ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р4 - 7917

И.Г.Бранков, В.А.Загребнов, Н.С.Тончев

ТОЧНО РЕШАЕМАЯ МОДЕЛЬ
ДЛЯ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ-ИЗОЛЯТОР

1974

ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 7917

И.Г.Бранков, В.А.Загребнов, Н.С.Тончев

ТОЧНО РЕШАЕМАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ-ИЗОЛЯТОР

Направлено в ***Physica***

Бранков И.Г., Загребнов В.А., Тончев Н.С. Р4 - 7917

Точно решаемая модель, описывающая фазовый переход металл-диэлектрик

Исследуется модель электронов, взаимодействующих с фононами, которая в случае простой кубической (ПК) и объемно-центрированной кубической (ОЦК) решеток в приближении сильносвязанных электронов обнаруживает фазовый переход металл-диэлектрик. Приведено строгое доказательство существования точного в термодинамическом пределе решения.

Препринт Объединенного института ядерных исследований.
Дубна, 1974

Brankov J.G., Zagrebnov V.A., Tonchev N.S. P4 - 7917

An Exactly Solvable Model for Metal-Insulator Phase Transition

A simple model of electrons interacting with phonons which displays a metal-insulator phase transition in the case of simple cubic (s.c.) and body centered cubic (b.c.c.) tight-binding bands is studied. A proof is given that the model is exactly solvable in the thermodynamic limit.

Preprint. Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1974

Рассматривается модель электронов, взаимодействующих с колебаниями решетки, которая в случае узких зон и ПК, ОЦК-решеток описывает фазовый переход металл-диэлектрик. Показано, что эта модель имеет точное решение в термодинамическом пределе.

В настоящей работе исследуются термодинамические свойства модели, описывающей фазовый переход металл-диэлектрик, которая рассматривалась в работах [1,2,3]. Будем исходить из гамильтониана Фрёлиха для электронов, взаимодействующих с колебаниями решетки:

$$\mathcal{H} = \sum_{k,\sigma}(\epsilon_k-\mu)a^+_{k\sigma}a_{k\sigma} + \sum_q \hbar\omega(q)\, b^+_q b_q + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k,\sigma,q} g(q)\left[a^+_{k+q,\sigma}a_{k,\sigma}b_q + \text{э.с.}\right], \qquad (1)$$

где $a^+_{k,\sigma}, a_{k,\sigma}$ и b^+_q, b_q – операторы электронов и фононов соответственно. Как известно, для случая простой кубической (ПК) и объемно-центрированной (ОЦК) решеток в приближении сильной связи для электронов и учете лишь ближайших соседей энергетический спектр обладает свойством: $\epsilon_{k+Q} = -\epsilon_k$, где $Q = \frac{\pi}{a}(\pm I, \pm I, \pm I)$ и a - постоянная решетки. В работах /I,2/ показано, что взаимодействие электронов с модой $\omega(Q)$ приводит к неустойчивости решетки, которая ведет к искажению кристаллической структуры (типа удвоения периода) и переходу металл-диэлектрик. Следовательно, мода $\omega(Q)$ в гамильтониане (I) играет особую роль, и часть взаимодействия, содержащая фононы с волновым вектором Q, исследуется особо:

$$\mathcal{H}_Q = \sum_{k,\sigma} (\epsilon_k - \mu) a^+_{k,\sigma} a_{k,\sigma} + \hbar\omega(Q) b^+_Q b_Q + \\ + g(Q)\sqrt{N}\left(J^+_Q b_Q + J_Q b^+_Q \right), \tag{2}$$

где $J^+_Q = (J_Q)^+ = N^{-1}\sum_{k,\sigma} a^+_{k+Q,\sigma} a_{k,\sigma}$. Следует отметить, что операторы J^+_Q, J_Q ограничены по норме: $\|J^+_Q\| = \|J_Q\| \leq 2$.

Ниже будет показано, что модель, описываемая гамильтонианом(2), имеет точное решение в термодинамическом пределе. С математической точки зрения $\mathcal{H}_Q$ аналогичен модельному гамильтониану Дикке, который используется при исследовании теории мазера/4/. Это позволит при решении задачи (2) воспользоваться техникой, развитой авторами в работе/4/. Необходимо отметить, что эта техника является обобщением метода Н.Н.Боголюбова (мл) /5/ на случай модельных систем, содержащих неограниченные операторы (в нашем случае b^+_Q, b_Q). Здесь мы изложим лишь основные пункты доказательства, детали могут быть легко восстановлены с помощью/4/.

Во-первых, представим гамильтониан (2) в виде суммы $\mathcal{H}_Q = \mathcal{H}_0(\eta_Q) + \mathcal{H}_I(\eta_Q)$, где $\mathcal{H}_0(\eta_Q)$ - аппроксимирующий гамильтониан:

$$\mathcal{H}_0(\eta_Q) = \sum_{k,\sigma} (\epsilon_k - \mu) a^+_{k,\sigma} a_{k,\sigma} + \hbar\omega(Q)\tilde{b}^+_Q \tilde{b}_Q - \\ - \frac{g^2(Q)N}{\hbar\omega(Q)}\left(J^+_Q \eta_Q + J_Q \eta^*_Q - |\eta_Q|^2 \right), \tag{3}$$

с $\tilde{b}^+_Q = (\tilde{b}_Q)^+ = b^+_Q + \frac{g(Q)N^{1/2}}{\hbar\omega(Q)}\eta^*_Q$, а $\mathcal{H}_I(\eta_Q)$ имеет вид:

$$\mathcal{H}_I(\eta_Q) = g(Q)N^{1/2}(J^+_Q - \eta^*_Q)\tilde{b}_Q + \text{э.с.} \tag{4}$$

Параметры η_Q, η^*_Q определяются из условия минимума плотности свободной энергии аппроксимирующего гамильтониана (3):

$$\min_{(\eta_Q \eta^*_Q)} \left\{ -\frac{1}{\beta N} \ln \mathrm{Tr} \exp\left[-\beta \mathcal{H}_0(\eta_Q) \right] \right\} = f_N\left[\mathcal{H}_0(\bar{\eta}_Q) \right],$$

где $\beta^{-1} = \theta$ — температура системы. Нетрудно заметить, что $\mathcal{H}_0(\eta_Q)$ с точностью до гамильтониана перенормированных фононов $\hbar\omega(Q)\tilde{b}^+_Q\tilde{b}_Q$, вклад которых в термодинамику системы имеет порядок $O(N^{-1})$, совпадает с модельным гамильтонианом Маттиса-Лангера/I/ x). Исследование $\lim_{N\to\infty} f_N[\mathcal{H}_0(\eta_Q)]$ показывает, что система испытывает фазовый переход металл-диэлектрик, который подробно рассмотрен в/I,2/.

x) Параметр X в/I/ связан с параметром порядка $|\eta_Q|$ (3) соотношением: $X = \frac{g(Q)}{\hbar\omega(Q)}|\eta_Q|$.

По теореме Боголюбова для разности плотностей свободных энергий, соответствующих $\mathcal{H}_Q$ и $\mathcal{H}_0(\eta_Q)$, получаем неравенства:

$$\frac{1}{N}\langle \mathcal{H}_I(\eta_Q)\rangle \le f_N[\mathcal{H}_Q] - f_N[\mathcal{H}_0(\eta_Q)] \le \frac{1}{N}\langle \mathcal{H}_I(\eta_Q)\rangle_0 , \qquad (5)$$

где $\langle\ldots\rangle$ и $\langle\ldots\rangle_0$ – термодинамические средние соответственно по $\mathcal{H}_Q$ и $\mathcal{H}_0(\eta_Q)$. Из градиентной инвариантности $\mathcal{H}_0(\eta_Q)$ относительно преобразования **бозе-операторов** $\tilde{b}_Q^{+}, \tilde{b}_Q$ следует, что правая часть (5) равна нулю. Для левой части (5) с помощью неравенства Н.Н.Боголюбова получаем оценку:

$$\frac{1}{N}\left|\langle\mathcal{H}_I(\eta_Q)\rangle\right| \le 2|g(Q)|\left[L^{1/2}+|g(Q)|M^{1/2}\right]\times \left[\langle (J_Q^+-\langle J_Q^+\rangle)(J_Q-\langle J_Q\rangle)\rangle\right]^{1/2}, \qquad (6)$$

где $L<\infty$ – верхняя граница для $N^{-1}\langle b_Q^+ b_Q\rangle$, а $M=\|J_Q\|^2$. Флуктуации, стоящие в правой части (6), нетрудно выразить через производные плотности свободной энергии $f_N[\mathcal{H}_{Q,\nu}]$ по внешним источникам: $\mathcal{H}_{Q,\nu}=\mathcal{H}_Q+N(\nu J_Q^+ + \nu^* J_Q)$. /5/.
Таким образом, получаем:

$$0\le f_N[\mathcal{H}_{0,\nu}(\bar{\eta}_Q)] - f_N[\mathcal{H}_{Q,\nu}] \le 2|g(Q)|(L^{1/2}+|g(Q)|M^{1/2})\times \qquad (7)$$
$$\times\left\{\frac{\theta}{N}\left(-\frac{\partial^2 f_N[\mathcal{H}_{Q,\nu}]}{\partial\nu\partial\nu^*}\right)+\frac{R^{1/3}(\nu)}{N^{2/3}}\left(-\frac{\partial^2 f_N[\mathcal{H}_{Q,\nu}]}{\partial\nu\partial\nu^*}\right)^{2/3}\right\}^{1/2}.$$

Здесь $R(\nu)$ – верхняя граница для $2\langle[\mathcal{H}_{Q,\nu},J_Q^+][J_Q,\mathcal{H}_{Q,\nu}]\rangle_{\mathcal{H}_{Q,\nu}}$, которая не зависит от N и конечна при любом фиксированном ν. Далее, используя модифицированную мажорационную технику /4/, **получаем**, наконец, оценку:

$$0\le f_N[\mathcal{H}_0(\bar{\eta}_Q)] - f_N[\mathcal{H}_Q] \le O(N^{-1/4}) . \qquad (8)$$

Тем самым доказана термодинамическая эквивалентность гамильтониана $\mathcal{H}_Q$ и аппроксимирующего гамильтониана $\mathcal{H}_0(\bar{\eta}_Q)$, т.е. задача (2) решается асимптотически точно.

В заключение отметим, во-первых, что $\mathcal{H}_0(\eta_Q)$ соответствует термодинамически эквивалентный гамильтониан с эффективным электрон-электронным притяжением:

$$\mathcal{H}_Q^{eff}=\sum_{k,\sigma}(\epsilon_k-\mu)a^+_{k,\sigma}a_{k,\sigma}-\frac{g^2(Q)}{\hbar\omega(Q)}N J_Q^+ J_Q . \qquad (9)$$

Во-вторых, из приведенного выше доказательства сразу следует, что гамильтониан $\mathcal{H}_0(\bar{\eta}_Q)+[\mathcal{H}-\mathcal{H}_Q]$ термодинамически эквивалентен исходному гамильтониану (I), который содержит, кроме Q, бесконечное число квазидискретных мод. Как отмечалось ранее /6/, таким же свойством "аддитивности" обладают некоторые магнитные спиновые системы с дальнодействием.

Л И Т Е Р А Т У Р А

I. D.C.Mattis, W.D.Langer. Phys.Rev. Lett., 25, 376 (1970).
2. Ю.А.Копаев, Р.А.Тимеров. ЖЭТФ 63, 290 (I972).
3. M.J.Rice, S.Strassler. Solid State Commun. 13, 125 (1973).
4. И.Г.Бранков, В.А.Загребнов, Н.С.Тончев. ОИЯИ Р4-7735, Дубна, I974.
5. N.N.Bogolubov (Jr).A Method for Studying Model Hamiltonians, Pergamon Press 1973,
N.N.Bogolubov (Jr). Physica 32, 933 (1966).
6. J.G.Brankov, A.S.Shumovsky, V.A.Zagrebnov. Preprint JINR E4-7150, Dubna 1973.

Рукопись поступила в издательский отдел 6 мая I974 года.