Краткие сообщения

01

Некоторые неравенства для электростатической энергии

© В.А. Антонов

Главная (Пулковская) астрономическая обсерватория,
196140 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 20 ноября 2002 г.)

Рассматривается потенциальная энергия системы конечного числа точечных зарядов. Представим себе, что они расположены вдоль одной прямой. Получаемая при этом оценка энергии снизу формально основывается на подсчете взаимодействий только между соседними зарядами, но каждое взаимодействие засчитывается как притяжение. В другом, квантово-механическом, варианте мы имеем дело уже с пространственной задачей N тел. Доказывается, что назший уровень энергии растет по абсолютной величине не быстрее N. Этот результат обобщен на случай, когда массы всех частиц различны.

Введение

Подсчет энергии, приходящейся на нерелятивистское электростатическое взаимодействие в системе элементарных зарядов, представляет интерес в ряде проблем физики твердого тела и физики плазмы. Обычно рассчитывают конкретные случаи относительно правильного расположения зарядов в узлах кристаллической решетки и т.д. Однако может встретиться необходимость рассмотрения более общих конфигураций. В данной работе мы, правда, ограничиваемся в классическом варианте линейным расположением зарядов, но не требуем от него жестких условий равномерности распределения и получаем оценку потенциальной энергии снизу. Кинетическая энергия может дать только положительную добавку, и ее нет смысла включать в расчет.

Напротив, в квантовом варианте, согласно соотношению Гейзенберга, невозможно отвлечься от движения частиц. С математической точки зрения оценка снизу полной энергии N электростатически взаимодействующих частиц сводится при этом к минимизации определенного функционала от волновой функции ψ в $3N$-мерном конфигурационном пространстве (мы рассматриваем сразу трехмерный случай).

В обоих случаях используется одно и то же вспомогательное неравенство для чисто условного экспоненциального закона взаимодействия.

Основное неравенство

Разместим вдоль оси x произвольное число точек с абсциссами x_j $(1 \leq j \leq N)$, занумерованными по правилу

$$x_1 < x_2 < \ldots < x_N. \tag{1}$$

Свяжем с этими точками „заряды“ $\varepsilon_j = \pm 1$ в любой комбинации. Докажем, что

$$\sum_{i<j} \varepsilon_i \varepsilon_j \, e^{-|x_i - x_j|} \geq -\sum_{j=1}^{N-1} e^{-(x_{j+1}-x_j)} \quad (\varepsilon_j = \pm 1). \tag{2}$$

Применяем индукцию по N. При $N = 2$ утверждение очевидно. Будем доказывать его при $N > 2$. Разность левой и правой части (2) обозначим через L. Как функция $N-1$ переменных $u_i = \exp(x_i - x_{i+1})$ она в силу (1) имеет область определения $0 \leq u_i \leq 1$ $(i = 1, 2, \ldots, N-1)$ и линейна по каждому из аргументов u_i. Как всякая полилинейная форма, L достигает минимума на этом кубе в одной из его вершин. Но при обращении хотя бы одной из величин u_i в нуль все можно считать доказанным, так как совокупность N частиц фактически разрывается на подсистемы меньшей численности. Остается проверить вершину $u_1 = u_2 = \ldots = u_{n-1} = 1$, которой соответствует $x_1 = x_2 = \ldots = x_N = x$ и

$$L = \sum_{i<j} \varepsilon_i \varepsilon_j + N - 1 = \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i \cdot \sum_{j=1}^{N} \varepsilon_j - N\right) + N - 1 > 0,$$

что и требовалось доказать.

Очевидно, во все показатели можно вставить произвольный положительный множитель

$$\sum_{i<j} \varepsilon_i \varepsilon_j \, e^{-k|x_i - x_j|} \geq \sum_{j=1}^{N-1} e^{-k(x_{j+1}-x_j)} \quad (\varepsilon_j = \pm 1,\ k > 0). \tag{3}$$

Классические заряженные частицы

Интегрируя (3) по k от 0 до ∞, получаем

$$\sum_{i<j} \frac{\varepsilon_i \varepsilon_j}{|x_i - x_j|} \geq -\sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \quad (\varepsilon_i = \pm 1) \tag{4}$$

при прежнем условии (1). Таким образом, для энергии, например, системы электронов и протонов, расположенных вдоль одной оси, оценка снизу получается, если учитывать только энергию попарного взаимодействия частиц, но с обязательным знаком „минус".

В [1] авторы, ссылаясь на одну идею из [2], дают сходное неравенство для пространственного распределения точечных зарядов любой величины и знака

$$\sum_{i<j} \varepsilon_i \varepsilon_j r_{ij}^{-1} \geq -\sum_{i=1}^{N} \frac{\varepsilon_i^2}{\alpha_i}, \tag{5}$$

где r_{ij} — расстояние между соответствующими точками, $\alpha_i = \min_{j \neq i} r_{ij}$.

В нашем случае нелинейного расположения единичных зарядов (4) дает лучшую оценку в сравнении с (5), хотя различие правых частей выражается не более чем коэффициентом 2.

Квантовые заряженные частицы в пространстве

Отправляемся от гамильтониана одномерного движения N частиц с одинаковыми массами m и экспоненциальным законом взаимодействия

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N} \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{i<j} \varepsilon_i \varepsilon_j k e^{-k|x_i - x_j|} \quad (k > 0, \ \varepsilon_j = \pm 1). \tag{6}$$

Наименьшее собственное значение H_m оператора (6) можно оценить, опираясь на обычное вариационное определение

$$H_m = \min \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi \, d\Omega}{\int \psi^* \psi \, d\Omega}, \tag{7}$$

где $d\Omega = dx_1 dx_2, \ldots, dx_n$, в классе непрерывно дифференцируемых нормируемых комплексных функций ψ $(x_1, x_2, \ldots, x_N)$. Все N-мерное конфигурационное пространство разбивается на $N!$ зон, отличающихся взаимным порядком чисел x_j. Ослабим условия непрерывности волновой функции в том смысле, что откажемся от обязательного совпадения значений при подходе к границе между зонами с обеих сторон. От этого значение минимума в (7) может только уменьшиться. Тогда числитель и знаменатель дроби (7) распадаются в суммы $N!$ слагаемых, причем пары, соответствующие разным зонам, совершенно однотипны и между собой не связаны. Легко понятно, что достаточно брать интегралы только по одной типичной зоне, определяемой (1). Воспользовавшись сразу неравенством (2), получаем

$$H_m \geq \min \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi \, d\Omega}{\int \psi^* \psi \, d\Omega},$$

где

$$\hat{H}_i = \sum_{j=1}^{N} \frac{\hat{p}_j^2}{2m} - k \sum_{j=1}^{N-1} e^{-k(x_{j+1} - x_j)},$$

интегрирование же ведется по области (1). Применим далее преобразование $\hat{P}_1 = \hat{p}_1$, $\hat{Q}_1 = \hat{q}_1$, $\hat{P}_j = (1/2)(\hat{p}_j - \hat{p}_{j-1})$, $\hat{Q}_j = (1/2)(\hat{q}_j - \hat{q}_{j-1})$ $(2 \leq j \leq N)$ (оператор $\hat{q}_j$, как известно, обозначает просто умножение на x_j), при котором остаются в силе соотношения Гейзенберга

$$\hat{Q}_j \hat{P}_j - \hat{P}_j \hat{Q}_j = \hat{q}_j \hat{p}_j - \hat{p}_j \hat{q}_j = i\hbar \quad (1 \leq j \leq N). \tag{8}$$

Соответственно находим, пользуясь коммутативностью $\hat{p}_j$ с разными j,

$$\frac{\hat{p}_{j-1}^2 + \hat{p}_j^2}{2} = \left(\frac{\hat{p}_j^2 - \hat{p}_{j-1}^2}{2}\right)^2 + \left(\frac{\hat{p}_{j-1}^2 - \hat{p}_j^2}{2}\right)^2 \quad (2 \leq j \leq N),$$

$$\hat{H}_1 \geq \hat{H}_2 = \sum_{j=2}^{N} \left(\frac{\hat{P}_1^2}{m} - k e^{-k\hat{Q}_j}\right). \tag{9}$$

При переходе к гамильтониану $\hat{H}_2$ координата Q_1 перестала играть роль и интегрирование по ней можно отбросить. Остальные $N-1$ координат подчинены только условию положительности, независимо друг от друга. Переменные разделились и, следовательно,

$$H_m \geq -(N-1)\lambda,$$

$$\lambda = \min \frac{\int \psi^* \left(\frac{\hat{P}^2}{m} - k e^{-kQ}\right) \psi \, d\Omega}{\int \psi^* \psi \, d\Omega}$$

уже с одномерными волновыми функциями. Но нахождение λ в силу (9) эквивалентно задаче определения собственного значения для уравнения Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (\lambda + k e^{-kx})\psi = 0, \tag{10}$$

отвечающее функции $\psi(x)$ без узлов и со „свободным" граничным условием $\psi'(0) = 0$. Фактически нам понадобится только асимптотика при $k \to \infty$. Ее нетрудно получить, выписав нужное решение (10) через функции Бесселя, но более наглядна обычная для такого рода физических задач аппроксимация при $x \gg k^{-1}$

$$\psi(x) = c e^{-\mu x}, \quad \mu = \frac{\sqrt{-m\lambda}}{\hbar}. \tag{11}$$

Интегрируем левую часть (10) по узкой потенциальной яме вблизи начала координат, учитывая, что сама функция $\psi(x)$ не успевает существенно измениться и член $\lambda\psi$ относительно мал. Тогда

$$\frac{\hbar^2}{m} \psi'(x) + \psi(x) = 0 \quad (k^{-1} \ll x \ll \mu^{-1}).$$

Сравнение с (11) дает приближенно

$$\mu = \frac{m}{\hbar^2}, \quad \lambda = -\frac{m}{\hbar^2}.$$

Резюмируя, находим при больших k

$$H_m \geq -(N-1)\frac{m}{\hbar^2} + o(1). \tag{12}$$

Но ничего из предыдущего не изменится, если истинное движение частиц считать трехмерным, а x_j и $\hat{p}_j$ в (6) заменить проекциями радиус-вектора и векторного оператора импульса на фиксированную ось, т. е. интерпретировать x_j и $\hat{p}_j$ $(j = 1, 2, \dots, N)$ на самом деле соответственно как $\alpha x_j + \beta y_j + \gamma z_j$ и $\alpha \hat{p}_{jx} + \beta \hat{p}_{jy} + \gamma \hat{p}_{jz}$.

Осредним гамильтониан (6) с указанной подстановкой по разным направлениям единичного вектора (α, β, γ). От осреднения гамильтонианов с одинаковым спектром его нижняя граница может только подняться. Выполняя несложные выкладки в предположении равноправия всех ориентировок, приходим этим путем от (12) к

$$\frac{1}{6m}\sum_{j=1}^{N}(\hat{p}_{jx}^2 + \hat{p}_{jy}^2 + \hat{p}_{jz}^2) + \sum_{i<j}\varepsilon_i\varepsilon_j\,\frac{1 - e^{-kr_{ij}}}{r_{ij}} \geq -(N-1)\frac{m}{\hbar^2} + o(1),$$

где $r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$ в смысле неравенства для границы спектра.

Наконец, устремив k к ∞, получаем уже не асимптотическое, а вполне точное неравенство

$$\frac{1}{2m}\sum_{j=1}^{N}\hat{p}_j^2 + \sum_{i<j}\frac{\varepsilon_i\varepsilon_j}{r_{ij}} \geq -\frac{(N-1)m}{3\hbar} \tag{13}$$

(попутно мы переобозначили $3m$ через m). Таким образом, энергия основного состояния системы большого числа N разноименно заряженных элементарных частиц заданной массы m растет по абсолютной величине не быстрее N. Этот результат, легко предвидимый интуитивно, был известен при различных упрощающих предположениях (разбиение на $N/2$ взаимно изолированных пар и т. д.), однако общее доказательство, по-видимому, отсутствует в литературе.

Заметим, что никакие предположения о тождественности частиц нами не использовались.

Часто упоминаемый в литературе результат для плотного газа частиц, подчиняющихся полной статистике, мы считаем неправильным и дезориентирующим. В [3] получена (отрицательная) асимптотическая оценка нижнего энергетического уровня, пропорциональная $N\rho^{1/4}$ (ρ — пространственная плотность плазмы), что, конечно, не согласуется с неравенством (13), при выводе которого не было речи ни об ограничениях на плотность системы, ни о тождественности электронов.

Противоречивость выкладок [3] можно обнаружить следующим образом. Если поверить соответствующему результату, то кинетическая энергия отдельной частицы в основном состоянии должна в среднем составлять по теореме вириала приблизительно

$$T_0 = \rho^{1/4} \tag{14}$$

в системе единиц, где $m = \varepsilon = \hbar = 1$. Соответственно время релаксации должно быть порядка $\rho^{-5/8}$ или несколько менее (за счет логарифмического множителя). Но в силу соотношения неопределенностей в области значений $T < \rho^{5/8}$ энергия T не является достаточно определенной величиной и вряд ли может служить аргументом квантово-механического пропагатора. Между тем величина (14) попадает при больших ρ в эту „неудачную“ область. Иными словами, в данной модели флуктуации развиваются столь быстро, что теряется надежда добраться от инерциального к истинному движению частицы суммированием возмущений. Подобных противоречий не возникает для газа фермионов и в теории горячей плазмы [4], где, как правило, характерная удельная кинетическая энергия существенно превышает (14).

Разные массы

Когда частицы обладают разными массами $m_1, m_2, \dots, m_N$, для получения оценки типа (13) проще всего заменить их с самого начала наибольшей. Но возможен более тонкий прием. Обобщая (9), используем положительную определенность квадратичной формы

$$\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{p_{j-1}^2}{2m_{j-1}} - \frac{(p_j - p_{j-1})^2}{2(m_j + m_{j-1})}.$$

Ниже в выражении H_2 на место m в каждом из слагаемых встают $(1/2)(m_j + m_{j-1})$. Правда, нумерация масс по смыслу применения будет в каждой из $N!$ зон своя. Однако если проследить, во что переходит правая часть (12) при замене одинаковых m на попарные средние арифметические, то возможна общая оценка снизу

$$-\frac{m_1 + m_2}{2} - \frac{m_2 + m_3}{2} - \dots - \frac{m_{N-1} + m_N}{2} \geq -(m_1 + m_2 + \dots + m_N).$$

Следовательно, и в итоге (13) обобщается как

$$\sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2m_j}\hat{p}_j^2 + \sum_{i<j}\frac{\varepsilon_i\varepsilon_j}{r_{ij}} \geq -\frac{1}{3\hbar^2}\sum m_j.$$

Список литературы

[1] *Dyson F.J., Lenard A.* // J. Math. Phys. 1963. Vol. 8. P. 423–434.
[2] *Onsager L.* // J. Phys. Chem. 1939. Vol. 43. P. 189–196.
[3] *Stephen M.J.* // Proc. Phys. Soc. 1962. Vol. 79. P. 994–1000.
[4] *Лисица В.С.* // УФН. 1977. Т. 122. С. 449–495.