

Положительность давления в каноническом ансамбле Гиббса

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович

Лаборатория моделирования. Институт теплофизики СО РАН. Пр-т Лаврентьева, 1.
г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org

Ключевые слова: отрицательное давление, потенциал взаимодействия, тройная точка, уравнение состояния твердых сфер, уравнение состояния Ван-дер-Ваальса, равновесие, взаимодействие со стенкой, зависимость потенциала от плотности.

Аннотация

В рамках классического канонического ансамбля Гиббса $(N, V, T) = const$ доказано, что равновесное давление неотрицательно для любого потенциала, независимого от плотности. Показано, что в макроскопической системе: 1) давление может принимать отрицательные значения, если потенциал взаимодействия зависит от плотности; 2) давление неотрицательно, если зависящий от плотности потенциал взаимодействия не содержит притяжения; 3) давление может принимать отрицательные значения, только если потенциал зависит от плотности и он не является притягательным.

Получено неравенство-критерий физической непротиворечивости для точных и приближенных решений уравнений для парной корреляционной функции.

Показано, что если считать, что уравнение Ван-дер-Ваальса получено для системы частиц, взаимодействующих посредством потенциальной энергии, независимой от плотности, то в этой системе существует тройная точка, в которой температура и давление не равны нулю. Получены формулы для оценки температуры и плотности жидкости в тройной точке.

Показано, что уравнение состояния твердых сфер, энергия взаимодействия которых описывается потенциалом Каца, не является точным, его теоретический вывод содержит скрытую ошибку, и это уравнение должно быть дополнено условием положительности давления при ненулевых температуре и плотности.