Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. П. Барашев, В. В. Белов, А. С. Вшивцев, А. Г. Кисунько, Некоторые особенности термодинамики идеальных систем с нелинейным взаимодействием, *ТМФ*, 1998, том 116, номер 3, 431–441

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf914>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.85.5.30

26 апреля 2023 г., 16:40:42

© 1998 г.

В. П. Барашев*, В. В. Белов[†],
А. С. Вшивцев*, А. Г. Кисунько*

НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ ТЕРМОДИНАМИКИ ИДЕАЛЬНЫХ СИСТЕМ С НЕЛИНЕЙНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Проведено сравнительное изучение термодинамических свойств для двух двумерных систем. Одна из них отвечает связанному состоянию двумерного гармонического осциллятора, а вторая – нелинейному ангармоническому осциллятору. Приведен спектр для гармонического осциллятора, а для нелинейного осциллятора впервые приведены результаты расчетов ВКБ-спектра и волновых функций. Показано, что Ω -потенциалы имеют существенно различное поведение в области высоких температур. Это может быть замечено, например, при исследовании температурной зависимости теплоемкости в планарных анизотропных средах.

Изучение термодинамических свойств различных систем позволяет в значительной мере расширить наши представления о природе того или иного состояния вещества.

Именно исследование термодинамических свойств электронного газа в магнитном поле привело к предсказанию эффекта осцилляций намагниченности в металлах [1–3]. До настоящего времени эта тема не исчерпала себя и продолжает интересовать исследователей [4–6]. Одна из причин, по которой сохраняется интерес к этой проблеме, – исследование явления высокотемпературной сверхпроводимости, а также в связи с этим детальное рассмотрение эффектов, происходящих в планарных структурах. Здесь имеется широкий круг проблем, впервые сформулированных в работах Лифшица [7]. Одной из таких проблем является учет нелинейных эффектов взаимодействия электронного газа с кристаллической решеткой, а также анализ физических следствий, к которым приводит нелинейность взаимодействия.

Традиционный подход к изучению взаимодействия, как правило, основывается на построении аппроксимирующего потенциала взаимодействия. Далее для этого потенциала решается спектральная задача. В нерелятивистском случае находится спектр уравнения Шредингера в потенциалах, моделирующих физические особенности поведения

*Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (технический университет), Москва, Россия

[†]Московский государственный институт электроники и математики (технический университет), Москва, Россия

электронов в поле кристаллической решетки твердого тела. При рассмотрении уравнения Шредингера, как правило, ограничиваются гармоническим приближением, что обусловлено математическими трудностями нахождения точного спектра многомерной задачи с учетом ангармонизма потенциалов. К сожалению, обоснование использования гармонического приближения не всегда бывает корректным и неясно, насколько в модифицированной таким образом задаче сохраняются физические особенности исходной задачи.

С учетом сказанного мы проанализируем поведение термодинамического потенциала, основываясь на рассмотрении двух планарных задач. Гамильтониан первой задачи

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2M} + U_1(x, y),$$

где

$$U_1(x, y) = \frac{k}{2}(x^2 + y^2) + \varepsilon xy, \quad \varepsilon > 0. \quad (1)$$

Для второй задачи

$$\hat{H}_2 = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + U_2(x, y),$$

где

$$U_2(x, y) = \frac{U_0}{4}(x^4 + y^4) + \frac{\varepsilon U_0}{2}x^2y^2, \quad \varepsilon > 0, \quad (2)$$

U_0 – параметр, учитывающий размерную зависимость потенциальной энергии.

Гамильтониан первого типа известен из курса квантовой механики [8], а также обсуждается в обычной классической механике как пример двух взаимодействующих осцилляторов. Характерной особенностью этой задачи являются возможность разделения переменных в уравнении Шредингера и ее точное решение. Соответствующий спектр имеет вид

$$E_{n,\nu}^{(1)} = E_{01} \left(a_1 \left(n + \frac{1}{2} \right) + b_1 \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \right). \quad (3)$$

Здесь $E_{01} = \hbar\omega/\sqrt{2}$, $\omega = \sqrt{k/m}$, $n, \nu = 0, 1, 2, \dots$, а константы a_1 и b_1 выражаются следующим образом через массы m и M осцилляторов и параметр ε :

$$a_1 = \left[1 + \frac{m}{M} + \sqrt{\left(1 - \frac{m}{M} \right)^2 + \frac{4m\varepsilon^2}{Mk^2}} \right]^{1/2},$$

$$b_1 = \left[1 + \frac{m}{M} - \sqrt{\left(1 - \frac{m}{M} \right)^2 + \frac{4m\varepsilon^2}{Mk^2}} \right]^{1/2}.$$

Заметим, что для приложения к задаче об осцилляциях намагниченности гамильтониан (1) фигурирует достаточно часто [6]. Более того, обсуждается возможность приближения таким гамильтонианом широкого класса гамильтонианов с нелинейным типом взаимодействия [9]. Для того чтобы решить вопрос о правомерности такого подхода,

мы сравним термодинамические потенциалы электронного газа с гамильтонианами (1) и (2) и установим области параметров, в которых возможно приближение одной модели другой.

При $\mu < 0$ (μ – химический потенциал) Ω -потенциал идеального электронного газа со спектром (3) вычисляется просто и имеет вид

$$\Omega_{1-} = \frac{4}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \frac{\exp(\mu\beta n)}{\operatorname{sh}(\beta E_{01} a_1 n/2) \operatorname{sh}(\beta E_{01} b_1 n/2)}. \quad (4)$$

При $\mu > 0$ этот же Ω -потенциал задается соотношением

$$\begin{aligned} \Omega_{1+} = & \frac{4}{\beta} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \frac{\exp(-\mu\beta n)}{\operatorname{sh}(\beta E_{01} a_1 n/2) \operatorname{sh}(\beta E_{01} b_1 n/2)} + \right. \\ & + \frac{2\mu [(\beta E_{01}/2)^2 (a_1^2 + b_1^2) - (\mu\beta)^2 - \pi^2]}{3E_{01}^2 a_1 b_1 \beta} + \\ & + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2(-1)^n}{n} \left[\sin\left(\frac{2\pi n\mu}{E_{01} a_1}\right) \operatorname{sh}^{-1}\left(\frac{2\pi^2 n}{E_{01} b_1 \beta}\right) \sin^{-1}\left(\frac{\pi n a_1}{b_1}\right) + \right. \\ & \left. \left. + \sin\left(\frac{2\pi n\mu}{E_{01} b_1}\right) \operatorname{sh}^{-1}\left(\frac{2\pi^2 n}{E_{01} a_1 \beta}\right) \sin^{-1}\left(\frac{\pi n b_1}{a_1}\right) \right] \right\}. \quad (5) \end{aligned}$$

Выражение (5) хорошо известно, и, в частности, исследователями обсуждаются проблемы суммирования быстроосциллирующих рядов, стоящих в (5). Мы обратим внимание лишь на тот факт, что в высокотемпературном пределе ($\beta \rightarrow 0$) из (4) и (5) следует асимптотическое поведение для Ω -потенциала идеального газа:

$$\Omega_{1\pm} \Big|_{\beta \rightarrow 0} = -\frac{12\zeta(3)}{E_{01}^2 a_1 b_1 \beta^3} \pm \frac{4\pi^2 \mu}{3E_{01}^2 a_1 b_1 \beta^2} + O(\beta^{-1}). \quad (6)$$

Заметим, что осциллирующая часть Ω -потенциала в (5) фактически является двоякопериодической функцией с периодами, связанными с параметрами a_1 и b_1 . Арифметическая природа отношения a_1/b_1 обуславливает расходимость ряда в (5). Здесь речь фактически идет о свойствах осциллирующей части функции Ω на двумерной по a_1 и b_1 решетке, изоморфной тору. Становится ясно, что устранить эту расходимость принципиально невозможно, т.к. это одно из характерных свойств рассматриваемой системы. В данном случае такое обстоятельство аналогично явлению резонансов инвариантных торов в интегрируемой системе [10, 11].

Выбор модельного гамильтониана (2) обусловлен двумя обстоятельствами. Во-первых, такие потенциалы взаимодействия с сильным ангармонизмом описывают свойства электронов в квазиульмерных системах (квантовые ямы и квантовые точки) [4, 6]. Во-вторых, система с потенциалом (2) является простейшим примером классической и, возможно, квантовой неинтегрируемости. Классическая неинтегрируемость (отсутствие дополнительного первого интеграла) при $\varepsilon \neq 0, 1, 3$ доказана в работе [12].

Численному исследованию структуры фазового пространства классической системы с гамильтонианом $H_2(p, q)$, где $p = (p_x, p_y)$, $q = (x, y)$, а уравнения движения имеют вид

$$\dot{p} = -H_q, \quad \dot{q} = H_p, \quad (7)$$

посвящено значительное число работ [13].

Было установлено, что в широком диапазоне параметров, энергии $E > 0$ и константы связи $\varepsilon \geq 0$ система (7) относится к классу систем с “мягким хаосом”, т.е. содержит как регулярную, так и стохастическую компоненты поведения фазовых траекторий, включая большие значения параметра ε [14].

Соответствующая квантовая спектральная задача

$$\hat{H}_2(\varepsilon)\psi_E = E\psi_E, \quad \psi_E \in L_2(\mathbf{R}_{x,y}^2) \quad (8)$$

имеет чисто дискретный спектр при любом положительном значении параметра ε (для $\varepsilon = \infty$ с потенциалом $V(x, y, \infty) = x^2 y^2 / 4$ этот факт установлен в работе [15]).

Неинтегрируемость системы (7) не позволяет получить какую-либо информацию о поведении спектра и волновых функций задачи (8) в рамках стандартного квазиклассического приближения ($\hbar \rightarrow 0$) – многомерного метода Венцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ)–Маслова.

Тем не менее квазиклассический подход к спектральной квантовой задаче (8), основанный на теории комплексного ростка Маслова (комплексный метод ВКБ, развитый в работах [16–18]), позволяет выделить в спектре гамильтониана H_2 (2) ту его часть, которая порождается регулярным движением вдоль устойчивых фазовых орбит соответствующей классической системы (7).

Здесь мы приведем, следуя статье [18], результаты расчета квазиклассических уровней энергии и соответствующих им волновых функций – спектральных серий (квизимод), ассоциированных со специальными семействами устойчивых фазовых орбит $\Lambda_j^1(E)$, $j = 1, 2, 3, 4$, на уровне энергии E классической функции Гамильтона. Эти орбиты порождены глобальной дискретной симметрией потенциала $V(x, y, \varepsilon)$ относительно замен: 1) $x \rightarrow x$, $y \rightarrow -y$, 2) $x \rightarrow -x$, $y \rightarrow y$, 3) $x \rightarrow -y$, $y \rightarrow x$, 4) $x \rightarrow y$, $y \rightarrow -x$, соответственно, и имеют вид

$$\begin{aligned} \Lambda_1^1(E) &= \left\{ y = 0, \quad p_y = 0, \quad \frac{x^4}{4} + \frac{p_x^2}{2} = E \right\}, \\ \Lambda_2^1(E) &= \left\{ x = 0, \quad p_x = 0, \quad \frac{y^4}{4} + \frac{p_y^2}{2} = E \right\}, \\ \Lambda_3^1(E) &= \left\{ y = x, \quad p_y = p_x, \quad \frac{x^4(1+\varepsilon)}{2} + p_x^2 = E \right\}, \\ \Lambda_4^1(E) &= \left\{ y = -x, \quad p_y = -p_x, \quad \frac{y^4(1+\varepsilon)}{2} + p_y^2 = E \right\}. \end{aligned} \quad (9)$$

Периодические движения вдоль этих фазовых орбит – прямолинейные либрации – очевидно, описываются эллиптическими функциями. Например, для $\Lambda_1^1(E)$ имеем

$$x(t) = -\alpha \operatorname{cn}\left(\frac{2\tau \mathbf{K}(1/\sqrt{2})}{\pi}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right), \quad p = \dot{x}(t), \quad \tau = \frac{2\pi}{T(E)}t, \quad (10)$$

где $T(E) = 4\mathbf{K}(1/\sqrt{2})/\alpha$ – период движения, $\alpha = (4E)^{1/4}$, $\mathbf{K}(1/\sqrt{2})$ – полный эллиптический интеграл.

Квазиклассические уровни энергии, отвечающие фазовым кривым $\Lambda_{1,2}^1(E)$, имеют вид

$$E_{n,\nu}^{(1,2)}(\hbar, \varepsilon) = U_0^{1/3} \left(\frac{3\pi\hbar}{2^{5/2}\mathbf{K}(1/\sqrt{2})} \right)^{4/3} \left[n + \frac{1}{2} + (m + \theta(\varepsilon)) \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \right]^{4/3} + O(\hbar^{3/2}), \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (11)$$

Здесь $n, \nu = 0, 1, 2, \dots$ – квантовые числа, а целочисленный индекс $m = 0, 1, 2, \dots$ – номер зоны устойчивости по параметру $\varepsilon \in \Omega_m = (m(m+1), (m+1)(2m+1))$ уравнения Хилла, к которому сводится система уравнений в нормальных вариациях в окрестности движения вдоль фазовых орбит $\Lambda_{1,2}^1(E)$:

$$\frac{d^2 z}{d\tau^2} + \Omega(\tau)z = 0, \quad \tau = \frac{2\pi t}{T(E)} \pmod{2\pi}. \quad (12)$$

В уравнении (12) частота

$$\Omega(\tau) = \varepsilon \frac{4\mathbf{K}(1/\sqrt{2})}{\pi^2} \operatorname{cn}^2\left(\frac{2\mathbf{K}(1/\sqrt{2})}{\pi}\tau, \frac{1}{\sqrt{2}}\right),$$

а показатель Флоке

$$\theta(\varepsilon) = \arccos\left(\sqrt{2} \cos\left(\frac{\pi}{4}\sqrt{1+8\varepsilon}\right)\right), \quad \varepsilon \in \Omega_m.$$

Кривым $\Lambda_{3,4}^1(E)$ отвечают серии квазиклассических уровней энергии, имеющие вид

$$E_{n,\nu}^{(3,4)}(\hbar, \varepsilon) = (1 + \varepsilon)^{1/3} E_{n,\nu}^{(1,2)}\left(\hbar, \frac{3 - \varepsilon}{1 + \varepsilon}\right), \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (13)$$

Для этих кривых условие орбитальной устойчивости в линейном приближении сводится к неравенствам $1 < \varepsilon < 3$.

Приведем явные формулы для квазиклассических волновых функций вне окрестностей проекций фокальных точек ($x = \pm\alpha$, $y = 0$), когда $|x| < \alpha$, $y = O(\sqrt{\hbar})$:

$$\begin{aligned} \psi_{n,\nu}(x, y, \varepsilon, \hbar) &= \frac{1}{\sqrt{T(E)}\sqrt{p(x, E)}} \times \\ &\times \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-\alpha}^x p(x_1, E) dx_1 - \frac{\pi}{4} - \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \frac{\beta_f(\varepsilon)}{2}\right) \times \\ &\times \Phi_\nu\left(\tau(x), \frac{y}{\sqrt{\hbar}}\right) \exp\left[i\left(\nu + \frac{1}{2}\right) \frac{\beta_f}{2}\right] \Big|_{E=E_{n,\nu}(\hbar, \varepsilon)}, \end{aligned} \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_\nu\left(\tau(x), \frac{y}{\sqrt{\hbar}}\right) &= N_\nu(\hbar) [z(\tau(x))]^{-1/2} \exp\left[i \frac{y^2 \dot{z}(\tau(x))}{2\hbar z(\tau(x))} - i\nu \operatorname{Arg} z(\tau(x))\right] \times \\ &\times H_\nu\left(\frac{y}{\sqrt{\hbar}|z(\tau(x))|}\right) \end{aligned} \quad (15)$$

для любого ε , принадлежащего m -зоне устойчивости уравнения (12). Здесь $p(x, E) = \sqrt{2(E - x^4/4)}$, $z = z(\tau)$ – устойчивое флукс-решение уравнения (12), $\tau(x)$ – гладкое решение (10) относительно x , $|x| < \alpha$ при $\tau \neq 0 \pmod{\pi}$, $\dot{z}(\tau) = dz/d\tau$, $N_\nu(\hbar) = [(\pi\hbar)^{1/4} 2^{\nu/2} \sqrt{\nu!}]^{-1}$, $\beta_f(\varepsilon) = m + \theta(\varepsilon)$, $H_\nu(x)$ – полиномы Эрмита.

Функции (14) локализованы при $\hbar \rightarrow 0$ в малой окрестности оси x , $|x| \leq \alpha$, осциллируя вдоль x с частотой порядка $1/\hbar$ аналогично одномерным ВКБ-функциям, и экспоненциально убывают по y (в силу свойства $\operatorname{Im}(\dot{z}/z) > 0$), осциллируя с частотой порядка $\sqrt{1/\hbar}$, $\hbar \rightarrow 0$, определяемой нулями многочленов Эрмита в (15).

Результатом нашего рассмотрения задачи (8) являются следующие утверждения.

1. Квазиклассические спектральные серии уравнения Шредингера с гамильтонианом (2), порожденные периодическими орбитами (9), имеют следующую общую структуру (с точностью до $\hbar^{3/2}$):

$$E_{n,\nu}^{(1,2)}(\hbar, \varepsilon) = E_0 \left[n + \frac{1}{2} + \beta_f(\varepsilon) \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \right]^{4/3}, \quad (16)$$

где

$$\begin{aligned} E_0 &= U_0^{1/3} \left(\frac{3\pi\hbar}{2^{5/2}\mathbf{K}(1/\sqrt{2})} \right)^{4/3}, \\ \beta_f(\varepsilon) &= m + \theta(\varepsilon), \quad \varepsilon \in \Omega_m, \quad n, \nu = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

2. Процедура квазиклассического квантования комплексным методом ВКБ такова, что используются только устойчивые замкнутые фазовые орбиты, т.е. стохастическая компонента классического движения не рассматривается.

3. С помощью процедуры ВКБ-квантования найдены волновые функции (14).

Далее мы используем серию собственных значений для либрации вдоль направления $x = 0$. Вычисление Ω -потенциала для других серий выполняется аналогично.

Рассмотрим возможность установления соответствия между результатами, полученными на основе гамильтонианов (2) и (1). Явные выражения для спектральных серий (3) и (16) показывают, что единственным связующим фактором является определение спектров (1) и (2) на двумерных решетках. Степенная зависимость по n и ν в (3) и (16), как и следовало ожидать, существенно различная. Если для двумерного гармонического осциллятора мы имеем линейную функцию по этим параметрам, то для гамильтониана (2) – степенную функцию с показателем $4/3$ (в одномерном аналоге модели (2), когда $U(x) = x^4$, возникает такая же степень [17, 19]).

Исследуем Ω -потенциал электронного газа со спектром типа (16). Известно, что Ω -потенциал представим в виде [20]

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \sum_{n,\nu=0}^{\infty} \ln \left[1 + e^{(\mu - E_{n,\nu})\beta} \right]. \quad (17)$$

Используем интегральное представление [21]

$$\ln(1 + \alpha x) = \frac{1}{2\pi} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\pi}{s \sin \pi s} (\alpha x)^s ds, \quad (18)$$

а также формулу [21]

$$\exp(-\alpha x^{h_1}) = \frac{1}{2\pi} \int_{c_1-i\infty}^{c_1+i\infty} h_1^{-1} \alpha^{-s_1/h_1} \Gamma\left(\frac{s_1}{h_1}\right) x^{-s_1} ds_1. \quad (19)$$

В результате мы найдем следующее интегральное представление для Ω -потенциала:

$$\begin{aligned} \Omega = & -\frac{1}{\beta 2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds \frac{\pi e^{\mu\beta s}}{s \sin \pi s} \frac{3}{8\pi i} \int_{c_1-i\infty}^{c_1+i\infty} ds_1 (E_0\beta s)^{-3s_1/4} \Gamma\left(\frac{3s_1}{4}\right) \times \\ & \times \zeta\left(s_1, \beta_f(\varepsilon), \frac{\beta_f(\varepsilon) + 1}{2}\right), \end{aligned} \quad (20)$$

где

$$\zeta(s, a, b) = \sum_{n,k=0}^{\infty} (n + ak + b)^{-s} \quad (21)$$

(дополнительные свойства этой функции изложены в приложении).

Для вычисления контурных интегралов необходимо выделить особые точки функции (21). Это можно сделать, воспользовавшись формулой суммирования [22]

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n) = \frac{1}{2} f(0) + \int_0^{\infty} f(\tau) d\tau + i \int_0^{\infty} \frac{f(it) - f(-it)}{e^{2\pi t} - 1} dt. \quad (22)$$

При этом получается следующее представление для функции (21):

$$\begin{aligned} \zeta(s, a, b) = & \frac{1}{4b^s} + \frac{a+1}{2(s-1)ab^{s-1}} + \frac{1}{a(s-1)(s-2)b^{s-2}} + \\ & + \int_0^{\infty} \frac{\sin[s \arctg(t/b)]}{(e^{2\pi t} - 1)(t^2 + b^2)^{s/2}} dt + \int_0^{\infty} \frac{\sin[s \arctg(at/b)]}{(e^{2\pi t} - 1)((at)^2 + b^2)^{s/2}} dt + \\ & + \frac{2}{a(s-1)} \int_0^{\infty} \frac{\sin[(s-1) \arctg(t/b)]}{(e^{2\pi t} - 1)(t^2 + b^2)^{(s-1)/2}} dt + \\ & + \frac{2}{s-1} \int_0^{\infty} \frac{\sin[(s-1) \arctg(at/b)]}{(e^{2\pi t} - 1)((at)^2 + b^2)^{(s-1)/2}} dt + \\ & + 2 \int_0^{\infty} \frac{d\tau}{(e^{2\pi \tau} - 1)} \int_0^{\infty} \left\{ \frac{\cos[s \arctg((a\tau - t)/b)]}{[(a\tau - t)^2 + b^2]^{s/2}} - \right. \\ & \left. - \frac{\cos[s \arctg((a\tau + t)/b)]}{[(a\tau + t)^2 + b^2]^{s/2}} \right\} \frac{dt}{e^{2\pi t} - 1}. \end{aligned} \quad (23)$$

Из равенства (23) видно, что функция $\zeta(s, a, b)$ имеет простые полюсы в точках $s = 1$ и $s = 2$ с вычетами

$$\operatorname{Res}_{s=1} \zeta(s, a, b) = \frac{a+1-2b}{2a}, \quad \operatorname{Res}_{s=2} \zeta(s, a, b) = \frac{1}{a}.$$

Учитывая особенности Γ -функции, находим

$$\begin{aligned} \Omega = & -\frac{1}{\beta 2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds \frac{\pi e^{\mu\beta s}}{s \sin(\pi s)} \frac{3}{4} \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2\beta_f(\varepsilon)} (E_0\beta s)^{-3/2} + \right. \\ & \left. + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} (E_0\beta s)^n \zeta\left(-\frac{4n}{3}, \beta_f(\varepsilon), \frac{\beta_f(\varepsilon)+1}{2}\right) \right]. \end{aligned} \quad (24)$$

Для вычисления интегралов вида

$$I(r) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds \frac{\pi e^{\mu\beta s} s^r}{\sin(\pi s)} \quad (25)$$

заметим, что

$$I(r) = 2 \operatorname{Re} I_+(r), \quad (26)$$

где

$$I_+(r) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{c+i0}^{c+i\infty} ds \frac{\pi e^{\mu\beta s} s^r}{\sin(\pi s)}. \quad (27)$$

При $r > 0$ можно положить $c = 0$ и тогда

$$I_+(r) = \left(\frac{i}{2\pi}\right)^{r+1} \int_0^{\infty} t^r \exp\left[-t\left(\frac{1}{2} + \frac{\mu\beta}{2\pi i}\right)\right] (1 - e^{-t})^{-1} dt. \quad (28)$$

Учитывая, что [22]

$$\Gamma(s)\zeta(s, v) = \int_0^{\infty} t^{s-1} e^{-vt} (1 - e^{-t})^{-1} dt, \quad (29)$$

получаем

$$I_+(r) = \left(\frac{i}{2\pi}\right)^{r+1} \Gamma(r+1) \zeta\left(r+1, \frac{1}{2} + \frac{\mu\beta}{2\pi i}\right), \quad (30)$$

где $\zeta(s, v)$ – ζ -функция Гурвица.

Равенство (30) является результатом вычисления интеграла (27) для любых значений r , кроме $r = -n - 1$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Для $r = -n - 1$ интеграл (27) может быть вычислен с помощью вычетов.

С учетом изложенного получаем следующее выражение для Ω -потенциала:

$$\begin{aligned} \Omega = & \frac{3}{4\beta} \left\{ \frac{4\pi}{3\beta_f(\varepsilon)} \left(\frac{2\pi}{E_0\beta}\right)^{3/2} \operatorname{Re} \left[e^{-3i\pi/4} \zeta\left(-\frac{3}{2}, \frac{\mu\beta}{2\pi i}\right) \right] + \right. \\ & + \omega_0 + \beta E_0 \zeta\left(-\frac{4}{3}, \beta_f(\varepsilon), \frac{\beta_f(\varepsilon)+1}{2}\right) (1 + e^{-\mu\beta})^{-1} + \\ & + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \left(\frac{E_0\beta}{2\pi}\right)^n \zeta\left(-\frac{4n}{3}, \beta_f(\varepsilon), \frac{\beta_f(\varepsilon)+1}{2}\right) \times \\ & \left. \times 2 \operatorname{Re} \left[e^{i\pi n/2} \zeta\left(n, \frac{1}{2} + \frac{\mu\beta}{2\pi i}\right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (31)$$

где

$$\omega_0 = \frac{\beta_f^2(\varepsilon) - 2\beta_f(\varepsilon) + 3}{24\beta_f(\varepsilon)} \ln(1 + e^{\mu\beta}) \quad \text{при } \mu < 0$$

и

$$\omega_0 = \frac{\beta_f^2(\varepsilon) - 2\beta_f(\varepsilon) + 3}{24\beta_f(\varepsilon)} [\mu\beta + \ln(1 + e^{-\mu\beta})] \quad \text{при } \mu > 0.$$

В высокотемпературном приближении ($\beta \rightarrow 0$) главные члены разложения имеют вид

$$\begin{aligned} \Omega = & \frac{3\sqrt{\pi}}{8\beta_f(\varepsilon)E_0^{3/2}\beta^{5/2}} \left(\frac{\sqrt{2}}{4} - 1 \right) \zeta(5/2) + \\ & + \frac{3\sqrt{\pi}\mu}{8\beta_f(\varepsilon)E_0^{3/2}\beta^{3/2}} \left(\frac{\sqrt{2}}{2} - 1 \right) \zeta(3/2) + O(\beta^{-1}), \end{aligned} \quad (32)$$

где $\zeta(s)$ – ζ -функция Римана.

Сравнивая этот результат с соответствующим выражением (6), легко заметить существенные различия. Так, Ω -потенциал (32) отличается характером поведения в высокотемпературном приближении ($\sim \beta^{-5/2}$) от Ω -потенциала (6) для “гармонического осциллятора” ($\sim \beta^{-3}$). Для последнего первый член разложения (6) соответствует закону Стефана–Больцмана в пространстве размерности $(2 + 1)$.

Таким образом, в данной работе показано, что в низкотемпературной области Ω -потенциалы для гамильтонианов (1) и (2) имеют схожее поведение. В то же время в высокотемпературной области для гамильтониана (2) зависимость Ω -потенциала от температуры имеет существенное отличие от аналогичной зависимости для гамильтониана (1).

Следует заметить, что для сильно анизотропных кристаллических структур “слоистого” и “цепочечного” типов ранее на основе постулирования закона дисперсии в классической области проводились вычисления для свободной энергии (см., например, [20, § 68]). Было показано, что изменение закона дисперсии приводит к существенному изменению температурной зависимости теплоемкости. В нашем рассмотрении закон дисперсии определяется из нерелятивистской квантовой теории и существенным отличием является истинная двумерность задачи. Последнее обстоятельство важно как для осуществления ВКБ-квантования, так и для нахождения волновых функций системы. Еще одним важным аспектом развитого выше подхода является вычисление волновых функций для гамильтониана (2), в котором переменные не разделяются. Само наличие волновых функций для задачи такого типа может быть интересным при вычислении средних моментов, а также спиновых эффектов и их вкладов в термодинамический потенциал системы. Относительно классической системы, соответствующей гамильтониану (2), следует отметить наличие в ней стохастической компоненты [10–12, 15]. Возможно, что это влияет на термодинамические свойства системы.

Если вспомнить, что в классической механике высоковозбужденные состояния отвечают, в частности, стохастическому состоянию системы (т.е. существует стохастическая компонента решения классических уравнений движения), то возможно, что разница в энергии системы $\Delta E = C\beta^{-3} - C_1\beta^{-5/2}$ отвечает термодинамической мере вклада этой стохастической компоненты в энергию системы.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Расчеты Ω -потенциала можно провести с помощью ζ -функции вида

$$\zeta_K(s, a, b) = \sum_{m, n=0}^{\infty} \left(a \left(m + \frac{1}{2} \right) + b \left(n + \frac{1}{2} \right) \right)^{-s},$$

которая связана с функцией (21) следующим образом:

$$\zeta_K(s, a, b) = a^{-s} \zeta \left(s, \frac{b}{a}, \frac{a+b}{2a} \right) = b^{-s} \zeta \left(s, \frac{a}{b}, \frac{a+b}{2b} \right).$$

Приведем некоторые свойства функции $\zeta_K(s, a, b)$, необходимые для вычислений.

Если a/b – иррациональное число, то

$$\begin{aligned} \Gamma(s) \zeta_K(s, a, b) &= \frac{2\pi}{ab \sin(\pi s/2)} (2\pi)^{s-2} (b^{2-s} + a^{2-s}) (2^{s-1} - 1) \zeta(2-s) + \\ &+ \frac{2\pi}{ab \sin(\pi s/2)} \sum_{m, n=1}^{\infty} (-1)^{m+n} \left[\left(\frac{2\pi n}{b} \right)^s - \left(\frac{2\pi m}{a} \right)^s \right] \times \\ &\times \left[\left(\frac{2\pi n}{b} \right)^2 - \left(\frac{2\pi m}{a} \right)^2 \right]^{-1} \end{aligned}$$

при $\operatorname{Re} s \in (-2, 0)$. Если a/b – рациональное число, то соответствующее выражение будет более громоздким, и мы его не приводим. С помощью написанного представления можно убедиться, что функция $\zeta_K(s, a, b)$ имеет простой полюс в точке $s = 2$ с вычетом $1/ab$ и $\zeta_K(0, a, b) = -(a^2 + b^2)/(24ab)$.

Кроме того, можно получить следующие функциональные соотношения

$$\begin{aligned} \Lambda(s) &= \tilde{\Lambda}(2-s), \\ \Lambda(s) &= 2^{s-1} \Gamma \left(\frac{s+1}{2} \right) \zeta_K(s, a, b), \\ \tilde{\Lambda}(s) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \Gamma \left(\frac{s}{2} \right) \tilde{\zeta}(s, a, b), \\ \tilde{\zeta}(s, a, b) &= \frac{(2\pi)^{1-s}}{ab} (b^s + a^s) (2^{-s} - 1) \zeta(s) + \\ &+ \frac{2\pi}{ab} \sum_{m, n=1}^{\infty} (-1)^{m+n} \left[\left(\frac{2\pi n}{b} \right)^{2-s} - \left(\frac{2\pi m}{ab} \right)^{2-s} \right] \times \\ &\times \left[\left(\frac{2\pi n}{b} \right)^2 - \left(\frac{2\pi m}{ab} \right)^2 \right]^{-1}. \end{aligned}$$

Список литературы

- [1] Л. Д. Ландау. Собр. трудов. Т.1. М.: Наука, 1969.
- [2] W. J. De Haas, P. M. van Alphen. Proc. Netherlands Roy. Acad. Sci. 1930. V. 33. P. 680; P. 1106.
- [3] Д. Шенберг. Магнитные осцилляции в металлах. М.: Мир, 1986.
- [4] Я. М. Блантер, М. И. Каганов, Д. В. Посвянский. УФН. 1995. Т. 165. С. 213.
- [5] А. С. Вишивцев, К. Г. Клименко, Б. В. Магницкий. ЖЭТФ. 1995. Т. 107. С. 307; А. С. Вишивцев, К. Г. Клименко. ЖЭТФ. 1996. Т. 109. С. 954.
- [6] В. А. Гейлер, В. А. Маргулис, И. В. Чудаев. ЖЭТФ. 1996. Т. 109. № 3. С. 762.
- [7] И. М. Лифшиц. Избранные труды. Электронная теория металлов. Физика полимеров и биополимеров. М.: Наука, 1994.
- [8] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Наука, 1989.
- [9] Х. Цикон, Р. Фрезе, В. Кири, Б. Саймон. Операторы Шредингера с приложениями к квантовой механике и глобальной геометрии. М.: Мир, 1990.
- [10] Р. Балеску. Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1, 2. М.: Мир, 1978.
- [11] В. В. Козлов. Симметрия, топология и резонансы в гамильтоновой механике. Ижевск: Изд-во Ижевского гос. ун-та, 1995.
- [12] H. Yoshida. Celest. Mech. 1984. V. 32. P. 73.
- [13] O. Bohigas, S. Tomsovic, D. Ullmo. Phys. Rep. 1993. V. 223. № 2. P. 43.
- [14] M. C. Cutzwiller. Chaos in Classical and Quantum Mechanics. New-York: Springer-Verlag, 1990.
- [15] B. Simon. Ann. Phys. 1983. V. 146. P. 209.
- [16] В. П. Маслов. Комплексный метод ВКБ в нелинейных уравнениях. М.: Наука, 1977.
- [17] В. В. Белов, С. Ю. Доброхотов. ДАН СССР. 1988. Т. 298. № 5. С. 1037.
- [18] В. В. Белов, С. Ю. Доброхотов. ТМФ. 1992. Т. 92. № 2. С. 215.
- [19] А. С. Вишивцев, Н. В. Норин, В. Н. Сорокин. ТМФ. 1996. Т. 109. № 1. С. 107.
- [20] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Статистическая физика. Т. 1. М.: Наука, 1995.
- [21] Г. Бейтмен, А. Эрдейи. Таблицы интегральных преобразований. Т. 1. М.: Наука, 1969.
- [22] Г. Бейтмен, А. Эрдейи. Высшие трансцендентные функции. Т. 1. М.: Наука, 1973.

Поступила в редакцию 4.II.1998 г.