ЖЭТФ, 1998, том 113, вып. 3, стр. 1000–1008

ОТСУТСТВИЕ НАСЫЩЕННОГО ФЕРРОМАГНЕТИЗМА В ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ХАББАРДА С ДВУМЯ ДЫРКАМИ ПРИ $U = \infty$

*Ю. В. Михайлова**

Государственный научный центр «НИИтеплоприбор»
129085, Москва, Россия

Поступила в редакцию 9 июля 1997 г.

Для квадратной решетки Хаббарда с бесконечной энергией отталкивания U получен точный результат: ферромагнитное состояние с максимальным спином не является основным состоянием системы, если число дырок равно двум.

1. ВВЕДЕНИЕ

Модель Хаббарда, первоначально введенная для объяснения ферромагнетизма, является простейшей моделью, описывающей соединения с сильной корреляционной связью. Гамильтониан Хаббарда обычно записывается в виде

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} \left(\hat{c}^+_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} + \hat{c}^+_{j,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma} \right) + U \sum_i (n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}),$$

где $c^+_{i,\sigma}$ $(c_{i,\sigma})$ — операторы рождения (уничтожения) электрона в узле i с проекцией спина σ, $n_{i\sigma}$ — число электронов в узле i со спином σ, суммирование $\langle i,j \rangle$ распространяется по парам ближайших соседей. Наличие всего двух параметров: перескока на соседней узел t и энергии кулоновского отталкивания на одном узле U делает модель чрезвычайно привлекательной для исследования.

Двумерная модель Хаббарда с бесконечным отталкиванием может рассматриваться как нулевое приближение для описания большого класса соединений с аномальными магнитными и электрическими свойствами, в том числе для высокотемпературных сверхпроводников. Поэтому вопрос о природе основного состояния этой модели имеет исключительное значение для понимания механизма высокотемпературной сверхпроводимости. Имеющиеся в литературе на сегодняшний момент работы содержат противоречивые утверждения. Все численные исследования кластерных систем (см., например, [1, 2]) дают одну и ту же картину: для системы с фиксированным полным спином частиц S энергия основного состояния $E_0(S)$ является монотонной функцией S. В случае одной дырки основное состояние системы соответствует максимальному спину (насыщенный ферромагнетизм) в следующих случаях: 1) свободной границы, 2) четного числа частиц по каждому направлению, 3) положительной энергии перескока ($t > 0$). При этом энергия основного состояния является монотонно убывающей функцией S. Если все три условия не выполняются, основное состояние соответствует минимально возможному спину частиц, причем $E_0(S)$ возрастает с ростом S. Если число дырок

---

*E-mail: zam@niitp.mainet.msk.su

больше одной, основное состояние системы соответствует минимальному спину ($S = 0$ или $S = 1/2$) и энергия основного состояния является монотонно возрастающей функцией S. В статье Нагаока [3] простая кубическая (квадратная) решетка рассматривается только с периодическими граничными условиями и четным числом частиц по каждому направлению. Нагаока [3] приводит точное доказательство максимальности спина для энергии основного состояния в случае одной дырки. Содержание остальной части этой работы обычно интерпретируется следующим образом: при малой концентрации дырок для кубической решетки основное состояние имеет максимальный спин (состояние насыщенного ферромагнетизма) решетки для всех $U < U_{max}$. Согласно [3] предельное значение U_{max} уменьшается при увеличении концентрации дырок. Фактически сам Нагаока формулировал свой результат несколько иначе: для простой кубической решетки при одной дырке и $U = \infty$ основное состояние соответствует максимальному спину; при конечных U и числе дырок n ферромагнитное состояние с максимальным полным спином не является основным, если

$$\alpha n/N < t/U,$$

где N — число узлов в решетке, α — численный параметр порядка единицы. Этот результат получен Нагаока в газовом приближении при условии малой, но макроскопической концентрации дырок n/N. Формально случай двух дырок в [3] не рассматривался.

В настоящей работе для периодической двумерной решетки с четным числом узлов по каждому направлению найдена оценка сверху для разности

$$\Delta = E_0(S_{max} - 1) - E_0(S_{max})$$

энергии основного состояния со спином, отличающимся от максимального на единицу, и энергии нагаоковского состояния. Оценка получена вариационным методом. Рассчитывалась величина

$$\tilde{\Delta} = \frac{\langle \Psi(\hat{H} - E_0(S_{max}))\Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle}.$$

Приведен явный вид пробной функции, для которой $\tilde{\Delta} < 0$.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Пусть имеется прямоугольная решетка $N_x \times N_y$. Обозначим через $N = N_x N_y$ число узлов, через $\hat{a}^+$ ($\hat{a}$) — оператор рождения (уничтожения) в i-ом узле частицы со спином вверх, через $\hat{b}_i^+$ ($\hat{b}_i$) — оператор рождения (уничтожения) в i-ом узле частицы со спином вниз. Примем, что система обладает трансляционной инвариантностью, и рассмотрим состояния с заданным квазиимпульсом $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_x, \alpha_y)$:

$$\alpha_x = \frac{2\pi}{N_x} i, \quad i = 0, 1, \ldots, N_x - 1, \quad \alpha_y = \frac{2\pi}{N_y} i, \quad i = 0, 1, \ldots, N_y - 1.$$

Для таких состояний может быть указан полный набор:

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{N}} \left(1 + \exp(i\alpha_x)\hat{K}_x + \exp(2i\alpha_x)\hat{K}_x^2 + \ldots + \exp(iN_{x-1}\alpha_x)\hat{K}_x^{N_x-1}\right) \times$$
$$\times \left(1 + \exp(i\alpha_y)\hat{K}_y + \exp(2i\alpha_y)\hat{K}_y^2 + \ldots + \exp(iN_{y-1}\alpha_y)\hat{K}_y^{N_y-1}\right) \hat{a}_i \hat{a}_j \Phi_0, \qquad (1)$$

где $\hat{K}_x$ ($\hat{K}_y$) — оператор трансляционного сдвига на один узел вдоль x (y), $\Phi_0 = \hat{b}_1^+ \hat{a}_2^+ \ldots \hat{a}_N^+ |\,\rangle$, $|\,\rangle$ — пустое состояние. Функция Φ_{ij} представляет собой трансляционно-инвариантное состояние с фиксированными расстояниями между перевернутым спином и каждой дыркой (равными расстояниям между первым и i-ым или j-ым узлами соответственно). Операторы трансляционного сдвига $\hat{K}_x$ ($\hat{K}_y$) определены следующим образом

$$\hat{K}_x \Phi = \exp(-i\alpha_x)\Phi, \quad \hat{K}_y \Phi = \exp(-i\alpha_y)\Phi.$$

Функции Φ_{ij} удовлетворяют следующим условиям нормировки:

$$\langle \Phi_{ij}, \Phi_{lm} \rangle = \delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl}. \tag{2}$$

В качестве базовых функций примем

$$\Omega_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} = \frac{1}{M} \sum_{i,j} \Phi_{ij} \exp(i\mathbf{k}_1\mathbf{r}_i) \exp(i\mathbf{k}_2\mathbf{r}_j), \tag{3}$$

причем набор $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ совпадает с набором квазиимпульсов $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_x, \alpha_y)$, исключая случай $k_x = k_y = 0$. Вектор $\mathbf{k}$ можно трактовать как импульс дырки в системе, в которой перевернутый спин покоится.

Очевидно, функции $\Omega_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}$ антисимметричны по индексам $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$:

$$\Omega_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} = -\Omega_{\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_1}. \tag{4}$$

Таким образом, выполняется очевидное требование: при данном квазиимпульсе $\boldsymbol{\alpha}$ имеем $(N-1)(N-2)/2$ независимых функций $\Omega_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}$.

Отметим полезные соотношения:

$$\sum_{\mathbf{k}_1} \Omega_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} = -\frac{1}{N} \sum_{i,j} \Phi_{ij} \exp(i\mathbf{k}_2\mathbf{r}_j) \tag{5}$$

и, аналогично,

$$\sum_{\mathbf{k}_2} \Omega_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} = -\frac{1}{N} \sum_{i,j} \Phi_{ij} \exp(i\mathbf{k}_1\mathbf{r}_j), \tag{5a}$$

где сумма по $\mathbf{k}$ берется по указанным $N-1$ величинам.

Функции Ω_{ij} удовлетворяют следующим условиям нормировки:

$$\langle \Omega_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}, \Omega_{\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2} \rangle = \left(\delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{p}_1}\delta_{\mathbf{k}_2,\mathbf{p}_2} - \delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{p}_2}\delta_{\mathbf{k}_2,\mathbf{p}_1}\right) - \frac{1}{N}\left(\delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{p}_1} + \delta_{\mathbf{k}_2,\mathbf{p}_2} - \delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{p}_2} - \delta_{\mathbf{k}_2,\mathbf{p}_1}\right). \tag{6}$$

Кроме того,

$$\langle \Omega_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}, \Phi_{\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2} \rangle = \frac{1}{N}\left(\exp\left(-i\mathbf{k}_1\mathbf{r}_1 - i\mathbf{k}_2\mathbf{r}_2\right) - \exp\left(-i\mathbf{k}_1\mathbf{r}_2 - i\mathbf{k}_2\mathbf{r}_1\right)\right). \tag{7}$$

Таким образом, функции Φ_{ij} выражаются через $\Omega_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}$ следующим образом:

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \Omega_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \left(\exp(-i\mathbf{k}_1\mathbf{r}_i) - 1\right)\left(\exp(-i\mathbf{k}_2\mathbf{r}_j) - 1\right). \tag{8}$$

Энергетический спектр E определяется решением уравнения Шредингера

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \tag{9}$$

где $\hat{H}$ — гамильтониан Хаббарда при $U = \infty$:

$$\hat{H} = t\sum_{i,j}{}' \left[\left(\hat{a}_i^+\hat{a}_j+\hat{a}_j^+\hat{a}_i\right)\left(1-\hat{b}_i^+\hat{b}_i\right)\left(1-\hat{b}_j^+\hat{b}_j\right) + \left(\hat{b}_i^+\hat{b}_j+\hat{b}_j^+\hat{b}_i\right)\left(1-\hat{a}_i^+\hat{a}_i\right)\left(1-\hat{a}_j^+\hat{a}_j\right)\right] \tag{10}$$

или

$$\hat{H} = t\sum_{i,j,\sigma} \hat{X}_i^{\sigma 0}\hat{X}_j^{0\sigma}, \tag{10a}$$

где $\hat{X}_i^{\sigma 0}$ $(\hat{X}_i^{0\sigma})$ — операторы Хаббарда. Суммирование в (10), (10a) проводится по ближайшим соседям. Далее в качестве энергетической единицы принята величина t, т. е. в (10) считаем $t = 1$.

Волновую функцию Ψ представим в виде разложения по набору $\Omega_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}$:

$$\Psi = \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} c_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}\Omega_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}. \tag{11}$$

3. ВАРИАЦИОННЫЕ ОЦЕНКИ

При использовании пробных волновых функций в виде (11) более удобно получить оценку для максимального собственного значения гамильтониана (10).

Ввиду периодичности решетки и четности числа узлов по данному направлению при замене $\hat{a}_i^+ \leftrightarrow \hat{a}_i^+(-1)^i$, $\hat{a}_i \leftrightarrow \hat{a}_i(-1)^i$ и соответственно, $\hat{b}_i^+ \leftrightarrow \hat{b}_i^+(-1)^i$, $\hat{b}_i \leftrightarrow \hat{b}_i(-1)^i$ гамильтониан системы меняет знак: $\hat{H} \leftrightarrow -\hat{H}$. Это значит, что энергетический спектр E не зависит от знака t. Поэтому из доказательства, что максимальное собственное значение E_{max} больше некоторого Λ, $E_{max} > \Lambda$, автоматически вытекает $E_{min} < -\Lambda$.

Рассмотрим пробные волновые функции, для которых $c_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}$ отличны от нуля, только если один из векторов $\mathbf{k}_1$ или $\mathbf{k}_2$ равен $\mathbf{p}_0 = (p_x, p_y) = (\pi, \pi)$, а другой равен любому из четырех возможных векторов:

$$\mathbf{p}_1 = \left(\pi, \pi+\frac{2\pi}{L}\right), \quad \mathbf{p}_2 = \left(\pi, \pi-\frac{2\pi}{L}\right), \quad \mathbf{p}_3 = \left(\pi-\frac{2\pi}{L}, \pi\right), \quad \mathbf{p}_4 = \left(\pi+\frac{2\pi}{L}, \pi\right), \tag{12}$$

где $L = \sqrt{N}$.

Векторы $\mathbf{p}_i$ подобраны так, чтобы для всех $\mathbf{p}_i$ энергия двух свободных квазичастиц была бы равна максимальной энергии состояний $N-2$ частиц со спином $S = S_{max}$:

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_{\mathbf{p}_0,\mathbf{p}_i} = 8\left(1 + \frac{\cos(2\pi/L) - 1}{4}\right) \approx 8\left(1 - \frac{\pi^2}{2N}\right). \tag{13}$$

Будем считать пробную волновую функцию симметричной относительно замены $y \leftrightarrow -y$ при условии $c_{\mathbf{p}_4,\mathbf{p}_0} = 0$, поэтому отличными от нуля коэффициентами $c_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}$ будут

$$\begin{gathered} c_{\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_0} = \gamma, \quad c_{\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_0} = \gamma, \quad c_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_0} = 2\delta, \quad c_{\mathbf{p}_4,\mathbf{p}_0} = 0, \\ c_{\mathbf{p}_0,\mathbf{p}_1} = -\gamma, \quad c_{\mathbf{p}_0,\mathbf{p}_2} = -\gamma, \quad c_{\mathbf{p}_0,\mathbf{p}_3} = -2\delta, \quad c_{\mathbf{p}_0,\mathbf{p}_4} = 0. \end{gathered} \tag{14}$$

Коэффициенты γ и δ будем рассматривать как вариационные параметры.

Значение $\tilde{\Delta} = \langle\Psi, (\hat{H}-E_0(S_{max}))\Psi\rangle/\langle\Psi,\Psi\rangle$ согласно выражению (П.16) Приложения вычисляется через величины $f_i(\mathbf{p})$. Простой расчет дает

$$\begin{aligned}
&f_1(\mathbf{p}_1) = c_{\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_0} = \gamma, \quad f_1(\mathbf{p}_2) = c_{\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_0} = \gamma, \quad f_1(\mathbf{p}_3) = c_{\mathbf{p}_3,\mathbf{p}_0} = 2\delta, \quad f_1(\mathbf{p}_4) = c_{\mathbf{p}_4,\mathbf{p}_0} = 0,\\
&f_1(\mathbf{p}_0) = -2\gamma - 2\delta, \quad f_2(\mathbf{p}_1) = c_{\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_0}\cos p_{0x} = -\gamma, \quad f_2(\mathbf{p}_2) = -\gamma, \quad f_2(\mathbf{p}_3) = -2\delta,\\
&f_2(\mathbf{p}_4) = 0, \quad f_2(\mathbf{p}_0) = 2(\gamma+\delta)\left(1 - \delta\frac{1-\cos(2\pi/L)}{\gamma+\delta}\right),\\
&f_3(\mathbf{p}_1) = f_3(\mathbf{p}_2) = f_3(\mathbf{p}_3) = f_3(\mathbf{p}_4) = 0, \quad f_3(\mathbf{p}_0) = 2\delta\sin(2\pi/L),\\
&f_4(\mathbf{p}_1) = c_{\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_0}\cos p_{0y} = -\gamma, \quad f_4(\mathbf{p}_2) = -\gamma, \quad f_4(\mathbf{p}_3) = -2\delta, \quad f_4(\mathbf{p}_4) = 0,\\
&f_4(\mathbf{p}_0) = 2(\gamma+\delta)\left(1 - \gamma\frac{1-\gamma\cos(2\pi/L)}{\gamma+\delta}\right),\\
&f_5(\mathbf{p}_1) = f_5(\mathbf{p}_2) = f_5(\mathbf{p}_3) = f_5(\mathbf{p}_4) = 0, \quad f_5(\mathbf{p}_0) = 0.
\end{aligned} \tag{15}$$

Подставляя (15) в (П.9), получим

$$|\Psi|^2 = 2\sum |c_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}|^2 - \frac{8}{N}\left(|\gamma|^2 + |\delta|^2 + 2|\gamma+\delta|^2\right). \tag{16}$$

Вычислим значение $\Delta = X - \varepsilon_0|\Psi|^2$. Используя (П.9) и (П.10), для величины Δ найдем

$$\begin{aligned}
\Delta = &\frac{8\varepsilon_0}{N}\left(|\gamma|^2 + |\delta|^2 + 2|\gamma+\delta|^2\right) + \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}(\cos k_{1x} + \cos k_{1y})\,|f_1(\mathbf{k}_1)|^2 +\\
&+ \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1}\left\{f_1(\mathbf{k}_1)\left[f_2^*(\mathbf{k}_1) + f_4^*(\mathbf{k}_1)\right] + f_1^*(\mathbf{k}_1)\left[f_2(\mathbf{k}_1) + f_4(\mathbf{k}_1)\right]\right\} -\\
&- \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1}|f_2(\mathbf{k}_1)|^2\cos(k_{1x}-\alpha_x) + \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1}|f_3(\mathbf{k}_1)|^2\cos(k_{1x}-\alpha_x) +\\
&+ \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1}\left[f_2^*(\mathbf{k}_1)f_3(\mathbf{k}_1) + f_3^*(\mathbf{k}_1)f_2(\mathbf{k}_1)\right]\sin(k_{1x}-\alpha_x) - \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1}|f_4(\mathbf{k}_1)|^2\cos(k_{1y}-\alpha_y) +\\
&+ \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1}\left[f_4^*(\mathbf{k}_1)f_5(\mathbf{k}_1) + f_5^*(\mathbf{k}_1)f_4(\mathbf{k}_1)\right]\sin(k_{1y}-\alpha_y) + \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1}|f_5(\mathbf{k}_1)|^2\cos(k_{1y}-\alpha_y).
\end{aligned} \tag{17}$$

Вычисляя суммы по векторам $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$ в выражении (17), найдем ($\alpha = 2\pi/L$)

$$\begin{aligned}
r_1 &= \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}(\cos k_{1x} + \cos k_{1y})\,|f_1(\mathbf{k}_1)|^2 =\\
&= -\frac{32}{N}\left(1 - \frac{1-\cos(2\pi/L)}{2}\right)\left(|\gamma|^2 + |\delta|^2\right) - \frac{64}{N}|\gamma+\delta|^2,
\end{aligned} \tag{18}$$

$$\begin{aligned}
r_2 &= \frac{16}{N}\sum_{\mathbf{k}_1} f_1(\mathbf{k}_1)\left[f_2^*(\mathbf{k}_1) + f_4^*(\mathbf{k}_1)\right] =\\
&= -\frac{64}{N}\left(|\gamma|^2 + |\delta|^2\right) - \frac{128}{N}|\gamma+\delta|^2\left(1 - \frac{1-\cos(2\pi/L)}{2}\right),
\end{aligned} \tag{19}$$

$$r_3 = -\frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1} |f_2(\mathbf{k}_1)|^2 \left[\cos(k_{1x}-\alpha_x) + \cos(k_{1y}-\alpha_y)\right] = \frac{32}{N}\left(|\gamma|^2 + |\delta|^2\right) +$$
$$+\frac{64}{N}|\gamma+\delta|^2 - \frac{8}{N}|\gamma|^2\left[2-\cos\left(\frac{2\pi}{L}-\alpha_y\right) + 2 - 2\cos\alpha_x - \cos\left(\frac{2\pi}{L}+\alpha_x\right)\right] -$$
$$-\frac{8}{N}|\delta|^2\left[2-\cos\alpha_y - \cos\left(\frac{2\pi}{L}+\alpha_x\right)\right] +$$
$$+\frac{32}{N}|\gamma+\delta|^2(\cos\alpha_x + \cos\alpha_y - 2), \tag{20}$$

$$r_4 = \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1}\left[f_2^*(\mathbf{k}_1)f_3(\mathbf{k}_1) + f_3^*(\mathbf{k}_1)f_2(\mathbf{k}_1)\right]\left[\sin(k_{1x}-\alpha_x) + \sin(k_{1y}-\alpha_y)\right] =$$
$$= \frac{32}{N}(\gamma+\delta)\delta\left(1 - \delta\frac{1-\cos(2\pi/L)}{\gamma+\delta}\right)\left[\sin\alpha_x + \sin\alpha_y\right]\sin\frac{2\pi}{L}, \tag{21}$$

$$r_5 = \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1}|f_3(\mathbf{k}_1)|^2\cos(k_{1x}-\alpha_x) + \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1}|f_5(\mathbf{k}_1)|^2\cos(k_{1y}-\alpha_y) =$$
$$= -\frac{16}{N}(\gamma+\delta)\delta\sin^2\frac{2\pi}{L}\cos\alpha_x. \tag{22}$$

В итоге получим

$$\Delta = \frac{64}{N}(\gamma+\delta)\delta\alpha_x\frac{2\pi}{L} - \frac{16}{N}|\gamma+\delta|^2(\alpha_x^2+\alpha_y^2) -$$
$$-\frac{4|\gamma|^2}{N}\left[\alpha_x^2 + \left(\frac{2\pi}{L}-\alpha_x\right)^2 + \left(\frac{2\pi}{L}-\alpha_y\right)^2\right] -$$
$$-\frac{16|\delta|^2}{N}\left[\alpha_y^2 + \alpha^2 + \left(\frac{2\pi}{L}+\alpha_x\right)^2 + \left(\frac{2\pi}{L}+\alpha_y\right)^2\right]. \tag{23}$$

Отметим, что при $\gamma = -(2/15)\delta$, $\alpha_x = 2\alpha$, $\alpha_y = 0$ величина Δ равна

$$\tilde{\Delta} = \frac{128\pi^2}{15N^2}|\delta|^2. \tag{24}$$

Поэтому максимальное значение энергии больше ε_0 на величину, большую

$$\Delta\varepsilon = \frac{128\pi^2|\alpha|^2}{15N^2\langle\Psi\Psi\rangle} \geq \frac{0.4\pi^2}{N^2}. \tag{25}$$

Это значит, что существует энергетический уровень E^+ для системы с двумя дырками такой, что

$$E^+ \geq \varepsilon_0 + \frac{0.4\pi^2}{N^2}. \tag{26}$$

Вследствие отмеченной симметричности энергетического спектра по отношению к замене знака t из (26) следует, что существует и энергетический уровень E^- для системы с двумя дырками такой, что

$$E^- \leq -\varepsilon_0 - \frac{0.4\pi^2}{N^2}. \tag{27}$$

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Из неравенства (27) следует, что основное состояние системы с двумя дырками соответствует полному спину частиц S, меньшему максимально возможного. В данной работе в качестве пробных функций выбраны функции с $S = S_{max} - 1$. Даже в этом случае основное состояние ниже нагаоковского. Для состояний с меньшими S эта оценка, возможно, может быть усилена.

Результаты данной работы показывают, что состояние насыщенного ферромагнетизма не является основным для системы с двумя дырками.

Этот вывод ни в коей мере не противоречит результатам работы Нагаока [3]. В этой связи необходимо подчеркнуть, что Нагоака доказал, что основное состояние системы при $U = \infty$ и одной дырке, соответствующее насыщенному ферромагнетизму, при большем числе дырок и при $U < U_0$ отвечает состоянию с меньшими S. Таким образом, в статье [3] доказано отсутствие насыщенного ферромагнетизма в указанном случае. При доказательстве Нагаока использовал предположение о структуре волновой функции, не обязательно справедливое в случае, когда для системы с максимальным спином и заданным полным значением проекции спина основное состояние вырождено.

Таким образом, в статье [3] приведено достаточное ($U < U_0$), но не необходимое условие отсутствия насыщенного ферромагнетизма. В статье Нагаока ищется волновая функция вполне определенного вида при условии невырожденности основного состояния для системы с максимальным спином. В случае двух дырок основное состояние для системы с максимальным спином вырождено, поэтому волновая функция основного состояния не может совпадать с найденной Нагаока. Это относится как к двумерному, так и к трехмерному случаю. Использованную в данной статье пробную функцию можно получить как решение секулярного уравнения для функции нулевого приближения в разложении по малой плотности (в данном случае по $1/N$).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Для расчета величины

$$\Delta = \frac{\langle \Psi, \hat{H}\Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} \tag{П.1}$$

найдем выражения для нормировки $\langle \Psi, \Psi \rangle$ и $X = \langle \Psi, \hat{H}\Psi \rangle$ через коэффициенты $c_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}$ в разложении волновой функции (11).

Учитывая (6) и (7), для нормировки волновой функции $\langle \Psi, \Psi \rangle$ получим

$$\langle \Psi, \Psi \rangle = 2\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} |c_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}|^2 - \frac{4}{N}\sum_{\mathbf{k}_1} \left| \sum_{\mathbf{k}_p} c_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_p} \right|^2 . \tag{П.2}$$

Обозначим через

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2(\cos k_x + \cos k_y), \tag{П.3}$$

$$f_1(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}_1} c_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1}, \tag{П.4}$$

$$f_2(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \cos p_x, \tag{П.5}$$

$$f_4(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \cos p_y, \tag{П.6}$$

$$f_3(\mathbf{k}_1) = \sum_{\mathbf{k}_2} c_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \sin k_{2x}, \tag{П.7}$$

$$f_5(\mathbf{k}_1) = \sum_{\mathbf{k}_2} c_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \sin k_{2y}. \tag{П.8}$$

Тогда имеем

$$\langle \Psi, \Psi \rangle = 2\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} |c_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}|^2 - \frac{4}{N}\sum_{\mathbf{k}_1} |f_1(\mathbf{k}_1)|^2. \tag{П.9}$$

Аналогично для величины $X = \langle \Psi, \hat{H}\Psi \rangle$ получим

$$\begin{aligned} X = {} & 2\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \varepsilon_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} |c_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}|^2 + \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} (\cos k_{1x} + \cos k_{1y})\, |f_1(\mathbf{k}_1)|^2 + \\ & + \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1} \left\{ f_1(\mathbf{k}_1) \left[f_2^*(\mathbf{k}_1) + f_4^*(\mathbf{k}_1) \right] + f_1^*(\mathbf{k}_1) \left[f_2(\mathbf{k}_1) + f_4(\mathbf{k}_1) \right] \right\} - \\ & - \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1} |f_2(\mathbf{k}_1)|^2 \cos(k_{1x} - \alpha_x) + \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1} \left[f_2^*(\mathbf{k}_1) f_3(\mathbf{k}_1) + f_3^*(\mathbf{k})_1 f_2(\mathbf{k}_1) \right] \sin(k_{1x} - \alpha_x) + \\ & + \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1} |f_3(\mathbf{k}_1)|^2 \cos(k_{1x} - \alpha_x) - \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1} |f_4(\mathbf{k}_1)|^2 \cos(k_{1y} - \alpha_y) + \\ & + \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1} |f_5(\mathbf{k}_1)|^2 \cos(k_{1y} - \alpha_y) + \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1} \left[f_4^*(\mathbf{k}_1) f_5(\mathbf{k}_1) + f_5(\mathbf{k}_1) f_4(\mathbf{k}_1) \right] \sin(k_{1y} - \alpha_y). \end{aligned} \tag{П.10}$$

Отметим случай, когда в разложении (11) волновой функции Ψ присутствуют только члены с импульсами дырок $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_2$, т. е.

$$c_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} = \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{p}_1}\delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{p}_2} - \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{p}_2}\delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{p}_1}. \tag{П.11}$$

При этом

$$\begin{aligned} & f_1(\mathbf{p}_1) = 1, \quad f_1(\mathbf{p}_2) = -1, \quad f_2(\mathbf{p}_1) = \cos p_{2x}, \quad f_2(\mathbf{p}_2) = -\cos p_{1x}, \\ & f_4(\mathbf{p}_1) = \cos p_{2y}, \quad f_4(\mathbf{p}_2) = -\cos p_{1y}, \quad f_3(\mathbf{p}_1) = \sin p_{2x}, \quad f_3(\mathbf{p}_2) = -\sin p_{2x}, \\ & f_5(\mathbf{p}_1) = \sin p_{2y}, \quad f_5(\mathbf{p}_2) = -\sin p_{1y} \end{aligned} \tag{П.12}$$

и, следовательно,

$$\langle \Psi, \Psi \rangle = 4 - \frac{8}{N}, \tag{П.13}$$

$$X = -4\varepsilon_{p_1p_2} + \frac{8}{N}(\cos p_{1x} + \cos p_{1y} + \cos p_{2x} + \cos p_{2y}) +$$
$$+ \frac{16}{N}(\cos p_{1x} + \cos p_{2x} + \cos p_{1y} + \cos p_{2y}) -$$
$$- \frac{8}{N}\big(\cos(2p_{2x} + p_{1x} - \alpha_x) + \cos(2p_{1x} + p_{2x} - \alpha_x)\big) -$$
$$- \frac{8}{N}\big(\cos(2p_{2y} + p_{1y} - \alpha_y) + \cos(2p_{1y} + p_{2y} - \alpha_y)\big). \qquad (\Pi.14)$$

Если $p_{2x} + p_{1x} = \alpha_x$ и $p_{2y} + p_{1y} = \alpha_y$, что отвечает волновой функции состояний с $S = S_{max}$, то

$$X = 4\left(1 - \frac{2}{N}\right)\varepsilon_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2}.$$

С учетом (П.13) имеем

$$X = -(\varepsilon_{\mathbf{p}_1} + \varepsilon_{\mathbf{p}_2})\langle\Psi, \Psi\rangle,$$

что и следовало ожидать, поскольку в данном случае использована точная волновая функция с собственным значением гамильтониана $E = -(\varepsilon_{\mathbf{p}_1} + \varepsilon_{\mathbf{p}_2})$.

Отметим также следующий удобный факт. Пусть функции $c_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} = c(k_{1x}, k_{1y}, k_{2x}, k_{2y})$ имеют симметрию относительно замены $x \leftrightarrow y$. Тогда

$$\begin{aligned} f_1(k_{1x}, k_{1y}) &= \Lambda f_1(k_{1y}, k_{1x}), \\ f_2(k_{1x}, k_{1y}) &= \Lambda f_4(k_{1y}, k_{1x}), \\ f_3(k_{1x}, k_{1y}) &= \Lambda f_5(k_{1y}, k_{1x}), \end{aligned} \qquad (\Pi.15)$$

причем $\Lambda = \pm 1$.

Подставляя (П.15) в (П.10), получим

$$X = 2\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \varepsilon_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}|c_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}|^2 + \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}(\cos k_{1x} + \cos k_{1y})\,|f_1(\mathbf{k}_1)|^2 + \frac{16}{N} \times$$
$$\times \sum_{\mathbf{k}_1}\{f_1(\mathbf{k}_1)f_2^*(\mathbf{k}_1) + f_1^*(\mathbf{k}_1)f_2(\mathbf{k}_1)\} - \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1}|f_2(\mathbf{k}_1)|^2\left(\cos(k_{1x} - \alpha_x) + \cos(k_{1x} - \alpha_y)\right) +$$
$$+ \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1}\left[f_2^*(\mathbf{k}_1)f_3(\mathbf{k}_1) + f_3^*(\mathbf{k}_1)f_2(\mathbf{k}_1)\right]\left(\sin(k_{1x} - \alpha_x) + \sin(k_{1x} - \alpha_y)\right) +$$
$$+ \frac{8}{N}\sum_{\mathbf{k}_1}|f_3(\mathbf{k}_1)|^2\left(\cos(k_{1x} - \alpha_x) + \cos(k_{1x} - \alpha_y)\right). \qquad (\Pi.16)$$

Литература

1. Y. Takahashi, Progr. Theor. Jap. **41**, 228 (1972).
2. Р. О. Зайцев, Ю. В. Михайлова, ФНТ **17**, 999 (1991).
3. Y. Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 392 (1966).