УДК 517.248

С. М. ТАШПУЛАТОВ

(ИЯФ АН РУз., Узбекистан, Ташкент)

СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ОПЕРАТОРА ЭНЕРГИИ ТРЕХЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Аннотация. Исследованы спектральные свойства трехэлектронной системы в модели Хаббарда. Показано, что существенный спектр рассматриваемой системы в квартетном состоянии состоит из единственного отрезка, а трехэлектронное связанное состояние отсутствует. В дублетных состояниях существенный спектр системы состоит из объединения не более трех отрезков. Доказано, что в дублетных состояниях трехэлектронные связанные состояния существует.

Ключевые слова: трехэлектронная система, модель Хаббарда, квартетное и дублетное состояние, трехэлектронное связанное состояние.

Keywords: three-electron system, Hubbard model, quartet and doublet state, three-electron bound state.

В настоящее время модель Хаббарда является одной из интенсивно изучаемых многоэлектронных моделей металла [1, 2]. Однако до сих пор получено очень мало точных результатов для спектра и волновых функций кристалла, описываемого моделью Хаббарда. Представляет большой интерес получение точных результатов для этой модели. В работе [1] был изучен спектр и волновые функции системы двух электронов в кристалле, описываемом гамильтонианом Хаббарда. Известно, что двухэлектронные системы могут находиться в двух состояниях: триплетном и синглетном [1, 2]. Доказано, что спектр оператора в триплетном состоянии имеет только непрерывный спектр, состоящий из отрезка $[m,M]$, а у оператора синглета, кроме непрерывного спектра $[m,M]$, при некоторых значениях квазиимпульса существует единственное антисвязанное состояние [1]. При $U < 0$ (см. (1)) реализуется обратная ситуация: ниже непрерывного спектра имеется связанное состояние (антисвязанное состояние отсутствует). Для первой полосы спектр не зависит от U-параметра кулоновского взаимодействия двух электронов на одном узле и соответствует энергии двух невзаимодействующих электронов и в точности совпадает с триплетной полосой. Вторая полоса в гораздо большей степени определяется кулоновским взаимодействием: от U зависят как амплитуды, так и энергия двух электронов, причем сама полоса исчезает при $U \to 0$, а при $U \to \infty$, неограниченно возрастает. Вторая полоса в основном соответствует одночастичному состоянию, а имен-но движению двойки, т. е. двухэлектронных связанных состояний.

В настоящей работе рассматривается оператор энергии трехэлектронных систем в модели Хаббарда и описывается структура существенного спектра и дискретный спектр системы в дублетных и квартетных состояниях.

Гамильтониан рассматриваемой модели имеет вид

$$H = A\sum_{m,\gamma} a^{+}_{m,\gamma} a_{m,\gamma} + B\sum_{m,\tau,\gamma} a^{+}_{m,\gamma} a_{m+\tau,\gamma} + U\sum_{m} a^{+}_{m,\uparrow} a_{m,\uparrow} a^{+}_{m,\downarrow} a_{m,\downarrow}, \tag{1}$$

где A – энергия электрона в узле решетке, B – интеграл переноса между соседними узлами; для удобства считаем, что $B > 0$, $\tau = \pm e_j, j = 1,2,...,\nu$, где e_j –единичные орты, т.е. суммирование ведется по ближайшим соседям; U – параметр кулоновского взаимодействия двух электронов на одном узле, γ –спиновый индекс ($\uparrow$ или $\downarrow$), а $a^{+}_{m,\gamma}$ и $a_{m,\gamma}$ соответственно, оператор рождения и уничтожения электрона в узле $m \in Z^{\nu}$, (через $\uparrow$ и $\downarrow$ обозначены соответственно, значения спина 1/2 и –1/2). Гамильтониан H действует в антисимметрическом пространстве Фока E_{as}.

Пусть φ_0 – вакуумный вектор в пространстве E_{as}. Квартетное состояние соответствует свободному движению трех электронов на решетке со следующими базисными функциями $q^{3/2}_{m,n,p} = a^{+}_{m,\uparrow} a^{+}_{n,\uparrow} a^{+}_{p,\uparrow} \varphi_0$. Подпространство $\widetilde{E}^{q}_{k}, k = 3/2$, соответствующее квартетному состоянию,

состоит из множества всех векторов вида $\psi = \sum_{m,n,p\in Z^\nu} \widetilde{f}(m,n,p) q^k_{m,n,p}, \widetilde{f} \in l_2^{as.}$, где $l_2^{as}((Z^\nu)^3)$ – пространство антисимметричных функций из $l_2((Z^\nu)^3)$. Обозначим через $\widetilde{H}_k^q$ сужение оператора H на $\widetilde{E}_k^q$.

Теорема 1. Пространство $\widetilde{E}_k^q$ инвариантно относительно оператора H. Оператор $\widetilde{H}_k^q$ является ограниченным самосопряженным оператором. Он порождает ограниченный самосопряженный оператор H^q, действующий в пространстве $l_2^{as.}$ по формуле

$$(H^q f)(p,q,r) = 3Af(p,q,r) + B\sum_\tau [f(p+\tau,q,r) + f(p,q+\tau,r) + f(p,q,r+\tau)] \qquad (2)$$

Сам оператор $\widetilde{H}_k^q$ на вектор $\psi \in \widetilde{E}_k^q$ действует по формуле

$$\widetilde{H}_k^q \psi = \sum_{m,n,p} (H^q f)(m,n,p) q^k_{m,n,p} \ . \qquad (3)$$

Оператора H^q будем называть оператором «трехэлектронного квартета». В квазиимпульсному представлении оператор H^q действует в гильберто-вых пространствах $L_2^{as.}((T^\nu)^3)$ по формуле $H^q f(x,y,z) = h(x,y,z) f(x,y,z)$, где $f \in L_2^{as.}((T^\nu)^3)$, $L_2^{as.}$ – подпространство антисимметричных функций в $L_2((T^\nu)^3)$ и $h(x,y,z) = 3A + 2B\sum_{i=1}^{\nu}(\cos x_i + \cos y_i + \cos z_i)$, $T^\nu - \nu -$ мерный тор, снабженный нор- мированной мерой Лебега $d\lambda$ с $\lambda(T^\nu) = 1$. Спектр оператора H^q состоит только из непрерывного спектра: $\sigma_{cont}(H^q) = [3A - 6B\nu, 3A + 6B\nu]$.

Следовательно, спектр квартетного состояния не зависит от кулоновского взаимодействия U и представляет собой энергии трех невзаимодействующих электронов, движущихся в кристалле. Такой результат вполне естествен, поскольку квартетное состояние не может содержать состояний с двумя электронами на узле.

Теперь рассмотрим дублетное состояние. Пусть φ_0 – вакуумный вектор в пространстве E_{as}. Дублетному состоянию соответствуют следующие базисные функции ${}^1d^{1/2}_{m,n,p} = a^+_{m,\uparrow} a^+_{n,\downarrow} a^+_{p,\uparrow} \varphi_0$, ${}^2d^{1/2}_{m,n,p} = a^+_{m,\uparrow} a^+_{n,\uparrow} a^+_{p,\downarrow} \varphi_0$. Подпространство $\widetilde{E}_1^d$, соответствующее дублетному состоянию, состоит из множества всех векторов вида $\psi = \sum_{m,n,p\in Z^\nu} \widetilde{f}(m,n,p) {}^1d^{1/2}_{m,n,p}, \widetilde{f} \in l_2^{as.}$, где $l_2^{as.}$ – пространство антисимметричных функций из $l_2((Z^\nu)^3)$. Обозначим через $\widetilde{H}_1^d$ сужение оператора H на $\widetilde{E}_1^d$.

Теорема 2. Пространство $\widetilde{E}_1^d$ инвариантно относительно оператора H. Оператор $\widetilde{H}_1^d$ являются ограниченным самосопряженным оператором. Он порождают ограниченный самосопряженный оператор H_1^d действующий в пространстве $l_2^{as.}$ по формуле $(H^d f)(p,q,r) = 3Af(p,q,r) + B\sum_\tau [f(p+\tau,q,r) + f(p,q+\tau,r) + f(p,q,r+\tau)] + U[\delta_{p,q} + \delta_{q,r}] f(p,q,r)$. Сам оператор H_1^d на вектор $\psi \in \widetilde{E}_1^d$ действуют по формуле $\widetilde{H}_1^d \psi = \sum_{m,n,p} (H_1^d f)(m,n,p) {}^1d^{1/2}_{m,n,p}$.

В квазиимпульсном представлении оператор H_1^d действует в гильбертовых пространствах $L_2^{as.}((T^\nu)^3)$ по формуле

$$H_1^d f(x,y,z) = h(x,y,z) f(x,y,z) + U[\int_{T^\nu} f(s,\lambda+\mu-s,\gamma) ds + \int_{T^\nu} f(\lambda,t,\mu+\gamma-t) dt], \qquad (4)$$

где $f \in L_2^{as.}((T^\nu)^3), L_2^{as.}$ – подпространство антисимметричных функций из $L_2((T^\nu)^3)$ и $h(x,y,z) = 3A + 2B\sum_{i=1}^{\nu}(\cos x_i + \cos y_i + \cos z_i)$.

Ясно, что спектральные свойства трехэлектронных систем в модели Хаббарда, тесно связаны со спектральными свойствами его двух электронных подсистем. Можно показать, что оператор H_1^d представлятся в виде:

$$H_1^d = H_{\Lambda_1}^s \otimes I + I \otimes H_{\Lambda_2}^*, \tag{5}$$

где $(H_{\Lambda_1}^s f_{\Lambda_1})(x) = h_{\Lambda_1}(x) f_{\Lambda_1}(x) + U\int_{T^\nu} f_{\Lambda_1}(s)ds$ является оператором синглета (здесь $f_{\Lambda_1}(x) = f(x, \Lambda_1 - x)$, $h_{\Lambda_1}(x) = h(x, \Lambda_1 - x)$ и $\Lambda_1 = x + y = \lambda + \mu$, $(H_{\Lambda_2}^* f_{\Lambda_2})(x) = \widetilde{h}_{\Lambda_2}(x) \times$ $\times f_{\Lambda_2}(x) + U\int_{T^\nu} f_{\Lambda_2}(s)ds$, $\widetilde{h}_{\Lambda_2}(y) = A + 2B\sum_{i=1}^{\nu}\cos(\Lambda_2 - y)$, $f_{\Lambda_2}(y) = f(y, \Lambda_2 - y)$.)

Используя полученные результаты исследования спектра и СС этих операторов и используя представление (5), опишем структуру существенного спектра и дискретного спектра оператора H_1^d.

Обозначим через z^* и z, соответственно, собственные значения операторов H^* и H^s.

Теорема 3. Если $\nu = 1,2$, то существенный спектр оператора дублета H_1^d состоит из объединения трех отрезков: $\sigma_{ess}(H_1^d) = [3A - 2\nu B - 4B\sum_{i=1}^{\nu} cos\frac{\Lambda_i}{2}, 3A + 2\nu B +$ $+ 4B\sum_{i=1}^{\nu} cos\frac{\Lambda_i}{2})] \cup [z^* + 2A - 4B\sum_{i=1}^{\nu} cos\frac{\Lambda_i}{2}, z^* + 2A + 4B\sum_{i=1}^{\nu} cos\frac{\Lambda_i}{2}] \cup [z + A - 2\nu B, z + A + 2\nu B]$, и дискретный спектр дублета состоит из единственного точки $z + z^*$.

Обозначим через z^{***} и $\widetilde{\widetilde{z}}$, соответственно, собственные значения операторов H^* и H^s.

Теорема 4. а) Если $\nu = 3$, $\Lambda = (\Lambda_0, \Lambda_0, \Lambda_0)$ и $U > \frac{B}{4W}$, $\cos\frac{\Lambda_0}{2} \le \frac{1}{2}$, то существенный спектр оператора дублета H_1^d состоит из объединения трех отрезков: $\sigma_{ess}(H^d) = [3A - 6B(1 + 2\cos\frac{\Lambda_0}{2}), 3A + 6B(1 + 2\cos\frac{\Lambda_0}{2})] \cup [z^{***} + 2A - 12B\cos\frac{\Lambda_0}{2}$, $z^{***} + 2A + 12B\cos\frac{\Lambda_0}{2}] \cup [\widetilde{\widetilde{z}} + A - 6B, \widetilde{\widetilde{z}} + A + 6B]$, и дискретный спектр дублета сос-тоит из единственной точки: $\sigma_{disc.}(H_1^d) = \{\widetilde{\widetilde{z}} + z^{***}\}$.

б) Если $\nu = 3$, $\Lambda = (\Lambda_0, \Lambda_0, \Lambda_0)$ и $\frac{B}{4W} < U < \frac{B\cos\frac{\Lambda_0}{2}}{2W}$, $\cos\frac{\Lambda_0}{2} > \frac{1}{2}$, то существенный спектр оператора дублета H_1^d состоит из объединения двух отрезков: $\sigma_{ess}(H^d) =$ $= [3A - 6B(1 + 2\cos\frac{\Lambda_0}{2}), 3A + 6B(1 + 2\cos\frac{\Lambda_0}{2})] \cup [z^{***} + 2A - 12B\cos\frac{\Lambda_0}{2}, z^{***} + 2A + 12B \cdot \cos\frac{\Lambda_0}{2}]$, и дискретный спектр дублета пуст.

в) Если $\nu = 3$, $\Lambda = (\Lambda_0, \Lambda_0, \Lambda_0)$ и $\frac{B\cos\frac{\Lambda_0}{2}}{2W} < U < \frac{B}{4W}$, $\cos\frac{\Lambda_0}{2} < \frac{1}{2}$, то существенный спектр оператора дублета H_1^d состоит из объединения двух отрезков:

$\sigma_{ess}(H_1^d)=[3A-6B(1+2\cos\frac{\Lambda_0}{2}),3A+6B(1+2\cos\frac{\Lambda_0}{2})]\cup[\tilde{\tilde{z}}+A-6B,\tilde{\tilde{z}}+A+6B]$, и дискретный спектр дублета пуст.

d) Если $\nu=3$, $\Lambda=(\Lambda_0,\Lambda_0,\Lambda_0)$ и $U<\frac{B}{4W}$, $\cos\frac{\Lambda_0}{2}>\frac{1}{2}$, то существенный спектр оператора дублета H_1^d состоит из единственного отрезка: $\sigma_{ess}(H^d)=$ $=[3A-6B(1+2\cos\frac{\Lambda_0}{2}),3A+6B(1+2\cos\frac{\Lambda_0}{2})]$, и дискретный спектр дублета пуст.

Эскиз доказательства теорем 3 и 4. Спектры обоих операторов H^* и H^s состоят из непрерывного спектра, являющегося отрезком и из единственного собственного значения. Эти собственные значения в случае, когда $\nu=1,2$, существуют при всех значениях параметров гамильтониана (1), а в трехмерном случае, собственные значения существуют при определенных значениях параметров гамильтониана. Учитывая представление (5) и используя описания спектров операторов H^* и H^s, получаем доказательств этих теорем.

Теперь рассмотрим второе дублетное состояние ${}^2d_{m,n,p}^{1/2}=a_{m,\uparrow}^+a_{n,\uparrow}^+a_{p,\downarrow}^+\varphi_0$.

Подпространство $\tilde{E}_2^d$, соответствующее дублетному состоянию, состоит из множества всех векторов вида $\psi=\sum_{m,n,p\in Z^\nu}\tilde{f}(m,n,p)^2d_{m,n,p}^{1/2},\tilde{f}\in l_2^{as.}$, где $l_2^{as.}$ – прост- ранство антисимметричных функций из $l_2((Z^\nu)^3)$. Обозначим через $\tilde{H}_2^d$ сужение оператора H на $\tilde{E}_2^d$.

В квазиимпульсном представлении оператор H_2^d действует в гильбертовых пространствах $L_2^{as.}((T^\nu)^3)$ по формуле

$$H_2^df(x,y,z)=h(x,y,z)f(x,y,z)+U[\int_{T^\nu}f(s,\mu,\lambda+\gamma-s)ds+\int_{T^\nu}f(\lambda,t,\mu+\gamma-t)dt], \qquad (6)$$

где $f\in L_2^{as.}((T^\nu)^3),L_2^{as.}$ – подпространство антисимметричных функций из $L_2((T^\nu)^3)$ и $h(x,y,z)=3A+2B\sum_{i=1}^{\nu}(\cos x_i+\cos y_i+\cos z_i)$.

Учитывая, что, функция $f(x,y,z)$ является антисимметрический, фор- мулу (6) можно представлять в виде

$$H_2^df(x,y,z)=-h(x,y,z)f(x,y,z)-U[\int_{T^\nu}f(s,\lambda+\gamma-s,\mu)ds-\int_{T^\nu}f(\lambda,t,\mu+\gamma-t)dt], \qquad (7)$$

Легко можно убеждать, на то, что оператора H_2^d можно представлять в виде:

$$H_2^d=-H_{\Lambda_3}^s\otimes I+I\otimes H_{\Lambda_2}^{**}, \qquad (8)$$

где $(H_{\Lambda_3}^sf_{\Lambda_3})(x)=h_{\Lambda_3}(x)f_{\Lambda_3}(x)+U\int_{T^\nu}f_{\Lambda_3}(s)ds$, является оператор синглета, здесь $f_{\Lambda_3}(x)=f(x,\Lambda_3-x)$, $h_{\Lambda_3}(x)=h(x,\Lambda_3-x)$ и $\Lambda_1=x+y=\lambda+\mu$, $\Lambda_2=y+z=\mu+\gamma$, $\Lambda_3=$ $=x+z=\lambda+\gamma$, а $(H_{\Lambda_2}^{**}f_{\Lambda_2})(x)=\tilde{h}_{\Lambda_2}(x)\ f_{\Lambda_2}(x)+U\int_{T^\nu}f_{\Lambda_2}(s)ds$, $\tilde{h}_{\Lambda_2}(y)=A+2B\sum_{i=1}^{\nu}\cos y_i$, $f_{\Lambda_2}(y)=f(y,\Lambda_2-y)$. Используя из полученных результатов исследования спектр и СС этих операторов и используя из представлений (8), описывается структуру существенного спектра и дискретный спектр оператора H_2^d.

Показано, что спектры операторов H_1^d и H_2^d, вообще говоря, являются различными.

Заключение. Исследованы существенный и дискретный спектр оператора энергии трехэлектронных систем в модели Хаббарда с взаимодействием ближайших соседей в ν – мерной решетке Z^{ν}. Показано, что спектр системы в квартетном состоянии состоит только из существенного спектра, а трехэлектронные связанные состояния отсутствует. В системе имеется два дублетных состояния и они имеет различнычых происхождение. В квазиимпульсном представлении действие оператора энергии в дублетных состояниях является суммой оператора умножения и двух частично-интегральных операторов. Показывается, что существенные спектры систем в дублетных состояниях состоят из объединениях не более трех отрезков. А дискретный спектр системы состоит из не более одной точки, т. е. в системе существует не более одного трехэлектронного антисвязанного или связанного состояния.

ЛИТЕРАТУРА

1 Карпенко Б.В., Дякин В.В., Будрина Г.Л. // ФММ. – 1986. – Т. 61, № 4. – С. 702-706.
2 Изюмов Ю.Ф., Скрябин Ю.Н. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. – М.: Наука, 1987. 264 с.

REFERENCES

1 Karpenko B.V., Dyakin V.V., Budrina G.L.// Fiz. Met. Metalloved. 1986. Vol. 61, N 4. P. 702-706. (in Russian).
2 Izyumov Yu.A., Skryabin Yu.N. Statistical Mechanics of Magnetically Ordered Systems. M.: Nauka, 1987. 264 s. (in Russian).

Summary

S. M. Tashpulatov

(INP AS RUz., Uzbekistan, Tashkent)

SPECTRAL PROPERTIES OF THE ENERGY OPERATOR OF THREE_ELECTRON SYSTEM IN A HUBBARD MODEL

Spectral properties of three-electron system in the Hubbard Model is investigated. We show the essential spectra of considering system in the quartet state consists only one segment and the three-electron bound states be absent. We show the essential spectra of the system in the doublet states consists of the unions no more three intervals. We proved the existence three-electron bound state in the doublet states.

Keywords: three-electron system, Hubbard model, quartet and doublet state, three-electron bound state.