Stabilitet i fysiske modeller

Jan Philip Solovej

Indledning

Man skulle måske tro, at det er enhver forskers drøm, når man, som det ret ofte sker, bliver stillet spørgsmålet "kan du forklare, hvad du egentlig forsker i?" Det er da også rigtigt, at der ikke er noget, en forsker hellere vil end fortælle, hvad det er man pusler med og hvad det er, der kører rundt i hovedet på en i mange af døgnets timer. Desværre er det for de fleste matematikere en temmelig utaknemmelig opgave at skulle fortælle om abstrakt matematisk forskning til ganske almindelige mennesker. Jeg har måske en lidt lettere opgave end mange andre matematikere, fordi jeg beskæftiger mig med matematisk fysik og kan beskrive det jeg forsker i i fysiske termer uden nødvendigvis at skulle komme ind på abstrakt matematik. Jeg forsøger mig normalt ved først at forklare, at det jeg forsker i er at forstå, hvorfor alt det, vi ser omkring os, har den størrelse, det har og hvorfor de fleste objekter omkring os er stabile. Hvorfor får man f.eks. to liter vand, når man hælder to gange en liter vand sammen?

Desværre når jeg sjældent meget længere i min forklaring, inden "åh nej! Hvorfor spurgte jeg?" står malet med skræk i den stakkels spørgers ansigt.

Min opgave her er betydelig lettere. Jeg regner med, at du kære læser ikke er helt almindelig (en kompliment!) og vil kunne fordøje en god portion avanceret matematik. Jeg vil forsøge at starte, hvor en førsteårs studerende i matematik vil kunne følge med. Om det er lykkedes mig at holde hele beskrivelsen på det niveau, ved jeg ikke.

Kræver det stor indsigt i fysik at læse denne artikel? Det skader ikke, men jeg vil forsøge ikke at antage noget større kendskab til fysik. Jeg vil give matematiske definitioner på de begreber der optræder. På den anden side vil jeg ikke gøre noget forsøg på alt for lange forklaringer af de fysiske motivationer for definitionerne.

Et af de spørgsmål, der har interesseret mig igennem det meste af min forskningskarriere, er, om de fysiske modeller for mikrokosmos virkelig kan forklare den makroskopiske verden. Min angrebsvinkel er relativt beskeden. Jeg har ingen ambitioner om at kunne beskrive detaljerede materielle egenskaber eller biologiske organismer. Spørgsmålet er på en måde mere overordnet: Kan de fysiske modeller for mikrokosmos overhovedet forklare eksistensen af en makroskopisk verden? Jeg håber i denne artikel at illustrere, at dette langt fra er oplagt.

Når jeg taler om fysiske modeller, så opfatter jeg det som matematiskt formulerede teorier, hvis objekter kan fortolkes i fysiske termer. Det er selvfølgeligt et interessant spørgsmål om disse teorier beskriver virkeligheden korrekt, men det er uden betydning for den matematiske analyse. Alle kendte fysiske teorier har deres begrænsninger i beskrivelsen af virkeligheden. Som matematiske modeller kan man studere dem udover disse begrænsninger og i mange tilfælde få en forståelse for, hvorfor de er begrænsede. Lad mig beskrive den model jeg først vil diskutere og specielt hvilke begrænsninger den har.

Jeg vil tage udgangspunkt i beskrivelser af verden som bestående af positivt ladede atomkerner og negativt ladede elektroner. Atomkernerne består i sig selv af protoner og neutroner, men det har kun betydning ved energier langt ud over, hvad man normalt finder i vores omgivelser. For ikke at gøre det hele for kompliceret ser vi bort fra kernernes indre struktur (og fra eksistensen af andre partikler, hvis eksistens kun har betydning ved meget høje energier).

Ladede partikler vekselvirker med hinanden gennem elektriske og magnetiske kræfter. Da partiklerne desuden har masse, tiltrækker de også hinanden ved tyngdekraften.

Både den magnetiske kraft og tyngdekraften er langt svagere end de elektriske kræfter, derfor vil jeg også til at starte med begrænse mig til at se bort fra disse. Tyngdekraften og magnetiske kræfter har betydning for, hvordan verden omkring os ser ud og at se bort fra dem er en stor begrænsning, derfor vil jeg senere vende tilbage til de problemer, der er involveret i at inkludere dem.

Kvantemekanik og brintatomets stabilitet

To elektriske partikler siddende i punkterne $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2 \in \mathbb{R}^3$ (det tre-dimensionale rum) med ladninger $q_1, q_2 \in \mathbb{R}$ har en elektrisk energi givet ved Coulombs lov

$$\frac{q_1 q_2}{|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|}.$$

Hvis vi forestiller os et atom (brintatomet) bestående af en kerne med ladning $+1$ og masse M og en elektron med masse 1 og ladning[1] -1 vil energien i klassisk mekanik være givet ved følgende funktion af kernens position $\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^3$ og impuls $\boldsymbol{P} \in \mathbb{R}^3$ og elektronens position $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3$ og impuls $\boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^3$

$$E(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{P}) = \frac{1}{2M}\boldsymbol{P}^2 + \frac{1}{2}\boldsymbol{p}^2 - \frac{1}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{X}|}.$$

Problemet er, at denne funktion ikke er defineret for $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{X}$, men mere alvorligt er det, at funktionen ikke er nedadtil begrænset. Det betyder, at den klassiske beskrivelse af et atom muliggør, at det kan have vilkårlig negativ energi. Et sådant atom er ikke stabilt, veksevirkning med omgivelserne vil tillade atomet at afgive vilkårlige store energimængder og elektronen vil falde tættere mod kernen.

[1] Vi vælger at måle alle masser i enheder af elektronmassen og alle ladninger i enheder af minus elektronladningen

Det er et af de problemer, der blev løst af den kvantemekaniske beskrivelse af atomare partikler. Lad mig kort skitsere, hvordan energien af brintatomet beregnes i kvantemekanik. Her beskrives et brintatom ikke ved at angive sted og impuls koordinaterne for elektronen og atomkernen. I stedet beskrives atomet ved at angive en funktion (bølgefunktionen) $\psi : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ afhængig af elektronens og kernens stedkoordinater $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{X})$. I virkeligheden afhænger bølgefunktionen af to yderligere parametre: elektronens spin og kernens spin. Spinnet har stor betydning for fysikken, men ikke umiddelbart for de matematiske aspekter jeg vil diskutere her (sålænge der ses bort fra magnetiske felter). Jeg vil derfor, for ikke at vanskeliggøre notationen for meget, tillade mig at ignorere spinnet[2]. Energien i kvantemekanik afhænger af den funktion ψ, der beskriver atomets tilstand.

Det er ikke alle funktioner ψ, der er relevante. Det er et ikke helt nemt matematisk spørgsmål at præcisere den rigtige klasse af funktioner og den kan endda afhænge af, det fysiske system man betragter. For brintatomet er den "rigtige" klasse af funktioner et såkaldt Sobolev rum, men det vil jeg ikke benytte mig af her. I stedet vil jeg fokusere på den mindre mængde af funktioner, der består af *de en gang kontinuert differentiable funktioner, som er nul uden for en begrænset mængde*. Jeg bruger notationen C_0^1 for denne klasse (superskriptet 1 står for antal gange funktionerne er differentiable og subskriptet 0 står for, at de er nul uden for en begrænset mængde). For brintatomet er funktionsklassen altså $C_0^1(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$. Desuden skal funktionen ψ opfylde *normaliseringen*

$$\iint |\psi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{X})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x} \mathrm{d}\boldsymbol{X} = 1. \tag{1}$$

Denne normalisering os tillader at fortolke $|\psi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{X})|^2$ som sandsynlighedsfordelingen for elektronens og kernens positioner.

For brintatomet er energien udtrykt ved ψ givet ved[3]

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\mathrm{H}}(\psi) &= \frac{1}{2M} \iint |\nabla_{\boldsymbol{X}} \psi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{X})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x} \mathrm{d}\boldsymbol{X} + \frac{1}{2} \iint |\nabla_{\boldsymbol{x}} \psi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{X})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x} \mathrm{d}\boldsymbol{X} \\ &\quad - \iint |\psi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{X})|^2 \frac{1}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{X}|} \mathrm{d}\boldsymbol{x} \mathrm{d}\boldsymbol{X}. \end{aligned}$$

Her er $\nabla_{\boldsymbol{x}} \psi$ og $\nabla_{\boldsymbol{X}} \psi$ gradienterne mht. de variable $\boldsymbol{x}$ og $\boldsymbol{X}$. Man ser relativt nemt, at $\mathcal{E}_{\mathrm{H}}(\psi)$ er veldefineret for $\psi \in C_0^1(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$.

Definition 1 (Brintatomets grundtilstandsenergi)**.** *Brints grundtilstandsenergi er defineret ved*

$$E_{\mathrm{H}} = \inf \left\{ \mathcal{E}_{\mathrm{H}}(\psi) \;\middle|\; \psi \in C_0^1(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3), \iint |\psi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{X})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x} \mathrm{d}\boldsymbol{X} = 1 \right\}.$$

[2]Elektronens spin inkluderes ved blot at lade $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3 \times \{1, -1\}$

[3]I energiudtrykket er der, udover de allerede valgte enheder, valgt enheder, hvor Planck's konstant $\hbar = 1$. D.v.s. at længde måles i Bohr radius, som er ca. $0,5 \times 10^{-10}$meter, energi måles i 2Rydberg som er ca. $4,4 \times 10^{-18}$Joule og tid måles i en enhed som er ca. $2,4 \times 10^{-17}$sekunder.

Stabilitet af brintatomet er påstanden $E_{\mathrm{H}} > -\infty$, altså at energien ikke kan være vilkårlig negativ. Denne ulighed er på ingen måde oplagt, men det er så heldigt, at man faktisk kan udregne *energien af brint* eksakt.

Sætning 2 (Brinatomets energi)**.**

$$E_{\mathrm{H}} = -\frac{1}{2}\frac{M}{M+1}. \tag{2}$$

Schrödinger var den første til at indse dette tilbage i 1927 (selvom han måske ikke havde et fuldstændigt bevis). For bl.a. dette resultat modtag Schrödinger i 1933 nobelprisen[4] i fysik. Niels Bohr havde allerede tidligere forklaret stabiliteten af brint (belønnet med nobelprisen i 1922), men ikke så matematisk veldefineret som Schrödinger.

Stabilitet og usikkerhedsrelationen

Man er ikke altid så heldig i matematik at kunne finde eksakte udtryk for relevante størrelser, som f.eks. E_{H}. Man er derfor interesseret i at kunne give vurderinger altså at finde uligheder, hvor størrelserne indgår.

Man vil ofte i fysikbøger se stabiliteten af brint forklaret ud fra Heisenbergs (nobelprisen i fysik 1932) berømte usikkerhedsrelation mellem sted og impuls. Med notationen fra forrige afsnit formuleres usikkerhedsrelationen normalt ved uligheden

$$\iint_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} |\nabla_{\boldsymbol{x}}\psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{X})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{X} \iint_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} |\boldsymbol{x}-\boldsymbol{X}|^2|\psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{X})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{X} \geq \frac{1}{4},$$

som holder for enhver funktion $\psi \in C_0^1(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)$ med $\iint |\psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{X})|^2\mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{X} = 1$. Det første dobbeltintegral ovenfor fortolkes som forventningsværdien af kvadratet på elektronens impuls og det andet dobbeltintegral som forventningsværdien af kvadratet på afstanden mellem elektronen og kernen. Uligheden udtrykker bl.a. det forhold, at elektronen ikke kan side vilkårligt tæt ved kernen og samtidig have vilkårlig lille impuls. Ved hjælp af usikkerhedsuligheden ser man, at energiudtrykket for brint opfylder

$$\mathcal{E}_{\mathrm{H}}(\psi) \geq \frac{1}{8}\left(\iint |\boldsymbol{x}-\boldsymbol{X}|^2|\psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{X})|^2\mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)^{-1} - \iint \frac{|\psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{X})|^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{X}|}\mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{X}.$$

Denne ulighed forklarer dog *ikke* stabiliteten af brint. Det overlades til læseren at indse dette ved at løse følgende opgave.

[4]Nobelprisens webside: www.nobelprize.org indeholder ofte relativt forståelige forklaringer af den fysik, der ligger til grund for prisen og biografier af prismodtagerne.

Opgave 3. Find en følge af funktioner $\psi_n \in C_0^1(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$ med

$$\iint |\psi_n(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{X})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{X} = 1$$

således, at

$$\frac{1}{8}\left(\iint |\boldsymbol{x}-\boldsymbol{X}|^2 |\psi_n(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{X})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)^{-1} - \iint \frac{|\psi_n(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{X})|^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{X}|} \mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{X} \to -\infty$$

når $n \to \infty$.

Stabiliteten af brint følger altså ikke af den sædvanlige formulering af usikkerhedsrelationen, men den følger af nedenstående stærkere formulering.

Sætning 4 (Hardys usikkerhedsrelation). *For alle funktioner $f \in C_0^1(\mathbb{R}^3)$ gælder*

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x} \geq \frac{1}{4}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{|\boldsymbol{x}|^2} |f(\boldsymbol{x})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}.$$

Der findes tilsvarende uligheder i alle dimensioner større end 3 men ikke i lavere dimensioner.

Denne ulighed, som vi ikke beviser her, giver

$$\begin{aligned}\iint_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} |\nabla_{\boldsymbol{x}} \psi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{X})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{X} &\geq \frac{1}{4}\iint_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} |\boldsymbol{x}-\boldsymbol{X}|^{-2} |\psi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{X})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{X} \\ &\geq \frac{1}{4}\left(\iint_{\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3} |\boldsymbol{x}-\boldsymbol{X}|^{-1} |\psi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{X})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)^2.\end{aligned}$$

for alle $\psi \in C_0^1(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)$ med $\iint |\psi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{X})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{X} = 1$. Den sidste ulighed ovenfor er en konsekvens af Cauchy-Schwarz ulighed (for integraler) eller Jensens ulighed. Ved brug af ovenstående vurdering er det nu nemt at bevise stabiliteten af brint, d.v.s. at, $E_{\mathrm{H}} > -\infty$, men man får ikke den eksakte værdi fra Sætning 2.

En på mange måder mere interessant ulighed, der også udtrykker usikkerhedsrelationen og også giver stabiliteten af brint, er Sobolevuligheden, som jeg igen nævner uden bevis.

Sætning 5 (Sobolevs ulighed). *For alle funktioner $f \in C_0^1(\mathbb{R}^3)$ er*

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x} \geq \frac{3}{4}(2\pi^2)^{2/3}\left(\int_{\mathbb{R}^3} |f(\boldsymbol{x})|^6 \mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)^{1/3}. \tag{3}$$

Der findes tilsvarende uligheder i alle dimensioner større end 3 men ikke i lavere dimensioner.

Makroskopisk stabilitet

Stabiliteten af brint generaliserer nemt til stabilitet af andre atomer og molekyler. Men hvad med makroskopiske objekter der nemt indeholder over 10^{23} partikler? Fra et matematisk synspunkt er vi interesserede i at forstå energien, når antallet af partikler går mod uendelig.

Lad os betragte et system bestående af $2N$ partikler ($N \in \mathbb{N}$), som for overskuelighedens skyld antages alle at have samme masse ($= 1$). Lad os også antage, at halvdelen af partiklerne har ladning $+1$ og den anden halvdel ladning -1. Hvis vi numererer partiklerne $i = 1, 2, \ldots, 2N$ lader vi de første N partikler være positivt ladet, dvs. de har ladningerne $q_i = 1$ for $i = 1, \ldots, N$ og derfor $q_i = -1$ for $i = N + 1, \ldots, 2N$. Positionerne kalder vi $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_{2N} \in \mathbb{R}^3$. Bølgefuntionen for dette system er en C_0^1 funktion af alle disse variable altså $\psi \in C_0^1(\mathbb{R}^{6N})$. Energiudtrykket er givet ved

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{2N}(\psi) &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{2N}\int_{\mathbb{R}^{6N}} |\nabla_{\boldsymbol{x}_i}\psi(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_{2N})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}_1 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{x}_{2N} \\ &\quad + \int_{R^{6N}} \sum_{1 \leq i < j \leq 2N} \frac{q_i q_j}{|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|} |\psi(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_{2N})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}_1 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{x}_{2N}. \end{aligned}$$

Systemets laveste energi (grundtilstandsenergien) er

$$E(2N) = \inf\left\{\mathcal{E}_{2N}(\psi) \;\middle|\; \psi \in C_0^1(\mathbb{R}^{6N}), \int_{\mathbb{R}^{6N}} |\psi(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_{2N})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}_1 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{x}_{2N} = 1\right\}.$$

Resultatet (2) om brintatomets energi betydergiver, at $E(2) = -\frac{1}{4}$. Ved brug af resultatet om brints stabilitet viser man nemt, at der for alle $N \in \mathbb{N}$ gælder $E(2N) > -\infty$.

For at forstå makroskopiske objekter er vi interesserede i, hvad der sker med $E(2N)$ når $N \to \infty$. Jeg har for ganske nylig (se [5, 10]) bevist, at grænseværdien

$$\lim_{N\to\infty} \frac{E(2N)}{(2N)^{7/5}}$$

eksisterer og er strengt negativ. Faktisk finder jeg et udtryk for denne grænseværdi.

Sætning 6 (Dysons formel)**.**

$$\lim_{N\to\infty} \frac{E(2N)}{(2N)^{7/5}} = \inf\left\{\mathcal{E}(u) \mid u \in C_0^1(\mathbb{R}^3),\ \int_{\mathbb{R}^3} |u(\boldsymbol{x})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x} = 1\right\}, \tag{4}$$

hvor

$$\mathcal{E}(u) = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla_{\boldsymbol{x}} u(\boldsymbol{x})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x} - \frac{4^{5/4}\Gamma(\frac{3}{4})}{5\pi^{1/4}\Gamma(\frac{5}{4})} \int |u(\boldsymbol{x})|^{5/2} \mathrm{d}\boldsymbol{x}.$$

At højresiden af (4) ikke er $-\infty$ følger af Sobolevuligheden (3) og Hölders ulighed (som omtales i de fleste bøger om mål og integralteori).

Det kunne umiddelbart se ud som om højresiden af (4) er lige så svær at udregne som $E(2N)$ selv. Det er langt fra tilfældet. Det er nemt at finde højresiden af (4) numerisk på en computer. Antallet N skal ikke være særlig stort (mindre end 10), før selv den hurtigste computer, man teoretisk kan forestille sig, ikke vil kunne udregne $E(2N)$ indenfor en rimelig tid.

Inden jeg tager hele æren for at have bevist (4), skal jeg understrege, at formlen blev gættet af den berømte matematiske fysiker F. Dyson i 1967 [1] og at den ene halvdel af beviset er et fælles arbejde med E. Lieb fra Princeton University. Det samlede bevis er på over 70 sider, så jeg kan ikke komme ind på det her.

Formlen (4) viser, at der må være noget galt med vores beskrivelse af systemet af ladede partikler. Potensen $7/5$ i formlen har nemlig katastrofale følger for eksistensen af en makroskopisk verden. Da $7/5 > 1$ vil en konsekvens af formlen være, at alt stof vil have en voldsom tiltrækningskraft og alt vil kollapse. Bemærk nemlig at to makroskopiske objekter med henholdsvis $2N_1$ og $2N_2$ partikler adskilt vil have en energi, der (hvis jeg ser bort fra en positiv multiplikativ konstant) er ca. $-N_1^{7/5} - N_2^{7/5}$. Hvis vi på den anden side lader dem kollapse til ét objekt, bliver energien $-(N_1+N_2)^{7/5} \ll -N_1^{7/5} - N_2^{7/5}$. De to objekter kan derfor kollapse og udløse en enorm energimængde. Man kan ved en nærmere analyse se, at et makroskopisk objekt med 10^{23} partikler vil få en udstrækning mindre end en atomkerne altså langt mindre end et atom bestående af blot to partikler. Objekter bestående af mange partikler vil altså være langt mindre end objekter med få partikler. Med andre ord formlen (4) betyder, at en makroskpisk verden *ikke* kan eksistere.

Problemet er, at vi har set bort fra, at de negativt ladede elektroner opfylder det meget vigtige *eksklusions-* eller *Pauliprincip*. Dette princip, som blev formuleret af Wolfgang Pauli og for hvilket han fik nobelprisen i fysik i 1945, siger løst sagt, at to elektroner ikke kan være i samme tilstand. Den mere matematiske formulering af Pauliprincippet er, at bølgefunktionen ψ skal være antisymmetrisk i de variable der svarer til elektroner. Dvs. vi skal antage, at ψ opfylder

$$\begin{aligned}&\psi(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N, \boldsymbol{x}_{N+1}, \boldsymbol{x}_{N+2}, \ldots, \boldsymbol{x}_{N+j-1}, \boldsymbol{x}_{N+j}, \boldsymbol{x}_{N+j+1}, \boldsymbol{x}_{2N}) = \\ &-\psi(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N, \boldsymbol{x}_{N+j}, \boldsymbol{x}_{N+2}, \ldots, \boldsymbol{x}_{N+j-1}, \boldsymbol{x}_{N+1}, \boldsymbol{x}_{N+j+1}, \boldsymbol{x}_{2N}),\end{aligned}$$

for alle $j = 1, \ldots, N$. Lad os kalde underummet af $C_0^1(\mathbb{R}^{6N})$ bestående af funktioner med denne egenskab for $C_{\mathrm{F}}^1(\mathbb{R}^{6N})$. Den fysisk korrekte energi er derfor

$$E_F(2N) = \inf\left\{\mathcal{E}_{2N}(\psi) \;\middle|\; \psi \in C_{\mathrm{F}}^1(\mathbb{R}^{6N}), \int_{\mathbb{R}^{6N}} |\psi(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_{2N})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{x}_1 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{x}_{2N} = 1\right\}.$$

For denne energi kan man vise følgende meget fundamentale resultat.

Sætning 7 (Eksistensen af den makroskopiske grænse). *Grænseværdien*

$$\lim_{N\to\infty} \frac{E_F(2N)}{2N} \tag{5}$$

eksisterer.

Bemærk at hvor vi tidligere havde potensen 7/5 optræder nu potensen 1. Grænseværdien udtrykker energien per partikel for makroskopiske objekter. Man kan fortolke eksistensen af denne grænse som eksistensen af en makroskopisk verden. Grænsen omtales i litteraturen normalt som *den termodynamiske grænse* (termodynamik er beskrivelsen af makroskopiske objekter). Vi har her kun omtalt en meget simpel variant af den termodynamiske grænse (se [3]). Værdien af grænsen i (5) kendes ikke.

Eksistensen af (5) er en nem konsekvens af følgende to egenskaber ved $E_F(2N)$.

Lemma 8 (Subadditivitet af energien). *Energien E_F er subadditiv, d.v.s. for alle $N_1, N_2 \in \mathbb{N}$ er*

$$E_F(2(N_1+N_2)) \le E_F(2N_1) + E_F(2N_2). \tag{6}$$

(Det samme gælder i øvrigt også for energien $E(2N)$ defineret uden Pauliprincippet.)

Sætning 9 (Stabilitet of makroskopisk stof). *Der eksisterer en positiv konstant C så*

$$-CN \le E_F(2N) \le 0, \tag{7}$$

for alle $N \in \mathbb{N}$.

Opgave 10. Vis at Sætning 7 følger af Lemma 8 og Sætning 9.

Opgave 11 (Udfordringen). I den form Lemma 8 er formuleret her, tror jeg ikke, den findes i litteraturen. Der findes tilsvarende og endda vanskeligere resultater. Læseren udfordres til at finde et bevis for Lemma 8. Den, der tager udfordringen op, kan overveje at udbygge det til et bachelor- eller fagprojekt i emnet.

Sætning 9 om stabilitet af makroskopisk stof er meget svær at vise og har en lang historie, som jeg kort vil beskrive nedenfor. Det første bevis blev givet af Dyson og Lenard i [2].

Mere om stabilitetsproblemets historie

Vi har set, at forklaringen af atomers stabilitet var en af kvantemekanikkens tidlige triumfer. Den numeriske værdi for E_H givet i Sætning 2 passer i øvrigt fantastisk godt med eksperimenter. Vi har også set, at stabilitet af atomer kan forstås ud fra passende formuleringer af usikkerhedsrelationen, dog ikke ud fra den sædvanlige formulering givet af Heisenberg.

Det overraskende er, at spørgsmålet om stabilitet af makroskopiske systemer er næsten helt overset i fysiklitteraturen. Den første gang, der bliver gjort opmærksom på problematikken, er i en artikel [8] i 1939 af den norske kemiker Lars Onsager (som for et helt andet arbejde fik nobelprisen i kemi i 1968). Onsager[5] giver i sin artikel et stort set matematisk korrekt argument for stabilitet under visse simplificerende antagelser. Onsagers hovedargument har ligget til grund for mange senere beviser for stabilitet. (Den første artikel jeg selv skrev [9] var en kort bemærkning om Onsagers argument.)

Resultatet i Sætning 6 viser, at stabiliteten af makroskopiske objekter ikke kan forklares alene ud fra usikkerhedsrelationen alene. Man er nødt til også at tage Pauliprincippet i betragtning. Denne vitale konsekvens af Pauliprincippet bliver stort set aldrig fremhævet i fysiklitteraturen, hvor der ellers ofte lægges stor vægt på princippets betydning for stabilitet af stjerner, f.eks. de såkaldte hvide dværge. Dyson [1] er den første, der indser betydningen af Pauliprincippet for eksistensen af en makroskopisk verden.

Som allerede nævnt er det også Dyson, der i samarbejde med A. Lenard først viser Sætning 9 om stabiliteten af makroskopisk stof. E. Lieb og J. Lebowitz [3] er de første til at vise eksistensen af den termodynamiske grænse i en betydelig mere generel situation end her.

Som nævnt i indledningen har vi set bort fra magnetiske vekselvirkninger og tyngdekraften. Jeg har selv været med til at vise [4], at man kan inkludere de magnetiske vekselvirkninger i stabilitetsbetragtningerne (se også næste afsnit om uløste problemer). Ved betragtning af magnetiske kræfter kommer lysets hastighed c naturligt ind som en parameter. I de enheder vi har valgt, får lysets hastighed en værdi, der ofte benævnes α^{-1}, hvor α kaldes *finstrukturkonstanten*. Finstrukturkonstantens værdi er $\alpha \approx 1/137$. Fordi α er relativt lille, har de magnetiske kræfter kun lille indflydelse på f.eks. atomare spektre. De ændringer i spektrene, der skyldes de magnetiske kræfter, kaldes for finstrukturen. Det viser sig (se [4]), at man for at få makroskopisk stabilitet må kræve, at finstrukturkonstanten er lille nok. Heldigvis er $1/137$ lille nok!

Tyngdekraften er betydelig mere kompliceret. For denne vekselvirkning gælder makroskopisk stabilitet ikke, men systemer skal være ganske store, før de bliver ustabile. Den indiske fysiker S. Chandrasekhar udviklede teorien for gravitationel stabilitet og instabilitet og fik for det nobelprisen i fysik i 1983. En matematisk behandling af Chandrasekhars teori kan findes i [6, 7]. Når gravitationel instabilitet indtræffer, kan der formodentlig opstå sorte huller. Det er også muligt, at hele universet en gang med tiden vil kollapse. Der findes ikke i dag nogen fysisk teori, der kan forklare de forhold, der opstår under gravitationelt kollapse. Det vil kræve en teori der omfatter både kvantemekanik og generel relativitetsteori.

[5] Selvom Lars Onsager var kemiker, har han haft stor indflydelse på moderne matematik f.eks. indenfor kvantegrupper og topologiske feltteorier.

Det store problem: Stabilitet i kvantefeltteori

Jeg har diskuteret stabilitetsproblemer, der involverer elektromagnetiske kræfter og tyngdekraften. I hele diskussionen indtil videre har jeg stiltiende antaget, at disse kræfter kunne beskrives ved, hvad man vil kalde klassiske felter beskrevet ved funktioner eller vektorfelter på det tre-dimensionale rum. Fysikken fortæller os, at dette ikke er en korrekt beskrivelse. Vekselvirkninger skal beskrives kvantemekanisk. Det vil sige, at felterne skal beskrives ved operatorer på Hilbertrum. Sådanne teorier, hvor felterne er beskrevet kvantemekanisk, kaldes *kvantefeltteorier*.

Et eksempel på en kvantefeltteori er teorien for ladede partiklers vekselvirning med det kvantiserede elektromagnetise felt. Denne teori for lys og stof kaldes *kvanteelektrodynamikken*. Feynman, Schwinger og Tomonaga fik i 1965 nobelprisen for (relativt uafhængigt af hindanden) at have formuleret kvanteelektrodynamikken. Man kunne håbe, at det var muligt at formulere og bevise stabilitet i kvanteelektrodynamik. Det er desværre langt fra tilfældet. Kvantelektrodynamik er en besynderlig teori, hvor fysiske størrelser kun kan udtrykkes som potensrækker i finstrukturkonstanten. D.v.s. finstrukturkonstanten er den variable i potensrækken. Selve opskrivningen af disse potensrækker er ganske vanskelig og man har i dag højst udregnet de første 5 eller 6 led i rækkerne. Dyson var den første, der beskrev, hvordan man systematisk kan finde disse rækker. Dyson er vist også den første, der indser, at disse rækker formodentlig har konvergensradius 0 (jeg ved ikke om der findes et fuldstændigt bevis for dette).

I en teori, der kun er beskrevet ved potensrækker med konvergensradius 0, giver det ingen mening at undersøge stabilitet. Faktisk er der meget lidt, der giver matematisk mening i en sådan teori. Det skal retfærdigvis nævnes, at man, ved at udregne de første få led i kvantelektrodynamikkens potensrækker, får en helt forrygende overenstemmelse med eksperimetelle værdier (ofte overenstemmelse udover 10 betydende cifre).

En måde, at forsøge at studere stabilitet i kvanteelektrodynamik, er ved at indføre en konvergensfaktor. Det er en helt almindelig teknik i matematik. Man indfører en lille ekstra parameter $\varepsilon > 0$, som sikrer at alt konvergerer. Der foregår for tiden en del forskning af stabilitet for kvanteelektrodynamik med en konvergensfaktor inkluderet. Man ville selvfølgelig gerne kunne lade ε gå mod nul, men det er ikke muligt.

Et håb er, at problemerne med kvantelektrodynamik skyldes, at man ikke har den fulde teori. Et langsigtet håb er, at man ved at inkludere de kræfter, vi indtil videre har ignoreret, nemlig den svage og den stærke vekselvirkning, vil få en teori, der ikke har de samme problemer som kvanteelektrodynamik. Man er selvfølgelig mest interesseret i en teori, der inkluderer alle fire kendte kræfter: elektromagnetisme, tyngdekraften og den svage og stærke vekselvirkning. Det har nok meget lange udsigter.

Litteraturliste

[1] Dyson, Freeman J., Ground state energy of a finite system of charged particles, *Jour. Math. Phys.* **8**, 1538–1545 (1967).

[2] Dyson, Freeman J. and Lenard, Andrew, Stability of matter. I , *Jour. Math. Phys.* **8**, 423–434, (1967) and II *Jour. Math. Phys.* **9**, 698–711 (1968).

[3] Lieb, Elliott H. and Lebowitz, Joel L. , The constitution of matter: Existence of thermodynamics for systems composed of electrons and nuclei. Advances in Math. **9**, 316–398 (1972).

[4] Lieb, Elliott H. and Loss, Michael and Solovej, Jan Philip, Stability of matter in magnetic fields, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 985–989 (1995). 22–116, (1977).

[5] Lieb, Elliott H. and Solovej, Jan Philip, Ground state energy of the two-component charged Bose gas, *Commun. Math. Phys.* **252**, 485 – 534, (2004).

[6] Lieb, Elliott H. and Thirring, Walter E. , Gravitational Collapse in Quantum Mechanics with Relativistic Kinetic Energy, *Annals of Phys. (N.Y.)* **155**, 494–512 (1984).

[7] Lieb, Elliott H. and Yau, Horng-Tzer, The Chandrasekhar Theory of Stellar Collapse as the Limit of Quantum Mechanics, *Commun. Math. Phys.* **112**, 147–174 (1987).

[8] Onsager, Lars, Electrostatic Interaction of Molecules, *Jour. Phys. Chem.* **43**, 189–196 (1939).

[9] Solovej, Jan Philip, Some simple counter examples to the Onsager lemma on metric space, *Reports on Math. Phys.*, 28, 1989.

[10] Solovej, Jan Philip, Upper Bounds to the Ground State Energies of the One- and Two-Component Charged Bose Gases. To appear in *Comunications in Mathematical Physics* 2006.