Proposizione 2.2.7: Se $\Lambda \to \infty$ (Fisher) e

$$\frac{n}{V(\Lambda)} \to L^{-3}\delta, \quad \frac{S}{V(\Lambda)} \to L^{-3}\sigma, \quad \text{per un } (\delta,\sigma)\in\Delta,$$

allora

$$\lim_{\Lambda\to\infty} \frac{E(\Lambda,n,S)}{V(\Lambda)} = L^{-3}\eta(\delta,\sigma).$$

Dimostrazione: (1) $\limsup\limits_{\Lambda\to\infty} \dfrac{E(\Lambda,n,S)}{V(\Lambda)} \leq L^{-3}\eta(\delta,\sigma)$:

$$\delta_0 = \frac{n_0}{8^N}, \quad n = m n_0 + r_0 \quad (m\in\mathbb{N},\ 0\leq r_0 < n_0)$$

$$r_0 = p\, 8^N + r_1 \quad (0 \leq r_1 < 8^N).$$

$$\frac{L_N^3}{n} \to 0 \quad \text{e} \quad \frac{L_N^{3+\varepsilon}}{n} \to +\infty \quad (\Lambda\to\infty).$$

$$\begin{aligned}
E(\Lambda,n,S) &\leq E\Big(\bigcup_{i=1}^{m+p+1}\Lambda_N^{(i)},\ m n_0 + \underbrace{p\,8^N + r_1}_{=r_0},\ S\Big)\\
&\leq m\, E\Big(\Lambda_N, n_0, \tfrac{1}{m}\big(S - r_0 \log V(\Lambda_0)\big)\Big)\\
&\quad + E\Big(\bigcup_{i=m+1}^{m+p+1}\Lambda_N,\ r_0,\ r_0\log V(\Lambda_0)\Big)\\
&\quad + \frac{A}{2} n^2 (3-1)^{-3-\varepsilon} L_N^{-3-\varepsilon}.
\end{aligned}$$

Siccome $r_0 = p\,8^N + r < (p+1)8^N$, possiamo usare lemma 2.2.5(b):

$$\begin{aligned}
E(\Lambda,n,S) &\leq m\, E\Big(\Lambda_N, n_0, \tfrac{1}{m}\big(S - r_0\log V(\Lambda_0)\big)\Big)\\
&\quad + r_0 \frac{A}{2}\sum_{g=0}^{N-1}\frac{8^{g+1}}{R_g^{3+\varepsilon}} + \frac{A}{2} n^2 (3-1)^{-3-\varepsilon} L_N^{-3-\varepsilon}.
\end{aligned}$$

Allora:

$$\begin{aligned}
\frac{E(\Lambda,n,S)}{|\Lambda|} &\leq \underbrace{\frac{n}{|\Lambda|}}_{\to L^{-3}\delta}\Bigg[\underbrace{\frac{m}{n} n_0}_{\to 1}\underbrace{\frac{1}{\delta_0}8^{-N}}_{=1} E\Big(\Lambda_N, n_0, \tfrac{1}{m}\big(S - r_0\log V(\Lambda_0)\big)\Big)\\
&\quad + \frac{r_0}{n}\frac{A}{2}\sum_{g=0}^{N-1}\frac{8^{g+1}}{R_g^{3+\varepsilon}} + \frac{A}{2}(3-1)^{-3-\varepsilon}\frac{n}{L_N^{3+\varepsilon}}\Bigg].
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \limsup_{\Lambda\to\infty}\frac{E(\Lambda,n,S)}{|\Lambda|} \leq L^{-3}\delta\frac{1}{\delta_0}\eta\Big(\delta_0, \frac{\delta_0}{\delta}\sigma\Big)$$

$$\Rightarrow \limsup_{\Lambda\to\infty}\frac{E(\Lambda,n,S)}{|\Lambda|} \leq L^{-3}\eta(\delta,\sigma).$$

(2) $\liminf\limits_{\Lambda\to\infty} \dfrac{E(\Lambda,n,S)}{|\Lambda|} \geq L^{-3}\,\psi(\delta,\sigma)$:

Scegliamo $\delta_1 = 2^{-q}p$, come approssimazione a δ.

Convergenza nel senso di Fisher implica che esiste $C'>0$ ed esiste $N'\in\mathbb{N}$ tale che:

- $\Lambda_{N'}$ contiene un Λ' che un traslato Λ
- $C' \leq \dfrac{V(\Lambda)}{V(\Lambda_{N'})} \leq \dfrac{1}{2}$. $\quad (\overset{*}{**})$

Possibilmente sostituendo N' con un numero maggiore otteniamo $N'\cdot 3 \geq q$. (dimensione dello spazio: 3)

Così: $\delta_1 = 8^{-N'} n_1 \quad (n_1 = p\,2^{(3N'-q)})$.

Ricordiamo: con $\Phi(q) \leq \dfrac{A}{|q|^{3+\varepsilon}}$, $\theta \in \left(2^{\frac{3}{3+\varepsilon}}, 2\right)$:

$$\Lambda'' := \{x \in \Lambda_{N'} : dist(x,\Lambda') > \theta^{N'}R\}.$$

Con la convergenza di Fisher si ottiene:

$$\lim_{\Lambda\to\infty} \frac{V(\Lambda)+V(\Lambda'')}{V(\Lambda_{N'})} = 1.$$

Usando il solito ragionamento (Lemma 2.2.1(b), Lemma 2.2.2(a)) otteniamo:

$$E(\Lambda_{N'}, 8^{N'}\delta_1, 8^{N'}\sigma) \leq E(\Lambda,n,S) + E(\Lambda'', n_1-n, 8^{N'}\sigma - S) + \frac{A}{2}\, n_1 (\theta^{N'}R)^{-3-\varepsilon}.$$

Dividiamo per $|\Lambda|$, prendiamo il limite $\Lambda\to\infty$, e ricordiamo che $N'\to\infty$ (se $\Lambda\to\infty$):

$$\liminf_{\Lambda\to\infty} \frac{E(\Lambda,n,S)}{V(\Lambda)} \geq \liminf_{\Lambda\to\infty} \Bigg[\frac{V(\Lambda_{N'})}{V(\Lambda)} \left(L^{-3}8^{-N'}E(\Lambda_{N'}, 8^{N'}\delta_1, 8^{N'}\sigma)\right) - \frac{V(\Lambda_{N'})-V(\Lambda)}{V(\Lambda)} \left(\frac{E(\Lambda'', n_1-n, 8^{N'}\sigma - S)}{V(\Lambda'')} \right) \Bigg]$$

Usando Lemma 2.2.3 [limite sui cubi diadici]: con $(\overset{*}{**})$, e poi $\delta_1 \to \delta$: $\liminf_{\Lambda\to\infty} \frac{E(\Lambda,u,S)}{V(\Lambda)} \geq L^{-3} y(\delta,\sigma)$.

(1) e (2) insieme:

$$\limsup_{\Lambda\to\infty} \frac{E(\Lambda,u,S)}{|\Lambda|} \leq L^{-3} y(\delta,\sigma) \leq \liminf_{\Lambda\to\infty} \frac{E(\Lambda,u,S)}{|\Lambda|}.$$

$\blacksquare$

Ricordiamo: Da lemma 2.2.3: $y(\delta,\sigma) = +\infty$ se e solo se $E(\Lambda_N, 8^N\delta, 8^N\sigma) = +\infty$ $\forall N \in \mathbb{N}$.

<u>Proposizione 2.2.8:</u> Sia $\Lambda \to \infty$ (Fisher),
$u/V(\Lambda) \to L^{-3}\delta$, $S/V(\Lambda) \to L^{-3}\sigma$. Allora:

(a) Se $(\delta,\sigma) \notin \overline{\Delta}$: allora $\lim_{\Lambda\to\infty} \frac{E(\Lambda,u,S)}{V(\Lambda)} = +\infty$.

(b) Se $(\delta,\sigma) \in \partial\Delta$, allora: $\liminf_{\Lambda\to\infty} \frac{E(\Lambda,u,S)}{V(\Lambda)} \geq y^*(\delta,\sigma)$,

dove $y^*(\delta,\sigma) := \liminf_{n\to\infty} y(\delta_n^*, \sigma_n^*)$ per $(\delta_n^*, \sigma_n^*) \in \Delta$ con $(\delta_n^*, \sigma_n^*) \to (\delta,\sigma)$.

(Dimostrazione: Contraddizione con l'ipotesi $\frac{E(\Lambda,u,S)}{|\Lambda|} \to \alpha \in \mathbb{R}$. usando Lemma 2.2.2 (a).)

<u>Proposizione 2.2.9:</u> La funzione y è continua su $\Delta \cup \{(\delta,\sigma): \delta=0, \sigma<0\}$. Se $\Lambda \to \infty$ (Fisher), $u/V(\Lambda) \to 0$, $S/V(\Lambda) \to L^{-3}\sigma < 0$, allora

$$\lim_{\Lambda\to\infty} \frac{E(\Lambda,u,S)}{V(\Lambda)} = L^{-3} y(0, L^{-3}\sigma) = 0.$$

(Dimostrazione: stabilità, stima superiore, Prop. 2.2.7, prop. 2.2.8 (b).)

2.3 <u>Dall'energia all'entropia</u>

Invece di $E(u,S)$, vogliamo $S(u,E)$.

Sia $\Sigma^* := \Sigma_a \cup \Sigma_b \cup \Sigma_c \subset \mathbb{R}^3$,

dove:

- $\Sigma_a := \mathrm{graph}(\eta|_\Delta) = \{(\delta,\sigma,\eta) : (\delta,\sigma)\in\Delta, \eta = \eta(\delta,\sigma)\}$
- $\Sigma_b := \bigcup_{\substack{(\delta^*,\sigma^*)\in\partial\Lambda \\ \delta\neq 0 \text{ o } \sigma\geq 0}} \{(\delta,\sigma,\eta) : \delta=\delta^*, \sigma=\sigma^*, \eta\geq\eta^*\}$

  e $\eta^* = \liminf_{\substack{(\delta_n,\sigma_n)\in\Lambda \\ (\delta_n,\sigma_n)\to(\delta^*,\sigma^*)}} \eta(\delta_n,\sigma_n)$.
- $\Sigma_c := \{(\delta,\sigma,\eta) : \delta = 0, \sigma<0, \eta = 0\}$.

Cambiamo normalizzazione:

$$\rho := L^{-3}\delta, \quad \varepsilon := L^{-3}\eta, \quad s := L^{-3}\sigma.$$

E scriviamo Σ per l'insieme ottenuto da Σ^* con questa nuova normalizzazione.

Si ottiene dalla proposizione 2.2.7, 2.2.8, e 2.2.9:

Teorema 2.3.1:

Se $\Lambda\to\infty$ (Fisher) e $\frac{n}{V(\Lambda)}\to\rho$, $\frac{E}{V(\Lambda)}\to\varepsilon$, $\frac{S(n,E)}{V(\Lambda)}\to s$,

con $(\rho,\varepsilon,s)\in\mathbb{R}^3$ (non infinit),

allora $(\rho,\varepsilon,s)\in\Sigma$.

Osservazioni: Se $(\rho,\varepsilon,s)\in\Sigma$, allora

$\varepsilon\geq -\rho B$, $s\leq\rho-\rho\log\rho$, $S(\Lambda,n,E)\leq\log\frac{V(\Lambda)^n}{n!}$

Definiamo

$\rho_{cp} := \sup_{(\rho,\varepsilon,s)\in\Sigma}\rho$ la densità più alta possibile.

Se $U(x_1,\dots x_n)<+\infty$ $\forall x_1,\dots x_n$ (senza nucleo duro)

allora posso sempre ottenere $\Omega(\Lambda,n,E)\neq 0$.

($\eta(\delta,\sigma)=+\infty$ se e solo se $E(\Lambda_N, 8^N\delta, 8^N\sigma)=+\infty$ $\forall N\in\mathbb{N}$).

Allora: senza nucleo duro $\rho_{cp}=+\infty$.

Se ci sono i nuclei duri: ρ_{cp} è la densità del "close packing" dei nuclei in $\mathbb{R}^3$.

Per $\rho \in [0, \rho_{cp})$ poniamo
$$\mathcal{E}_0(\rho) := \inf_{\substack{(\rho,\varepsilon,s)\in\Sigma \\ \rho \text{ fisso}}} \varepsilon \quad ; \text{ inoltre } \mathcal{E}_0(0) := 0 .$$

Raccogliendo tutti i risultati:

<u>Teorema 2.3.2:</u> [limite termodinamico dell'entropia per l'insieme configurazionale ed estesa]

Sia $S(\Lambda, n, E) := \log \Omega(\Lambda, n, E)$ dove
$$\Omega(\Lambda, n, E) := \frac{1}{n!} \left| \{ (x_1, \dots x_n) \in \Lambda^n : U(x_1, \dots, x_n) \leq E \} \right| .$$
Sia l'interazione stabile e temperata.

Allora esistono:

- $\rho_{cp} > 0$ (anche $\rho_{cp} = +\infty$ è possibile)
- una funzione convessa e continua $\mathcal{E}_0$ sull'intervallo $[0, \rho_{cp}]$ tale che $\mathcal{E}_0(0) = 0$ e $\mathcal{E}_0(\rho) \geq -\rho B$.
- una funzione concava e continua s definita su
$$\Theta := \{ (\rho, \varepsilon) : 0 \leq \rho < \rho_{cp} \text{ e } \varepsilon > \mathcal{E}_0(\rho) \},$$
s crescente rispetto ε per ρ fissa,
e tale che $s(0, \varepsilon) = 0$ per ogni $\varepsilon > 0$.

Se $\Lambda \longrightarrow +\infty$ nel senso di Fisher, e $\lim_{\Lambda \to \infty} \frac{n}{V(\Lambda)} = \rho$, e $\lim_{\Lambda\to\infty} \frac{E}{V(\Lambda)} = \varepsilon$, allora:

non maiuscolo

(a) Se $(\rho, \varepsilon) \in \Theta$ allora $\lim_{\Lambda\to\infty} \frac{S(\Lambda, n, E)}{V(\Lambda)} = s(\rho, \varepsilon)$

(b) Se $(\rho, \varepsilon) \in \partial\Theta$ allora
$$\limsup_{\Lambda \to \infty} \frac{S(\Lambda, n, E)}{V(\Lambda)} \leq s^*(\rho, \varepsilon)$$
dove $s^*(\rho, \varepsilon) = \limsup_{n\to\infty} s(\rho_n^*, \varepsilon_n^*)$, $(\rho_n^*, \varepsilon_n^*) \in \Theta$, e $(\rho_n^*, \varepsilon_n^*) \longrightarrow (\rho, \varepsilon)$.

(c) Se $(\rho, \varepsilon) \in (\overline{\Theta})^c$ allora $\lim_{\Lambda \to \infty} \frac{S(\Lambda, n, E)}{|\Lambda|} = -\infty$.

La convergenza su ogni insieme compatto $K \subset \Theta$ è uniforme.

2.4 Dall'insieme configurazionale ed esteso all'insieme microcanonico