Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. А. Замятин, В. А. Малышев, О больших плотностях
в ферми системах, *Матем. заметки*, 2005, том 78, вы-
пуск 5, 687–694

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm2640>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подра-
зумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.237.206.68

26 апреля 2023 г., 10:36:21

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 $\beta \rightarrow \infty$ 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 локализован 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

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

– 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

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

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

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

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

ТЕОРЕМА 1. Пусть V – ограниченный потенциал. Тогда при $N, \Lambda, N/\Lambda \rightarrow \infty$

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

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

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

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

ТЕОРЕМА 2. Пусть интервал Λ фиксирован и потенциал V ограничен. Тогда при $\mu \rightarrow \infty$

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

Положим

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

Допустим, что потенциал V таков, что предел

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

существует.

ТЕОРЕМА 3. При $\mu \rightarrow \infty$

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

3. Доказательства

Нам понадобится следующий результат.

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

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

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)

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

Из простоты собственных значений для любого a и аналитичности семейства операторов следует, что собственные значения являются аналитическими функциями a на интервале $0 \leq a \leq 1$. 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

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

3.1. Канонический ансамбль.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 1. Доказательство теоремы основано на следующей лемме.

ЛЕММА 5. Пусть $N > \Lambda$. Тогда

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

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

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

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

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

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

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

Далее, имеем

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

Следовательно,

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

Но $N!/(N-p)! \leq N^p$ и поэтому

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

Лемма доказана.

Прологарифмировав неравенство (1) и разделив на N , получим

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

Так как для достаточно больших N

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

то

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

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

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

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

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

Из леммы 4 следует, что

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

Теперь (3) следует из (2).

3.2. Большой канонический ансамбль.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 2. Введем функцию распределения собственных значений

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

Логарифм статистической суммы большого канонического ансамбля удобно записать в виде интеграла

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

Докажем следующие леммы.

ЛЕММА 6. При $t \rightarrow \infty$

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

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

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

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

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

найдем

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

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

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

Но $k = F_{\Lambda}^{(V)}(t)$, поэтому

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

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

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

Для достаточно больших t имеем

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

Лемма доказана.

ЛЕММА 7. При $\mu \rightarrow \infty$

$$\ln \Xi_{\mu}^{(V)}(\Lambda) \sim \frac{2}{3} \frac{\Lambda}{\pi} \mu^{3/2}. \quad (6)$$

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 $t \rightarrow \infty$, 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

$$\int_0^{\mu} F_{\Lambda}^{(V)}(t) dt \sim \frac{2}{3} \frac{\Lambda}{\pi} \mu^{3/2}, \quad \mu \rightarrow \infty. \quad (7)$$

Покажем, что

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

По формуле (5) имеем

$$F_{\Lambda}^{(V)}(t) = c\sqrt{t} + r(t), \quad r(t) = O(1), \quad t \rightarrow \infty.$$

Докажем

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

После замены переменной $s = t - \mu$ имеем

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

Отсюда следует (8), так как

$$\int_0^{\mu} \frac{r(t)}{1 + e^{\beta(\mu-t)}} dt = O(1), \quad \mu \rightarrow \infty.$$

Докажем теперь, что

$$\int_{\mu}^{\infty} \frac{F_{\Lambda}^{(q)}(t)}{1 + e^{\beta(t-\mu)}} dt = O(\mu^{1/2}), \quad \mu \rightarrow \infty. \quad (9)$$

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

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

Формулы (7)–(9) доказывают лемму.

Теперь утверждение теоремы следует из (6).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 3. По теореме 2 имеем

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

Хорошо известно, что

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

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

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

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.