Математические заметки

том 78 выпуск 5 ноябрь 2005

УДК 517.958+530.145

О БОЛЬШИХ ПЛОТНОСТЯХ В ФЕРМИ СИСТЕМАХ

А. А. Замятин, В. А. Малышев

В данной работе представлены строгие результаты о поведении ферми систем при больших плотностях.

Библиография: 7 названий.

1. Введение

Хорошо известно, что в равновесной квантовой статистической механике при $\beta \to \infty$ и выполнении некоторых слабых ограничений β-КМШ состояние стремится к основному состоянию [1]. С другой стороны, для фиксированного β, когда химический потенциал μ (в случае большого канонического ансамбля) или плотность частиц ρ (в случае канонического ансамбля) стремится к бесконечности, не существует естественного предельного состояния. В этом случае целесообразно изучать асимптотику термодинамических функций при больших μ или ρ, в частности, асимптотику $\ln Z$, где Z – статистическая сумма.

Целью настоящей статьи является получение строгих результатов о поведении ферми систем при больших плотностях, в соответствии с тем, как это объяснено в курсе Ландау–Лившица [2, с. 345]: при больших плотностях ферми система становится идеальной. Под этим понимается, что кинетическая энергия большинства частиц становится много больше, чем энергия их взаимодействия с другими частицами или внешним полем. Заметим, что эвристические аргументы для классических систем показывают, что это возможно только в том случае, когда взаимодействие стремится к нулю, если объем и плотность стремятся к бесконечности. В самом деле, возьмем объем Λ, содержащий $\rho\Lambda$ частиц. Предположим, что потенциал ограничен константой v и локален с радиусом взаимодействия r. Введем внешнее поле так, чтобы средняя энергия взаимодействия равнялась 0, иначе говоря, чтобы сделать систему нейтральной. Тогда по центральной предельной теореме для большинства частиц энергия взаимодействия имеет порядок $v\sqrt{\rho}\,r^{d/2}$. В то же время кинетическая энергия имеет порядок $c(\beta)$. Таким образом, кинетическая энергия превышает энергию взаимодействия только в том случае, когда $vr^{d/2} = o(\rho^{-1/2})$, или когда $vr^d = o(\rho^{-1})$, если условие нейтральности отсутствует.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 02-01-00415.

Наши строгие результаты показывают, что в одномерной модели малость потенциала в действительности не требуется. Это не очевидно, так как в данном случае стандартная спектральная теория возмущений не применима в силу того, что разность $\varepsilon_k - \varepsilon_{k-1}$ между последовательными собственными значениями стремится к нулю, если $k \ll \Lambda^2$.

В [2] рассматриваются нейтральные системы, состоящие из M ядер и $N = qM$ электронов, где q – заряд ядра. Предполагая, что ядра расположены в вершинах периодической решетки и что электроны не взаимодействуют между собой, мы моделируем это, как систему независимых бесспиновых ферми частиц во внешнем потенциале V.

2. Результаты

Дадим точные определения. Мы рассмотрим одночастичный гамильтониан

$$h = -\nabla^2 + V$$

в $L^2(\Lambda)$ с граничными условиями Дирихле, но можно рассматривать и другие граничные условия; V – оператор умножения на функцию $V(x)$, которая предполагается ограниченной. Пусть

$$\varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \cdots < \varepsilon_k = \varepsilon_k^{(V)}(\Lambda) < \cdots$$

– собственные значения соответствующей одночастичной задачи в конечном интервале $\Lambda \subset \mathbb{R}$. Известно, что в данном случае кратные собственные значения отсутствуют [3, гл. 13, теорема 7.50]. Для $V = 0$

$$\varepsilon_k^{(0)}(\Lambda) = \pi^2 \frac{k^2}{\Lambda^2}.$$

Рассмотрим ферми газ, состоящий из независимых частиц во внешнем поле V. Каноническая статистическая сумма имеет вид

$$Z_N^{(V)}(\Lambda) = \sum_{0<k_1<k_2<\cdots<k_N} \exp\left(-\beta \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_{k_i}^{(V)}(\Lambda)\right),$$

где β – обратная температура, N – число частиц и Λ – "объем". Мы всегда будем предполагать, что потенциал V таков, что предел

$$F = F(\beta, \rho) = \lim \frac{1}{\Lambda} \ln Z_N^{(V)}(\Lambda)$$

существует, если $\Lambda \to \infty$, так что $N/\Lambda = \rho$.

Теорема 1. *Пусть V – ограниченный потенциал. Тогда при N, Λ, $N/\Lambda \to \infty$*

$$\frac{\ln Z_N^{(V)}(\Lambda)}{\ln Z_N^{(0)}(\Lambda)} \to 1.$$

Статистическая сумма большого канонического ансамбля для ферми газа во внешнем поле с потенциалом V определяется следующим образом:

$$\Xi_\mu^{(V)}(\Lambda) = \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 + z e^{-\beta \varepsilon_k^{(V)}(\Lambda)}\right),$$

где $z = \exp(\mu\beta)$ – активность и μ – химический потенциал.

Теорема 2. *Пусть интервал Λ фиксирован и потенциал V ограничен. Тогда при $\mu \to \infty$*

$$\frac{\ln \Xi_{\mu}^{(V)}(\Lambda)}{\ln \Xi_{\mu}^{(0)}(\Lambda)} \to 1.$$

Положим

$$\Omega_{\mu}^{(V)}(\Lambda) = \frac{1}{\Lambda} \ln \Xi_{\mu}^{(V)}(\Lambda).$$

Допустим, что потенциал V таков, что предел

$$\Omega_{\mu}^{(V)} = \lim_{\Lambda \to \infty} \frac{1}{\Lambda} \ln \Xi_{\mu}^{(V)}(\Lambda)$$

существует.

Теорема 3. *При $\mu \to \infty$*

$$\frac{\Omega_{\mu}^{(V)}}{\Omega_{\mu}^{(0)}} \to 1.$$

3. Доказательства

Нам понадобится следующий результат.

Лемма 4. *Если V ограничен, то для всех Λ и k*

$$|\varepsilon_k(\Lambda, V) - \varepsilon_k(\Lambda, 0)| \leqslant C.$$

Доказательство. Этот факт может быть извлечен из доказательства теоремы $13.82\frac{1}{2}$ из [4]. Дадим краткое доказательство. Рассмотрим аналитическое семейство операторов (для фиксированного Λ)

$$H(a) = -\nabla^2 + aV, \qquad 0 \leqslant a \leqslant 1.$$

Из простоты собственных значений для любого a и аналитичности семейства операторов следует, что собственные значения являются аналитическими функциями a на интервале $0 \leqslant a \leqslant 1$. Тогда, полагая $\varepsilon_k(a) = \varepsilon_k(\Lambda, aV)$ и используя формулу

$$\frac{d\varepsilon_k(a)}{da} = (\phi_k(a), V\phi_k(a)),$$

где $\phi_k(a)$ – соответствующие нормированные собственные вектора, получаем

$$|\varepsilon_k(1) - \varepsilon_k(0)| \leqslant \sup_{[0,\Lambda]} |V| = C.$$

3.1. Канонический ансамбль.

Доказательство теоремы 1. Доказательство теоремы основано на следующей лемме.

Лемма 5. *Пусть* $N > \Lambda$. *Тогда*

$$Z_N^{(0)}(\Lambda) \leqslant \frac{1}{N!}\left(\frac{\Lambda}{\beta}\right)^N \left(1+\frac{e^\beta \beta N}{\Lambda}\right)^\Lambda. \tag{1}$$

Доказательство. Положим для $p = 1, \dots, [\Lambda]$

$$\begin{aligned} Z_{N,p}(\Lambda) &= \sum_{0<k_1<\dots<k_p\leqslant[\Lambda]<k_{p+1}<\dots<k_N} \exp\left(-\beta\sum_{i=1}^N \varepsilon_{k_i}^{(0)}(\Lambda)\right) \\ &= \sum_{0<k_1<\dots<k_p\leqslant[\Lambda]} \exp\left(-\beta\sum_{i=1}^p \varepsilon_{k_i}^{(0)}(\Lambda)\right) \sum_{[\Lambda]<k_{p+1}<\dots<k_N} \exp\left(-\beta\sum_{i=p+1}^N \varepsilon_{k_i}^{(0)}(\Lambda)\right) \end{aligned}$$

и для $p = 0$

$$Z_{N,0}(\Lambda) = \sum_{[\Lambda]<k_1<\dots<k_N} \exp\left(-\beta\sum_{i=1}^N \varepsilon_{k_i}^{(0)}(\Lambda)\right).$$

Тогда

$$Z_N^{(0)}(\Lambda) = \sum_{p=0}^{[\Lambda]} Z_{N,p}(\Lambda).$$

При $k_i > [\Lambda]$ имеем $\varepsilon_{k_i}^{(0)}(\Lambda) > k_i/\Lambda$. Поэтому

$$\begin{aligned} &\sum_{[\Lambda]<k_{p+1}<\dots<k_N} \exp\left(-\beta\sum_{i=p+1}^N \varepsilon_{k_i}^{(0)}(\Lambda)\right) \leqslant \sum_{[\Lambda]<k_{p+1}<\dots<k_N} \exp\left(-\beta\sum_{i=p+1}^N \frac{k_i}{\Lambda}\right) \\ &= \sum_{[\Lambda]<k_{p+1}} \exp\left(-\frac{\beta k_{p+1}}{\Lambda}\right)\cdots \sum_{k_{N-1}<k_N} \exp\left(-\frac{\beta k_N}{\Lambda}\right) \\ &= \exp(-(N-p)\beta) \prod_{k=1}^{N-p} \frac{\exp(-\beta k/\Lambda)}{1-\exp(-\beta k/\Lambda)} = \exp(-(N-p)\beta) \prod_{k=1}^{N-p} \frac{1}{\exp(\beta k/\Lambda)-1}. \end{aligned}$$

Используя очевидную оценку $\exp(\beta k/\Lambda) - 1 > \beta k/\Lambda$, получаем

$$\sum_{[\Lambda]<k_{p+1}<\dots<k_N} \exp\left(-\beta\sum_{i=p+1}^N \varepsilon_{k_i}^{(0)}(\Lambda)\right) \leqslant \frac{\exp\beta(p-N)}{(N-p)!}\left(\frac{\Lambda}{\beta}\right)^{N-p}.$$

Далее, имеем

$$\sum_{0<k_1<\dots<k_p\leqslant[\Lambda]} \exp\left(-\beta\sum_{i=1}^p \varepsilon_{k_i}^{(0)}(\Lambda)\right) \leqslant \binom{[\Lambda]}{p}.$$

Следовательно,

$$Z_N^{(0)}(\Lambda) = \sum_{p=0}^{[\Lambda]} Z_{N,p}(\Lambda) \leqslant \exp(-\beta N) \sum_{p=0}^{[\Lambda]} \binom{[\Lambda]}{p} \frac{\exp \beta p}{(N-p)!} \left(\frac{\Lambda}{\beta}\right)^{N-p}$$
$$= \frac{\exp(-\beta N)}{N!} \sum_{p=0}^{[\Lambda]} \binom{[\Lambda]}{p} \exp \beta p \frac{N!}{(N-p)!} \left(\frac{\Lambda}{\beta}\right)^{N-p}.$$

Но $N!/(N-p)! \leqslant N^p$ и поэтому

$$Z_N^{(0)}(\Lambda) \leqslant \frac{\exp(-\beta N)}{N!} \left(\frac{\Lambda}{\beta}\right)^N \sum_{p=0}^{[\Lambda]} \binom{[\Lambda]}{p} \exp \beta p \left(\frac{\beta N}{\Lambda}\right)^p \leqslant \frac{1}{N!} \left(\frac{\Lambda}{\beta}\right)^N \left(1 + \frac{e^\beta \beta N}{\Lambda}\right)^\Lambda.$$

Лемма доказана.

Прологарифмировав неравенство (1) и разделив на N, получим

$$\frac{\ln Z_N^{(0)}(\Lambda)}{N} \leqslant \ln \Lambda - \frac{\ln N!}{N} + \frac{\Lambda}{N} \ln\left(1 + \frac{e^\beta \beta N}{\Lambda}\right) - \ln \beta.$$

Так как для достаточно больших N

$$\ln N! > N \ln N - N,$$

то

$$\frac{\ln Z_N^{(0)}(\Lambda)}{N} \leqslant \ln \Lambda - \ln N + \frac{\Lambda}{N} \ln\left(1 + \frac{e^\beta \beta N}{\Lambda}\right) - \ln \beta + 1 = \ln \frac{\Lambda}{N} + \frac{\ln(1 + e^\beta \beta N/\Lambda)}{N/\Lambda} - \ln \beta + 1.$$

Выражение в правой части этого неравенства стремится к $-\infty$ при выполнении условий теоремы 1. Отсюда следует, что при $N, \Lambda, N/\Lambda \to \infty$

$$\frac{\ln Z_N^{(0)}(\Lambda)}{N} \to -\infty. \tag{2}$$

Чтобы закончить доказательство теоремы, нам нужно показать, что при $N, \Lambda, N/\Lambda \to \infty$

$$\left|\frac{\ln Z_N^{(V)}(\Lambda) - \ln Z_N^{(0)}(\Lambda)}{\ln Z_N^{(0)}(\Lambda)}\right| \to 0. \tag{3}$$

Из леммы 4 следует, что

$$\left|\frac{\ln Z_N^{(V)}(\Lambda) - \ln Z_N^{(0)}(\Lambda)}{\ln Z_N^{(0)}(\Lambda)}\right| \leqslant \left|\frac{CN}{\ln Z_N^{(0)}(\Lambda)}\right|.$$

Теперь (3) следует из (2).

3.2. Большой канонический ансамбль.

Доказательство теоремы 2. Введем функцию распределения собственных значений

$$F_\Lambda^{(V)}(t) = \#\{k : \varepsilon_k^{(V)}(\Lambda) \leqslant t\}.$$

Логарифм статистической суммы большого канонического ансамбля удобно записать в виде интеграла

$$\ln \Xi_\mu^{(V)}(\Lambda) = \int_0^\infty \ln(1 + e^{\beta(\mu - t)})\, dF_\Lambda^{(V)}(t). \tag{4}$$

Докажем следующие леммы.

Лемма 6. *При $t \to \infty$*

$$F_\Lambda^{(V)}(t) = \frac{\Lambda\sqrt{t}}{\pi} + O(1). \tag{5}$$

Доказательство. Мы дадим элементарное доказательство. Общие результаты об асимптотике собственных значений дифференциальных операторов представлены в [5]–[7]. Пусть

$$\varepsilon_k^{(V)}(\Lambda) \leqslant t < \varepsilon_{k+1}^{(V)}(\Lambda).$$

Для таких t: $F_\Lambda^{(V)}(t) = k$. Используя оценку (лемма 4)

$$|\varepsilon_k^{(V)}(\Lambda) - \varepsilon_k^{(0)}(\Lambda)| \leqslant C,$$

найдем

$$-C + \frac{k^2\pi^2}{\Lambda^2} \leqslant t \leqslant C + \frac{(k+1)^2\pi^2}{\Lambda^2}.$$

После умножения на Λ^2/π^2 и извлечения квадратного корня, приходим к неравенству

$$-1 + \frac{\Lambda\sqrt{t}}{\pi}\sqrt{1 - \frac{C}{t}} \leqslant k \leqslant \frac{\Lambda\sqrt{t}}{\pi}\sqrt{1 + \frac{C}{t}}.$$

Но $k = F_\Lambda^{(V)}(t)$, поэтому

$$-1 + \frac{\Lambda\sqrt{t}}{\pi}\sqrt{1 - \frac{C}{t}} \leqslant F_\Lambda^{(V)}(t) \leqslant \frac{\Lambda\sqrt{t}}{\pi}\sqrt{1 + \frac{C}{t}}.$$

Вычитая $\Lambda\sqrt{t}/\pi$ из всех частей этого неравенства, получаем

$$-1 + \frac{\Lambda\sqrt{t}}{\pi}\left(\sqrt{1 - \frac{C}{t}} - 1\right) \leqslant F_\Lambda^{(V)}(t) - \frac{\Lambda\sqrt{t}}{\pi} \leqslant \frac{\Lambda\sqrt{t}}{\pi}\left(\sqrt{1 + \frac{C}{t}} - 1\right).$$

Для достаточно больших t имеем

$$-1 - \frac{\Lambda\sqrt{t}}{\pi}\frac{C}{2t} \leqslant F_\Lambda^{(V)}(t) - \frac{\Lambda\sqrt{t}}{\pi} \leqslant \frac{\Lambda\sqrt{t}}{\pi}\frac{C}{2t}.$$

Лемма доказана.

Лемма 7. *При* $\mu \to \infty$
$$\ln \Xi_\mu^{(V)}(\Lambda) \sim \frac{2}{3}\frac{\Lambda}{\pi}\mu^{3/2}. \tag{6}$$

Доказательство. В самом деле,
$$\ln \Xi_\mu^{(V)}(\Lambda) = \int_0^\infty \ln(1+e^{\beta(\mu-t)})\,dF_\Lambda^{(V)}(t).$$

Интегрируя по частям и используя тот факт, что
$$F_\Lambda^{(V)}(t) \sim \frac{\Lambda}{\pi}\sqrt{t}$$
при $t \to \infty$, найдем
$$\begin{aligned}\ln \Xi_\mu^{(V)}(\Lambda) &= \beta\int_0^\infty \frac{e^{\beta(\mu-t)}}{1+e^{\beta(\mu-t)}}F_\Lambda^{(V)}(t)\,dt \\ &= \beta\int_0^\mu F_\Lambda^{(V)}(t)\,dt - \beta\int_0^\mu \frac{F_\Lambda^{(V)}(t)}{1+e^{\beta(\mu-t)}}\,dt + \beta\int_\mu^\infty \frac{F_\Lambda^{(V)}(t)}{1+e^{\beta(t-\mu)}}\,dt.\end{aligned}$$

Из леммы 6 следует, что
$$\int_0^\mu F_\Lambda^{(V)}(t)\,dt \sim \frac{2}{3}\frac{\Lambda}{\pi}\mu^{3/2}, \qquad \mu \to \infty. \tag{7}$$

Покажем, что
$$\int_0^\mu \frac{F_\Lambda^{(V)}(t)}{1+e^{\beta(\mu-t)}}\,dt = O(\mu^{1/2}), \qquad \mu \to \infty. \tag{8}$$

По формуле (5) имеем
$$F_\Lambda^{(V)}(t) = c\sqrt{t} + r(t), \qquad r(t) = O(1), \quad t \to \infty.$$

Докажем
$$\int_0^\mu \frac{\sqrt{t}}{1+e^{\beta(\mu-t)}}\,dt = O(\mu^{1/2}), \qquad \mu \to \infty.$$

После замены переменной $s = t - \mu$ имеем
$$\int_0^\mu \frac{\sqrt{t}}{1+e^{\beta(\mu-t)}}\,dt = \int_{-\mu}^0 \frac{\sqrt{\mu+s}}{1+e^{-\beta s}}\,dt = \sqrt{\mu}\int_{-\mu}^0 \frac{\sqrt{1+s/\mu}}{1+e^{-\beta s}}\,dt = O(\mu^{1/2}).$$

Отсюда следует (8), так как
$$\int_0^\mu \frac{r(t)}{1+e^{\beta(\mu-t)}}\,dt = O(1), \qquad \mu \to \infty.$$

Докажем теперь, что
$$\int_\mu^\infty \frac{F_\Lambda^{(q)}(t)}{1+e^{\beta(t-\mu)}}\,dt = O(\mu^{1/2}), \qquad \mu \to \infty. \tag{9}$$

После замены переменной получаем

$$\int_\mu^\infty \frac{F_\Lambda^{(q)}(t)}{1+e^{\beta(t-\mu)}}\,dt = \int_0^\infty \frac{F_\Lambda^{(q)}(\mu+t)}{1+e^{\beta t}}\,dt = c\int_0^\infty \frac{\sqrt{\mu+t}}{1+e^{\beta t}}\,dt + \int_0^\infty \frac{r(\mu+t)}{1+e^{\beta t}}\,dt,$$

где c – константа. Очевидно, что

$$\int_0^\infty \frac{\sqrt{\mu+t}}{1+e^{\beta t}}\,dt = \sqrt{\mu}\int_0^\infty \frac{\sqrt{1+t/\mu}}{1+e^{\beta t}}\,dt = O(\mu^{1/2}), \quad \int_0^\infty \frac{r(\mu+t)}{1+e^{\beta t}}\,dt = O(1), \qquad \mu\to\infty.$$

Формулы (7)–(9) доказывают лемму.

Теперь утверждение теоремы следует из (6).

Доказательство теоремы 3. По теореме 2 имеем

$$\frac{1}{\Lambda}\ln\Xi_{\mu-C}^{(0)}(\Lambda) \leqslant \frac{1}{\Lambda}\ln\Xi_{\mu}^{(V)}(\Lambda) \leqslant \frac{1}{\Lambda}\ln\Xi_{\mu+C}^{(0)}(\Lambda). \tag{10}$$

Хорошо известно, что

$$\lim_{\Lambda\to\infty}\frac{1}{\Lambda}\ln\Xi_\mu^{(0)}(\Lambda) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \ln(1+e^{\beta(\mu-p^2)})\,dp.$$

После замены переменной $t=p^2$ и интегрирования по частям получаем

$$\int_0^\infty \ln(1+e^{\beta(\mu-p^2)})\,dp = \int_0^\infty \frac{\sqrt{t}}{1+e^{\beta(t-\mu)}}\,dt.$$

Выше было показано (лемма 7), что

$$\int_0^\infty \frac{\sqrt{t}}{1+e^{\beta(t-\mu)}}\,dt \sim K\mu^{3/2}, \qquad \mu\to\infty.$$

Поэтому требуемый результат следует из (10).

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Bratteli O., Robinson D.W. Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics 2. Berlin: Springer-Verlag, 1981.

[2] Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Курс теоретической физики. Т. 5. Статистическая физика. М.: Наука, 1976.

[3] Данфорд Н., Шварц Дж. Линейные операторы. Ч. 2. Спектральная теория. М.: Мир, 1966.

[4] Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Ч. 4. Анализ операторов. М.: Мир, 1982.

[5] Шубин М.А. Псевдодифференциальные операторы и спектральная теория. М.: Наука, 1978.

[6] Марченко В.А. Операторы Штурма–Лиувилля и их приложения. Киев: Наукова думка, 1977.

[7] Safarov Yu., Vassiliev D. The Asymptotic Distribution of Eigenvalues of Partial Differential Operators. Transl. Math. Monographs. V. 155. Providence, RI: Amer. Math. Soc., 1997.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
E-mail: zamyatin@lbss.math.msu.su, malyshev@lbss.math.msu.su

Поступило
22.11.2004