

ПРОСТОЙ СПОСОБ ТОЧНОГО РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА С БЕСКОНЕЧНЫМ ОТТАЛКИВАНИЕМ

К. А. Сидоров^{a,b}, С. Г. Овчинников^{a,b}, Н. В. Тихонов^b*

^a *Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

^b *Сибирский федеральный университет
660041, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 3 сентября 2012 г.

Показано, что каноническая статистическая сумма одномерной модели Хаббарда с $U = \infty$ в приближении ближайших соседей определяется произведением канонических статистических сумм спинов и холонов. Для электронной концентрации $0 \leq n_e < 1$ в этом приближении точно вычислены концентрационные и температурные зависимости свободной и внутренней энергий, химического потенциала, энтропии и теплоемкости.

DOI: 10.7868/S0044451013020156

1. ВВЕДЕНИЕ

Модель Хаббарда является одной из немногих базовых моделей физики конденсированного состояния. Ее точное решение с применением анзаца Бете [1] является одним из фундаментальных результатов в области физики сильно коррелированных систем. Спектр элементарных возбуждений как зарядовых, так и спиновых, был исследован при $T = 0$ в работе [2]. В пределе $U \rightarrow \infty$ точная волновая функция упрощается при исключении локальных двухчастичных состояний и ее можно записать в виде произведения спиновой и зарядовой функций [3].

Термодинамика одномерной модели была исследована различными методами: на основе анзаца Бете с помощью гипотезы струн [4, 5] и методом квантовой трансфер-матрицы [6]. Все эти методы достаточно сложны, поэтому представляет интерес получение точных результатов более простым способом. В настоящей работе используется факт расщепления спиновых и зарядовых степеней свободы [3], что приводит к факторизации статистической суммы в виде произведения статистических сумм спинов и холонов. При $U \rightarrow \infty$ обменное взаимодействие меж-

ду ближайшими соседями $J = 2t^2/U \rightarrow 0$, поэтому имеется цепочка невзаимодействующих спинов со статистической суммой $Z^{(s)} = 2^{N_e}$, где N_e — полное число электронов в цепочке. Статистическая сумма холонов $Z^{(h)}$ легко вычисляется благодаря точной диагонализации гамильтониана межатомных перескоков для бесспиновых фермионов. В результате получены простые соотношения между термодинамическими характеристиками электронов и бесспиновых фермионов (холонов).

Исключая из полного базиса локальных состояний $|0\rangle$, $|\sigma\rangle = a_\sigma^\dagger|\sigma\rangle$, $|2\rangle = a_\uparrow^\dagger a_\downarrow^\dagger|0\rangle$ состояния доек, мы фактически проектируем модель Хаббарда на t - J -модель, которую в случае $U \rightarrow \infty$ можно записать в виде

$$H = \sum_{f,\sigma} \varepsilon X_f^{\sigma\sigma} - \sum_{f,m,\sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma}. \quad (1)$$

Здесь $X_f^{pq} = |p\rangle\langle q|$ — операторы Хаббарда, построенные на усеченном локальном базисе для узла f , содержащем три состояния $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$. При этом нарушается электронно-дырочная симметрия, поэтому мы не можем рассматривать наполовину заполненную зону с концентрацией электронов $n_e = N_e/N = 1$ (N — полное число узлов). Наши решения справедливы для концентраций $0 \leq n_e < 1$. В настоящей работе мы ограничиваемся учетом перескоков t_{fm} только между ближайшими соседями.

*E-mail: sgo@iph.krasn.ru

Статья имеет следующую структуру. В разд. 2 мы анализируем многоэлектронные волновые функции и записываем точное выражение для статистической суммы в приближении ближайших соседей. В разд. 3 получено точное решение в атомном пределе ($t = 0$). Концентрационные и температурные зависимости термодинамических характеристик электронов, полученные в результате точного решения при конечных значениях параметра перескока t , рассмотрены в разд. 4. Наконец, в разд. 5 мы сравниваем наши результаты с известными из литературы. В Приложении приведено доказательство факта факторизации статистической суммы в виде произведения статистических сумм для холонов и спинов.

2. АНАЛИЗ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ

Для бесспиновых фермионов базис локальных состояний на узле f состоит всего из двух векторов $|0\rangle_f$ и $|1\rangle_f = a_f^\dagger |0\rangle_f$. Оператор рождения холона на узле f есть X_f^{10} . Условие полноты базиса принимает следующую форму:

$$X_f^{00} + X_f^{11} = 1. \quad (2)$$

Гамильтониан холонов имеет вид

$$H = \sum_f \varepsilon X_f^{11} - \sum_{f,m} t_{fm} X_f^{10} X_m^{01}, \quad (3)$$

причем для холонов справедливо обычное коммутационное соотношение, характерное для свободных фермионов:

$$\begin{aligned} [X_f^{10}, X_m^{01}] &= X_f^{10} X_m^{01} + X_m^{01} X_f^{10} = \\ &= \delta_{fm} (X_f^{11} + X_f^{00}) = \delta_{fm}. \end{aligned} \quad (4)$$

Отметим, что операторы рождения и уничтожения электронов подчиняются уже более сложному коммутационному соотношению:

$$\begin{aligned} [X_f^{\sigma 0}, X_m^{0\sigma}] &= X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma} + X_m^{0\sigma} X_f^{\sigma 0} = \\ &= \delta_{fm} (X_f^{00} + X_m^{\sigma\sigma}) = \delta_{fm} (1 - X_f^{\bar{\sigma}\bar{\sigma}}). \end{aligned} \quad (5)$$

Для операторов (1), (3) существует один очень удобный базис функций, в котором можно записать матрицы этих операторов. Именно, в качестве такого базиса удобно взять волновые функции вида

$$|\psi\rangle = |\psi\rangle_1 |\psi\rangle_2 \dots |\psi\rangle_N = \prod_{i=1}^N |\psi\rangle_i, \quad (6)$$

где

$$|\psi\rangle_i = \begin{cases} |0\rangle_i, & \text{если узел } i \text{ не оккупирован} \\ & \text{электроном,} \\ |1\rangle_i, & \text{если узел } i \text{ оккупирован} \\ & \text{электроном,} \end{cases} \quad (7)$$

при отсутствии спина и

$$|\psi\rangle_i = \begin{cases} |0\rangle_i, & \text{если узел } i \text{ не оккупирован} \\ & \text{электроном,} \\ |\uparrow\rangle_i, & \text{если узел } i \text{ оккупирован} \\ & \text{электроном со спином } 1/2, \\ |\downarrow\rangle_i, & \text{если узел } i \text{ оккупирован} \\ & \text{электроном со спином } -1/2, \end{cases} \quad (8)$$

при наличии спина.

Размерность гильбертова пространства g волновых функций системы электронов связана с размерностью гильбертова пространства бесспиновой системы (системы холонов) $g^{(h)}$ очевидным соотношением

$$g = 2^{N_e} g^{(h)}, \quad (9)$$

где

$$g^{(h)} = \frac{N!}{N_e!(N - N_e)!}. \quad (10)$$

Соотношениями (6)–(8) базис определен с точностью до нумерации базисных векторов, которая, впрочем, никак не влияет на выводимые физические результаты. После определения базиса можно рассматривать матрицы операторов (1) и (3) в этих базисах. В Приложении из такого рассмотрения и общих соображений строго доказывается, что каноническая статистическая сумма в пределе $U \rightarrow \infty$ распадается на произведение статистических сумм для холонов и спинов:

$$Z = Z^{(h)} Z^{(s)}, \quad (11)$$

где

$$Z^{(h)} = \text{Sp} \left(\exp \left(-\frac{H^{(h)}}{k_B T} \right) \right), \quad (12)$$

а $Z^{(s)}$ определяется как

$$Z^{(s)} = 2^{N_e}. \quad (13)$$

Соотношения (11)–(13) очень важны, так как, определяя связь между каноническими статистическими суммами для бесспинового и спинового случаев, они позволяют рассчитать термодинамические

параметры системы при наличии спина, если они уже известны при его отсутствии. Именно, введя обозначение

$$x = 1 - n_e \quad (14)$$

для концентрации дырок и используя хорошо известные тождества статистической физики и термодинамики, сразу получаем следующие соотношения:

$$f = f^{(h)} - k_B T (1 - x) \ln 2 \quad (15)$$

для свободной энергии,

$$s = s^{(h)} + k_B (1 - x) \ln 2 \quad (16)$$

для энтропии,

$$u = u^{(h)} \quad (17)$$

для внутренней энергии,

$$c = c^{(h)} \quad (18)$$

для теплоемкости при постоянных объеме и количестве частиц,

$$\mu = \mu^{(h)} - k_B T \ln 2 \quad (19)$$

для химического потенциала. Отметим, что каждая из формул (15)–(19) имеет следующий общий вид:

$$a = a^{(h)} + a^{(s)}, \quad (20)$$

где $a^{(h)}$ — вклад в величину a , возникающий от множителя $Z^{(h)}$ в равенстве (11) (холонный вклад), $a^{(s)}$ — вклад от множителя $Z^{(s)}$ в том же равенстве (спионный вклад).

3. АТОМНЫЙ ПРЕДЕЛ

В атомном пределе $t = 0$ и гамильтонианы (1) и (3) принимают вид

$$H^{(h)} = \sum_f \varepsilon X_f^{11} \quad (21)$$

для холонov и

$$H = \sum_{f,\sigma} \varepsilon X_f^{\sigma\sigma} \quad (22)$$

для электронов.

Канонические статистические суммы для систем, описываемых гамильтонианами (21), (22), равны соответственно

$$Z^{(h)} = \frac{N!}{N_e!(N - N_e)!} \exp\left(-\frac{N_e \varepsilon}{k_B T}\right), \quad (23)$$

$$Z = \frac{2^{N_e} N!}{N_e!(N - N_e)!} \exp\left(-\frac{N_e \varepsilon}{k_B T}\right). \quad (24)$$

Из приведенных соотношений видно, что в данном случае справедливость равенств (11) и (13) особенно очевидна. Расписав в формулах (23) и (24) факториалы по формуле Стирлинга $n! \approx (n/e)^n$, получим следующие выражения для статистических сумм:

$$Z^{(h)} = \frac{N^N}{N_e^{N_e} (N - N_e)^{N - N_e}} \exp\left(-\frac{N_e \varepsilon}{k_B T}\right), \quad (25)$$

$$Z = \frac{2^{N_e} N^N}{N_e^{N_e} (N - N_e)^{N - N_e}} \exp\left(-\frac{N_e \varepsilon}{k_B T}\right). \quad (26)$$

Из выражений (25), (26) для статистических сумм, с учетом обозначения (14) для концентрации дырок, можно последовательно рассчитать все термодинамические параметры системы. Для свободной энергии, приходящейся на один атом, согласно тождеству $F = -k_B T \ln Z$, получаем

$$f^{(h)} = \varepsilon(1 - x) + k_B T (x \ln x + (1 - x) \ln(1 - x)), \quad (27)$$

$$f = \varepsilon(1 - x) + k_B T \times \\ \times (x \ln x + (1 - x) \ln(1 - x) - (1 - x) \ln 2). \quad (28)$$

Из формул (27), (28) непосредственно находятся удельные энтропия и внутренняя энергия для холонov и электронов:

$$s^{(h)} = -k_B (x \ln x + (1 - x) \ln(1 - x)), \quad (29)$$

$$s = -k_B ((1 - x) \ln 2 - (x \ln x + (1 - x) \ln(1 - x))), \quad (30)$$

$$u^{(h)} = u = \varepsilon(1 - x). \quad (31)$$

Отметим, что соотношения (29) и (30) находятся в полном согласии с формулой Больцмана, согласно которой

$$s = -k_B \overline{\ln w} = -k_B \sum_k w_k \ln w_k.$$

Далее, теплоемкость $c = (\partial u / \partial T)_{V, N_e}$ в атомном пределе равна нулю:

$$c^{(h)} = c = 0. \quad (32)$$

Этот результат имеет простую интерпретацию: из вида гамильтонианов (21) и (22) видно, что все их собственные значения одинаковы и равны $N_e \varepsilon$, так что внутренняя энергия не изменяется при изменении температуры. Наконец, химический потенциал

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial N_e} = \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial N_e} = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial x}$$

можно записать в виде

$$\mu^{(h)} = \varepsilon - k_B T \ln \frac{x}{1 - x}, \quad (33)$$

$$\mu = \varepsilon - k_B T \ln \frac{2x}{1 - x}. \quad (34)$$

Важно отметить, что все выведенные соотношения (27)–(34) находятся в полном согласии с (15)–(19).

4. ТОЧНЫЙ РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРИ КОНЕЧНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ ПАРАМЕТРА ПЕРЕСКОКА

Коммутационное соотношение (4) для холонов, характерное для свободных фермионов, позволяет легко диагонализировать гамильтониан (3) простым преобразованием Фурье. В результате находим точное выражение для спектральной функции

$$\langle X_k^{10} X_k^{01} \rangle = \left\{ \exp \left(\frac{t(k) - \mu^{(ns)}}{k_B T} \right) + 1 \right\}^{-1} = f_{FD}(t(k)), \quad (35)$$

совпадающее с выражением для функции распределения свободных электронов Ферми–Дирака. В выражении (35) $t(k)$ — это обычный зонный спектр, который в одномерном случае в приближении ближайших соседей имеет вид

$$t(k) = -2t \cos(ka). \quad (36)$$

Для расчета термодинамических свойств системы необходимо в первую очередь решить уравнение для химического потенциала:

$$\sum_k \left\{ \exp \left(\frac{t(k) - \mu^{(h)}}{k_B T} \right) + 1 \right\}^{-1} = \frac{N}{\pi} \times \int_0^\pi dy \left\{ \exp \left(\frac{-2t \cos y - \mu^{(h)}}{k_B T} \right) + 1 \right\}^{-1} = N_e, \quad (37)$$

где суммирование проводится по всем векторам k из первой зоны Бриллюэна. На втором шаге вычисляем внутреннюю энергию системы холонов:

$$u^{(h)} = \frac{1}{N} \sum_k t(k) f_{FD}(t(k)) = -\frac{2t}{\pi} \times \int_0^\pi \cos y dy \left\{ \exp \left(\frac{-2t \cos y - \mu^{(h)}}{k_B T} \right) + 1 \right\}^{-1}. \quad (38)$$

Из формулы (38) последовательно вычисляются теплоемкость при постоянных объеме и количестве электронов, энтропия и свободная энергия:

$$c^{(h)} = \left(\frac{\partial u^{(h)}}{\partial T} \right)_{V, N_e}, \quad (39)$$

$$s^{(h)} = \int_0^T \frac{c^{(h)}}{T} dT, \quad (40)$$

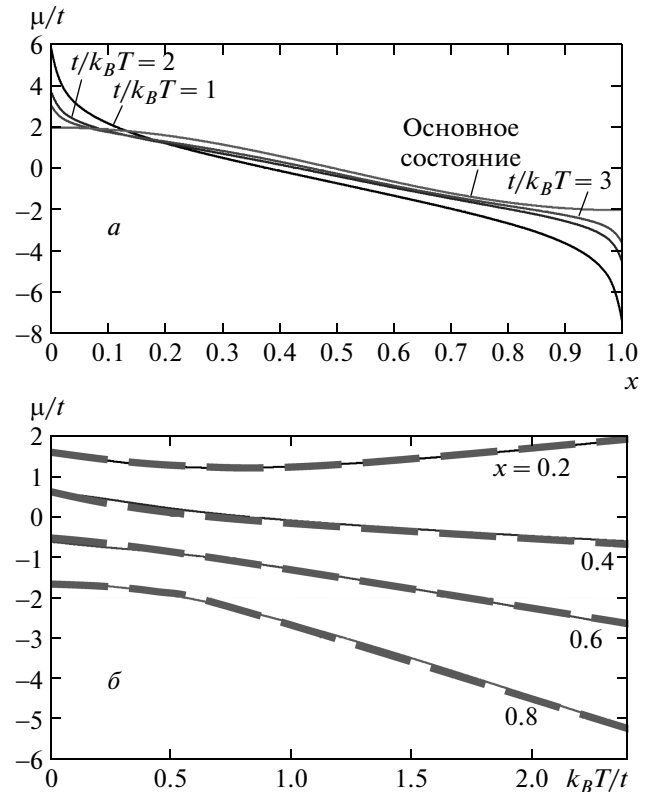


Рис. 1. Концентрационная (а) и температурная (б) зависимости электронного химического потенциала. На рис. б жирные штриховые линии — данные работы [8]

$$f^{(h)} = u^{(h)} - T s^{(h)}. \quad (41)$$

В результате получаются хорошо известные зависимости, отражающие поведение идеального ферми-газа [7]. Отметим, что полное число состояний на атом в зоне холонов равно единице, поэтому в приближении ближайших соседей концентрационная зависимость для химического потенциала антисимметрична, а для остальных термодинамических характеристик холонов симметрична относительно концентрации $x = 1/2$.

Перейдем теперь к расчету термодинамических свойств системы при наличии спина. Как уже упоминалось, путь к расчету таких термодинамических параметров открывает равенство (11). Именно с его помощью выше были получены формулы (15)–(19). Результаты проведенного нами численного расчета для химического потенциала представлены на рис. 1. В силу соотношения (19) энергия и волновое число Ферми электронной системы не отличаются от их значений в холонной системе. В последней эти

значения вычисляются из известных элементарных соображений. В результате находим радиус одномерной сферы Ферми

$$k_F^{(h)} = \frac{N_e}{N} \frac{\pi}{a} = (1-x) \frac{\pi}{a} \quad (42)$$

и энергию Ферми

$$\varepsilon_F^{(h)} = -2t \cos(\pi(1-x)) = 2t \cos(\pi x). \quad (43)$$

Таким образом, при $T = 0$ зависимость химического потенциала от концентрации дырок имеет вид обычного косинуса. Однако, как только температура становится отличной от нуля, химический потенциал при $x = 0$ и $x = 1$ обращается соответственно в $+\infty$ и $-\infty$. Это обстоятельство наиболее наглядно демонстрируется на примере уравнения (37), рассмотренного нами выше для холонов. При $x = 0$ имеем $N_e = N$. Сумма же, состоящая из N слагаемых, может быть равна N тогда и только тогда, когда каждое слагаемое в отдельности равно единице. Этому условию можно удовлетворить либо положив $\mu^{(h)} \geq 2t$ и $T = 0$ (в соответствии с соотношением (43) убеждаемся, что в данном случае $\mu^{(h)} = 2t$), либо взяв $\mu^{(h)} = +\infty$ и $T \neq 0$. В соответствии же с формулой (19) при наличии в системе спина график функции

$$\frac{\mu}{t} = \frac{\mu}{t} \left(x, \frac{t}{T} = \text{const} \right)$$

просто сдвигается вниз относительно оси ординат. Случай $x = 1$ рассматривается аналогично.

В соответствии с соотношениями (17) и (18) внутренняя энергия и теплоемкость электронов совпадают с внутренней энергией и теплоемкостью холонов. Вкратце обсудим полученные результаты (рис. 2, 3). Все зависимости $u(x, T/t = \text{const})$ располагаются между кривой, описывающей основное состояние,

$$\begin{aligned} u^{(h)}(T = 0) &= \frac{1}{N} \sum_{k=-k_F}^{k_F} \varepsilon(k) = \\ &= -\frac{t}{\pi} \int_{-(1-x)\pi}^{(1-x)\pi} \cos y dy = -\frac{2t}{\pi} \sin(\pi x), \quad (44) \end{aligned}$$

и кривой, соответствующей бесконечной температуре,

$$\begin{aligned} u^{(h)}(T = \infty) &= 2 \frac{1}{\pi} \sum_{k=\pi x/a}^{\pi/a} \varepsilon(k) = \\ &= -\frac{2t}{\pi} \int_{\pi x}^{\pi} \cos y dy = \frac{2t}{\pi} \sin(\pi x). \quad (45) \end{aligned}$$

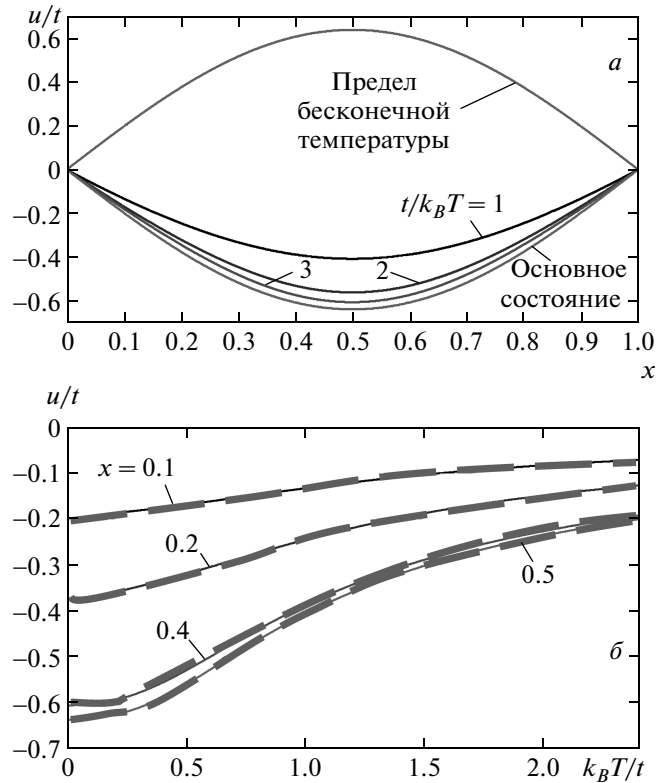


Рис. 2. Концентрационная (а) и температурная (б) зависимости электронной внутренней энергии. На рис. б жирные штриховые линии — данные работы [8]

Таким образом, по мере увеличения температуры кривая плавно переходит из своего положения (44) при $T = 0$ к предельному положению (45) при $T \rightarrow \infty$.

То же поведение, конечно, наблюдается и на температурных зависимостях внутренней энергии $u(k_B T/t, x = \text{const})$: кривые начинаются в точках $(0, -(2t/\pi) \sin(\pi x))$ и при $T \rightarrow \infty$ стремятся к горизонтальной асимптоте (45).

Кривые $c(x, T/t = \text{const})$, описывающие зависимость теплоемкости от концентрации при постоянном объеме и количестве электронов, при увеличении температуры возрастают из начального положения $c = 0$ при $T = 0$, достигают некоторой критической (самой верхней) кривой и далее, сплюсываясь, стремятся к нулю при $T \rightarrow \infty$. Ту же физическую особенность можно увидеть при рассмотрении температурной зависимости теплоемкости.

В соответствии с формулой (16) энтропия возрастает на $k_B(1-x) \ln 2$ по сравнению с вкладом холонов. Получаемые при такой добавке концентрационные зависимости представлены на рис. 4а.

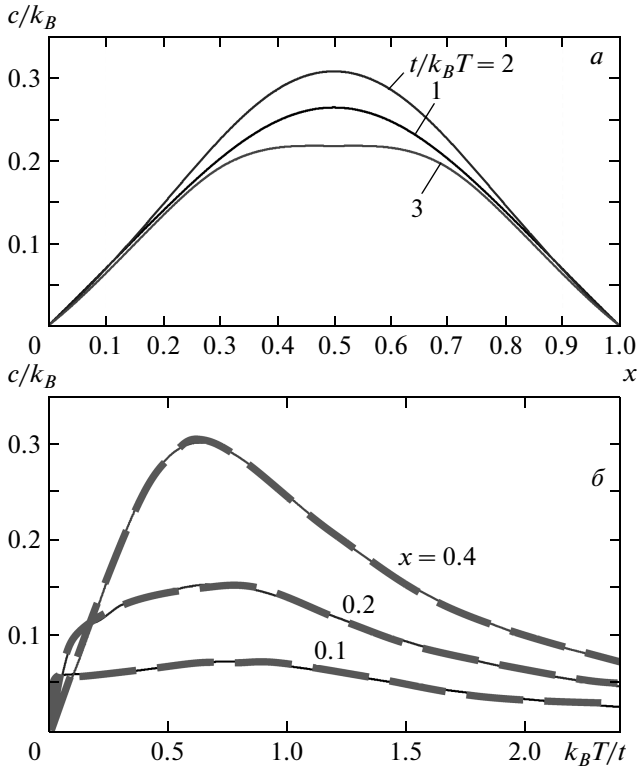


Рис. 3. Концентрационная (а) и температурная (б) зависимости электронной теплоемкости с учетом равенства (18). На рис. б жирные штриховые линии — данные работы [8]

При $x = 0$ виден хорошо известный результат $s(x = 0) = k_B \ln 2$, т. е. энтропия определяется локализованными спинами $\sigma = 1/2$. Далее, по мере увеличения отношения $t/k_B T$ кривая $s(x)$ «переходит» из своего начального положения, описываемого равенством (30), в прямую, определяемую уравнением $s = k_B(1 - x) \ln 2$. Кривые $s(k_B T/t)$ «выходят» из точки $(0, k_B(1 - x) \ln 2)$ и при $k_B T/t \rightarrow \infty$ стремятся к своей асимптоте, описываемой равенством (30) (рис. 4б).

Обсудим, наконец, поведение свободной энергии. Кривая $f(x)$ (рис. 5а) по мере возрастания отношения $t/k_B T$ «сплюсчивается» из минус бесконечности к «критической» кривой

$$f(x, T = 0) = u(x, T = 0) = -\frac{2t}{\pi} \sin(\pi x),$$

которая, в соответствии с (15), определяется одним и тем же уравнением как при наличии спина, так и при его отсутствии. Кривые $f(k_B T/t)$ выходят из точки $(0, -(2t/\pi) \sin(\pi x))$ и при $k_B T/t \rightarrow \infty$ асимптотически приближаются к прямым, описываемым уравнением (рис. 5б)

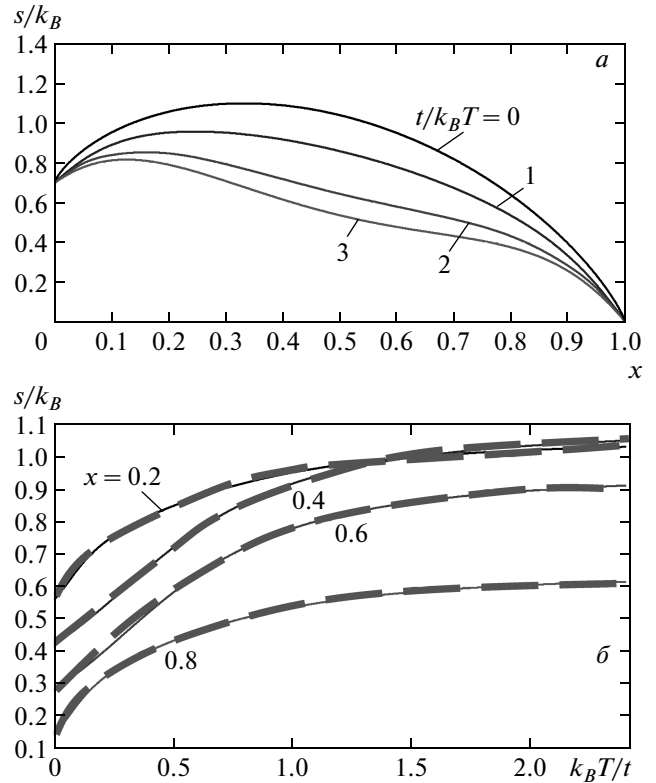


Рис. 4. Концентрационная (а) и температурная (б) зависимости электронной энтропии

$$f = \frac{2t}{\pi} \sin(\pi x) - k_B T ((1-x) \ln 2 - x \ln x - (1-x) \ln(1-x)). \quad (46)$$

5. СРАВНЕНИЕ С РЕЗУЛЬТАТАМИ ДРУГИХ РАБОТ

Температурные зависимости термодинамических величин ранее были вычислены для одномерной модели Хаббарда при $U = \infty$ в работе [8] без привлечения идей о спин-зарядовом расщеплении. Как видно из представленных нами температурных зависимостей на рис. 1б, 2б, 3б, 4б, 5б, полученные нами результаты полностью совпадают с данными [8]. В то же время концентрационные зависимости ранее не приводились в литературе. Для конечных U в работах [5, 6] приведены температурные зависимости теплоемкости, которые при малых x имеют два пика. Низкотемпературный узкий пик связан со спиновыми возбуждениями и достигается при $T \sim J/k_B \sim t^2/k_B U$; этот пик отсутствует в пределе $U \rightarrow \infty$. Более широкий высокотемпературный пик обусловлен зарядовыми возбуждениями. Он слабо зависит от величины U , и для $U = 4t$ и $U = 8t$ при

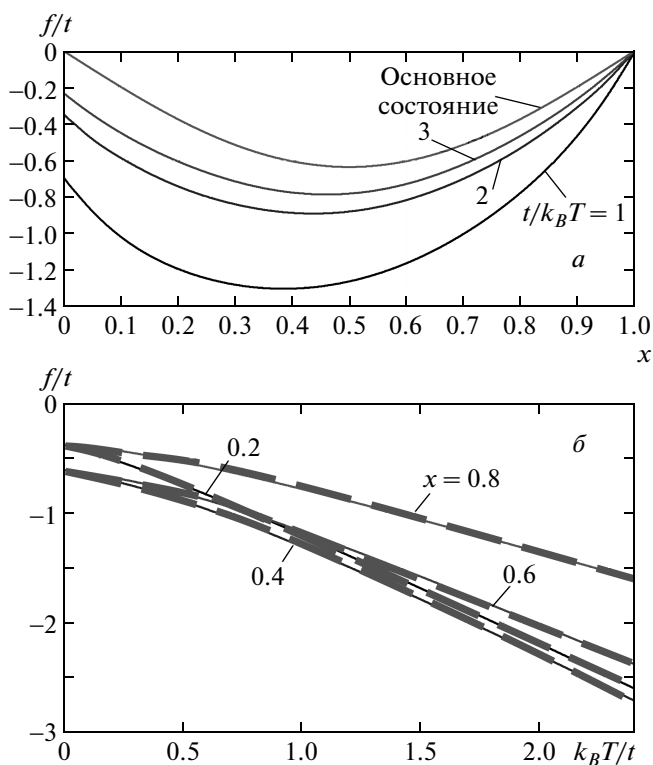


Рис. 5. Концентрационная (а) и температурная (б) зависимости электронной свободной энергии

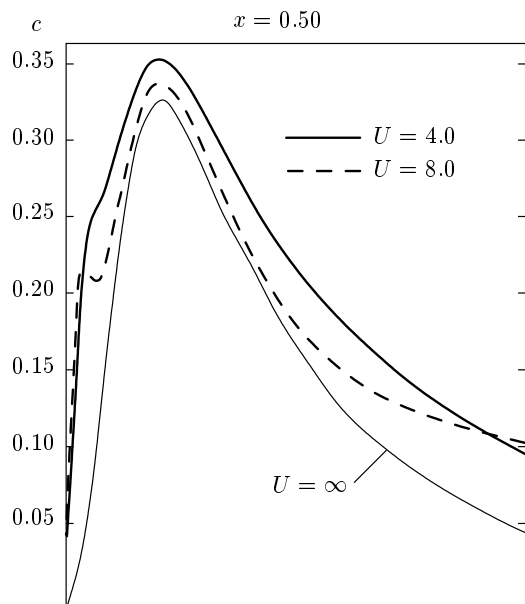


Рис. 6. Сравнение температурных зависимостей теплоемкости из работы [6], вычисленных для $U/t = 4$ и $U/t = 8$, с полученной нами расчетной кривой при бесконечном отталкивании

$x = 0.5$ достигается при $T_{max} \approx 0.6t/k_B$ (рис. 6). Ввиду слабой зависимости этого пика от величины U возможно сравнить его с нашими результатами при $U \rightarrow \infty$ (нижний график на рис. 6). Как видим, очень близки к результатам, приведенным в работе [6], и значение температуры T_{max} , и величина теплоемкости $c/k_B \approx 0.3$ в точке максимума. Как отмечается в работе [5], рост концентрации дырок размывает два пика (спиновый и холонный) в температурной зависимости теплоемкости, поскольку в металлической системе восстанавливается взаимосвязь зарядовых и спиновых возбуждений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН № 20.7, гранта НШ 1044.2012.2, РФФИ (грант № 10-02-00251) и внутреннего гранта СФУ НФ-11. Авторы выражают искреннюю признательность С. В. Николаеву и Е. И. Шнейдер за полезные обсуждения проблематики данной статьи.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Докажем имеющую принципиальное значение для всей статьи формулу (11). Введем следующие обозначения для операторов:

$$H_0^{(h)} = \sum_f \varepsilon X_f^{11}, \tag{47}$$

$$H_t^{(h)} = \sum_{g,m} t_{gm} X_g^{10} X_m^{01}, \tag{48}$$

$$H_0 = \sum_{f,\sigma} \varepsilon X_f^{\sigma\sigma}, \tag{49}$$

$$H_t = \sum_{g,m,\sigma} t_{gm} X_g^{\sigma 0} X_m^{0\sigma}. \tag{50}$$

Непосредственным вычислением убеждаемся в том, что

$$[H_0^{(h)}, H_t^{(h)}] = [H_0, H_t] = 0. \tag{51}$$

Равенство указанных коммутаторов нулю влечет за собой следующие матричные равенства:

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{H_0^{(h)} + H_t^{(h)}}{k_B T}\right) &= \\ &= \exp\left(-\frac{H_0^{(h)}}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{H_t^{(h)}}{k_B T}\right), \end{aligned} \tag{52}$$

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{H_0 + H_t}{k_B T}\right) &= \\ &= \exp\left(-\frac{H_0}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{H_t}{k_B T}\right). \end{aligned} \tag{53}$$

Учитывая далее, что матрицы $\exp(-H_0^{(h)}/k_B T)$ и $\exp(-H_0/k_B T)$ диагональны и на диагоналях обеих стоят числа $\exp(-N_e \varepsilon/k_B T)$, получаем следующие выражения для канонических статистических сумм соответственно для бесспинового и спинового случаев:

$$Z^{(h)} = \exp\left(-\frac{N_e \varepsilon}{k_B T}\right) \text{Sp}\left(\exp\left(-\frac{H_t^{(h)}}{k_B T}\right)\right), \quad (54)$$

$$Z = \exp\left(-\frac{N_e \varepsilon}{k_B T}\right) \text{Sp}\left(\exp\left(-\frac{H_t}{k_B T}\right)\right). \quad (55)$$

Рассмотрим теперь воздействие оператора $H_t^{(h)}$ на состояние типа (6), в котором $|\psi\rangle_i$ определяются равенствами (7). Имеем

$$\begin{aligned} H_t^{(h)} \left| \begin{matrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ f_1 & f_2 & & f_{N_e} \end{matrix} \right\rangle = \\ = \sum_{m \in \{f_1, f_2, \dots, f_{N_e}\}} \sum_{g \in h \setminus \{f_1, f_2, \dots, f_{N_e}\}} (-1)^{\Delta N_{gm} + 1} \times \\ \times t_{gm} \left| \begin{matrix} 1 & 1 & \dots & 0 & \dots & 1 & \dots & 1 \\ f_1 & f_2 & & m & & g & & f_{N_e} \end{matrix} \right\rangle, \end{aligned}$$

где в левой части стоит вектор, символизирующий состояние, у которого на узлах f_1, f_2, \dots, f_{N_e} находятся холоны, на остальных узлах — дырки; фигурные скобки $\{f_1, f_2, \dots, f_{N_e}\}$ обозначают множество, состоящее из узлов f_1, f_2, \dots, f_{N_e} ; h — множество всех узлов системы; знак «\» обозначает разность множеств; ΔN_{gm} — количество холонов, находящихся строго между узлами g и m . Понятно, что все векторы, стоящие в левой части последнего равенства, различны между собой. Различны также и коэффициенты при них. Скалярно умножая это равенство на какой-либо бра-вектор из

$$\frac{N!}{N_e!(N - N_e)!}$$

возможных, получим матричный элемент равный либо нулю, либо $(-1)^{\Delta N_{ij} + 1} t_{ij}$, где $i \in \{f_1, f_2, \dots, f_{N_e}\}$, $j \in h \setminus \{f_1, f_2, \dots, f_{N_e}\}$. Заметим сейчас, что попутно мы доказали одно важное утверждение. Для его формулировки условимся называть пару векторов, на которых строится данный матричный элемент, парой, порождающей данный матричный элемент. Тогда из изложенного выше вытекает, что матричный элемент отличен от нуля тогда и только тогда, когда между векторами порождающей его пары возможен переход от одного к другому посредством перескока только одного электрона из одной позиции в другую. Аналогично этому и при наличии спина матричный элемент

отличен от нуля тогда и только тогда, когда возможен переход от одного из векторов порождающей пары к другому посредством перескока только одного электрона из одной позиции в другую (с сохранением его спина). Это утверждение доказывается рассмотрением воздействия оператора H_t на состояние типа (6), где $|\psi\rangle_i$ определяются на этот раз равенством (8).

Нетрудно далее усмотреть алгоритм, по которому из матрицы оператора $H_t^{(h)}$ получается матрица оператора H_t . Очевидно, что каждый матричный элемент трансформируется в блок размером $2^{N_e} \times 2^{N_e}$. Очевидно далее, что если этот матричный элемент равен нулю, то он преобразуется в нулевой же блок. Это утверждение верно хотя бы потому, что любой матричный элемент рассматриваемого блока порождается парой таких векторов, что невозможен переход от одного к другому посредством перескока только одного электрона из одной позиции в другую (так как равен нулю трансформируемый матричный элемент). Если же матричный элемент равен минус параметру перескока между ближайшими соседями, то диагональные элементы блока равны ему самому. Действительно, для пары, порождающей диагональный элемент, существует переход от одного вектора пары к другому посредством перебрасывания только одного электрона с сохранением его спина. Направления остальных спинов для векторов порождающей диагональный элемент пары совпадают (вследствие того, что рассматривается именно диагональный элемент). Для недиагональных же элементов направления спинов хотя бы одной пары электронов, находящихся в двух векторах, порождающих рассматриваемый матричный элемент, в одной и той же позиции, обязательно различаются (вследствие того, что сам элемент недиагональный). Итак, матрица оператора H_t получается из матрицы оператора $H_t^{(h)}$ преобразованием каждого матричного элемента в блок размером $2^{N_e} \times 2^{N_e}$, на диагонали которого стоят числа, равные преобразуемому элементу, а все недиагональные элементы равны нулю.

По правилу умножения блочных матриц, учитывая определение матричной экспоненты как матричного ряда, нетрудно заключить, что матричная экспонента $\exp(-H_t/k_B T)$ образуется из экспоненты $\exp(-H_t^{(h)}/k_B T)$ посредством преобразования каждого матричного элемента в блок размером $2^{N_e} \times 2^{N_e}$, на диагонали которого стоят числа, равные преобразуемому матричному элементу, а недиагональные элементы равны нулю. Непосредственно отсюда и вытекает соотношение (11).

ЛИТЕРАТУРА

| | | | | |
|---|----|----|---|------------------------------------|
| | | | 5 | |
| | | | | 137 |
| 1 | | 20 | 6 | |
| | | | | 522 |
| 2 | 57 | | 7 | |
| 3 | | 41 | | <i>Электронная теория металлов</i> |
| 4 | | 52 | 8 | 8 |