Math-Net.Ru
Общероссийский математический портал

Д. Рюэль, Классическая статистическая механика системы многих частиц,
Математика, 1966, том 10, выпуск 4, 146–160

https://www.mathnet.ru/mat405

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

Параметры загрузки:
IP: 18.97.14.87
17 января 2026 г., 04:40:28

КЛАССИЧЕСКАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА СИСТЕМЫ МНОГИХ ЧАСТИЦ [1])

Д. Рюелль

Введение

Рассмотрим классическую систему, состоящую из n частиц, заключенных в области Λ и попарно взаимодействующих с помощью сферически симметричного потенциала. Статистическая механика дает выражение свободной энергии F системы при температуре T (канонический ансамбль) [2]).

Для того чтобы отождествить F с термодинамической свободной энергией, следует рассмотреть предел F/n, когда n и объем области Λ стремятся к бесконечности так, что удельный объем имеет конечный предел. Проблема существования и свойства предела F/n были исследованы Ван Ховом [4], а для большого канонического ансамбля — Ли и Янгом [6]. Однако эти два исследования ограничиваются случаем потенциалов с твердой сердцевиной. В самом деле, ясно, что система классических частиц, взаимодействующих попарно, не при всяком потенциале приводит в пределе к определению обычных термодинамических функций [3]).

В связи с этим мы приведем как можно менее ограничительные достаточные условия, которым должен удовлетворить потенциал, чтобы система вела себя в пределе как термодинамическая система.

Затем докажем существование и свойства устойчивости термодинамических потенциалов для канонического и большого канонического ансамблей. Мы всегда будем предполагать, что Λ является кубом, но рассуждения без труда обобщаются и на другие области.

Аналитические свойства термодинамических функций детально изучены в настоящее время только для одномерных систем (ван Хов [5]). Поэтому мы также доказываем для ограниченных потенциалов непрерывность давления как функции удельного объема при постоянной температуре.

---

[1]) Ruelle D., Classical statistical mechanics of a system of particles, *Helvetica physica acta*, **36**, № 2 (1963), 183—197.

[2]) Свободной энергией системы из n частиц с функцией Гамильтона $E = E(p, x)$ называется выражение $-\frac{1}{\beta}\ln\frac{1}{n!}\int e^{-\beta E}dp\,dx$. — *Прим. ред.*

[3]) Эта трудность возникает, когда потенциал недостаточно быстро убывает на бесконечности или когда является недостаточно отталкивающим. Предположим, например, что потенциал непрерывен и что существуют точки $\mathbf{x}_i$, $i = 1, \ldots, n$, такие, что $\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\Phi(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) < 0$. Легко видеть, что наименьшая энергия системы N частиц становится отрицательной и возрастает пропорционально квадрату N. Определение обычных термодинамических функций становится теперь невозможным.

1. Условия, налагаемые на потенциал

Рассмотрим систему n одинаковых классических частиц, каждая из которых имеет только 3 степени свободы (сдвиг) и взаимодействующих попарно. Полная энергия системы имеет вид

$$E_n(p, x) = T_n(p) + U_n(x), \tag{1}$$

$$T_n(p) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}, \tag{2}$$

$$U_n(x) = \sum_{i<j} \Phi(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i), \tag{3}$$

где $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$ — координаты частиц и $\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_n$ — соответствующие моменты.

Мы ограничим наше рассмотрение только теми потенциалами, которые обладают следующими двумя свойствами.

Свойство А. *Запишем*

$$\Phi(\mathbf{x}) = \Phi_1(\mathbf{x}) + \Phi_2(\mathbf{x}), \tag{4}$$

где $\Phi_1(\mathbf{x})$ *и* $\Phi(\mathbf{x})$ *зависят только от* $|\mathbf{x}|$ *и*

A_1. $\Phi_1(\mathbf{x})$ *является измеримой по Лебегу функцией со значениями в замкнутом интервале* $[0, +\infty]$. (Было бы достаточно предположить, что $\Phi_1(\mathbf{x})$ неотрицательна *почти везде.*) *Множество* $\{\mathbf{x}\colon \Phi_1(\mathbf{x}) = +\infty\}$ *является сферой радиуса* $a \geqslant 0$ *с центром в начале координат. Существует число* $R > 0$, *такое, что* $\Phi_1(\mathbf{x})$ *интегрируема по Лебегу для* $|\mathbf{x}| \geqslant R$.

A_2. $\Phi_2(\mathbf{x})$ *непрерывна и интегрируема по Лебегу. Если записать*

$$\Phi_2(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} \int d\,\mathbf{p}\, e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} \hat{\Phi}_2(\mathbf{p}), \tag{5}$$

то $\hat{\Phi}_2(\mathbf{p})$ *неотрицательна, причем* $\hat{\Phi}_2(0) > 0$.

Таким образом, $\Phi_2(\mathbf{x})$ есть непрерывная положительно определенная функция и, следовательно, ограничена. $\hat{\Phi}_2(\mathbf{p})$ непрерывна и интегрируема по Лебегу.

Пусть теперь Λ — замкнутый куб объема $V = \lambda^3$. Пусть $\mathfrak{M}_+(A)$ есть семейство всех положительных мер, носитель которых содержится в Λ.

Если $n(\mathbf{x})\,dx \in \mathfrak{M}_+(A)$, мы можем написать

$$n(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} \int d\,\mathbf{p}\, e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} \hat{n}(\mathbf{p}), \tag{6}$$

где $\hat{n}(\mathbf{p})^* = \hat{n}(-\mathbf{p})$ и по теореме Пэли и Винера [3] $\hat{n}(\mathbf{p})$ является целой аналитической функцией.

Имеем

$$\int d\mathbf{y} \cdot n(\mathbf{y})\, n(\mathbf{x} + \mathbf{y}) = \int d\,\mathbf{p} \cdot e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} \hat{n}(\mathbf{p}) \hat{n}(-\mathbf{p}), \tag{7}$$

$$\int d\mathbf{x}\, d\mathbf{y}\, \Phi_2(\mathbf{y} - \mathbf{x})\, n(\mathbf{x})\, n(\mathbf{y}) = (2\pi)^{3/2} \int d\mathbf{p}\, \hat{\Phi}_2(\mathbf{p})\, \hat{n}(\mathbf{p})\, \hat{n}(-\mathbf{p}). \tag{8}$$

Если $\mathbf{u}$ — произвольный единичный вектор, то функция $\hat{n}(p\mathbf{u})\,\hat{n}(-p\mathbf{u})$ является целой аналитической функцией, неотрицательной для дей-

ствительных чисел p. Если разложить ее в степенной ряд в окрестности начала и оценить каждый член, мы получим

$$\left.\begin{aligned}\hat{n}(p\mathbf{u})\,\hat{n}(-p\mathbf{u}) &\geqslant (2\pi)^{-3}\left(\int d\mathbf{x}\, n(\mathbf{x})\right)^2\left\{1-\left[\frac{(\sqrt{3}\lambda)^2}{2!}p^2+\right.\right.\\ &\left.\left.+\frac{(\sqrt{3}\lambda)^6}{6!}p^6+\ldots\right]\right\}=\\ &=(2\pi)^{-3}\left(\int d\mathbf{x}\cdot n(\mathbf{x})\right)^2\left(1-\frac{\operatorname{ch}\sqrt{3}\lambda p-\cos\sqrt{3}\lambda p}{2}\right).\end{aligned}\right\}\quad(9)$$

Непрерывная неотрицательная функция

$$f(\mathbf{p})=\max(0,1-(\operatorname{ch}\sqrt{3}\lambda p-\cos\sqrt{3}\lambda p)/2)$$

удовлетворяет условию $f(0)=1$ и

$$\left(\int d\mathbf{x}\, n(\mathbf{x})\right)^2\geqslant(2\pi)^3\,\hat{n}(\mathbf{p})\,\hat{n}(-\mathbf{p})\geqslant\left(\int d\mathbf{x}\, n(\mathbf{x})\right)^2 f(\lambda\mathbf{p}).\qquad(10)$$

Из формул (8) и (10) мы получаем

$$\int d\mathbf{x}\,d\mathbf{y}\,\Phi_2(\mathbf{y}-\mathbf{x})\,n(\mathbf{x})\,n(\mathbf{y})\geqslant(2\pi)^{-3/2}\left(\int d\mathbf{x}\, n(\mathbf{x})\right)^2\int d\mathbf{p}\,\hat{\Phi}_2(\mathbf{p})\,f(\lambda p),\qquad(11)$$

и существуют такие положительные константы $\mathbf{A}$ и λ_0, что для $\lambda>\lambda_0$ выполняется

$$(2\pi)^{-3/2}\int d\mathbf{p}\,\hat{\Phi}_2(\mathbf{p})\,f(\lambda\mathbf{p})>\frac{A}{V},\qquad(12)$$

$$\int d\mathbf{x}\,d\mathbf{y}\,\Phi_2(\mathbf{y}-\mathbf{x})\,n(\mathbf{x})\,n(\mathbf{y})>\left(\int d\mathbf{x}\, n(\mathbf{x})\right)^2\frac{A}{V}.\qquad(13)$$

Пусть теперь $x=(\mathbf{x}_1,\ldots,\mathbf{x}_n)$, $\mathbf{x}_i\in\Lambda$ для $i=1,\ldots,n$. Для потенциальной энергии $U_n(x)$ мы получаем неравенство

$$\left.\begin{aligned}U_n(x)&=\sum_{i<j}\Phi(\mathbf{x}_j-\mathbf{x}_i)\geqslant\sum_{i<j}\Phi_2(\mathbf{x}_j-\mathbf{x}_i)=\\ &=\left[\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\Phi_2(\mathbf{x}_j-\mathbf{x}_i)-n\Phi_2(0)\right]=\\ &=\frac{1}{2}\left[\int d\mathbf{x}\,d\mathbf{y}\,\Phi_2(\mathbf{y}-\mathbf{x})\,n(\mathbf{x})\,n(\mathbf{y})-nB\right],\end{aligned}\right\}\quad(14)$$

где мы обозначили

$$\Phi_2(0)=B>0,\quad n(\mathbf{x})=\sum_{i=1}^{n}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i).\qquad(15)$$

Из (13) и (14) получаем

$$U_n(x)>\frac{n}{2}\left(A\frac{n}{V}-B\right)\text{ для }\lambda>\lambda_0.\qquad(16)$$

В следующем параграфе мы будем опираться главным образом на неравенство (16) и также на еще одно требование, налагаемое на потенциал $\Phi(\mathbf{x})$, которое сформулируем следующим образом.

Свойство B. *Существует число $R>0$, такое, что для $|\mathbf{x}|\geqslant R$ выполняется неравенство $\Phi(\mathbf{x})\leqslant 0$.*

Это условие подчеркивает свойство интегрируемости Φ_1, упомянутое в A_1. По-видимому, свойство B несущественно для доказательства полученных ниже результатов, и достаточно одного свой-

ства А. Во всяком случае, существует много интересных потенциалов, которые обладают обоими свойствами А и В. Некоторые из них указаны в приложении.

2. Существование свободной энергии на одну частицу

Рассмотрим систему n частиц, заключенных в куб Λ со стороной λ и объемом λ^3, и пусть β — положительное число.

Определим функции f и φ следующими формулами:

$$e^{-n\beta f(\beta;\Lambda,n)} = (2\pi)^{3n}\frac{1}{n!}\int\limits_{1} d\mathbf{p}_1, \ldots, d\mathbf{p}_n \int\limits_{(\Lambda)^n} d\mathbf{x}_1, \ldots, dx_n e^{-\beta E_n(p,\mathbf{x})}, \tag{1}$$

$$e^{-n\beta\varphi(\beta;\Lambda,n)} = Q(\beta;\Lambda,n) = \frac{1}{n!}\int\limits_{(\Lambda)^n} d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2, \ldots, dx_n e^{-\beta U_n(\mathbf{x})}. \tag{2}$$

Мы имеем, таким образом,

$$f = \frac{3}{2\beta}\log\frac{2\pi\beta}{m} + \varphi. \tag{3}$$

Для $\lambda > \lambda_0$, согласно (1.16), имеем

$$Q(\beta;\Lambda,n) < \frac{V^n}{n!}e^{-n\beta\left[1/2\left(A\frac{n}{V}-B\right)\right]}. \tag{4}$$

$$\varphi(\beta;\Lambda,n) > \frac{1}{2}\left(A\frac{n}{V}-B\right) - \frac{1}{\beta}\left(\log\frac{V}{n}+1\right). \tag{5}$$

Пусть теперь Λ_m^λ будет куб со стороной $2^m\lambda - R$, m — неотрицательное число. Мы предположим, что $\lambda - R > \lambda_0$ и $\lambda - R > \left(\frac{n}{\sqrt{2}}\right)^{1/3} a$, чтобы получить плотность, меньшую, чем плотность наиплотнейшей упаковки.

Полагаем

$$Q_m^\lambda = Q(\beta;\Lambda_m^\lambda, 2^{3m}n), \quad \varphi_m^\lambda = \varphi(\beta,\Lambda_m^\lambda, 2^{3m}n). \tag{6}$$

Можно поместить восемь кубов Λ_m^λ внутри куба Λ_{m+1}^λ таким образом, что расстояние между любыми двумя кубами Λ_m^λ было не меньше R. Применяя свойство В, из этого заключаем, что

$$Q_{m+1}^\lambda > (Q_m^\lambda)^8, \quad \varphi_{m+1}^\lambda < \varphi_m^\lambda. \tag{7}$$

Последовательность $(\varphi_m^\lambda)_{0<m<\infty}$, как следует из формулы (7), убывает и остается ограниченной [формула (5)]. Следовательно, существует конечный предел φ^λ, причем

$$\varphi^\lambda \geqslant \frac{1}{2}\left(A\frac{n}{V}-B\right) - \frac{1}{\beta}\left(\log\frac{V}{n}+1\right). \tag{8}$$

Если $\lambda < \lambda'$, то $Q_m^\lambda < Q_m^{\lambda'}$ и

$$\varphi^\lambda \geqslant \varphi^{\lambda'}. \tag{9}$$

Это соотношение показывает, что φ^λ является убывающей функцией от λ.

Пусть $\lambda_1 = (\lambda + \lambda')/2$. Тогда можно поместить семь кубов Λ_m^λ и один куб $\Lambda_m^{\lambda'}$ внутри $\Lambda_{m+1}^{\lambda_1}$ таким образом, чтобы расстояние между

любыми двумя кубами Λ_m было бы больше R. Из этого заключаем, что $Q_{m+1}^{\lambda_1} < (Q_m^{\lambda})^7 Q_m^{\lambda'}$, так что

$$\varphi^{\lambda_1} \leqslant \frac{7}{8}\varphi^{\lambda} + \frac{1}{8}\varphi^{\lambda'}. \tag{10}$$

Из (9) и (10) вытекает, что φ^{λ} является непрерывной функцией от λ для $\lambda > R + \max(\lambda_0, (n/\sqrt{2})^{1/3}a)$. В самом деле, легко доказать полунепрерывность φ^{λ} слева, а затем и справа.

Рассмотрим теперь последовательность $(N_i)_{1<i<\infty}$ положительных чисел, где $N_i \to \infty$, и последовательность положительных чисел $(V_i)_{1\leqslant i<\infty}$, таких, что $V_i/N_i \to v > a^3/\sqrt{2}$. Мы опять обозначили через V_i куб объема V_i.

Можно затем выбрать номер n (положительное число) и $V = \lambda^3$, так что $v = V/n$ и $\lambda > R + \max(\lambda_0; (n/\sqrt{2})^{1/3}a)$.

Так как φ^{λ} непрерывна, то для любого $\varepsilon > 0$ можно выбрать λ' и λ'', такие, что выполняется соотношение

$$R + \max(\lambda_0, (n/\sqrt{2})^{1/3}a) < \lambda' < \lambda < \lambda'' \text{ и } \varphi^{\lambda'} - \varphi^{\lambda} < \varepsilon,\ \varphi^{\lambda} - \varphi^{\lambda''} < \varepsilon.$$

Пусть $E(x)$ обозначает целую часть числа x. Тогда можно найти число i', такое, что для $i > i'$ выполняется соотношение

$$\left(E\left[\left(\frac{N_i}{n}\right)^{1/3}\right] + 1\right)\lambda' < (V_i)^{1/3}. \tag{11}$$

Пусть теперь $2^m \leqslant E[(N_i/n)^{1/3}] < 2^{m+1}$, где m целое. Внутри куба V_i можно поместить, начиная из одного угла, на взаимных расстояниях, больших, чем R, следующие кубы, содержащие в совокупности N_i частиц.

1) Один куб $\Lambda_m^{\lambda'}$, содержащий $2^{3m'}n$ частиц.

2) Следующие слои кубов $\Lambda_{m'}^{\lambda'}$, содержащие $2^{3m'}n$ частиц, $m' < m$, m' строго убывает.

3) Некоторое определенное число кубов $\Lambda_0^{\lambda'}$, содержащих n частиц.

4) Куб $\Lambda_0^{\lambda'}$, содержащий n' частиц $0 < n' \leqslant n$. Мы можем тогда написать

$$\varphi(\beta; V_i, N_i) < \sum_{m'=0}^{m} c_{m'}\varphi_{m'}^{\lambda'} + \frac{n'}{N_i}\varphi(\beta; \Lambda_0^{\lambda'}, n'), \tag{12}$$

где $c_{m'} \geqslant 0$, $\sum\limits_{m'=0}^{m} c_{m'} + n'/N_i = 1$. Когда $i \to \infty$, величины $c_{m'}$ при m', меньших любой заданной константы, стремятся к нулю.

Следовательно, для достаточно больших i выполняется

$$\varphi(\beta; V_i, N_i) < \varphi^{\lambda'} + \varepsilon. \tag{13}$$

С другой стороны, можно найти число i'', такое, что для $i > i''$

$$\left(\frac{n}{N_i}\right)^{1/3}[(V_i)^{1/3} + R] < \lambda''. \tag{14}$$

Тогда можно выбрать m столь большим, что можно поместить $2^{3m}nN_i^2$ кубов V_i внутри куба со стороной $2^m N_i\lambda'' - R$ таким образом, что расстояние между двумя V_i больше, чем R. Мы тогда получим

$$(Q(\beta; V_i, N_i))^{2^{3m}nN_i^2} < Q(\beta; (2^m N_i\lambda'' - R)^3, 2^{3m}nN_i^3), \tag{15}$$

и если $2^{p-1} < N_i \leqslant 2^p$, где p — целое число, то

$$Q(\beta; (2^m N_i \lambda'' - R)^3, 2^{3m} n N_i^3)(Q_m^{\lambda''})^{2^{3p} - N_i^3} < Q_{m+p}^{\lambda''}. \tag{16}$$

Из (15) и (16) вытекает

$$\varphi(\beta; V_i, N_i) > \frac{2^{3p}}{N_i^3} \varphi_{m+p}^{\lambda''} - \frac{2^{3p} - N_i^3}{N_i^3} \varphi_m^{\lambda''}, \tag{17}$$

и если мы устремим m к бесконечности, то

$$\varphi(\beta; V_i, N_i) \geqslant \varphi^{\lambda''} \text{ для } i > i''. \tag{18}$$

Соотношения (13) и (18) показывают, что для любого данного $\varepsilon > 0$ найдется i''', такое, что выполняется

$$\varphi^{\lambda} - \varepsilon < \varphi(\beta; V_i, N_i) < \varphi^{\lambda} + 2\varepsilon \text{ для } i > i'''. \tag{19}$$

Следовательно,

$$\lim_{i \to \infty} \varphi(\beta; V_i, N_i) = \varphi^{\lambda}.$$

Теорема 1. *Пусть $(N_i)_{1 \leqslant i < \infty}$ — последовательность целых положительных чисел, таких, что $N_i \to \infty$ и $(V_i)_{1 \leqslant i < \infty}$ — последовательность положительных чисел, таких, что $V_i/N_i \to v > (a^3/\sqrt{2})$. Если опять обозначить через V_i куб с объемом V_i, то последовательность $\varphi(\beta; V_i, N_i)_{1 \leqslant i < \infty}$ сходится*

$$\lim_{i \to \infty} \varphi(\beta; V_i, N_i) = \varphi(\beta, v) \tag{20}$$

и ее предел зависит только от β и v.

Этот результат был получен для кубических областей. Но он может быть легко обобщен для более общих областей. Функция $f(\beta, v)$, связанная с $\varphi(\beta, v)$ формулой (3), может быть истолкована как термодинамическая свободная энергия, приходящаяся на одну частицу при температуре $T = \beta^{-1}$ и удельном объеме v.

3. Свойства свободной энергии на одну частицу

Мы нашли в предыдущем параграфе, что $\varphi(\beta, v)$ является непрерывной и убывающей функцией от v; теперь мы докажем, что она, кроме того, выпукла (выпуклость и вогнутость будет здесь определяться относительно отрицательной части оси ординат).

Действительно, допустим, что $a^3/\sqrt{2} < v < v'$, v/v' рационально. Мы можем тогда написать

$$v = \lambda^3/n, \; v' = \lambda^3/n'$$

и

$$\varphi(\beta; \Lambda_{m+1}^{\lambda}, 2^{3m} 4(n + n')) \leqslant \frac{n}{n + n'} \varphi(\beta; \Lambda_m^{\lambda}, 2^{3m} n) + \\ + \frac{n'}{n + n'} \varphi(\beta; \Lambda_m^{\lambda}, 2^{3m} n'). \tag{1}$$

Устремляя $m \to \infty$, мы получим

$$\varphi\left(\beta, \frac{2}{v^{-1} + v'^{-1}}\right) \leqslant \frac{v^{-1}}{v^{-1} + v'^{-1}} \varphi(\beta, v) + \frac{v'^{-1}}{v^{1} + v'^{-1}} \varphi(\beta, v'). \tag{2}$$

Это неравенство вместе с непрерывностью φ как функции v влечет ее выпуклость по v. Вернемся теперь к последовательностям $(N_i)_{1 \leqslant i < \infty}$

и $(V_i)_{1\leqslant i<\infty}$ теоремы 1. Если мы положим

$$\mu_i(\xi)=\frac{1}{N_i!}\int\limits_{(V_i)^{N_i}} dx_1\ldots dx_n\delta\left[\xi-U_{N_i}(x)+\frac{N_i}{2}\left(A\frac{N_i}{V_i}-B\right)\right], \tag{3}$$

то μ_i является положительной мерой с носителем в положительной части действительной оси и такой, что $\|\mu_i\|\leqslant(V_i^{N_i}/N_i!)$. Мы имеем

$$\int d\xi e^{-\beta\xi}\mu_i(\xi)=e^{-N_i\psi_i(\beta)}, \tag{4}$$

$$\psi_i(\beta)=\beta\left[\varphi(\beta;V_i,N_i)-\frac{1}{2}\left(A\frac{N_i}{V_i}-B\right)\right]. \tag{5}$$

Согласно (4), $\psi_i(\beta)$ является возрастающей и вогнутой функцией от β.

Когда $i\to\infty$, она сходится при каждом β в функции $\psi(\beta,v)=\beta[\varphi(\beta,v)-(\{A/v\}-B)/2]$. Таким образом, $\psi(\beta,v)$ является возрастающей и вогнутой функцией от β и то же самое верно для функции $\psi'(\beta,v)=[\{A/v_2'\}-B]/2+\varphi(\beta,v)\beta$, где $a^3/\sqrt{2}<v\leqslant v_2'$. Кроме того, функция $\psi'(\beta,v)$ является возрастающей и выпуклой функцией от v.

Пусть

$$\left.\begin{aligned}&0<\beta_1'<\beta_1<\beta_2<\beta_2',\quad \frac{d^3}{\sqrt{2}}<v_1'<v_1<v_2<v_2',\\&K'=\{(\beta,v):\beta_1'\leqslant\beta\leqslant\beta_2',\ v_1'\leqslant v\leqslant v_2'\},\\&K=\{(\beta,v):\beta_1\leqslant\beta\leqslant\beta_2,\ v_1\leqslant v\leqslant v_2\}.\end{aligned}\right\} \tag{6}$$

Тогда $\psi'(\beta,v)$ ограничена на K', так как $\psi'(\beta_1',v_2')\leqslant\psi'(\beta,v)\leqslant\psi'(\beta_2',v_1')$. Из этого и свойств выпуклости функции ψ' следует, что $\partial\psi'/\partial\beta$ и $\partial\psi'/\partial v$ ограничены на K и, следовательно, ψ' является непрерывной относительно пары переменных (β,v).

Теорема 2. *Функция* $\beta\varphi(\beta,v)$, *определенная для* $\beta>0$ *и* $v>a^3/\sqrt{2}$, *является непрерывной функцией относительно* (β,v), *вогнута относительно* β, *убывает и выпукла относительно* v; *она удовлетворяет еще следующим неравенствам*:

$$\beta\varphi(\beta,v)\geqslant\frac{\beta}{2}\left(\frac{A}{v}-B\right)-(\log v+1), \tag{7}$$

$$\beta\varphi(\beta,v)<-3\log(v^{1/3}-R)\ \text{для}\ v>R^3. \tag{8}$$

Первая часть этой теоремы может быть сформулирована также следующим образом: функция $\varphi(\beta,v)$, определенная для $\beta^{-1}>0$, $v>a^3/\sqrt{2}$, непрерывна относительно (β^{-1},v), вогнута относительно β^{-1}, убывает и выпукла относительно v. Аналогичные свойства для $f(\beta,v)=\frac{3}{2}\beta\log(2\pi\beta/m)+\varphi(\beta,v)$ получаются непосредственно.

Остается доказать только (8). Чтобы доказать это, мы используем обозначения § 2 и возьмем $n=1$, $\lambda>R$. Тогда

$$(Q_0^\lambda)^{2^{3m}}<Q_m^\lambda\quad Q_0^\lambda=(\lambda-R)^3. \tag{9}$$

Если мы устремим $m\to\infty$, то получим неравенство

$$\beta\varphi_m^\lambda<-\log(\lambda-R)^3, \tag{10}$$

которое эквивалентно неравенству (8).

Мы закончим этот параграф замечанием о том, как φ зависит от потенциала.

Пусть $\mathscr{V}$ — множество всех потенциалов со свойствами А и В. Тогда $\mathscr{V}$ является выпуклым конусом в векторном пространстве, которое оно порождает.

Пусть α' и α'' — такие неотрицательные действительные числа, что $\alpha' + \alpha'' = 1$. Если мы напишем $\Phi = \alpha'\Phi' + \alpha''\Phi''\Phi'$, $\Phi'' \in \mathscr{V}$ и

$$U'_n(x) = \sum_{i<j} \Phi'(\mathrm{x}_j - \mathrm{x}_i),\ U''_n(x) = \sum_{i<j} \Phi''(\mathrm{x}_j - \mathrm{x}_i), \tag{11}$$

то мы получим с помощью неравенства Гёльдера

$$\left.\begin{aligned} Q_\Phi(\beta;\Lambda,n) = \frac{1}{n!}\int\limits_{(\Lambda)^n} dx_1\ldots dx_n (e^{-\beta U'_n(x)})^{\alpha'} (e^{-\beta U''_n(x)})^{\alpha''} \leqslant \\ \leqslant [Q_{\Phi'}(\beta;\Lambda,n)]^{\alpha'} [Q_{\Phi''}(\beta;\Lambda,n)]^{\alpha''}. \end{aligned}\right\} \tag{12}$$

Таким образом, φ_Φ является вогнутым функционалом от Φ на $\mathscr{V}$

$$\varphi_\Phi(\beta, v) \geqslant \alpha'\varphi_{\Phi'}(\beta, v) + \alpha''\varphi_{\Phi''}(\beta, v). \tag{13}$$

4. *Непрерывность функции $p(v)$*

Мы видели в § 3 (теорема 2), что давление

$$p(\beta, v) = -\frac{\partial\varphi(\beta, v)}{\partial v} \tag{1}$$

является для фиксированного β убывающей функцией от v. Теперь мы докажем, что для потенциала Φ, удовлетворяющего условиям А и В и, кроме того, ограниченного, т. е.

$$\max|\Phi(x)| = M < +\infty, \tag{2}$$

функция $p(v)$ абсолютно непрерывна. Фактически достаточно предположить, что Φ ограничена почти везде. Для ограниченных потенциалов, разумеется, $a = 0$.

Теорема 3. *Для ограниченного потенциала, удовлетворяющего условиям А и В, функция p является непрерывной, убывающей функцией от v для $v > 0$ и фиксированного β. Ее частная производная по v отрицательна, локально интегрируема и ограничена.*

Фактически предположение, сделанное относительно Φ, по-видимому, является слишком ограничительным и можно было бы доказать непрерывность $p(v)$ для $v > a^3/\sqrt{2}$ в гораздо более общем случае (см., например, [5])[1]).

Доказательство теоремы основывается на следующем результате.

Лемма. *Если потенциал $\Phi(\mathrm{x})$ удовлетворяет условию* А (*условиям* А *и* В), *то можно написать*

$$\Phi(\mathrm{x}) = \Phi'(\mathrm{x}) + \psi_2(\mathrm{x}), \tag{3}$$

где $\Phi'(\mathrm{x})$ удовлетворяет условию А (*условиям* А *и* В) *и $\psi_2(\mathrm{x})$ является непрерывной строго положительной и положительно определенной функцией.*

---

[1]) В настоящее время непрерывность $p(v)$ доказана (Р. Л. Добрушин и Р. А. Минлос) для гораздо более широкого класса потенциалов, чем удовлетворяющих условию (2).— *Прим. перев.*

Пусть, в самом деле, $\hat{\psi}(\mathbf{p})$ — непрерывная неотрицательная функция с компактным носителем, зависящая только от $|\mathbf{p}|$ и не обращающаяся тождественно в нуль. Тогда $\psi(\mathbf{x}) = \psi(-\mathbf{x}) = \psi(x)^*$ и функция

$$\psi_1(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x})^2 = (2\pi)^{-3/2} \int d\mathbf{p}\, s^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} (2\pi)^{-3/2} \int d\mathbf{q}\, \hat{\psi}(\mathbf{q})\, \hat{\psi}(\mathbf{p}-\mathbf{q}) \tag{4}$$

неотрицательная и положительно определенная. Она зависит только от $|\mathbf{x}|$ и не может обратиться в нуль на открытом множестве, как следует из теоремы Пэли и Винера [3]. Обозначим теперь

$$\hat{\psi}_2(\mathbf{p}) = \hat{\psi}_1(\mathbf{p})^2 = \left[(2\pi)^{-3/2} \int d\mathbf{q}\hat{\psi}(\mathbf{q})\, \hat{\psi}(\mathbf{p}-\mathbf{q})\right]^2. \tag{5}$$

Тогда

$$\psi_2(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} \int d\mathbf{y}\, \psi_1(\mathbf{y})\, \psi_1(\mathbf{x}-\mathbf{y})$$

— строго положительная функция, зависящая только от $|\mathbf{x}|$ и удовлетворяющая условию A_2. Если мы напишем разложение

$$\Phi(\mathbf{x}) = \Phi_1(\mathbf{x}) + \Phi_2(x),$$

где Φ_1 и Φ_2 удовлетворяют соответственно условиям A и B, можно всегда выбрать $\hat{\psi}(\mathbf{p})$ таким, чтобы $\Phi_2(\mathbf{x}) - \psi_2(\mathbf{x})$ снова удовлетворяла условию A_2. Тогда функции $\psi_2(\mathbf{x})$ и $\Phi'(\mathbf{x}) = [\Phi_2(\mathbf{x}) + \psi_2(\mathbf{x})] + \Phi_1(\mathbf{x})$ удовлетворяют условиям леммы.

Пусть теперь Φ — ограниченный потенциал, удовлетворяющий условиям A и B. Применяя неравенство Шварца для куба Λ объема V, мы находим

$$\left.\begin{aligned}
(n+1)!\, Q(\beta;\Lambda, n+1) &= \int\limits_{(\Lambda)^n} d\mathbf{x}_1,,,d\mathbf{x}_n\, e^{-\beta U_n(\mathbf{x})} \int\limits_{\Lambda} d\mathbf{x}_{n+1} \times \\
&\times \exp\left[-\beta \sum_{i=1}^{n} \Phi(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_i)\right] \leqslant \\
&\leqslant \left[\int\limits_{(\Lambda)^n} d\mathbf{x}_1 \ldots d\mathbf{x}_n\, e^{-\beta U_n(x)}\right]^{1/2} \times \\
&\times \left[\int\limits_{(\Lambda)^{n+2}} d\mathbf{x}_1 \ldots d\mathbf{x}_n\, d\mathbf{x}_{n+1}\, d\mathbf{x}_{n+2}\, e^{-\beta U_n(x)} \times\right. \\
&\left.\times \prod_{\alpha=1}^{2} \exp\left[-\beta \sum_{i=1}^{n} \Phi(\mathbf{x}_{n+\alpha} - \mathbf{x}_i)\right]\right]^{1/2} = \\
&= [n!\, Q(\beta;\Lambda, n)]^{1/2} \left[\int\limits_{(\Lambda)^{n+2}} d\mathbf{x}_1 \ldots d\mathbf{x}_{n+2}\, e^{-\beta U_{n+2}(\mathbf{x})}\, e^{\beta\Phi(x_{n+2} - x_{n+1})}\right]^{1/2}
\end{aligned}\right\} \tag{6}$$

Следовательно,

$$\frac{n+1}{n+2} \cdot \frac{[Q(\beta;\Lambda, n+1)]^2}{Q(\beta;\Lambda, n)} \leqslant$$

$$\leqslant \frac{1}{(n+2)!} \int\limits_{(\Lambda)^{n+2}} d\mathbf{x}_1 \ldots d\mathbf{x}_{n+2}\, e^{-\beta U_{n+2}(\mathbf{x})}\, e^{\beta\Phi(\mathbf{x}_{n+2} - \mathbf{x}_{n+1})}. \tag{7}$$

Для любой измеримой функции $\Psi(\mathbf{x})$, зависящей только от $|\mathbf{x}|$, мы обозначим

$$\left.\begin{aligned}\varphi_{\Phi}^{(1)}(\beta;\Lambda,n)(\Psi)&=\left[\frac{d}{dh}\varphi_{\Phi+h\Psi}(\beta;\Lambda,n)\right]_{h=0}=\\&=\frac{n+1}{2}\,\frac{\int\limits_{(\Lambda)^n}d\mathbf{x}_1\ldots d\mathbf{x}_n\,e^{-\beta U_n(\mathbf{x})}\Psi(\mathbf{x}_n-\mathbf{x}_{n-1})}{\int\limits_{(\Lambda)^n}d\mathbf{x}_1\ldots d\mathbf{x}_n\,e^{-\beta U_n(\mathbf{x})}}.\end{aligned}\right\}\tag{8}$$

Это позволяет нам переписать неравенство (7) в виде

$$\frac{n+1}{n+2}\,\frac{[Q(\beta;\Lambda,n+1)]^2}{Q(\beta;\Lambda,n)\,Q(\beta;\Lambda,n+2)}\leqslant 1+\frac{2}{n+1}\,\varphi_{\Phi}^{(1)}(\beta;\Lambda,n+2)\left(e^{\beta\Phi}-1\right).\tag{9}$$

Пусть теперь

$$m=\min_{\mathbf{x}^2\leqslant R^2}\psi_2(\mathbf{x}),\tag{10}$$

где ψ_2 определена предыдущей леммой. Согласно (2) и (10) потенциал

$$\Phi(h)=\Phi+h\left(e^{\beta\Phi}-1\right)\tag{11}$$

удовлетворяет условиям A и B, как только

$$-\frac{m}{e^{\beta M}-1}\leqslant R.\tag{12}$$

(Для $h\geqslant 0$ это является следствием неравенства $\beta\Phi(\mathbf{x})\leqslant e^{\beta\Phi(\mathbf{x})}-1$.) Когда (12) выполняется, $\varphi_{\Phi(h)}(\beta;\Lambda,n)$ и $\varphi_{\Phi(h)}(\beta,v)$ являются вполне определенными вогнутыми функциями от h.

Пусть $0<v_1<v_2$ и $0<h_1<h_2=\dfrac{m}{e^{\beta M}-1}$. Мы имеем

$$\varphi_{\Phi}^{(1)}(\beta;\Lambda,n)\left(e^{\beta\Phi}-1\right)\leqslant\frac{\varphi_{\Phi(-h_1)}(\beta,\Lambda,n)-\varphi_{\Phi(-h_2)}(\beta;\Lambda,n)}{h_2-h_1}.\tag{13}$$

$\varphi_{\Phi(h)}(\beta;\Lambda,n)$ является непрерывной убывающей функцией от $v=V/n$ для фиксированных β, h и n. Она сходится к $\varphi_{\Phi(h)}(\beta,v)$, когда $n\to\infty$, Поскольку сходимость при $v_1\leqslant v\leqslant v_2$ равномерна, $\varphi_{\Phi(h)}(\beta,v)$ также непрерывна и убывает по v.

Для $v_1\leqslant v\leqslant v_2$ и фиксированных β, h функции $\varphi_{\Phi(h)}(\beta;\Lambda,n)$ являются, таким образом, равномерно ограниченными по n. Тогда из (13) следует, что функции $\varphi_{\Phi(h)}^{(1)}(\beta;\Lambda,n)\left(e^{\beta\Phi}-1\right)$ также равномерно ограничены по n

$$\varphi_{\Phi}^{(1)}(\beta;\Lambda,n)\left(e^{\beta\Phi}-1\right)\leqslant L<+\infty\quad\text{для}\quad v_1\leqslant\frac{V}{n}\leqslant v_2.\tag{14}$$

Для $v_1\leqslant V(n+2)\leqslant v_2$ мы имеем, таким образом, согласно (9)

$$\frac{n+1}{n+2}\cdot\frac{[Q(\beta;\Lambda,n+1)]^2}{Q(\beta;\Lambda,n)\,Q(\beta;\Lambda,n+2)}\leqslant 1+\frac{2}{n+1}L.\tag{15}$$

Следовательно,

$$\left.\begin{aligned}&(n+2)\varphi(\beta,\Lambda,n+2)-2(n+1)\varphi(\beta;\Lambda,n+1)+n\varphi(\beta,\Lambda,n)\leqslant\\&\leqslant\frac{1}{\beta}\left[\log\left(1+\frac{2}{n+1}L\right)+\log\frac{n+2}{n+1}\right]<\frac{2L+1}{\beta(n+1)}.\end{aligned}\right\}\tag{16}$$

Так как Λ фиксировано, функция $\varphi(\beta, \rho^{-1}, \Lambda)$, определенная формулой $\varphi(\beta, (n/V)^{-1}; \Lambda) = \varphi(\beta; \Lambda, n)$ при целых значениях $\rho \cdot V$, т. е. для $\rho = n/V$, удовлетворяет неравенству

$$\left.\begin{aligned}&\left[\frac{n+2}{n}\rho\varphi\left(\beta; \left(\frac{n+2}{n}\rho\right)^{-1}; \Lambda\right) - 2\frac{n+1}{n}\rho\varphi\left(\beta, \left(\frac{n+1}{n}\rho\right)^{-1}; \Lambda\right) + \right.\\ &\left. + \rho\varphi(\beta, \rho^{-1}; \Lambda)\right]\left(\frac{\rho}{n}\right)^{-2} < \frac{2L+1}{\beta} \cdot \frac{V}{n+1}.\end{aligned}\right\} \quad (17)$$

Пусть теперь k, l — такие положительные целые числа, что $v_2^{-1} \leqslant n/V < (n+k+l)\,1/V \leqslant v_1^{-1}$. Тогда из (17) можно вывести, что

$$\left.\begin{aligned}&\left[\frac{n+k+l}{n}\rho\varphi\left(\beta, \left(\frac{n+k+l}{n}\rho\right)^{-1}; \Lambda\right) - \frac{n+k}{n}\rho\varphi\left(\beta, \left(\frac{n+k}{n}\rho\right)^{-1}; \Lambda\right) - \right.\\ &\left. - \frac{n+l}{n}\rho\varphi\left(\beta, \left(\frac{n+l}{n}\rho\right)^{-1}; \Lambda\right) + \rho\varphi(\beta; \rho; \Lambda)\right]\left(\frac{k\rho}{n}\right)^{-1}\left(\frac{l\rho}{n}\right)^{-1} \leqslant \frac{2L+1}{\beta v_1}.\end{aligned}\right\} \quad (18)$$

Итак, если ρ, ρ_1, ρ_2 являются такими положительными числами, что $v_2^{-1} \leqslant \rho < \rho + \rho_1 + \rho_2 \leqslant v_1^{-1}$, то мы имеем

$$\left.\begin{aligned}&[(\rho+\rho_1+\rho_2)\varphi(\beta_1, (\rho+\rho_1+\rho_2)^{-1}) - (\rho+\rho_1)\varphi(\beta_1, (\rho+\rho_1)^{-1}) - \\ &- (\rho+\rho_2)\varphi(\beta, (\rho+\rho_2)^{-1}) + \rho\varphi(\beta, \rho^{-1})]\,\rho_1^{-1}\rho_2^{-1} \leqslant \frac{2L+1}{\beta v_1}.\end{aligned}\right\} \quad (19)$$

Из того что функция $\varphi(\beta, v)$ выпукла относительно v, следует, что функция $\rho\varphi(\beta, \rho^{-1})$ является выпуклой относительно $\rho = v^{-1}$. Тогда известно, что для почти всех ρ существует частная производная

$$\partial/\partial\rho\,(\rho\varphi(\beta, \rho^{-1})) = \psi(\rho).$$

Если она существует в точках ρ и $\rho + \rho_1$, $v_2^{-1} < \rho < \rho + \rho_1 < v_1^{-1}$, то, согласно (19), мы имеем

$$\frac{\psi(\rho+\rho_1) - \psi(\rho)}{\rho_1} \leqslant \frac{2L+1}{\beta v_1}. \quad (20)$$

Это показывает, что $\psi(\rho)$ может быть продолжена по непрерывности на все значения ρ для $v_2^{-1} < \rho < v_1^{-1}$. Кроме того, (20) обеспечивает, что $\psi(\rho)$ является неопределенным интегралом от ограниченной интегрируемой функции [2].

Теорема 3 отсюда следует непосредственно.

5. *Большой канонический ансамбль*

В этом пункте мы ограничимся изучением потенциалов, для которых $a = 0$ (для случая $a > 0$ см. [6]). Пусть опять Λ будет кубом объема V и пусть β и z — положительные числа. Мы напишем $Q(\beta; \Lambda, 0) = 1$ и определим функцию p следующей формулой:

$$e^{\beta V p(\beta, z; \Lambda)} = \Xi(\beta, z; \Lambda) = \sum_{n=0}^{\infty}, z^n Q(\beta; \Lambda, n). \quad (1)$$

Согласно (2.4), ряд (1) имеет бесконечный радиус сходимости, так как

$$z^n Q(\beta; \Lambda, n) \leqslant \frac{1}{n!}\,[zVe^{1/2\beta B}]^n \leqslant \left[z\frac{V}{n}e^{1/2\beta B+1}\right]^n. \quad (2)$$

Пусть β и z фиксированы и пусть

$$v_0 = \frac{1}{2}z^{-1}e^{-1/2\beta B-1} > 0.$$

Мы получим тогда

$$\sum_{n > V/v_0}{}' z^n Q(\beta; \Lambda, n) \leqslant \sum_{n > V/v_0} \left(\frac{1}{2}\right)^n. \tag{3}$$

Пусть также $v_1 > z^{-1} e^{-1/2\beta B}$, тогда

$$\sum_{n < V/v_1} z^n Q(\beta; \Lambda, n) \leqslant \sum_{n < V/v_1} \left[z \frac{V}{n} e^{1/2\beta B+1}\right]^n < \frac{V}{v_1} [z v_1 e^{1/2\beta B+1}]^{V/v_1}. \tag{4}$$

Последнее неравенство следует из того, что для $\alpha > 0$ $(\alpha/n)^n$ является возрастающей функцией n, когда $0 \leqslant n < \alpha e^{-1}$. Кроме того,

$$\lim_{v_1 \to \infty} [z v_1 e^{1/2\beta B+1}]^{1/v_1} = 1. \tag{5}$$

Пусть $z = e^{\beta\gamma}$. Из (3.8) следует, что для любого γ можно выбрать v столь большим, что $\gamma - \varphi(\beta, v) > 0$. Итак, пусть v — такое, что $\beta(\gamma - \varphi(\beta, v)) > \delta + \varepsilon$, $\delta > 0$, $\varepsilon > 0$. Для достаточно большого Λ всегда существует положительное целое число n, такое, что $n > V/v$ и $\beta(\gamma - \varphi(\beta; \Lambda, n)) > 0$. Тогда

$$\Xi(\beta; z; \Lambda) > z^n Q(\beta; \Lambda, n) > e^{\delta(V/v)}. \tag{6}$$

Согласно (5), можно фиксировать v_1 таким, что

$$[z v_1 e^{1/2\beta B+1}]^{1/v_1} < e^{\delta/v}, \tag{7}$$

и, следовательно, если Λ достаточно большое,

$$\Xi(\beta, z; \Lambda) > \sum_{\frac{V}{V_1} \leqslant n \leqslant \frac{V}{v_0}} z^n Q(\beta; \Lambda, n) > \frac{1}{2} \Xi(\beta, z; \Lambda). \tag{8}$$

$\varphi(\beta; nv, n)$ является убывающей непрерывной функцией от v для $v > 0$ и сходится равномерно на компактах к функции $\varphi(\beta, v)$ при $n \to \infty$.

Из этого следует, что для $V/v_1 \leqslant n \leqslant V/v_0$ можно записать

$$\left.\begin{aligned} Q(\beta; \Lambda, n) &= e^{-n\beta(\varphi(\beta, V/n) + \chi(\beta; \Lambda, n))} \\ z^n Q(\beta; \Lambda, n) &= \exp \beta V \left[\frac{\gamma - \varphi(\beta, V/n)}{V/n} - \frac{n\chi}{V}\right], \end{aligned}\right\} \tag{9}$$

$$|\chi(\beta; \Lambda, n)| < \varepsilon(\beta, \Lambda), \qquad \lim_{V \to \infty} \varepsilon(\beta, \Lambda) = 0. \tag{10}$$

Мы теперь изучим поведение $[\gamma - \varphi(\beta, v)] \cdot 1/v$ как функции от v. Имеем

$$\frac{\partial}{\partial v}\left(\frac{\gamma - \varphi(\beta, v)}{v}\right) = -\frac{1}{v^2}\left(\gamma - \varphi(\beta, v) + v \frac{\partial\varphi}{\partial v}\right), \tag{11}$$

$$\frac{\partial}{\partial v}\left(\gamma - \varphi(\beta; v) + v \frac{\partial\varphi}{\partial v}\right) = v \frac{\partial^2\varphi}{\partial v^2}. \tag{12}$$

Из (12) следует, что функция $\gamma - \varphi(\beta, v) + v(\partial\varphi/\partial v)$ является возрастающей, поскольку в силу (3.7) она < 0, когда v достаточно мало. Она должна быть > 0 при достаточно больших v. Неравенство

$$\gamma - \varphi(\beta, v) \leqslant -v \frac{\partial\varphi}{\partial v} \tag{13}$$

для $v > 0$ при $\gamma - \varphi > 0$ влечет соотношения

$$\frac{\partial}{\partial v}(\log(\gamma - \varphi)) \geqslant \frac{1}{v}, \qquad \log(\gamma - \varphi) \geqslant \log Cv, \qquad \gamma - \varphi \geqslant Cv, \tag{14}$$

где $C > 0$ в противоречии с (3) из п. 7.

Функция $[\gamma - \varphi(\beta, v)] \cdot 1/v$ имеет, таким образом, максимум, который находится между v_0 и v_1. Тогда из (1), (8), (9), (10) следует, что этот максимум является пределом $p(\beta, z; \Lambda)$, когда $V \to \infty$.

Теорема 4. *Когда* $V \to \infty$, $p(\beta, z; \Lambda)$ *имеет предел*

$$\lim_{V\to\infty} p(\beta, z, \Lambda) = p(\beta, z) = \max_{0<v<+\infty} \frac{\gamma + \varphi(\beta, v)}{v} \tag{15}$$

и когда $\varphi - v\frac{\partial\varphi}{\partial v} = \gamma$, $z = e^{\beta\gamma}$, *мы имеем* $p(\beta, z) = [\gamma - \varphi(\beta, v)] \times \times \frac{1}{v} = -\frac{\partial\varphi}{\partial v}$.

Мы можем, таким образом, отождествить $p(\beta, z)$ с давлением и писать $\gamma = g - (3/2\beta)\log(2\pi\beta/m)$, где g — химический потенциал.

Мы закончим этот параграф замечанием о целой аналитической функции $\Xi(\beta, z; \Lambda)$, определенной формулой (1), при комплексных z. Для $r \geqslant 0$ имеем

$$\max_{|z|\leqslant r} \Xi(\beta, z; \Lambda) = \Xi(\beta, r; \Lambda). \tag{16}$$

Согласно (3) и (2), из п. 5 выполняется неравенство

$$\left.\begin{aligned}
&\Xi(\beta, r; \Lambda) < 1 + \sum_{n<V/v_0} r^n Q(\beta; \Lambda, n) \leqslant \\
&\leqslant 1 + \frac{V}{v_0}\max_n \left[r\frac{V}{n} e^{1+(1/2)\beta\left(B - A\frac{n}{V}\right)}\right]^n \leqslant \\
&\leqslant 1 + \frac{V}{v_0}\max_v \left[r\cdot v\cdot e^{1+(1/2)\beta\left(B - \frac{A}{v}\right)}\right]^{V/v} = \\
&= 1 + \frac{V}{v_0}\max_v \exp\left[\beta V \frac{1/\beta(\log v + 1) + 1/\beta\log r + \frac{B}{2} - \frac{1}{2}\frac{A}{v}}{v}\right] \leqslant \\
&\leqslant 1 + \frac{V}{v_0}\exp\left[\beta V \max_v \left(\frac{1}{\beta} + \left(\frac{1}{\beta}\log r + \frac{B}{2}\right)\frac{1}{v} - \frac{1}{2}\frac{A}{v^2}\right)\right] = \\
&= 1 + V\exp\left[\beta V\left(\frac{1}{\beta} + \frac{1}{2}\frac{\left(\frac{1}{\beta}\log r + \frac{B}{2}\right)^2}{A}\right) - \log v_0\right] = \\
&= 1 + V\exp\left[V + \frac{\beta}{2}\frac{V}{A}\left(\frac{1}{\beta}\log r + \frac{B}{2}\right)^2 + \log 2r + \frac{1}{2}\beta B + 1\right].
\end{aligned}\right\} \tag{17}$$

Следовательно,

$$\lim_{r\to\infty} \frac{\log\log\Xi(\beta, r, \Lambda)}{\log r} = 0. \tag{18}$$

(16) и (18) показывают, что $\Xi(\beta, z; \Lambda)$ — целая функция нулевого порядка (см. [1]). Следовательно, число нулей ζ_i образует бесконечное множество и для каждого $\varepsilon > 0$ ряд $\sum_{i=1}^{\infty} |\zeta_i|^{-\varepsilon}$ сходится и

$$\Xi(\beta, z; \Lambda) = \prod_{i=1}^{\infty}\left(1 - \frac{z}{\zeta_i}\right), \tag{19}$$

где бесконечное произведение справа сходится абсолютно и равномерно на компактах.

Это приводит нас к обобщению результатов, полученных Ли и Янгом [6] для случая $a > 0$ на случай потенциала, удовлетворяющего условиям A и B и для которого $a = 0$. Эти результаты непосредственно вытекают из теоремы Стильтьеса и Витали (см. [1]).

Заключение

Целью этой статьи было изучить точным образом, как классическая статистическая механика применяется к классической системе частиц в пределе, когда система становится бесконечной.

Во многих отношениях результаты, полученные здесь, не являются наилучшими из возможных. Здесь возникают интересные математические проблемы. Например, как характеризовать непрерывные потенциалы, для которых $\sum_i \sum_j \Phi(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) \geqslant 0$ для всех наборов векторов x_i.

С другой стороны, по-видимому, наши методы могут быть также применены для решения задач квантовой статистической механики, которые не рассматривались до сих пор.

Замечание при корректуре. Доктор Фишер сообщил автору, что он получил результаты, подобные приведенным здесь, и похожими методами (применяя монотонность, чтобы доказать существование предела, и выпуклость, чтобы доказать непрерывность). Доктор Фишер также указал на имеющую ко всем этим вопросам отношение статью Вилтена [7].

Нужно заметить, что, по-видимому, не существует никакого доказательства того, что плотность наилучшей упаковки p_c есть $\sqrt{2}/a^3$. Наше доказательство, однако, не зависит от этого (нужно лишь заменить $a^3/\sqrt{2}$ на p_c^{-1}).

ПРИЛОЖЕНИЕ. ПОТЕНЦИАЛЫ, УДОВЛЕТВОРЯЮЩИЕ УСЛОВИЯМ A и B

Условия A и B выполняются в следующих случаях:

a) $\Phi(\mathbf{x}) \geqslant 0$, $\Phi(\mathbf{x}) = 0$ для $|\mathbf{x}| > R > 0$; $\Phi(\mathbf{x}) \geqslant A > 0$ в окрестности начала.

b) $a > 0$, $\Phi(\mathbf{x}) = 0$ для $|\mathbf{x}| > R \geqslant \alpha$; $\Phi(\mathbf{x}) \geqslant A > -\infty$.

c) $\Phi(\mathbf{x}) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{R}{|\mathbf{x}|}\right)^{12} - \left(\frac{R}{|\mathbf{x}|}\right)^{6}\right]$ (потенциал Ленарда — Джонса).

d) $\Phi(\mathbf{x}) = \varepsilon\left(e^{-2\alpha(|\mathbf{x}|-R')} - 2e^{-\alpha(|\mathbf{x}|-R')}\right)$ (потенциал Морзе) для $e^{\alpha R'} > 16$.

Пусть $\alpha(\mathbf{x})$ — непрерывная неотрицательная функция с компактным носителем, зависящим только от $|\mathbf{x}|$, и не равная нулю тождественно. Тогда

$$\beta(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{y}\,\alpha(\mathbf{y})\,\alpha(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = \int d\mathbf{p}\,e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}\,\hat{\alpha}(\mathbf{p})^2 \tag{1}$$

является положительно определенной функцией, и можно выбрать $\alpha(\mathbf{x})$, таким, что $\beta(\mathbf{x}) < \Phi(\mathbf{x})$ в случае a). Можно взять $\Phi_1 = \Phi - \beta$, $\Phi_2 = \beta$.

Что касается случая b), из соотношения

$$(2\pi)^{-3/2}\int d\mathbf{x}\,e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}\,e^{-\alpha(\mathbf{x}^2-a^2)} = (2\alpha)^{-3/2}\,e^{\alpha a^2}\,e^{\mathbf{p}^2/4\alpha} \tag{2}$$

мы видим, что функция

$$\gamma(\mathbf{x}) = e^{-\alpha(\mathbf{x}^2-a^2)} - e^{-\beta(\mathbf{x}^2-b^2)} \tag{3}$$

положительно определенная, как только выполняется

$$\alpha > \beta, \quad \frac{e^{\alpha a^2}}{(2\alpha)^{3/2}} > \frac{e^{\beta b^2}}{(2\beta)^{3/2}}, \tag{4}$$

где a фиксировано и $e^{-\alpha(\mathbf{x}^2-a^2)} = 1$ для $|\mathbf{x}| = a$. Для данного α, $\alpha > 0$, мы можем выбрать такие b и β, что $\gamma(\mathbf{x}) < \Phi(\mathbf{x})$. Наконец, мы можем

увеличить α и взять его таким большим, что выполняется неравенство (4). Для потенциала Ленарда — Джонса [случай c)] мы положим

$$\Phi_2(\mathbf{x}) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{R^2}{\mathbf{x}^2+\alpha^2R^2}\right)^6 - 2\left(\frac{R^2}{\mathbf{x}^2+\alpha^2R^2}\right)^3\right], \quad 0<\alpha^2<\sqrt[3]{2}-1. \tag{5}$$

Сначала докажем, что Φ_1 положительно. В самом деле $\alpha^2<\sqrt[3]{2}-1$ влечет $\sqrt[3]{2}-\alpha^2>[(\alpha^2/\sqrt[3]{2})-1]$. Мы имеем, таким образом, либо $\mathbf{x}^2<\sqrt[3]{2}-\alpha^2$, т. е. $2[1/(\mathbf{x}^2+\alpha^2)]^3>1$, либо $x^2>(\alpha^2\cdot 1/\sqrt[3]{2}-1)$, т. е. $2(1/\mathbf{x}^2+\alpha^2)^3>(1/\mathbf{x}^2)^3$. Поэтому Φ_1 всегда положительна, поскольку

$$\left.\begin{aligned}&\left(\frac{1}{\mathbf{x}^2}\right)^3\left[\left(\frac{1}{\mathbf{x}^2}\right)^3-1\right]-\left(\frac{1}{\mathbf{x}+\alpha^2}\right)^3\left[\left(\frac{1}{\mathbf{x}^2+\alpha^2}\right)^2-2\right]=\\&=\left[\left(\frac{1}{\mathbf{x}^2}\right)^3-\left(\frac{1}{\mathbf{x}^2+\alpha^2}\right)^3\right]\left[\left(\frac{1}{\mathbf{x}^2}\right)^3+\left(\frac{1}{\mathbf{x}^2+\alpha^2}\right)^3-1\right]+\left(\frac{1}{\mathbf{x}^2+\alpha^2}\right)^3.\end{aligned}\right\} \tag{6}$$

Остается доказать, что

$$\left.\begin{aligned}&\left(\frac{1}{\mathbf{x}^2+\alpha^2}\right)^3\left[\left(\frac{1}{\mathbf{x}^2+\alpha^2}\right)^3-2\right]=\left[\left(\frac{1}{\mathbf{x}^2+\alpha^2}\right)^3-\right.\\&\left.-\sqrt[3]{2}\left(\frac{1}{\mathbf{x}^2+\alpha^2}\right)^2\right]\left[\left(\frac{1}{\mathbf{x}^2+\alpha^2}\right)^3+\sqrt[3]{2}\left(\frac{1}{\mathbf{x}^2+\alpha^2}\right)^2+\sqrt[3]{4}\left(\frac{1}{\mathbf{x}^2+\alpha^2}\right)\right]\end{aligned}\right\} \tag{7}$$

является положительно определенной функцией. Чтобы сделать это, мы докажем, что каждый сомножитель справа является положительно определенной функцией. Действительно, мы имеем

$$(2\pi)^{-3/2}\int d\mathbf{x}e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}(\mathbf{x}^2+\alpha^2)^{-1}=\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{e^{-p\alpha}}{p}, \tag{8}$$

$$(2\pi)^{-3/2}\int d\mathbf{x}e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}(\mathbf{x}^2+\alpha^2)^{-2}=\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{e^{-p\alpha}}{2\alpha}, \tag{9}$$

$$(2\pi)^{-3/2}\int d\mathbf{x}e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}(\mathbf{x}^2+\alpha^2)^{-3}=\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{e^{-p\alpha}}{4\alpha^2}\left(\frac{p}{2}+\frac{1}{2\alpha}\right). \tag{10}$$

Таким образом, первый сомножитель положительно определен, когда α достаточно мало. Второй также положительно определен, так как является суммой таких функций.

Для потенциала Морзе [случай d)] мы можем взять $\Phi_1=0$. Действительно, тогда Φ является положительно определенной функцией, если $e^{\alpha R'}>16$, так как выполняется

$$(2\pi)^{-3/2}\int d\mathbf{x}e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}\Phi(\mathbf{x})=\varepsilon\frac{8\alpha}{\sqrt{2\pi}}e^{\alpha R'}\left[\frac{e^{\alpha R'}}{(\mathbf{p}^2+4\alpha^2)^2}-\frac{1}{(\mathbf{p}^2+\alpha^2)^2}\right]. \tag{11}$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Milloux H., Pisot C., Traité de théorie des functions I, Fasc. 1. Paris, 1953.
2. Рисс Ф., Секефальви-Надь Б., Лекции по функциональному анализу.
3. Schwartz L., Théorie des distributions, vol. 2, 2-e ed., Hermann, Paris, 1959.
4. Van Hove L., *Physica,* **15** (1949), 951.
5. Van Hove L., *Physica,* **16** (1950), 137.
6. Yang C. N., Lee T. D., *Phys. Rev.,* **87** (1952), 404.
7. Wilten L., *Phys. Rev.,* **93** (1954), 1131.