1次元HUBBARD模型における 基底エネルギーとエネルギーギャップ

東大教養物理　斎藤基彦

§1. 序

1次元Hubbard模型の基底エネルギーとエネルギーギャップは Lieb とWu[1]によって厳密に解かれた。ハミルトニアンを

$$H = -\sum_i \sum_\sigma (c_{i\sigma} c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma} c_{i\sigma}) + U \sum c^{+}_{i\uparrow} c_{i\uparrow} c^{+}_{i\downarrow} c_{i\downarrow} \quad (U \geqq 0) \tag{1}$$

とすると，電子数Nが格子点の数 N_a に等しい時（ half-filled の場合），基底状態における1粒子当りのエネルギー E_g とエネルギーギャップ δ はそれぞれ

$$E_g(U) = -4 \int_0^\infty \frac{d\omega\, J_0(\omega) J_1(\omega)}{\omega(1+e^{\omega U/2})},$$

$$\delta(U) = U - 4 + 8 \int_0^\infty \frac{d\omega J_1(\omega)}{\omega(1+e^{\omega U/2})}$$

で与えられる。ここで $J_n(\omega)$ はn次の Bessel関数である。 E_g の解析性はTakahashi[2]によって調べられたが，そのU依存性は明らかにされなかった。最近になり， Ovchinnikov[3]が δ を，そして Misurkin と Ovchinnikov[4,5]が E_g のあらわな関数形を求めたが，その完全な表式を与えていない。また特に後者については，結果の一部が正しくないと思われるので，ここで詳しく議論したい

§2. エネルギーギャップ

まず積分表式

$$\frac{J_1(\omega)}{\omega} = \int_{-1}^{1} \frac{dt}{\pi}\, e^{i\omega t} (1-t^2)^{1/2}$$

に注意する。(3) の積分において　U ＞ 0 の場合は分母を

$$(1+e^{\omega U/2})^{-1} = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\omega U/2}$$

と展開する事により，またU＝0の場合はこの因数が $1/2$ になる事に注意して ω 積分を実行すると，

$$\delta = U + 8\int_{-1}^{1}\frac{dt}{\pi}(1-t^2)^{1/2}\ f(t;U) \tag{5}$$

ただし

$$f(t;U) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-)^{n+1}(nU/2)}{(nU/2)^2+t^2} \tag{6}$$

(6)の n和を実行するには公式

$$\sum_{n=1}^{\infty}(-)^{n+1}g(n) = \frac{i}{2}\ \frac{dz}{\sin \pi z}\ g(z) \tag{7}$$

に留意する。ここでCは実軸 $Z \geqq 1$ を反時計周りに $\infty + i0^+$ から $\infty - i0^+$ にむかう積分路である。この積分路は z平面の虚軸上を $i\infty$ から $-i\infty$ にむかう積分路に変更できるから，変数変換

$$z = iy$$

の後に

$$\delta = U + \frac{8}{U}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dy}{\mathrm{sh}(2\pi y/U)}\int_{-1}^{1}\frac{dt}{\pi}\ \frac{(1-t^2)^{1/2}}{t^2-y^2} \tag{8}$$

を得る。さらに

$$\int_{-1}^{1}\frac{dt}{\pi}\frac{(1-t^2)^{1/2}}{t^2-y^2} = \begin{cases}\sqrt{(y^2-1)/y^2}\ -1 & (y^2>1)\\ -1 & (y^2<1)\end{cases} \tag{9}$$

であるから，結局

$$\delta(U) = \frac{16}{U}\int_{1}^{\infty}\frac{dy}{\mathrm{sh}(2\pi y/U)}\ \sqrt{y^2-1} \tag{10}$$

を得る。この表式は Ovchinnikov によっても得られている。この式は変換変数

$$y = \mathrm{ch}\, t$$

を行ない，

$$\mathrm{csh}(2\pi y/U) = 2\sum e^{-2\pi y(2n+1)/U}$$

を用いる事により

$$\delta(U) = \frac{16}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{2n+1}K_1\left(\frac{2\pi}{U}(2n+1)\right) \tag{11}$$

の形にまとめる事ができる。ただし$K_1(x)$は1次の変形されたBessel関数である。特に$U \ll 1$の時はその漸近形を用いる事により

$$\delta(U) \simeq \frac{8}{\pi}\sqrt{U}\,e^{-2\pi/U} \qquad (U \ll 1) \tag{12}$$

となる。この結果は Hartree-Fock 近似の結果 [7]

$$\delta_{HF} \simeq 32\,e^{-2\pi/U}$$

と定性的に異なるので注目に値する。$U \gg 1$の時は(11)は不便だからあらためて§4で議論する。

§ 3. 基底エネルギー

積分表示

$$J_0(\omega)J_1(\omega) = \frac{2}{\pi}\int^{\frac{\pi}{2}} d\theta\cos\theta\, J_1(2\omega\cos\theta) \tag{13}$$

を(2)に代入して，$2\omega\cos\theta = \nu$なる変数変換をすると，(3)と同型の積分が得られるから

$$E_g = -\frac{4}{\pi} + \frac{U}{4} - L \tag{14}$$

$$L = \int_0^{\pi/2}\frac{d\theta}{\pi}\cos\theta\,\delta\left(\frac{U}{2\cos\theta}\right) \tag{15}$$

となる。Lを計算するために(10)を用い，$\cos\theta = z$，$y\cos\theta = x$とおき，zとxの積分領域を適当に変更する事により

$$L = L_1 + L_2 \tag{16}$$

ただし

$$L_1 = \frac{32}{\pi U}\int_0^1 \frac{dx\,x^2}{\mathrm{sh}(4\pi x/U)}\int_0^1 dz\sqrt{\frac{1-z^2}{1-x^2 z^2}} \tag{17}$$

$$L_2 = \frac{32}{\pi U}\int_1^{\infty}\frac{dx}{\mathrm{sh}(4\pi x/U)}\int_0^1 dz\sqrt{\frac{x^2-z^2}{1-z^2}} \tag{18}$$

が導びかれる。(17)と(18)に現われる z 積分は楕円積分で表わす事ができて，それぞれ

$$\{(x^2-1)K(x^2)+E(x^2)\}/x^2, \qquad E(1/x^2)$$

である。KとEの定義は参考文献(6)に依る。この節ではこれから簡単のために

$$u=U/4\pi \tag{19}$$

なる記法を用いる事にする。上記の楕円積分を x^2 の巾級数で書き，再び csh (x/u) の展開を用いて，x 積分を実行すれば，(17)，(18)はそれぞれ

$$L_1=\frac{8}{\pi^2 u}\int_0^1 \frac{dx\,x^2}{sh(x/U)}\sum_{m=0}^{\infty} b_m x^{2m}$$

$$=\frac{16u^2}{\pi^2}\sum_{m=0}^{\infty} b_m \Gamma(2m+3)\tilde{\zeta}(2m+3)u^{2m}$$

$$-\frac{16}{\pi^2}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{p=0}^{2m+2} b_m \frac{\Gamma(2m+3)}{\Gamma(2m+3-p)}u^p\tilde{\phi}_{p+1}$$

$$L_2=\frac{8}{\pi^2 u}\int_1^{\infty}\frac{dx\,x}{sh(x/u)}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{c_m}{x^{2m}}$$

$$=\frac{8}{\pi}(\tilde{\phi}_1+u\tilde{\phi}_2)$$

$$+\frac{16}{\pi^2 u}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty} c_{m+1}\left(\frac{2n+1}{u}\right)^{2m}\Gamma\left(-2m,\frac{2n+1}{u}\right) \tag{21}$$

となる。ここで

$$b_m=\frac{\pi}{2^{4m+2}}\frac{\Gamma^2(2m+1)}{\Gamma^4(m+1)}\frac{1}{m+1}, \tag{22}$$

$$c_m=\frac{\pi}{2^{4m+1}}\frac{\Gamma^2(2m+1)}{\Gamma^4(m+1)}\frac{1}{1-2m}, \tag{23}$$

また $\tilde{\phi}_q\equiv\tilde{\phi}_q(e^{-t/u})$ で，$\tilde{\phi}_q(x)$は Appellの関数[6)]

$$\phi_q(x)=\sum_{n=0}^{\infty}x^n/n^q$$

と関連した関数で

$$\widetilde{\phi}_q(x) = \sum_{n=1}^{\infty} x^{2n+1}/(2n+1)^q$$
$$= \phi_q(x) - 2^{-q}\,\phi_q(x^2) \quad (24)$$

であり，$\widetilde{\zeta}(q)$ は $\widetilde{\phi}_q(1)$ またはゼータ関数 $\zeta(q)$ と次のように結びついている：

$$\widetilde{\zeta}(q) = \widetilde{\phi}_q(1) = (1-2^{-q})\,\zeta(q). \quad (25)$$

更に $\Gamma(q, x)$ は第2積の変形されたガンマ関数[6]で，特に q が負の整数の時は

$$\Gamma(-2m,\ x) = \frac{x^{-2m}\,e^{-x}}{\Gamma(2m+1)} \int_0^{\infty} \frac{e^{-t}\,t^{2m}}{x+t}\,dt$$
$$= \frac{\Gamma(0,\ x)}{\Gamma(2m+1)} + e^{-x} \sum_{p=1}^{2m} \frac{\Gamma(p)}{\Gamma(2m+1)} \frac{(-)^{2m+p}}{x^p} \quad (26)$$

となる事が知れている。ここで $\Gamma(0, x)$ は通常の積分指数関数である。$\Gamma(0, x)$ の漸近展開と (26)を用いて (21)に代入すれば，

$$L_2 = \frac{8}{\pi}(\widetilde{\phi}_1 + u\,\widetilde{\phi}_2) + \frac{16}{\pi^2} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} c_{m+1} \frac{\Gamma(2m+1+p)}{\Gamma(2m+1)} (-)^p u^{2m+p}\,\widetilde{\phi}_{2m+p+1} \quad (27)$$

を得る事ができる。基底エネルギーは従って u の漸近級数で表わされた事になる。$E_g(U)$ は $U = \pm 2i/n$ (n は整数) で対数的に発散する事が知れているが，[2] それは例えば

$$\widetilde{\phi}_1 = \frac{1}{2}\ \ln\left(\mathrm{cth}\ \frac{1}{2u}\right)$$

となる事が明らかである。

特に $U \ll 1$ の時は $\widetilde{\phi}_q \simeq e^{-1/u}$ であるから

$$L \simeq \frac{16}{\pi^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\pi\Gamma^2(2m+1)\,\widetilde{\zeta}(2m+3)\,u^{2m}}{2^{4m+2}\,\Gamma^4(m+1)(m+1)} + \left(\frac{6}{\pi} - \frac{16}{\pi^2}\right)e^{-1/u} + \theta(e^{-1/u}) \quad (28)$$

となる。この結果の第2項の形は参考文献 (5) の形と異なる。この事はもう一度§5 でふれる。

§ 4， $1/U$ 展開

まずエネルギーギャップについて調べよう。表式 (6) を $1/U$ で展開して (5) に代入し

t 積分を実行すれば

$$\delta(U)=U+\frac{\ln 2}{U}-\pi\sum_{m=0}^{\infty}(-)^{m+1}\frac{\tilde{\zeta}(2m+1)\Gamma(2m+1)}{\Gamma(m+1)\Gamma(m+2)}\frac{1}{U^{2m+1}} \tag{29}$$

を得る。

基底エネルギーは (29) を (15) に代入して計算する事ができて，結果は

$$E_g(U)=-\frac{4}{\pi}-\frac{\ln 2}{2U}+\frac{\pi}{4}\sum_{m=1}^{\infty}(-)^{m+1}\frac{\tilde{\zeta}(2m+1)\Gamma(2m+1)\Gamma(2m+3)}{\Gamma(m+1)\Gamma^3(m+2)U^{2m+1}} \tag{30}$$

となる。

§5. E_g と δ の上下限

$U \ll 1$ の時は (11), (20), (27) の結果は漸近転開になっており十分使いやすいものではない。ここで $U \ll 1$ で便利なそれぞれの上限下限を求めておこう。エネルギーギャップの上下限は次のようにして得られる。まず (10)に Schwartz の不等式を適用すると，上限は

$$\delta<\delta^M=\frac{16}{U}\left[\int_1^{\infty}\frac{dy}{\mathrm{sh}(2\pi y/U)}\int_1^{\infty}dy\,\frac{y^2-1}{\mathrm{sh}(2\pi y/U)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$=\frac{16}{\pi}\left(\frac{U}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\tilde{\varphi}_1\left(\tilde{\varphi}_2+\frac{U}{2\pi}\tilde{\varphi}_3\right)\right]^{\frac{1}{2}} \tag{31}$$

で与えられる。下限は

$$\sqrt{y^2-1}>\sqrt{2(y-1)}$$

に注意すれば

$$\delta>\delta^m=\frac{8}{\pi}\sqrt{U}\,\tilde{\varphi}_{3/2} \tag{32}$$

となる。

次に基底エネルギーの上下限を考えよう。L_1 については (17) で積分範囲を考慮して，

$$1\leqslant\frac{1}{\sqrt{1-x^2z^2}}\leqslant\frac{1}{\sqrt{1-z^2}}$$

が成り立つ。かくして z積分は1と $\pi/4$ の上限と下限を与える。 x積分も容易に実行できる。次に L_2 については (18)で

$$\sqrt{1-z^2} \ll \sqrt{x^2-z^2} \ll x$$

を用いる。こうして最終結果は $L^m < L < L^M$ として，

$$L^M = \frac{2U^2}{\pi^4}\tilde{\zeta}(3) + \left(\frac{8}{\pi} - \frac{16}{\pi^2}\right)\left\{\tilde{\phi}_1 + 2\frac{U}{4\pi}\tilde{\phi}_2 + 2\left(\frac{U}{4\pi}\right)^2\tilde{\phi}_3\right\} \quad (33)$$

$$L^m = \frac{U^2}{2\pi^3}\tilde{\zeta}(3) + \left(\frac{16}{\pi^2} - \frac{4}{\pi}\right)\tilde{\phi}_1 - \left(\frac{8}{\pi} - \frac{16}{\pi^2}\right)\frac{U}{4\pi}\tilde{\phi}_2 - \frac{8}{\pi}\left(\frac{U}{4\pi}\right)^2\tilde{\phi}_3 \quad (34)$$

を得る。この結果から (28)の第2項は $O(e^{-1/u})$ でなければ ならない事がいえる。

§6. 討　論

表式(2)，(3)を E_g，δ の数学的な 定義式と考えた時， $U \to -U$ の変換に 関して対称性がある。定義式に $U \to -U$ の 変換をほどこせば，視察により

$$E_g(U) + E_g(-U) = -8/\pi \quad (35)$$

$$\delta(U) + \delta(-U) = 0 \quad (36)$$

が容易に得られる。§§ 2, 3 における計算は少し修正を受けるが最終的には勿論(35)，(36)を満たす事が確かめられる。実際 (11)，(20)，(27)の関数を代表的に $F(U)$ で表わせば， Uの正負を考慮したものは $\mathrm{sign}(U)F(|U|)$ で与えられる事が容易に確かめられる。(2)，(3)の 2階の微係数は $U=0$ で発散するが，その事は

$$\frac{d^2|U|}{dU^2} = 2U\frac{d}{dU}\delta(U) + 4\delta(U) \quad (37)$$

となる事に起因している。

参　考　文　献

1) E. H. Lieb and F. Y. Wu, Phys. Rev. Letters 20 (1968) 1445-8.

2) M. Takahashi, Prog. theor. Phys. 45 (1971) 756-60.

3) A. A. Ovchinnikov, ZhETF 57 (1969) 2137 --- Sov. Phys. 30 (1970) 1160-3.

4) I. A. Misurkin and A. A. Ovchinnikov, TMF 1 (1972) 125.

斎藤基彦

この論文は参考文献(5)に引用されているが著者は見ていない。

5) A. A. Ovchinnikov, I. I. Ukrainskii and G. Kventzel, Usp. Fiz. Nauk 108 (1972) 81-111 --- Sov. Phys. Uspekhi 15 (1973) 575-91.

6) M. Abramovitz and I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions Dover, New York)

森口繁一他, 数学公式集 III (岩波, 東京, 1968).

7) B. Johansson and K. -F. Berggren, Phys. Rev. 181 (1969) 855-62.