Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

С. М. Ташпулатов, О спектральных свойствах трехэлектронных систем в модели Хаббарда, *ТМФ*, 2014, том 179, номер 3, 387–405

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8577>

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: 54.80.97.219

26 апреля 2023 г., 10:16:33

© 2014 г.

С. М. Ташпулатов*

О СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВАХ ТРЕХЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ В МОДЕЛИ ХАББАРДА

Исследованы спектральные свойства трехэлектронной системы в рамках модели Хаббарда. Доказано, что существенный спектр рассматриваемой системы в квартетном состоянии состоит из единственного отрезка, а трехэлектронное связанное состояние отсутствует. Показано, что в дублетных состояниях существенный спектр системы представляет собой объединение не более чем трех отрезков. Также доказано, что в дублетных состояниях существуют трехэлектронные связанные состояния.

Ключевые слова: модель Хаббарда, трехэлектронная система, квартетное состояние, триплетное состояние, дублетное состояние, синглетное состояние, существенный спектр, дискретный спектр, трехэлектронное связанное состояние, дискретный оператор Шредингера.

DOI: 10.4231/tmf8577

1. ВВЕДЕНИЕ

В начале 70-х гг. прошлого века почти одновременно и независимо появились три работы [1]–[3], в которых была предложена простая модель металла, ставшая фундаментальной моделью теории сильно коррелированных электронных систем. В этой модели рассматривается единственная невырожденная зона электронов с локальным кулоновским взаимодействием. Гамильтониан модели содержит всего два параметра: матричный элемент t перескока электрона с узла на соседний узел решетки и параметр U кулоновского отталкивания двух электронов на одном узле. В представлении вторичного квантования гамильтониан записывается в виде

$$H = t \sum_{m,\tau,\gamma} a_{m,\gamma}^+ a_{m+\tau,\gamma} + U \sum_m a_{m,\uparrow}^+ a_{m,\uparrow} a_{m,\downarrow}^+ a_{m,\downarrow}. \quad (1)$$

Здесь через $a_{m,\gamma}^+$ (через $a_{m,\gamma}$) обозначен ферми-оператор рождения (уничтожения) электрона со спином γ на узле m , суммирование по τ означает суммирование по ближайшим соседям в решетке.

*Институт ядерной физики АН РУз, Ташкент, Узбекистан. E-mail: toshpul@inp.uz, sadullatashpulatov@yandex.ru

Предложенная в работах [1]–[3] модель названа моделью Хаббарда в честь Джона Хаббарда, внесшего фундаментальный вклад в изучение статистической механики этой системы, хотя локальная форма кулоновского взаимодействия впервые введена Андерсоном для примесной модели в металле [4]. Напомним также, что модель Хаббарда является частным случаем полярной модели Шубина–Вонсовского [5], появившейся за тридцать лет до работ [1]–[3]. В модели Шубина–Вонсовского наряду с кулоновским взаимодействием на одном узле учитывается взаимодействие электронов на соседних узлах.

Модель Хаббарда является приближением, которое используется в физике твердого тела для описания перехода между проводящим и диэлектрическим состояниями. Она представляет собой простейшую модель, описывающую взаимодействие частиц в решетке. Ее гамильтониан содержит только два слагаемых: кинетический член, соответствующий туннелированию (перескокам) частиц между узлами решетки, и слагаемое, соответствующее внутриузловому взаимодействию. Частицы могут быть фермионами, как в исходной работе Хаббарда, а также бозонами. Простота и достаточность гамильтониана (1) сделала модель Хаббарда весьма популярной и эффективной для описания сильно коррелированных электронных систем.

Модель Хаббарда хорошо описывает поведение частиц в периодическом потенциале при достаточно низких температурах, когда все частицы находятся в нижней блоховской зоне, а дальними взаимодействиями можно пренебречь. Если учитывается взаимодействие между частицами на разных узлах, то такую модель часто называют расширенной моделью Хаббарда. Впервые эта модель была предложена для описания электронов в твердых телах, с тех пор она представляет особый интерес при изучении высокотемпературной сверхпроводимости. Позднее расширенная модель Хаббарда стала использоваться и при описании поведения ультрахолодных атомов в оптических решетках.

При рассмотрении электронов в твердых телах модель Хаббарда можно считать усложнением модели сильно связанных электронов, которая учитывает только член гамильтониана, связанный с перескоками электронов. В случае сильных взаимодействий эти две модели могут давать значительно отличающиеся друг от друга результаты. При этом модель Хаббарда точно предсказывает существование так называемых изоляторов Мотта, в которых проводимость отсутствует из-за сильного отталкивания между частицами.

Модель Хаббарда основана на приближении сильно связанных электронов. В приближении сильной связи электроны изначально занимают стандартные орбитали в атомах (узлах решетки), а затем перескакивают на другие атомы в процессе проведения тока. Математически это представляется так называемым интегралом перескока. Этот процесс можно рассматривать как физическое явление, благодаря которому появляются электронные зоны в кристаллических материалах. Однако в более общих зонных теориях взаимодействие между электронами не рассматривается. Кроме интеграла перескока, объясняющего проводимость материала, модель Хаббарда содержит так называемое внутриузловое отталкивание, соответствующее кулоновскому отталкиванию между электронами. Это приводит к конкуренции между интегралом перескока, зависящим от взаимного расположения узлов решетки, и внутриузловым отталкиванием, которое от расположения атомов не зависит. Благодаря этому факту модель Хаббарда объясняет переход проводник–диэлектрик

в оксидах некоторых переходных металлов. При нагревании такого материала расстояния между ближайшими соседними узлами в нем увеличиваются, интеграл перескока уменьшается, и внутриузловое отталкивание становится доминирующим фактором.

В настоящее время модель Хаббарда является одной из наиболее интенсивно изучающихся многоэлектронных моделей металла [6]–[10]. Однако до сих пор имеется очень мало точных результатов для спектра и волновых функций кристалла, описываемого моделью Хаббарда, и получение соответствующих утверждений представляет большой интерес.

В работе [6] изучался спектр и волновые функции системы двух электронов в кристалле, который описывается гамильтонианом Хаббарда. Известно, что двухэлектронные системы могут находиться в двух состояниях: триплетном и синглетном [6]–[10]. В работе [6] доказано, что спектр гамильтониана H^t системы в триплетном состоянии чисто непрерывен и совпадает с отрезком $[m, M]$, а у оператора H^s системы в синглетном состоянии, кроме непрерывного спектра $[m, M]$, при некоторых значениях квазиимпульса существует единственное антисвязанное состояние. Для антисвязанного состояния реализуется такое коррелированное движение электронов, при котором велик вклад двоичных состояний. При этом в силу замкнутости системы энергия должна оставаться постоянной и большой. Это вынуждает электроны не расходиться на большие расстояния. Далее, существенным является то обстоятельство, что связанные состояния (их иногда называют состояния типа рассеяния) ниже непрерывного спектра не формируются. Это вполне понятно, так как взаимодействие имеет характер отталкивания. Заметим, что при $U < 0$ реализуется обратная ситуация: ниже непрерывного спектра имеется связанное состояние (антисвязанные состояния отсутствуют), поскольку в этом случае электроны притягиваются друг к другу.

Для первой полосы спектр не зависит от параметра U кулоновского взаимодействия двух электронов на одном узле и соответствует энергии двух невзаимодействующих электронов, в точности совпадая 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 $U \rightarrow 0$, а при $U \rightarrow \infty$ неограниченно возрастает. Вторая полоса в основном соответствует одночастичному состоянию, а именно движению двойки, т. е. двухэлектронным связанным состояниям.

В настоящей работе рассматривается оператор энергии трехэлектронных систем в модели Хаббарда и описывается структура существенного и дискретного спектров системы для дублетных и квартетных состояний. Гамильтониан рассматриваемой модели имеет вид

$$H = A \sum_{m,\gamma} a_{m,\gamma}^+ a_{m,\gamma} + B \sum_{m,\tau,\gamma} a_{m,\gamma}^+ a_{m+\tau,\gamma} + U \sum_m a_{m,\uparrow}^+ a_{m,\uparrow} a_{m,\downarrow}^+ a_{m,\downarrow}. \quad (2)$$

Здесь A – энергия электрона в узле решетки; B – интеграл переноса между соседними узлами (для удобства мы считаем, что $B > 0$); $\tau = \pm e_j$, $j = 1, 2, \dots, \nu$, где e_j – единичные орты, т. е. суммирование ведется по ближайшим соседям; U – параметр кулоновского взаимодействия двух электронов на одном узле; γ – спиновый индекс,

$\gamma = \uparrow$ или $\gamma = \downarrow$, через $\uparrow$ и $\downarrow$ обозначены значения спина $1/2$ и $-1/2$; $a_{m,\gamma}^+$ и $a_{m,\gamma}$ – соответственно операторы рождения и уничтожения электрона в узле $m \in \mathbb{Z}^\nu$.

Энергия системы зависит от ее полного спина S . В случае насыщенного ферромагнитного состояния ($S = N_e/2$, где N_e – число электронов в системе) решение задачи является точным и тривиальным для любого допустимого числа электронов N_e . В этом случае система представляет собой идеальный ферми-газ электронов с одним направлением проекции спинов.

Наряду с гамильтонианом, N_e -электронная система характеризуется полным спином S ,

$$S = S_{\max}, S_{\max} - 1, \dots, S_{\min}, \quad S_{\max} = \frac{N_e}{2}, \quad S_{\min} = 0, \frac{1}{2}.$$

Гамильтониан (2) коммутирует со всеми компонентами оператора $S = (S^+, S^-, S^z)$ полного спина системы, поэтому структура собственных функций и собственные значения системы зависят от S . Гамильтониан H действует в антисимметрическом пространстве Фока $\mathcal{H}_{\text{as}}$.

2. КВАРТЕТНОЕ СОСТОЯНИЕ

Пусть φ_0 – вакуумный вектор в пространстве $\mathcal{H}_{\text{as}}$. Квартетное состояние соответствует свободному движению трех электронов на решетке, и ему отвечают следующие базисные функции:

$$q_{m,n,p}^{3/2} = a_{m,\uparrow}^+ a_{n,\uparrow}^+ a_{p,\uparrow}^+ \varphi_0.$$

Подпространство $\mathcal{H}_k^q$, $k = 3/2$, соответствующее квартетному состоянию, есть множество всех векторов вида

$$\psi = \sum_{m,n,p \in \mathbb{Z}^\nu} f(m,n,p) q_{m,n,p}^k, \quad f \in l_2^{\text{as}},$$

где l_2^{as} – подпространство антисимметричных функций из пространства $l_2((\mathbb{Z}^\nu)^3)$.

ТЕОРЕМА 1. *Подпространство $\mathcal{H}_k^q$ инвариантно относительно оператора H , и сужение $H_k^q = H|_{\mathcal{H}_k^q}$ оператора H на подпространство $\mathcal{H}_k^q$ является ограниченным самосопряженным оператором. Он порождает ограниченный самосопряженный оператор $\bar{H}^q$, действующий в пространстве l_2^{as} по формуле*

$$(\bar{H}^q f)(p, q, r) = 3A f(p, q, r) + B \sum_{\tau} (f(p + \tau, q, r) + f(p, q + \tau, r) + f(p, q, r + \tau)). \quad (3)$$

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

$$H_k^q \psi = \sum_{m,n,p} (\bar{H}^q f)(m, n, p) q_{m,n,p}^k. \quad (4)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Подействуем гамильтонианом H на векторы $\psi \in \mathcal{H}_k^q$ с использованием обычных антикоммутационных соотношений между операторами рождения и уничтожения электронов в узлах,

$$\{a_{m,\gamma}, a_{n,\beta}^+\} = \delta_{m,n} \delta_{\gamma,\beta}, \quad \{a_{m,\gamma}, a_{n,\beta}\} = \{a_{m,\gamma}^+, a_{n,\beta}^+\} = \theta,$$

а также учтем, что $a_{m,\gamma} \varphi_0 = \theta$, где θ – нулевой элемент пространства $\mathcal{H}_k^q$. Отсюда получается утверждение теоремы.

ЛЕММА 1. *Спектры операторов $\tilde{H}^q$ и H_k^q совпадают.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО получается с использованием критерия Вейля [11].

Оператор $\tilde{H}^q$ будем называть *оператором трехэлектронного квартета*.

Обозначим через $\mathcal{F}$ преобразование Фурье:

$$\mathcal{F}: l_2((\mathbb{Z}^\nu)^3) \rightarrow L_2((T^\nu)^3) \equiv \tilde{\mathcal{H}}_k^q,$$

где T^ν – ν -мерный тор, снабженный нормированной мерой Лебега $d\lambda$, $\lambda(T^\nu) = 1$.

Положим $\tilde{H}^q = \mathcal{F} \tilde{H}^q \mathcal{F}^{-1}$. В квазиимпульсном представлении оператор $\tilde{H}^q$ действует в гильбертовом пространстве $L_2^{\text{as}}((T^\nu)^3)$ по формуле

$$\tilde{H}^q \tilde{f}(x, y, z) = h(x, y, z) \tilde{f}(x, y, z), \quad \tilde{f} \in L_2^{\text{as}}((T^\nu)^3),$$

где L_2^{as} – подпространство антисимметричных функций в $L_2((T^\nu)^3)$ и

$$h(x, y, z) = 3A + 2B \sum_{i=1}^{\nu} (\cos x_i + \cos y_i + \cos z_i). \quad (5)$$

Очевидно, что спектр оператора $\tilde{H}^q$ чисто непрерывен и совпадает с множеством значений функции $h(x, y, z)$, т. е. с множеством

$$\text{Im } h(x, y, z) = [m_\nu, M_\nu] = [3A - 6B\nu, 3A + 6B\nu],$$

где

$$m_\nu = \min_{x, y, z \in T^\nu} h(x, y, z), \quad M_\nu = \max_{x, y, z \in T^\nu} h(x, y, z).$$

Следовательно, спектр квартетного состояния не зависит от параметра кулоновского взаимодействия U и представляет собой множество энергий трех невзаимодействующих электронов, движущихся в кристалле. Такой результат является вполне естественным, поскольку квартетное состояние не может содержать состояний с двумя электронами в узле. Таким образом, в квартетном состоянии спектр трехэлектронных систем вычисляется точно и чисто непрерывен. Рассмотренная в настоящей работе спектральная задача является частным случаем задачи о нахождении спектра систем N невзаимодействующих электронов в кристаллической решетке.

По правилу Хунда в N -электронных системах минимальную энергию имеет состояние, в котором все спины направлены вверх, т. е. состояние $\uparrow\uparrow \dots \uparrow$. В силу запрета Паули такое состояние не может содержать состояний с двумя электронами в одном узле. В этом случае спектр системы не зависит от параметра U кулоновского взаимодействия и представляет собой зонную энергию N невзаимодействующих электронов, которые движутся в кристалле. При этом спектр системы чисто непрерывен.

3. ПЕРВОЕ ДУБЛЕТНОЕ СОСТОЯНИЕ

Пусть φ_0 – вакуумный вектор в пространстве $\mathcal{H}_{\text{as}}$. Дублетному состоянию соответствуют следующие базисные функции:

$$^1d_{m,n,p}^{1/2} = a_{m,\uparrow}^+ a_{n,\downarrow}^+ a_{p,\uparrow}^+ \varphi_0, \quad ^2d_{m,n,p}^{1/2} = a_{m,\uparrow}^+ a_{n,\uparrow}^+ a_{p,\downarrow}^+ \varphi_0.$$

Видно, что таких состояний два, и они имеют различное происхождение. Подпространство $\mathcal{H}_1^d$, соответствующее первому дублетному состоянию, – это множество всех векторов вида

$$\psi = \sum_{m,n,p \in \mathbb{Z}^\nu} f(m,n,p) d_{m,n,p}^{1/2}, \quad f \in l_2^{\text{as}},$$

где l_2^{as} – подпространство антисимметричных функций в $l_2((\mathbb{Z}^\nu)^3)$.

ТЕОРЕМА 2. *Подпространство $\mathcal{H}_1^d$ инвариантно относительно оператора H , и сужение $H_1^d = H|_{\mathcal{H}_1^d}$ оператора H на подпространство $\mathcal{H}_1^d$ является ограниченным самосопряженным оператором. Он порождает ограниченный самосопряженный оператор $\bar{H}_1^d$, действующий в пространстве l_2^{as} по формуле*

$$(\bar{H}_1^d f)(p,q,r) = 3Af(p,q,r) + B \sum_{\tau} (f(p+\tau,q,r) + f(p,q+\tau,r) + f(p,q,r+\tau)) + \\ + U(\delta_{p,q} + \delta_{q,r})f(p,q,r), \quad (6)$$

где $\delta_{k,j}$ – символ Кронекера. Сам оператор H_1^d на вектор $\psi \in \mathcal{H}_1^d$ действует по формуле

$$H_1^d \psi = \sum_{m,n,p} (\bar{H}_1^d f)(m,n,p) d_{m,n,p}^{1/2}. \quad (7)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО теоремы можно получить из явного вида действия гамильтониана H на векторы $\psi \in \mathcal{H}_1^d$ с использованием обычных антикоммутиационных соотношений между операторами рождения и уничтожения электронов.

Положим $\tilde{H}_1^d = \mathcal{F} \bar{H}_1^d \mathcal{F}^{-1}$. В квазиимпульсном представлении оператор $\bar{H}_1^d$ действует в гильбертовом пространстве $L_2^{\text{as}}((T^\nu)^3)$ по формуле

$$\tilde{H}_1^d \tilde{f}(x,y,z) = h(x,y,z) \tilde{f}(x,y,z) + \\ + U \int_{T^\nu} (\tilde{f}(s, \lambda + \mu - s, \gamma) ds + \tilde{f}(\lambda, t, \mu + \gamma - t) dt), \quad \tilde{f} \in L_2^{\text{as}}((T^\nu)^3), \quad (8)$$

где L_2^{as} – подпространство антисимметричных функций в $L_2((T^\nu)^3)$ и $h(x,y,z)$ имеет вид (5).

Наряду с оператором $\tilde{H}_1^d$ будем рассматривать оператор H^s синглетного состояния двухэлектронной системы в модели Хаббарда. Синглетному состоянию двух электронов в модели Хаббарда соответствует связанное состояние двух электронов и следующие базисные функции:

$$\psi_{m,n}^s = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{m,\uparrow}^+ a_{n,\downarrow}^+ - a_{m,\downarrow}^+ a_{n,\uparrow}^+) \varphi_0.$$

Подпространство $\mathcal{H}^s$, отвечающее синглетному состоянию двух электронов, есть множество всех векторов вида

$$\psi = \sum_{m,n \in \mathbb{Z}^\nu} f(m,n) \psi_{m,n}^s, \quad f \in l_2^s,$$

где l_2^s – подпространство симметричных функций из пространства $l_2((\mathbb{Z}^\nu)^2)$.

ТЕОРЕМА 3. Подпространство $\mathcal{H}^s$ инвариантно относительно оператора H , и сужение $H^s = H|_{\mathcal{H}^s}$ оператора H на подпространство $\mathcal{H}^s$ является ограниченным самосопряженным оператором. Оператор H^s порождает ограниченный самосопряженный оператор H'^s , действующий в пространстве l_2^s по формуле

$$(H'^s f)(p, q) = 2Af(p, q) + B \sum_{\tau} (f(p + \tau, q) + f(p, q + \tau)) + U\delta_{p,q}f(p, q). \quad (9)$$

Сам оператор H^s на вектор $\psi \in \mathcal{H}^s$ действует по формуле

$$H^s \psi = \sum_{m,n} (H'^s f)(m, n) \psi_{m,n}^s. \quad (10)$$

Положим $\tilde{H}^s = \mathcal{F}H'^s\mathcal{F}^{-1}$. В квазиимпульсном представлении оператор H'^s действует в гильбертовом пространстве $L_2^s((T^\nu)^2)$ по формуле

$$\tilde{H}^s \tilde{f}(x, y) = h(x, y) \tilde{f}(x, y) + U \int_{T^\nu} \tilde{f}(s, x + y - s) ds, \quad \tilde{f} \in L_2^s((T^\nu)^2), \quad (11)$$

где L_2^s – подпространство симметричных функций в $L_2((T^\nu)^2)$ и

$$h(x, y) = 2A + 2B \sum_{i=1}^{\nu} (\cos x_i + \cos y_i).$$

Пусть фиксирован полный квазиимпульс системы $x + y = \Lambda$. Обозначим через $L_2(\Gamma_\Lambda)$ пространство функций, квадратично интегрируемых на многообразии

$$\Gamma_\Lambda = \{(x, y) : x + y = \Lambda\}.$$

Известно [12], что оператор $\tilde{H}^s$ и пространство $\tilde{\mathcal{H}}^s \equiv L_2^s((T^\nu)^2)$ можно разложить в прямой интеграл операторов $\tilde{H}_\Lambda^s$ и пространств $\tilde{\mathcal{H}}_\Lambda^s = L_2(\Gamma_\Lambda)$,

$$\tilde{H}^s = \bigoplus \int_{T^\nu} \tilde{H}_\Lambda^s d\Lambda, \quad \tilde{\mathcal{H}}^s = \bigoplus \int_{T^\nu} \tilde{\mathcal{H}}_\Lambda^s d\Lambda,$$

так, что пространства $\tilde{\mathcal{H}}_\Lambda^s$ окажутся инвариантными относительно операторов $\tilde{H}_\Lambda^s$, а каждый оператор $\tilde{H}_\Lambda^s$ в пространстве $\tilde{\mathcal{H}}_\Lambda^s$ действует по формуле

$$(\tilde{H}_\Lambda^s \tilde{f}_\Lambda)(x) = h_\Lambda(x) \tilde{f}_\Lambda(x) + U \int_{T^\nu} \tilde{f}_\Lambda(t) dt,$$

здесь $h_\Lambda(x) = h(x, \Lambda - x)$ и $\tilde{f}_\Lambda(x) = \tilde{f}(x, \Lambda - x)$.

Известно, что непрерывный спектр оператора $\tilde{H}_\Lambda^s$ не зависит от U и совпадает с отрезком $[m_\Lambda, M_\Lambda]$, где

$$m_\Lambda = \inf_x h_\Lambda(x), \quad M_\Lambda = \sup_x h_\Lambda(x).$$

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1. Собственная функция $\varphi_\Lambda \in L_2(T^\nu \times T^\nu)$ оператора $\tilde{H}_\Lambda^s$, отвечающая собственному значению $z_\Lambda \notin [m_\Lambda, M_\Lambda]$, называется *связанным состоянием* оператора $\tilde{H}^s$ с квазиимпульсом Λ , а величина z_Λ — *энергией* этого состояния.

Известно, что в синглетном состоянии двухэлектронная система, кроме непрерывного спектра, при некоторых значениях параметров гамильтониана имеет в спектре вторую полосу, т. е. существуют двухэлектронные связанные состояния.

Опишем теперь спектр оператора синглетного состояния двухэлектронной системы на ν -мерной решетке $\mathbb{Z}^\nu$. Положим

$$\Delta_\nu(z) = 1 + U \int_{T^\nu} \frac{ds_1 ds_2 \dots ds_\nu}{2A + 4B \sum_{i=1}^\nu \cos(\Lambda_i/2) \cos(\Lambda_i/2 - s_i) - z}.$$

ЛЕММА 2. Число $z = z_0$, не принадлежащее непрерывному спектру оператора $\tilde{H}^s$, является собственным значением этого оператора тогда и только тогда, когда оно является нулем функции $\Delta_\nu(z)$, т. е. $\Delta_\nu(z_0) = 0$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Если z_0 – собственное значение оператора $\tilde{H}^s$, то

$$\left\{ 2A + 4B \sum_{i=1}^\nu \cos \frac{\Lambda_i}{2} \cos \left(\frac{\Lambda_i}{2} - x_i \right) \right\} \tilde{f}_\Lambda(x) + U \int_{T^\nu} \tilde{f}_\Lambda(s) ds = z_0 \tilde{f}_\Lambda(x).$$

Отсюда имеем $\Delta_\nu(z_0) = 0$.

Пусть теперь $\Delta_\nu(z_0) = 0$. Тогда однородное уравнение

$$\tilde{f}_\Lambda(x) + U \int_{T^\nu} \frac{\tilde{f}_\Lambda(s)}{2A + 4B \sum_{i=1}^\nu \cos(\Lambda_i/2) \cos(\Lambda_i/2 - s_i) - z} ds_1 ds_2 \dots ds_\nu = 0$$

имеет нетривиальное решение. Отсюда следует, что число $z = z_0$ является собственным значением оператора $\tilde{H}^s$.

Ясно, что непрерывный спектр гамильтониана $\tilde{H}^s$ синглетного состояния совпадает с отрезком

$$[m_\Lambda^\nu, M_\Lambda^\nu] = \left[2A - 4B \sum_{i=1}^\nu \cos \frac{\Lambda_i}{2}, 2A + 4B \sum_{i=1}^\nu \cos \frac{\Lambda_i}{2} \right].$$

Рассмотрим одномерный случай.

ТЕОРЕМА 4. При $\nu = 1$ оператор $\tilde{H}^s$ для всех значений параметра гамильтониана имеет единственное двухэлектронное антисвязанное состояние φ со значением энергии $z = 2A + \sqrt{U^2 + 16B^2 \cos^2(\Lambda/2)}$, которое лежит выше непрерывного спектра оператора $\tilde{H}^s$, т. е. $z > M_\Lambda^1$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. В одномерном случае функция $\Delta_1(z)$ является монотонно возрастающей вне области непрерывного спектра оператора $\tilde{H}^s$ синглетного состояния. При значениях $z < m_\Lambda^1$ функция $\Delta_1(z)$ возрастает от 1 до $+\infty$,

$$\begin{aligned} \Delta_1(z) &\rightarrow 1 & \text{при } z &\rightarrow -\infty, \\ \Delta_1(z) &\rightarrow +\infty & \text{при } z &\rightarrow m_\Lambda^1 - 0. \end{aligned}$$

Поэтому ниже значения m_Λ^1 функция $\Delta_1(z)$ не может обращаться в нуль. При значениях $z > M_\Lambda^1$ функция $\Delta_1(z)$ возрастает от $-\infty$ до 1,

$$\begin{aligned} \Delta_1(z) &\rightarrow -\infty & \text{при } z &\rightarrow M_\Lambda^1 + 0, \\ \Delta_1(z) &\rightarrow +1 & \text{при } z &\rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Поэтому выше значения M_Λ^1 функция $\Delta_1(z)$ обращается в нуль в единственной точке

$$z = 2A + \sqrt{U^2 + 16B^2 \cos^2 \frac{\Lambda}{2}}.$$

Рассмотрим теперь двумерный случай.

ТЕОРЕМА 5. При $\nu = 2$ оператор $\tilde{H}^s$ для всех значений параметра гамильтониана имеет единственное двухэлектронное антисвязанное состояние $\tilde{\phi}$ со значением энергии, равным $\tilde{z}$, причем $\tilde{z} > M_\Lambda^2$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. В двумерном случае функция $\Delta_2(z)$ является монотонно возрастающей вне области непрерывного спектра оператора $\tilde{H}^s$. При значениях $z < m_\Lambda^2$ функция $\Delta_2(z)$ возрастает от 1 до $+\infty$,

$$\begin{aligned} \Delta_2(z) &\rightarrow 1 && \text{при } z \rightarrow -\infty, \\ \Delta_2(z) &\rightarrow +\infty && \text{при } z \rightarrow m_\Lambda^2 - 0. \end{aligned}$$

Поэтому ниже значения m_Λ^2 функция $\Delta_2(z)$ не может обращаться в нуль. При $z > M_\Lambda^2$ функция $\Delta_2(z)$ возрастает от $-\infty$ до 1,

$$\begin{aligned} \Delta_2(z) &\rightarrow -\infty && \text{при } z \rightarrow M_\Lambda^2 + 0, \\ \Delta_2(z) &\rightarrow 1 && \text{при } z \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Поэтому выше значения M_Λ^2 функция $\Delta_2(z)$ обращается в нуль в единственной точке $\tilde{z} > M_\Lambda^2$.

В трехмерном случае оператор $\tilde{H}^s$ при некоторых значениях параметров гамильтониана имеет единственное двухэлектронное антисвязанное состояние $\tilde{\phi}$, удовлетворяющее неравенству $\tilde{z} > M_\Lambda^3$.

Рассмотрим интеграл Ватсона [13]

$$W = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{3 \, dx \, dy \, dz}{3 - \cos x - \cos y - \cos z} \approx 1.516.$$

Поскольку мера ν нормированная,

$$\begin{aligned} J &= \int_{-\pi}^\pi \int_{-\pi}^\pi \int_{-\pi}^\pi \frac{dx \, dy \, dz}{3 - \cos x - \cos y - \cos z} = \\ &= \int_{-\pi}^\pi \int_{-\pi}^\pi \int_{-\pi}^\pi \frac{dx \, dy \, dz}{3 + \cos x + \cos y + \cos z} = \frac{W}{3}. \end{aligned}$$

ТЕОРЕМА 6. Пусть $\nu = 3$ и полный квазиимпульс системы Λ имеет вид

$$\Lambda = (\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3) = (\Lambda_0, \Lambda_0, \Lambda_0),$$

тогда оператор $\tilde{H}^s$ имеет единственное антисвязанное состояние $\tilde{\phi}$, если

$$U > \frac{12B \cos(\Lambda_0/2)}{W};$$

если же это неравенство не выполнено, то оператор $\tilde{H}^s$ не имеет двухэлектронных антисвязанных состояний.

Отметим, что при $U \rightarrow \infty$ энергия антисвязанного состояния неограниченно высоко поднимается и превращается в уровень.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. В трехмерном случае

$$\begin{aligned}\Delta_3(z) &\rightarrow 1 && \text{при } z \rightarrow -\infty, \\ \Delta_3(z) &\rightarrow Q > 1 && \text{при } z \rightarrow m_\Lambda^3 - 0.\end{aligned}$$

Таким образом, ниже непрерывного спектра функция $\Delta_3(z)$ не может обращаться в нуль. Выше непрерывного спектра

$$\begin{aligned}\Delta_3(z) &\rightarrow 1 - \frac{UW}{12B \cos(\Lambda_0/2)} && \text{при } z \rightarrow M_\Lambda^3 + 0, \\ \Delta_3(z) &\rightarrow 1 && \text{при } z \rightarrow +\infty.\end{aligned}$$

Исследуя уравнение $\Delta_3(z) = 0$ выше области непрерывного спектра оператора $\tilde{H}^s$, получаем утверждение теоремы.

Отметим, что при $U < 0$ реализуется обратная ситуация. Ниже непрерывного спектра оператора $\tilde{H}_\Lambda^s$ существует единственное связанное состояние, а антисвязанное состояние отсутствует. Спектр оператора $\tilde{H}^s$ исследуется так же, как в случае $U > 0$.

Понятно, что спектральные свойства трехэлектронных систем в модели Хаббарда тесно связаны со спектральными свойствами его двухэлектронных подсистем. Сравнивая формулы (8) и (11), убеждаемся, что оператор $\tilde{H}_1^d$ можно представить в виде

$$\tilde{H}_1^d = \tilde{H}_{\Lambda^1}^s \otimes I + I \otimes \tilde{H}_{\Lambda^2}^s. \quad (12)$$

Здесь

$$\Lambda^1 = x + y = \lambda + \mu, \quad \Lambda^2 = y + z = \mu + \gamma,$$

оператор $\tilde{H}_{\Lambda^1}^s$ является оператором системы в синглетном состоянии,

$$\tilde{H}_{\Lambda^1}^s \tilde{f}_{\Lambda^1}(x) = h_{\Lambda^1}(x) \tilde{f}_{\Lambda^1}(x) + U \int_{T^\nu} \tilde{f}_{\Lambda^1}(s) ds,$$

где

$$\tilde{f}_{\Lambda^1}(x) = \tilde{f}(x, \Lambda^1 - x), \quad h_{\Lambda^1}(x) = h(x, \Lambda^1 - x).$$

Оператор $\tilde{H}_{\Lambda^2}^s$ действует по формуле

$$\tilde{H}_{\Lambda^2}^s \tilde{f}_{\Lambda^2}(x) = \tilde{h}_{\Lambda^2}(x) \tilde{f}_{\Lambda^2}(x) + U \int_{T^\nu} \tilde{f}_{\Lambda^2}(s) ds,$$

где

$$\tilde{h}_{\Lambda^2}(y) = A + 2B \sum_{i=1}^{\nu} \cos(\Lambda_i^2 - y_i), \quad \tilde{f}_{\Lambda^2}(y) = \tilde{f}(y, \Lambda^2 - y).$$

Таким образом, нам необходимо изучить спектр и связанные состояния оператора $\tilde{H}_{\Lambda^2}^s$. Пусть

$$\tilde{\Delta}_\nu(z) = 1 + U \int_{T^\nu} \frac{ds_1 ds_2 \dots ds_\nu}{A + 2B \sum_{i=1}^{\nu} \cos(\Lambda_i^2 - s_i) - z}.$$

ЛЕММА 3. Число $z = z_0$, не принадлежащее непрерывному спектру оператора $\tilde{H}_{\Lambda^2}^*$, является собственным значением этого оператора тогда и только тогда, когда оно является нулем функции $\tilde{\Delta}_\nu(z)$, т. е. $\tilde{\Delta}_\nu(z_0) = 0$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО аналогично доказательству леммы 2.

Сначала рассмотрим одномерный случай: в этом случае непрерывный спектр оператора $\tilde{H}_{\Lambda^2}^*$ совпадает с отрезком $[A - 2B, A + 2B]$.

ТЕОРЕМА 7. При $\nu = 1$ оператор $\tilde{H}_{\Lambda^2}^*$ для всех значений параметра гамильтониана имеет единственное двухэлектронное антисвязанное состояние φ^* с энергией $z^* = A + \sqrt{U^2 + 4B^2}$, лежащей выше непрерывного спектра оператора $\tilde{H}_{\Lambda^2}^*$, т. е. $z^* > A + 2B$.

В двумерном случае непрерывный спектр оператора $\tilde{H}_{\Lambda^2}^*$ совпадает с отрезком $[A - 4B, A + 4B]$.

ТЕОРЕМА 8. При $\nu = 2$ оператор $\tilde{H}_{\Lambda^2}^*$ для всех значений параметра гамильтониана имеет единственное двухэлектронное антисвязанное состояние φ^{**} с энергией z^{**} , причем $z^{**} > A + 4B$.

В трехмерном случае непрерывный спектр оператора $\tilde{H}_{\Lambda^2}^*$ совпадает с отрезком $[A - 6B, A + 6B]$.

ТЕОРЕМА 9. При $\nu = 3$ оператор $\tilde{H}_{\Lambda^2}^*$ имеет единственное антисвязанное состояние φ^{***} , если $U > 6B/W$. Если $U \leq 6B/W$, то оператор $\tilde{H}_{\Lambda^2}^*$ не имеет двухэлектронных антисвязанных состояний.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМ 7–9 основано на том, что функция $\tilde{\Delta}_\nu(z)$ является монотонно возрастающей вне непрерывного спектра оператора $\tilde{H}_{\Lambda^2}^*$.

В одномерном и двумерном случаях при значениях $z < m_\Lambda^\nu$ функция $\tilde{\Delta}_\nu(z)$ возрастает от 1 до $+\infty$,

$$\begin{aligned}\tilde{\Delta}_\nu(z) &\rightarrow 1 && \text{при } z \rightarrow -\infty, \\ \tilde{\Delta}_\nu(z) &\rightarrow +\infty && \text{при } z \rightarrow m_\Lambda^\nu - 0.\end{aligned}$$

Поэтому при $z < m_\Lambda^\nu$ функция $\tilde{\Delta}_\nu(z)$ не может обращаться в нуль. При $z > M_\Lambda^\nu$ функция $\tilde{\Delta}_\nu(z)$ возрастает от $-\infty$ до 1,

$$\begin{aligned}\tilde{\Delta}_\nu(z) &\rightarrow -\infty && \text{при } z \rightarrow M_\Lambda^\nu + 0, \\ \tilde{\Delta}_\nu(z) &\rightarrow 1 && \text{при } z \rightarrow +\infty,\end{aligned}$$

поэтому функция $\tilde{\Delta}_\nu(z)$ для всех значений параметра гамильтониана может обращаться в нуль только в единственной точке.

В трехмерном случае

$$\begin{aligned}\tilde{\Delta}_3(z) &\rightarrow 1 && \text{при } z \rightarrow -\infty, \\ \tilde{\Delta}_3(z) &\rightarrow \tilde{Q} > 1 && \text{при } z \rightarrow m_\Lambda^3 - 0.\end{aligned}$$

Поэтому ниже непрерывного спектра оператора $\tilde{H}_{\Lambda^2}^*$ функция $\tilde{\Delta}_3(z)$ не может обращаться в нуль. Для $z > M_\Lambda^3$ имеем

$$\begin{aligned}\tilde{\Delta}_3(z) &\rightarrow 1 - \frac{UW}{6B} \quad \text{при } z \rightarrow M_\Lambda^3 + 0, \\ \tilde{\Delta}_3(z) &\rightarrow 1 \quad \text{при } z \rightarrow +\infty.\end{aligned}$$

Отсюда получаем условия существования антисвязанных состояний.

Теперь, используя полученные результаты и представление (12), опишем структуру существенного спектра и дискретный спектр оператора $\tilde{H}_1^d$.

Спектр оператора $A \otimes I + I \otimes B$, где A и B – плотно определенные ограниченные линейные операторы, был изучен в работах [14]–[16]. В этих работах приведены явные формулы, выражающие существенный спектр $\sigma_{\text{ess}}(A \otimes I + I \otimes B)$ и дискретный спектр $\sigma_{\text{disc}}(A \otimes I + I \otimes B)$ оператора $A \otimes I + I \otimes B$ через спектр $\sigma(A)$ и дискретный спектр $\sigma_{\text{disc}}(A)$ оператора A и через спектр $\sigma(B)$ и дискретный спектр $\sigma_{\text{disc}}(B)$ оператора B :

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{disc}}(A \otimes I + I \otimes B) &= \\ &= \{\sigma(A) \setminus \sigma_{\text{ess}}(A) + \sigma(B) \setminus \sigma_{\text{ess}}(B)\} \setminus \{(\sigma_{\text{ess}}(A) + \sigma(B)) \cup (\sigma(A) + \sigma_{\text{ess}}(B))\}, \\ \sigma_{\text{ess}}(A \otimes I + I \otimes B) &= (\sigma_{\text{ess}}(A) + \sigma(B)) \cup (\sigma(A) + \sigma_{\text{ess}}(B)).\end{aligned}$$

Ясно, что $\sigma(A \otimes I + I \otimes B) = \{\lambda + \mu: \lambda \in \sigma(A), \mu \in \sigma(B)\}$.

ТЕОРЕМА 10. При $\nu = 1$ существенный спектр оператора $\tilde{H}_1^d$ системы в дублетном состоянии есть объединение трех отрезков:

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{ess}}(\tilde{H}_1^d) &= \left[3A - 2B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda}{2} \right), 3A + 2B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda}{2} \right) \right] \cup \\ &\cup \left[z^* + 2A - 4B \cos \frac{\Lambda}{2}, z^* + 2A + 4B \cos \frac{\Lambda}{2} \right] \cup [z + A - 2B, z + A + 2B].\end{aligned}$$

Дискретный спектр оператора $\tilde{H}_1^d$ состоит из единственной точки (существует единственное антисвязанное состояние):

$$\sigma_{\text{disc}}(\tilde{H}_1^d) = \{z + z^*\},$$

где z – собственное значение оператора $\tilde{H}^s$, а z^* – собственное значение оператора $\tilde{H}^*$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Из представления (12) видно, что

$$\sigma(\tilde{H}_1^d) = \{\lambda + \mu: \lambda \in \sigma(\tilde{H}^s), \mu \in \sigma(\tilde{H}^*)\},$$

и в одномерном случае непрерывный спектр оператора $\tilde{H}^s$ есть

$$\sigma_{\text{cont}}(\tilde{H}^s) = \left[2A - 4B \cos \frac{\Lambda}{2}, 2A + 4B \cos \frac{\Lambda}{2} \right],$$

а дискретный спектр оператора $\tilde{H}^s$ состоит из единственной точки z .

Непрерывный спектр оператора $\tilde{H}^*$ – это отрезок $[A - 2B, A + 2B]$, а дискретный спектр оператора $\tilde{H}^*$ также состоит из единственной точки z^* . Поэтому существенный спектр оператора $\tilde{H}_1^d$ системы в дублетном состоянии представляет собой объединение трех отрезков, а точка $z + z^*$ является собственным значением этого оператора (энергией антисвязанного состояния).

Полностью аналогично теореме 10 доказывается следующая теорема.

ТЕОРЕМА 11. При $\nu = 2$ существенный спектр оператора $\tilde{H}_1^d$ есть объединение трех отрезков:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{ess}}(\tilde{H}_1^d) = & \left[3A - 4B \left(1 + \cos \frac{\Lambda_1}{2} + \cos \frac{\Lambda_2}{2} \right), 3A + 4B \left(1 + \cos \frac{\Lambda_1}{2} + \cos \frac{\Lambda_2}{2} \right) \right] \cup \\ & \cup \left[z^{**} + 2A - 4B \left(\cos \frac{\Lambda_1}{2} + \cos \frac{\Lambda_2}{2} \right), z^{**} + 2A + 4B \left(\cos \frac{\Lambda_1}{2} + \cos \frac{\Lambda_2}{2} \right) \right] \cup \\ & \cup [\tilde{z} + A - 4B, \tilde{z} + A + 4B]. \end{aligned}$$

Дискретный спектр оператора $\tilde{H}_1^d$ состоит из единственной точки:

$$\sigma_{\text{disc}}(\tilde{H}_1^d) = \{\tilde{z} + z^{**}\},$$

где $\tilde{z}$ – собственное значение оператора $\tilde{H}^s$, а z^{**} – собственное значение оператора $\tilde{H}^*$.

Пусть $\nu = 3$ и $\Lambda = (\Lambda_0, \Lambda_0, \Lambda_0)$.

ТЕОРЕМА 12. Имеют место следующие утверждения.

1. Пусть

$$U > \frac{6B}{W}, \quad \cos \frac{\Lambda_0}{2} \geq \frac{1}{2}.$$

Тогда существенный спектр оператора $\tilde{H}_1^d$ системы в дублетном состоянии есть объединение трех отрезков:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{ess}}(\tilde{H}_1^d) = & \left[3A - 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0}{2} \right), 3A + 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0}{2} \right) \right] \cup \\ & \cup \left[z^{***} + 2A - 12B \cos \frac{\Lambda_0}{2}, z^{***} + 2A + 12B \cos \frac{\Lambda_0}{2} \right] \cup [\tilde{z} + A - 6B, \tilde{z} + A + 6B]. \end{aligned}$$

Дискретный спектр оператора $\tilde{H}_1^d$ состоит из единственной точки:

$$\sigma_{\text{disc}}(\tilde{H}_1^d) = \{\tilde{z} + z^{***}\};$$

здесь и ниже $\tilde{z}$ – собственное значение оператора $\tilde{H}^s$, а z^{***} – собственное значение оператора $\tilde{H}^*$.

2. Пусть

$$\frac{6B}{W} < U < \frac{12B \cos(\Lambda_0/2)}{W}, \quad \cos \frac{\Lambda_0}{2} > \frac{1}{2}.$$

Тогда существенный спектр оператора $\tilde{H}_1^d$ есть объединение двух отрезков:

$$\sigma_{\text{ess}}(\tilde{H}_1^d) = \left[3A - 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0}{2} \right), 3A + 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0}{2} \right) \right] \cup \\ \cup \left[z^{***} + 2A - 12B \cos \frac{\Lambda_0}{2}, z^{***} + 2A + 12B \cos \frac{\Lambda_0}{2} \right].$$

Дискретный спектр оператора $\tilde{H}_1^d$ является пустым.

3. Пусть

$$\frac{12B \cos(\Lambda_0/2)}{W} < U < \frac{6B}{W}, \quad \cos \frac{\Lambda_0}{2} < \frac{1}{2}.$$

Тогда существенный спектр оператора $\tilde{H}_1^d$ есть объединение двух отрезков:

$$\sigma_{\text{ess}}(\tilde{H}_1^d) = \left[3A - 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0}{2} \right), 3A + 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0}{2} \right) \right] \cup \\ \cup [\tilde{z} + A - 6B, \tilde{z} + A + 6B].$$

Дискретный спектр оператора $\tilde{H}_1^d$ является пустым.

4. Пусть

$$U < \frac{6B}{W}, \quad \cos \frac{\Lambda_0}{2} > \frac{1}{2}.$$

Тогда существенный спектр оператора $\tilde{H}_1^d$ – это единственный отрезок,

$$\sigma_{\text{ess}}(\tilde{H}_1^d) = \left[3A - 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0}{2} \right), 3A + 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0}{2} \right) \right],$$

а дискретный спектр пуст.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО получается с использованием представления (12) и результатов для спектров операторов $\tilde{H}^s$ и $\tilde{H}^*$ в случае $\nu = 3$.

4. ВТОРОЕ ДУБЛЕТНОЕ СОСТОЯНИЕ

Рассмотрим второе дублетное состояние ${}^2d_{m,n,p}^{1/2} = a_{m,\uparrow}^+ a_{n,\uparrow}^+ a_{p,\downarrow}^+ \varphi_0$. Подпространство $\mathcal{H}_2^d$, соответствующее этому состоянию, есть множество всех векторов вида

$$\psi = \sum_{m,n,p \in \mathbb{Z}^\nu} f(m,n,p) {}^2d_{m,n,p}^{1/2}, \quad f \in l_2^{\text{as}},$$

где l_2^{as} – подпространство антисимметричных функций в $l_2((\mathbb{Z}^\nu)^3)$.

ТЕОРЕМА 13. Подпространство $\mathcal{H}_2^d$ инвариантно относительно оператора H , и сужение $H_2^d = H|_{\mathcal{H}_2^d}$ оператора H на подпространство $\mathcal{H}_2^d$ является ограниченным самосопряженным оператором. Он порождает ограниченный самосопряженный оператор $\bar{H}_2^d$, действующий в пространстве l_2^{as} по формуле

$$(\bar{H}_2^d f)(p, q, r) = 3A f(p, q, r) + B \sum_r (f(p + \tau, q, r) + f(p, q + \tau, r) + f(p, q, r + \tau)) + \\ + U[\delta_{p,r} + \delta_{q,r}] f(p, q, r). \quad (13)$$

Сам оператор H_2^d на вектор $\psi \in \mathcal{H}_2^d$ действует по формуле

$$H_2^d \psi = \sum_{m,n,p} (\bar{H}_2^d f)(m, n, p) {}^2d_{m,n,p}^{1/2}. \quad (14)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО теоремы следует из явного вида действия гамильтониана H на векторы $\psi \in \mathcal{H}_2^d$ с использованием обычных антикоммутиационных соотношений между операторами рождения и уничтожения электронов.

Положим $\tilde{H}_2^d = \mathcal{F} \bar{H}_2^d \mathcal{F}^{-1}$. В квазиимпульсном представлении оператор $\bar{H}_2^d$ действует в гильбертовом пространстве $L_2^{\text{as}}((T^\nu)^3)$ по формуле

$$\begin{aligned} \tilde{H}_2^d \tilde{f}(x, y, z) &= h(x, y, z) \tilde{f}(x, y, z) + \\ &+ U \int_{T^\nu} (\tilde{f}(s, \mu, \lambda + \gamma - s) ds + \tilde{f}(\lambda, t, \mu + \gamma - t) dt), \quad \tilde{f} \in L_2^{\text{as}}((T^\nu)^3), \end{aligned} \quad (15)$$

где L_2^{as} – подпространство антисимметричных функций в $L_2((T^\nu)^3)$ и $h(x, y, z)$ имеет вид (5).

Учитывая, что функция $\tilde{f}(x, y, z)$ является антисимметрической, формулу (15) можно переписать как

$$\tilde{H}_2^d \tilde{f}(x, y, z) = -h(x, y, z) \tilde{f}(x, z, y) - U \int_{T^\nu} \tilde{f}(s, \lambda + \gamma - s, \mu) ds + U \int_{T^\nu} \tilde{f}(\lambda, t, \mu + \gamma - t) dt. \quad (16)$$

Сравнивая формулы (8) и (16), убеждаемся, что оператор $\tilde{H}_2^d$ можно представить в виде

$$\tilde{H}_2^d = -\tilde{H}_{\Lambda^3}^s \otimes I + I \otimes \tilde{H}_{\Lambda^2}^{\star\star}. \quad (17)$$

Здесь

$$\Lambda^2 = y + z = \mu + \gamma, \quad \Lambda^3 = x + z = \lambda + \gamma.$$

Оператор $\tilde{H}_{\Lambda^3}^s$ является оператором системы в синглетном состоянии,

$$\tilde{H}_{\Lambda^3}^s \tilde{f}_{\Lambda^3}(x) = h_{\Lambda^3}(x) \tilde{f}_{\Lambda^3}(x) + U \int_{T^\nu} \tilde{f}_{\Lambda^3}(s) ds,$$

где

$$\tilde{f}_{\Lambda^3}(x) = \tilde{f}(x, \Lambda^3 - x), \quad h_{\Lambda^3}(x) = h(x, \Lambda^3 - x).$$

Оператор $\tilde{H}_{\Lambda^2}^{\star\star}$ действует по формуле

$$\tilde{H}_{\Lambda^2}^{\star\star} \tilde{f}_{\Lambda^2}(x) = \tilde{h}_{\Lambda^2}(x) \tilde{f}_{\Lambda^2}(x) + U \int_{T^\nu} \tilde{f}_{\Lambda^2}(s) ds,$$

где

$$\tilde{h}_{\Lambda^2}(y) = A + 2B \sum_{i=1}^{\nu} \cos y_i, \quad \tilde{f}_{\Lambda^2}(y) = \tilde{f}(y, \Lambda^2 - y).$$

Итак, нам необходимо изучить спектр и связанные состояния операторов $\tilde{H}_{\Lambda^2}^{\star\star}$ и $-\tilde{H}_{\Lambda^3}^s$. Пусть

$$\Delta'_\nu(z) = 1 + U \int_{T^\nu} \frac{ds_1 ds_2 \dots ds_\nu}{A + 2B \sum_{i=1}^{\nu} \cos s_i - z}.$$

ЛЕММА 4. Число $z = z_0$, не принадлежащее непрерывному спектру оператора $\tilde{H}_{\Lambda^2}^{**}$, является собственным значением этого оператора тогда и только тогда, когда оно является нулем функции $\Delta'_\nu(z)$.

Непрерывный спектр оператора $\tilde{H}_{\Lambda^2}^{**}$ совпадает с отрезком $[A - 2\nu B, A + 2\nu B]$.

ТЕОРЕМА 14. Имеют место следующие утверждения.

1. При $\nu = 1$, если $U > 0$, оператор $\tilde{H}_{\Lambda^2}^{**}$ имеет единственное собственное значение $z = A + \sqrt{U^2 + 4B^2}$, причем $z > A + 2B = M_{\Lambda^2}$.

2. При $\nu = 2$, если $U > 0$, оператор $\tilde{H}_{\Lambda^2}^{**}$ имеет единственное собственное значение $\tilde{z} > A + 4B = M_{\Lambda^2}$.

3. При $\nu = 3$ и $U > 6B/W$ оператор $\tilde{H}^{**}$ имеет единственное собственное значение z^{**} , удовлетворяющее условию $z^{**} > A + 6B$, а при $0 < U \leq 6B/W$ оператор $\tilde{H}^{**}$ не имеет собственных значений, которые удовлетворяют условию $z^{**} > A + 6B = M_{\Lambda^2}$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО утверждений теоремы аналогично доказательству теорем 11–13.

Пусть

$$\Delta''_\nu(z) = 1 - U \int_{T^\nu} \frac{ds_1 ds_2 \dots ds_\nu}{2A + 4B \sum_{i=1}^\nu \cos(\Lambda_i^3/2) \cos(\Lambda_i^3/2 - s_i) + z}.$$

ЛЕММА 5. Число $z = z_0$, не принадлежащее непрерывному спектру оператора $-\tilde{H}_{\Lambda^3}^s$, является собственным значением этого оператора тогда и только тогда, когда оно является нулем функции $\Delta''_\nu(z)$.

В одномерном случае непрерывный спектр оператора $-\tilde{H}_{\Lambda^3}^s$ совпадает с отрезком

$$\left[-2A - 4B \cos \frac{\Lambda^3}{2}, -2A + 4B \cos \frac{\Lambda^3}{2} \right].$$

ТЕОРЕМА 15. Пусть $\nu = 1$, $U > 0$. Тогда при всех значениях параметров гамильтониана оператор $-\tilde{H}_{\Lambda^3}^s$ имеет единственное собственное значение

$$z' = -2A - \sqrt{U^2 + 16B^2 \cos^2 \frac{\Lambda^3}{2}},$$

удовлетворяющее условию

$$z' < -2A - 4B \cos \frac{\Lambda^3}{2} = m_{\Lambda^3}^1.$$

При $\nu = 2$ непрерывный спектр оператора $-\tilde{H}_{\Lambda^3}^s$ совпадает с отрезком

$$\left[-2A - 4B \left(\cos \frac{\Lambda_1^3}{2} + \cos \frac{\Lambda_2^3}{2} \right), -2A + 4B \left(\cos \frac{\Lambda_1^3}{2} + \cos \frac{\Lambda_2^3}{2} \right) \right].$$

ТЕОРЕМА 16. Пусть $\nu = 2$, $U > 0$. Тогда при всех значениях параметров гамильтониана оператор $-\tilde{H}_{\Lambda^3}^s$ имеет единственное собственное значение z'' , удовлетворяющее условию

$$z'' < -2A - 4B \cos \frac{\Lambda_1^3}{2} - 4B \cos \frac{\Lambda_2^3}{2} = m_{\Lambda^3}^2.$$

Теперь рассмотрим трехмерный случай. Пусть полный квазиимпульс Λ^3 имеет вид

$$\Lambda^3 = (\Lambda_1^3, \Lambda_2^3, \Lambda_3^3) = (\Lambda_0^3, \Lambda_0^3, \Lambda_0^3). \quad (18)$$

Тогда непрерывный спектр оператора $-\tilde{H}_{\Lambda^3}^s$ совпадает с отрезком

$$\left[-2A - 12B \cos \frac{\Lambda_0^3}{2}, -2A + 12B \cos \frac{\Lambda_0^3}{2} \right].$$

ТЕОРЕМА 17. Пусть $\nu = 3$ и полный квазиимпульс системы Λ^3 имеет вид (18). Если $U > 12B \cos(\Lambda_0^3/2)/W$, то оператор $-\tilde{H}_{\Lambda^3}^s$ имеет единственное собственное значение z''' , которое удовлетворяет условию

$$z''' < -2A - 12B \cos \frac{\Lambda_0^3}{2}. \quad (19)$$

Если $U \leq 12B \cos(\Lambda_0^3/2)/W$, то оператор $-\tilde{H}_{\Lambda^3}^s$ не имеет собственных значений, удовлетворяющих условию (19).

Опишем теперь структуру существенного и дискретного спектров оператора $\tilde{H}_2^d$ системы в дублетном состоянии.

ТЕОРЕМА 18. При $\nu = 1$ существенный спектр оператора $\tilde{H}_2^d$ есть объединение трех отрезков:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{ess}}(\tilde{H}_2^d) = & \left[-A - 2B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda^3}{2} \right), -A + 2B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda^3}{2} \right) \right] \cup \\ & \cup \left[z - 2A - 4B \cos \frac{\Lambda^3}{2}, z - 2A + 4B \cos \frac{\Lambda^3}{2} \right] \cup [z' + A - 2B, z' + A + 2B]. \end{aligned}$$

Дискретный спектр оператора $\tilde{H}_2^d$ состоит из единственной точки:

$$\sigma_{\text{disc}}(\tilde{H}_2^d) = \{z + z'\},$$

где z – собственное значение оператора $\tilde{H}^{**}$, а z' – собственное значение оператора $-\tilde{H}_{\Lambda^3}^s$. Если $z + z'$ лежит вне существенного спектра оператора $\tilde{H}_2^d$, то $z + z'$ является энергией единственного антисвязанного состояния оператора $\tilde{H}_2^d$. В противном случае оператор $\tilde{H}_2^d$ не имеет антисвязанных состояний.

ТЕОРЕМА 19. При $\nu = 2$ существенный спектр оператора $\tilde{H}_2^d$ есть объединение трех отрезков:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{ess}}(\tilde{H}_2^d) = & \left[-A - 4B \left(1 + \cos \frac{\Lambda_1^3}{2} + \cos \frac{\Lambda_2^3}{2} \right), -A + 4B \left(1 + \cos \frac{\Lambda_1^3}{2} + \cos \frac{\Lambda_2^3}{2} \right) \right] \cup \\ & \cup \left[\tilde{z} - 2A - 4B \left(\cos \frac{\Lambda_1^3}{2} + \cos \frac{\Lambda_2^3}{2} \right), \tilde{z} + 2A + 4B \left(\cos \frac{\Lambda_1^3}{2} + \cos \frac{\Lambda_2^3}{2} \right) \right] \cup \\ & \cup [z'' + A - 4B, z'' + A + 4B]. \end{aligned}$$

Дискретный спектр оператора $\tilde{H}_2^d$ состоит из единственной точки:

$$\sigma_{\text{disc}}(\tilde{H}_2^d) = \{\tilde{z} + z''\},$$

где $\tilde{z}$ – собственное значение оператора $\tilde{H}^{**}$, а z'' – собственное значение оператора $-\tilde{H}_{\Lambda^3}^s$. Если $\tilde{z} + z''$ лежит вне существенного спектра оператора $\tilde{H}_2^d$, то $\tilde{z} + z''$ является энергией единственного антисвязанного состояния оператора $\tilde{H}_2^d$. В противном случае оператор $\tilde{H}_2^d$ не имеет антисвязанных состояний.

Пусть $\nu = 3$ и $\Lambda^3 = (\Lambda_0^3, \Lambda_0^3, \Lambda_0^3)$.

ТЕОРЕМА 20. Имеют место следующие утверждения.

1. Пусть

$$U > \frac{6B}{W}, \quad \cos \frac{\Lambda_0^3}{2} \geq \frac{1}{2}.$$

Тогда существенный спектр оператора $\tilde{H}_2^d$ есть объединение трех отрезков:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{ess}}(\tilde{H}_2^d) = & \left[-A - 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0^3}{2} \right), -A + 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0^3}{2} \right) \right] \cup \\ & \cup \left[z^{**} - 2A - 12B \cos \frac{\Lambda_0^3}{2}, z^{**} - 2A + 12B \cos \frac{\Lambda_0^3}{2} \right] \cup \\ & \cup [z''' + A - 6B, z''' + A + 6B]. \end{aligned}$$

Дискретный спектр оператора $\tilde{H}_2^d$ состоит из единственной точки:

$$\sigma_{\text{disc}}(\tilde{H}_2^d) = \{z''' + z^{**}\};$$

здесь и далее z''' – собственное значение оператора $-\tilde{H}_{\Lambda^3}^s$, а z^{**} – собственное значение оператора $\tilde{H}^{**}$.

2. Пусть

$$\frac{6B}{W} < U < \frac{12B \cos(\Lambda_0^3/2)}{W}, \quad \cos \frac{\Lambda_0^3}{2} > \frac{1}{2}.$$

Тогда существенный спектр оператора $\tilde{H}_2^d$ есть объединение двух отрезков:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{ess}}(\tilde{H}_2^d) = & \left[-A - 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0^3}{2} \right), -A + 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0^3}{2} \right) \right] \cup \\ & \cup [z''' + A - 6B, z''' + A + 6B]. \end{aligned}$$

Дискретный спектр оператора $\tilde{H}_2^d$ является пустым.

3. Пусть

$$\frac{12B \cos(\Lambda_0^3/2)}{W} < U < \frac{6B}{W}, \quad \cos \frac{\Lambda_0^3}{2} < \frac{1}{2}.$$

Тогда существенный спектр оператора $\tilde{H}_2^d$ есть объединение двух отрезков:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{ess}}(\tilde{H}_2^d) = & \left[-A - 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0^3}{2} \right), -A + 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0^3}{2} \right) \right] \cup \\ & \cup \left[z^{**} - 2A - 12B \cos \frac{\Lambda_0^3}{2}, z^{**} - 2A + 12B \cos \frac{\Lambda_0^3}{2} \right]. \end{aligned}$$

Дискретный спектр оператора $\tilde{H}_2^d$ является пустым.

4. Пусть

$$U < \frac{6B}{W}, \quad \cos \frac{\Lambda_0^3}{2} > \frac{1}{2}.$$

Тогда существенный спектр оператора $\tilde{H}_2^d$ дублетного состояния представляет собой единственный отрезок,

$$\sigma_{\text{ess}}(\tilde{H}_2^d) = \left[-A - 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0^3}{2} \right), -A + 6B \left(1 + 2 \cos \frac{\Lambda_0^3}{2} \right) \right],$$

а дискретный спектр пуст.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО теорем 18–20 аналогично доказательству теорем 10–12.

Мы рассмотрели случай $\cos(\Lambda/2) > 0$. Случай $\cos(\Lambda/2) \leq 0$ исследуется аналогично.

Итак, в дублетных состояниях трехэлектронная система имеет не более одного антисвязанного состояния или не более одного связанного состояния соответственно при значениях $U > 0$ или $U < 0$. Существенный спектр системы представляет собой объединение не более чем трех отрезков.

Список литературы

- [1] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **276**:1365 (1963), 238–257.
- [2] M. C. Gutzwiller, *Phys. Rev. Lett.*, **10**:5 (1963), 159–162.
- [3] J. Kanamori, *Prog. Theor. Phys.*, **30**:3 (1963), 275–289.
- [4] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **124**:1 (1961), 41–53.
- [5] S. P. Shubin, S. V. Wonsowsky, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **145** (1934), 159–180.
- [6] Б. В. Карпенко, В. В. Дякин, Г. Л. Будрина, *ФММ*, **61**:2 (1986), 702–706.
- [7] D. Mattis, *Rev. Modern Phys.*, **58**:2 (1986), 361–379.
- [8] E. Lieb, *Phys. Rev. Lett.*, **62**:10 (1989), 1201–1204.
- [9] A. M. Tsvelick, P. B. Wiegmann, *Adv. Phys.*, **32**:4 (1983), 453–713.
- [10] Ю. Ф. Изюмов, Ю. Н. Скрябин, *Статистическая механика магнитоупорядоченных систем*, Наука, М., 1987.
- [11] М. Рид, Б. Саймон, *Методы современной математической физики*, т. 1: *Функциональный анализ*, Мир, М., 1977.
- [12] М. А. Наймарк, *Нормированные кольца*, Наука, М., 1968.
- [13] В. В. Вальков, С. Г. Овчинников, О. П. Петраковский, *ФТТ*, **30**:10 (1988), 3044–3047.
- [14] T. Ichinose, *Trans. Amer. Math. Soc.*, **235** (1978), 75–113.
- [15] T. Ichinose, *Trans. Amer. Math. Soc.*, **237** (1978), 223–254.
- [16] T. Ichinose, “On the spectral properties of tensor products of linear operators in Banach spaces”, *Spectral Theory*, Banach Center Publications, **8**, PWN-Polish Sci. Publ., Warsaw, 1982, 295–300.

Поступила в редакцию 22.07.2013,
после доработки 2.12.2013