

Ограниченность энергии снизу в модели Лифшица

Аникин Евгений

1 октября 2017 г.

Гамильтониан модели Лифшица задаётся так:

$$H_{ij} = \begin{cases} te^{\frac{|r_i - r_j|}{a}} & \text{при } i \neq j \\ 0 & \text{при } i = j \end{cases} \quad (1)$$

Хочется доказать, что его спектр ограничен снизу значением $-t$. Это равносильно положительной определённости (в нестрогом смысле) матрицы

$$h_{ij} = e^{\frac{|r_i - r_j|}{a}} \quad (2)$$

Здесь уже диагональные элементы равны единице, а не нулю. Положительная определённость означает, что для любого набора y_i

$$\sum h_{ij} y_i^* y_j = \sum e^{\frac{|r_i - r_j|}{a}} y_i^* y_j \geq 0 \quad (3)$$

Воспользуемся разложением экспоненты в трёхмерном пространстве в интеграл Фурье:

$$e^{-\frac{|\vec{r}|}{a}} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{8\pi a^3 e^{i\vec{k}\vec{r}}}{(1 + (ka)^2)^2} \quad (4)$$

Это позволяет переписать $\sum h_{ij} y_i^* y_j$ в виде интеграла по k .

$$\sum h_{ij} y_i^* y_j = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{8\pi a^3}{(1 + (ka)^2)^2} \sum e^{i\vec{k}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} y_i^* y_j \quad (5)$$

Нетрудно видеть, что сумма в правой части — это квадрат модуля некоторого выражения. Получается

$$\sum h_{ij} y_i^* y_j = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{8\pi a^3}{(1 + (ka)^2)^2} \left| \sum e^{-i\vec{k}\vec{r}_i} y_i \right|^2 \quad (6)$$

Интеграл в правой части неотрицателен, поэтому $\sum h_{ij} y_i^* y_j$ тоже ≥ 0 . Это доказывает, что энергия в модели Лифшица всегда $\geq -t$. Более того, энергия может достигать $-t$ только в случае, когда все узлы расположены в одной точке. Иначе сумма экспонент обязательно будет где-то отлична от нуля, и интеграл будет строго положительен.

Заметим также, что рассуждение использует только тот факт, что интеграл Фурье от $\exp(-r/a)$ положителен. Значит, вместо экспонент можно использовать любые другие функции, обладающие этим свойством, например, $\exp(-r^2/a^2)$.