

$$\rho^{(n)}(\sigma(dx_1), \dots, \sigma(dx_n)) := \frac{1}{n!} \rho_n(x_1, \dots, x_n) \sigma(dx_1) \cdots \sigma(dx_n),$$

$$\rho_n(x_1, \dots, x_n) := \rho(\eta) \restriction \Gamma^{(n)}, \quad \eta = \{x_1, \dots, x_n\}. \tag{1.39}$$

З урахуванням (1.37) формулу (1.38) можна переписати у вигляді

$$\int\limits_{\Gamma} \sum_{\{x_1,\dots,x_n\}\subset\gamma} G_n(x_1,\dots,x_n)\mu(d\gamma) = \tag{1.40}$$

$$= \int\limits_{\mathbb{R}^{dn}} G_n(x_1,\dots,x_n)\rho^{(n)}(\sigma(dx_1),\dots,\sigma(dx_n)).$$

Кореляційну міру тепер можна визначити на просторі усіх скінченних конфігурацій Γ_0, просумувавши рівність (1.40) за всіма $n \geq 0$. Тоді з (1.40) отримуємо формулу:

$$\int\limits_{\Gamma} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{x_1,\dots,x_n\}\subset\gamma} G_n(x_1,\dots,x_n)\mu(d\gamma) := \tag{1.41}$$

$$:= \int\limits_{\Gamma} \sum_{\eta\Subset\gamma} G(\eta)\mu(d\gamma) = \int\limits_{\Gamma_0} G(\eta)\rho(d\eta),$$

а у випадку (1.39)

$$\int\limits_{\Gamma} \sum_{\eta\Subset\gamma} G(\eta)\mu(d\gamma) = \int\limits_{\Gamma_0} G(\eta)\rho(\eta)\lambda_\sigma(d\eta), \tag{1.42}$$

де значок $\eta \Subset \gamma$ означає сумування за усіма скінченними підмножинами η нескінченної конфігурації γ. Підставимо в (1.40) $G = 1\!\!1_A$, $A \in \mathcal{B}(\Gamma_0)$, тоді отримуємо означення кореляційної міри на $\mathcal{B}(\Gamma_0)$:

$$\rho_\mu(A) = \rho(A) = \int\limits_{\Gamma} \sum_{\eta\Subset\gamma} 1\!\!1_A(\eta)\mu(d\gamma), \tag{1.43}$$

або, використовуючи праву частину (1.42) та визначення міри λ_σ, отримуємо:

$$\rho(A) = \int\limits_{\Gamma_0} 1\!\!1_A(\eta)\rho(\eta)\lambda_\sigma(d\eta) = \int\limits_{\Gamma_0} 1\!\!1_A(\eta)z^{-|\eta|}\rho(\eta)\lambda_{z\sigma}(d\eta). \tag{1.44}$$

Знаючи вираз для кореляційної функції, можна обчислити середні спостережуваних величин, обраховуючи інтеграли за мірою Лебега—Пуассона:

$$< F_B >_\mu = \int\limits_{\Gamma} F_B(\gamma)\mu(d\gamma) = \int\limits_{\Gamma_0} f_B(\eta)\rho(\eta)\lambda_\sigma(d\eta). \tag{1.45}$$

Відомо, що для кожного із трьох ансамблів Гіббса, вводять деяку статистичну суму, яка являє собою загальну міру фазового простору системи. Логарифм статистичної суми, поділений на об'єм області, що містить цю систему, має границю при збільшенні частинок у системі. Цю границю зазвичай і ототожнюють з деякою термодинамічною функцією. Оскільки термодинамічні функції залежать від ансамблів, то вони мають задовольняти звичайні термодинамічні співвідношення (еквівалентність ансамблів).

В дисертаційній роботі будемо розглядати термодинамічні функції, які визначають основні макроскопічні характеристики досліджуваної системи — тиск та вільну енергію Гельмгольца.

Тиск системи є функцією від активності z, яка безпосередньо пов'язана з густиною системи частинок, та оберненого значення температури $\beta = \frac{1}{kT}$, де T — температура системи, а k — стала Больцмана, що забезпечує перехід від температурної до енергетичної шкали. Обчислюємо тиск за допомогою формули:

$$p(z,\beta) = \lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d} p^\Lambda(z,\beta) := \frac{1}{\beta}\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\log Z_\Lambda(z,\beta), \tag{1.46}$$

де $Z_\Lambda(z,\beta)$ — це велика статистична сума. Аналітичний запис великої статистичної суми можна подати у вигляді інтегралу за мірою Лебега—Пуассона по всім можливим конфігураціям частинок від фактора Больцмана [37]:

$$Z_\Lambda(z,\beta) := \int\limits_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma), \tag{1.47}$$

де потенціальна енергія системи

$$U(\gamma) = \begin{cases} 0, & \text{для } |\gamma| = 0 \vee 1; \\ \sum\limits_{\{x,y\}\subset\gamma} \phi(|x-y|) := \sum\limits_{\{x,y\}\subset\gamma} \phi_{xy}, & \text{для } |\gamma| \geq 2. \end{cases} \tag{1.48}$$

Запис великої статистичної суми у вигляді (1.47) був відомий ще з робіт Р. А. Мінлоса, Я. Г. Сіная та їх учнів (1967-1968 р.р.), які у своїх дослідженнях зосереджували увагу на вивченні теорії фазових переходів, властивостях конфігураційних просторів, а також вперше розвинули контурну техніку для аналізу та оцінок ймовірності різних конфігурацій у фазовому просторі системи частинок [38], [22].

Вільна енергія системи є функцією від питомого об'єму v (об'єм, що припадає на одну частинку) та оберненого значення температури $\beta = \frac{1}{kT}$, де T — температура системи, а k — стала Больцмана. Обчислюється вільна енергія системи за допомогою формули:

$$f(v,\beta) = -\frac{1}{\beta} \lim_{\substack{N,V\to\infty \\ \frac{V}{N}\to v}} \frac{1}{N} \log Z_\Lambda(N,\beta). \tag{1.49}$$

$Z_\Lambda(N,\beta)$ називають конфігураційним інтегралом або статистичною сумою канонічного ансамблю, аналітичний запис якої можна подати в наступному вигляді:

$$Z_\Lambda(N,\beta) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} e^{-\beta U(\gamma)} \lambda_{\lambda_D^{-d}\sigma}(d\gamma), \tag{1.50}$$

де $\lambda_D = (\frac{h^2\beta}{2\pi m})^{\frac{1}{2}}$, h – стала, яку вводять, щоб позбутися розмірності.

1.6. Висновки до першого розділу

У першому розділі дисертаційної роботи здійснено огляд літературних джерел за темою дисертаційного дослідження та введено основні означення та поняття рівноважної статистичної механіки, які будуть необхідними при формулюванні одержаних результатів дослідження в наступних розділах. У підрозділі 1.1 представлено основні етапи еволюції досліджень актуальних задач математичної фізики. У підрозділі 1.2 описано простори конфігурацій систем статистичної механіки (простір нескінченних конфігурацій, простір скінченних конфігурацій, простір щільних та розріджених конфігурацій). У підрозділі 1.3 введено поняття парного потенціалу взаємодії тотожних точкових частинок, сформульовано означення потенціальної енергії взаємодії між частинками, розглянуто умови, які накладають на двочастинковий потенціал взаємодії (умови стійкості, надстійкості, посиленої надстійкості та умова регулярності); наведено приклад посилено надстійких взаємодій, розглянуто потенціали типу Ленарда—Джонса. У підрозділі 1.4 описано міри на просторах конфігурацій: введено поняття мір Лебега—Пуассона та Пуассона, а також розглянуто їх основні властивості, найважливішою серед яких є властивість нескінченної подільності; окрему увагу приділено мірі Гіббса нескінченних систем. У підрозділі 1.5 розглянуто основні характеристики міри Гіббса — кореляційні функції; описано зв'язок між кореляційною мірою та мірою Гіббса; визначені основні термодинамічні функції.

РОЗДІЛ 2

Застосування нескінченновимірного аналізу в статистичній механіці

Фізичні системи статистичної механіки можна розглядати як приклад застосування математичних методів нескінченновимірного аналізу точкових зліченних систем. Завдяки даному методу не лише спрощується запис фізичних характеристик статистичних систем (статистичні суми, кореляційні функції тощо), але й доведення громіздких комбінаторних формул. Слід також зазначити, що метод нескінченновимірного аналізу є надзвичайно зручним для отримання нових математичних результатів.

Основна мета написання другого розділу — продемонструвати глибокий зв'язок математичного опису нескінченних систем статистичної механіки і методів нескінченновимірного пуассонівського аналізу на фазових просторах таких систем.

2.1. Експоненціальне представлення деяких інтегралів за мірою Лебега—Пуассона

Одним із яскравих прикладів застосування методу нескінченновимірного пуассонівського аналізу при дослідженні нескінченних систем точкових частинок є результат, який буде сформульований у вигляді теореми 2.1.

В статистичній механіці доведення цього результату зводиться до алгебраїчних перетворень, наприклад в монографії Рюеля [37], [117]. Це також слідує з роботи [53], проте вимагає ще додатково певні комбінаторні пересумування. Ми ж ставимо за мету продемонструвати інший варіант доведення формули (2.6). Зауважимо, що отриманий результат є надзвичайно корисним при вивченні окремих питань статистичної механіки, а саме для зручності обчислення деяких комбінаторних формул. В даній роботі будуть використані математичні властивості інтегралів за мірою Пуассона (в обмеженому об'ємі дану міру називають мірою Лебега—Пуассона [41], [42]). Слід зазначити, що міра Пуассона визначається на просторі локально скінченних конфігурацій евклідового простору $\mathbb{R}^d$ і використовується при побудові міри Гіббса для нескінченних систем точкових частинок.

Міра Пуассона належить до класу мір, що мають властивість нескінченної подільності. Дана властивість відповідно поширюється і на інтеграли за мірою Лебега—Пуассона. Ось чому є надзвичайно корисним технічним засобом для побудови нових типів кластерних розкладів, використання яких робить можливим спростити доведення суперстійкості оцінок для кореляційних функцій.

Отже, нехай $\mathbb{R}^d$ — d-вимірний евклідовий простір, всі локально скінченні підмножини якого утворюють простір конфігурацій Γ, визначений формулою (1.3). Простори скінченних конфігурацій Γ_0 та конфігурацій, що знаходяться в деякій обмеженій множині, Γ_Λ визначимо формулами (1.6). Відповідні σ-алгебри цих просторів будемо позначати $\mathcal{B}(\Gamma_0)$ та $\mathcal{B}(\Gamma_\Lambda)$.

Нехай σ — міра Лебега в $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$. Для будь-якого $n \in \mathbb{N}$ визначимо добуток мір $\sigma^{\otimes n}$, який можна розглядати як міру на

$$\widetilde{(\mathbb{R}^d)^n} = \{(x_1, \dots, x_n) \in (\mathbb{R}^d)^n \ \mid \ x_k \neq x_l, \text{ якщо } k \neq l\}.$$

Як наслідок, міру $\sigma^{(n)}$ на $\Gamma^{(n)}$ визначають шляхом відображення

$$sym_n : \widetilde{(\mathbb{R}^d)^n} \ni (x_1, \ldots, x_n) \mapsto \{x_1, \ldots, x_n\} \in \Gamma^{(n)}.$$

Для всіх $z > 0$ міру Лебега—Пуассона $\lambda_{z\sigma}$ на $\mathcal{B}(\Gamma_0)$ було визначено формулою (1.23), але абстрактно вона може бути представлена наступним чином

$$\lambda_{z\sigma} := \sum_{n \geq 0} \frac{z^n}{n!} \sigma^{(n)}. \tag{2.1}$$

Для будь-якої $\mathcal{B}(\Gamma_\Lambda)$ — вимірної функції F інтеграл за мірою Лебега—Пуассона (2.1) визначатиметься за допомогою формули (1.23), для всіх функцій $F : \Gamma_\Lambda \mapsto \mathbb{R}$ або $F : \Gamma_0 \mapsto \mathbb{R}$, що можуть бути представлені як нескінченна послідовність симетричних функцій $\{F_n\}_{n \geq 0}$ так, що для будь-якої конфігурації $\gamma = \{x_1, \ldots, x_n\} \in (\mathbb{R}^d)^{\otimes n}$ матимемо:

$$F(\gamma) = F(\{x_1, \ldots, x_n\}) = F_n(x_1, \ldots, x_n) = F(x_{\pi(1)}, \ldots, x_{\pi(n)}), \tag{2.2}$$

$F(\emptyset) = F_0 \in \mathbb{R}$, $\pi \in P_n$, а P_n — є множиною перестановок з n елементів.

Будемо розглядати функції на конфігураційному просторі Γ_Λ, що мають вигляд:

$$\Phi(\gamma) = \sum_{k=1}^{|\gamma|} \sum^{*}_{\{\gamma_1, \ldots, \gamma_k\} \subset \gamma} F(\gamma_1) F(\gamma_2) \ldots F(\gamma_k), \quad \Phi(\emptyset) = 1, \tag{2.3}$$

де $*$ в межі суми означає, що сумування відбувається по всіх k-непорожнім неперетинним підмножинам γ, тобто

$$\bigcup_{j=1}^{k} \gamma_j = \gamma,\ \gamma_i \cap \gamma_j = \varnothing \text{ для всіх } i \neq j,\ \gamma_i \neq \varnothing,\ i, j \in \{1, \ldots, k\}. \tag{2.4}$$

Теорема 2.1. *Нехай функція* Φ *має вигляд (2.3), а функції* F_n*, задані формулою (2.2), задовольняють наступні оцінки:*

$$\int\limits_{\Lambda} \dots \int\limits_{\Lambda} F_n(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n \leq c^n C_\Lambda n!, \tag{2.5}$$

де стала c *не залежить від* Λ*. Тоді буде справджуватись рівність:*

$$\int\limits_{\Gamma_\Lambda} \Phi(\gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma) = e^{\int\limits_{\Gamma_\Lambda \setminus \{\varnothing\}} F(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)} \tag{2.6}$$

для $0 < z < 1/2c$*.*

Доведення. Введемо в розгляд функцію

$$\Phi(\alpha; \gamma) = \sum_{k=1}^{|\gamma|} \frac{\alpha^k}{k!} \Phi_k(\gamma), \ \ \alpha \in \mathbb{R}, \ |\gamma| \geq 1, \ \Phi(\alpha, \varnothing) = 1, \tag{2.7}$$

в якій

$$\Phi_k(\gamma) = \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_k) \subset \gamma}^{*} F(\gamma_1) F(\gamma_2) \dots F(\gamma_k), \tag{2.8}$$

де функції F є такими ж, як у (2.3)–(2.6). На відміну від формули (2.3), у формулі (2.8) сумування відбувається по всім впорядкованим підмножинам множини, що задовольняють (2.4). Очевидно, що $\Phi(\gamma) = \Phi(1; \gamma)$. В наступних етапах доведення теореми нам буде потрібна лема. □

Лема 2.1. *Нехай функція* F *в означенні (2.3) задовольняє припущення (2.5). Для будь-якого* $\alpha \in \mathbb{R}$ *функція* $\Phi(\alpha; \cdot)$ *є інтегрованою на* Γ_Λ *за мірою Лебега—Пуассона* $\lambda_{z\sigma}$ *і для будь-якого* $0 < z < 1/2c$ *функція* I *визначається формулою*

$$I(\alpha) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda} \Phi(\alpha; \gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma), \alpha \in \mathbb{R} \tag{2.9}$$

є аналітичною і може бути представлена у вигляді розкладу Маклорена для будь-якого $\alpha \in (-R; R)$ *та* $R > 0$*.*

Доведення леми 2.1. Запишемо вираз (2.9), враховуючи означення міри Лебега—Пуассона (1.23):

$$I(\alpha) = 1 + \sum_{N=1}^{\infty} \frac{z^N}{N!} \sum_{k=1}^{N} \frac{\alpha^k}{k!} \int\limits_{\Lambda^N} (dx)^N \Phi_k(\gamma), \text{ де } \gamma = \{x_1, \ldots, x_n\}. \quad (2.10)$$

Продиференціюємо функцію $I(\alpha)$ (2.10):

$$\frac{dI(\alpha)}{d\alpha} = \sum_{N=1}^{\infty} \frac{z^N}{N!} \sum_{k=1}^{N} \frac{k\alpha^{k-1}}{k!} \int\limits_{\Lambda^N} (dx)^N \Phi_k(\gamma) =$$

$$= \sum_{N=1}^{\infty} \frac{z^N}{N!} \sum_{k=1}^{N} \frac{\alpha^{k-1}}{(k-1)!} \int\limits_{\Lambda^N} (dx)^N \Phi_k(\gamma);$$

$$\frac{d^2 I(\alpha)}{d\alpha^2} = \sum_{N=2}^{\infty} \frac{z^N}{N!} \sum_{k=2}^{N} \frac{(k-1)\alpha^{k-2}}{(k-1)!} \int\limits_{\Lambda^N} (dx)^N \Phi_k(\gamma) =$$

$$= \sum_{N=2}^{\infty} \frac{z^N}{N!} \sum_{k=2}^{N} \frac{\alpha^{k-2}}{(k-2)!} \int\limits_{\Lambda^N} (dx)^N \Phi_k(\gamma)$$

і так далі.

Зрозуміло, що похідна m-го порядку від функції $I(\alpha)$ буде виражатися наступним чином:

$$I^{(m)}(\alpha) = \frac{d^m I(\alpha)}{d\alpha^m} =$$

$$= \int\limits_{\Gamma_\Lambda} \mathbb{1}_{A_m}(\gamma) \sum_{k=m}^{|\gamma|} \frac{\alpha^{k-m}}{(k-m)!} \Phi_k(\gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \quad (2.11)$$

$$= \sum_{N=m}^{\infty} \frac{z^N}{N!} \sum_{k=m}^{N} \frac{\alpha^{k-m}}{(k-m)!} \int\limits_{\Lambda^N} (dx)^N \sum_{(\gamma_1, \ldots, \gamma_k) \subset \{x_1, \ldots, x_N\}}^{*} F(\gamma_1) F(\gamma_2) \ldots F(\gamma_k),$$

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

$$A_m := \{\gamma \in \Gamma_\Lambda \mid \ |\gamma| \geq m\}. \quad (2.12)$$

Позначимо кількість частинок конфігурації $|\gamma_j| = n_j$, де $j = \overline{1,k}$. Сума з $*$ у формулі (2.8) є сумою по всіх можливих розбиттях конфігурації $\{x_1, \dots, x_N\}$ на k неперетинні конфігурації з фіксованим числом елементів $n_1, \dots, n_k$, а також сумою по всім можливим значенням $n_j \geq 1$ з обмеженням $n_1 + n_2 + \ldots + n_k = N$. Сума по всіх можливих розбиттях є класичною комбінаторною задачею (модель Бозе—Ейнштейна) і налічує $\frac{N!}{n_1! \dots n_k!}$ елементів і

$$\sum_{\substack{\{n_1,\dots,n_k \geq 1\} \\ n_1+\ldots+n_k=N}} 1 \leq \sum_{\substack{\{n_1,\dots,n_k \geq 0\} \\ n_1+\ldots+n_k=N}} 1 = C_{N+k-1}^{N} < 2^{N+k}$$

Враховуючи оцінку (2.5), отримуємо

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

$$< \frac{(4czC_\Lambda R)^m}{(1-2cz)R^m} e^{2|\alpha| C_\Lambda} < M \frac{m!}{R^m}, \tag{2.13}$$

де

$$M = M(R) = \frac{e^{2(1+2cz)RC_\Lambda}}{1-2cz} \tag{2.14}$$

для будь-якого $R > 0$.

Отже, згідно з критерієм аналітичності (див. (1.2:1) у [21]) функція $I(\alpha)$ буде аналітичною.

Тому дану функцію $I(\alpha)$ можна подати у вигляді степеневого ряду Маклорена:

$$I(\alpha) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^m}{m!} I^{(m)}(0), |\alpha| < R. \tag{2.15}$$

Лему доведено.

Продовження доведення теореми 2.1. З формули (2.11) видно, що функція $I(1)$ є лівою частиною рівності (2.6). Тому для того, щоб довести теорему, слід показати, що права частина (2.15) може бути представлена у вигляді експоненти (2.6) при $\alpha = 1$. З рівності (2.11) при $\alpha = 0$ отримуємо:

$$I^{(m)}(0) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda} 1\!\!1_{A_m}(\gamma)\Phi_m(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \tag{2.16}$$

$$= \sum_{N=m}^{\infty} \frac{z^N}{N!} \int\limits_{\Lambda^N} (dx)^N \sum^{*}_{(\gamma_1,\dots,\gamma_N)\subset\{x_1,\dots,x_N\}} F(\gamma_1)F(\gamma_2)\dots F(\gamma_N).$$

Зважаючи на те, що $\gamma = \{x_1,\dots,x_N\}$, функцію $\Phi_m(\gamma)$ (див. 2.8) можна записати у вигляді

$$\Phi_m(\gamma) = \sum^{*}_{(\gamma_1,\dots,\gamma_N)\subset\gamma} F(\gamma_1)\dots F(\gamma_N) =$$

$$= \sum_{\substack{(\gamma_1,\dots,\gamma_N)\subset\gamma \\ \bigcup\limits_{i=1}^{N}\gamma_i=\gamma}} 1\!\!1_{A_1}(\gamma_1)F(\gamma_1)1\!\!1_{A_1}(\gamma_2)F(\gamma_2)\dots 1\!\!1_{A_1}(\gamma_N)F(\gamma_N).$$

Нехай в останній рівності конфігурація $\gamma_N = \eta$, тоді

$$\Phi_m(\gamma) = \sum_{\eta\subseteq\gamma} 1\!\!1_{A_1}(\eta)F(\eta)\times$$

$$\times \sum_{\substack{(\gamma_1,\dots,\gamma_{N-1})\subset\gamma\backslash\eta \\ \bigcup\limits_{i=1}^{N-1}\gamma_i=\gamma\backslash\eta}} 1\!\!1_{A_1}(\gamma_1)F(\gamma_1)\dots 1\!\!1_{A_1}(\gamma_{N-1})F(\gamma_{N-1}) =$$

$$= \sum_{\eta\subseteq\gamma} 1\!\!1_{A_1}(\eta)F(\eta)1\!\!1_{A_{m-1}}(\gamma\backslash\eta)\Phi_{m-1}(\gamma\backslash\eta). \tag{2.17}$$

В рівності (2.17) сума починається з $\eta = \varnothing$, але відповідний член дорівнюватиме нулю, оскільки $1\!\!1_{A_1}(\varnothing) = 0$ за означенням.

Застосувавши формулу (1.27), покладаючи в ній $G(\gamma) = 1\!\!1_{A_m}(\gamma)$ та

$$H(\eta,\gamma\backslash\eta) = 1\!\!1_{A_1}(\eta)F(\eta)1\!\!1_{A_{m-1}}(\gamma\backslash\eta)\Phi_{m-1}(\gamma\backslash\eta), \tag{2.18}$$

і використавши рівність

$$\mathbb{1}_{A_m}(\gamma \cup \eta)\mathbb{1}_{A_1}(\eta)\mathbb{1}_{A_{m-1}}(\gamma) = \mathbb{1}_{A_1}(\eta)\mathbb{1}_{A_{m-1}}(\gamma),$$

отримаємо

$$I^{(m)}(0) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda}\int\limits_{\Gamma_\Lambda} \mathbb{1}_{A_m}(\gamma\cup\eta)\mathbb{1}_{A_1}(\eta)F(\eta)\mathbb{1}_{A_{m-1}}(\gamma)\Phi_{m-1}(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\eta)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) =$$

$$= \int\limits_{\Gamma_\Lambda} \mathbb{1}_{A_1}(\eta)F(\eta)\lambda_{z\sigma}(d\eta) \int\limits_{\Gamma_\Lambda} \mathbb{1}_{A_{m-1}}(\gamma)\Phi_{m-1}(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \qquad (2.19)$$

Тому

$$I^{(m)}(0) = (\int\limits_{\Gamma_\Lambda} \mathbb{1}_{A_1}(\eta)F(\eta)\lambda_{z\sigma}(d\eta))I^{(m-1)}(0). \qquad (2.20)$$

Ітерації цього рівняння дають результат леми 2.1 (див. формулу (2.15)), тому (2.20) можна записати у вигляді

$$I^{(m)}(0) = \Big(\int\limits_{\Gamma_\Lambda} \mathbb{1}_{A_1}(\eta)F(\eta)\lambda_{z\sigma}(d\eta)\Big)^m.$$

А далі

$$I(\alpha) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda} \Phi(\alpha;\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^m}{m!}\Big(\int\limits_{\Gamma_\Lambda} \mathbb{1}_{A_1}(\eta)F(\eta)\lambda_{z\sigma}\Big)^m.$$

Остаточно при $\alpha = 1$ отримуємо результат теореми 2.1

$$\int\limits_{\Gamma_\Lambda} \Phi(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) = e^{\int\limits_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\emptyset\}} F(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)}.$$

Що і треба було довести.

2.2. Застосування теореми 2.1 до великої статистичної суми та тиску

Одним із прикладів застосування теореми 2.1 є представлення великої статистичної суми (1.47) у вигляді експоненти. Даний результат є надзвичайно важливим для побудови термодинамічних потенціалів, зокрема тиску(1.46) при переході до нескінченного об'єму.

Отже, будемо використовувати доведену в попередньому пункті дисертаційної роботи теорему для отримання так званого розкладу Майєра для тиску та густини нескінченної системи точкових частинок, що взаємодіють через парний потенціал ϕ, який є неперервною функцією на $\mathbb{R}_+ \backslash \{0\}$ і задовольняє умови стійкості (1.13) та регулярності (1.16).

Для того, щоб нам було зручно застосувати теорему 2.1, необхідно записати функціонал $e^{-\beta U(\gamma)}$, який входить в означення великої статистичної суми (1.47), у наступному вигляді:

$$e^{-\beta U(\gamma)} = e^{-\beta \sum\limits_{\{z,y\}\subset\gamma} \phi_{xy}} = \prod_{\{x,y\}\subset\gamma} e^{-\beta\phi_{xy}} =$$

$$= \prod_{\{x,y\}\subset\gamma} \big((e^{-\beta\phi_{xy}} - 1) + 1\big),$$

тобто

$$e^{-\beta U(\gamma)} = \begin{cases} 1, & \text{для } |\gamma| = 0 \vee 1; \\ \prod\limits_{\{x,y\}\subset\gamma} (C_{xy} + 1), & \text{для } |\gamma| \geq 2, \end{cases} \tag{2.21}$$

де $C_{xy} := e^{-\beta\phi_{xy}} - 1$.

Добуток у формулі (2.21) можна записати як суму внесків графа, вершинами якого є точки конфігурації γ. Внесок кожної вершини виражається одиницею, а внесок лінії $l = l_{xy}$, що з'єднує дві точки $x, y \in \gamma$, є функцією C_{xy}. Таким чином, внесок будь-якого графу є сумою функцій $C_{l_{xy}} = C_{xy}$ по всім внутрішнім лініям $\mathcal{L}(G)$ графу G. Легко порахувати, що для будь-якої конфігурації $\gamma \in \Gamma_\Lambda$ сума в (2.21) включатиме $2^{N(N-1)/2}$ графи, де число $N = |\gamma|$. Позначимо граф $G = G(\gamma)$, а $\mathcal{G}(\gamma)$ — сукупність таких графів, тоді функцію Больцмана можна подати у вигляді суми:

$$e^{-\beta U(\gamma)} = \sum_{G \in \mathcal{G}(\gamma)} \prod_{\{x,y\} \in \mathcal{L}(G)} C_{xy}. \tag{2.22}$$

Кожен граф G може бути представлений у вигляді композиції з k графів $G_i^T \ \ (i \in \{1, \dots, k\})$, при чому ці графи будуть зв'язними:

$$G = C_1^T * \ldots * G_k^T. \tag{2.23}$$

Число k називають порядком незв'язності графа $G(1 \leq k \leq N)$, де $N = |\gamma|$. Внески графу G з $k > 1$ є сумою k внесків з кожного графу $G_i^T, \ i = 1, k$. Кожен граф $G \in \mathcal{G}$ може бути співставлений з розбиттям конфігурації γ на множину підконфігурацій $\{\gamma_1, \dots, \gamma_k\}$, що задовольняють умову (2.4), проте для кожного такого розбиття є багато графів G з однаковим значенням k.

Далі можна здійснити повторне пересумування в (2.21), розклавши суму на $N = |\gamma|$ доданків з однаковим числом k. Потім розділити доданки з однаковим числом k, суму графів з однаковими вершинами, які належать до однієї з k підмножин конфігурації γ, на які вона поділена $\{\gamma_1, \dots, \gamma_k\}$. Спочатку ми сумуємо всі графи з однаковими внесками, що належать $\{\gamma_2, \dots, \gamma_k\}$ та з різними внесками з γ_1. В результаті отримуємо суму внесків, кожен доданок якої матиме однаковий перший член:

$$\Phi^T(\gamma_1) = \begin{cases} 1, & \text{для } |\gamma_1| = 1, \\ \displaystyle\sum_{G^T \in \mathcal{G}^T(\gamma_1)} \prod_{\{x,y\} \in \mathcal{L}(G^T)} C_{xy}, & \text{для } |\gamma_1| \geq 2, \end{cases} \tag{2.24}$$

де $\mathcal{G}^T(\gamma_1)$ — множина усіх зв'язних графів, вершини яких є точками конфігурації γ_1, функції $\Phi^T(\gamma)$ називають функціями Урселла [37], які безпосередньо пов'язані зі зв'язними узагальненими функціями [91]. Після аналогічних пересумувань для $\gamma_2, \dots, \gamma_k$, в результаті отримаємо:

$$e^{-\beta U(\gamma)} = \sum_{k=1}^{|\gamma|} \sum_{\{\gamma_1,\ldots,\gamma_k\}\subset\gamma}^{*} \Phi^T(\gamma_1)\ldots\Phi^T(\gamma_k), \tag{2.25}$$

де $*$ в межі суми означає те ж саме, що і у формулі (2.3). В результаті отримуємо новий вираз для великої статистичної суми:

$$Z_\Lambda(z,\beta) := \int\limits_{\Gamma_\Lambda} \sum_{k=1}^{|\gamma|} \sum_{\{\gamma_1,\ldots,\gamma_k\}\subset\gamma}^{*} \Phi^T(\gamma_1)\ldots\Phi^T(\gamma_k)\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{2.26}$$

Для того, щоб застосувати теорему 2.1 з $F(\gamma) = \Phi^T(\gamma)$ необхідно оцінити $\Phi^T(\gamma)$. Оцінки для таких функцій можна знайти в роботі [37]:

$$\int\limits_\Lambda \cdots \int\limits_\Lambda |\Phi^T(\{x_1,\ldots,x_n\})| dx_2\ldots dx_n \le (n-1)! e^{-2\beta B}(e^{2\beta B+1}C(\beta))^{n-1}. \tag{2.27}$$

Використаємо теорему 2.1 з $C_\Lambda = \sigma(\Lambda)C\ (\beta)^{-1}e^{-4\beta B-1}$ і $c = e^{2\beta B+1}C(\beta)$ для того, щоб представити велику статистичну суму у вигляді:

$$Z_\Lambda(z,\beta) = e^{\int\limits_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\emptyset\}} \Phi^T(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)}. \tag{2.28}$$

Остання рівність та оцінка (2.27) доводять існування та аналітичність тиску. Дійсно, використовуючи означення (1.46), отримуємо:

$$p(z,\beta) := \lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d} p^\Lambda := \frac{1}{\beta}\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\log Z_\Lambda(z,\beta) =$$

$$= \frac{1}{\beta}\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\log e^{\int\limits_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\emptyset\}} \Phi^T(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)} = \frac{1}{\beta}\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\int\limits_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\emptyset\}} \Phi^T(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) =$$

$$= \frac{1}{\beta}\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\sum_{n=1}^{\infty}\int\limits_\Lambda\cdots\int\limits_\Lambda |\Phi^T(\{x_1,\ldots,x_n\})| dx_1\ldots dx_n. \tag{2.29}$$

Слід зазначити, що існування та аналітичність тиску є наслідком існування інтегралів від функцій $\Phi^T(\{x_1,\dots,x_n\})$ по $x_2,\dots,x_n$ (див. формулу (2.26)).

Аналогічний результат також справджується і для густини нескінченної системи точкових частинок. Це слідує з представлення густини (див. [37]):

$$\rho = \lim_{\Lambda\to\infty} z\frac{d}{dz}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\log Z_\Lambda(z,\beta) =$$

$$= \lim_{\Lambda\to\infty} z\frac{d}{dz}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\log e^{\int\limits_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\emptyset\}}\Phi^T(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)} =$$

$$= \lim_{\Lambda\to\infty} z\frac{d}{dz}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\int\limits_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\emptyset\}}\Phi^T(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) =$$

$$= \lim_{\Lambda\to\infty}\frac{z}{\sigma(\Lambda)}\frac{d}{dz}\left(\sum_{n=1}^{\infty}\frac{z^n}{n!}\int\limits_\Lambda\dots\int\limits_\Lambda|\Phi^T\big(\{x_1,\dots,x_n\}\big)|dx_1\dots dx_n\right) =$$

$$= \lim_{\Lambda\to\infty}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}z\left(1+\sum_{n=2}^{\infty}\frac{z^{n-1}}{(n-1)!}\int\limits_\Lambda\dots\int\limits_\Lambda|\Phi^T\big(\{x_1,\dots,x_n\}\big)|dx_2\dots dx_n\right) =$$

$$= z+\sum_{n=2}^{\infty}\frac{z^n}{(n-1)!}\int\limits_{\mathbb{R}^d}\dots\int\limits_{\mathbb{R}^d}|\Phi^T\big(\{x_1,\dots,x_n\}\big)|dx_2\dots dx_n \tag{2.30}$$

та оцінки (2.26).

2.3. Рівняння Кірквуда—Зальцбурга для кореляційних функцій рівноважних систем

Запишемо вираз для кореляційних функцій ρ_Λ, у вигляді:

$$\rho_\Lambda(\emptyset) = 1,$$

$$\rho_\Lambda(\eta) = \frac{z^{|\eta|}}{Z_\Lambda}\int\limits_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\eta\cup\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma),\ \text{при } |\eta|\geq 1. \tag{2.31}$$

Достатньою умовою існування кореляційних функцій на Γ_Λ є умова стійкості (1.13) при $|\gamma| = N$. Ця умова дозволяє отримати оцінки:

$$1 \leq Z_\Lambda \leq e^{ze^{\beta B}\sigma(\Lambda)} \tag{2.32}$$

та

$$0 \leq \rho_\Lambda(\eta) \leq Z_\Lambda^{-1} e^{ze^{\beta B}\sigma(\Lambda)}. \tag{2.33}$$

Ці оцінки є наслідком умови стійкості (1.13) і означення інтегралу за мірою Лебега—Пуассона (1.23).

Але оцінка (2.33) не дає підстав зробити висновок, що послідовність функцій $\rho_\Lambda(\eta)$ має термодинамічну границю при $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^d$.

Одним з методів побудови кореляційних функцій при нескінченному об'ємі є метод рівнянь. Треба отримати рівняння для функцій ρ і знайти їх розв'язок. Отримаємо спершу такі рівняння для функцій ρ_Λ, тобто у скінченному об'ємі. Виділимо для цього в конфігурації η деяку точку $x \in \eta$ і введемо позначення $\eta^{(\widehat{x})} := \eta \backslash \{x\}$. Тоді вираз (2.31) можна переписати у вигляді:

$$\rho_\Lambda(\eta) = z^{|\eta|} \frac{e^{-\beta W(x;\eta^{(\widehat{x})})}}{Z_\Lambda} \int\limits_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta W(x;\gamma)} e^{-\beta U(\eta^{(\widehat{x})} \cup \gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{2.34}$$

Зауважимо, що при $|\eta| = 1$, тобто $\eta = \{x_1\}$, буде виконуватись рівність

$$e^{-\beta W(x_1;\eta^{(x_1)})} = 1.$$

Скористаємося тим, що у випадку парного потенціалу взаємодії енергія взаємодії двох конфігурацій задається формулою (1.32).

Тоді експоненту в (2.34) можна записати у вигляді:

$$e^{-\beta W(x;\gamma)} = \prod_{y \in \gamma} \big[(e^{-\beta \phi(|x-y|)} - 1) + 1 \big]. \tag{2.35}$$

Далі для довільної неперервної функції $\varphi \in C(\mathbb{R}^d)$ і довільного $\gamma \in \Gamma_\Lambda$ справедлива проста комбінаторна формула:

$$\prod_{y\in\gamma}[1+\varphi(y)] = \sum_{\xi\subseteq\gamma}\prod_{y\in\xi}\varphi(y). \tag{2.36}$$

Введемо наступне позначення:

$$K(x;\xi) := \begin{cases} \prod\limits_{y\in\xi}(e^{-\beta\phi(|x-y|)}-1), & |\xi|\geq 1, \\ 1, & \xi=\emptyset. \end{cases} \tag{2.37}$$

Тоді вираз (2.34) можна переписати у вигляді:

$$\rho_\Lambda(\eta) = z^{|\eta|}\frac{e^{-\beta W(x;\eta^{(\widehat{x})})}}{Z_\Lambda}\int\limits_{\Gamma_\Lambda}\sum_{\xi\subseteq\gamma}K(x;\xi)e^{-\beta U(\eta^{(\widehat{x})}\cup\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{2.38}$$

Застосуємо до правої частини (2.38) лему 1.2 з Γ_Λ замість Γ_0 і

$$G(\gamma) = e^{-\beta U(\eta^{(\widehat{x})}\cup\gamma)}, \tag{2.39}$$

$$H(\xi,\gamma\backslash\xi) = K(x;\xi) \equiv K(x;\xi)1\!\!1_{\Gamma_\Lambda}(\gamma\backslash\xi).$$

Тоді

$$\rho_\Lambda(\eta) = z^{|\eta|}\frac{e^{-\beta W(x;\eta^{(\widehat{x})})}}{Z_\Lambda}\int\limits_{\Gamma_\Lambda}\int\limits_{\Gamma_\Lambda}K(x;\xi)e^{-\beta U(\eta^{(\widehat{x})}\cup\xi\cup\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\xi). \tag{2.40}$$

Використовуючи означення кореляційного функціоналу (2.31), отримаємо остаточне співвідношення:

$$\rho_\Lambda(\eta) = ze^{-\beta W(x;\eta^{(\widehat{x})})}\int\limits_{\Gamma_\Lambda}K(x;\xi)\rho_\Lambda(\eta^{(\widehat{x})}\cup\xi)\lambda_\sigma(d\xi). \tag{2.41}$$

В останньому інтегралі була використана рівність:

$$\int\limits_{\Gamma_\Lambda}z^{-|\xi|}f(\xi)\lambda_{z\sigma}(d\xi) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda}f(\xi)\lambda_\sigma(d\xi), \tag{2.42}$$

яка випливає з означення інтеграла за мірою Лебега—Пуассона.

Формально таке саме рівняння можна записати і для нескінченної системи в усьому просторі $\mathbb{R}^d$:

$$\rho(\eta) = ze^{-\beta W(x;\eta^{(\widehat{x})})} \int\limits_{\Gamma_0} K(x;\xi)\rho(\eta^{(\widehat{x})} \cup \xi)\lambda_\sigma(d\xi), \quad \eta \in \Gamma_0. \tag{2.43}$$

Якщо існують розв'язки обох рівнянь (2.41), (2.43), і розв'язок рівняння (2.41) в деякому сенсі прямує до розв'язку рівняння (2.43) при $\Lambda \uparrow \mathbb{R}^d$, то він відповідає сім'ї кореляційних функцій міри Гіббса. Якщо такий розв'язок є єдиним при певних значеннях термодинамічних параметрів z, β, то відповідна міра Гіббса буде відповідати єдиному гіббсівському стану. Якщо ж декілька розв'язків при певних значеннях термодинамічних параметрів z, β, тоді ці розв'язки будуть відповідати різним гіббсівським станам і тоді кажуть, що в системі в околі цих термодинамічних параметрів відбувається фазовий перехід.

2.4. Рівняння ББҐКІ

Еволюція стану системи визначається рівнянням Боголюбова, яке являє собою нескінченну системи інтегрально-диференціальних рівнянь для кореляційних функцій. Дане рівняння має стаціонарні розв'язки, серед яких особливу роль відіграє перший розв'язок — розподіл Гіббса, що визначає рівноважний стан системи. Таким чином в основі статистичної механіки лежать рівняння Боголюбова, які єдиним чином визначають через стаціонарний та нестаціонарний розв'язки рівноважний та нерівноважний стан статистичної системи.

Рівняння Боголюбова розглядають як абстрактно еволюційні рівняння в деякому визначеному функціональному просторі. Щоб визначити еволюцію стану, слід побудувати для них еволюційний оператор. Виникає проблема: оператор в рівняннях Боголюбова є необмежений, а функціональний простір повинен мати в собі функції розподілу нескінченних систем. Для розв'язку цієї проблеми в статистичній механіці була створена процедура термодинамічного граничного переходу — спершу будуються розв'язки, що описують стан скінченних систем, а далі число частинок і об'єм посудини спрямовують до нескінченності при сталій густині. Отримані розв'язки описуватимуть стан нескінченних систем статистичної механіки.

Якщо кожна частинка системи має такі характеристики як імпульс, спін, заряд тощо, тоді фазовим простором є так званий маркований конфігураційний простір $\widetilde{\Gamma}$ (див. [59], [60], [67]). Ми розглянемо найбільш простий фазовий простір класичного точкового газу, кожна частинка якого в довільній 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 $p_x \in \mathbb{R}^d$:

$$\widetilde{\Gamma} := \{\widetilde{\gamma} = \{(x, p_x)\} \mid x \in \gamma, p_x \in \mathbb{R}^d\}. \tag{2.44}$$

Для того, щоб записати рівняння для кореляційних функцій нерівноважної системи взаємодіючих частинок, треба розглянути їх в конфігураційному просторі маркованих конфігурацій $\widetilde{\Gamma}$, визначеному в (2.44). Для довільної конфігурації $\widetilde{\gamma} \in \widetilde{\Gamma}$ з $\gamma \in \Gamma_0$ гамільтоніан складається з кінетичної енергії частинок конфігурації і потенціальної енергії їх взаємодії:

$$H(\widetilde{\gamma}) = E_k(\widetilde{\gamma}) + U(\gamma), \ E_k(\widetilde{\gamma}) = \sum_{x \in \gamma} \frac{p_x^2}{2m}. \tag{2.45}$$

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 $u^{\Lambda}(x),\ x \in \Lambda$:

$$u^{\Lambda}(x) := \begin{cases} +\infty, & \text{якщо } x \in \partial\Lambda, \\ 0, & \text{якщо } x \in \Lambda_{\delta}, \end{cases} \tag{2.46}$$

де область Λ_{δ} містить точки $x \in \Lambda$, які знаходяться на відстані $d \geq \delta > 0$ від $\partial\Lambda$. В області $\Lambda \backslash \Lambda_{\delta}$ функція $u^{\Lambda}(x)$ є гладкою позитивною функцією. Гамільтоніан такої системи має вигляд:

$$H^{\Lambda}(\widetilde{\gamma}) = E_k(\widetilde{\gamma}) + U^{\Lambda}(\gamma),\ U^{\Lambda}(\gamma) := U(\gamma) + \sum_{x \in \gamma} u^{\Lambda}(x),\ \gamma \in \Gamma_{\Lambda}. \tag{2.47}$$

Виведення рівнянь ББҐКІ. В рамках великого канонічного ансамблю вираз для щільності міри Гіббса буде мати вигляд:

$$D_{\Lambda}(\widetilde{\gamma}, N) = \frac{1}{Z_{\Lambda}} \frac{1}{N!} e^{\beta\mu N - \beta E(\widetilde{\gamma})}, \quad N = |\widetilde{\gamma}|, \tag{2.48}$$

де μ — хімічний потенціал, а Z_{Λ} — велика статистична сума, що виражається формулою:

$$Z_{\Lambda} = \sum_{N \geq 0} \frac{1}{N!} \int\limits_{\widetilde{\Gamma}_{\Lambda}^{(N)}} d\widetilde{\gamma} e^{\beta\mu N - \beta E(\widetilde{\gamma})}, \quad d\widetilde{\gamma} := (d\widetilde{\sigma})^N := (d\sigma \otimes dp)^N. \tag{2.49}$$

Еволюція щільності міри Гіббса описується рівнянням Ліувіля:

$$\frac{\partial}{\partial t} D_{\Lambda}(t; \widetilde{\gamma}) = \{H^{\Lambda}\widetilde{\gamma}, D(t; \widetilde{\gamma})\}_P = \tag{2.50}$$

$$= \sum_{x \in \gamma} [\nabla_x H^{\Lambda}(\widetilde{\gamma}) \cdot \nabla_{p_x} D_{\Lambda}(t; \widetilde{\gamma}) - \nabla_{p_x} H^{\Lambda}(\widetilde{\gamma}) \cdot \nabla_x D_{\Lambda}(t; \widetilde{\gamma})],$$

де $\{\cdot, \cdot\}_P$ — це дужки Пуассона, які визначаються другою стрічкою рівняння (2.50), а $\nabla_x(\nabla_{p_x})$ — градієнт за змінною $x(p_x)$. Треба також задати початковий розподіл:

$$D_{\Lambda}(t; \widetilde{\gamma})|_{t=0} = D_{\Lambda}^0(\widetilde{\gamma}). \tag{2.51}$$

Виходячи з вигляду гамільтоніану (див. (2.45) – (2.47)), граничні умови для функцій $D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma})$ можна записати у такому вигляді:

$$D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma})|_{\forall x\in\gamma, x\in\partial\Lambda} = D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma})|_{\forall x\in\gamma, p_x^{(\alpha)}=\pm\infty, \alpha=\overline{1,d}} = 0. \tag{2.52}$$

Еволюція початкової функції розподілу $D_\Lambda^0(\widetilde{\gamma})$ описується рівнянням Ліувіля (2.50) і визначається еволюцією початкової конфігурації $\gamma = \{\widetilde{x}_1, \ldots, \widetilde{x}_N\}$, $N = |\gamma|$, або на мові пуассонівських полів:

$$\widetilde{\gamma}(\widetilde{x}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\widetilde{x} - \widetilde{x}_i) = \delta(x - x_i)\delta(p_x - p_{x_i}). \tag{2.53}$$

Стан системи частинок в момент часу t буде визначатись конфігурацією

$$\widetilde{\gamma}_t = \{x_1(t), \ldots, x_N(t)\}, \widetilde{\gamma}_t(\widetilde{x}) = \sum_{i=1}^{N} \delta(\widetilde{x} - \widetilde{x}_i(t)), \widetilde{x}_i(t) = \widetilde{x}_i(t, \widetilde{\gamma}), \tag{2.54}$$

де точки конфігурації $\widetilde{x}_i(t)$ задовольняють систему рівнянь Гамільтона:

$$\frac{dp_{x_i}(t)}{dt} = -\frac{\partial H^\Lambda(\widetilde{\gamma}_t)}{\partial x_i(t)}, \ \frac{dx_i(t)}{dt} = \frac{\partial H^\Lambda(\widetilde{\gamma}_t)}{\partial p_{x_i}(t)}. \tag{2.55}$$

Позначимо через T_t оператор зсуву вздовж траєкторії частинок. Тоді

$$T_t\widetilde{\gamma} = \widetilde{\gamma}_t. \tag{2.56}$$

Зауважимо, якщо $\widetilde{\Gamma}_\Lambda$ з $\Lambda \in \mathcal{B}_c$ є фазовим простором системи частинок, еволюція фазових точок $\widetilde{\gamma} \in \widetilde{\Gamma}_\Lambda$ яких описує система рівнянь Гамільтона (2.55) з гамільтоніаном (2.47), тоді міра

$$\mu^t_{D_\Lambda}(d\widetilde{\gamma}) := D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}), \ \ t \geq 0 \tag{2.57}$$

є інваріантною відносно зсувів T_t:

$$\int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda} F(\widetilde{\gamma})\mu^t_{D_\Lambda}(d\widetilde{\gamma}) = \int_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda} F(T_t\widetilde{\gamma})\mu^0_{D_\Lambda}(d\widetilde{\gamma}) \tag{2.58}$$

для функцій F, для яких інтеграли в (2.58) приймають скінченне значення.

Доведення є наслідком відомої теореми Ліувіля (див. [32]) та визначення міри $\lambda_{\widetilde{\sigma}}$.

Кореляційні функції, які відповідають нерівноважній динаміці, визначаються за формулою:

$$\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta}) = \int\limits_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda} D_\Lambda(t;\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}), \tag{2.59}$$

де $\widetilde{\sigma}$ — міра Лебега в $\mathbb{R}^d\otimes\mathbb{R}^d$, тобто $d\widetilde{\sigma} = dxdp_x$. Продиференціюємо рівняння (2.59). Враховуючи рівняння Ліувіля та співвідношення:

$$\nabla_x H^\Lambda(\widetilde{\gamma}) := \begin{cases} \nabla_x U^\Lambda(\eta) + \nabla_x W(\eta;\gamma), & \text{якщо } x\in\eta, \\ \nabla_x U^\Lambda(\gamma) + \nabla_x W(\eta;\gamma), & \text{якщо } x\in\gamma, \end{cases} \tag{2.60}$$

$$\nabla_{p_x} H^\Lambda(\widetilde{\gamma}) = \frac{1}{m}\mathbf{p}_x,\ x\in\eta\cup\gamma, \tag{2.61}$$

отримуємо:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta}) = \sum_{x\in\eta}\left[\nabla_x U^\Lambda(\eta)\cdot\nabla_{p_x}\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta}) - \frac{1}{m}\mathbf{p}_x\cdot\nabla_x\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta})\right] + \tag{2.62}$$

$$+\sum_{x\in\eta}\int\limits_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}\sum_{y\in\gamma}\nabla_x\phi(|x-y|)\cdot\nabla_{p_x}D_\Lambda(t;\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) +$$

$$+\int\limits_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}\sum_{x\in\gamma}\nabla_x H^\Lambda(\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma})\cdot\nabla_{p_x}D_\Lambda(t;\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) -$$

$$-\int\limits_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}\sum_{x\in\gamma}\nabla_{p_x} H^\Lambda(\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma})\cdot\nabla_x D_\Lambda(t;\widetilde{\eta}\cup\widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}).$$

Застосуємо до 2-го, 3-го і 4-го доданків рівняння (2.62) формулу Мекке (1.25), яка має місце також на просторі $\widetilde{\Gamma}_\Lambda$ для міри $\lambda_{\widetilde{\sigma}}$. Враховуючи означення (2.59) та граничні умови (2.52), отримуємо рівняння ББҐКІ:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta}) = \sum_{x\in\eta}\left[\nabla_x U^\Lambda(\eta)\cdot\nabla_{p_x}\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta}) - \frac{1}{m}\mathbf{p}_x\cdot\nabla_x\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta})\right]+ \tag{2.63}$$

$$+\sum_{x\in\eta}\int\limits_\Lambda\int\limits_{\mathbb{R}^d}\nabla_x\phi(|x-y|)\cdot\nabla_{p_x}\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta}\cup\{(y,p_y)\})dydp_y.$$

Представлення розв'язку рівнянь ББҐКІ. Щоб отримати формулу, подібну до формули (2.44), запишемо спершу твірний функціонал для послідовності функцій $\rho_n^\Lambda(t;\widetilde{x}_1,\ldots,\widetilde{x}_n)$:

$$F_\Lambda(t;j) = \sum_{n=0}^\infty\frac{1}{n!}\int\limits_{\Lambda^n}\int\limits_{\mathbb{R}^{dn}}(d\widetilde{x})^n\rho_n^\Lambda(t;\widetilde{x}_1,\ldots,\widetilde{x}_n)j(\widetilde{x}_1)\cdots j(\widetilde{x}_n) =$$

$$= \int\limits_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}\rho_\Lambda(t;\widetilde{\eta})\prod_{\widetilde{x}\in\widetilde{\eta}}j(\widetilde{x})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\eta}). \tag{2.64}$$

Підставимо у цю формулу визначення (2.59) і застосуємо рівність (лема 1.2), 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 $H(\widetilde{\eta},\widetilde{\gamma}) = (\prod\limits_{\widetilde{x}\in\widetilde{\eta}}j(\widetilde{x}))1\!\!1_\Lambda(\gamma)$. В результаті отримуємо:

$$F_\Lambda(t;j) = \int\limits_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma})\sum_{\widetilde{\eta}\subseteq\widetilde{\gamma}}\prod_{\widetilde{x}\in\widetilde{\eta}}j(\widetilde{x})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) =$$

$$= \int\limits_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma})e^{<\widetilde{\gamma},\log(1+j)>}\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) =$$

$$= \int\limits_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma}) : e^{\widetilde{<\gamma,j>}} : \lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}), \tag{2.65}$$

де ми скористалися формулою

$$: e^{<\gamma, g>} := e^{<\gamma, \log(1+g)>}. \tag{2.66}$$

Формула (2.66) буде слідувати з формули (1.37) для функцій

$$G_n(x_1, \dots, x_n) = \prod_{\{x_1,\dots,x_n\}\subset\gamma} g(x_1)\dots g(x_n)$$

та формули

$$\sum_{\{x_1,\dots,x_n\}\subset\gamma} \prod_{j=1}^{n} g(x_j) = \prod_{x\in\gamma}(1+g(x)).$$

Скористаємося формулою (2.58). Тоді остаточно отримуємо наступне представлення для твірного функціоналу:

$$F_\Lambda(t;j) = \int\limits_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda} : e^{<\widetilde{\gamma}_t;j>} : D_\Lambda(0;\widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) = \tag{2.67}$$

$$= \int\limits_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda} e^{<\gamma_t, \log(1+j)>} D_\Lambda(0;\widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma})$$

і автоматично для кореляційних функцій:

$$\rho_\Lambda(t,\widetilde{\eta}) = \int\limits_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda} : \prod_{\widetilde{x}\in\widetilde{\eta}} \widetilde{\gamma}_t(\widetilde{x}) : D_\Lambda(0;\widetilde{\gamma})\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}). \tag{2.68}$$

Залишається з'ясувати, яким чином визначити еволюцію пуассонівського поля, тобто функцію $\widetilde{\gamma}_t$ (див. (2.54)).

Для цього виконаємо диференціювання по змінній t функціоналу $F_\Lambda(t;j)$ у формулі (2.65), вставляючи праву частину рівняння Ліувіля (2.50). Застосуємо знову формулу Мекке (1.25) і скористаємося формулами (2.60),(2.61), (1.32):

$$\frac{\partial F_\Lambda(t;j)}{\partial t} =$$

$$= \int\limits_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda} \int\limits_{\Lambda} \int\limits_{\mathbb{R}^d} \left[\nabla_x W_x^\Lambda(\gamma) \cdot \nabla_{p_x} D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma}\cup\{x\})\right] : e^{<\widetilde{\gamma}\cup\{x\},j>} : d\widetilde{x}\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}) -$$

$$-\int\limits_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}\int\limits_{\Lambda}\int\limits_{\mathbb{R}^d}\left[\frac{1}{m}\mathbf{p}_x\cdot\nabla_x D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma}\cup\{x\})\right]:e^{<\widetilde{\gamma}\cup\{x\},j>}:d\widetilde{x}\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma}),\quad(2.69)$$

де $W_x^\Lambda(\gamma):=W(x;\gamma)+u^\Lambda(x)$. Враховуючи граничні умови (2.52), виконаємо інтегрування за частинами по змінній p_x у першому доданку і по змінній x — у другому доданку, діючи відповідними операторами ∇_{p_x} і ∇_x на фактор $:e^{<\widetilde{\gamma}\cup\{x\},j>}:$. Далі знову застосуємо формулу (1.25), повертаючись до сумування по точках конфігурації $\widetilde{\gamma}$ і заміняючи це сумування введенням інтегралу від пуассонівського поля $\widetilde{\gamma}(\widetilde{x})$. Після цього виконаємо ще раз інтегрування за частинами в цих інтегралах в сенсі узагальнених функцій, тобто перекидаючи оператори ∇_{p_x} і ∇_x на пуассонівські поля. Тоді остаточно отримаємо таке представлення:

$$\frac{\partial F_\Lambda(t;j)}{\partial t}=-\int\limits_{\widetilde{\Gamma}_\Lambda}\lambda_{\widetilde{\sigma}}(d\widetilde{\gamma})D_\Lambda(t;\widetilde{\gamma})\int\limits_{\Lambda}\int\limits_{\mathbb{R}^d}d\widetilde{x}\Bigg(\frac{1}{m}\mathbf{p}_x\cdot\nabla_x\widetilde{\gamma}(\widetilde{x})-$$

$$-:\nabla_{p_x}\widetilde{\gamma}(\widetilde{x})\int\limits_{\Lambda}\int\limits_{\mathbb{R}^d}d\widetilde{x}'\widetilde{\gamma}(\widetilde{x}'):\cdot(\nabla_x\phi(|x-x'|)+$$

$$+\nabla_x u^\Lambda(x))\Bigg)\frac{\delta}{\widetilde{\gamma}(x)}:e^{<\widetilde{\gamma,j}>}:,\qquad(2.70)$$

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 (2.69), отримаємо вираз, який після застосування рівності (2.58) буде збігатись з правою частиною (2.70), якщо функція $\widetilde{\gamma}_t(\widetilde{x})$, буде задовольняти рівняння Власова

$$\frac{\partial\widetilde{\gamma}_t(\widetilde{x})}{\partial t}=-\frac{1}{m}\mathbf{p}_x\cdot\nabla_x\widetilde{\gamma}_t(\widetilde{x})+\qquad(2.71)$$

$$+:\nabla_{p_x}\widetilde{\gamma}_t(\widetilde{x})\int\limits_{\Lambda}\int\limits_{\mathbb{R}^d}d\widetilde{x}'\widetilde{\gamma}'_t(\widetilde{x}'):\cdot(\nabla_x\phi(|x-x'|)+\nabla_x u^\Lambda(x))$$

у сенсі узагальнених функцій. Використовуючи це рівняння, легко перевірити безпосередньо, що вираз (2.68) задовольняє рівняння (2.63) (див. також [108]).

2.5. Висновки до другого розділу

У другому розділі дисертаційної роботи продемонстровано зручність використання методу нескінченновимірного пуассонівського аналізу для доведення теорем статистичної механіки. У підрозділі 2.1 за допомогою даного методу доведено теорему 2.1 про експоненціальне представлення деяких інтегралів за мірою Лебега—Пуассона. У підрозділі 2.2 розглянуто застосування результату теореми 2.1 до великої статистичної суми, густини та тиску. У підрозділі 2.3 запропонований новий спосіб виведення рівнянь Кірквуда—Зальцбурга для кореляційних функцій рівноважних систем. В останньому підрозділі з позиції нескінченновимірного пуассонвіського аналізу розглянуто виведення ланцюжка рівнянь ББҐКІ для кореляційних функцій.

Основні результати другого розділу опубліковано в працях [35], [44], [8].

РОЗДІЛ 3

Розклади кореляційних та термодинамічних функцій

Дослідження термодинамічних потенціалів є основним математичним засобом для розуміння природи фазових переходів в системах взаємодіючих частинок. Одним з методів дослідження статистичних систем є розклад величин, що їх характеризують, за степенями активності z. Такий розклад називають розкладом Майєра [37], [32]. Представлення термодинамічних величин за степенями густини ρ називають віріальним розкладом. По мірі того як активність z або густина ρ прямує до нуля, поведінка відповідної системи взаємодіючих частинок наближається до поведінки системи без взаємодії. Актуальним питанням є дослідження розкладів кореляційних та термодинамічних функцій у ряди.

Слід зазначити, що перший нетривіальний результат про збіжність ряду розкладу термодинамічних функцій за степенями активності був отриманий незалежно Боголюбовим, Хацетом [4] та Грьонвельдом для випадку додатних парних взаємодій. Пізніше Рюелю вдалося узагальнити отриманий Грьонвельдом результат для більш широкого класу взаємодій. Завдяки дослідженням Пенроуза були отримані оцінки для радіусів збіжності розкладів Майєра, що не залежать від об'єму куба, в якому знаходиться система. У своїх дослідженнях вчений використовував рівняння Майєра—Монтролла. Над питаннями, пов'язаними з розкладами термодинамічних функцій в ряди, працювали також такі вчені, як Галлавотті таМіракль—Соля, Лебовіц, Ліба та інші [37].

3.1. Розклад Бріджеса—Федербуша для неінтегровних потенціалів взаємодії

Одним із методів обчислення коефіцієнтів розкладу Майєра є метод Бріджеса—Федербуша [48]. Особливістю цього методу є нова форма запису коефіцієнтів розкладу, аналітичний вигляд яких описується вкладами від графів-дерев на відміну від майєрівських графів. Аналітичним вкладом кожної лінії, що з'єднує дві вершини $x \in \mathbb{R}^d$ та $y \in \mathbb{R}^d$ такого графа, є парний потенціал взаємодії $\phi(|x-y|)$, який повинен бути інтегрованим. В методі Бріджеса—Федербуша значно спрощується доведення збіжності рядів в області малих значень параметра активності z.

Будемо розглядати систему точкових частинок, які взаємодіють неінтегровним в околі нуля потенціалом. Такі системи можна розглядати в рамках моделі коміркового газу, яка була введена О. Л. Ребенком [103] як апроксимація неперервних систем статистичної механіки з посилено надстійкими взаємодіями [107].

Потенціали таких взаємодій не є інтегровними, тому безпосередньо застосувати метод Бріджеса—Федербуша до таких систем неможливо. Посилено надстійкі потенціали, які ми розглядаємо, не задовольняють цим вимогам. Тому потрібно застосувати деякі проміжні технічні конструкції, щоб коректно побудувати цей розклад.

Продемонструємо цю технічну роботу і доведемо збіжність даного розкладу.

3.1.1. Побудова розкладу. Для початку введемо простори конфігурацій Γ, Γ_0 і Γ_Λ відповідно формулами (1.3), (1.6). Будемо також розглядати міру Лебега—Пуассона $\lambda_{z\sigma}$ на σ-алгебрі $\mathcal{B}(\Gamma_0)$, що визначатиметься формулою (1.23). Звуження міри λ_σ на $\mathcal{B}(\Gamma_\Lambda)$ ми також позначатимемо $\lambda_\sigma \equiv \lambda_\sigma^\Lambda$. Нехай також потенціал взаємодії задовольняє умови **(A)** (див. (1.17)-(1.23)). Потенціали такого класу є посилено надстійкими [103], [107], але для побудови розкладу достатньою умовою є умова стійкості взаємодії (2.18). Розглядатимемо потенціали типу Ленарда—Джонса (див. рис. 1.1).

Велика статистична сума для системи, що знаходиться в деякому обмеженому об'ємі $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ визначається формулою (1.47).

Термодинамічний потенціал, який відповідає тиску, визначається за формулою (1.46).

Розкладом Майєра, який ми зараз побудуємо, є ряд:

$$\beta p(z,\beta) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n(\beta) z^n. \tag{3.1}$$

Отже, представимо велику статистичну суму $Z_\Lambda(z,\beta)$ у вигляді:

$$Z_\Lambda(z,\beta) = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Z_\Lambda(N), \tag{3.2}$$

де

$$Z_\Lambda(N) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} e^{-\beta U(\gamma)} \lambda_\sigma(d\gamma) = \frac{1}{N!} \int\limits_{\Lambda^N} (dx)^N e^{-\beta U^{(N)}}, \tag{3.3}$$

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

$$U^{(N)} := U(\{x_1, \ldots, x_N\}) =$$

$$= \sum_{1 \le i < j \le N} \phi(|x_i - x_j|) := \sum_{1 \le i < j \le N} \phi_{ij}. \tag{3.4}$$

Якщо ми виділимо перші k частинок, то енергія $N-k$ частинок

$$U^{(N-k)} := U(\{x_{k+1}, \dots, x_N\}) :=$$

$$:= \sum_{k+1 \le i < j \le N} \phi(|x_i - x_j|) := \sum_{k+1 \le i < j \le N} \phi_{ij}. \tag{3.5}$$

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

$$w(|x|) := \phi^+(|x|) - v(|x|) \ge 0 \text{ для всіх } x \in \mathbb{R}^d, \tag{3.6}$$

а потенціал

$$\varphi = v - \phi^- \tag{3.7}$$

є стійким (1.13), тобто

$$U_\varphi(\gamma) = \sum_{\{x,y\} \subset \gamma} \varphi(|x-y|) \ge -B_1|\gamma| \tag{3.8}$$

з деякою константою $B_1 \ge 0$. Тоді

$$\phi = w + \varphi, \;\; U(\gamma) = U_\phi(\gamma) = U_w(\gamma) + U_\varphi(\gamma). \tag{3.9}$$

Наведемо приклад такого позитивного інтегровного парного потенціалу v.

Виберемо в якості $v = \phi_0^+$, де ϕ_0^+ визначається так само, як в умові (1.18) при $s < d$. Тоді $w = \phi^+ - \phi_0^+ \ge 0$. За рахунок вигляду функції w, у записі якої присутні лише додатні частини потенціалу ϕ^+ та ϕ_0^+, значення функції w будуть невід'ємні, тому графік потенціалу w буде лежати в I чверті системи координат. Очевидно, що $\varphi = v - \phi^- = (\phi^+ - \phi_0^+) - \phi^-$ буде задовольняти умову посиленої надстійкості.

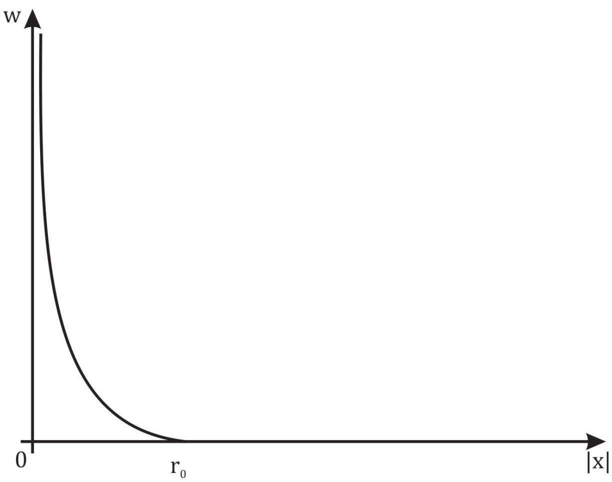

Рис. 3.1: Графік функції $w(|x|) = \phi^+(|x|) - v(|x|)$

Введемо параметри інтенсивності взаємодії. Нехай s_k ($o \leq s_k \leq 1$) характеризує інтенсивність взаємодії перших k частинок з рештою $N-k$ частинками. Підставимо спершу параметр s_1 у вираз для енергії N частинок таким чином, щоб при $s_1 = 0$ взаємодія першої частини з рештою виключалась, а при $s_1 = 1$ зберігалась повна взаємодія усіх N частинок. Спершу введемо ці параметри в енергію $U_\varphi(\gamma)$. Тоді при $0 < s_1 < 1$ енергію $U_\varphi^{(N)}$ можна записати таким чином

$$V_1^{(N)}(s_1) = (1 - s_1)V_0^{(N),(1)} + s_1 V_0^{(N)}, \tag{3.10}$$

де

$$V_0^{(N),(1)} := U_\varphi^{(1)} + U_\varphi^{(N-1)}, \text{ а } V_0^{(N)} := U_\varphi^{(N)}. \tag{3.11}$$

Тепер у цей вираз підставимо параметр s_2, відокремлюючи взаємодію першої і другої частинки від $(N-2)$-х частинок, що залишились. В результаті отримуємо вираз:

$$V_2^{(N)}(s_1, s_2) = (1 - s_2)V_1^{(N),(2)}(s_1) + s_2 V_1^{(N)}(s_1), \tag{3.12}$$

де $V_1^{(N),(2)}(s_1) := V_1^{(N)}(s_1) + U_\varphi^{(N-2)}$. Після підстановки параметра s_k маємо:

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

$$+s_k V^{(N)}_{k-1}(s_1, \dots, s_{k-1}), \tag{3.13}$$

де $V^{(N),(k)}_{k-1}(s_1, \dots, s_{k-1}) := V^{(k)}_{k-1}(s_1, \dots, s_{k-1}) + U^{(N-k)}_{\varphi}$,

а при $k = N-1$

$$V^{(N)}_{N-1}(\sigma_{N-1}) := V^{(N)}(\sigma_{N-1}) = \sum_{1 \le i < j \le N} s_i s_{i+1} \dots s_{j-1} \varphi_{ij}, \tag{3.14}$$

де для скорочення запису введемо позначення

$$\sigma_{N-1} := (s_1, \dots, s_{N-1}) := (s)_{N-1}. \tag{3.15}$$

Відповідну послідовність для потенціалу w означимо наступним чином:

$$W^{(N)}(\sigma_{N-1}) = -\frac{1}{\beta} \sum_{1 \le i < j \le N} \ln(1 + s_1 \dots s_{j-1} u_{ij}), \tag{3.16}$$

де

$$u_{ij} = e^{-\beta w_{ij}} - 1. \tag{3.17}$$

При $s_1 = \ldots = s_{N-1} = 1$ маємо

$$W^{(N)}(\sigma_{N-1}) = U_w = \sum_{1 \le i < j \le N} w_{ij}. \tag{3.18}$$

Вигляд енергії (3.16) виникає після підстановки параметра інтенсивності s не перед потенціалом w, як ми це робили у виразі для U_{φ}, а заміною експоненти $e^{-\beta w_{ij}}$ на вираз $1+su_{ij}$, який при $s=1$ збігається з даною експонентою, а при $s=0$ взаємодія між i-ю та j-ю частинками зникає.

Повну потенціальну енергію N частинок з введеними параметрами інтенсивності позначимо наступним чином:

$$U^{(N)}(\sigma_{N-1}) := V^{(N)}(\sigma_{N-1}) + W^{(N)}(\sigma_{N-1}). \tag{3.19}$$

Введемо також додаткові позначення, які далі будуть використовуватись:

$$\varphi'_{ij} = \varphi_{ij} - \frac{1}{\beta}\frac{u_{ij}}{1 + s_i \dots s_{j-1} u_{ij}}, \tag{3.20}$$

$$K_l^{\Lambda} = \frac{1}{l}\int\limits_{\Lambda^l} (dx)^l J^{(l)}(x)_l, \tag{3.21}$$

де

$$J^{(1)}(x)_1 = J^{(1)}(x_1) = 1,$$

$$J^{(l)}(x)_l = (-\beta)^{l-1}\int\limits_0^1 d\sigma_{l-1} e^{-\beta U(\sigma_{l-1})} \prod_{j=2}^{l} \big[s_1 \dots s_{j-2}\varphi'_{1j} +$$

$$+ s_2 \dots s_{j-2}\varphi'_{2j} + \dots + s_{(j-2)j}\varphi'_{(j-2)j} + \varphi'_{(j-1)j}\big], \tag{3.22}$$

де $l \geq 2$, а

$$Z_{\Lambda}(N-l) = \frac{1}{(N-l)!}\int\limits_{\Lambda^{N-l}} (dx)^{N-l} \prod_{l+1 \leq i < j \leq N} e^{-\beta(w_{ij} + \varphi_{ij})}. \tag{3.23}$$

У формулі (3.22) ми також ввели позначення:

$$\int\limits_0^1 d\sigma_{N-1} = \int\limits_0^1 ds_1 \int\limits_0^1 ds_2 \dots \int\limits_0^1 ds_{N-1}. \tag{3.24}$$

Перетворимо функціонал $Z_{\Lambda}(N)$ наступним чином. Для початку відокремимо взаємодію першої частинки від решти, ввівши параметр інтенсивності s_1 і використовуючи тотожність:

$$e^{f(1)} = e^{f(0)} + \int\limits_0^1 ds_1 f'(s_1) e^{f(s_1)}. \tag{3.25}$$

Тоді вираз (3.3) набуває вигляду:

$$Z_\Lambda(N) = \frac{1}{N!}\int\limits_{\Lambda^{(N)}} (dx)^N \prod_{1\le i<j\le N} e^{-\beta(w_{ij}+\varphi_{ij})} =$$

$$= \frac{1}{N!}\int\limits_{\Lambda^N}(dx)^N \prod_{2\le i<j\le N} e^{-\beta(w_{ij}+\varphi_{ij})}\prod_{j=2}^{N} e^{-\beta(w_{1j}+\varphi_{1j})} =$$

$$= \frac{1}{N!}\int\limits_{\Lambda^N}(dx)^N \prod_{2\le i<j\le N} e^{-\beta(w_{ij}+\varphi_{ij})}\times$$

$$\times\Big[1+\int\limits_0^1 ds_1\frac{d}{ds_1}[\prod_{j=2}^{N} e^{-\beta s_1\varphi_{1j}}(1+s_1u_{1j})]\Big], \tag{3.26}$$

де u_{1j} визначено у формулі (3.17). В інтегралі за змінною s_1 виконаємо диференціювання:

$$\int\limits_0^1 ds_1\frac{d}{ds_1}\Big[\prod_{j=2}^{N} e^{-\beta s_1\varphi_{1j}}(1+s_1u_{1j})\Big] =$$

$$= \int\limits_0^1 ds_1\frac{1}{ds_1}\Big[e^{-\beta s_1\varphi_{12}}(1+s_1u_{12})\cdot e^{-\beta s_1\varphi_{13}}(1+s_1u_{13})\cdot\ldots\cdot$$

$$\cdot e^{-\beta s_1\varphi_{1N}}(1+s_1u_{1N})\Big] = \int\limits_0^1 ds_1\Big[\big[-\beta\varphi_{12}(1+s_1u_{12})e^{-\beta s_1\varphi_{12}}+$$

$$+u_{12}e^{-\beta s_1\phi_{12}}]\prod_{j=3}^{N} e^{-\beta s_1\varphi_{1j}}(1+s_1u_{1j})+\ldots+$$

$$+[-\beta\varphi_{1N}(1+s_1u_{1N})e^{-\beta s_1\varphi_{1N}}+u_{1N}e^{-\beta s_1\varphi_{1N}}]\prod_{j=2}^{N-1} e^{-\beta s_1\varphi_{1j}}(1+s_1u_{1j})\Big] =$$

$$= \int\limits_0^1 ds_1\Big[\frac{-\beta\varphi_{12}(1+s_1u_{12})+u_{12}}{1+s_1u_{12}}\prod_{j=2}^{N} e^{-\beta s_1\varphi_{1j}}(1+s_1u_{1j})+\ldots+$$

$$+\frac{-\beta\varphi_{1N}(1+s_1u_{1N})+u_{1N}}{1+s_1u_{1N}}\prod_{j=2}^{N}e^{-\beta s_1\varphi_{1j}}(1+s_1u_{1j})\Big]=$$

$$=\int\limits_0^1 ds_1\sum_{j=2}^{N}[\prod_{j=2}^{N}e^{-\beta s_1\varphi_{1j}}(1+s_1u_{1j})]\frac{-\beta\varphi_{1j}(1+s_1u_{1j})+u_{1j}}{1+s_1u_{1j}}=$$

$$=(-\beta)\int\limits_0^1 ds_1\sum_{j'=2}^{N}(\varphi_{1j'}+\frac{u_{1j'}}{1+s_1u_{1j'}})\prod_{j=2}^{N}e^{-\beta s_1\varphi_{1j}}(1+s_1u_{1j}). \qquad (3.27)$$

Підставимо отриманий вираз (3.27) у формулу (3.26) і скористаємось симетричністю підінтегральної функції відносно перестановки змінних $x_1,\ldots,x_N$. В результаті отримаємо рівність:

$$Z_\Lambda^{(N)}=\frac{1}{N!}\int\limits_{\Lambda^N}(dx)^N\prod_{2\le i<j\le N}e^{-\beta(w_{ij}+\varphi_{ij})}\Bigg[1+$$

$$+(-\beta)\int\limits_0^1 ds_1\sum_{j'=2}^{N}(\varphi_{1j'}+\frac{u_{1j'}}{1+s_1u_{1j'}})\prod_{j=2}^{N}e^{-\beta s_1\varphi_{1j}}(1+s_1u_{1j})\Bigg]=$$

$$=\frac{1}{N!}\int\limits_{\Lambda^N}(dx)^N\prod_{2\le i<j\le N}e^{-\beta(w_{ij}+\varphi_{ij})}+\frac{1}{N!}\int\limits_{\Lambda^N}(dx)^N\prod_{2\le i<j\le N}e^{-\beta(w_{ij}+\varphi_{ij})}\times$$

$$\times(-\beta)\int\limits_0^1 ds_1\sum_{j'=2}^{N}(\varphi_{1j'}+\frac{u_{1j'}}{1+s_1u_{1j'}})\prod_{j=2}^{N}e^{-\beta s_1\varphi_{1j}}(1+s_1u_{1j}). \qquad (3.28)$$

Враховуючи означення (3.21) та (3.22) для $l=1$ маємо:

$$Z_\Lambda(N)=\frac{1}{N}K_1^\Lambda Z_\Lambda(N-1)+\frac{(-\beta)}{(N-2)!N}\int\limits_{\Lambda^N}(dx)^N\times$$

$$\times\prod_{2\le i<j\le N}e^{-\beta(w_{ij}+\varphi_{ij})}\int\limits_0^1 ds_1\varphi'_{12}\prod_{j=2}^{N}e^{-\beta s_1\varphi_{1j}}(1+s_1u_{1j}), \qquad (3.29)$$

де φ'_{12} визначено формулою (3.20).

В множниках добутків правої частини формули (3.29) встановимо параметр інтенсивності взаємодії s_2 між першими двома частинками та рештою $(N-2)$ частинками, використавши тотожність:

$$\prod_{j=3}^{N} e^{-\beta(w_{2j}+\varphi_{2j})} e^{-\beta s_1 \varphi_{1j}} (1+s_1 u_{1j}) =$$

$$= 1 + \int\limits_0^1 ds_2 \frac{d}{ds_2}\Big[\prod_{j=3}^{N} e^{-\beta s_1 s_2 \varphi_{1j}}(1+s_1 s_2 u_{1j}) e^{-\beta s_2 \varphi_{2j}}(1+s_2 u_{2j})\Big]. \quad (3.30)$$

У формулі (3.30) виконаємо диференціювання по параметру інтенсивності взаємодії s_2:

$$\frac{d}{ds_2}\big[\prod_{j=3}^{N} e^{-\beta s_1 s_2 \varphi_{1j}}(1+s_1 s_2 u_{1j}) e^{-\beta s_2 \varphi_{2j}}(1+s_2 u_{2j})\big] =$$

$$= -\beta \sum_{j=3}^{N} \prod_{j=3}^{N} e^{-\beta s_1 s_2 \varphi_{1j}}(1+s_1 s_2 u_{1j}) e^{-\beta s_2 \varphi_{2j}}(1+s_2 u_{2j}) \times$$

$$\times \big[s_1(\varphi_{1j} - \frac{1}{\beta}\frac{u_{1j}}{1+s_1 s_2 u_{1j}}) + (\varphi_{2j} - \frac{1}{\beta}\frac{u_{2j}}{1+s_2 u_{2j}})\big].$$

Пророблюючи усі операції, як на першому кроці і враховуючи позначення (3.14), (3.16), (3.19), (3.20), (3.21), (3.22) при $l=2$ отримаємо наступний член розкладу рівності (3.29)

$$Z_\Lambda(N) = \frac{1}{N} K_1^l Z_\Lambda(N-1) + \frac{2}{N} K_2^l Z_\Lambda(N-2) +$$

$$+ \frac{(-\beta)^2}{(N-3)!N} \int\limits_{\Lambda^N} (dx)^N \prod_{3 \le i < j \le N} e^{-\beta(w_{ij}+\varphi_{ij})} \times$$

$$\times \int\limits_0^1 ds_1 \int\limits_0^1 ds_2 \varphi'_{12}(s_1 \varphi'_{13} + \varphi'_{23}) e^{-\beta U^{(2)}(s_1)} \times$$

$$\times \prod_{j=3}^{N} e^{-\beta[s_1 s_2 \varphi_{1j} + s_2 \varphi_{2j}]}(1+s_1 s_2 u_{1j})(1+s_2 u_{2j}). \quad (3.31)$$

Продовжуючи цей процес до тих пір, доки не буде вичерпано усі змінні, отримаємо розклад:

$$Z_\Lambda(N) = \sum_{l=1}^{N} \frac{l}{N} K_l^\Lambda Z_\Lambda(N-l). \tag{3.32}$$

Підставимо праву частину тотожності (3.32) у вираз для великої статистичної суми (3.2) і продиференціюємо за змінною z, припускаючи, що ряд $\sum\limits_{n\geq 1} nz^{n-1}K_n^\Lambda$ рівномірно збігається в деякому околі точки $z=0$ (це буде доведено нижче). Тоді отримаємо рівняння:

$$\frac{dZ_\Lambda}{dz} = (\sum_{n=1}^{\infty} nz^{n-1}K_n^\Lambda)Z_\Lambda. \tag{3.33}$$

Тоді остаточно для статистичної суми отримуємо представлення:

$$Z_\Lambda = \exp(\sum_{n=1}^{\infty} z^n K_n^\Lambda), \tag{3.34}$$

а враховуючи означення (1.46) і (3.1), отримуємо:

$$b_n(\beta) = \lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d} \frac{1}{\sigma(\Lambda)} K_n^\Lambda. \tag{3.35}$$

3.1.2. Доведення збіжності. Збіжність розкладу Майєра, про який було описано в попередньому підпункті, буде виражати наступна теорема.

Теорема 3.1. *Нехай потенціал взаємодії задовольняє умови* ***(A)*** *(див. (1.17)-(1.20)). Тоді існує границя*

$$\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d} \frac{1}{\sigma(\Lambda)} \log Z_\Lambda(z,\beta) = \beta p(z,\beta) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n(\beta) z^n \tag{3.36}$$

для достатньо малих значень активності z, які визначаються нерівністю:

$$z\beta e^{\beta B_1+1}(||\varphi||_1 + ||u||_1) < 1, \tag{3.37}$$

де

$$||f||_1 := \int\limits_{\mathbb{R}^d} |f(x)|dx < \infty. \tag{3.38}$$

Доведення. Представимо тепер добуток сум у $J^{(n)}(x)_n$ (див. формулу (3.22)) у вигляді суми добутків. Тоді

$$J^{(n)}(x)_n = \sum_{\eta} J^{(n)}_{\eta}(x)_n, \tag{3.39}$$

де

$$J^{(n)}_{\eta}(x)_n = (-\beta)^{n-1} \int\limits_0^1 d\sigma_{n-1} f(\eta, \sigma_{n-1}) (\prod_{i=2}^{n} \varphi'_{\eta(i)i}) e^{-\beta U^{(n)}(\sigma_{n-1})}, \tag{3.40}$$

а η — це відображення

$$\eta : \{2, 3, \dots, n\} \mapsto \{1, 2, \dots, n-1\}, \quad \eta(i) < i, \tag{3.41}$$

тобто $\eta(k)$ може приймати значення тільки у множині $\{1, 2, \dots, k-1\}$. Добуток в (3.40) можна розглядати як внесок графа-дерева з вершинами у точках $\{x_1, \dots, x_n\}$, а кожній лінії, що з'єднує вершину $x_\eta(i)$ і вершину x_i, відповідає фактор $\varphi'_{\eta(i)i}$. З визначення відображення (3.41) слідує, що кожний граф-дерево побудовано таким чином, що кожна k-та вершина x_k (починаючи з другої) приєднується до вершини $x_\eta(k)$ графа, що складається з $(k-1)$-ї вершини. Зрозуміло, що усіх таких графів у сумі (3.43) буде $(n-1)!$. Але цей факторіал буде контролюватись інтегралом від функцій $f(\eta, \sigma_{n-1})$, яка має вигляд:

$$f(\eta, \sigma_{n-1}) := \begin{cases} 1, & \text{якщо } n = 2, \\ \prod\limits_{i=2}^{n-1} s_\eta(i) \dots s_{i-1}, & \text{якщо } n > 2, \end{cases} \tag{3.42}$$

який слідує безпосередньо з побудови розкладу. Легко переконатись (див. [48]), що

$$\sum_{\eta} \int\limits_0^1 d\sigma_{n-1} f(\eta, \sigma_{n-1}) \le e^{n-1}. \tag{3.43}$$

□

Враховуючи цю оцінку легко довести наступну пропозицію.

Пропозиція 2.1. Нехай потенціал взаємодії задовольняє умови **(A)** (див. (1.17)- (1.20)). Тоді

$$|K_n^\Lambda| \leq \beta^{n-1}(||\varphi||_1 + ||u||_1)^{n-1} e^{n(\beta B_1+1)-1}\sigma(\Lambda). \tag{3.44}$$

Доведення. Дана нерівність слідує з очевидного факту, що

$$0 < 1 + s_i \dots s_{j-1} u_{ij} < 1, \tag{3.45}$$

внаслідок чого

$$|\varphi'_{\eta(i)i}(1 + s_{\eta(i)} \dots s_{i-1} u_{\eta(i)i})| \leq |\varphi_{\eta(i)i}| + |u_{\eta(i)i}|, \tag{3.46}$$

трансляційної інваріантності добутку у правій частині (3.40) за змінними $x_1, \dots, x_n$, умови (3.8) та визначень (3.16)— (3.22) та (3.38)—(3.40).

Оцінка (3.44) забезпечує існування границі (3.36) і теорему 3.1 доведено.

□

3.2. Розклади Майєра для зв'язних кореляційних функцій

Твірні функціонали кореляційних функцій $\rho_m(x_1, \dots, x_m)$ і зв'язних кореляційних функцій $\rho_m^T(x_1, \dots, x_m)$ задовольняють співвідношенню:

$$F_\Lambda(j) = e^{F_\Lambda^T(j)}, \quad F_\Lambda^T(j) = \ln F_\Lambda(j) \tag{3.47}$$

де

$$F_\Lambda(j) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \int\limits_{\Lambda^N} (dx)^N j(x_1) \dots j(x_N) \rho_{N;\Lambda}(x_1, \dots, x_N), \tag{3.48}$$

$$F_{\Lambda}^{T}(j)=\sum_{N=1}^{\infty}\frac{1}{N!}\int\limits_{\Lambda^N}(dx)^N j(x_1)\dots j(x_N)\rho_{N;\Lambda}^{T}(x_1,\dots,x_N). \qquad (3.49)$$

Відповідні функції:

$$\rho_N^{\Lambda}(x_1,\dots,x_N)=\left.\frac{\delta^N F_{\Lambda}(j)}{\delta j(x_1)\dots\delta j(x_N)}\right|_{j=0};$$

$$\rho_N^{\Lambda^T}(x_1,\dots,x_N)=\left.\frac{\delta^N F_{\Lambda}^{T}(j)}{\delta j(x_1)\dots\delta j(x_N)}\right|_{j=0}; \qquad (3.50)$$

конфігурація $\eta=\{x_1,\dots,x_N\}$,

$$e_{\lambda}(j,\eta)=\prod_{x\in\eta}j(x)=j(x_1)j(x_2)\dots j(x_N).$$

Наведемо приклад зв'язних кореляційних функцій, врахувавши, що $F_{\Lambda}^{T}(j)=\ln F_{\Lambda}(j)$

$$\rho^T(x_1)=\left.\frac{\delta F_{\Lambda}^{T}(j)}{\delta j(x_1)}\right|_{j=0}=\big(F(j)\big)^{-1}\left.\frac{\delta F(j)}{\delta j(x_1)}\right|_{j=0}=\rho(x_1);$$

$$\rho^T(x_1,x_2)=\left.\frac{\delta^2 F_{\Lambda}^{T}(j)}{\delta j(x_1)\delta j(x_2)}\right|_{j=0}=\rho_2(x_1,x_2)-\rho_1(x_1)\rho_1(x_2);$$

$$\rho^T(x_1,x_2,x_3)=\left.\frac{\delta^3 F_{\Lambda}^{T}(j)}{\delta j(x_1)\delta j(x_2)\delta j(x_3)}\right|_{j=0}=$$

$$=\rho_3(x_1,x_2,x_3)-\rho_2(x_1,x_2)\rho_1(x_3)-\rho_2(x_2,x_3)\rho_1(x_1)-$$

$$-\rho_2(x_1,x_3)\rho_1(x_2)+2\rho_1(x_1)\rho_1(x_2)\rho_1(x_3);$$

$$\rho_4^T(x_1,x_2,x_3,x_4)=\left.\frac{\delta^4 F_{\Lambda}^{T}(j)}{\delta_j(x_1)\delta_j(x_2)\delta_j(x_3)\delta_j(x_4)}\right|_{j=0}=$$

$$=\rho_4(x_1,x_2,x_3,x_4)-\rho_3(x_1,x_2,x_3)\rho_1(x_4)-\rho_3(x_1,x_2,x_4)\rho_1(x_3)-$$

$$-\rho_3(x_1,x_3,x_4)\rho_1(x_2)-\rho_3(x_2,x_3,x_4)\rho(x_1)-\rho_2(x_1,x_2)\rho_2(x_3,x_4)-$$

$$-\rho_2(x_1,x_3)\rho_2(x_2,x_4)-\rho_2(x_1,x_4)\rho_2(x_2,x_3)+2\rho_2(x_1,x_2)\rho_1(x_3)\rho_1(x_4)+$$

$$+2\rho_2(x_1,x_3)\rho_1(x_2)\rho_1(x_4)+2\rho_2(x_1,x_4)\rho_1(x_2)\rho_1(x_3)+$$

$$+2\rho_2(x_2,x_3)\rho_1(x_1)\rho_1(x_4)+2\rho_2(x_2,x_4)\rho_1(x_1)\rho_1(x_3)+$$

$$+2\rho_2(x_3,x_4)\rho_1(x_1)\rho_1(x_2)-6\rho_1(x_1)\rho_1(x_2)\rho_1(x_3)\rho_1(x_4).$$

Для випадку $|\eta| = N$, тобто $\eta = \{x_1, \ldots, x_N\}$, зв'язна кореляційна функція матиме вигляд:

$$\rho_N^T(\eta) = \sum_{k=1}^{|\eta|} (-1)^{k-1}(k-1)! \sum_{\{\eta_1,\ldots,\eta_k\}\subset\eta}^{*} \rho(\eta_1)\ldots\rho(\eta_k).$$

Щоб знайти вигляд для функцій ρ_Λ^T запишемо $F_\Lambda(j)$ у наступному вигляді та скористаємось лемою 2.1:

$$F_\Lambda(j) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda} e_\lambda(j,\eta)\rho_\Lambda(\eta)\lambda_\sigma(d\eta) =$$

$$= \int\limits_{\Gamma_\Lambda} e_\lambda(j,\eta)\frac{z^{|\eta|}}{Z_\Lambda}\int\limits_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\eta\cup\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma)\lambda_\sigma(d\eta) =$$

$$= \frac{1}{Z_\Lambda}\int\limits_{\Gamma_\Lambda}\int\limits_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\eta\cup\gamma)} z^{|\eta\cup\gamma|} e_\lambda(j,\eta)\lambda_\sigma(d\gamma)\lambda_\sigma(d\eta) =$$

$$= \frac{1}{Z_\Lambda}\int\limits_{\Gamma_\Lambda} z^{|\gamma|}e^{-\beta U(\gamma)}\sum_{\eta\subset\gamma} e_\lambda(j,\eta)\lambda_\sigma(d\gamma).$$

Врахувавши, що

$$\sum_{\eta\subset\gamma} e_\lambda(j,\eta) = e_\lambda(1+j,\gamma),$$

отримуємо

$$F_\Lambda(j) = \frac{1}{Z_\lambda}\int\limits_{\Gamma_\Lambda} z^{|\gamma|}e_\lambda(1+j,\gamma)e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_\sigma(d\gamma). \tag{3.51}$$

Використаємо представлення функції Больцмана у вигляді суми (2.25) для $\gamma = \bigcup\limits_{l=1}^{k}\gamma_l,\ \gamma_i\cap\gamma_l = \emptyset$ при $i \neq l$ та формулу

$$e_\lambda(1+j,\gamma) = \prod_{l=1}^{k} e_\lambda(1+j,\gamma_l). \tag{3.52}$$

Тоді функціонал кореляційних функцій можна подати у вигляді

$$F_\Lambda(j) = \frac{1}{Z_\Lambda} \int\limits_{\Gamma_\Lambda} \lambda_\sigma(d\gamma) \sum_{k=1}^{|\gamma|} \sum_{\{\gamma_1,\ldots,\gamma_k\}}^{*} \widetilde{\Phi}^T(\gamma_1)\cdots\widetilde{\Phi}^T(\gamma_k), \tag{3.53}$$

де у представленні якого

$$\widetilde{\Phi}^T(\gamma_l) = z^{|\gamma_l|} e_\lambda(1+j,\gamma_l)\Phi^T(\gamma_l), \tag{3.54}$$

а

$$Z_\Lambda = F_\Lambda(0). \tag{3.55}$$

За теоремою 2.1 отримаємо

$$F_\Lambda(j) = e^{\int\limits_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\varnothing\}} \prod\limits_{x\in\gamma}(1+j(x))\Phi^T(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) - \int\limits_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\varnothing\}} \Phi^T(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)}. \tag{3.56}$$

Отже згідно з (3.47) породжуючий функціолнал зв'язних кореляційних функцій для z, що забезпечує збіжність інтегралів у (3.56), має вигляд

$$F^T(j) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\varnothing\}} \prod_{x\in\gamma}(1+j(x))\Phi^T(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) - \int\limits_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\varnothing\}} \Phi^T(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{3.57}$$

Перепишемо перший член формули (3.57):

$$\int\limits_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\varnothing\}} \prod_{x\in\gamma}(1+j(x))\Phi^T(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda} \Phi^T(\gamma) \sum_{\eta\subset\gamma} e_\lambda(j;\eta)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) =$$

$$= \int\limits_{\Gamma_\Lambda} e_\lambda(j;\eta)\Big[\int\limits_{\Gamma_\Lambda} \Phi^T(\eta\cup\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)\Big]\lambda_{z\sigma}(d\eta),$$

де ми скористались лемою 1.2 та простою комбінаторною формулою

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

Зауважимо також, що оскільки $\Phi^T(\varnothing) = 0$, то інтегрування може відбуватись не по $\Gamma_\Lambda\setminus\{\varnothing\}$, а по простору Γ_Λ.

З формули (3.49) враховуючи, що $\rho^T(\varnothing) = 0$, маємо

$$F^T(j) = \int_{\Gamma_\Lambda} e_\lambda(j;\eta)\rho^T(\eta)\lambda_\sigma(d\eta).$$

Отже, зв'язні кореляційні функції остаточно можна подати у вигляді

$$\rho^T(\eta) = z^{|\eta|} \int_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\varnothing\}} \Phi^T(\eta\cup\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma). \tag{3.58}$$

3.3. Нова форма запису розкладів Майєра

В цьому підрозділі нами запропонована нова форма запису розкладів Майєра для термодинамічних потенціалів нескінченних систем статистичної механіки. Ідея полягає у тому, щоб розділити додатню і від'ємну частини потенціалу взаємодії між частинками і побудувати розклад за функціями Урсела від'ємної частини, яка інтегрується за мірою Гіббса, що визначається додатньою частиною потенціалу. Такий запис дає можливість покращити радіус збіжності розкладів Майєра і дослідити деякі нові властивості термодинамічних потенціалів.

Будемо розглядати простори конфігурацій Γ, Γ_0 і Γ_Λ, що визначені відповідно у формулах (1.3),(1.6). Введемо також міру Лебега—Пуассона λ_σ на Γ_0, яка буде визначатись формулою (1.23). Звуження міри λ_σ на $B(\Gamma_\Lambda)$ ми також будемо позначати $\lambda_\sigma \equiv \lambda_\sigma^\Lambda$, але всі інтеграли по простору $\mathbb{R}^d$ треба замінити по Λ.

Потенціальну енергію довільної конфігурації $\gamma \in \Gamma_0$ для частинок, взаємодію якмх описує парний потенціал ϕ, будемо записувати так, як в (1.11)

$$U(\gamma) = U_\phi(\gamma) := \sum_{\{x,y\}\subset\gamma} \phi(|x-y|) := \sum_{\{x,y\}\subset\gamma} \phi_{xy}. \tag{3.59}$$

Будемо розглядати мінімальні обмеження на потенціал ϕ: стійкість та регулярність (див. умови (2.18) та (2.19)), а його графічне зображення буде мати вигляд потенціалу Ленарда—Джонса (див. рис. 1.1). Позначимо також через r_0 відстань, для якої $\phi(r_0) = 0$.

Термодинамічні потенціали визначають основні макроскопічні характеристики системи: тиск, вільну енергію, тощо. Аналітично ці характеристики визначаються за допомогою статистичних сум великого канонічного та канонічного ансамблів Гіббса $Z_\Lambda(z,\beta)$ (1.47) і $Z_\Lambda(N,\beta)$ (1.50):

$$Z_\Lambda(z,\beta) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \sum_{N\geq 0} z^N \int\limits_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} e^{-\beta U(\gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \qquad (3.60)$$

$$= \sum_{N\geq 0} z^N Z_\Lambda(N,\beta),$$

де z — активність, $\beta = \frac{1}{kT}$ — обернена температура системи, наступними формулами:

–вільна енергія (1.49)

$$f(v,\beta) = -\frac{1}{\beta} \lim_{\substack{N,V\to\infty \\ \frac{V}{N}\to v}} \frac{1}{N} \log Z_\Lambda(N,\beta);$$

–тиск (1.46)

$$p(z,\beta) := \frac{1}{\beta} \lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d} \frac{1}{V} \log Z_\Lambda(z,\beta).$$

Під час побудови розкладів Майєра стандартною процедурою є представлення експоненти у виразі (3.60) у вигляді (1.46). При цьому експоненту зручно записати за допомогою функцій Урсела $\Phi^T(\gamma)$ (див. [37]):

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

(див. формулу (2.23)). Тоді застосовуючи теорему 2.1 (див. формули (2.2)-(2.3)) велику статистичну суму $Z_\Lambda(z,\beta)$ можна записати у вигляді (2.25):

$$Z_\Lambda(z,\beta) = e^{\int\limits_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\emptyset\}} \Phi^T(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)}.$$

Підставивши останню рівність у формулу (1.46) і врахувавши визначення міри λ_σ (див. (1.23)) отримаємо відомий розклад тиску за степенями активності.

Для побудови нового розкладу, який ми хочемо тут продемонструвати, ми скористаємось вище наведеною процедурою тільки для експоненти від енергії, яка враховує лише від'ємну частину потенціалу ϕ^- ($\phi = \phi^+ + \phi^-$) і запишемо її у вигляді:

$$e^{-\beta U^-(\gamma)} = \sum_{\eta\subset\gamma} \tilde{F}(\eta), \quad \tilde{F}(\emptyset) = 1, \tag{3.61}$$

$$\tilde{F}(\eta) = \sum_{k=1}^{|\eta|} \sum_{\{\eta_1,\ldots,\eta_k\}\subset\eta}^{*} F(\eta_1)\ldots F(\eta_k). \tag{3.62}$$

$F(\{x\}) = 0$ і $F(\eta) = \Phi^T_-(\eta)$ для $|\eta| \geq 2$, а вираз для $\Phi^T_-(\eta)$ відрізняється від функцій Урсела $\Phi^T(\eta)$ тим, що у кожному зв'язному графі, внесок якого входить у визначення $\Phi^T_-(\eta)$, аналітичний вираз C_{xy}, який відповідає кожній лінії графа, треба замінити на функції $C^-_{xy} := e^{-\beta\phi^-_{xy}} - 1$.

Тоді велика статистична сума набуває вигляду:

$$Z_\Lambda(z,\beta) = Z^+_\Lambda(z,\beta)\int\limits_{\Gamma_\Lambda} \frac{e^{-\beta U^+(\gamma)}}{Z^+(z,\beta)} \sum_{\eta\subset\gamma} \tilde{F}(\eta)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) =$$

$$= Z^+_\Lambda(z,\beta)\int\limits_{\Gamma_\Lambda} \sum_{\eta\subset\gamma} \tilde{F}(\eta)\mu^+_\Lambda(d\gamma), \tag{3.63}$$

де μ^+_Λ — це міра Гіббса в Λ, яка відповідає взаємодії ϕ^+, тобто

$$\mu_\Lambda^+(d\gamma) = \frac{1}{Z_\Lambda^+(z,\beta)} e^{-\beta U^+(\gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma),$$

$$Z_\Lambda^+(z,\beta) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U^+(\gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma).$$

До правої частини рівності застосуємо формулу (1.42):

$$\int\limits_{\Gamma_\Lambda} \sum_{\eta\subset\gamma} \tilde{F}(\eta)\mu_\Lambda^+(d\gamma) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda} \tilde{F}(\eta)\rho^{(+)}(\eta)\lambda_\sigma(d\eta), \tag{3.64}$$

де $\rho^{(+)}(\eta)$ — сім'я кореляційних функцій, які відповідають взаємодії ϕ^+.

А далі, враховуючи вигляд функції $\tilde{F}(\eta)$ в (3.62), підінтегральний вираз в (3.64) представимо у вигляді:

$$\sum_{k=1}^{|\eta|} \sum_{\{\eta_1,\ldots,\eta_k\}\subset\eta}^{*} F(\eta_1)F(\eta_2)\ldots F(\eta_k)\rho^{(+)}(\eta) =$$

$$= \sum_{k=1}^{|\eta|} \sum_{\{\eta_1,\ldots\eta_k\}\subset\eta}^{*} X(\eta_1)X(\eta_2)\ldots X(\eta_k). \tag{3.65}$$

Для того, щоб визначити функції X з рівняння (3.65), слід скористатись методом математичної індукції.

1) Для $k = 1$ функція

$$X_1 = X_1(x_1) = F_1(x_1)\rho_1^{(+)}(x_1). \tag{3.66}$$

2) Для $k = 2$ з рівняння (3.65) маємо:

$$X_2(x_1,x_2) + X_1(x_1)X_1(x_2) =$$

$$= F_2(x_1,x_2)\rho_2^{(+)}(x_1,x_2) + F_1(x_1)F_1(x_2)\rho_2^{(+)}(x_1,x_2),$$

тоді, враховуючи формулу (3.66), можна записати:

$$X_2(x_1,x_2) + F_1(x_1)\rho_1^{(+)}(x_1)F_1(x_2)\rho_1^{(+)}(x_2) =$$

$$= F_2(x_1,x_2)\rho_2^{(+)}(x_1,x_2) + F_1(x_1)F_1(x_2)\rho_2^{(+)}(x_1,x_2),$$

тоді остаточно

$$X_2(x_1,x_2) = F_2(x_1,x_2)\rho_2^{(+)}(x_1,x_2)+$$

$$+F_1(x_1)F_1(x_2)\big(\rho_2^{(+)}(x_1,x_2) - \rho_1^{(+)}(x_1)\rho_1^{(+)}(x_2)\big). \tag{3.67}$$

3) Розглянемо тепер випадок, коли $k = 3$. Із формули (3.65), використовуючи формули (3.66) та (3.67), отримуємо:

$$F_3(x_1,x_2,x_3)\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3) + F_2(x_1,x_2)F_1(x_3)\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)+$$

$$+F_2(x_1,x_3)F_1(x_2)\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3) + F_2(x_2,x_3)F_1(x_1)\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)+$$

$$+F_1(x_1)F_1(x_2)F_1(x_3)\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3) = X_3(x_1,x_2,x_3)+$$

$$+X_2(x_1,x_2)X_1(x_3) + X_2(x_1,x_3)X_1(x_2)+$$

$$+X_2(x_2,x_3)X_1(x_1) + X_1(x_1)X_1(x_2)X_1(x_3),$$

тоді, перетворивши, маємо:

$$X_3(x_1,x_2,x_3) = F_3(x_1,x_2,x_3)\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)+$$

$$+F_2(x_1,x_2)F_1(x_3)\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3) + F_2(x_1,x_3)F_1(x_2)\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)+$$

$$+F_2(x_2,x_3)F_1(x_1)\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)+$$

$$+F_1(x_1)F_1(x_2)F_1(x_3)\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)$$

$$-F_2(x_1,x_2)F_1(x_3)\rho_2^{(+)}(x_1,x_2)\rho_1^{(+)}(x_3)-$$

$$-F_1(x_1)F_1(x_2)F_1(x_3)\rho_2^{(+)}(x_1,x_2)\rho_1^{(+)}(x_3)+$$

$$+F_1(x_1)F_1(x_2)F_1(x_3)\rho_1^{(+)}(x_1)\rho_1^{(+)}(x_2)\rho_1^{(+)}(x_3)-$$

$$-F_2(x_1,x_3)F_1(x_2)\rho_2^{(+)}(x_1,x_3)\rho_1^{(+)}(x_2)-$$

$$-F_1(x_1)F_1(x_3)F_1(x_2)\rho_2^{(+)}(x_1,x_3)\rho_1^{(+)}(x_2)+$$

$$+F_1(x_1)F_1(x_2)F_1(x_3)\rho_1^{(+)}(x_1)\rho_1^{(+)}(x_2)\rho_1^{(+)}(x_3)-$$

$$-F_2(x_2,x_3)F_1(x_1)\rho_2^{(+)}(x_2,x_3)\rho_1^{(+)}(x_1)-$$

$$-F_1(x_1)F_1(x_2)F_1(x_3)\rho_2^{(+)}(x_2,x_3)\rho_1^{+}(x_1)+$$

$$+F_1(x_1)F_1(x_2)F_1(x_3)\rho_1^{(+)}(x_1)\rho_1^{(+)}(x_2)\rho_1^{(+)}(x_3)-$$

$$-F_1(x_1)F_1(x_2)F_1(x_3)\rho_1^{(+)}(x_1)\rho_1^{(+)}(x_2)\rho_1^{(+)}(x_3).$$

Просумувавши та згрупувавши функції $\rho^{(+)}$ при відповідних F, остаточно отримуємо:

$$X_3(x_1,x_2,x_3)=F_3(x_1,x_2,x_3)\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)+$$

$$+F_2(x_1,x_2)F_1(x_3)\big(\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)-\rho_2^{(+)}(x_1,x_2)\rho_1^{(+)}(x_3)\big)+$$

$$+F_2(x_1,x_3)F_1(x_2)\big(\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)-\rho_2^{(+)}(x_1,x_3)\rho_1^{(+)}(x_2)\big)+$$

$$+F_2(x_2,x_3)F_1(x_1)\big(\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)-\rho_2^{(+)}(x_2,x_3)\rho_1^{(+)}(x_1)\big)+$$

$$+F_1(x_1)F_1(x_2)F_1(x_3)\big(\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)-\rho_2^{(+)}(x_1,x_2)\rho_1^{(+)}(x_3)-$$

$$-\rho_2^{(+)}(x_1,x_3)\rho_1^{(+)}(x_2)-\rho_2^{(+)}(x_2,x_3)\rho_1^{(+)}(x_1)+$$

$$+2\rho_1^{(+)}(x_1)\rho_1^{(+)}(x_2)\rho_1^{(+)}(x_3)\big). \tag{3.68}$$

4) Аналогічно отримуємо вираз для невідомої функції X у випадку $k=4$:

$$X_4(x_1,x_2,x_3,x_4)+X_3(x_1,x_2,x_3)X_1(x_4)+X_3(x_1,x_2,x_4)X_1(x_3)+$$

$$+X_3(x_1,x_3,x_4)X_1(x_2)+X_3(x_2,x_3,x_4)X_1(x_1)+X_2(x_1,x_2)X_2(x_3,x_4)+$$

$$+X_2(x_1,x_3)X_2(x_2,x_4)+X_2(x_1,x_4)X_2(x_2,x_3)+X_2(x_1,x_2)X_1(x_3)X_1(x_4)+$$

$$+X_2(x_1,x_3)X_1(x_2)X_1(x_4)+X_2(x_1,x_4)X_1(x_2)X_1(x_3)+$$

$$+X_2(x_2,x_3)X_1(x_1)X_1(x_4)+X_2(x_2,x_4)X_1(x_1)X_1(x_3)+$$

$$+X_2(x_3,x_4)X_1(x_1)X_1(x_2)+X_1(x_1)X_1(x_2)X_1(x_3)X_1(x_4)=$$

$$=F_4(x_1,x_2,x_3,x_4)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)+F_3(x_1,x_2,x_3)F_1(x_4)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)+$$

$$+F_3(x_1,x_2,x_4)F_1(x_3)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)+F_3(x_1,x_3,x_4)F_1(x_2)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)+$$

$$+F_3(x_2,x_3,x_4)F_1(x_1)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)+F_2(x_1,x_2)F_2(x_3,x_4)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)+$$

$$+F_2(x_1,x_3)F_2(x_2,x_4)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)+F_2(x_1,x_4)F_2(x_2,x_3)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)+$$

$$+F_2(x_1,x_2)F_1(x_3)F_1(x_4)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)+$$

$$+F_2(x_1,x_3)F_1(x_2)F_1(x_4)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)+$$

$$+F_2(x_1,x_4)F_1(x_2)F_1(x_3)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)+$$

$$+F_2(x_2,x_3)F_1(x_1)F_1(x_4)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)+$$

$$+F_2(x_2,x_4)F_1(x_1)F_1(x_3)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)+$$

$$+F_2(x_3,x_4)F_1(x_1)F_1(x_2)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)+$$

$$+F_1(x_1)F_1(x_2)F_1(x_3)F_1(x_4)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4).$$

Після відповідних перетворень одержимо:

$$X_4(x_1,x_2,x_3,x_4)=F_4(x_1,x_2,x_3,x_4)\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)+$$

$$+F_3(x_1,x_2,x_3)F_1(x_4)(\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)-\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)\rho_1^{(+)}(x_4))+$$

$$+F_3(x_1,x_2,x_4)F_1(x_3)(\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)-\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_4)\rho_1^{(+)}(x_3))+$$

$$+F_3(x_1,x_3,x_4)F_1(x_2)(\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)-\rho_3^{(+)}(x_1,x_3,x_4)\rho_1^{(+)}(x_2))+$$

$$+F_3(x_2,x_3,x_4)F_1(x_1)(\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)-\rho_3^{(+)}(x_2,x_3,x_4)\rho_1^{(+)}(x_1))+$$

$$+F_2(x_1,x_2)F_2(x_3,x_4)(\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)-\rho_2^{(+)}(x_1,x_2)\rho_2^{(+)}(x_3,x_4))+$$

$$+F_2(x_1,x_3)F_2(x_2,x_4)(\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)-\rho_2^{(+)}(x_1,x_3)\rho_2^{(+)}(x_2,x_4))+$$

$$+F_2(x_1,x_4)F_2(x_2,x_3)(\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)-\rho_2^{(+)}(x_1,x_4)\rho_2^{(+)}(x_2,x_3))+$$

$$+F_2(x_1,x_2)F_1(x_3)F_1(x_4)(\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)-\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)\rho_1^{(+)}(x_4)-$$

$$-\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_4)\rho_1^{(+)}(x_3)-\rho_2^{(+)}(x_1,x_2)\rho_2^{(+)}(x_3,x_4)+$$

$$+2\rho_2^{(+)}(x_1,x_2)\rho_1^{(+)}(x_3)\rho_1^{(+)}(x_4))+F_2(x_1,x_3)F_1(x_2)F_1(x_4)(\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)-$$

$$-\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)\rho_1^{(+)}(x_4)-\rho_3^{(+)}(x_1,x_3,x_4)\rho_1^{(+)}(x_2)-\rho_2^{(+)}(x_1,x_3)\rho_2^{(+)}(x_2,x_4)+$$

$$+2\rho_2^{(+)}(x_1,x_3)\rho_1^{(+)}(x_2)\rho_1^{(+)}(x_4))+F_2(x_1,x_4)F_1(x_2)F_1(x_3)(\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)-$$

$$-\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_4)\rho_1^{(+)}(x_3)-\rho_3^{(+)}(x_1,x_3,x_4)\rho_1^{(+)}(x_2)-\rho_2^{(+)}(x_1,x_4)\rho_2^{(+)}(x_2,x_3)+$$

$$+2\rho_2^{(+)}(x_1,x_4)\rho_1^{(+)}(x_2)\rho_1^{(+)}(x_3))+F_2(x_2,x_3)F_1(x_1)F_1(x_4)(\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)-$$

$$-\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)\rho_1^{(+)}(x_4)-\rho_3^{(+)}(x_2,x_3,x_4)\rho_1^{(+)}(x_1)-\rho_2^{(+)}(x_2,x_3)\rho_2^{(+)}(x_1,x_4)+$$

$$+2\rho_2^{(+)}(x_2,x_3)\rho_1^{(+)}(x_1)\rho_1^{(+)}(x_4))+F_2(x_2,x_4)F_1(x_1)F_1(x_3)(\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)-$$

$$-\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_4)\rho_1^{(+)}(x_3)-\rho_3^{(+)}(x_2,x_3,x_4)\rho_1^{(+)}(x_1)-\rho_2^{(+)}(x_1,x_3)\rho_2^{(+)}(x_2,x_4)+$$

$$+2\rho_2^{(+)}(x_2,x_4)\rho_1^{(+)}(x_1)\rho_1^{(+)}(x_3))+F_2(x_3,x_4)F_1(x_1)F_1(x_2)(\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)-$$

$$-\rho_3^{(+)}(x_1,x_3,x_4)\rho_1^{(+)}(x_2)-\rho_3^{(+)}(x_2,x_3,x_4)\rho_1^{(+)}(x_1)-\rho_2^{(+)}(x_1,x_2)\rho_2^{(+)}(x_3,x_4)+$$

$$+2\rho_2^{(+)}(x_3,x_4)\rho_1^{(+)}(x_1)\rho_1^{(+)}(x_2))+F_1(x_1)F_1(x_2)F_1(x_3)F_1(x_4)\times$$

$$\times\Bigg(\rho_4^{(+)}(x_1,x_2,x_3,x_4)-\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_3)\rho_1^{(+)}(x_4)-$$

$$-\rho_3^{(+)}(x_1,x_2,x_4)\rho_1^{(+)}(x_3)-\rho_3^{(+)}(x_1,x_3,x_4)\rho_1^{(+)}(x_2)-$$

$$-\rho_3^{(+)}(x_2,x_3,x_4)\rho_1^{(+)}(x_1)-\rho_2^{(+)}(x_1,x_2)\rho_2^{(+)}(x_3,x_4)-$$

$$-\rho_2^{(+)}(x_1,x_3)\rho_2^{(+)}(x_2,x_4)-\rho_2^{(+)}(x_1,x_4)\rho_2^{(+)}(x_2,x_3)+$$

$$+2\rho_2^{(+)}(x_1,x_2)\rho_1^{(+)}(x_3)\rho_1^{(+)}(x_4)+2\rho_2^{(+)}(x_1,x_3)\rho_1^{(+)}(x_2)\rho_1^{(+)}(x_4)+$$

$$+2\rho_2^{(+)}(x_1,x_4)\rho_1^{(+)}(x_2)\rho_1^{(+)}(x_3)+2\rho_2^{(+)}(x_2,x_3)\rho_1^{(+)}(x_1)\rho_1^{(+)}(x_4)+$$

$$+2\rho_2^{(+)}(x_2,x_4)\rho_1^{(+)}(x_1)\rho_1^{(+)}(x_3)+2\rho_2^{(+)}(x_3,x_4)\rho_1^{(+)}(x_1)\rho_1^{(+)}(x_2)-$$

$$-6\rho_1^{(+)}(x_1)\rho_1^{(+)}(x_2)\rho_1^{(+)}(x_3)\rho_1^{(+)}(x_4)\Bigg). \qquad (3.69)$$

Тоді аналізуючи формули (3.66)-(3.69), для довільного значення k остаточно отримуємо формулу

$$X(\eta) = \sum_{k=1}^{|\eta|} \sum_{\{\eta_1,\ldots,\eta_k\}\subset\eta}^{*} F(\eta_1)\ldots F(\eta_k)\rho^{(+),T}(\eta_1,\ldots,\eta_k|\eta), \tag{3.70}$$

де $\rho^{(+),T}(\eta_1,\ldots,\eta_k|\ \ \eta)$ — узагальнені зв'язні кореляційні функції [52], які відповідають взаємодії ϕ^+. Вони визначаються як звичайні зв'язні кореляційні функції по відношенню до підмножин $\eta_1,\ldots,\eta_k$ конфігурації η, тобто є звичайними зв'язними кореляційними функціями у випадку, коли кожна з підмножин $\eta_1,\ldots,\eta_k$ містить по одній точці.

Узагальнені зв'язні кореляційні функції $\rho^T(\eta_1,\ldots,\eta_k|\eta)$ визначаються наступною формулою [52]:

$$\rho^T(\eta|\eta) = \rho^T(\eta)$$

$$\rho^T(\eta_1,\ldots,\eta_k|\eta) = \rho^T(\eta) - \sum_{(\pi_1,\ldots,\pi_i)}^{\eta_1,\ldots,\eta_k} \prod_{j=1}^{i} \rho^T\Big(\{\eta(\pi_j)\}|\eta(\pi_j)\Big) =$$

$$= \rho^T(\eta) - \sum_{k=1}^{|\eta|} \sum_{\{\eta_1,\ldots,\eta_k\}\subset\eta}^{*} \prod_{j=1}^{k} \rho^T(\eta_j|\eta_j),$$

де $\sum\limits_{\pi_1,\ldots,\pi_i}^{\eta_1,\ldots,\eta_k}$ є сумою по усіх можливих розбиттях підмножин $(\eta_1,\ldots,\eta_k)$; $\{\eta(\pi_j)\}$ — це сукупність підмножин η_t, які належать π_j, $\eta(\pi_j)$ — це множина, що складається з елементів x_i, які належать до різних підмножин з $\{\eta(\pi_j)\}$. Зауважимо також, що узагальнені зв'язні кореляційні функції $\rho^T(\eta_1,\ldots,\eta_k|\eta)$ можуть бути представлені через звичайні зв'язні кореляційні функції (3.58) наступною рекурентною формулою

$$\rho^T(\eta_1,\ldots,\eta_k|\eta) = \rho^T(\eta) + \sum_{(\pi_1,\ldots,\pi_j)^c\setminus\eta_1,\ldots,\eta_k}^{(x_1,\ldots,x_n)} \prod_{i=1}^{j} \rho^T(\eta(\pi_j)),$$

де в правій частині рівності сумування відбуватиметься по всіх $x_1,\ldots,x_n$, які беруться з підмножин $\eta_1,\ldots,\eta_k$ та утворюють зв'язний граф з n вершинами лише за умови, коли кожна з цих точок буде його вершиною та кожна з підмножин $\eta_1, \dots, \eta_k$ міститиме лише одну з цих точок.

Далі враховуючи (3.65) і теорему 2.1 (див. формули (2.2)-(2.3)), отримуємо рівність:

$$\int\limits_{\Gamma_\Lambda} \tilde{F}(\eta)\rho^{(+)}(\eta)\lambda_\sigma(d\eta) = e^{\int\limits_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\o\}} X(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)}. \tag{3.71}$$

Тоді використовуючи формули (3.63)-(3.65), (3.70), (3.71) та означення (1.46), отримуємо розклад тиску p за степенями активності z:

$$p(z,\beta) := \frac{1}{\beta}\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\log Z_\Lambda(z,\beta) =$$

$$= \frac{1}{\beta}\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\log\left(Z_\Lambda^+(z,\beta)\int\limits_{\Gamma_\Lambda}\sum_{\eta\subset\gamma}\tilde{F}(\eta)\mu_\Lambda^+(d\gamma)\right) =$$

$$= \frac{1}{\beta}\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\log Z_\Lambda^+(z,\beta) + \frac{1}{\beta}\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\log\int\limits_{\Gamma_\Lambda}\sum_{\eta\subset\gamma}\tilde{F}(\eta)\mu_\Lambda^+(d\gamma) =$$

$$= p^+(z,\beta) + \frac{1}{\beta}\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\log\int\limits_{\Gamma_\Lambda}\tilde{F}(\eta)\rho^{(+)}(\eta)\lambda_\sigma(d\eta) =$$

$$= p^+(z,\beta) + \frac{1}{\beta}\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\log e^{\int\limits_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\o\}} X(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma)} =$$

$$= p^+(z,\beta) + \frac{1}{\beta}\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\int\limits_{\Gamma_\Lambda\setminus\{\o\}} X(\gamma)\lambda_{z\sigma}(d\gamma) =$$

$$= p^+(z,\beta) + kT\sum_{n=2}^{\infty}\frac{z^n}{n!}\int\limits_{\mathbb{R}^d}\dots\int\limits_{\mathbb{R}^d} X_n(x_1,\dots,x_n)dx_2\dots dx_n. \tag{3.72}$$

Щоб показати збіжність розкладу (3.72), наведемо ряд оцінок. Для цього проаналізуємо формулу (3.70). Сума з $*$ в даній формулі є сумою по всіх можливих розбиттях множини η на k підмножин η_j з фіксованим числом елементів $|\eta_1| = n_1, \dots, |\eta_k| = n_k$ не менше, ніж одиниця, при цьому $n_1 + \ldots + n_k = N$, де $|\eta| = N$. Така сума налічує $\frac{N!}{n_1! \ldots n_k!}$ елементів і аналогічно до міркувань, наведених при доведенні леми 2.1, можна стверджувати, що:

$$\sum_{\substack{\{n_1,\ldots,n_k \geq 1\} \\ n_1+\ldots+n_k=N}} 1 \leq 2^{N+k}. \tag{3.73}$$

При $|\eta| \geq 2$ функції $F(\eta)$ будуть сумою зв'язних графів. При цьому сума добутків таких функцій буде включати і незв'язні графи. Узагальнені зв'язні кореляційні функції $\rho^{(+),T}(\eta_1, \ldots, \eta_k \mid \eta)$, що присутні у формулі (3.72), будуть утворювати лінії між незв'язними точками отриманих графів. В результаті сума із незв'язних графів перетвориться на суму зв'язних графів. В такому випадку можна скористатись оцінкою для функцій $F(\eta)$, яку можна знайти в монографії Рюеля [118], при $|\eta| = m$, матимемо оцінку такого типу:

$$\int\limits_{\Lambda} \cdots \int\limits_{\Lambda} \left| \Phi_{-}^{T}(\{x_1, \ldots, x_m\}) \right| dx_2 \ldots dx_m \leq (m-1)! C^{m-1}, \tag{3.74}$$

де стала C залежить від β.

Зауважимо також, що узагальнені зв'язні кореляційні функції $\rho^{(+),T}(\eta_1, \ldots, \eta_k \mid \eta)$ будуть задовольняти оцінці, наведеній в [52]:

$$\left| \rho^{(+),T}(\eta_1, \ldots, \eta_k \mid) \right| <$$

$$< \left(\prod_{i=1}^{k} (|\eta_i|) \right) \sum_{\mathcal{G}}^{(\eta_1,\ldots,\eta_k)} \prod_{l=1}^{k-1} u\big(dist(\eta_l', \eta_l'')\big), \tag{3.75}$$

де $\sum\limits_{\mathcal{G}}^{\eta_1,\ldots,\eta_k}$ є сумою по всіх деревах $k-1$ ліній, що з'єднують підмножини $\eta_1, \ldots, \eta_k$. Підмножини η_l' та η_l'' є такими, що з'єднані лінією l, а вираз $dist(\eta_l', \eta_l'')$ є відстанню між цими підмножинами.

Отже, збіжність розкладу (3.72) випливає з оцінок $\rho^{(+),T}(\eta_1, \ldots, \eta_k \mid \eta)$ (див. [52]) та внесків $F(\eta)$ зв'язних графів, побудованих за допомогою функцій C^-_{xy},вирішальною властивістю яких є умови:

$$C^-_{xy} = 0 \text{ при } |x - y| \le r_0$$

та

$$C^-(\beta, r_0) = \int\limits_{R^d} C^-_{0x} dx < \infty. \tag{3.76}$$

Зауважимо також, що така нова форма запису розкладу Майєра дає можливість покращити радіус збіжності даного розкладу. В монографії Рюеля [118] було встановлено, що такий ряд буде збіжний в крузі

$$|z| < e^{-\beta B - 1} C(\beta)^{-1},$$

де $C(\beta)$ задано в умові регулярності потенціалу (1.17).

В розглянутому випадку певне покращення радіуса збіжності буде полягати в тому, що

$$C_-(\beta) = \int\limits_{|x| > r_0} (e^{-\beta\phi_-(x)} - 1) dx < C(\beta),$$

тому

$$C_-^{-1} > C(\beta)^{-1}.$$

3.4. Висновки до третього розділу

У підрозділі 3.1 дисертаційної роботи побудовано методом Бріджеса—Федербуша розклад Майєра для неінтегровних потеціалів взаємодії; доведено теорему 3.1 про збіжність побудованого розкладу. У підрозділі 3.2 запропоновано новий спосіб виведення розкладу Майєра для зв'язних кореляційних функцій методами нескінченновимірного пуассонівського аналізу. У підрозділі 3.3 запропонована нова форма запису розкладів Майєра для термодинамічних потенціалів нескінченних систем статистичної механіки.

Основні результати досліджень третього розділу опубліковано в [9], [7], [36].

РОЗДІЛ 4

Вільна енергія моделі коміркового газу

В класичній статистичній механіці найбільший інтерес у дослідника викликають фізичні явища з низькою температурою та системи з великою густиною частинок, де відбуваються фазові переходи. В 1933 році австрійсько-нідерландський фізик-теоретик П. Еренфест ввів класифікацію фазових переходів, згідно з якою розрізняють фазові переходи першого та другого роду. До фазових переходів першого роду відносять переходи, за яких стрибком змінюються величини, що визначаються як перші похідні термодинамічного потенціалу за температурою та тиском. При фазових переходах другого роду неперервними залишаються термодинамічний потенціал і його перші похідні за температурою та тиском, але стрибком змінюються другі похідні, через які виражають теплоємність, коефіцієнти теплового розширення та стиску. Основи теорії фазових переходів другого роду були створені Л. Ландау у 1937 році.

Проблема фазових переходів ще й досі залишається актуальною, навіть зважаючи на цілу низку опублікованих досліджень, що стосуються даного питання. Так незалежно один від одного Р. Л. Добрушин [20] та Р. Гріффітс [66] довели існування фазового переходу першого роду для моделі Ізінга. В роботі Гріффітса були використані деякі ідеї ранніх досліджень Пайєрлса [93]. Існує також приклад одновимірної неперервної системи (так звана модель Каца), в якій виявлено фазовий перехід першого роду (див. наукові статті М. Каца, Г. Уленбека і

П. Хеммери [73]; М. Каца та Є. Гельфанда [74]). Загальний опис такого роду моделей міститься в роботах Ван-Кампена [122], Лебовіца і Пенроуза [87]. Починаючи з 1965 року над дослідженнями існування фазових переходів працювали такі науковці як Р. Л. Добрушин, Я. Г. Сінай, Р. А. Мінлос, Ф. А. Березін, Д. Рюель, Ф. Женібер, А. Гросман, А. Ф. Андрєєв, Н. В. Вдовиченко та інші ([2], [51], [55], [26], [27], [23], [1], [10], [11]).

Проте для звичайних неперервних систем взаємодіючих частинок узагальнити розроблені вченими методи ще й досі не вдалося. Деякі аналогічні результати були отримані для неперервних систем в області граничних значень достатньо малих значень параметрів оберненої температури β та хімічної активності z. Задача зводилась до розгляду штучних моделей — моделі Уідома—Роулінсона (див. [124]), при цьому методи дослідження базувались на теорії ґратчастих систем (див. [47], [61], [86], [118]).

У 2012 році О. Л. Ребенком була введена нова неперервна модель — комірковий газ [103].

Модель коміркового газу є перехідною між моделями ґратчастих газів і неперервними системами статистичної механіки. В рамках введеної модельної системи за порівняно невеликий період часу вже вдалося отримати ряд важливих результатів. В роботах О. Л Ребенка спільно з його учнями М. В. Тертичним та С. М. Петренком [30] було показано, що:

— для двочастинкових потенціалів, що мають неінтегровну особливість в околі нуля (посилено надстійкі потенціали), тиск апроксимованої системи прямує до тиску досліджуваної неперервної системи, якщо параметр розбиття спрямувати до нуля $a \to 0$ для будь-яких додатніх значень оберненої температури $\beta > 0$ та хімічної активності z. Подібний результат було узагальнено для систем з багаточастинковою взаємодією [111], [112], [29];

— аналогічно було встановлено результат для сім'ї кореляційних функцій, але лише для області достатньо малих значень параметра z, значення якого обмежувались радіусом збіжності розкладів Кірквуда—Зальцбурга для кореляційних функцій системи [112]. Для довільних додатніх значень параметрів z, β і для парних і для багаточастинкових посилено надстійких потенціалів вдалося завершити побудову квазінеперервної апроксимації для кореляційних функцій в роботі [30];

— спираючись на квазінеперервну апроксимацію для систем з двочастинковою взаємодією нескінченного радіуса дії, було запропоновано нове просте доведення єдиності граничної кореляційної функції, яка не залежить від граничних умов. Доведено, що в класі мір помірного росту при малих значеннях параметра активності z існує єдина міра Гіббса з відповідною граничною кореляційною функцією [98], [30].

Зауважимо, що наведені результати були отримані в рамках великого канонічного ансамблю. Більш складнішою задачею виявилось встановлення подібного результату для вільної енергії Гельмгольца, оскільки в даному випадку дослідження відбуваються в канонічному ансамблі.

У цьому розділі буде показано, що для довільних позитивних значень оберненої температури $\beta > 0$ та питомого об'єму $v > 0$ апроксимована вільна енергія модельної системи буде прямувати до вільної енергії неперервної системи, коли параметр розбиття $a \to 0$. Також доведемо, що функція апроксимованої вільної енергії є монотонною, неперервною, вгнутою функцією від питомого об'єму v.

4.1. Конфігураційний простір та термодинамічні функції моделі коміркового газу

Якщо розбити простір $\mathbb{R}^d$ на маленькі неперетинні d-вимірні куби, то для кожної конфігурації весь простір поділиться на області, в яких у кожному кубику міститься дві і більше точок конфігурацій (щільна частина конфігурації) та області, де в кубиках буде 0 або 1 точка конфігурації (розріджена частина конфігурації). Більш детальніше таке розбиття було описане в першому розділі (див. (1.7)-(1.10)).

Нескінченну систему частинок, конфігураційний простір якої складається з розріджених конфігурацій, розглядають як модель коміркового газу. Зауважимо, що це не означає, що частинка весь час перебуває в одному і тому ж кубику; конфігурації неперервно переміщуються в просторі, але це відбувається за умови, що в кожному кубику перебуватиме одна частинка. Зупинемось детальніше на описі конфігураційного простору модельної системи.

Означення 4.1. Для заданого розбиття $\overline{\Delta_a}$ простору $\mathbb{R}^d$ система коміркового газу визначається конфігураційним простором (1.9).

При цьому для моделі коміркового газу конфіугаційний простір $\Gamma^{(dil)}$ будемо позначати $\tilde{\Gamma}^{(a)}$.

Для того, щоб описати множини простору $\Gamma^{(dil)}$, перевизначимо його як простір маркованих конфігурацій:

$$\Gamma^{(a)} := \{\widetilde{\gamma} = \{(\Delta_1, x_1), \ldots, (\Delta_n, x_n), \ldots\} \mid \Delta_i \neq \Delta_j, i \neq j\}, \quad (4.1)$$

де $x_i \in \Delta_i \subset \mathbb{R}^d$, $\Delta_i \in \overline{\Delta_a}$. Тобто даний простір можна представити як дискретну множину обмежених неперервних "спінів"(див. наприклад, [59], [60]).

При цьому аналогічно до (1.6) введемо множину скінченних конфігурацій $\widetilde{\Gamma}_0^{(a)}$:

$$\widetilde{\Gamma}_0^{(a)} = \coprod_{n\in\mathbb{N}_0} \widetilde{\Gamma}^{(a;n)}, \tag{4.2}$$

де $\widetilde{\Gamma}^{(a;n)}$ — це простір конфігурацій в $\widetilde{\gamma} \in \widetilde{\Gamma}_0^{(a)}$, який складається з n кубів $\{\Delta_1, \dots, \Delta_n\} \subset \overline{\Delta_a}$ і відповідних положень $\{x_1 \in \Delta_1, \dots, x_n \in \Delta_n\}$.

Позначимо через $\overline{X_n}$ множину кубів $\Delta_j \in \overline{\Delta_a}$, а через $X_n \subset \mathbb{R}^d$ об'єднання цих кубів. Нехай $\mathfrak{X}_{\Delta_j}$ — це борелівські множини в $B(\Delta_j) := B(\mathbb{R}^d) \restriction \Delta_j, \Delta_j \in \overline{\Delta_a}$. Тоді циліндричну множину $\widetilde{X}_N^{(n)} = \widetilde{X}_N^{(n)}(\overline{\Lambda}_N, \overline{\mathfrak{X}}_N)$ в $\widetilde{\Gamma}^{(a;n)}$ і $\widetilde{\Gamma}_0^{(a)}$ можна визначити за допомогою фіксованої множини Λ_N і послідовності множин $\mathfrak{X}_{\Delta_j}, j = \overline{1, N}$ наступним чином ($n \leq N$):

$$\widetilde{X}_N^{(n)}\{\{(\Delta_1, x_1), \dots, (\Delta_n, x_n)\} \in \widetilde{\Gamma}^{(a;n)} | \overline{\Lambda_n} \subseteqq \overline{\Lambda_N}, x_j \in \mathfrak{X}_{\Delta_j}, j = \overline{1, N}\} \tag{4.3}$$

та

$$\widetilde{X} := \bigcup_{n\in\mathbb{N}} \bigcup_{\overline{\Lambda_N}\subset\overline{\Lambda_n}} \bigcup_{\overline{\mathfrak{X}_N}} \coprod_{n=0}^{N} \widetilde{X}_N^{(n)}(\overline{\Lambda_N}, \overline{\mathfrak{X}_N}) \in B(\widetilde{\Gamma}_0{}^{(a)}) \tag{4.4}$$

де $\overline{\mathfrak{X}}_N = \{\mathfrak{X}_{\Delta_1}, \dots, \mathfrak{X}_{\Delta_N}\}$.

Визначимо міру Лебега—Пуассона на $\widetilde{\Gamma}_0^{(a)}$. Для цього спершу визначимо міру $\widetilde{\sigma}^{(n)}$ на множині (4.3):

$$\widetilde{\sigma}^{(n)}(\overline{X}_N^{(n)}(\overline{\Lambda}_N, \overline{\mathfrak{X}}_N)) = \begin{cases} 1, & \text{для } n = 0, \\ \sum\limits_{\overline{\Lambda}_n \subseteq \overline{\Lambda}_N} \sigma(\mathfrak{X}_{\Delta_1})\sigma(\mathfrak{X}_{\Delta_2}) \dots \sigma(\mathfrak{X}_{\Delta_n}), & \text{для } 1 \leq n \leq N, \\ 0, & \text{для } n \geq N. \end{cases} \tag{4.5}$$

Введемо також функцію-індикатор для розріджених конфігурацій формулою:

$$\chi_-^{\Delta}(\gamma) = \begin{cases} 1, & \text{якщо } |\gamma_\Delta| = 0 \vee 1; \\ 0, & \text{в іншому випадку.} \end{cases} \tag{4.6}$$

Використовуючи (4.6), можна порахувати, що для $1 \leq n \leq N$

$$\sigma^{(n)}(\widetilde{X}_N^{(n)}(\overline{\Lambda}_N, \overline{\mathfrak{X}}_N)) = \frac{1}{n!} \int\limits_{\mathfrak{X}_N} dx_1 \ldots \int\limits_{\mathfrak{X}_N} dx_n \prod_{i=1}^{N} \chi_-^{\Delta_i}(\{x_1, \ldots, x_n\}) \tag{4.7}$$

де $\mathfrak{X}_N := \bigcup\limits_{i=1}^{N} \mathfrak{X}_{\Delta_i}$ і $dx_i = \sigma(dx_i)$. Тоді міру Лебега—Пуассона на $\widetilde{\Gamma}_0^{(a)}$ і $\widetilde{\Gamma}_{\overline{\Lambda}_N}^{(a)}$ можна визначити формулою:

$$\lambda_\sigma^{(a)} := \sum_{n=0}^{\infty} \sigma^{(n)}. \tag{4.8}$$

Враховуючи (4.7), для довільної $F \in L^1(\Gamma_0, \lambda_\sigma)$

$$\int\limits_{\widetilde{\Gamma}_0^{(a)}} F(\widetilde{\gamma}) \lambda_\sigma^{(a)} = \int\limits_{\Gamma_0} F(\gamma) \prod_{\Delta \in \overline{\Delta}_a} \chi_-^{\Delta}(\gamma) \lambda_\sigma(d\gamma). \tag{4.9}$$

Отже, будемо розглядати двочастинковий потенціал взаємодії $\phi(|x-y|)$, де $\phi : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, який буде задовольняти умову **A** (див. (1.17)-(1.20)).

Надзвичайно важливим залишається той факт, що багато явищ не залежать якісно від точного виду потенціалу взаємодії, а лише від загального характеру його поведінки на великих та малих відстанях $|x|$. В зв'язку з цим будемо розглядати потенціали, графіки яких мають такий же характер, що і графік потенціалу Ленарда—Джонса, зображений на рисунку 1.1 у першому розділі.

Більшість фізичних характеристик системи визначаються за допомогою термодинамічних потенціалів. До таких термодинамічних потенціалів належать внутрішня енергія, ентальпія, вільна енергія, вільна ентальпія, тиск та інші. Термодинамічні потенціали зазвичай залежать лише від двох параметрів системи: так, наприклад, тиск залежить від значення обереннної температури β та активності z системи, а вільна енергія від оберненої температури β та питомого об'єму v. Цікавим залишається той факт, що знаючи, наприклад, вільну енергію, можна знайти тиск системи, встановивши таким чином рівняння стану.

Визначимо основні термодинамічні функції для моделі коміркового газу. Для цього спершу означимо статистичні суми великого канонічного та канонічного ансамблів, при цьому скористаємось функцією-індикатором для розріджених конфігурацій, яка була введена за допомогою формули (4.6):

— велика статистична сума

$$Z_\Lambda^{(a)}(z,\beta)=\int\limits_{\Gamma_\Lambda^{(dil)}} e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma)=\int\limits_{\Gamma_\Lambda}\prod_{\Delta\in\overline{\Delta}_{a,\Lambda}}\chi_-^\Delta(\gamma)e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_{z\sigma}(d\gamma), \quad (4.10)$$

— статистична сума канонічного ансамблю

$$Z_\Lambda^{(a)}(N,\beta)=\int\limits_{\Gamma_\Lambda^{(N)}}\prod_{\Delta\in\overline{\Delta}_{a,\Lambda}}\chi_-^\Delta(\gamma)e^{-\beta U(\gamma)}\lambda_{\lambda_D^{-d}\sigma}(d\gamma). \quad (4.11)$$

Означення вільної енергії та тиску модельної системи ґрунтується на безпосередньому фізичному змісті статистичних сум великого канонічного та канонічного ансамблів, що були введені у формулах (4.10) та (4.11):

— тиск

$$p^{(a)}(z,\beta)=\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}p_\Lambda^{(a)}(z,\beta):=\frac{1}{\beta}\lim_{\Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}\frac{1}{\sigma(\Lambda)}\log Z_\Lambda^{(a)}(z,\beta); \quad (4.12)$$

— вільна енергія

$$f^{(a)}(v,\beta)=\lim_{\substack{N\to\infty\\ \Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}}f_\Lambda^{(a)}(N,\beta):=-\frac{1}{\beta}\lim_{\substack{N\to\infty\\ \Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}}\frac{1}{N}\log Z_\Lambda^{(a)}(N,\beta). \quad (4.13)$$

Зауваження 4.1. Основною ідеєю введення апроксимації є той факт, що у виразах для основних термодинамічних характеристик систем інтегрування здійснюється не по всьому простору конфігурацій Γ_Λ, а тільки по тих конфігураціях, які містять для заданого фіксованого розбиття $\overline{\Delta_a}$ не більше, ніж одну частинку в кожному кубі $\Delta \in \overline{\Delta_a}$.

При цьому основні характеристики системи коміркового газу апроксимують неперервну систему з будь-якою наперед заданою точністю.

4.2. Властивості вільної енергії коміркового газу як функції питомого об'єму v

Аналітично вільну енергію $f(v)$ нескінченної системи визначають за допомогою статистичної суми канонічного ансамблю Гіббса, використовуючи формулу (1.49).

Перші спроби доведення існування границі (1.49) були пророблені Ван-Ховом в 1949 році для потенціалу з твердою серцевиною. З цією метою вчений розробив метод, який нагадує метод "викидань", що зазвичай використовують при асимптотичному дослідженні сум залежних величин [121]. Проте думки, викладені Ван-Ховом, містили деякі протиріччя. Перше строге доведення існування границі (1.49) було запропоноване Рюелем в 1963 році [116], який доповнив метод Ван-Хова. Однак вказані Рюелем умови, які мав задовольняти потенціал взаємодії частинок, були не досить природніми. Зазначимо, що над проблемою доведення існування границі (1.49) також працювали Фішер та Повзнер. Окремої уваги заслуговує робота Р. Л. Добрушина [17], присвячена дослідженню загальних умов існування скінченної границі вільної енергії $f(v)$, які виявились в деякому сенсі ще й необхідними.

Ми ж ставимо за мету довести існування границі для вільної енергії коміркового газу (4.13), а також продемонструвати, що функція

$f^{(a)}(v,\beta)$ є монотонною, неперервною, вгнутою функцією від питомого об'єму v.

Теорема 4.1. *Нехай двочастинковий потенціал взаємодії $\phi(|x|)$ задовольняє умови **(A)** (див. (1.17)-(1.20)) Тоді існує деяке $0 \le v_0 < \infty$ таке, що для всіх $v > v_0$ існує границя*

$$f^{(a)}(v,\beta) = \lim_{\substack{N\to\infty \\ \Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}} f_\Lambda^{(a)}(N,\beta) := -\frac{1}{\beta} \lim_{\substack{N\to\infty \\ \Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}} \frac{1}{N} \log Z_\Lambda^{(a)}(N,\beta). \qquad (4.14)$$

Функція $f^{(a)}(v,\beta)$ є монотонною, неперервною, вгнутою функцією від питомого об'єму v.

Доведення. Будемо проводити доведення для випадку $d = 3$. Доведемо спочатку існування границі (4.14). Парний потенціал взаємодії точкових частинок ϕ є неперервною функцією на $\mathbb{R}_+\backslash\{0\}$ і задовольняє умову стійкості (1.13), тому

$$Z_\Lambda^{(a)}(N,\beta) := \int\limits_{\Gamma_\Lambda^{(dil)}} e^{-\beta U(\gamma)} \lambda_\sigma(d\gamma) \le \frac{|\Lambda|^N}{N!} e^{CN}, \qquad (4.15)$$

де $C = \beta B < \infty$, а $|\gamma| = N$, тому з цієї нерівності слідує існування скінченної верхньої границі

$$\overline{\lim_{\substack{N\to\infty \\ \Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}}} \frac{1}{N} \log Z_\Lambda^{(a)}(N,\beta). \qquad (4.16)$$

Доведемо слідом за Добрушиним існування скінченної нижньої границі

$$\underline{\lim_{\substack{N\to\infty \\ \Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}}} \frac{1}{N} \log Z_\Lambda^{(a)}(N,\beta).$$

Нехай y_0 таке, що при $y' > y_0$ потенціал взаємодії $\phi(y) \leq h < \infty$, $y \geq y'$. Покажемо, що при $v > v_0$

$$\varliminf_{\substack{N\to\infty \\ \Lambda\uparrow\mathbb{R}^d}} \frac{1}{N} \log Z_\Lambda^{(a)}(N,\beta) > -\infty \tag{4.17}$$

Нехай $\hat{y} > y'$, а y' таке, що $\phi(y) \leq C < \infty$ при $y > y'$. Для довільного $\hat{v} > v_0$ існує куб Λ_1 з ребром довжини r і в ньому система точок $\hat{x}_1, \ldots, \hat{x}_{\hat{N}}$ такі, що $\frac{|\Lambda_1|}{\hat{N}} = \hat{v}$, $|\hat{x}_i - \hat{x}_j| \geq \hat{y}$, де $i \neq j$ та $i, j = 1, \ldots, \hat{N}$, при чому всі точки знаходяться на відстані від граней кубу не менше, ніж на $\hat{y}/2$. Нехай Λ_k — куб з ребрами довжини kr (де $k \in Z$), що лежить на додатніх координатних півосях і нехай цей куб розбитий на k^3 підкубів U_i $i = \overline{1, k^3}$, конгруентних Λ_1 і ці підкуби занумеровані так, щоб сума підкубів $U_1, \ldots, U_{(k-1)^3}$ співпадала з кубом Λ_{k-1}. Спільні грані підкубів слід враховувати лише до одного із них, так, щоб куби U_i не перетинались. Для довільного цілого N нехай Λ_N — це куб $\Lambda_{k(N)}$, де $\hat{N}(k(N)-1)^3 < N \leq \hat{N}(k(N))^3$. Очевидно, що

$$\frac{|\Lambda_N|}{N} = \frac{(k(N))^3|\Lambda_1|}{N} = \frac{(k(N))^3|\Lambda_1|}{\hat{N}(k(N))^3} \to \hat{v} \tag{4.18}$$

Отже, сторона куба Λ_N в $k(N)$ раз більша за сторону куба Λ_1.

Назвемо набір точок $\{x_1, \ldots, x_N\}$ із Λ_N “виділеним”, якщо $|x_i - x_j| \geq y'$, $i, j = 1, \ldots, N$, $i \neq j$, в кожному із підкубів U_i міститься не більше, ніж $\hat{N}$ точок, а в кожному із підкубів U_i, $i = 1, \ldots, (k(N)-1)^3$, що знаходяться в $\Lambda_{k(N)-1}$, буде рівно $\hat{N}$ точок. Відповідну множину таких конфігурацій будемо позначати $\gamma \in \Gamma_W$, де $\Gamma_W \subset \Gamma_\Lambda$.

Якщо $\xi_1, \ldots, \xi_N$ — випадкові величини, то ймовірність виділених наборів

$$P\Big(\{\xi_1, \ldots, \xi_N\} \in \Gamma_W\Big) \geq N!\left(\frac{\frac{4}{3}\pi\varepsilon^3}{|\Lambda_N|}\right)^N, \tag{4.19}$$

де $\frac{4}{3}\pi\varepsilon^3$ — об'єм сфери радіуса ε.

Для моделі коміркового газу простором конфігурацій є простір $\Gamma^{(dil)}$, тому в кубиках не може перебувати більше однієї частинки. Для того щоб продовжити доведення теореми, використовуючи дослідження Добрушина, необхідно узгодити розбиття простору на куби.

Будемо вважати, що куб Λ_1, про який було описано вище, ще додатково розбитий на куби $\Delta_{i'}$ так, що в кожному з цих $\Delta_{i'}$ знаходилось 0 або 1 частинка. Оскільки вище було сказано, що в кубі Λ_1 міститься система з $\hat{N}$ точок, то щонайменше в кубі Λ_1 буде міститись $\hat{N}$ кубів $\Delta_{i'}$. Також будемо розглядати таке розбиття Λ_1 на куби $\Delta_{i'}$, де довжина ребер кубів $\Delta_{i'}$ є меншою, ніж найменша відстань між двома частинками в кубі Λ_1. Зауважимо також, що число кубів $\Delta_{i'}$ повинно бути цілим.

Підкуби U_i $i = \overline{1, k^3}$, конгруентні Λ_1, теж автоматично ще додатково будуть розбиті на куби $\Delta_{i'}$ так, щоб в кожному $\Delta_{i'}$ містилось щонайбільше 1 частинка.

Розглянемо $\chi(y)$ — монотонно-незростаючу невід'ємну функцію таку, що при деякому $0 < b < \infty$

$$\int_b^\infty \chi(y) y^{d-1} dy < \infty \tag{4.20}$$

та

$$\phi(y) \leq \chi(y), \text{ при } y \geq b. \tag{4.21}$$

Доозначимо функцію $\chi(y)$ при $y < b$, нехай $\chi(y) = \max(\chi(b), h)$, $y < b$. Тоді функція $\chi(y)$ монотонно незростає. Враховуючи (4.21) та означення функції $\chi(y)$, а також виділених наборів

$\gamma = \{x_1, \ldots, x_N\} \in \Gamma_W$, потенціал взаємодії $\phi(|x_i - x_j|) \leq \chi(|x_i - x_j|)$, звідки буде слідувати, що потенціальна енергія

$$U(\gamma \in \Gamma_W) \leq \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \chi(|x_i - x_j|). \tag{4.22}$$

Нехай y_{il} — точка підкубу U_l, яка є найбільш віддалена від точки x_i. Тоді якщо $U_l \subset \Lambda_k$, то

$$\sum_{x_j \in U_l} \chi(|x_i - x_j|) \leq \hat{N} \chi(|x_i - y_{il}|) =$$

$$= \frac{N}{|\Lambda_1|} \int\limits_{U_l} \chi(|x_i - y_{il}|) dx \leq \frac{\hat{N}}{|\Lambda_1|} \int\limits_{U_l} \chi(|x_i - x| + r\sqrt{3}) dx, \tag{4.23}$$

де x — довільна точка, $r\sqrt{3}$ — максимальний діаметр куба U_l. Тоді виконуватиметься нерівність

$$\sum_{j \neq i} \chi(|x_i - x_j|) \leq \frac{\hat{N}}{|\Lambda_1|} \int\limits_{\Lambda_k} \chi(|x_i - x| + r\sqrt{3}) dx, \quad i = \overline{1, N}. \tag{4.24}$$

Так як для довільної точки $x_i \in \Lambda_k$ кубу Λ_k належить перетин сфери радіуса $k(N)r$ з центром в точці x_i з прямокутним сферичним кутом, що рівний повному куту, враховуючи (4.24), отримаємо, що при $\gamma \in \Gamma_W$ і достатньо великих N

$$U(\gamma \in \Gamma_W) \leq 4\pi N \frac{\hat{N}}{|\Lambda_1|} \int\limits_0^{k(N)r} \chi(y + r\sqrt{3}) y^2 dy =$$

$$4\pi \frac{\hat{N}}{|\Lambda_1|} N \left[\max(\chi(b), h) \frac{(b + r\sqrt{3})^3}{3} + \int\limits_b^{\infty} \chi(y)(y + r\sqrt{3})^2 dy \right]. \tag{4.25}$$

Враховуючи умову (4.20) і як видно із (4.25), що при деякому $D < \infty$ для $\gamma \in \Gamma_W$

$$U(\gamma) \leq DN. \tag{4.26}$$

Тоді (4.19) та означення (4.11) отримуємо нерівність

$$Z_{\Lambda}^{(a)}(N,\beta) \geq \frac{|\Lambda_N|^N}{N!} N! \left(\frac{\frac{4}{3}\pi\varepsilon^3}{|\Lambda_N|} \right)^N e^{-\beta D N} = \left(\frac{4}{3}\pi\varepsilon^3 e^{-\beta D} \right)^N, \tag{4.27}$$

звідки і буде слідувати існування скінченної нижньої границі (4.17).

Для доведення існування границі (4.14) залишилось показати, що верхня та нижня границі співпадають. Зазначимо, що з умови (4.20) буде слідувати, що $y^3\chi(y) \to 0$ коли $y \to \infty$, інакше інтеграл в (4.20) був би логарифмічно розбіжний. Насправді, якщо це не так, то існує послідовність $y_1, y_2, \ldots$ така, що $y_i \geq 2y_{i-1}$ та $\chi(y_i) \geq \frac{C}{y_i^3}$, де $C > 0$. Оскільки $\chi(y)$ — монотонна, то

$$\int\limits_0^\infty \chi(y) y^2 dy \geq \sum_{i=2}^\infty \int\limits_{y_{i-1}}^{y_i} \chi(y_i) y^2 dy \geq \frac{1}{3} \sum_{i=2}^\infty \frac{C}{y_i^3} \big(y_i^3 - y_{i-1}^3\big) \geq$$

$$\geq \frac{1}{3} \sum_{i=2}^\infty \frac{C}{y_i^3} \big(y_i^3 - (\frac{y_i}{2})^3\big) = \frac{1}{3} \cdot \frac{7}{8} \sum_{i=2}^\infty \frac{C y_i^3}{y_i^3} = \infty,$$

що суперечить умові (4.20).

Введемо монотонно-спадну функцію $æ(y) \to 0$ при $y \to \infty$ таку, що $y^3\chi(y) \leq æ(y)$. Нехай $\lambda(y) = \max\left(y^{\frac{1}{2}}\ [æ(y^{\frac{1}{2}})]^{\frac{1}{6}}\right)$. Важливі наступні властивості цієї функції:

1) $\lambda(y) \to 0$ при $y \to \infty$;

2) $y\lambda(y) \to \infty$ при $y \to \infty$;

$$3) y^3 \chi(y\lambda(y)) \le \frac{æ(y\lambda(y))}{(\lambda(y))^3} \le$$

$$\le \frac{æ(y^{\frac{1}{2}})}{(\lambda(y))^3} \le (æ(y^{\frac{1}{2}}))^{\frac{1}{2}} \to 0 \text{ при } y \to \infty. \tag{4.28}$$

Нехай задано два куби Λ_1 з об'ємом $|\Lambda_1| = V_{N_1} = V_1$ і Λ_2 з об'ємом $|\Lambda_2| = V_{N_2} = V_2$ ($N_1 < N_2$, тобто $V_1 \subset V_2$) зі сторонами $z_1 = \sqrt[3]{V_1}$; $z_2 = \sqrt[3]{V_2}$ відповідно.

Визначимо ціле число $r(N_1, N_2)$ таким чином:

$$r(N_1, N_2) z_1 \big(1 + \lambda(z_1)\big) \le z_2 < \big(r(N_1, N_2) + 1\big) z_1 \big(1 + \lambda(z_1)\big). \tag{4.29}$$

Тоді в середину куба Λ_2 можна вкласти

$$M(N_1, N_2) = \big[r(N_1, N_2)\big]^3 \tag{4.30}$$

кубів $H_1, H_2, \ldots, H_{M(N_1,N_2)}$, що не будуть перетинатись, конгруентних Λ_1. Відстань між цими кубами буде $z_1 \lambda(z_1)$. Нехай

$$N_2 = n_1 + n_2 + \ldots + n_M, \quad \bar{n} = \max_{k=1,\ldots,M} n_k, \tag{4.31}$$

де n_k — фіксовані цілі числа. Нехай $\gamma = \{x_1, \ldots, x_{N_2}\}$ — виділені конфігурації ($\gamma \in \Gamma_W \subset \Gamma_{\Lambda_2}$) (при цьому рівно n_1 серед точок належать кубу H_1, рівно n_2 належать H_2, ..., рівно n_M належать кубу H_M). Якщо ξ_i — випадкова величина, що набуває значень x_i, то

$$P\big(\{\xi_1, \ldots, \xi_{N_2}\} \in \Gamma_W\big) = \frac{N_2!}{n_1! \ldots n_M!} \left(\frac{V_{N_1}}{V_{N_2}}\right)^{N_2}. \tag{4.32}$$

Якщо $\gamma \in \Gamma_W$, то

$$U(\gamma) = \sum_{k=1}^{M} \sum_{\{x_i, x_j\} \in H_k} \phi(|x_i - x_j|) + \sum_{k \ne l} \sum_{\substack{x_i \in H_k \\ x_j \in H_l}} \phi(|x_i - x_j|). \tag{4.33}$$

Точки розподілені по кубам H_i, куби знаходяться один від одного на відстані $z_1\lambda(z_1)$. Оцінимо другий доданок в (4.33).

Для цього введемо функцію

$$\tilde{\chi}(y) = \begin{cases} \chi(y), & \text{якщо } y \geq z_1\lambda(z_1); \\ \chi(z_1\lambda(z_1)), & \text{якщо } y < z_1\lambda(z_1). \end{cases} \tag{4.34}$$

Якщо $y < 0$, то $\tilde{\chi}(y)$ покладемо рівним $\chi(z_1\lambda(z_1))$.

Нехай N_1 — достатньо велике, тоді і сторона z_1 — достатньо велика, а тому $z_1\lambda(z_1)$ — досить велика, якщо куби знаходитимуться на відстані b один від одного, то $\phi(|x_i - x_j|) < \chi(|x_i - x_j|)$ (x_i та x_j належать різним кубам). Зафіксуємо якесь $\chi_{i_0} \in H_{k_0}$, тоді:

$$\sum_{x_j \notin H_{k_0}} \phi\big(|x_{i_0} - x_j|\big) \leq \sum_{x_j \notin H_{k_0}} \chi\big(|x_{i_0} - x_j|\big) = \sum_{x_j \notin H_{k_0}} \tilde{\chi}\big(|x_{i_0} - x_j|\big). \tag{4.35}$$

Нехай y_{i_0k} — відстань від точки x_{i_0} до куба H_k. Всі куби H_k мають об'єм V_{N_1}. Тоді

$$\sum_{x_j \notin H_k} \tilde{\chi}(|x_{i_0} - x_j|) = \sum_{\substack{k=1 \\ y_0 \neq y}}^{M} \sum_{x_j \in H_k} \tilde{\chi}(|x_{i_0} - x_j|);$$

$$\sum_{x_j \in H_k} \tilde{\chi}(|x_{i_0} - x_j|) \leq \bar{n}\tilde{\chi}(y_{i_0k}) \frac{1}{V_{N_1}} \int\limits_{H_k} dx = \frac{\bar{n}}{V_{N_1}} \int\limits_{H_k} \tilde{\chi}(y_{i_0k}) dx \leq$$

$$\leq \frac{\bar{n}}{V_{N_1}} \int\limits_{H_k} \tilde{\chi}\big(|x - x_{i_0}| - z_1\sqrt{3}\big) dx, \tag{4.36}$$

оскільки $\tilde{\chi}(y_{i_0k}) < \tilde{\chi}\big(|x - x_{i_0}| - z_1\sqrt{3}\big)$.

Окремо продемонструємо, що $y_{i_0k} > |x - x_{i_0}| - z_1\sqrt{3}$. Нехай A — це така точка, яка належить кубу H_k і найближче розташована до точки x_{i_0}, що не належить даному кубику H_k, сторона якого дорівнює z_1 (див. рис. (4.1)). Зрозуміло, що відстань між точкою $A \in H_k$ і точкою

$x \in H_k$ не буде перевищувати довжини діагоналі куба, тобто числа $\sqrt{3}z_1$, тому $|x - A| < z_1\sqrt{3}$. З нерівності трикутника отримуємо, що $y_{i0} < |x - A| + y_{i_0 k}$, де $y_{i_0} = |x - x_{i_0}|$, $y_{i_0 k} = |A - x_{i_0}|$, оскільки $|x - A| < z_1\sqrt{3}$, то $y_{i_0 k} > |x - x_{i_0}| - |x - A| > |x - x_{i_0}| - z_1\sqrt{3}$.

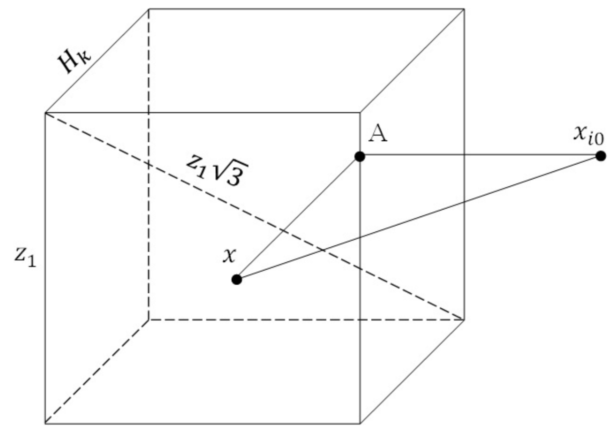

Рис. 4.1:

Отже,

$$\sum_{x_j \notin H_{k0}} \phi(|x_{i_0} - x_j|) \leq \frac{\bar{n}}{V_{N_1}} \sum_{\substack{k=1 \\ y_0 \neq y}}^{M} \int_{H_k} \tilde{\chi}(|x - x_{i_0}| - z_1\sqrt{3})dx \leq$$

$$\leq \frac{\bar{n}}{V_{N_1}} \int_{\Lambda_{N_2}} \tilde{\chi}\big(|x - x_{i_0}| - z_1\sqrt{3}\big)dx. \qquad (4.37)$$

Зробимо заміну змінних, перейшовши до сферичних координат.

$$y = |x - x_{i_0}|$$
$$x^{(x)} - x_{i_0}^{(x)} = y\cos\varphi\sin\theta$$
$$x^{(y)} - x_{i_0}^{(y)} = y\sin\varphi\sin\theta$$
$$x^{(z)} - x_{i_0}^{(z)} = y\cos\theta$$

Тоді отримуємо:

$$\sum_{x_j \notin H_{k0}} \phi(|x_{i_0} - x_j|) \leq \frac{\bar{n}}{V_{N_1}} 4\pi \int_0^{\infty} y^2 \tilde{\chi}(y - z_1\sqrt{3})dy =$$

$$= \frac{4\pi\bar{n}}{V_{N_1}}\Bigg(\chi\big(z_1\lambda(z_1)\big)\int\limits_0^{z_1(\lambda(z_1)+\sqrt{3})} y^2dy + \int\limits_{z_1\lambda(z_1)}^{\infty}(y+z_1\sqrt{3})^2\chi(y)dy\Bigg). \quad (4.38)$$

Враховуючи (4.28) і (4.20), функція від z_1, що знаходиться в дужках в (4.38) буде наближатись до 0 при $z_1 \to \infty$. Тому для деякої функції $\mu(N) \to 0$ при $N \to \infty$, вид якої залежить виду функції $\chi(y)$, як слідує з (4.38), (4.37) і (4.32) при $\gamma \in \Gamma_W$

$$U(\gamma) \leq \sum_{k=1}^{M}\sum_{\{x_i,x_j\}\in H_k}\phi(|x_i - x_j|) + \frac{N_2\mu(N_1)\bar{n}}{V_{N_1}}. \quad (4.39)$$

Скористаємось далі тим, що для будь-якого розбиття числа N_2 на числа $n_1,\ldots,n_M$ $N_2 = n_1+\ldots+n_M$, у кожному з кубів $\Lambda_1,\ldots,\Lambda_M$ (де $|\Lambda_1| = \ldots = |\Lambda_M|$, тобто $V_1 = \ldots = V_M$) буде перебувати $n_1,\ldots,n_M$ частинок і $\bigcup\limits_{k=1}^{M}\Lambda_k \subset \Lambda_2$, також для кожної функції $f(\{x_1,\ldots,x_{N_2}\}) \geq 0$

$$\frac{1}{N_2!}\int\limits_{\Lambda_2}dx_1\ldots\int\limits_{\Lambda_2}dx_{N_2}f(\{x_1,\ldots,x_{N_2}\}) \geq$$

$$\geq \prod_{k=1}^{M}\frac{1}{n_k!}\int\limits_{\Lambda_k}dx_1^{(k)}\ldots\int\limits_{\Lambda_k}dx_{N_2}^{(k)}f(\{x_1^{(1)},\ldots,x_{k_M}^{(M)}\}). \quad (4.40)$$

Тоді враховуючи оцінку (4.39), тримаємо:

$$\frac{1}{N_2!}Q^{(a)}(\Lambda_{N_2},N_2) \geq \prod_{k=1}^{M}\frac{Q^{(a)}(\Lambda_{N_1},n_k)}{n_k!}e^{-\frac{\beta\bar{n}\mu(N_1)N_2}{V_{N_1}}}, \quad (4.41)$$

де $Q_\Lambda^{(a)}(N,\beta) = N!Z_\Lambda^{(a)}(N,\beta)$.

Розглянемо довільну послідовність кубів, для яких правильним є умова $\frac{V_k}{N} \to v, \;\; N \to \infty$ та $v > v_0$. Як видно з (4.29), (4.30) і того, що

$\lambda(z_1) \to 0$ при $N_1 \to \infty$, якщо $N_1 \to \infty$ і $\frac{N_2}{N_1} \to \infty$, тоді

$$M(N_1, N_2) \sim \frac{z_2^3}{z_1^3\big(1+\lambda(z_1)\big)^3} \sim \frac{N_2}{N_1}. \tag{4.42}$$

Адже з (4.29) маємо

$$\frac{z_2}{r(N_1, N_2)} \sim z_1(1+\lambda(z_1)) => r(N_1, N_2) \sim \frac{z_2}{z_1(1+\lambda(z_1))},$$
$$M = (r(N_1, N_2))^3 => M \sim \frac{z_2^3}{(z_1(1+\lambda(z_1)))^3} \sim \frac{N_2}{N_1},$$

оскільки $\lambda(z_1) \to 0$.

Для довільного $\varepsilon > 0$ можна при всіх достатньо великих N_1 і $\frac{N_2}{N_1}$ вибрати числа n_k в (4.31) так, щоб по меншій мірі $(1-\varepsilon)M(N_1, N_2)$ із цих чисел дорівнює N_1, а всі інші були заключені по величині між N_1 і $\frac{|\Lambda_{N_1}|}{\bar{V}}$, де $v > \bar{v} > v_0$. З нерівності (4.17) слідує, що існує $K > -\infty$ таке, що при $\frac{V}{N} > \bar{v}$ і при всіх достатньо великих V та N

$$\frac{1}{N!} Q^{(a)}(V, N) \geq e^{KN}, \tag{4.43}$$

звідки отримуємо, що

$$\prod_{k=1}^{\left[\varepsilon M(N_1, N_2)\right]} \frac{Q^{(a)}(V_k, n_k)}{n_k!} \geq e^{KN_1 \varepsilon M(N_1, N_2)},$$

отже

$$\frac{Q^{(a)}(\Lambda_{N_2}, N_2)}{N_2!} \geq \left[\frac{Q^{(a)}(\Lambda_{N_1}, N_1)}{N_1!}\right]^{(1-\varepsilon)M(N_1, N_2)} \times$$

$$\times e^{KN_1 \varepsilon M(N_1, N_2) - \frac{\beta\mu(N_1)N_2}{\bar{v}}}. \tag{4.44}$$

Із (4.42) та (4.44) слідує, що для довільного $\delta > 0$ знайдеться N_δ настільки велике, що для довільного фіксованого $N_1 > N_\delta$ нижня границя

$$\varliminf_{N_2 \to \infty} \frac{1}{N_2} \log \frac{Q^{(a)}(\Lambda_{N_2}, N_2)}{N_2!} \geq (1-\delta) \frac{1}{N_1} \log \frac{Q^{(a)}(\Lambda_{N_1}, N_1)}{N_1!} - \delta. \tag{4.45}$$

Якщо в цій нерівності у правій частині $N_1 \to \infty$, отримаємо

$$\varliminf_{N_2\to\infty} \frac{1}{N_2} \log \frac{Q^{(a)}(\Lambda_{N_2}, N_2)}{N_2!} \geq (1-\delta) \varlimsup_{N_1\to\infty} \frac{1}{N_1} \log \frac{Q^{(a)}(\Lambda_{N_1}, N_1)}{N_1!} - \delta. \quad (4.46)$$

Оскільки $\delta > 0$ — довільне, то нижня границя і верхня співпадають. Тому існує границя (4.14).

Щоб довести твердження теореми про вгнутість функції $f^{(a)}(v)$ розглянемо числа $v_2 > v_1 > v_0$ та $\lambda_1 \geq 0$, $\lambda_2 \geq 0$, $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$, $\lambda_1 v_1 + \lambda_2 v_2 = v$. Застосуємо нерівність (4.41). Для цього зазначимо, що в силу (4.42) для довільного $\varepsilon > 0$ і всіх достатньо великих N_1 та N_2/N_1 можна вибрати числа n_k в (4.31) так, щоб $\frac{\lambda_1 v_1}{v}(1-\varepsilon)M(N_1, N_2)$ із них дорівнювали $\tilde{n}_1 = \left[V_{N_1} v_1^{-1}\right]$, а $\frac{\lambda_2 v_2}{v}(1-\varepsilon)M(N_1, N_2)$ із них дорівнювати числу $\tilde{n}_2 = \left[V_{N_1} v_2^{-1}\right]$, а решта не перевищували $V_{N_1} \bar{v}^{-1}$, де $\bar{v} > v_0$.

Аналогічно до попередніх міркувань, отримуємо

$$f^{(a)}(v) = -\frac{1}{\beta} \lim_{N_2\to\infty} \frac{1}{N_2} \log \frac{Q^{(a)}(N_{N_2}, N_2)}{N_2!} \leq$$

$$\leq -\frac{1}{\beta}\left[\lambda_1 \frac{1}{\tilde{n}_1} \log \frac{Q^{(a)}(V_{N_1}, \tilde{n}_1)}{n_1!} + \lambda_2 \frac{1}{\tilde{n}_2} \log \frac{Q^{(a)}(V_{N_1}, \tilde{n}_2)}{n_2!}\right](1-\delta) - \delta. \quad (4.47)$$

Оскільки при $N_1 \to \infty$ $\frac{V_{N_1}}{\tilde{n}_1} \to v_1$, $\frac{V_{N_1}}{\tilde{n}_2} \to v_2$, то в результаті переходу до границі при $N_1 \to \infty$ в правій частині нерівності (4.47) отримуємо, що

$$f^{(a)}(\lambda_1 v_1 + \lambda_2 v_2) \leq \lambda_1 f^{(a)}(v_1) + \lambda_2 f^{(a)}(v_2), \quad (4.48)$$

що і доводить вгнутість функції $f^{(a)}(v)$.

Монотонність $f^{(a)}(v)$ слідує з того, що $Q_\Lambda^{(a)}(N, \beta)$ монотонно залежить від Λ. Неперервність $f^{(a)}(v)$ є наслідком її монотонності і вгнутості.

4.3. Теорема про апроксимацію вільної енергії точкового газу вільною енергією коміркового газу

Теорема 4.2. *Нехай двочастинковий потенціал взаємодії* $\phi(|x|)$ *задовольняє умови* ***(A)*** *(див. (1.17)–(1.20)). Тоді для будь-якого* $\varepsilon > 0$ *існує значення параметру розбиття* $a_1 = a_1(v, \varepsilon) > 0$ *таке, що умова*

$$|f(v,\beta) - f^{(a)}(v,\beta)| < \varepsilon \tag{4.49}$$

буде виконуватись для всіх позитивних значень v, β *і* $a \in (0; a_1(v,\varepsilon))$.

Доведення. Для доведення нам буде потрібний наступний розклад для одиниці:

$$1 = \prod_{\Delta \in \bar{\Delta}_{a,\Lambda}} \left[\chi_-^{\Delta}(\gamma) + \chi_+^{\Delta}(\gamma)\right] = \sum_{X \subseteq \bar{\Delta}_{a,\Lambda}} \tilde{\chi}_+^{\bar{X}}(\gamma) \tilde{\chi}_-^{\bar{\Delta}_{a,\Lambda} \setminus \bar{X}}(\gamma), \tag{4.50}$$

що буде виконуватись для довільного $\gamma \in \Gamma_\Lambda$ і деякого фіксованого розбиття $\Delta_{a,\Lambda}$. У формулі (4.49) були використані наступні факти:

$$\tilde{\chi}_\pm^{\bar{Y}}(\gamma) := \prod_{\Delta \in \bar{\Delta}_{a,Y}} \chi_\pm^{\Delta}(\gamma), \tag{4.51}$$

$$\sum_{\bar{X} \subseteq \bar{\Delta}_{a,\Lambda}} (\dots) = \sum_{k=0}^{N_k} \sum_{\bar{X}_k \subseteq \bar{\Delta}_{a,\Lambda}} (\dots), \tag{4.52}$$

де множина $\bar{X}_k := \{\Delta_1, \dots, \Delta_k\}$, а число $N_\Lambda := \frac{\sigma(\Lambda)}{a^d}$ — кількість кубиків Δ у множині Λ, при цьому $\sigma(\Lambda)$ означає міру Лебега множини Λ.

Підставимо одиницю, що виражається формулою (4.50), в означення статистичної суми канонічного ансамблю (4.11), тоді:

$$Z_\Lambda(N,\beta) = \sum_{\bar{X} \subset \bar{\Delta}_{a,\Lambda}} \int\limits_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} \tilde{\chi}_+^{\bar{X}}(\gamma) \tilde{\chi}_-^{\bar{\Delta}_{a,\Lambda} \setminus \bar{X}}(\gamma) e^{-\beta U(\gamma)} \lambda_\sigma(d\gamma). \tag{4.53}$$

Перший доданок у (4.53) при $\bar{X} = \emptyset$ буде співпадати з $Z_\Lambda^{(a)}(N,\beta)$, що задана формулою (4.13). Тоді вираз (4.53) можна переписати у такому вигляді:

$$Z_\Lambda(N,\beta) = Z_\Lambda^{(a)}(N,\beta) Z_\Lambda^{(+)}(N,a,\beta), \tag{4.54}$$

де

$$Z_\Lambda^{(+)}(N,a,\beta) = 1 + \frac{1}{Z_\Lambda^{(a)}(N,\beta)} \sum_{\emptyset \neq \bar{X} \subseteq \bar{\Delta}_{a,\Lambda}} \int_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} \tilde{\chi}_+^{\bar{X}}(\gamma) \tilde{\chi}_-^{\bar{\Delta}_{a,\Lambda} \setminus \bar{X}}(\gamma) e^{-\beta U(\gamma)} \lambda_\sigma(d\gamma). \tag{4.55}$$

$\square$

Використовуючи означення для вільної енергії (4.13) та формулу (4.55), а також властивості логарифма, отримаємо:

$$f_\Lambda(N,\beta) = -\frac{1}{\beta N} \log Z_\Lambda(N,\beta) =$$

$$= -\frac{1}{\beta N} \log(Z_\Lambda^{(a)}(N,\beta) \cdot Z_\Lambda^{(+)}(N,a,\beta)) =$$

$$= -\frac{1}{\beta N} \log Z_\Lambda^{(a)}(N,\beta) - \frac{1}{\beta N} \log Z_\Lambda^{(+)}(N,a,\beta) =$$

$$= f_\Lambda^{(a)}(N,\beta) + \Delta f_\Lambda^{(a)}(N,\beta), \tag{4.56}$$

де

$$\Delta f_\Lambda^{(a)}(N,\beta) := -\frac{1}{\beta N} \log Z_\Lambda^{(+)}(N,a,\beta) \tag{4.57}$$

Для того, щоб встановити оцінку для другого доданку у виразі (4.56) представимо енергію $U(\gamma)$ у вигляді:

$$U(\gamma) = U(\gamma_X) + W(\gamma_X; \gamma_{\Lambda \setminus X}) + U(\gamma_{\Lambda \setminus X}), \tag{4.58}$$

де

$$W(\gamma;\eta) := \sum_{\substack{x\in\gamma\\ y\in\eta}} \phi(|x-y|), \quad \gamma,\eta\in\Gamma_0. \tag{4.59}$$

Далі використаємо умову (1.15), тоді:

$$e^{-\beta U(\gamma_X)} e^{-\beta W(\gamma_X;\gamma_{\Lambda\setminus X})} \le \prod_{\Delta\in\bar{\Delta}_{a,x}} e^{-\beta A(a)|\gamma_\Delta|^m + \beta C(a)|\gamma_\Delta|} := E_x, \tag{4.60}$$

де

$$C(a) = B(a) + v_0(a). \tag{4.61}$$

Позначимо інтеграл в (4.55) (після оцінки (4.61)) літерою I_X і перепишемо вираз для $I'_X = I_X N!$ в такій формі:

$$I'_X = (\int\limits_X dx_1 + \int\limits_{\Lambda\setminus X} dx_1)\ldots(\int\limits_X dx_N +$$

$$+ \int\limits_{\Lambda\setminus X} dx_N) E_x \tilde{\chi}_+^{\bar{X}}(\gamma_X) e^{-\beta U(\gamma_{\Lambda\setminus X})} \tilde{\chi}_-^{\bar{\Delta}_{a,\Delta}\setminus\bar{X}}(\gamma_\Lambda\setminus X). \tag{4.62}$$

Кожна із множин $\bar{X}$ є об'єднанням k кубиків $\Delta_1,\ldots,\Delta_k$, де $k\in\{1,\ldots,N_\Lambda\}$. У кожному з цих кубів Δ_j, де $j\in\{1,\ldots,k\}$, повинно знаходитись не менше, ніж дві змінні з конфігурації $\gamma=\{x_1,\ldots,x_N\}$. Позначимо кількість змінних, що знаходяться в кубиках $\Delta_1,\ldots,\Delta_k$ літерою $M=m_1+\ldots+m_k$. Очевидно, що $M\in\{2k,\ldots,N\}$ і $m_j\ge 2$, $j\in\{1,\ldots,k\}$. Серед 2^N інтегралів, що виникнуть у правій частині рівності (4.62), не будуть обертатись в нуль тільки ті доданки, у яких інтегрування за змінними $\{x_1,\ldots,x_M\}$ буде відбуватись по області $X_k=\bigcup\limits_{i=1}^{k}\Delta_i$, а інтегрування за змінними $\{x_{m+1},\ldots,x_N\}$ по області $\Lambda\setminus X_k=\bigcup\limits_{i=k+1}^{N}\Delta_i$. За рахунок симетричності підінтегральних функцій відносно змінних $\{x_1, \ldots, x_N\}$ кількість доданків в сумі I_x буде складати $C_N^M = \frac{N!}{(N-M)!M!}$, а відповідні функції $\tilde{\chi}_{\pm}^{\bar{Y}}(\bar{Y} = \bar{X}$ або $\bar{Y} = \bar{\Delta}_{a,\Lambda\setminus\bar{X}})$ будуть залежати тільки від конфігурацій в X або $\Lambda\setminus X$:

$$\tilde{\chi}_{+}^{\bar{X}}(\gamma) = \tilde{\chi}_{+}^{\bar{X}}(\gamma_X) = \tilde{\chi}_{+}^{\bar{X}}(\{x_1, \ldots, x_M\})$$

$$\tilde{\chi}_{-}^{\bar{X}_{a,\Lambda\setminus\bar{X}}}(\gamma) = \tilde{\chi}_{-}^{\bar{X}_{a,\Lambda\setminus\bar{X}}}(\gamma_{\Lambda\setminus X}) = \tilde{\chi}_{-}^{\bar{X}}(\{x_{M+1}, \ldots, x_N\})$$

Отже,

$$Z_\Lambda^+(N, a, \beta) \leq 1 + \sum_{k=1}^{N_\Lambda} \sum_{\{\Delta_1,\ldots,\Delta_k\}\subseteq\bar{\Delta}_{a,\Lambda}} \sum_{M=2k}^{N} \frac{1}{M!} \int\limits_{X_k} dx_1 \ldots \int\limits_{X_k} dx_M \times$$

$$\times \tilde{\chi}_{+}^{\bar{X}_k}(\{x_1, \ldots, x_M\}) \prod_{\Delta\in\bar{\Delta}_{a,X}} e^{-\beta A(a)|\gamma_\Delta|^m + \beta C(a)|\gamma_\Delta|} \frac{Z_{\Lambda\setminus X_k}^{(a)}(N-M, \beta)}{Z_\Lambda^{(a)}(N, \beta)}. \quad (4.63)$$

Кожна з функцій-індикаторів $\chi_{+}^{\Delta_j}(\{x_1, \ldots, x_M\})$, $j = 1, 2, \ldots, k$, що входить у визначення $\tilde{\chi}_{+}^{X_k}$ може бути представлена у вигляді (тут $\gamma = \{x_1, \ldots, x_M\}$):

$$\chi_{+}^{\Delta_j}(\gamma) = \chi_{+}^{\Delta_j}(\{x_1, \ldots, x_M\}) = \sum_{n=2}^{M} \chi_{n}^{\Delta_j}(\{x_1, \ldots, x_M\}),$$

де

$$\chi_n^{\Delta_j}(\gamma) = \begin{cases} 1, & \text{якщо } |\gamma_{\Delta_j}| = n, \\ 0, & \text{в іншому випадку.} \end{cases}$$

Далі знову кожен з інтегралів зі змінною $x_j \in X_k$ $j = 1, \ldots, M$ можна представити як суму:

$$\int\limits_{X_k} dx_j(\ldots) = \sum_{l=1}^{k} \int\limits_{\Delta_l} dx_j(\ldots).$$

M змінних $\{x_1, \ldots, x_M\}$ можна розмістити в k кубах так, щоб у кожному кубику було m_j $(m \geq 2)$ частинок, $M!/m_1! \ldots m_k!$ способами.

Тоді (4.63) буде мати вигляд:

$$Z_\Lambda^{(+)}(N,a,\beta) \le 1 + \sum_{k=1}^{N_\Lambda} \sum_{\{\Delta_1,\ldots,\Delta_k\}\subseteq\bar{\Delta}_{a,\Lambda}} \sum_{M=2k}^{N} a^{dM} \times$$

$$\times e^{\beta C(a)M} \sum_{\substack{m_1,\ldots,m_k:\, m_j\ge 2\\ m_1+\ldots+m_k=M}} \left(\prod_{j=1}^{k} \frac{e^{-\beta A(a)m_j^m}}{m_j!}\right) \frac{Z^{(a)}_{\Lambda\setminus X_k}(N-M,\beta)}{Z^{(a)}_\Lambda(N,\beta)}. \qquad (4.64)$$

Для оцінки частки у формулі (4.64) ми будемо використовувати лему.

Лема 4.1. *Нехай потенціал взаємодії ϕ задовольняє умови **(A)** (див. (1.17)-(1.20)). Тоді існує стала $K>0$ така, що виконується нерівність*

$$\frac{Z^{(a)}_{\Lambda\setminus X_k}(N-M,\beta)}{Z^{(a)}_\Lambda(N,\beta)} \le K^M \qquad (4.65)$$

для довільного $\beta>0$, $v>0$ і достатньо великого куба Λ.

Доведення. Спочатку зафіксуємо деяке $\bar{v}>0$ і достатньо великий куб Λ в такий спосіб, щоб зберігалась умова $\sigma(\Lambda)/N \ge \bar{v}$. Аналогічно до напрацювань Добрушина та Мінлоса [19] введемо допоміжний потенціал

$$\phi_{\bar{a}}(|x|) = \begin{cases} 0, & \text{при } |x|\le \bar{a},\\ \phi(|x|), & \text{при } |x|>\bar{a}, \end{cases} \qquad (4.66)$$

для всіх $a<\bar{a}<r_0$ (див. (1.18)). Доведення леми слідує з оцінки співвідношення конфігураційного інтегралу $Q^{(a)}(\Lambda,N,\beta) = N!Z^{(a)}_\Lambda(N,\beta)$ [19]:

$$\frac{Q^{(a)}(N+1,\Lambda,\beta)}{Q^{(a)}(N,\Lambda,\beta)} \ge k\sigma(\Lambda), \qquad (4.67)$$

де $k = k(\bar{a}, \bar{v})$. Для доведення нерівності (4.67) представимо $Q^{(a)}(N+1, \Lambda, \beta)$ у вигляді:

$$Q^{(a)}(N+1, \Lambda, \beta) = \int\limits_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} e^{-\beta U(\gamma)} d\gamma \int\limits_{\Lambda} dx e^{-\beta W(x;\gamma)} \prod_{\Delta \in \bar{\Delta}_{a,\Lambda}} \chi_-^{\Delta}(\gamma \cup \{x\}), \tag{4.68}$$

де $\gamma = \{x_1, \ldots, x_N\}$, $d\gamma = dx_1 \ldots dx_N$. Визначимо область

$$\tilde{\Lambda}_{\bar{a}}(\gamma) := \left\{ x \in \Lambda | \, |x - x_j| \geq \bar{a}, \; x_j \in \gamma, \; \Gamma_\Lambda^{(N)} \right\} \tag{4.69}$$

і виберемо Λ достатньо великим та $\bar{a}$ — достатньо малим і нехай:

$$\sigma(\tilde{\Lambda}_{\bar{a}}(\gamma)) \geq \frac{1}{2} \sigma(\Lambda). \tag{4.70}$$

Зауважимо, що $x \in \tilde{\Lambda}_{\bar{a}}(\gamma)$

$$\prod_{\Delta \in \bar{\Delta}_{a,\Lambda}} \chi_-^{\Delta}(\gamma \cup \{x\}) = \prod_{\Delta \in \bar{\Delta}_{a,\Lambda}} \chi_-^{\Delta}(\gamma), \tag{4.71}$$

і

$$W(x;\gamma) = W_{\bar{a}}(x;\gamma) = \sum_{y \in \gamma} \phi_{\bar{a}}(|x - y|), \tag{4.72}$$

отримаємо:

$$I_\Lambda(\gamma) := \int\limits_{\Lambda} dx e^{-\beta W(x;\gamma)} \geq \int\limits_{\tilde{\Lambda}_{\bar{a}(\gamma)}} dx e^{\beta W(x;\gamma)} = \int\limits_{\tilde{\Lambda}_{\bar{a}(\gamma)}} dx e^{-\beta W_{\bar{a}}(x;\gamma)}. \tag{4.73}$$

З нерівності (4.73) далі маємо:

$$I_\Lambda(\gamma) \geq \sigma(\tilde{\Lambda}_{\bar{a}}(\gamma)) e^{\frac{-\beta}{\sigma(\tilde{\Lambda}_{\bar{a}}(\gamma))} \int\limits_{\tilde{\Lambda}_{\bar{a}}(\gamma)} W_{\bar{a}}(x;\gamma) dx}. \tag{4.74}$$

Використовуючи властивість (1.17) і означення (4.66), маємо:

$$\int\limits_{\tilde{\Lambda}_{\bar{a}}(\gamma)} W_{\bar{a}}(x;\gamma) dx \leq N \int\limits_{\mathbb{R}^d} |\phi_{\bar{a}}(|x|)| dx := N ||\phi_{\bar{a}}||_{L_1}. \tag{4.75}$$

Використовуючи останню нерівність, а також враховуючи, що

$N_{\bar{v}} \le \sigma(\Lambda)$ і умову (4.70), отримуємо нерівність (4.67), в якій

$$k = \frac{1}{2} e^{-\frac{2\beta}{\bar{v}}||\phi_{\bar{a}}||_{L_1}}. \tag{4.76}$$

Враховуючи, що

$$Z^{(a)}_{\Lambda\setminus X_k}(N-M,\beta) < Z^{(a)}_{\Lambda}(N-M,\beta),$$

маємо:

$$\frac{Z^{(a)}_{\Lambda\setminus X_k}(N-M,\beta)}{Z^{(a)}_{\Lambda}(N,\beta)} \le$$

$$\le \frac{Z^{(a)}_{\Lambda}(N-1,\beta)}{Z^{(a)}_{\Lambda}(N,\beta)} \cdots \frac{Z^{(a)}_{\Lambda}(N-M,\beta)}{Z^{(a)}_{\Lambda}(N-M+1,\beta)} \le K^M, \tag{4.77}$$

де $K = \frac{1}{k\bar{v}}$. Лему доведено. □

Продовження доведення теореми 4.2

Тепер доведення теореми 4.2 слідує з тривіальних оцінок для комбінаторних сум у виразі (4.64). Нехай для простоти $m = 2$ в умові (1.15). З умови $m_1 + \ldots + m_k = M$ легко показати що $m_1^2 + \ldots + m_k^2 \ge \frac{M^2}{k}$. Тому в результаті отримуємо:

$$Z^{(+)}_{\Lambda}(N,a,\beta) \le 1 + \sum_{k=1}^{N_\Lambda} \sum_{\{\Delta_1,\ldots,\Delta_k\}\subset\bar{\Delta}_{a,\Lambda}} (ea^{2d})^k e^{-4\beta(A(a)-\frac{1}{2}C(a))k} \times$$

$$\times \sum_{M'=0}^{\infty} a^{dM'} e^{-4\beta(A(a)-\frac{1}{2}C(a))M'} \le (1+\varepsilon(a))^{N_\Lambda}, \tag{4.78}$$

де

$$\varepsilon(a) := 2ea^{2d} e^{-4\beta(A(a)-\frac{1}{2}C(a))}. \tag{4.79}$$

Використовуючи рівності (1.21), (1.22) і (4.62), легко порахувати, що

$$\lim_{a\to 0} \frac{1}{a^d} \log(1+\varepsilon(a)) = 0, \tag{4.80}$$

що і забезпечує виконання умови теореми 4.2.

Доведено. □

4.4. Висновки до четвертого розділу

У четвертому розділі дисертації розглянуто модель коміркового газу. У підрозділі 4.1 описано конфігураційний простір, а також визначено основні термодинамічні функції модельної системи, однією з яких є вільна енергія Гельмгольца, результатів досліджень якої і стосується даний розділ. У підрозділі 4.2 сформульовано та доведено теорему про існування термодинамічної границі для вільної енергії коміркового газу, а також досліджено властивість вільної енергії як монотонної, неперервної, вгнутої функції від питомого об'єму v. У підрозділі 4.3 встановлено, що для довільних позитивних значень оберненої температури $\beta > 0$ та питомого об'єму $v > 0$ апроксимована вільна енергія коміркового газу буде прямувати до вільної енергії неперервної статистичної системи, коли параметр апроксимації a спрямувати до нуля. Отриманий результат є кроком до реалізації методу Добрушина [51], що дозволить вирішити проблему фазового переходу в континуумі.

Основні результати четвертого розділу опубліковано у роботах [45], [6].

Висновки

Основні результати дисертації можна підсумувати таким чином.

1. Методами нескінченновимірного аналізу доведено теорему про експоненціальне представлення деяких інтегралів за мірою Лебега—Пуассона. Продемонстровано зручність застосування доведеної теореми для представлення великої статистичної суми у вигляді експоненти та відповідного представлення тиску.

2. Запропоновано новий спосіб виведення рівнянь Кірквуда—Зальцбурга для кореляційних функцій рівноважних систем, а також виведення ланцюжка рівнянь ББҐКІ для кореляційних функцій з позиції нескінченновимірного пуассонівського аналізу.

3. Побудовано розклад Майєра методом Бріджеса—Федербуша для неінтегровних потенціалів взаємодії та доведено збіжність даного розкладу. Запропоновано новий спосіб виведення розкладу Майєра для зв'язних кореляційних функцій методами нескінченновимірного пуассонівського аналізу. Запропонована нова форма запису розкладів Майєра для термодинамічних потенціалів нескінченних систем статистичної механіки.

4. В рамках моделі коміркового газу сформульовано та доведено теорему про існування термодинамічної границі для вільної енергії коміркового газу, а також досліджено властивість вільної енергії як монотонної, неперервної, вгнутої функції від питомого об'єму v. Встановлено, що для довільних позитивних значень оберненої температури $\beta > 0$ та питомого об'єму $v > 0$ апроксимована вільна енергія коміркового газу буде прямувати до вільної енергії неперервної статистичної системи, коли параметр апроксимації a спрямувати до нуля.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

[1] Андреев А.Ф. Об особенности термодинамических величин в точке фазового перехода, / А.Ф. Андреев // ЖЭТФ. — 1963. — № 12(45). — С. 2064.

[2] Березин Ф. А. Существование фазового перехода у решетчатого газа с притяжением между частицами, / Ф. А. Березин, Я. Г. Синай // Труды Моск. матем. о-ва. — 1967. — №. 17. — С. 197-212.

[3] Боголюбов Н. Н. Математическое описание равновесного состояние классических систем на основе формализма канонического ансамбля / Н. Н. Боголюбов, Д. Я. Петрина, Б. И. Хацет // Теорет. и матем. физика. — 1969. — Т. 1, № 2. — С. 251–274.

[4] Боголюбов Н. Н. О некоторых математических вопросах теории статистического равновесия / Н. Н. Боголюбов, Б. И. Хацет // Докл. АН СССР. — 1949. — Т. 66, № 3. — С. 321–324.

[5] Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике / Н. Н. Боголюбов. — М.: Гостехиздат, 1946. — 119 с.

[6] Болух В. А. Апроксимація вільної енергії Гельмгольца в рамках моделі коміркового газу / В. А. Болух // Міжнародна конференція молодих математиків. 3-6 червня 2015 року. Київ, Україна. Тези доповідей. — Київ: Інститут математики НАН України. — 2015. — 192 с. — С. 134.

[7] Болух В. А. Збіжність розкладу Майєра у формі Бріджеса-Федербуша для систем з посилено надстійкою взаємодією /

В. А. Болух // Розвиток сучасної освіти і науки: результати, проблеми, перспективи: тези III-ї Міжнародної науково-практичної конференції молодих вчених (Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, 26-27 березня 2015 року) / [редактори-упорядники: В. Ільницький, А. Душний, І. Зимомря]. Дрогобич: Просвіт. — 2015 — 360 с. — С. 296-297.

[8] Болух В. А. Про представлення деяких інтегралів за мірою Лебега-Пуассона / В. А. Болух // Шістнадцята міжнародна наукова конференція ім. акад. Михайла Кравчука, 14-15 травня, 2015 р., Київ: Матеріали конф. Т. 2. Алгебра. Геометрія. Математичний аналіз. — К.: "НТУУ" КПІ, 2015. — 216 с. — Укр., англ., рос. — С. 59-60.

[9] Болух В. А. Розклад Бріджеса-Федербуша для систем з посилено надстійкою взаємодією / В. А. Болух // Актуальні проблеми математичної фізики та її застосувань / Відп. ред.: В. І. Герасименко, О. Л. Ребенко // Зб. праць Ін-ту математики НАН України . — Київ: Інститут математики НАН України. — 2014. — Т. 11, № 1. — 354 с. — С. 153-165.

[10] Вдовиченко Н.В. Вычисление статистической суммы плоской дипольной решетки, / Н.В. Вдовиченко // ЖЭТФ. — 1964. — № 8(47). — С. 715.

[11] Вдовиченко Н. В. Спонтанная намагниченность плоской дипольной решетки, / Н.В. Вдовиченко // ЖЭТФ. — 1965. — № 2(48). — С. 526.

[12] Гончар Н. С. Об уравнениях для приведенных функций распределения Н. Н. Боголюбова и их решениях при произвольных зна-

чениях плотности частиц / Н. С. Гончар // Теоретическая и математическая физика. — 1983. — Т. 57, № 1. — С. 85–96.

[13] Добрушин Р. Л. Гиббсовские поля. Общий случай / Р. Л. Добрушин // Функциональный анализ и приложения. — 1969. — Т. 3, вып. 1. — С. 27–35.

[14] Добрушин Р. Л. Гиббсовские поля для решетчатых систем с попарным взаимодействием / Р. Л. Добрушин // Функциональный анализ и приложения. — 1968. — Т. 2, вып. 4. — С. 31–43.

[15] Добрушин Р. Л. Задание системы случайных величин при помощи условных распределений / Р. Л. Добрушин // Теория вероятностей и ее применения. — 1970. — Т. 15, вып. 3. — С. 469–497.

[16] Добрушин Р. Л. Задачи единственности гиббсовского случайного поля и проблема фазовых переходов / Р. Л. Добрушин // Функциональный анализ и приложения. — 1968. — Т. 2, вып. 4. — С. 44–57.

[17] Добрушин Р. Л. Исследование условий асимптотического существования конфигурационного интеграла Гиббса / Р. Л. Добрушин // Теоретическая и математическая физика. — 1964. — Т. 9, вып. 4. — С. 626–643.

[18] Добрушин Р. Л. Описание случайного поля при помощи условных вероятностей и условия его регулярности / Р. Л. Добрушин // Теоретическая и математическая физика. — 1968. — Т. 13, вып. 2.— С. 201–229.

[19] Добрушин Р. Л. Существование и непрерывность давления в классической статистической физике / Р. Л. Добрушин, Р. А. Минлос // Теория вероятностей и ее применения. — 1967. — Т. 12, вып. 4. — С. 595–618.

[20] Добрушин Р. Л. Существование фазового перехода в двумерной и трехмерной моделях Изинга / Р. Л. Добрушин // Теория вероятностей и ее применения. — 1965. — Т. 10, вып. 2. — С. 209–230.

[21] Маркушевич А. И. Теория аналитических функций. Том 1: Начала теории./ А. И. Маркушевич // Изд. 2-е. М.: Наука. — 1967. – 486 с.

[22] Минлос Р. А. Лекции по статистической физике / Р. А. Минлос // Успехи математических наук. — 1968. — Т. 23, № 1. — С. 133–190.

[23] Минлос Р.А. Новые результаты о фазовых переходах 1-го рода в моделях решетчатого газа, / Р.А. Минлос, Я.Г. Синай // Труды Моск. матем. о-ва. — 1967. — № 17. — С. 213-242.

[24] Минлос Р. А. Предельное распределение Гиббса / Р. А. Минлос // Функциональный анализ и приложения. — 1967. — Т.1, вып. 2. — С. 60–73.

[25] Минлос Р. А. Регулярность предельного распределения Гиббса / Р. А. Минлос // Функциональный анализ и приложения. — 1967. — Т. 1, вып. 3. — С. 40–53.

[26] Минлос Р.А. Явление разделения фаз в некоторых решетчастых моделях газа, / Р.А. Минлос, Я.Г. Синай // 1. Матем. сб. — 1967. — № 73(115). — С. 375-448.

[27] Минлос Р.А. Явление разделения фаз , / Р.А. Минлос, Я.Г. Синай // ДАН. — 1967. — № 175(2) — С. 323-326.

[28] Пастур Л. А. Спектральная теория уравнений Кирквуда-Зальцбурга в конечном объёме / Л. А. Пастур // Теорет. и мат. физика. — 1974. — 18, N 2. — С. 233–242.

[29] Петренко С. М. Квазінеперервна апроксимація статистичних систем з багаточастинковою взаємодією / С. М. Петренко // Науковий вісник НЛТУ України. Збірник науково-технічних праць. — 2008. — Т. 18.9. — С. 287–296.

[30] Петренко С. М. Про квазінеперервну апроксимацію в класичній статистичній механіці / С. М. Петренко, О. Л. Ребенко, М. В. Тертичний // Укр. мат. журн. — 2011. — Т. 63, № 3. — С. 369–384.

[31] Петрина Д. Я. Математические основы квантовой статистической механики. Непрерывные системы / Д. Я. Петрина // К. Институт математики АН Украины. — 1995. — 623 с.

[32] Петрина Д. Я. Математические основы классической статистической механики / Д. Я. Петрина, В. И. Герасименко, П. В. Малышев. — К.: Наукова думка, 1985. — 262 с.

[33] Петрина Д. Я. Математические основы классической статистической механики: Непрерывные системы / Д. Я. Петрина, Изд. 2-е. — М.: Либроком, 2014. — 624 с.

[34] Престон К. Гиббсовские состояния на счетных множествах / К. Престон. — М.:Мир, 1977. — 126 с.

[35] Ребенко О. Л. Нескінченновимірний аналіз і статистична механіка / О. Л. Ребенко, В. А. Болух // Актуальні проблеми математичної фізики та її застосувань / Відп. ред.: В. І. Герасименко, О. Л. Ребенко // Зб. праць Ін-ту математики НАН України . — Київ: Інститут математики НАН України. — 2014. — Т. 11, № 1. — 354 с. — С. 257-315.

[36] Ребенко О. Л. Про нову форму запису розкладів Майєра / О. Л. Ребенко, В. А. Болух // Доповіді Національної академії

наук України. — 2015. — № 11. — P. 18-22.

[37] Рюэль Д. Статистическая механика. Строгие результаты / Д. Рюэль; пер. с англ. И. Д. Новикова и В. М. Герцика. — М.: Мир, 1971. — 368 с.

[38] Синай Я. Г. Теория фазовых переходов. Строгие результаты / Я. Г. Синай. — М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1980. — 207 с.

[39] Хацет Б. І. Асимптотичні розклади за степенями густини функції розподілу систем в стані статистичної рівноваги / Б. І. Хацет // Наукові записки Житомирського педагогічного інституту, фіз.-мат. серія. — 1956. — № 3. — P. 103–139.

[40] Хинчин А. Я. Математические основания статистической механики / А. Я. Хинчин // М. – Л.: Гостехиздат. — 1943.

[41] Albeverio S. Analysis and geometry on configuration spaces / S. Albeverio, Yu. G. Kondratiev, M. Röckner // J. Funct. Anal. — 1998. — Vol. 154, № 2. — P. 444–500.

[42] Albeverio S. Analysis and geometry on configuration spaces: The Gibbsian case / S. Albeverio, Yu. G. Kondratiev, M. Röckner // J. Funct. Anal. — 1998. — Vol. 157, № 1. — P. 242–291.

[43] Belitsky V. Uniqueness of Gibbs state for nonideal gas in $\mathbb{R}^d$. The case of multibody interactions / V. Belitsky, E. A. Pechersky // J. Stat. Phys. — 2002. — Vol. 106, № 5/6. — P. 931–955.

[44] Boluh V. A. An exponential Representation for Some Integrals with Respect to Lebesgue-Poisson Measure / V. A. Boluh, O. L. Rebenko // Methods of Functional Analisys and Topology. — 2014. — Vol. 20 — № 2. — P. 186-192.

[45] Boluh V. A. Cell gas free energy as an approximation of the continuous model / V. A. Boluh, O. L. Rebenko // J. Modern Phys. — 2015. — Vol. 5. — P. 168-175.

[46] Born M. A general kinetic theory of liquids / M. Born, H. S. Green // Proc. Roy. Soc. London A. — 1947. — Vol. 188. — P. 168–201.

[47] Bricmont J. The structure of Gibbs states and coexistence for non-symmetric continuum Widom-Rowlinson models / J. Bricmont, K. Kuroda, J. L. Lebowitz // Z. Wahrscheinlichkeitstheorie Verw. Geb. — 1984. — Vol. 67. — P. 121-138.

[48] Brydges D. C. A new form of the Mayer expansion in classical statistical mechanics. / D. C. Brydges, P. Federbush // J. Math. Phys. — 1978. — Vol. 19. — №10. — P. 2064-2067.

[49] Campbell N. R. Discontinuities in light emission. — Proc. Cambridge Phil. Soc., 1909. — № 15. — p. 310-328

[50] Campbell N. R. The study of discontinuous problem. Proc. Cambridge Phil. Soc., 1909. — № 15. — p. 117-136

[51] Dobrushin R. L. Existence of phase transitions in models of a lattice gas. / R. L. Dobrushin// Proc. Fifth Berkeley Sympos. Math. Statist. and Prob. Univ. of Calif. Press. — 1966. — Vol. 3. — P. 73-87.

[52] Duneau M. Decrease Properties of Truncated Correlation Functions and Analicity Properties for Classical Lattices And Continuous Systems. / M. Duneau, D. Iagolnitzer, B. Souillard // Commun. math. Phys. — 1973. — Vol. 31. — P. 191-208.

[53] Finkelshtein D. L. On convolutions on configuration spaces. II. Spaces of finite configurations. / D. L. Finkelshtein // Ukrain. Math. Zh., — 2012. — Vol. 12(64) — P. 1699-1719 (Ukrainian); // English transl. Ukrainian Math J. — 2013. — Vol. 12(64) — P. 1919-1944.

[54] Fowler R.H. Statistical mechanics. The theory of the properties of matter in equilibrium / R. H. Fowler // Cambridge: Univ. Press. — 1929.

[55] Genibre F. Condensation of lattice gases, / F. Genibre, A. Grosmann, D. Ruelle // Compt. Math. Phys. — 1966. — Vol. 3. — P. 187-193.

[56] Georgii H. O. Canonical and grand canonical Gibbs states for continuum systems / H. O. Georgii // Commun. Math. Phys. — 1976. — Vol. 48. — P. 31–51.

[57] Georgii H. O. Canonical Gibbs measure / H. O. Georgii // Lecture Notes in Math. Phys. — 1979. — Vol. 760, Springer Verlag. — 190 p.

[58] Georgii H. O. Gibbs measures and Phase Transitions / H. O. Georgii. — Walter de Gruyter, 1988. — 525 p.

[59] Georgii H. O. Large devations and the maximum entropy principle for marked point Random fields / H. O. Georgii, H. Zessin // Probab. Theor. Relat. Fields. — 1993. — Vol. 96. — P. 177–204.

[60] Georgii H. O. On the interplay of magnetics and molecular forces in Curie-Weiss ferrofluid models / H. O. Georgii, V. A. Zagrebnov // J. Stat. Phys. — 1998. — Vol. 93 № 1/2. — P. 79–107.

[61] Georgii H. O. Phase Transition in Continuum Potts Models / H. O. Georgii, O. Höggström // Commun. Math. Phys. — 1996. — Vol. 181. — P. 507–528.

[62] Gibbs W. Elementary principles in statistical mechanics / W. Gibbs // Yale Univ. Press. — 1902.

[63] Gielerak R. Poisson Field Representation in the Statistical Mechanics of Continuous Systems / R. Gielerak, A. L. Rebenko // Operator

Theory: Advances and Applications — 1994. — Vol. 70. — P. 219–226.

[64] Gielerak R. Poisson Integrals Representation in the Classical Statistical Mechanics of Continuous Systems / R. Gielerak, A. L. Rebenko // J. Math. Phys. — 1996. — Vol. 37, № 7. — P. 3354–3374.

[65] Gonchar N. S. Correlation functions of some continuous model systems and description of phase transitions / N. S. Gonchar // Physics Reports. — 1989. — Vol. 172, № 5. — P. 175–337.

[66] Griffiths R. Peierls proof of spontaneous magnetisation in two-dimansional Ising termomagnetism, / R. Griffiths // Phys. Rev. — 1964. — Vol. 136. — P. 437.

[67] Gruber C. Berezinskii-Kosterlitz-Thouless Order in Two-Dimensional $O(2)$-Ferrofluid / C. Gruber, H. Tamura, V. A. Zagrebnov // J. Stat. Phys. — 2002. — Vol. 106. — P. 875-893.

[68] Ito Y. Calculus on Gaussian and Poisson white noises. / Y. Ito, I. Kubo // Nagoya Math. Jour., — 1988. — Vol. 111. — P. 41-84.

[69] Ito Y. Generalized Poisson functionals / Y. Ito // Math. Rep. Toyoma Univ. — 1980. — Vol. 3. — P. 111–122.

[70] Ito Y. On a generalization of non-linear Poisson functionals. / Y. Ito // Probab. Theor. and Related Fields. — 1988. — Vol. 77. — P. 1-28.

[71] S. Jansen, W. König, Ideal mixture approximation of cluster size distributions at low density, arXiv:1112.4725v1 [math-ph], preprint, 2011.

[72] Kac M. On the Partition Function of a One-Dimensional Gas / M. Kac // Phys. Fluids. — 1959. — Vol. 2 — P. 8–12.

[73] Kac M. On the Van der Waals theory / M. Kac, G. E. Unlenbeck, P. C. Hemmer // Journ. of Math. Phys., I — 1963. — Vol. 4(2) — P.216-228; II — 1963. — Vol. 4(2) — P. 229-247; III — 1964. — Vol. 5(1). — P. 60-70.

[74] Kac M. Study of several lattice system with long-range forces, / M. Kac, E. Helfand // Journ. of Math. Phys. — 1963. — Vol. 4(8). — P. 1078-1085.

[75] Kirkwood J. G. The statistical mechanical theory of thansport processes / J. G. Rirkwood // J. Chem. Phys. — 1946. — Vol. 14. — P. 180.

[76] Kirkwood J. G. The statistical mechanical theory of thansport processes / J. G. Rirkwood // J. Chem. Phys. — 1947. — Vol. 15. — P. 72.

[77] Kondratiev Yu. G. Analysis on Poisson and Gamma spaces / Yu. G. Kondratiev, J. L. Silva, G. F. Us // Infin. Dimens. Anal. Quantum. Probal. Relat. Top. — 1998. — Vol. 1, № 1. — P. 91–117.

[78] Kondratiev Yu. G. On the metrical properties of the configuration space / Yu. G. Kondratiev, O. V. Kutoviy // Math. Nachr. — 2006. — Vol. 279, № 7. — P. 774–783.

[79] Kondratiev Yu. G. On the relations between Poissonian white noise analysis and harmonic analysis on configuration spaces. / Yu. G. Kondratiev, T. Kuna, M. A. Oliviera // Funct. Anal. — 2004. — Vol. 213, №1. — P. 1-30.

[80] Kondratiev Yu. G. Harmonic analysis on configuration spaces. I. General theory / Yu. G. Kondratiev, T. Kuna // Infin. Dimens. Anal. Quantum. Probal. Relat. Top. — 2002. — Vol. 5, № 2. — P. 201–233.

[81] Kuna T. Studies in configuration space analysis and application. / T. Kuna // Dissertation. — 1999. — Minden (Westfalen), Bonn.

[82] Kutoviy O. V. Existence of Gibbs state for continuous gas with many-body interection / O. V. Kutoviy, A. L. Rebenko // J. Math. Phys. — 2004. — Vol. 45, № 4. — P. 1593–1605.

[83] Lenard A. Correlation Functions and the Uniqueness of the State in Classical Statistical Mechanics / A. Lenard // Commun. math. Phys. — 1973. — Vol. 30, № 1. — P. 35–44.

[84] Lanford O. E. Observables at infinity and states with short range correlations in statistical mechanics / O. E. Lanford, D. Ruelle // Commun. Math. Physics. — 1969. — Vol. 13, № 3. — P. 194–215.

[85] Lebowitz J.L. Liquid-Vapor Phase Transition for Systems with the Finite-Range Interactions / J. L. Lebowitz, A. Mazel, E. Presutti // J. Stat. Phys. — 1999. — Vol. 94, № 5/6. — P. 955-1025.

[86] Lebowitz J. L. Phase transition in continuous classical system / J. L. Lebowitz, E. H. Lieb // Phys. Lett. — 1975. — Vol. 39A. — P. 98–100.

[87] Lebowitz J. L. Rigorous treatment of the Van der Waals — Maxwell theory of the liquid vapor transition / J. L. Lebowitz, O. Penrose // Journ. of Math. Phys. — 1966. —Vol. 7. — P. 98.

[88] Mecke J. Fine charakteristische Eigenschaft der doppelt stochastischen Poissonschen Prozesse. — Z. Wahrscheinlichkeitstheor. und verw. Geb. — 1968. — № 11. — P. 74-81

[89] Lenard A. States of classical statistical mechanical systems of infinitely many particles. I / A. Lenard // Arch. Rational Mech. Anal. — 1975. — Vol. 59, № 3. — P. 219–239.

[90] Lenard A. States of classical statistical mechanical systems of infinitely many particles. II / A. Lenard // Arch. Rational Mech. Anal. — 1975. — Vol. 59, № 3. — P. 241–256.

[91] Minlos R. A. Estimated of Ursell functions, group functions, and their derivatives / R. A. Minlos, S. K. Pogosjan // Teoret. Mat. Fiz. — 1977. — Vol. 2(31). — P. 199-213. (Russian); English tansl. Theoret. Math. Phys. —1977. — Vol. 2(31). — P. 408-418.

[92] Nguyen X. X. Canonical and grand canonical Gibbs states for continuum systems. / X. X. Nguyen, H. Zessin // Math. Nachr. — 1979. — Vol. 88. — P. 105-115.

[93] Paierls R. E. On model Ising's ferromagnetic / R. E. Paierls // Proc. Camb. Phil. Soc. — 1936. — Vol. 3.2. — P. 477.

[94] Park Y. M. Bounds on Exponentials of Local Number Operators in Quantum Statistical Mechanics / Y. M. Park // Commun. Math. Phys. — 1984. — Vol. 94, № 1. — P. 1–33.

[95] Parthasarathy K. R. Probability Measure on Metric Spaces. Probability and Mathematical Statistics / K. R. Parthasarathy. — Academic Press, New York and London, 1969. — 276 p.

[96] Petrenko S. N. Superstable criterion and superstable bounds for infinite range interaction I: two-body potentials / S. N. Petrenko, A. L. Rebenko // Meth. Funct. Anal. and Topology. — 2007. — Vol. 13, № 1. — P. 50–61.

[97] Petrenko S. N. Superstable criterion and superstable bounds for infinite range interaction II: many-body potentials / S. N. Petrenko, A. L. Rebenko // Збірник праць Інституту математики НАН України. — 2009. — Т. 6, № 1. — С. 191–208.

[98] Petrenko S. N. Uniqueness of Gibbs state / S. N. Petrenko // Збірник праць Інституту математики НАН України. — 2007. — Т. 4, № 3. — С. 148–159.

[99] Petrina D. Ya. Mathematical foundation of classical statistical mechanics. Continuous Systems / D. Ya. Petrina, V. I. Gerasimenko, P. V. Malishev. — Gordon and Breach Science, N.Y. — London — Paris, 1989. — 281 p.

[100] E.Presutti, *Phase Transition in the continuum*, Lectures at IHP, June-July 1998.

[101] Presutti E., Scaling Limits in Statistical Mechanics and Mechanics and Microstructures in Continuum Mechanics, Theoretical and Mathematical Physics ISSN 1864–5879, Springer Berlin–Heidelberg, 2009.

[102] Procacci A. The Gas Phase of Continuous Systems of Hard Spheres Interacting via n-Body Potential / A. Procacci, B. Scoppola // Comm. Math. Phys. — 2000. — Vol. 211, № 4. — P. 487–496.

[103] Rebenko O. L. Cell gas model of classical statistical systems / O. L. Rebenko // Rewiew in Math. Phys. — 2012. — Vol. 25, N 4. — (13330006) — 28 p.

[104] Rebenko A. L. Cluster expansions and uniqueness of Gibbs state. Many-body case / A. L. Rebenko, S. N. Petrenko // Modern Analysis and Aplications: міжнародна конф. 9-14 квіт. 2007р.: тези доп. — Одеса, 2007. — С. 120.

[105] Rebenko O. L. Euclidean Gibbs states for quantum continuous systems via cluster expansion. II. Bose and Fermi statistics / O. L. Rebenko // Methods of Functional Analysys and Topology. — 1999. — Vol. 5, N 2. — P. 86–100.

[106] Rebenko A. L. New Proof of Ruelle's Superstability Bounds / A. L. Rebenko // J. Stat. Phys. — 1998. — Vol. 91, № 3/4. — P. 815–826.

[107] Rebenko A. L. On stability, superstability and strong superstability of classical systems of Statistical Mechanics // A. L. Rebenko, M. V. Tertychnyi // Meth. Funct. Anal. and Topology. — 2008. — Vol. 14, № 3. — P. 287–296.

[108] Rebenko A. L. Poisson Analysys and Statistical Mechanics / A. L. Rebenko // Condensed Matter Physics. — 1996. — № 8. — P. 119–127.

[109] Rebenko A. L. Poisson Measure Representations and Cluster Expansion in Classical Statistical Mechanics / A. L. Rebenko // Commun. Math. Phys. — 1993. — Vol. 151, № 4. — P. 427–435.

[110] Rebenko A. L. Polymer expansions for continuous classical systems with many-body interaction / A. L. Rebenko // Methods of Functional Analysys and Topology. — 2005. — Vol. 11, № 1. — P. 73–87.

[111] Rebenko A. L. Quasi-continuous approximation of statistical systems with strong superstable interactions / A. L. Rebenko, M. V. Tertychnyi // Збірник праць Інституту математики НАН України. — 2007. — Т. 4, № 3. — С. 172–182.

[112] Rebenko A. L. Quasi-lattice approximation of statistical systems with strong superstable interactions. Correlation functions / A. L. Rebenko, M. V. Tertychnyi // Jour. Math. Phys. — 2009. — Vol. 50, № 3. — P. 1–16.

[113] Rebenko A. L. Superstability criterion for many-body interaction and Gibbs measure on the configuration space / A. L. Rebenko, S. N. Petrenko // Modern problems and new trands in probability

theory: міжнародна конф. 19-26 лип. 2005р.: тези доп. — Чернівці, 2005. — С. 81.

[114] Rebenko A. L. The Convergence of Cluster Expansions for Continuous Systems with Many-Body Interactions / A. L. Rebenko, G. V. Shchepan'uk // J. Stat. Phys. — 1997. — Vol. 88, № 3/4. — P. 665–689.

[115] Romano S. V. Oriantational ordering in a continuous-spin ferrofluid / S. V. Romano, V. A. Zagrebnov // Physica A. — 1998. — Vol. 253. — P. 483-497.

[116] Ruelle D. Classical statistical mechanics of a system of particles / D. Ruelle // Helv. Phys. Acta. — 1963. — Vol. 36, № 2. — P. 183–197.

[117] Ruelle D. Cluster property of the correlation functions of classical gases, / D. Ruelle // Rev. Mod. Phys. — 1964. — Vol. 36. — P. 580-584.

[118] Ruelle D. Existence of a Phase Transition in a Continuous Classical System / D. Ruelle // Phys. Rev. Lett. — 1971. — Vol. 27, № 16. — P. 1040-1041.

[119] Ruelle D. States of classical statistical mechanics / D. Ruelle // J. Math. Phys. — 1967. — Vol. 8, № 6. — P. 1657–1668.

[120] Ruelle D. Superstable interactions in classical statistical mechanics / D. Ruelle // Commun. Math. Phys. — 1970. — Vol. 18, № 2. — P. 127–159.

[121] Van Hove L. Quelques proprietes generales de l'integrale de configuration d'un systeme de particules avec interaction / L. Van Hove // Physica. — 1949. — Vol. 15, № 5. — P. 951–961.

[122] Van Kampen N. G. Condensation of a classical gas with long-range attraction, / N. G. Van Kampen // Phys. Rev. — 1964. —Vol. 135A. — P. 362.

[123] Widom B. New model of the study of liquid-vapor phase transition / B. Widom, J. S. Rowlinson // J. Chem. Phys. — 1970. — Vol. 52. — P. 1670-1684.

[124] Widom B. New model for the study of liquid-vapor phase transition / B. Widom, J. S. Rowlinson // J. Chem. Phys. — 1970. — Vol. 52. — P. 1670–1684.

[125] Yang C. N. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions I, Theory of Condensation / C. N. Yang, T. D. Lee // Phys. Rev. — 1952. — Vol. 7. — P. 404–409.

[126] Yu. G. Euclidean Gibbs states for quantum continuous systems with Boltzmann statistics viaclaster expansion / G. Yu, E. W. Lytvynow, A. L. Rebenko, M. Röckner, G. V. Shchepan'uk // Methods of Functional Analysys and Topology. — 1997. — Vol. 3, N 1. — P. 62–81.

[127] Yvon J. La theorie, statistique des fluids et l'equetion d'etat / J. Yvon // Paris: Hermann. — 1935. — 270 p.

[128] Zagrebnov V. A. Spectral properties of Kirkwood-Salsburg and Kirkwood-Ruelle operators / V. A. Zagrebnov // J. Stat. Phys. — 1982. — Vol. 27, N 3. — P. 577–591.