СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

P4 - 9087

М.Х.Харрасов

ОБ ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА

1975

P4 - 9087

М.Х.Харрасов

ОБ ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА

Метод квазисредних Н.Н.Боголюбова [1] и неравенства для квантовостатистических функций Грина, а также их аналоги [2] для "классических" функций Грина [3] в значительной мере способствовали решению некоторых важных задач статистической механики. Использование неравенств Н.Н.Боголюбова, лежащих в основе известной теоремы об особенностях типа $1/q^2$ в теории вырожденных бозе- и ферми-систем, позволило получить целый ряд точных соотношений, с помощью которых удалось провести математически строгое доказательство отсутствия дальнего порядка в некоторых конкретных моделях бесконечных одно- и двухмерных систем при определенном ограничении на потенциал взаимодействия [4]. На этой основе также был получен ряд нетривиальных оценок в теории переходов типа "порядок - беспорядок" в конечных одно- и двухмерных системах [5,6]. Довольно эффективной оказалось применение неравенств Н.Н.Боголюбова при установлении строгих неравенств для корреляционных функций [7,8].

В данной работе на основе неравенства Н.Н.Боголюбова мы рассмотрим вопрос о наличии щели в энергетическом спектре в одномерной модели Хаббарда при $N \to \infty$ $(N/V = \text{const})$ в случаях $\theta \neq 0$ и $\theta = 0$.

1. Заметим, что до сих пор неравенства Н.Н.Боголюбова и мажорирующие их неравенства использовались для выяснения определенного круга вопросов лишь при отличных от нуля температурах $(\theta \neq 0)$.

Представляет интерес получение соответствующих неравенств для нуля температуры, поскольку в этом случае мы должны исходить из спектральных представлений для корреляционных функций и функций Грина, установленных для $\theta = 0$.

Н.Н. Боголюбовым для двухвременных температурных функций Грина в энергетическом представлении было установлено неравенство /1/.

$$|\langle\langle A;B\rangle\rangle_{E=0}|^2 \leq |\langle\langle A;A^+\rangle\rangle_{E=0}|\cdot|\langle\langle B^+;B\rangle\rangle_{E=0}|, \qquad /1/$$

которое с учетом спектральных представлений

$$\langle\langle A;B\rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} J_{AB}(\omega)\,\frac{e^{\omega/\theta}-1}{E-\omega}\,d\omega,$$

$$/2/$$

$$\langle[A(t);B(t')]\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} J_{AB}(\omega)\,(e^{\omega/\theta}-1)\,e^{-i\omega(t-t')}\,d\omega,$$

и путем выбора $A=[Q(t);H]$ можно записать в виде

$$|\langle\langle B^+;B\rangle\rangle_{E=0}| \geq \frac{1}{2\pi}\,\frac{|\langle[Q;B]\rangle|^2}{|\langle[Q;[Q^+;H]]\rangle|}, \qquad /3/$$

что, в свою очередь, дает

$$\langle B^+B+BB^+\rangle \geq 2\theta\,\frac{|\langle[Q;B]\rangle|^2}{|\langle[Q;[Q^+;H]]\rangle|}. \qquad /4/$$

Для вывода аналогичного неравенства для $\theta=0$ будем исходить из /1/ и обратимся к спектральным представлениям для нуля температуры /9/

$$\langle\langle A;B\rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\epsilon(\omega)}{E-\omega}\,I^0_{AB}(\omega)\,d\omega,$$

$$\langle B(t')\,A(t)\rangle = \int_{-\infty}^{0} I^0_{AB}(\omega)\,e^{-i\omega(t-t')}\,d\omega, \qquad /5/$$

$$\langle A(t)\,B(t')\rangle = \int_{0}^{+\infty} I^0_{AB}(\omega)\,e^{-i\omega(t-t')}\,d\omega,$$

$$\epsilon(\omega) = \begin{cases} 1, & x>0 \\ -1, & x<0. \end{cases}$$

В неравенстве /1/ положим $A=[Q;H]$. Имеем

$$\langle B(t')\,A(t)\rangle = i\frac{\partial}{\partial t}\langle B(t')\,Q(t)\rangle = \int_{-\infty}^{0}\omega I^0_{QB}(\omega)\,e^{-i\omega(t-t')}\,d\omega.$$

Сравнивая полученное выражение с /5/, находим, что

$$I^0_{AB}(\omega) = \omega I^0_{QB}(\omega). \qquad /6/$$

Тогда

$$\langle\langle A;B\rangle\rangle_{E=0} = -\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\epsilon(\omega)}{\omega}\,\omega I^0_{QB}(\omega)\,d\omega =$$

$$/7/$$

$$= \frac{1}{2\pi}\langle B(t)\,Q(t)-Q(t)\,B(t)\rangle_0 = \frac{1}{2\pi}\langle[B(t);Q(t)]\rangle_0.$$

Рассматривая $B(t)$ в соотношении /7/ как произвольный оператор и полагая $B=A^+=-[Q^+;H]$, получаем

$$\langle\langle A;A^+\rangle\rangle_{E=0} = \frac{1}{2\pi}\langle[Q(t);[Q^+(t);H]]\rangle_0. \qquad /8/$$

Подстановка /7/ и /8/ в /1/ приводит к неравенству

$$|\langle\langle B^+(t);B(t)\rangle\rangle_{E=0}| > \frac{1}{2\pi}\,\frac{|\langle[B(t);Q(t)]\rangle_0|^2}{|\langle[Q(t);[Q^+(t);H]]\rangle_0|}. \qquad /9/$$

Значок "0" в последних формулах означает, что соответствующие усреднения должны производиться при $\theta=0$.

Приведем еще одну удобную форму неравенства /1/.

Поскольку спектральная интенсивность $I^0(\omega)$ является неотрицательной функцией, то, согласно спектральным представлениям /5/, справедливо неравенство

$$|\langle\langle B^+;B\rangle\rangle_{E=0}| \le \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\frac{\epsilon(\omega)}{\omega}\right| \cdot I^0_{B^+B}(\omega)\, d\omega = \qquad /10/$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{|\omega|} I^0_{B^+B}(\omega)\, d\omega .$$

Рассматривая левую часть выражения /10/ в случае достаточно малых $\vec{k}$, когда имеет смысл говорить об "элементарных возбуждениях", обладающих определенной энергией, можем предположить, что спектральная интенсивность $I^0_{B^+B}(\omega)$ практически равна нулю при $|\omega| < \mathcal{E}(\vec{k})$, где $\mathcal{E}(\vec{k})$ - минимальная энергия элементарного возбуждения с импульсом $\vec{k}$. Тогда из /10/ следует

$$|\langle\langle B^+;B\rangle\rangle_{E=0}| \le \frac{1}{2\pi\mathcal{E}(\vec{k})}\int_{-\infty}^{+\infty} I^0_{B^+B}(\omega)\, d\omega = \qquad /11/$$

$$= \frac{1}{2\pi\mathcal{E}(\vec{k})}\langle B^+B + BB^+\rangle_0 .$$

Объединяя /9/ и /11/, получаем

$$\langle B^+B + BB^+\rangle \ge \mathcal{E}(\vec{k})\frac{|\langle [B;Q]\rangle_0|^2}{|\langle [Q;[Q^+;H]]\rangle_0|} . \qquad /12/$$

Заметим, что, интересуясь поведением корреляционных функций $\langle B^+B+BB^+\rangle$ в длинноволновом пределе ($\vec{k}\to 0$), в качестве $Q=Q_{\vec{k}}$ следует выбрать "квазиинтеграл" движения данной задачи: $\lim_{\vec{k}\to 0}[Q_{\vec{k}};H]=0$.

II . Обратимся к гамильтониану Хаббарда [10], который имеет следующий вид:

$$H = \sum_{f,f'} \beta_{ff'} a^+_{f\sigma} a_{f'\sigma} + \gamma\sum n_{f,\sigma} n_{f,-\sigma} , \qquad /13/$$

где суммирование по f, f' ведется по узлам решетки $a^+_{f\sigma}$, $a_{f\sigma}$ - операторы рождения и уничтожения электронов со спином $\sigma=\pm 1/2$ в Ванье-состоянии на узле f; $n_{f\sigma}=a^+_{f\sigma}a_{f\sigma}$; в первой сумме обычно учитывают только члены $\beta_{ff}\equiv\alpha_0$ - кулоновский интеграл, $\beta_{f,f\pm 1}=\beta<0$ - резонансный интеграл, γ - параметр кулоновского взаимодействия электронов на одном узле.

Гамильтониан /13/ был использован для объяснения конечной величины щели в спектре π-электронов в длинных полимерных цепочках [11]. Наряду с конечным значением щели в энергетическом спектре при $N\to\infty$ было показано, что основное состояние рассматриваемой цепочки является антиферромагнитным.

Ниже, основываясь на неравенствах /4/ и /12/, мы покажем, что эти результаты имеют место лишь при $\theta=0$.

Воспользуемся следующим представлением спиновых операторов через ферми-операторы [12]

$$S^x_f = \frac{1}{2}(a^+_{f,-1/2}a_{f,+1/2} + a^+_{f,+1/2}a_{f,-1/2}),$$

$$S^y_f = \frac{i}{2}(a^+_{f,+1/2}a_{f,-1/2} - a^+_{f,-1/2}a_{f,+1/2}), \qquad /14/$$

$$S^z_f = \frac{1}{2}(n_{f,-1/2} - n_{f,+1/2}) .$$

Предположим, что основное состояние рассматриваемой системы является антиферромагнитным, т.е. существуют подрешетки типа $f(1)$ и $f(2)$, для которых можем положить

$$\sigma_f = \langle n_{f(1),-1/2} - n_{f,+1/2}\rangle = \langle n_{f(2),+1/2} - n_{f(2),-1/2}\rangle ,$$

В силу трансляционной симметрии величина $\sigma_f = 2|\langle S^z_f\rangle|$ не зависит от f.

Рассмотрим функции Грина вида $\langle\langle a_{f,\sigma};a^+_{f',\sigma}\rangle\rangle_E$. Решение уравнения для введенных функций Грина в приближении Хартри-Фока может быть записано в виде [13]:

$$\langle\langle a_{k\sigma};a^+_{k\sigma}\rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi}\frac{1}{E-E_1(k)} , \qquad /15/$$

$$\langle\langle a_{k+G,\sigma}; a^{+}_{k+G,\sigma}\rangle\rangle_E = \frac{1}{2\pi}\,\frac{1}{E - E_2(k)}\,,$$

где

$$a_{k\sigma} = N^{-1/2}\sum_f a_{f\sigma}\, e^{i\vec{k}\vec{f}}\,,$$

$$E_{1,2}(k) = \alpha_0 + \frac{1}{2}\gamma + \frac{1}{2}(t_k + t_{k+G}) \mp \frac{1}{2}(\gamma^2\sigma_f^2 + (t_{k+G} - t_k)^2)^{1/2},$$

$$t_k = \sum_f (\beta_{ff'} - \beta_{ff}\,\delta_{ff'})\, e^{i\vec{k}(\vec{f}-\vec{f}')}. \qquad /16/$$

Здесь G - волновой вектор такой, что $e^{iGf(1)} = +1$, $e^{iGf(2)} = -1$. В выражении энергетического спектра знак $(-)$ соответствует основному состоянию системы, знак $(+)$ - возбужденным состояниям, которые оказываются отделенными от основного состояния щелью, равной

$$\Delta E = \gamma\sigma_f\,. \qquad /17/$$

Покажем, что при $\theta \neq 0$ и $N \to \infty$ / $V/N = a$ - шаг решетки/

$$\Delta E(N) \to 0\,.$$

Введем операторы

$$S^{(x)}_k = N^{-1/2}\sum_f (-1)^f\, e^{i\vec{k}\vec{f}}\, S^x_f\,, \qquad /18/$$

$$S^{(y)}_k = N^{-1/2}\sum_f e^{i\vec{k}\vec{f}}\, S^y_f\,,$$

и в неравенстве /4/ выберем

$$B = B_k = S^{(x)}_{-k}, \quad Q = Q_k = S^{(y)}_k. \qquad /19/$$

Вычисляя входящие в /4/ коммутаторы, получаем

$$|\langle[\dot{B}_k; Q_k]\rangle|^2 = |\langle[\dot{S}^{(x)}_{-k}; S^{(y)}_k]\rangle|^2 = \qquad /20/$$

$$= \left|\frac{1}{N}\sum_f (-1)^f \langle S^z_f\rangle\right|^2 = \frac{1}{4}\sigma_f^2\,,$$

$$\langle[Q_k; [Q^+_k; H]]\rangle = \langle[S^{(y)}_k; [S^{(y)}_{-k}; H]]\rangle = \qquad /21/$$

$$= \frac{1}{2N}\sum_{ff'\sigma}\beta_{ff'}(1-\cos\vec{k}(\vec{f}-\vec{f}'))\,\langle a^+_{f,\sigma} a_{f',\sigma}\rangle \leq$$

$$\leq \frac{k^\lambda}{4N}\sum_{ff'\sigma}\beta_{ff'}(f-f')^2\,\langle a^+_{f\sigma} a_{f'\sigma}\rangle\,.$$

Подставляя /20 и /21/ в /4/, имеем

$$\langle S^{(x)}_{-k} S^{(x)}_k + S^{(x)}_k S^{(x)}_{-k}\rangle \geq 2\theta\,\frac{\sigma_f^2}{\frac{1}{N}\sum_{ff'\sigma}\beta_{ff'}(f-f')^2\langle a^+_{f\sigma} a_{f'\sigma}\rangle}\,\frac{1}{k^2}\,. \qquad /22/$$

Разделив обе части /22/ на N и суммируя по всем $\vec{k} \neq 0$ в первой зоне Бриллюэна, приходим к неравенству

$$L \geq 2\theta\sigma_f^2 M^{-1}\frac{1}{N}\sum_{k=0}\frac{1}{k^2}\,, \qquad /23/$$

где величины L и M, имеющие статистический порядок N^0, равны

$$L = \frac{1}{N}\sum_{k\neq 0}\langle \dot{S}^{(x)}_{-k} S^{(x)}_k + S^{(x)}_k S^{(x)}_{-k}\rangle\,, \qquad /24/$$

$$M = \frac{1}{N}\sum_{ff'\sigma}\beta_{ff'}(f-f')\,\langle a^+_{f\sigma} a_{f'\sigma}\rangle\,.$$

Для достаточно больших N из /23/ находим

$$L \geq \theta \sigma_f^2 M^{-1} \frac{a^2}{2\pi^2} N. \qquad /25/$$

Тогда для величины энергетической щели, определяемой формулой /17/, получаем следующую оценку

$$\Delta E(N) \leq \gamma (2\pi^2 L)^{1/2} \left(\frac{M}{\theta a^2}\right)^{1/2} \cdot N^{-1/2}. \qquad /26/$$

Соотношение /26/ показывает, что в бесконечной одномерной модели Хаббарда при $\theta \neq 0$ щель в спектре элементарных возбуждений отсутствует, т.е. $\Delta E(N) \to 0$ при $N \to \infty$, в то время как для конечных систем величина первого электронного перехода будет отлична от нуля

$$\Delta E(N) \sim \frac{1}{N^{1/2}}. \qquad /27/$$

Отметим, что аналогичная ситуация имеет место и для сверхпроводящей ферми-системы /6/.

Обратимся теперь к случаю $\theta = 0$. В неравенстве /12/ операторы $B = B_k$ и $Q = Q_k$ возьмем в виде /19/.

В рассматриваемой системе $\mathcal{E}(\vec{k}) = J\sigma_f (ka)^2$ *, где J - порядка обменной энергии между соседними узлами. Тогда из /12/ получаем следующее неравенство:

$$L_0 \geq J \sigma_f^3 M_0^{-1} \frac{N-1}{N}, \qquad /28/$$

$$L_0 = \lim_{\theta \to 0} L, \quad M_0 = \lim_{\theta \to 0} M.$$

При этом величина энергетической щели

$$\Delta E(N) \leq \gamma \left(\frac{L_0 M_0}{J}\right)^{1/3} \left(\frac{N}{N-1}\right)^{1/3} \qquad /29/$$

будет отлична от нуля при $N \to \infty$. Таким образом, при $\theta = 0$ в одномерной модели Хаббарда наряду с антиферромагнитным упорядочением существует щель в спектре одночастичных возбуждений.

---
* Существование такого спектра будет рассмотрено в следующей работе.

Следует заметить, что подобные результаты будут иметь место и для двухмерной модели Хаббарда.

В заключение автор выражает глубокую благодарность Б.И.Садовникову и В.К.Федянину за полезные обсуждения и ценные замечания.

Литература

1. *Н.Н.Боголюбов. Препринт ОИЯИ, Д-781, Дубна,1961.*
2. *Б.И.Садовников, К.Букли. Вестник МГУ, физика, астрономия, №1, 35 /1970/.*
3. *Н.Н.Боголюбов /мл./, Б.И.Садовников. ЖЭТФ, 43, 677 /1962/.*
4. *N.D.Mermin, H.Wagner. Phys.Rev.Lett., 17, 1133 (1966). P.C.Hohenberg. Phys.Rev., 158, 383 (1966). Б.И.Садовников, Е.М.Сорокина. ДАН СССР, 188, 788 /1969/.*
5. *Б.И.Садовников, М.Х.Харрасов. Препринт ИТФ, 74-111Р, Киев, 1974.*
6. *М.Х.Харрасов. Препринт ОИЯИ, Р4-8951, Дубна, 1975.*
7. *В.К.Федянин. ФММ, 28, 217 /1969/. Phys.Lett., 29А, 40 (1969).*
8. *Б.И.Садовников, М.Х.Харрасов. ДАН СССР, 216, 513 /1974/.*
9. *В.Л.Бонч-Бруевич. ЖЭТФ, 31, 522 /1956/.*
10. *J.Hubbard. Proc. Roy. Soc., A276, 238 (1963).*
11. *И.А.Мисуркин, А.А.Овчинников. Письма в ЖЭТФ,4, 248 /1966/. ТЭХ, 3, 451 /1967/.*
12. *Н.Н.Боголюбов. Лекции по квантовой статистике. Изд-во "Наукова думка", Киев. 1949.*
13. *Tadashi. Arai. Phys. Rev., B4, 216 (1971).*

Рукопись поступила в издательский отдел
22 июля 1975 года.