КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ КЛАССИЧЕСКИХ ГАЗОВ [1,2])

Давид Рюелль

Исследуется предел бесконечной системы корреляционных функций классических систем частиц с попарным центральным взаимодействием. Доказываются свойства аналитичности функции активности, которые влекут за собой существование газообразной фазы и сходимость вириального разложения.

Введение

Цель этой статьи — определение и изучение корреляционных функций для бесконечных систем, изучаемых статистической механикой. Мы используем формализм большого канонического ансамбля и ограничимся классическими системами частиц с потенциалом парного взаимодействия. Такая система будет вести себя при стремлении объема к бесконечности как термодинамическая система, если взаимодействие удовлетворяет определенным условиям. Обычно предполагается существование твердого ядра [3]) ([1], [2]), но на самом деле достаточны более слабые условия [(3), (4)], которые мы формулируем в п. 1 [4]).

В п. 2 вводятся корреляционные функции для конечного объема и показывается, что они удовлетворяют некоторым системам интегральных уравнений. В п. 3 и 4 показывается, что, интерпретируя такую систему уравнений как линейное уравнение в банаховом пространстве, можно совершить предельный переход при бесконечном увеличении объема для достаточно малых значений активности. В п. 5 изучаются свойства корреляционных функций для бесконечного объема и доказывается сходимость вириального разложения (такое доказательство было дано ранее Грюнвальдом [5] для чисто отталкивающего потенциала). В п. 6 рассматривается случай чисто отталкивающего потенциала и даются границы для плотности. Область значения активности, в которой справедливы наши результаты, соответствует части газовой фазы; о других фазах ничего не говорится. Можно отметить, что ограничения, которые мы накладываем на потенциал взаимодействия, очень слабы. С другой стороны, наши результаты не являются наилучшими из возможных. Например, легко видеть, что в случае системы твердых шариков отлично от нуля только конечное число членов в правой части уравнений (3.15) и (3.16), и, следовательно, оценка (3.14) может быть заменена на лучшую. Стоит заметить, что первоначальная идея автора состояла в том, чтобы изучить интегральные уравнения, которым удовлетворяют корреляционные функции, а не установить определенный результат. Оказывается, что эти интегральные уравнения дают средство для исследования свойств непрерывности и аналитичности в статистиче-

---

[1]) Ruelle David, Correlation Functions of Classical Gases, *Ann. of Phys.*, 25, № 1 (1963), 109—120.

[2]) Впервые свойства систем с бесконечным числом частиц, получающихся в результате термодинамического предельного перехода, изучались в работе Н. Н. Боголюбова и Б. И. Хацета «О некоторых математических вопросах теории статистического равновесия», *ДАН СССР*, **66**, № 3 (1949), 321—324. В этой работе для разреженных газов при некоторых естественных предположениях о виде потенциала попарного взаимодействия доказано существование предельных корреляций функций, их единственность и аналитическая зависимость от параметров системы. При тех же условиях показано, что имеет место свойство ослабления корреляции. — *Прим. ред.*

[3]) То есть $U(r) = +\infty$ при $r \leqslant r_0$.— *Прим. ред.*

[4]) См. также [10].

ской механике, и, вероятно, с их помощью можно сделать намного более того, чем содержится здесь[1]).

1. Условия, накладываемые на потенциал

Рассмотрим систему n тождественных частиц в пространстве ν измерений, взаимодействующих с помощью потенциала попарного взаимодействия. В этой статье на потенциал Φ налагаем следующие ограничения.

I. Φ *является вещественной измеримой функцией, зависящей только от* $|\mathrm{x}|$, *ограниченной снизу, но могущей принимать значение* $+\infty$. *Функция* $\exp[-\beta\Phi(\mathrm{x})]-1$ *интегрируема по Лебегу для некоторого* $\beta, \beta>0$:

$$C(\beta)=\int d\mathrm{x}\,|d^{-\beta\Phi(\mathrm{x})}-1|<\infty, \tag{1.1}$$

Будучи верным для некоторого $\beta>0$, неравенство (1.1) выполняется для всех $\beta>0$.

Потенциальная энергия системы из n частиц есть

$$U(x)_n=U(\mathrm{x}_1, \ldots, \mathrm{x}_n)=\sum_{i<j}\Phi(\mathrm{x}_i-\mathrm{x}_j). \tag{1.2}$$

Мы накладываем на функцию $U(x)_n$ следующие ограничения:

II. *Существует постоянная* $B\geqslant 0$, *такая, что для любого положительного целого* n *и любой последовательности* $(\mathrm{x}_i)_{1\leqslant j\leqslant n}$.

$$U(\mathrm{x})_n=U(\mathrm{x}_1, \ldots, \mathrm{x}_n)\geqslant -nB.$$

Если $\Phi(0)<\infty$, то (1.3) выполняется в том и только том случае, если

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\Phi(\mathrm{x}_i-\mathrm{x}_j)\geqslant 0 \tag{1.4}$$

для любого положительного целого n и любой последовательности $(\mathrm{x}_i)_{1\leqslant i\leqslant n}$.

Если $\Phi(0)<\infty$ и Φ полунепрерывна сверху, (1.3) или (1.4) необходимы и достаточны для сходимости ряда, определяющего большую статистическую сумму. В частности, условие II выполняется при любой непрерывной положительно определенной функции (см. [6], формула (VII, 9; 1)) или любой неотрицательной функции их суммы. Потенциалы, удовлетворяющие условиям A_1 и A_2 работы [4], удовлетворяют, следовательно, условию II. Исходя из этого, можно доказать следующее свойство.

Лемма[2]). *Пусть* $\Phi(\mathrm{x})$ — *вещественная измеримая функция, зависящая только от* $|\mathrm{x}|$. *Предполагается, что* Φ *ограничена снизу, но может принимать значение* $+\infty$. *Если существуют положительные константы* $a_1, a_2, C_1, C_2, n_1, n_2$, *такие, что*

$$\Phi(\mathrm{x})>C_1(\mathrm{x}^2)^{-n_1/2} \quad \textit{для } |\mathrm{x}|\leqslant a_1,$$

$$\Phi(\mathrm{x})<C_2(\mathrm{x}^2)^{-n_2/2} \quad \textit{для } |\mathrm{x}|\geqslant a_2,$$

и если $n_1>\nu$, $n_2>\nu$, *то* Φ *удовлетворяют условиям* I *и* II.

---

[1]) Корреляционные уравнения использовались в последнее время при решении очень многих задач статистической физики. Упомянем для примера работы [11]—[13]. Д. Рюелль в ряде работ формализовал такой подход с помощью C^*-алгебр.— *Прим. ред.*

[2]) Это свойство было высказано автору М. Фишером. Я благодарю д-ра Фишера за это сообщение.

Потенциалы с твердым ядром и потенциалы, удовлетворяющие условиям, данным Грюнвальдом (условие теоремы 1, в [1]), также удовлетворяют условию II. Из (1.2) и (1.3) мы получаем

$$\sum_{i=1}^{n}\Big[\sum_{j\neq i}\Phi(\mathbf{x}_j-\mathbf{x}_i)\Big]\geqslant -n\,[2B]. \tag{1.5}$$

Следовательно, для каждого набора из n векторов $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$ существует по крайней мере один индекс i, такой, что

$$\sum_{j\neq i}\Phi(\mathbf{x}_j-\mathbf{x}_i)\geqslant -2B. \tag{1.6}$$

Если $\pi\in\gamma_n$ является перестановкой индексов $(1, \ldots, n)$,

$$\pi(1, \ldots, n)=(i_1, \ldots, i_n), \tag{1.7}$$

то для любой функции $\varphi(\mathrm{x})_n$ положим

$$\pi^{-1}\varphi(\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n)=\varphi(\mathbf{x}_{i_1}, \ldots, \mathbf{x}_{i_n}). \tag{1.8}$$

Тогда из (1.6) следует, что существуют измеримые функции[1] $\theta_i(\boldsymbol{x})_n$, инвариантные относительно евклидовых преобразований, принимающие значения в интервале (0,1) и такие, что

$$\sum_{i=1}^{n}\theta_i(\mathrm{x})_n=1, \quad \pi\theta_k(\mathrm{x})_n=\theta_{i_k}(\boldsymbol{x})_n, \tag{1.9}$$

и (1.6) выполняется, если $\theta_i(\boldsymbol{x})_n\neq 0$ [1]).

II. Корреляционные функции для конечного объема

Пусть Λ — сфера в пространстве R^ν радиуса λ и объема V с центром в начале координат, и пусть $\psi^\lambda(\mathrm{x})$ — ее характеристическая функция. Пусть также

$$\psi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})_n=\psi^{(\lambda)}(\mathbf{x}_1)\ldots\psi^{(\lambda)}(\mathbf{x}_n). \tag{2.1}$$

Если β и z вещественны, $\beta>0$, $z\geqslant 0$, то ряды

$$\Xi^{(\lambda)}=\sum_{s=0}^{\infty}\frac{z^s}{s!}\int d\mathbf{x}_1\ldots d\mathbf{x}_s\,\psi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})_s\exp\left[-\beta U(\boldsymbol{x})_s\right], \tag{2.2}$$

$$\rho^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})_n=(\Xi^{(\lambda)})^{-1}\sum_{s=0}^{\infty}\frac{z^{n+s}}{s!}\int d\mathbf{x}_{n+1}\ldots d\mathbf{x}_{n+s}\psi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})_{n+s}\times$$
$$\times\exp\left[-\beta U(\boldsymbol{x})_{n+s}\right] \tag{2.3}$$

сходятся в силу условия (1.3). Пусть

$$U^{(1)}(\boldsymbol{x})_m=\sum_{i=2}^{m}\Phi(\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_1), \tag{2.4}$$

$$(\boldsymbol{x})'_{m-1}=(\mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_m). \tag{2.5}$$

---

[1]) В самом деле, обозначим через $\eta_i(\mathrm{x})_n$ характеристическую функцию множества, для которого верно неравенство (1.6), и положим

$$\theta_i(\boldsymbol{x})_n=\frac{\eta_i(\boldsymbol{x})_n}{\sum\limits_{i=1}^{n}\eta_i(\boldsymbol{x})_n}.$$ — *Прим. перев.*

Тогда

$$\exp[-\beta U(\boldsymbol{x})_{m+s}] = \exp[-\beta U^{(1)}(\boldsymbol{x})_m] \times$$
$$\times \exp[-\beta U(\boldsymbol{x})'_{m+s-1}] \prod_{j=1}^{s} (1 + \{\exp[-\beta\Phi(\mathbf{x}_{m+j} - \mathbf{x}_1)] - 1\}). \quad (2.6)$$

Полагая $\mathbf{x}_{m+j} = \mathbf{y}_j$, $j = 1, \ldots, s$, и

$$K(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{y})_n = \prod_{j=1}^{n} (\{\exp[-\beta\Phi(\mathbf{y}_j - \mathbf{x}_1)]\} - 1) \quad (2.7)$$

и используя (2.6), перепишем выражение (2.3) для корреляционной функции в виде

$$\rho^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})_m = \psi^{\lambda}(\mathbf{x}_1)\, z \{\exp[-\beta U^{(1)}(\boldsymbol{x})_m]\} (\Xi^{(\lambda)})^{-1} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{z^{m+s-1}}{s!} \times$$
$$\times \int d\mathbf{y}_1 \ldots d\mathbf{y}_s \sum_{n=0}^{s} \frac{s!}{n!(s-n)!} K(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{y})_n \psi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})'_{m+s-1} \exp[-\beta U(\boldsymbol{x})'_{m+s-1}] =$$
$$= \psi^{(\lambda)}(\mathbf{x}_1)\, z \{\exp[-\beta U^{(1)}(\boldsymbol{x})_m]\} (\Xi^{(\lambda)})^{-1} \sum_{s=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{s} \frac{z^{m+s-1}}{n!(s-n)!} \times$$
$$\times \int d\mathbf{y}_1 \ldots d\mathbf{y}_n K(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{y})_n \int d\mathbf{y}_{n+1} \ldots d\mathbf{y}_s \psi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})'_{m+s-1} \times$$
$$\times \exp[-\beta U(\boldsymbol{x})'_{m+s-1}] = \psi^{(\lambda)}(\mathbf{x}_1) z \{\exp[-\beta U^{(1)}(\boldsymbol{x})_m]\} [(\Xi^{(\lambda)})^{-1} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{z^{m+s-1}}{s!} \times$$
$$\times \int d\mathbf{y}_1 \ldots d\mathbf{y}_s \psi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})'_{m+s-1} \{\exp - \beta U(\boldsymbol{x})'_{m+s-1}]\} +$$
$$+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d\mathbf{y}_1 \ldots d\mathbf{y}_n K(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{y})_n (\Xi^{(\lambda)})^{-1} \sum_{s=n}^{\infty} \frac{z^{m+s-1}}{(s-n)!} \times$$
$$\times \int d\mathbf{y}_{n+1} \ldots d\mathbf{y}_s \psi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})'_{m+s-1} \exp[-\beta U(\boldsymbol{x})'_{m+s-1}]]. \quad (2.8)$$

Последняя формула в (2.8) получена после перемены порядка суммирования и интегрирования. Эти операции законны ввиду равномерной и абсолютной сходимости, которая является следствием условия (1.3). Наконец, применяя (2.3), мы получим

$$\rho^{(\lambda)}(\mathbf{x}_1) = \psi^{(\lambda)}(\mathbf{x}_1)\, z \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d\boldsymbol{y} K(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{y})_n \rho^{(\lambda)}(\boldsymbol{y})_n\right], \quad (2.9)$$

$$\rho^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})_m = \psi^{(\lambda)}(\mathbf{x}_1)\, z \{\exp[-\beta U^{(1)}(\boldsymbol{x})_m]\} \times$$
$$\times \left[\rho^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})'_{m-1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d\boldsymbol{y} K(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{y})_n \rho^{(\lambda)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})'_{m+n-1}\right], \quad (2.10)$$

где (2.10) выполняется для $m > 1$. Это — хорошо известные уравнения Кирквуда — Зальцбурга (см. [7] стр. 251), на которых и будут главным образом основываться наши рассуждения.

Мы будем пользоваться также другими уравнениями, выведенными Майером и Монтролем (см. [8], формулу (59′)), которые могут быть получены в основном таким же образом. Вот эти уравнения:

$$\rho^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})_m = \psi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})_m z^m \{\exp[-\beta U(\boldsymbol{x}_m]\} \times$$
$$\times \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d\boldsymbol{y} K(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})_{mn} \rho^{(\lambda)}(\boldsymbol{y})_n\right], \tag{2.11}$$

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y})_{mn} = \prod_{j=1}^{n} \left(\sum_{i=1}^{m} \{\exp[-\beta\Phi(\mathbf{y}_j - \mathbf{x}_i)]\} - 1\right). \tag{2.12}$$

Заметим, что из формул (2.3) и (1.3) получаются оценки

$$\rho^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})_n < (\Xi^{(\lambda)})^{-1} \exp[zVe^{\beta B}] (ze^{\beta B})^n. \tag{2.13}$$

III. Пространства E_ξ

Пусть ξ — любое положительное число, и пусть φ есть набор функций $\varphi(\boldsymbol{x})_n = \varphi(\mathrm{x}_1, \ldots, \mathrm{x}_n) \in L^\infty(R^{n\nu})$, $n = 1, 2, \ldots$ Векторное пространство E_ξ всех φ, для которых

$$\|\varphi\|_\xi = \sup_n (\xi^{-n} \operatorname*{ess\,sup}_x |\varphi(\boldsymbol{x})_n|) < +\infty, \tag{3.1}$$

есть банахово пространство с нормой $\|\varphi\|_\xi$.

Пусть E есть объединение пространства E_ξ для всех положительных ξ, и пусть $\theta(\boldsymbol{x})_n$ — характеристическая функция носителя функции $\theta_1(\boldsymbol{x})_n$, введенной в п. I. Мы определим операторы $\Psi^{(\lambda)}$ и Θ в E следующими формулами (см. (2.1)):

$$(\Psi^{(\lambda)}\varphi)(\boldsymbol{x})_n = \psi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})_n \varphi(\boldsymbol{x})_n, \tag{3.2}$$

$$(\Theta\varphi)(\boldsymbol{x})_n = \theta(\boldsymbol{x})_n \varphi(\boldsymbol{x})_n. \tag{3.3}$$

Пусть $\pi_1, \ldots, \pi_n$ — циклические перестановки последовательности $(1, \ldots, n)$; мы можем определить линейный оператор Π, действующий из ΘE в E, формулой

$$(\Pi\varphi)(\boldsymbol{x})_n = \sum_{i=1}^{n} \pi_i [\theta_1(\boldsymbol{x})_n \varphi(\boldsymbol{x})_n]. \tag{3.4}$$

$\Psi^{(\lambda)}$ и Θ являются, очевидно, идемпотентными (проектирующими) операторами и индуцируют отображение единичной нормы каждого E_ξ в себя. Оператор Π индуцирует отображение единичной нормы ΘE_ξ в E_ξ. Оператор $\Psi^{(\lambda)}$ коммутирует с операторами Θ и Π. Мы можем также определить линейный оператор K в пространстве E

$$(K\varphi)(\mathrm{x}_1) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d\boldsymbol{y} K(\mathrm{x}_1, \boldsymbol{y})_n \varphi(\boldsymbol{y})_n, \tag{3.5}$$

$$(K\varphi)(\boldsymbol{x})_m = \{\exp[-\beta U^{(1)}(\boldsymbol{x})_m]\} [\varphi(\boldsymbol{x})'_{m-1} +$$
$$+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d\boldsymbol{y} K(\mathrm{x}_1, \boldsymbol{y})_n \varphi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})'_{m+n-1}], \tag{3.6}$$

где (3.6) выполняется для $m > 1$.

В самом деле, из (1.1) и (1.3) следует, что функция $\Phi(\mathbf{x})$ ограничена снизу числом $-2B$, поэтому для любого вектора $\varphi \in E_\xi$, $\|\varphi\|_\xi \leqslant 1$,

$$\operatorname{ess\cdot sup}_{x} |(K\varphi)(x)_m| \leqslant e^{2m\beta B}\xi^{m-1}\exp(C(\beta)\xi). \tag{3.7}$$

Наконец, для любого комплексного z мы определим вектор α в пространстве E соотношением

$$\alpha(\mathbf{x}_1) = z, \quad \alpha(x)_n = 0 \quad \text{для} \quad n > 1. \tag{3.8}$$

Вектор α принадлежит, следовательно, каждому E_ξ. В силу этих обозначений мы можем переписать (2.9) и (2.10) в виде

$$\rho^{(\lambda)} = \Psi^{(\lambda)}\alpha + \Psi^{(\lambda)}zK\rho^{(\lambda)}. \tag{3.9}$$

Из этого следует

$$\rho^{(\lambda)} = \Pi\Theta\rho^{(\lambda)} = \Psi^{(\lambda)}\alpha + \Psi^{(\lambda)}z\Pi\Theta K\rho^{(\lambda)}. \tag{3.10}$$

Пользуясь (1.6), мы находим, что если $\varphi \in E_\xi$, $\|\varphi\|_\xi \leqslant 1$,

$$\xi^{-n}\operatorname{ess\cdot sup}_{x} |(\Theta K\varphi)(x)_n| \leqslant e^{2\beta B}\xi^{-1}\exp(C(\beta)\xi). \tag{3.11}$$

Следовательно, для любого комплексного z оператор $z\Pi\Theta K$ индуцирует на каждом E_ξ отображение $\mathscr{K}$ с нормой

$$k = \|\mathscr{K}\| \leqslant e^{2\beta B}|z|\xi^{-1}\exp(C(\beta)\xi). \tag{3.12}$$

Если мы выберем ξ и z таким образом, что

$$|z| < \xi e^{-2\beta B}\exp(-C(\beta)\xi), \tag{3.13}$$

или если положить в (3.13) $\xi = (C(\beta))^{-1}$,

$$|z| < e^{-2\beta B-1}(C(\beta))^{-1}, \tag{3.14}$$

то $k < 1$ и каждое из следующих уравнений:

$$\rho^{(\lambda)} = \Psi^{(\lambda)}\alpha + \Psi^{(\lambda)}\mathscr{K}\rho^{(\lambda)}, \tag{3.15}$$

$$\rho = \alpha + \mathscr{K}\rho \tag{3.16}$$

имеет единственное решение в E_ξ.

Пусть теперь $\xi = (C(\beta))^{-1}$ и z меняется в круге (3.14) (можно было бы взять другое значение ξ и заключить z в меньшую область). Тогда α и K являются голоморфными функциями от z в круге (3.14) со значениями в E_ξ и в банаховом пространстве ограниченных операторов в E_ξ соответственно (см. 3 гл. III, § 2 и гл. IV, § 1, 6). Следовательно, также и решения уравнений (3.15) и (3.16) являются голоморфными в области (3.14) со значениями в E_ξ. Заметим, что вследствие (3.9) и (2.13) функция $\rho^{(\lambda)}$, определенная формулой (2.3), совпадает с решением уравнения (3.15) для действительных неотрицательных z, меньших, чем $e^{-2\beta B}(C(\beta))^{-1}$, что оправдывает наши обозначения. Из (2.2) и (2.3) мы получаем

$$\int d\mathbf{x}_1\rho^{(\lambda)}(\mathbf{x}_1) = (\Xi^{(\lambda)})z^{-1}\sum_{s=1}^{\infty}\frac{z^{s-1}}{(s-1)!}\times$$

$$\times\int d\mathbf{x}_1\ldots d\mathbf{x}_s\psi^{(\lambda)}(x)_s\exp[-\beta U(x)_s] = z\frac{d}{dz}\log\Xi^{(\lambda)}. \tag{3.17}$$

Так как $\Xi^{(\lambda)}$ является целой функцией от z, принимающей значение 1 в точке $z=0$, аналитическое продолжение (3.17) показывает, что $\Xi^{(\lambda)}$ не имеет нулей в области (3.14). Поэтому с помощью аналитического продолжения мы убеждаемся, что (2.3) и (3.15) дают эквивалентные определения $\rho^{(\lambda)}$ во всей области (3.14).

IV. Предел при бесконечном увеличении объема

Пусть z и ξ фиксированы и удовлетворяют (3.13). Если $0<\varepsilon<\delta'\leqslant+\infty$, мы имеем

$$0\leqslant\psi^{(\lambda+\delta')}(\boldsymbol{y})_n-\psi^{(\lambda+\delta)}(\boldsymbol{y})_n\leqslant\sum_{j=1}^{n}(1-\psi^{(\lambda+\delta)}(\boldsymbol{y}_j)). \tag{4.1}$$

Следовательно, согласно (2.7) и (1.1), если $\varphi\in E_\xi$ и $\|\varphi\|\leqslant 1$, то

$$\begin{aligned}\operatorname{ess\cdot sup}_x\Big|\psi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})_m\int d\boldsymbol{y}K(\mathrm{x}_1,\boldsymbol{y})_n(\psi^{(\lambda+\delta')}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})'_{m+n-1}-\\-\psi^{(\lambda+\delta)}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})'_{m+n-1})\,\varphi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})'_{m+n-1}\Big|\leqslant\\ \leqslant\xi^{m+n-1}\psi^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})_m\int d\boldsymbol{y}\,|K(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{y})_n|\,(\psi^{(\lambda+\delta')}(\boldsymbol{y})_n-\psi^{(\lambda+\delta)}(\boldsymbol{y})_n)\leqslant\\ \leqslant n\xi^{m+n-1}(C(\beta))^{n-1}\int d\mathbf{y}\,|\exp[-\beta\Phi(\mathbf{y}-\mathrm{x}_1)-1|\times\\ \times\psi^{(\lambda)}(\mathrm{x})_m(1-\psi^{(\lambda+\delta)}(\mathbf{y}))\leqslant n\xi^{m+n-1}(C(\beta))^{n-1}C^{(\delta)}(\beta),\end{aligned} \tag{4.2}$$

где через $C^{(\delta)}(\beta)$ мы обозначили величину

$$C^{(\delta)}(\beta)=\int d\mathrm{x}\,(1-\psi^{(\delta)}(\mathrm{x}))\,|\exp[-\beta\varphi(\mathrm{x})]-1\,|. \tag{4.3}$$

Поэтому, в силу (3.5) и (3.6)

$$\begin{aligned}\operatorname{ess\cdot sup}_x[(\Psi^{(\lambda)}\mathscr{K}\Psi^{(\lambda+\delta')}-\Psi^{(\lambda)}\mathscr{K}\Psi^{(\lambda+\delta)})\,\varphi](\boldsymbol{x})_m\leqslant\\ \leqslant|z|\,e^{2\beta B}\exp(C(\beta)\,\xi)\,C^{(\delta)}(\beta)\,\xi^m.\end{aligned} \tag{4.4}$$

Так как $C^{(\delta)}(\beta)\to 0$ при $\delta\to\infty$, для каждого $\eta>0$ можно выбрать δ настолько большим, что

$$\|\Psi^{(\lambda)}\mathscr{K}\Psi^{(\lambda+\delta')}-\Psi^{(\lambda)}\mathscr{K}\Psi^{(\lambda+\delta)}\|<\eta. \tag{4.5}$$

Из соотношений

$$\left.\begin{aligned}\|\Psi^{(\lambda+l\delta)}\mathscr{K}\Psi^{(\lambda+j\delta)}-\Psi^{(\lambda+l\delta)}\mathscr{K}\Psi^{(\lambda+(l+1)\delta)}\|<\eta,\\ \|\Psi^{(\lambda+l\delta)}\mathscr{K}-\Psi^{(\lambda+l\delta)}\mathscr{K}\Psi^{(\lambda+(l+1)\delta)}\|<\eta\end{aligned}\right\} \tag{4.6}$$

получаем соответственно

$$\left.\begin{aligned}\|\Psi^{(\lambda)}(\mathscr{K}\Psi^{(\lambda+j\delta)})^j-\Psi^{(\lambda)}\mathscr{K}\Psi^{(\lambda+\delta)}\mathscr{K}\Psi^{(\lambda+2\delta)}\ldots\mathscr{K}\Psi^{(\lambda+j\delta)}\|\leqslant\\ \leqslant(j-1)\,\eta k^{j-1},\\ \|\Psi^{(\lambda)}\mathscr{K}\Psi^{(\lambda+\delta)}\mathscr{K}\Psi^{(\lambda+2\delta)}\ldots\mathscr{K}\Psi^{(\lambda+j\delta)}-\Psi^{(\lambda)}\mathscr{K}^j\|<j\eta k^{j-1}.\end{aligned}\right\} \tag{4.7}$$

Следовательно,

$$\|\Psi^{(\lambda)}(\Psi^{(\lambda+j\delta)}\mathscr{K})^j\,\Psi^{(\lambda+j\delta)}-\Psi^{(\lambda)}\mathscr{K}^j\|<2j\eta^{j-1}. \tag{4.8}$$

Имеем также

$$\begin{aligned}\Big\|\Psi^{(\lambda)}\Big[(1-\Psi^{(\lambda-l\delta)}\mathscr{K})^{-1}-\Big(1+\sum_{j=1}^{l}(\Psi^{(\lambda+l\delta)}\mathscr{K})^j\Big)\Big]\Psi^{(\lambda+l\delta)}\Big\|\leqslant\\ \leqslant\frac{k^{l+1}}{1-k}\Big\|\Psi^{(\lambda)}\Big[(1-\mathscr{K})^{-1}-\Big(1+\sum_{j=1}^{l}\mathscr{K}^j\Big)\Big]\Big\|\leqslant\frac{k^{l+1}}{1-k}.\end{aligned} \tag{4.9}$$

Заменяя δ на $l\delta/j$ в (4.8) для $j=1,\dots,l$ и применяя (4.9), находим

$$\|\Psi^{(\lambda)}(1-\Psi^{(\lambda+l\delta)}\mathscr{K})^{-1}\Psi^{(\lambda+l\delta)}-\Psi^{(\lambda)}(1-\mathscr{K})^{-1}\|<\frac{2k^{l+1}}{1-k}+$$

$$+2\eta\sum_{j=1}^{l}jk^{j-1}<\frac{2k^{l+1}}{1-k}+\frac{2\eta}{(1-k)^2}. \tag{4.10}$$

Правая часть неравенства (4.10) может быть сделана произвольно малой, если выбрать l и δ достаточно большими. Поэтому существует функция $\varepsilon(\delta)>0$, не зависящая от λ и такая, что

$$\lim_{\delta\to\infty}\varepsilon(\delta)=0, \tag{4.11}$$

$$\|\Psi^{(\lambda)}(1-\Psi^{(\lambda+\delta)}\mathscr{K})^{-1}\Psi^{(\lambda+\delta)}-\Psi^{(\lambda)}(1-\mathscr{K})^{-1}\|<\varepsilon(\delta)/\|\alpha\| \tag{4.12}$$

и, следовательно, в силу (3.15) и (3.16)

$$\|\Psi^{(\lambda)}\rho^{(\lambda+\delta)}-\Psi^{(\lambda)}\rho\|<\varepsilon(\delta). \tag{4.13}$$

Мы можем объединить наши результаты в следующую теорему.

Теорема 1. *Пусть функции* $\rho^{(\lambda)}(x)_n$ *определены формулой* (2.3) *при фиксированном положительном* β *и комплексном* z, *таких, что* $|z|<e^{-2\beta B-1}(C(\beta))^{-1}$. *Тогда существуют функции* $\rho(x)_n$, *определяемые как решение уравнения* (3.16), *которые являются предельными для корреляционных функций* $\rho^{(\lambda)}(x)_n$ *в следующем смысле: для фиксированного* ξ, $\xi e^{-2\beta B}\exp(-C(\beta)\xi)>|z|$, *существует функция* $\varepsilon(\delta)>0$, *такая, что* $\lim_{\delta\to\infty}\varepsilon(\delta)=0$, *и для всех целых положительных* n

$$|\rho^{(\lambda+\delta)}(x)_n-\rho(x)_n|<\xi^n\varepsilon(\delta), \tag{4.14}$$

если $x_1,\dots,x_n$ *принадлежат сфере* Λ *радиуса* λ *с центром в начале.*

Из теоремы I и равенства (2.11) можно получить следующее выражение для предельных корреляционных функций:

$$\rho(x)_m=z^m\{\exp[-\beta U(x)_m]\}\left[1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\int dyK(x,y)_{mn}\rho(y)_n\right]. \tag{4.15}$$

Для этого достаточно использовать неравенство типа (4.2) и тот факт, что векторы $\rho^{(\lambda)}$ и ρ имеют конечную норму в пространстве E_ξ.

V. Свойства корреляционных функций и вириальное разложение

Мы изучим теперь свойства корреляционных функций, определенных в области

$$|z|<e^{-2\beta B-1}(C(\beta))^{-1}. \tag{5.1}$$

Из (2.3) и теоремы 1 следует, что $\rho(x)_n$ для действительных и неотрицательных значений z неотрицательна.

Для комплексных z мы имеем следующие свойства инвариантности функций $\rho(x)_n$: а) они симметричны относительно аргументов $x_1,\dots,x_n$; b) так как уравнение (3.16) инвариантно относительно евклидовых преобразований, то и функции $\rho(x)_n$ обладают этим свойством. Другими словами, если R — ν-мерное вращение и $\mathbf{a}$ — любой вектор, то

$$\rho(x_1,\dots,x_n)=\rho(Rx_1+\mathbf{a},\dots,Rx_n+\mathbf{a}). \tag{5.2}$$

В частности, $\rho(\mathrm{x}_1)$ является постоянной:

$$\rho(\mathrm{x}_1) = \frac{1}{v}, \tag{5.3}$$

а $\rho(\mathrm{x}_1, \mathrm{x}_2)$ есть функция только от $|\mathrm{x}_2 - \mathrm{x}_1|$. Возьмем теперь $\xi = (C(\beta))^{-1}$, из (3.16) и (3.12) следует

$$\rho^{(\lambda)}(\mathrm{x}_1) \leqslant \xi/(1-k). \tag{5.4}$$

Поэтому (5.3) и (3.17) дают

$$\left| \frac{z}{V}\frac{d}{dz}\log \Xi^{(\lambda+\delta)} - \frac{1}{v} \right| \leqslant \frac{1}{V}\int d\mathrm{x}_1 \left| \rho^{(\lambda+\delta)}(\mathrm{x}_1) - \psi^{(\lambda)}(\mathrm{x}_1)\rho(\mathrm{x}_1) \right| =$$
$$= \frac{1}{V}\int d\mathrm{x}_1 (1-\psi^{(\lambda)}(\mathrm{x}_1)) \left| \rho^{(\lambda+\delta)}(\mathrm{x}_1) \right| + \frac{1}{V}\int d\mathrm{x}_1 \psi^{(\lambda)}(\mathrm{x}_1) \left| \rho^{(\lambda+\delta)}(\mathrm{x}_1) - \rho(\mathrm{x}_1) \right| \leqslant$$
$$\leqslant \frac{1}{V}\frac{\xi}{1-k}\int d\mathrm{x}_1 (\psi^{(\lambda+\delta)}(\mathrm{x}_1) - \psi^{(\lambda)}(\mathrm{x}_1)) + \xi\epsilon(\delta). \tag{5.5}$$

Выбирая сначала δ, затем λ достаточно большими, получим, что

$$\lim_{\lambda\to\infty} \frac{z}{V}\frac{d}{dz}\log \Xi^{(\lambda)} = \frac{1}{v}, \tag{5.6}$$

где сходимость равномерна на компактах в (5.1). Интегрируя по z, находим:

Исключив z, можно выразить βp как сходящийся степенной ряд от $1/v$ в окрестности начала. Это есть хорошо известное вириальное разложение.

Теорема 2. *Функция* $\frac{1}{V}\log \Xi^{(\lambda)}$ *является аналитической функцией z в области $|z| < e^{-2\beta B-1}(C(\beta))^{-1}$ и сходится равномерно на компактах при $\lambda \to \infty$.*

Ее предел, очевидно, интерпретируется как аналитическое продолжение βp, где p — давление. Таким же образом предел $\lim\limits_{\lambda\to\infty} \frac{1}{V} z \frac{d}{dz}\log \Xi^{(\lambda)}$ есть аналитическое продолжение плотности $1/v$.

Мы закончим этот параграф доказательством непрерывности функции $\rho(x)_n$. Из (4.15) следует, что

$$\rho(x)_m = z^m \{\exp[-\beta U(x)_m]\}\,\sigma(x)_m, \tag{5.7}$$

где

$$\sigma(x)_m = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}\int dy K(x, y)_{mn}\rho(y)_n. \tag{5.8}$$

Из формулы (2.12) следует, что отображение

$$(x)_m \to \varkappa,\quad \varkappa(y)_n = \frac{1}{n!}K(x, y)_{mn} \tag{5.9}$$

пространства $R^{m\nu}$ в пространство, двойственное пространству E_ξ, непрерывно. Следовательно, $\sigma(x)_m$ есть непрерывная функция своих аргументов.

VI. Случай неотрицательного потенциала

В этом пункте мы предположим, что Φ — неотрицательная функция. Наши результаты могут быть тогда кое-где упрощены (например, полагая везде $B=0$) и уточнены. Используя в формуле (2.3) тот факт, что $\exp[-\beta\Phi(\mathrm{x}_j - \mathrm{x}_i)] \leqslant 1$ для $1 \leqslant i \leqslant n$, $n < j \leqslant n+s$, мы получим для действительных неотрицательных z

$$\rho^{(\lambda)}(\boldsymbol{x})_n \leqslant z^n \exp[-\beta U(\boldsymbol{x})_n]. \tag{6.1}$$

Поэтому по теореме 1

$$\rho(\boldsymbol{x})_m \leqslant z^m \exp[-\beta U(\boldsymbol{x})_m] \leqslant z^m \tag{6.2}$$

для $0 \leqslant z < e^{-1}(C(\beta))^{-1}$. Первая компонента уравнения (3.16) есть

$$\frac{1}{v} = \rho(\mathrm{x}_1) = z\left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d\boldsymbol{y} K(\mathrm{x}_1, \boldsymbol{y})_n \rho(\boldsymbol{x})_n\right], \tag{6.3}$$

где члены ряда имеют чередующиеся знаки. Следовательно, применяя (6.2), находим

$$z\left[(1 - \operatorname{sh}(C(\beta) z) + C(\beta) z) - \frac{1}{v} C(\beta)\right] \leqslant \frac{1}{v} \leqslant \leqslant z\left[\operatorname{ch}(C(\beta) z) - \frac{1}{v} C(\beta)\right]. \tag{6.4}$$

Отсюда

$$z(1 + C(\beta) z)^{-1}(1 - \operatorname{sh}(C(\beta) z) + C(\beta) z) \leqslant \frac{1}{v} \leqslant \leqslant z(1 + C(\beta) z)^{-1} \operatorname{ch}(C(\beta) z). \tag{6.5}$$

Из (5.6) следует, что $1/v$ является неубывающей функцией от z и, следовательно, v имеет предел v_0, когда $z \to e^{-1}(C(\beta))^{-1}$. В силу (6.5) этот предел удовлетворяет неравенству

$$3{,}4C(\beta) < (1 + e)[\operatorname{ch} e^{-1}]^{-1} C(\beta) \leqslant v_0 \leqslant \leqslant (1 + e)[1 + e^{-1} - \operatorname{sh} e^{-1}]^{-1} C(\beta) \leqslant 3{,}8C(\beta). \tag{6.6}$$

Из (6.6) следует, что наше описание системы верно для значений плотности в промежутке от нуля и по крайней мере до значения $[3{,}8C(\beta)]^{-1}$. В случае системы твердых шариков [$\Phi(\mathrm{x}) = +\infty$ для $|\mathrm{x}| < a$, $\Phi(\mathrm{x}) = 0$ для $|\mathrm{x}| > a$], $C(\beta) = C$ есть объем шара радиуса a («исключенный объем») и является верхней границей удельного объема наиплотнейшей упаковки шариков (радиуса $a/2$) при любой размерности ν.

В самом деле, пусть Λ — область объема V. Если n — максимальное число точек с взаимными расстояниями, не меньшими чем a, которые могут быть помещены в Λ, то nC не может быть меньше, чем V. Следовательно, $V/n \leqslant C$.

Заметим, что $3{,}8C$ становится меньше, чем удельный объем упакованных в куб шариков (радиуса $a/2$), если ν достаточно велико.

ЛИТЕРАТУРА

1. Van Hove L., *Physica* **15** (1949), 951.
2. Yang C. N., Lee T. D., *Phys. Rev.*, **87** (1952), 404.
3. Witten L., *Phys. Rev.*, **93** (1954), 1131.
4. Ruelle D., *Helv. Phys. Acta*, **36** (1963), 183.
5. Groeneveld J., *Phys. Letters*, **3** (1962), 50.
6. Schwartz L., Théorie des distributions, 2nd ed., Vol. 2. Hermann, Paris, 1959.
7. Hill T. L., Statistical Mechanics, McGraw-Hill, New York, 1956.
8. Mayer J. E., Montroll E., *J. Chem. Phys.*, **9** (1941), 2.
9. Хилле Э., Филлипс Р., Функциональный анализ и полугруппы, ИЛ, М., 1962.
10. Добрушин Р. Л., Существование конфигурационного интеграла Гиббса, *Теория вер. и ее прим.*, **9** (1964), 626—632.