

О. Л. Ребенко, В. А. Болух

## Про нову форму запису розкладів Майєра

*(Представлено членом-кореспондентом НАН України А. Г. Нікітіним)**Розглянуто нескінченну систему точкових частинок у рамках класичної статистичної механіки. Побудовано нові розклади для термодинамічних потенціалів статистичної механіки, які дають можливість покращити радіус збіжності розкладів Майєра.***Ключові слова:** термодинамічні потенціали, розклад Майєра.

Дослідження термодинамічних потенціалів є основним математичним засобом для розуміння природи фазових переходів у системах взаємодіючих частинок. Математичні аспекти дослідження нескінченних систем точкових частинок описані в роботах [1–3]. У цій роботі запропонована нова форма запису розкладів Майєра для термодинамічних потенціалів нескінченних систем статистичної механіки. Ідея полягає в тому, щоб розділити додатну і від’ємну частини потенціалу взаємодії між частинками і побудувати розклад тільки за функціями Урселла від’ємної частини, яка інтегрується за мірою Гіббса, що визначається додатною частиною потенціалу. Такий запис дає можливість покращити радіус збіжності розкладів Майєра і дослідити деякі нові властивості термодинамічних потенціалів.

**1. Простори конфігурацій системи частинок та їх взаємодія.** Визначимо простір конфігурацій (множину положень частинок) в  $\mathbb{R}^d$  як множину локально скінченних підмножин:

$$\Gamma = \Gamma_{\mathbb{R}^d} := \{\gamma \subset \mathbb{R}^d \mid |\gamma \cap \Lambda| < \infty, \quad \text{для всіх} \quad \Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)\}, \quad (1)$$

де  $|A| := \text{card}\{A\}$  — кількість точок множини  $A$ , а через  $\mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$  будемо позначати систему всіх обмежених борелівських множин в  $\mathbb{R}^d$ . Позначимо через  $\Gamma_0$  і  $\Gamma_\Lambda$  множини скінченних конфігурацій відповідно в  $\mathbb{R}^d$  і в  $\Lambda \in \mathcal{B}_c(\mathbb{R}^d)$ , а через  $\sigma$  — міру Лебега на  $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d))$ . Мірою Лебега–Пуассона будемо називати  $\sigma$ -скінченну міру  $\lambda_\sigma$  на  $\Gamma_0$ , яка визначається формулою

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_0} F(\gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\mathbb{R}^d} \dots \int_{\mathbb{R}^d} F(\{x_1, \dots, x_n\}) \sigma(dx_1) \dots \sigma(dx_n) = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\mathbb{R}^d} \dots \int_{\mathbb{R}^d} F_n(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n, \end{aligned} \quad (2)$$

для всіх вимірних функцій  $F = \{F_n\}_{n \geq 0}$ ,  $F_n \in L^1(\mathbb{R}^{dn})$ . Звуження міри  $\lambda_\sigma$  на  $\mathcal{B}(\Gamma_\Lambda)$  ми також будемо позначати  $\lambda_\sigma \equiv \lambda_\sigma^\Lambda$ , але всі інтеграли за простором  $\mathbb{R}^d$  треба замінити інтегралами за  $\Lambda$ .

Потенціальну енергію довільної конфігурації  $\gamma \in \Gamma_0$  для частинок, взаємодію яких описує парний потенціал  $\phi$ , записують таким чином:

$$U(\gamma) = U_\phi(\gamma) := \sum_{\{x,y\} \subset \gamma} \phi(|x-y|) := \sum_{\{x,y\} \subset \gamma} \phi_{xy}. \quad (3)$$

Будемо розглядати мінімальні обмеження на потенціал  $\phi$ : *стійкість* і *регулярність* (див., наприклад, [1, §§3.1–3.2]), а його графічне зображення буде мати вигляд потенціалу Ленарда–Джонсона.

Позначимо також через  $a_0$  відстань, для якої  $\phi(a_0) = 0$ .

**2. Термодинамічні потенціали.** Термодинамічні потенціали визначають основні макроскопічні характеристики системи: тиск, вільну енергію тощо. Аналітично ці характеристики визначаються за допомогою статистичних сум великого та малого статистичних ансамблів  $Z_\Lambda(z, \beta)$  і  $Z_\Lambda^{(N)}(v, \beta)$ :

$$Z_\Lambda(z, \beta) = \int_{\Gamma_\Lambda} e^{-\beta U(\gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \sum_{N \geq 0} z^N \int_{\Gamma_\Lambda^{(N)}} e^{-\beta U(\gamma)} \lambda_{z\sigma}(d\gamma) = \sum_{N \geq 0} z^N Z_\Lambda^{(N)}(v, \beta), \quad (4)$$

де  $z$  — активність,  $v$  — питомий об'єм (об'єм, що припадає на одну частинку) і  $\beta = 1/kT$  — обернена температура системи, такими формулами:

$$f(v, \beta) = -kT \lim_{\substack{N, V \rightarrow \infty \\ V/N \rightarrow v}} \frac{1}{N} \log Z_\Lambda^{(N)}(v, \beta), \quad (5)$$

$$p(z, \beta) := kT \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{R}^d} \frac{1}{V} \log Z_\Lambda(z, \beta). \quad (6)$$

**3. Побудова розкладів Майєра.** Стандартною процедурою є зображення експоненти у виразі (4) у вигляді:

$$e^{-\beta U(\gamma)} = \begin{cases} 1, & \text{для } |\gamma| = 0 \vee 1, \\ \prod_{\{x, y\} \subset \gamma} (C_{xy} + 1), & \text{для } |\gamma| \geq 2. \end{cases} \quad (7)$$

де  $C_{xy} := e^{-\beta \phi_{xy}} - 1$ , і запис її за допомогою функцій Урсела  $\Phi^T(\gamma)$  (див., наприклад, [1, п. 4.4.2]):

$$e^{-\beta U(\gamma)} = \sum_{k=1}^{|\gamma|} \sum_{\{\gamma_1, \dots, \gamma_k\} \subset \gamma}^* \Phi^T(\gamma_1) \dots \Phi^T(\gamma_k), \quad (8)$$

де сума з зірочкою означає підсумовування за усіма розбиттями множини  $\gamma$  на  $k$  непорожніх множин, які не перетинаються між собою:

$$\bigcup_{j=1}^k \gamma_j = \gamma, \quad \gamma_i \cap \gamma_j = \emptyset \quad \text{для всіх } i \neq j, \quad \gamma_i \neq \emptyset, \quad i, j \in \{1, \dots, k\}. \quad (9)$$

Тоді велику статистичну суму  $Z_\Lambda(z, \beta)$  можна записати у вигляді

$$Z_\Lambda(z, \beta) = e^{\Gamma_\Lambda} \int \Phi^T(\gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma). \quad (10)$$

Після підстановки виразу (10) у формулу (6) і з урахуванням визначення міри  $\lambda_\sigma$  (2) отримаємо відомий розклад тиску за степенями активності.

Для побудови розкладу, який ми хочемо розглянути в цій роботі, скористаємося вищенаведеною процедурою тільки для експоненти від енергії, яка враховує лише від'ємну частину потенціалу  $\phi^-$  ( $\phi = \phi^+ + \phi^-$ ), і запишемо її у вигляді

$$e^{-\beta U^-(\gamma)} = \sum_{\eta \subset \gamma} \tilde{F}(\eta), \quad \tilde{F}(\emptyset) = 1, \quad (11)$$

$$\tilde{F}(\eta) = \sum_{k=1}^{|\eta|} \sum_{\{\eta_1, \dots, \eta_k\} \subset \eta}^* F(\eta_1) \dots F(\eta_k), \quad (12)$$

$F(\{x\}) = 0$  і  $F(\eta) = \Phi_-^T(\eta)$  для  $|\eta| \geq 2$ , а вираз для  $\Phi_-^T(\eta)$  відрізняється від функцій Урсеа  $\Phi^T(\eta)$  тим, що в 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

$$Z_\Lambda(z, \beta) = Z_\Lambda^{(+)}(z, \beta) \int_{\Gamma_\Lambda} \sum_{\eta \subset \gamma} \tilde{F}(\eta) \mu_\Lambda^+(d\gamma), \quad (13)$$

де  $\mu_\Lambda^+$  — міра Гіббса в  $\Lambda$ , яка відповідає взаємодії  $\phi^+$ . До правої частини рівності (13) застосуємо формулу (див., наприклад, [4])

$$\int_{\Gamma_\Lambda} \sum_{\eta \subset \gamma} \tilde{F}(\eta) \mu_\Lambda^+(d\gamma) = \int_{\Gamma_\Lambda} \tilde{F}(\eta) \rho^{(+)}(\eta) \lambda_\sigma(d\eta), \quad (14)$$

де  $\rho^{(+)}(\eta)$  — сім'я кореляційних функцій, які відповідають взаємодії  $\phi^+$ . Враховуючи вигляд функції  $\tilde{F}(\eta)$  в (12), підінтегральний вираз в (14) зобразимо у вигляді:

$$\sum_{k=1}^{|\eta|} \sum_{\{\eta_1, \dots, \eta_k\} \subset \eta}^* F(\eta_1) \dots F(\eta_k) \rho^{(+)}(\eta) = \sum_{k=1}^{|\eta|} \sum_{\{\eta_1, \dots, \eta_k\} \subset \eta}^* X(\eta_1) \dots X(\eta_k), \quad (15)$$

де функції  $X$  визначаються з рівняння (15) методом математичної індукції:

$$X(\eta) = \sum_{k=1}^{|\eta|} \sum_{\{\eta_1, \dots, \eta_k\} \subset \eta}^* F(\eta_1) \dots F(\eta_k) \rho^{(+),T}(\eta_1, \dots, \eta_k | \eta), \quad (16)$$

де  $\rho^{(+),T}(\eta_1, \dots, \eta_k | \eta)$  — *узагальнені зв'язні кореляційні функції* [5], які відповідають взаємодії  $\phi^+$ . Вони визначаються як звичайні зв'язні кореляційні функції по відношенню до підмножин  $\eta_1, \dots, \eta_k$  конфігурації  $\eta$ , тобто є звичайними зв'язними кореляційними функціями у випадку, коли кожна з підмножин  $\eta_1, \dots, \eta_k$  містить по одній точці. Враховуючи (15) і теорему 2.1 роботи [6], отримуємо рівність

$$\int_{\Gamma_\Lambda} \tilde{F}(\eta) \rho^{(+)}(\eta) \lambda_\sigma(d\eta) = e^{\int_{\Gamma_\Lambda \setminus \{\emptyset\}} X(\gamma) \lambda_{z\sigma}(d\gamma)}. \quad (17)$$

Згідно з формулами (13)–(17) та визначеннями (6) отримаємо розклад тиску за степенями  $z$ :

$$p(z, \beta) := p^{(+)}(z, \beta) + kT \sum_{n=2}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\mathbb{R}^d} \dots \int_{\mathbb{R}^d} X_n(x_1, \dots, x_n) dx_2 \dots dx_n. \quad (18)$$

Збіжність розкладу (18) впливає з оцінок функцій  $\rho^{(+),T}(\eta_1, \dots, \eta_k | \eta)$  (див. [5]) і внесків  $F(\eta)$  зв'язних графів, побудованих за допомогою функцій  $C_{xy}^-$ , вирішальною властивістю яких є умови

$$C_{xy}^- = 0 \quad \text{при} \quad |x - y| \leq a_0 \quad \text{і} \quad C^-(\beta, a_0) = \int_{\mathbb{R}^d} C_{0x}^- dx < \infty. \quad (19)$$

## Цитована література

1. *Ruelle D.* Statistical Mechanics: Rigorous results. – New York; Amsterdam: Benjamin, 1969. – 219 p.
2. *Minlos R. A.* Introduction to Mathematical Statistical Physics. – Providence, R. I.: AMS, 1999. – 103 p. – (University Lecture Series; Vol. 19).
3. *Petrina D. Ya., Gerasimenko V. I., Malyshev P. V.* Mathematical foundations of classical statistical mechanics. – London; New York: CRC Press, 2002. – 352 p.
4. *Lenard A.* States of classical statistical mechanical systems of infinitely many particles. II // Arch. Ration. Mech. Anal. – 1975. – **59**. – P. 241–256.
5. *Duneau M., Iagolnitzer D., Souillard B.* Decrease Properties of Truncated Correlation Functions and Analyticity Properties for Classical Lattices and Continuous Systems // Commun. Math. Phys. – 1973. – **31**. – P. 191–208.
6. *Boluh V. A., Rebenko A. L.* An exponential representation for some integrals with respect to Lebesgue-Poisson measure // Methods Funct. Anal. and Topol. – 2014. – **20**, No 2. – P. 186–192.

## References

1. *Ruelle D.* Statistical Mechanics: Rigorous results, New York; Amsterdam: Benjamin, 1969.
2. *Minlos R. A.* Introduction to Mathematical Statistical Physics, University Lecture Series, Vol. 19, Providence, R.I.; AMS, 1999.
3. *Petrina D. Ya., Gerasimenko V. I., Malyshev P. V.* Mathematical foundations of classical statistical mechanics, London; New York: CRC Press, 2002.
4. *Lenard A.* Arch. Ration. Mech. Anal., 1975, **59**: 241–256.
5. *Duneau M., Iagolnitzer D., Souillard B.* Commun. Math. Phys., 1973; **31**: 191–208.
6. *Boluh V. A., Rebenko A. L.* Methods Funct. Anal. and Topol., 2014, **20**, No 2: 186–192.

Інститут математики НАН України, Київ

Надійшло до редакції 04.06.2015

**А. Л. Ребенко, В. А. Болух**

## О новой форме записи разложений Майера

Інститут математики НАН України, Київ

*Рассмотрена бесконечная система точечных частиц в рамках классической статистической механики. Построены новые разложения для термодинамических потенциалов статистической механики, которые позволяют улучшить радиус сходимости разложений Майера.*

**Ключевые слова:** термодинамические потенциалы, разложение Майера.

A. L. Rebenko, V. A. Boluh

## On a new form of the Mayer expansion

Institute of Mathematics of the NAS of Ukraine, Kiev

*The infinite system of point particles is considered in the framework of classical statistical mechanics. A new form of the Mayer expansion for thermodynamic potentials of statistical mechanics is presented, which improves the radius of convergence of the previous one.*

**Keywords:** thermodynamic potentials, Mayer expansion.