

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Wu¹⁾によって厳密に解かれた。ハミルトニアンを

$$H = - \sum_i \sum_{\sigma} (c_{i\sigma} c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma} c_{i\sigma}) + U \sum_i c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} \quad (1)$$

($U \geq 0$)

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Takahashi²⁾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、Ovchinnikov³⁾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

斎藤基彦

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

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，

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

ただし

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

(6) の n 和を実行するには公式

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

に留意する。ここで C は実軸 $Z \geq 1$ 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

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

を得る。さらに

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

であるから，結局

$$\delta(U) = \frac{16}{U} \int_1^{\infty} \frac{dy}{\text{sh}(2\pi y/U)} \sqrt{y^2 - 1} \quad (10)$$

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

$$y = \text{ch } t$$

を行ない，

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

を用いる事により

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

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

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

となる。この結果は Hartree-Fock 近似の結果⁷⁾

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

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

$$J_0(\omega) J_1(\omega) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\theta \cos \theta J_1(2\omega \cos \theta) \quad (13)$$

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

$$E_g = -\frac{4}{\pi} + \frac{U}{4} - L \quad (14)$$

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

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

$$L = L_1 + L_2 \quad (16)$$

ただし

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

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

斎藤基彦

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

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

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

$$u = U/4\pi \quad (19)$$

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 $\text{csh}(x/u)$ の展開を用いて、 x 積分を実行すれば、(17), (18)はそれぞれ

$$\begin{aligned} L_1 &= \frac{8}{\pi^2 u} \int_0^1 \frac{dx x^2}{\text{sh}(x/U)} \sum_{m=0}^{\infty} b_m x^{2m} \\ &= \frac{16 u^2}{\pi^2} \sum_{m=0}^{\infty} b_m \Gamma(2m+3) \tilde{\zeta}(2m+3) u^{2m} \\ &\quad - \frac{16}{\pi^2} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{2m+2} b_m \frac{\Gamma(2m+3)}{\Gamma(2m+3-p)} u^p \tilde{\phi}_{p+1} \\ L_2 &= \frac{8}{\pi^2 u} \int_1^{\infty} \frac{dx x}{\text{sh}(x/u)} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{c_m}{x^{2m}} \\ &= \frac{8}{\pi} (\tilde{\phi}_1 + u \tilde{\phi}_2) \\ &\quad + \frac{16}{\pi^2 u} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} c_{m+1} \left(\frac{2n+1}{u}\right)^{2m} \Gamma(-2m, \frac{2n+1}{u}) \end{aligned} \quad (21)$$

となる。ここで

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

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

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

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}_q(x) &= \sum_{n=1}^{\infty} x^{2n+1} / (2n+1)^q \\ &= \phi_q(x) - 2^{-q} \phi_q(x^2)\end{aligned}\quad (24)$$

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

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

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

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

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,

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

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

$$\tilde{\phi}_1 = \frac{1}{2} \ln \left(\coth \frac{1}{2u} \right)$$

となる事が明らかである。

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

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

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

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

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

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

となる。

§5. E_g と δ の上下限

$U \ll 1$ の時は (11), (20), (27) の結果は漸近展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

$$\begin{aligned} \delta < \delta^M &= \frac{16}{U} \left[\int_1^{\infty} \frac{dy}{\text{sh}(2\pi y/U)} \int_1^{\infty} dy \frac{y^2 - 1}{\text{sh}(2\pi y/U)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{16}{\pi} \left(\frac{U}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\tilde{\phi}_1 \left(\tilde{\phi}_2 + \frac{U}{2\pi} \tilde{\phi}_3 \right) \right]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (31)$$

で与えられる。下限は

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

に注意すれば

$$\delta > \delta^m = \frac{8}{\pi} \sqrt{U} \tilde{\phi}_{3/2} \quad (32)$$

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、

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

1 次元 HUBBARD 模型における
 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、

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

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

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

§ 6. 討 論

表式(2), (3)を E_g , δ の数学的な 定義式と考えた時, $U \rightarrow -U$ の変換に 関して対
 称性がある。定義式に $U \rightarrow -U$ 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 $\text{sign}(U) F(|U|)$ 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.