



# Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

К. А. Сидоров, Н. В. Тихонов, С. Г. Овчинников, Точный расчет термодинамики одномерной модели Хаббарда с бесконечным отталкиванием в магнитном поле, *ТМФ*, 2014, том 180, номер 1, 94–111

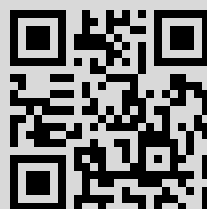
DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8619>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 84.237.90.20

30 октября 2020 г., 14:57:15



© 2014 г. К. А. Сидоров<sup>\*†</sup>, Н. В. Тихонов<sup>†</sup>, С. Г. Овчинников<sup>\*†</sup>

## ТОЧНЫЙ РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИКИ ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА С БЕСКОНЕЧНЫМ ОТТАЛКИВАНИЕМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Показано, что в приближении ближайших соседей каноническая статистическая сумма одномерной модели Хаббарда в пределе бесконечного отталкивания в магнитном поле распадается на произведение статистических сумм холонов и спинов, которые точно вычисляются. Благодаря этому получены точные численные зависимости свободной энергии, энтропии, внутренней энергии, теплоемкости, химического потенциала и магнитной восприимчивости от концентрации дырок, температуры и индукции магнитного поля.

**Ключевые слова:** модель Хаббарда, магнитное поле, бесконечное отталкивание, термодинамика, точное решение.

DOI: 10.4213/tmf8619

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Модель Хаббарда в магнитном поле исследовалась во многих работах. Так, в работе [1] приведено много численно точных результатов, которые получены с применением формализма анзаца Бете. В работе [2] термодинамика рассчитывалась с помощью метода квантовой трансфер-матрицы. Как отмечается в обзоре [3], результаты работ [1] и [2] удовлетворительно согласуются между собой.

Нетрудно, однако, видеть, что эти расчеты связаны с использованием относительно сложных математических уравнений. Поэтому задача о нахождении термодинамики более простым способом по-прежнему представляет интерес. В настоящей работе средствами одной лишь линейной алгебры показано, что статистическая сумма модели Хаббарда в пределе  $U \rightarrow \infty$  в магнитном поле может быть представлена в виде произведения статистических сумм холонов и спинов. Оказывается, что статистическую сумму спинов можно записать в виде явного аналитического

---

<sup>\*</sup>Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, Красноярск, Россия.  
E-mail: kirillexp@mail.ru, sgo@iph.krasn.ru

<sup>†</sup>Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия. E-mail: edem-05@mail.ru

выражения, которое в случае половинного заполнения совпадает со статистической суммой одномерной модели Изинга с нулевым обменным интегралом. Статистическая сумма холонов легко вычисляется численно точно благодаря точной диагонализации гамильтониана межатомных перескоков для бесспиновых фермионов методом, подробно описанным в работе [4]. В результате получены простые соотношения между термодинамическими характеристиками электронов и холонов.

Статья имеет следующую структуру. В разделе 2 получено точное аналитическое решение в отсутствие перескоков. В разделе 3 рассмотрен способ получения численно точного решения при наличии перескоков. В разделе 4 анализируются термодинамические величины, полученные в виде численно точных графиков. Доказательство факта факторизации статистической суммы в виде произведения статистических сумм спинов и холонов приведено в приложении.

## 2. ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ПРИ $t = 0$

Исследуемый в настоящей работе гамильтониан в представлении операторов Хаббарда имеет вид

$$H = H_0 + H_t + H_m, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} H_0 &= \varepsilon \sum_{f,\sigma} X_f^{\sigma\sigma}, \\ H_t &= - \sum_{f,m,\sigma} t_{fm} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma}, \\ H_m &= -h \sum_f (X_f^{\uparrow\uparrow} - X_f^{\downarrow\downarrow}), \end{aligned} \quad (2)$$

$\varepsilon$  – энергия электрона на узле,  $t_{fm}$  – интеграл перескока с узла  $f$  на узел  $m$ ,  $h = g_s \mu_B B/2$ ,  $g_s$  – спиновый фактор Ланде,  $\mu_B$  – магнетон Бора,  $B$  – индукция магнитного поля в веществе, оператор Хаббарда  $X_f^{pq}$  определен как  $X_f^{pq} = |p\rangle\langle q|$ .

Начнем анализ с простейшего случая, когда  $H_t = 0$  (так называемый атомный предел). В отсутствие перескоков полученное в приложении точное соотношение (50)–(52) между статистическими суммами холонов и электронов позволяет легко получить точные выражения для всех термодинамических характеристик последних. Действительно, в этом случае матрица  $H^{(h)}$  представляет собой диагональную матрицу размера  $C_N^{N_e} \times C_N^{N_e}$  с числами  $N_e \varepsilon$  на диагонали. Экспонента такой матрицы представляет собой диагональную матрицу тех же размеров с числами  $e^{-N_e \varepsilon / k_B T}$  на диагонали. Статистическая сумма холонов равна

$$Z^{(h)} = C_N^{N_e} e^{-N_e \varepsilon / k_B T}, \quad C_N^{N_e} = \frac{N!}{N_e! (N - N_e)!} \quad (3)$$

Расписывая в (3) факториалы по формуле Стирлинга  $n! \approx (n/e)^n$  и вводя обозначение  $x = 1 - N_e/N$  для концентрации дырок, получаем

$$Z^{(h)} = ((x^{-x} (1-x)^{-(1-x)}) e^{-(1-x)\varepsilon / k_B T})^N. \quad (4)$$

Используя (4) и (50)–(52), последовательно получаем все термодинамические характеристики электронов: свободную энергию

$$f = \varepsilon(1-x) + k_B T \left( x \ln x + (1-x) \ln(1-x) - (1-x) \ln \left( 2 \operatorname{ch} \left( \frac{h}{k_B T} \right) \right) \right), \quad (5)$$

энтропию

$$s = -k_B \left( x \ln x + (1-x) \ln(1-x) - (1-x) \ln \left( 2 \operatorname{ch} \left( \frac{h}{k_B T} \right) \right) \right) - (1-x) \frac{h}{T} \operatorname{th} \left( \frac{h}{k_B T} \right), \quad (6)$$

внутреннюю энергию

$$u = (1-x) \left( \varepsilon - h \operatorname{th} \left( \frac{h}{k_B T} \right) \right), \quad (7)$$

теплоемкость

$$c = (1-x) \frac{h^2}{k_B T^2} \frac{1}{\operatorname{ch}^2(h/k_B T)}, \quad (8)$$

химический потенциал

$$\mu = \varepsilon - k_B T \ln \frac{2 \operatorname{ch}(h/k_B T) x}{1-x} \quad (9)$$

и магнитную восприимчивость (закон Кюри)

$$\chi = \frac{1}{V} \frac{g_s^2 \mu_B^2 N_e}{4k_B T}. \quad (10)$$

Формулы (5)–(9) представляют собой обобщение формул (28), (30)–(32), (34) из работы [4] на случай наличия магнитного поля. Мы не станем проводить здесь детальный анализ полученных результатов. Все они являются частным случаем результатов, полученных при учете наличия перескоков, обсуждаемых ниже в разделе 4.

Важно отметить, что магнитная восприимчивость полностью определяется множителем  $Z^{(s)}$  в (50), ибо только он определяет зависимость статистической суммы от величины индукции магнитного поля. Восприимчивость, таким образом, не зависит от величины параметра перескока  $t$  между ближайшими соседями. Поэтому в дальнейшем мы не выписываем наряду с формулами для термодинамических характеристик формулу для восприимчивости, так как эта формула всегда имеет вид (10).

Интересно отметить также, что при  $t = 0$  и  $x = 0$  исследуемая нами модель, очевидно, совпадает с одномерной моделью Изинга при  $J = 0$  в магнитном поле [5]. Соответственно совпадают и статистические суммы этих моделей

$$Z_{J=0}^{(\text{Ising})} = Z_{t=0}^{(t)} = \left( 2 \operatorname{ch} \left( \frac{h}{k_B T} \right) \right)^N$$

и все вытекающие отсюда формулы для термодинамических параметров.

### 3. ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ПРИ ОТЛИЧНОМ ОТ НУЛЯ ПАРАМЕТРЕ ПЕРЕСКОКА

Для холонов нахождение термодинамических характеристик может быть осуществлено благодаря наличию фермиевского коммутационного соотношения:

$$\{X_f^{10}, X_m^{01}\} = X_f^{10} X_m^{01} + X_m^{01} X_f^{10} = \delta_{fm}. \quad (11)$$

Соотношение (11) позволяет диагонализировать гамильтониан холонов

$$H = H_0 = \varepsilon \sum_f X_f^{11} - \sum_{f,m} t_{fm} X_f^{10} X_m^{01}$$

с помощью преобразования Фурье, в результате которого находим спектральную функцию

$$\langle X_k^{10} X_k^{01} \rangle = \frac{1}{e^{(t(k)-\mu^{(h)})/k_B T} + 1}, \quad (12)$$

совпадающую с распределением свободных фермионов Ферми–Дирака. В выражении (12) функция  $t(k)$  представляет собой зонный спектр, который в приближении ближайших соседей записывается в виде

$$t(k) = -2t \cos ka. \quad (13)$$

Для нахождения термодинамических характеристик холонов сначала решается уравнение для химического потенциала

$$\sum_k \frac{1}{e^{(t(k)-\mu^{(h)})/k_B T} + 1} = N_e, \quad (14)$$

затем рассчитываются внутренняя энергия

$$u^{(h)} = \sum_k \frac{t(k)}{e^{(t(k)-\mu^{(h)})/k_B T} + 1}, \quad (15)$$

теплоемкость

$$c^{(h)} = \frac{\partial u^{(h)}}{\partial T}, \quad (16)$$

энтропия (с применением теоремы Нернста)

$$s^{(h)} = \int_0^T \frac{c^{(h)}}{T} dT \quad (17)$$

и, наконец, свободная энергия

$$f^{(h)} = u^{(h)} + T s^{(h)}. \quad (18)$$

В формулах (12), (14)–(18) верхний индекс (h) указывает на то, что рассматриваемые величины относятся к холонам. Из формул (14)–(18) получаются хорошо известные зависимости, отражающие поведение идеального ферми-газа [6].

Благодаря наличию точной взаимосвязи (50) между статистическими суммами холонов и электронов численно точное решение имеет и задача о нахождении термодинамических характеристик электронов. Именно, используя известные из статистической физики и термодинамики формулы для расчета соответствующих термодинамических величин, сразу получаем следующие формулы: для свободной энергии

$$f = f^{(h)} - k_B T (1-x) \ln \left( 2 \operatorname{ch} \left( \frac{h}{k_B T} \right) \right) = f^{(e)} - k_B T (1-x) \ln \operatorname{ch} \left( \frac{h}{k_B T} \right), \quad (19)$$

для энтропии

$$\begin{aligned} s &= s^{(h)} + k_B (1-x) \ln \left( 2 \operatorname{ch} \left( \frac{h}{k_B T} \right) \right) - (1-x) \frac{h}{T} \operatorname{th} \left( \frac{h}{k_B T} \right) = \\ &= s^{(e)} + k_B (1-x) \ln \operatorname{ch} \left( \frac{h}{k_B T} \right) - (1-x) \frac{h}{T} \operatorname{th} \left( \frac{h}{k_B T} \right), \end{aligned} \quad (20)$$

для внутренней энергии

$$u = u^{(h)} - (1-x) h \operatorname{th} \left( \frac{h}{k_B T} \right) = u^{(e)} - (1-x) h \operatorname{th} \left( \frac{h}{k_B T} \right), \quad (21)$$

для теплоемкости

$$c = c^{(h)} + (1-x) \frac{h^2}{k_B T^2} \frac{1}{\operatorname{ch}^2(h/k_B T)} = c^{(e)} + (1-x) \frac{h^2}{k_B T^2} \frac{1}{\operatorname{ch}^2(h/k_B T)}, \quad (22)$$

для химического потенциала

$$\mu = \mu^{(h)} - k_B T \ln \left( 2 \operatorname{ch} \left( \frac{h}{k_B T} \right) \right) = \mu^{(e)} - k_B T \ln \operatorname{ch} \left( \frac{h}{k_B T} \right). \quad (23)$$

В формулах (19)–(23) величины с верхним индексом (h) относятся к холонам, с верхним индексом (e) – к электронам в отсутствие магнитного поля ( $B = 0$ ). Каждая из формул (19)–(23) имеет следующий общий вид:

$$a = a^{(h)} + a^{(s)} = a^{(e)} + a^{(B)},$$

где  $a^{(h)}$  – вклад от множителя (51) в (50) (холонный вклад),  $a^{(s)}$  – вклад от множителя (52) в (50) (спионный вклад),  $a^{(e)}$  – вклад от множителя  $Z^{(e)} = 2^{N_e} Z^{(h)}$  в (50) (электронный вклад),  $a^{(B)}$  – вклад от множителя  $Z^{(B)} = \operatorname{ch}^{N_e}(h/k_B T)$  в (50) (вклад магнитного поля). Отметим здесь также, что формулы (8)–(12), соответствующие случаю  $t = 0$ , находятся в полном согласии с общими формулами (19)–(23) (см. также формулы (15)–(19), (27)–(34) в работе [4]).

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Перейдем теперь к обсуждению результатов, полученных с помощью формул (19)–(23). На рис. 1 представлены результаты, полученные для свободной энергии. На рис. 1а приведена зависимость свободной энергии от концентрации дырок,

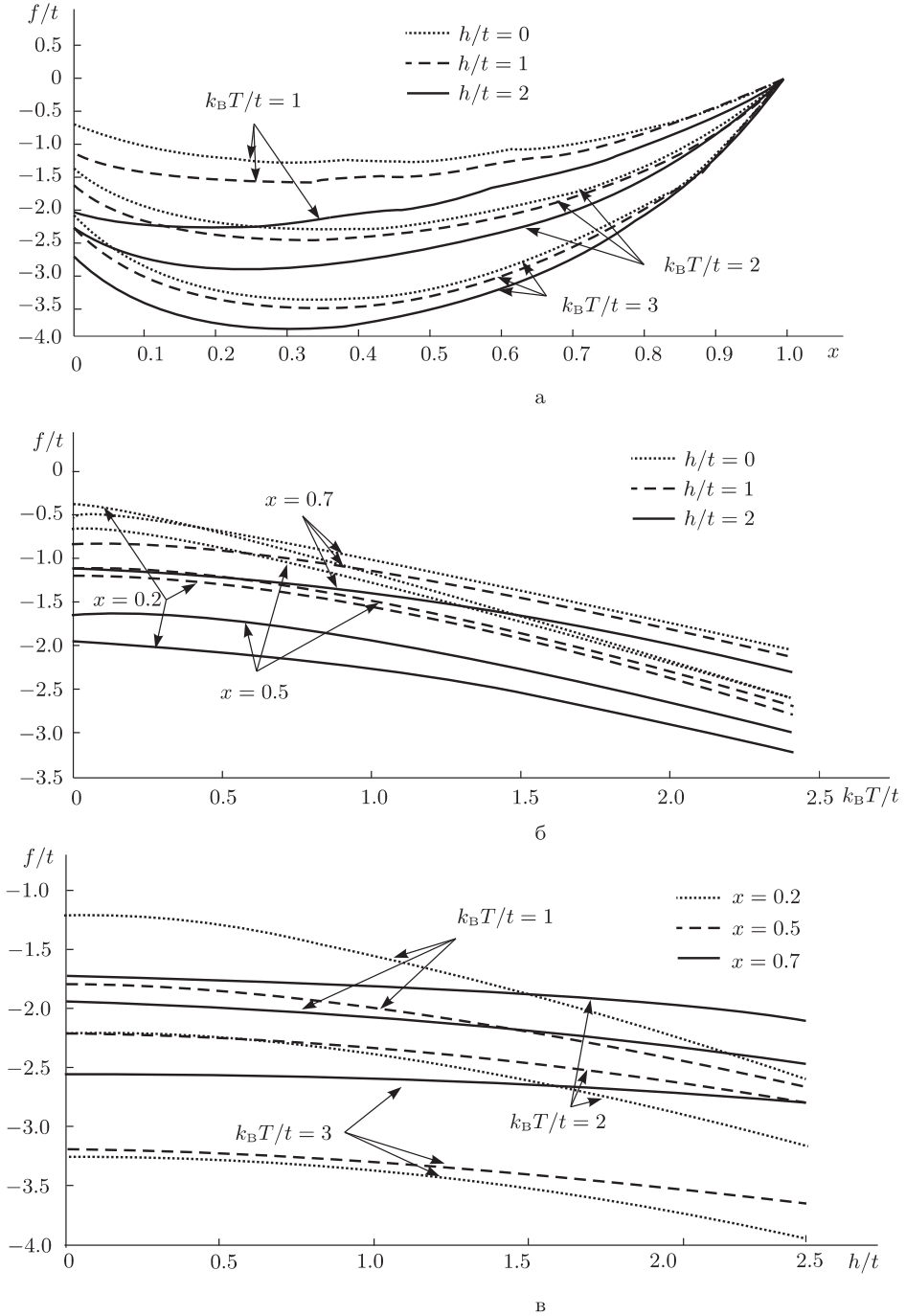


Рис. 1. Зависимости свободной энергии от концентрации дырок (а), температуры (б) и индукции магнитного поля (в).

на котором видно, как по мере увеличения температуры кривая смещается из своего первоначального положения при  $T = 0$

$$\begin{aligned} \frac{f}{t} &= \frac{f^{(h)}}{t} \Big|_{T=0} - (1-x) \frac{h}{t} = \frac{u^{(h)}}{t} \Big|_{T=0} - (1-x) \frac{h}{t} = \left( \frac{1}{Nt} \sum_{k=-k_F}^{k_F} \varepsilon(k) \right) - (1-x) \frac{h}{t} = \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_{-(1-x)\pi}^{(1-x)\pi} \cos y \, dy - (1-x) \frac{h}{t} = -\frac{2}{\pi} \sin \pi x - (1-x) \frac{h}{t} \end{aligned} \quad (24)$$

к минус бесконечности при  $T \rightarrow \infty$ . Видно также, как по мере увеличения поля при постоянной температуре кривая растягивается из первоначального положения при  $h = 0$

$$\frac{f}{t} = \frac{f^{(h)}}{t} \left( \frac{k_B T}{t} \right) - (1-x) \frac{k_B T}{t} \ln 2 \quad (25)$$

к минус бесконечности при  $h \rightarrow \infty$ .

Кривые зависимости свободной энергии от  $k_B T/t$  (рис. 1б) выходят из точки  $(0, -(2/\pi) \sin \pi x) - (1-x)h/t$  и при  $k_B T/t \rightarrow \infty$  ведут себя в соответствии с асимптотической формулой

$$\frac{f}{t} = \frac{2}{\pi} \sin \pi x + \frac{k_B T}{t} (x \ln x + (1-x) \ln(1-x) - (1-x) \ln 2). \quad (26)$$

Кривые зависимости свободной энергии от  $h/t$  (рис. 1в) демонстрируют уменьшение свободной энергии с ростом индукции магнитного поля. При  $h \rightarrow \infty$  они асимптотически приближаются к прямым, описываемым уравнением

$$\frac{f}{t} = \frac{f^{(h)}}{t} \left( x, \frac{k_B T}{t} \right) - (1-x) \frac{h}{t}. \quad (27)$$

На рис. 2 представлены зависимости энтропии от концентрации дырок, температуры и индукции магнитного поля. Из рис. 2а, на котором приведена зависимость энтропии от концентрации дырок, видно, как при  $h = 0$  по мере увеличения температуры кривая становится все более и более выпуклой, начиная с прямой

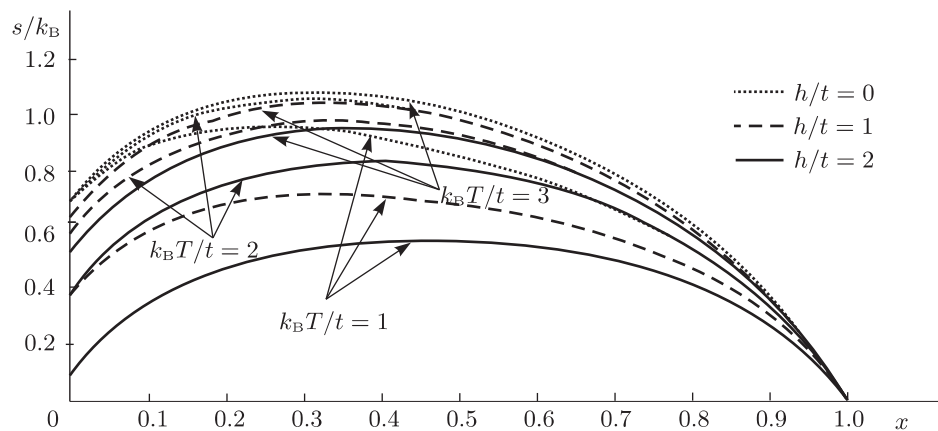
$$\frac{s}{k_B} = (1-x) \ln 2 \quad (28)$$

при  $T = 0$ , когда энтропия определяется только локализованными спинами  $\sigma = 1/2$ , и приближаясь при  $T \rightarrow \infty$  к кривой

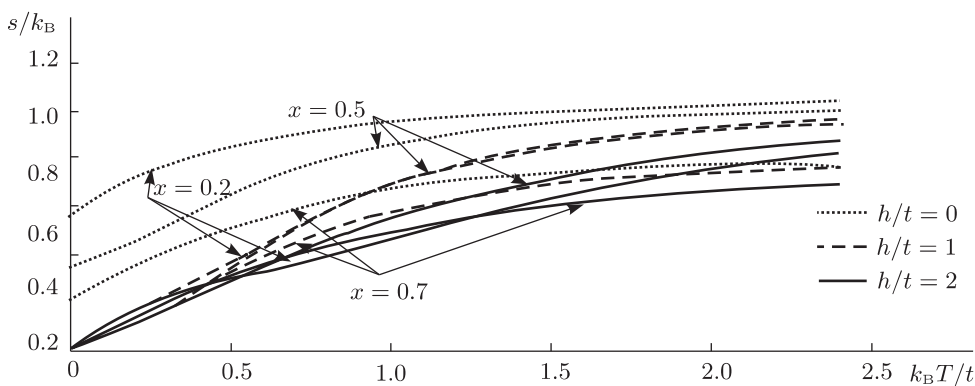
$$\frac{s}{k_B} = (1-x) \ln 2 - x \ln x - (1-x) \ln(1-x) \quad (29)$$

(т.е. теперь энтропия определяется как спиновым, так и зарядовым вкладом). Включение же сколь угодно малого магнитного поля кардинально меняет ситуацию и приводит к тому, что кривая зависимости  $s/k_B$  от  $x$  при  $T = 0$  просто совпадает с осью абсцисс, а при  $T \rightarrow \infty$  асимптотически приближается к кривой, описываемой тем же уравнением (29). Это обстоятельство не усматривается напрямую из рис. 2а, но отчетливо наблюдается на зависимости энтропии от температуры (рис. 2б). Наиболее наглядно можно пояснить физическую причину этого скачка в случае  $t = 0$ .

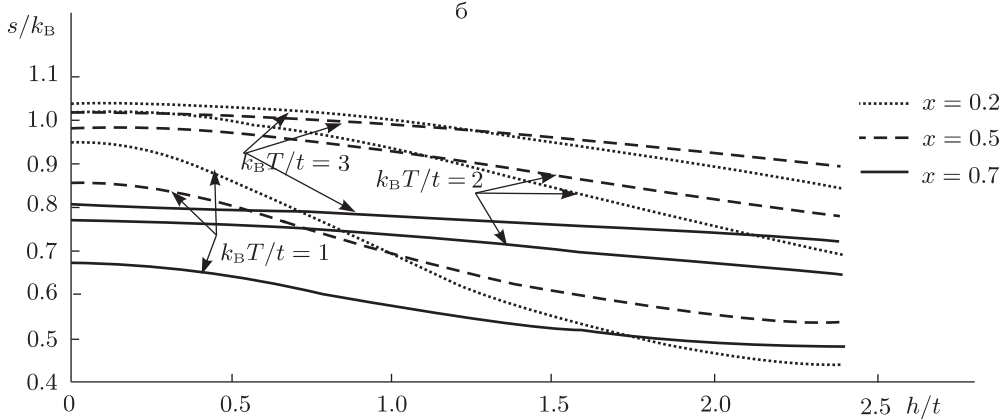




а



б



в

Рис. 2. Зависимости энергии от концентрации дырок (а), температуры (б) и индукции магнитного поля (в).

В этом случае даже при сколь угодно малом магнитном поле из полного базиса состояний исключаются состояния со спином электрона, направленным вверх (при  $T = 0$ ). В результате этого конфигурационный вклад в энтропию скачкообразно уменьшается. Как и должно быть, зависимости  $s/k_B$  от  $k_B T/t$  представляют собой возрастающие функции. При обсуждении зависимости энтропии от концентрации дырок уже отмечалось, что при  $h = 0$  кривые, описывающие эти зависимости, выходят из точки  $(0, (1-x) \ln 2)$  и при  $k_B T/t \rightarrow \infty$  стремятся к асимптоте, описываемой равенством (29). В случае  $h \neq 0$  энтропия при  $T = 0$  скачкообразно уменьшается на  $k_B(1-x) \ln 2$ , но выражение для асимптоты при  $k_B T/t \rightarrow \infty$  по-прежнему имеет вид (29).

Что касается зависимости энтропии от величины индукции магнитного поля, то, как видно из рис. 2в, эти зависимости представляют собой убывающие кривые, как и должно быть в соответствии с (20). Проще всего пояснить физическую причину этого убывания опять в случае  $t = 0$ . В этом случае убывание энтропии есть следствие выполнения неравенства

$$\frac{\partial}{\partial h}(-w_{\uparrow} \ln w_{\uparrow} - w_{\downarrow} \ln w_{\downarrow}) < 0, \quad (30)$$

где  $w_{\uparrow}, w_{\downarrow}$  – вероятности заполнения вышележащего и нижележащего энергетических уровней атома, которые образуются при зеемановском расщеплении. Записывая большое каноническое распределение с гамильтонианом (1), в котором  $H_t = 0$ , получим для указанных вероятностей следующие выражения:

$$\begin{aligned} w_{\uparrow} &= \frac{1-x}{2 \operatorname{ch}(h/k_B T)} e^{-h/k_B T}, \\ w_{\downarrow} &= \frac{1-x}{2 \operatorname{ch}(h/k_B T)} e^{h/k_B T}. \end{aligned} \quad (31)$$

Проверка справедливости неравенства (30) осуществляется тривиально. Интересно здесь также отметить, что формула (6) для энтропии при  $t = 0$  находится в полном согласии с формулой Больцмана, согласно которой

$$s = -w_0 \ln w_0 - w_{\uparrow} \ln w_{\uparrow} - w_{\downarrow} \ln w_{\downarrow},$$

где  $w_0 = x$  – вероятность заполнения пустого состояния на узле.

Перейдем теперь к обсуждению поведения внутренней энергии. Как видно из рис. 3а, на котором приведена зависимость внутренней энергии от концентрации дырок, кривая при  $h = 0$  по мере увеличения температуры постепенно поднимается из своего первоначального положения при  $k_B T/t = 0$

$$\frac{u}{t} = -\frac{2}{\pi} \sin \pi x \quad (32)$$

и при  $k_B T/t \rightarrow \infty$  стремится к предельному положению

$$\frac{u}{t} = \frac{2}{\pi} \sin \pi x. \quad (33)$$

При  $h \neq 0$  уравнение кривой  $\frac{u}{t}(x)$  при  $k_B T/t = 0$  принимает вид

$$\frac{u}{t} = -\frac{2}{\pi} \sin \pi x - (1-x) \frac{h}{t}, \quad (34)$$

а при  $k_B T/t \rightarrow \infty$  оно по-прежнему имеет вид (33).

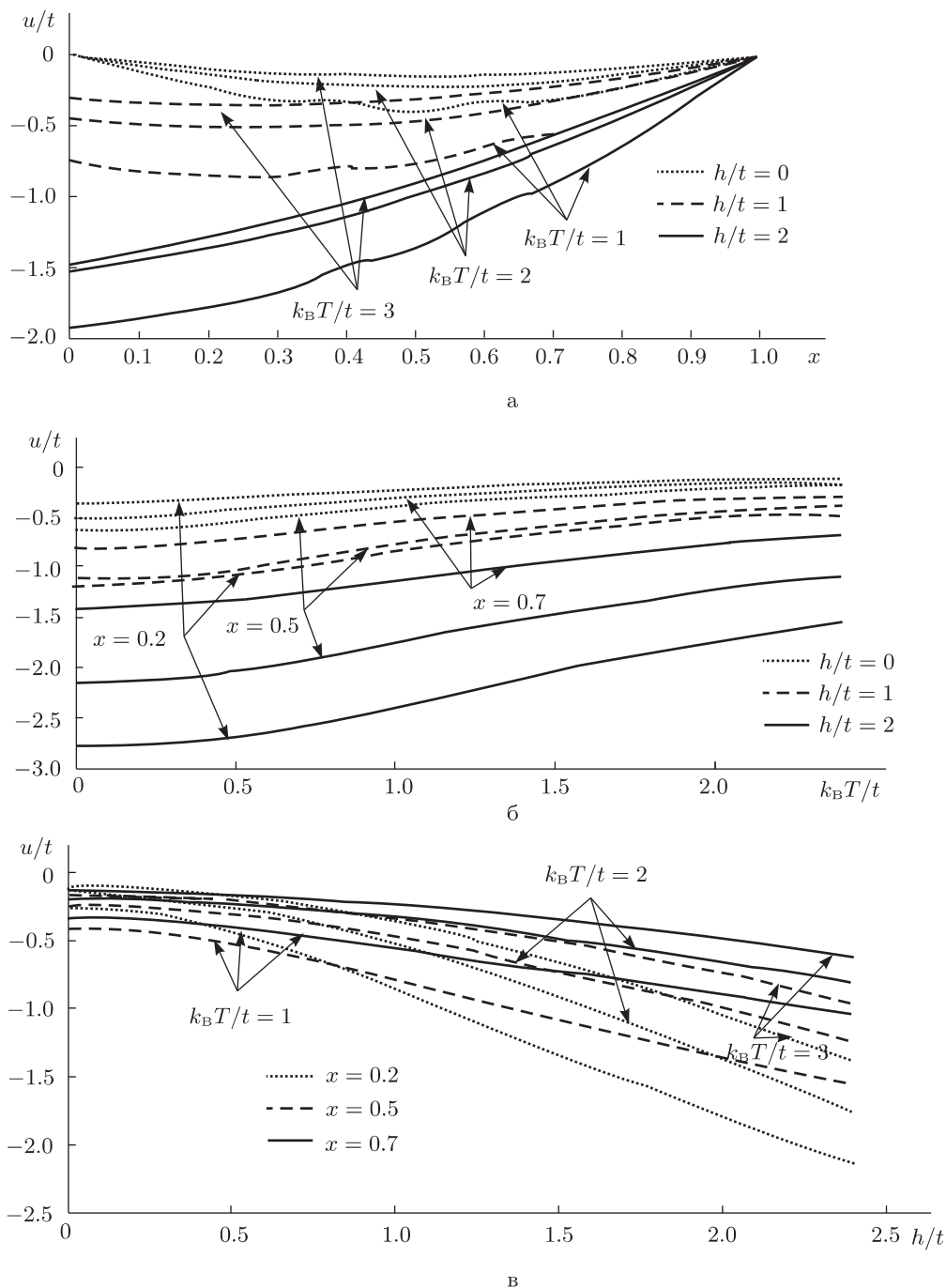


Рис. 3. Зависимости внутренней энергии от концентрации дырок (а), температуры (б) и индукции магнитного поля (в).

Кривые на рис. 3б, отображающие зависимость внутренней энергии от температуры, выходят из точки  $(0, -(2/\pi) \sin \pi x - (1-x)h/t)$ , монотонно возрастают и при  $k_B T/t \rightarrow \infty$  стремятся к положению (33). С ростом величины индукции магнитного поля внутренняя энергия, как и следовало ожидать, убывает (рис. 3в). Это связано с заполнением преимущественно нижележащих энергетических уровней, образующихся при зеемановском расщеплении.

Обсудим теперь поведение теплоемкости. На этот раз начнем обсуждение с зависимости теплоемкости от температуры (рис. 4б). Оба слагаемых в (22) как функции температуры представляют собой кривые, имеющие одну точку максимума. Поэтому, казалось бы, на кривой температурной зависимости теплоемкости следует ожидать появления двух максимумов. Тем не менее в полях  $h \approx (0.1 - 4)t$  при температурах, близких к температурам, в которых достигается максимум кривых  $c^{(h)}(T)$  и

$$c^{(s)}(T) = \frac{h^2}{k_B T^2} (1-x) \frac{1}{\text{ch}^2(h/k_B T)},$$

сами величины  $c^{(h)}$  и  $c^{(s)}$  имеют одинаковый порядок. Поэтому на кривой  $c(T)$  различается лишь один максимум. Однако при полях, лежащих за пределами указанного интервала, максимум кривой  $c^{(h)}(T)$  достигается в области, где  $c^{(h)} \gg c^{(s)}$ , и на кривой  $c(T)$  отчетливо различаются два пика. Это обстоятельство, заключающееся в том, что при различных значениях  $h$  на кривой  $c(T)$  наблюдается то один, то два максимума, проиллюстрировано на рис. 5. Как отмечается в работах [7], [8], для модели Хаббарда с конечным значением энергии отталкивания  $U$  двух электронов на одном узле без магнитного поля зависимость теплоемкости от температуры также имеет две точки максимума. Низкотемпературный пик связан со спиновыми возбуждениями и достигается при температуре  $T \approx J/k_B$ . Высокотемпературный пик обусловлен зарядовыми возбуждениями и достигается при температуре  $T \approx t/k_B$ . В рассматриваемой нами модели при  $u \rightarrow \infty$  параметр обмена  $J = t^2/U = 0$ , так что спиновый пик должен отсутствовать. Тем не менее включение магнитного поля приводит к ненулевой энергии спиновых возбуждений, и этот пик вновь появляется.

Из обсуждавшегося выше поведения теплоемкости как функции температуры нетрудно теперь понять зависимости теплоемкости от концентрации дырок. Как видно из рис. 4а, при постоянном  $0.1t < h < 4t$  кривые поднимаются из своего первоначального положения  $\frac{c^{(h)}}{k_B}(x)$  при  $k_B T/t = 0$ , достигают экстремальной (самой верхней) кривой и далее вновь сплющиваются к кривой  $\frac{c^{(h)}}{k_B}(x)$  при  $k_B T/t \rightarrow \infty$ . При  $h < 0.1t$  по мере увеличения температуры достигается сначала первая экстремальная кривая, которая связана со спиновыми возбуждениями. После ее достижения кривая зависимости  $\frac{c}{k_B}(x)$  опускается, а затем вновь начинает подниматься, достигая второй экстремальной кривой, связанной с зарядовыми возбуждениями. При  $h > 4t$ , наоборот, сначала достигается холонная экстремальная кривая, затем спиновая экстремальная кривая. В обоих случаях после достижения второй экстремальной кривой зависимость  $\frac{c}{k_B}(x)$  опускается далее к кривой  $\frac{c^{(h)}}{k_B}(x)$  при  $k_B T/t \rightarrow \infty$ .

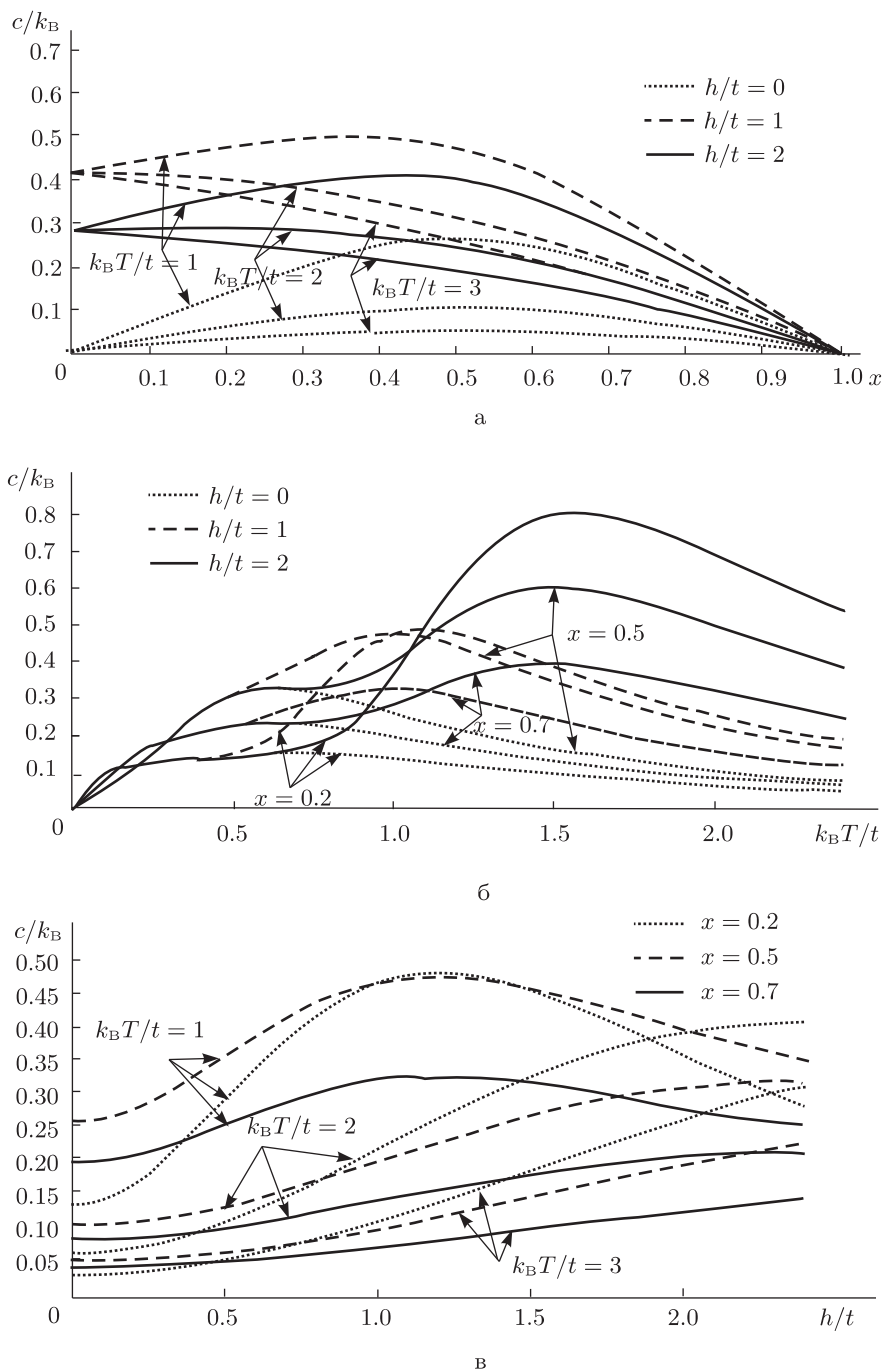


Рис. 4. Зависимости теплоемкости от концентрации дырок (а), температуры (б) и индукции магнитного поля (в).

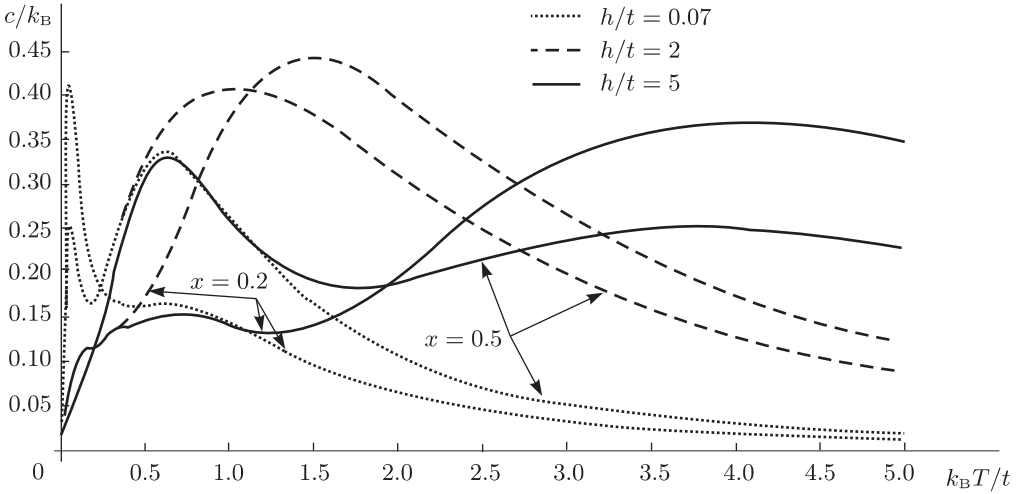


Рис. 5. Кривые зависимости теплоемкости от температуры, имеющие при различных значениях индукции магнитного поля то одну, то две точки максимума.

Наконец, обсудим поведение химического потенциала. В первую очередь видно, что включение магнитного поля понижает уровень Ферми (численно равный химическому потенциалу при  $T = 0$ ) на  $h$ . Как следует из рис. 6а, на котором приведена зависимость химического потенциала от концентрации дырок, химический потенциал монотонно уменьшается при росте  $x$  от плюс бесконечности при  $x = 0$  до минус бесконечности при  $x = 1$ .

Кривые зависимости  $\mu/t$  от  $k_B T/t$  (рис. 6б) выходят из точки  $(0, 2 \cos \pi x - h/t)$  и при  $k_B T/t \rightarrow \infty$  асимптотически приближаются к прямым

$$\frac{\mu}{t} = -\frac{k_B T}{t} \ln \frac{2x}{1-x}. \quad (35)$$

Как и следовало ожидать, зависимости  $\mu/t$  от  $h/t$  являются монотонно убывающими (рис. 6в). Это снова связано с заполнением преимущественно нижележащих энергетических уровней, образующихся при зеемановском расщеплении. Кривые зависимости  $\mu/t$  от  $h/t$  выходят из точки  $(0, \frac{\mu^{(h)}}{t}(x, k_B T/t) - (k_B T/t) \ln 2)$  и при  $h/t \rightarrow \infty$  асимптотически приближаются к прямым

$$\frac{\mu}{t} = \frac{\mu^{(h)}}{t} \left( x, \frac{k_B T}{t} \right) - \frac{h}{t}. \quad (36)$$

## ПРИЛОЖЕНИЕ

В работе [4] приведен способ точного расчета статистической суммы одномерной  $t$ -модели в отсутствие магнитного поля. Как будет показано ниже, использованный там матричный метод может быть с успехом применен и при наличии магнитного поля.

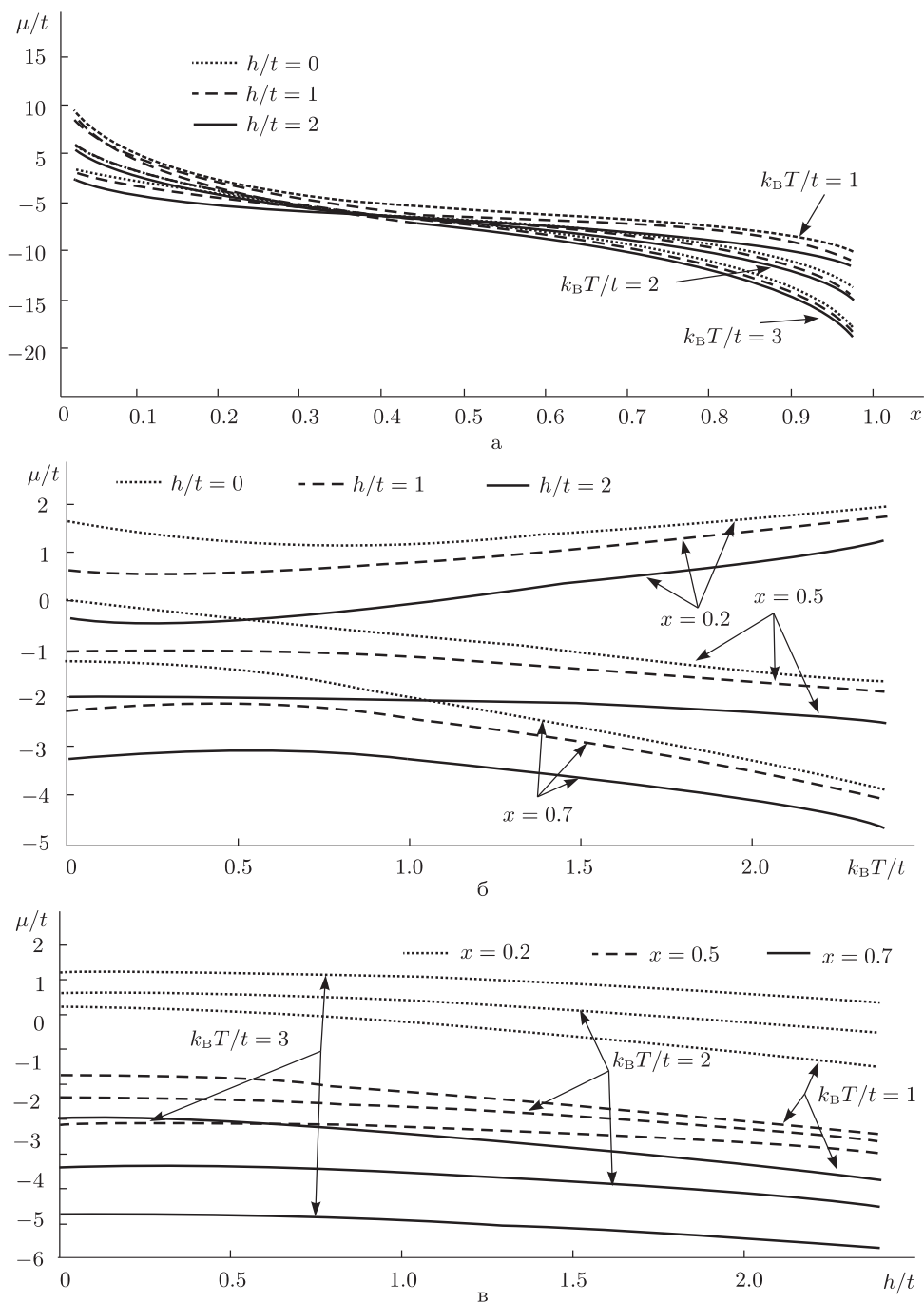


Рис. 6. Зависимости химического потенциала от концентрации дырок (а), температуры (б) и индукции магнитного поля (в).

Статистическая сумма для системы, описываемой гамильтонианом (1), по определению есть

$$Z = \text{Sp}(e^{(-H_0+H_t+H_m)/k_B T}). \quad (37)$$

Заметим, что коммутаторы всех слагаемых гамильтониана (1) попарно равны нулю:

$$[H_0, H_t] = [H_t, H_m] = [H_m, H_0] = 0. \quad (38)$$

Кроме того, матрица оператора  $H_0$ , очевидно, является диагональной в любом базисе, причем на диагонали стоят числа  $N_e \varepsilon$ . Эти два обстоятельства позволяют переписать выражение (37) для статистической суммы следующим образом:

$$Z = e^{-N_e \varepsilon / k_B T} \text{Sp}(e^{-H_t / k_B T} e^{-H_m / k_B T}). \quad (39)$$

Для дальнейших построений нам потребуется точное указание базиса волновых функций, в котором ведется рассмотрение матриц  $e^{-H_t / k_B T}$  и  $e^{-H_m / k_B T}$ . В качестве базисных функций возьмем функции вида

$$\psi = \psi_1 \psi_2 \cdots \psi_N = \prod_{i=1}^N \psi_i, \quad (40)$$

где

$$|\psi\rangle_i = \begin{cases} |0\rangle_i, & \text{если узел } i \text{ не занят электроном,} \\ |\uparrow\rangle_i, & \text{если узел } i \text{ занят электроном со спином } 1/2, \\ |\downarrow\rangle_i, & \text{если узел } i \text{ занят электроном со спином } -1/2. \end{cases} \quad (41)$$

Обсудим теперь некоторые характерные свойства матриц  $e^{-H_t / k_B T}$  и  $e^{-H_m / k_B T}$  в базисе функций (40), которые понадобятся нам в дальнейшем при решении задачи. Обе матрицы  $e^{-H_t / k_B T}$  и  $e^{-H_m / k_B T}$  являются квадратными с размерами  $2^{N_e} C_N^{N_e} \times 2^{N_e} C_N^{N_e}$ . Будем представлять себе каждую из этих матриц как блочную с размерами  $C_N^{N_e} \times C_N^{N_e}$ , причем размер каждого отдельно взятого блока есть  $2^{N_e} \times 2^{N_e}$ . Очевидно, что такое разбиение матрицы на блоки при заданном упорядочении всех  $2^{N_e} C_N^{N_e}$  состояний типа (40) может быть осуществлено единственным способом. Всякий раз, употребляя в дальнейшем слово “блок”, мы имеем в виду именно один из блоков размера  $2^{N_e} \times 2^{N_e}$  таким (единственно возможным) образом разбитой на блоки рассматриваемой в контексте матрицы. При этом остается в силе одно важное правило. Если через  $\{|\psi\rangle_i\}$  и  $\{|\psi\rangle_j\}$  обозначить набор бра- и кет-векторов, на которых образуется  $ij$ -й блок рассматриваемой матрицы, то все бра-состояния  $\{|\psi\rangle_i\}$  (кет-состояния  $\{|\psi\rangle_j\}$ ) выбираются так, что они не отличаются друг от друга номерами узлов, на которых находятся электроны, а отличаются лишь направлениями спинов в некоторых из позиций, в которых находятся электроны.

Как указывалось в работе [4], каждый отдельно взятый блок матрицы  $e^{-H_t / k_B T}$  в базисе функций (40), записанной в приближении ближайших соседей, является диагональным, причем все числа на диагонали данного отдельно взятого блока равны между собой. Обозначим через  $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{C_N^{N_e}}$  числа, стоящие в диагональных блоках матрицы  $e^{-H_t / k_B T}$ .

Относительно матрицы  $e^{-H_m / k_B T}$  сделаем следующие замечания. Во-первых, анализируя воздействие оператора  $H_m$  на состояния типа (40), в котором каждая



из функций  $|\psi\rangle_i$  определяется в (41), нетрудно заключить, что матрица этого оператора будет диагональной. Это означает, что и матрица  $e^{-H_m/k_B T}$  также является диагональной в этом базисе. Во-вторых, операторы  $X_f^{\uparrow\uparrow}$  и  $X_f^{\downarrow\downarrow}$  представляют собой просто операторы числа частиц со спином вверх и вниз соответственно. Их воздействие на состояния типа (40) никак не зависит от взаимного расположения узлов, на которых находятся электроны со спином вверх и вниз и на которых находятся дырки, а зависит только от количества электронов со спином вверх и количества электронов со спином вниз. В рамках же одной группы, состоящей из  $2^{N_e}$  состояний, из  $C_N^{N_e}$  групп состояний взаимное расположение узлов, на которых находятся электроны со спином вверх и вниз и на которых находятся дырки, не изменяется, как это указывалось выше. Это означает, что если упорядочивать в рамках каждой из групп все состояния по одному и тому же принципу, то все  $C_N^{N_e}$  диагональных блоков матрицы  $H_m$  (а следовательно, и матрицы  $e^{-H_m/k_B T}$ ) равны между собой как матрицы.

Обозначим через  $\Sigma$  сумму всех диагональных элементов одного диагонального блока матрицы  $e^{-H_m/k_B T}$ . Тогда статистическую сумму можно записать в виде

$$Z = e^{-N_e \varepsilon / k_B T} \Sigma \sum_{i=1}^{C_N^{N_e}} \sigma_i. \quad (42)$$

В [4] указано правило, по которому в приближении ближайших соседей из матрицы оператора холонных перескоков  $H_t^{(h)} = -\sum_{f,m} t_{fm} X_f^{10} X_m^{01}$  можно получить матрицу оператора электронных перескоков  $H_t = -\sum_{f,m,\sigma} t_{fm,\sigma} X_f^{\sigma 0} X_m^{0\sigma}$ . Это правило состоит в том, что каждый элемент матрицы  $H_t^{(h)}$  трансформируется в диагональный блок, на диагонали которого стоят числа, равные трансформируемому матричному элементу. Учитывая это правило и приведенное выше определение чисел  $\sigma_i$ , нетрудно заключить, что произведение  $e^{-N_e \varepsilon / k_B T} \sum_{i=1}^{C_N^{N_e}} \sigma_i$  есть просто статистическая сумма холоннов:

$$Z^{(h)} = \text{Sp}(e^{-H^{(h)}/k_B T}) = e^{-N_e \varepsilon / k_B T} \sum_{i=1}^{C_N^{N_e}} \sigma_i, \quad (43)$$

где  $H^{(h)} = \sum_f \varepsilon X_f^{11} + H_t^{(h)}$ . Таким образом, для статистической суммы электронов в магнитном поле получаем

$$Z = \Sigma Z^{(h)}. \quad (44)$$

Из (44) очевидно, что для получения окончательного результата для  $Z$  требуется лишь вычисление величины  $\Sigma$ .

Для расчета величины  $\Sigma$  удобно с самого начала указать прием для упорядочения  $2^{N_e}$  состояний, не отличающихся друг от друга месторасположением спинов, а различающихся только направлениями спинов в некоторых из фиксированных позиций, в которых находятся электроны. Проиллюстрируем этот простой прием на системе из трех электронов:

$$1) \uparrow\uparrow\uparrow; \quad 2) \downarrow\downarrow\downarrow; \quad 3) \uparrow\downarrow\uparrow; \quad 4) \downarrow\uparrow\downarrow; \quad 5) \uparrow\uparrow\downarrow; \quad 6) \downarrow\downarrow\uparrow; \quad 7) \uparrow\downarrow\downarrow; \quad 8) \downarrow\uparrow\uparrow. \quad (45)$$

Из указанного способа решения задачи об упорядочении системы из трех спинов совершенно очевидно решение и общей задачи об упорядочении системы из произвольного количества  $N_e$  спинов. Это решение получается методом математической индукции: после упорядочения системы из  $k$  спинов упорядоченная система из  $k + 1$  спинов получается дописыванием к уже образованным  $2^k$  состояниям еще  $2^k$  состояний, получающихся из уже выписанных лишь изменением направления  $(k + 1)$ -го спина. Причем если какое-то из первых  $2^k$  состояний имеет номер  $n$  ( $1 \leq n \leq 2^k$ ), то состояние, получающееся из него переворотом  $(k + 1)$ -го спина, будет иметь номер  $2^k + n$ . В результате процедуры дописывания состояний получается, очевидно, упорядоченная система из  $2^k + 2^k = 2^{k+1}$  состояний.

Обозначим через  $\Sigma_k$  сумму первых  $2^k$  диагональных элементов блока матрицы  $e^{-H_m/k_B T}$ . Воздействием оператора  $H_m$  на состояния типа (45) легко убедиться в том, что

$$\begin{aligned}\Sigma_1 &= e^{-hN_e/k_B T} (1 + e^{2h/k_B T}), \\ \Sigma_2 &= e^{-hN_e/k_B T} (1 + e^{2h/k_B T})^2.\end{aligned}$$

Общая формула

$$\Sigma_k = e^{-hN_e/k_B T} (1 + e^{2h/k_B T})^k \quad (46)$$

легко доказывается методом математической индукции. Действительно, из указанного выше правила образования упорядоченных состояний следует, что последние  $2^k$  из первых  $2^{k+1}$  диагональных элементов блока получаются путем умножения первых  $2^k$  элементов на множитель  $e^{2h/k_B T}$ . Тогда из этого факта и из индуктивного предположения (46) вытекает справедливость равенства

$$\Sigma_{k+1} = \Sigma_k + e^{2h/k_B T} \Sigma_k = e^{-hN_e/k_B T} (1 + e^{2h/k_B T})^{k+1},$$

что доказывает общую формулу (46).

Далее очевидно, что

$$\Sigma = \Sigma_{N_e}. \quad (47)$$

Путем элементарных преобразований формулы (46) при  $k = N_e$  получаем окончательный ответ

$$\Sigma = \left( 2 \operatorname{ch} \left( \frac{h}{k_B T} \right) \right)^{N_e}. \quad (48)$$

Заметим, что величина  $\Sigma$  представляет собой по существу множитель, обусловленный наличием спина у электрона, т. е. является статистической суммой спинов  $Z^{(s)}$ :

$$Z^{(s)} = \Sigma. \quad (49)$$

Выпишем окончательный ответ для статистической суммы:

$$Z = Z^{(h)} Z^{(s)}, \quad (50)$$

$$Z^{(h)} = \operatorname{Sp}(e^{-H^{(h)}/k_B T}), \quad (51)$$

$$Z^{(s)} = \left( 2 \operatorname{ch} \left( \frac{h}{k_B T} \right) \right)^{N_e}. \quad (52)$$

**Благодарности.** Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (госзадание СФУ 2014 ГФ-2) Программы президиума РАН № 20.7, Программы поддержки ведущих научных школ (грант НШ-1044.2012.2), РФФИ (грант № 10-02-00251) и внутреннего гранта СФУ НФ-11. Авторы выражают искреннюю признательность С. В. Николаеву за полезные обсуждения.

### Список литературы

- [1] T. Usuki, N. Kawakami, A. Okiji, *J. Phys. Soc. Japan*, **59**:4 (1990), 1357–1365.
- [2] M. Suzuki, M. Inoue, *Prog. Theor. Phys.*, **78**:4 (1987), 787–799.
- [3] T. Deguchi, F. H. L. Essler, F. Göhmann, A. Klümper, V. E. Korepin, K. Kusakabe, *Phys. Rep.*, **331**:5 (2000), 197–281.
- [4] К. А. Сидоров, С. Г. Овчинников, Н. В. Тихонов, *ЖЭТФ*, **143**:2 (2013), 379–387.
- [5] Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, М., 1985.
- [6] И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, М., 1971.
- [7] N. Kawakami, T. Uzuki, A. Okiji, *Phys. Lett. A*, **137**:6 (1989), 287–290.
- [8] G. Jutter, A. Klümper, J. Suzuki, *Nucl. Phys. B*, **522**:3 (1998), 471–502.

Поступила в редакцию 28.11.2013,  
после доработки 2.02.2014