ИТОГИ НАУКИ И ТЕХНИКИ.
Современная математика и ее приложения.
Тематические обзоры.
Том 236 (2024). С. 31–48
DOI: 10.36535/2782-4438-2024-236-31-48

УДК 517.984

СТРУКТУРА СУЩЕСТВЕННОГО СПЕКТРА И ДИСКРЕТНЫЙ СПЕКТР ОПЕРАТОРА ЭНЕРГИИ ШЕСТИЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ В МОДЕЛИ ХАББАРДА. ЧЕТВЕРТОЕ ТРИПЛЕТНОЕ СОСТОЯНИЕ

© 2024 г. **С. М. ТАШПУЛАТОВ**

Аннотация. Рассматривается оператор энергии шестиэлектронных систем в модели Хаббарда и исследуются структура существенного спектра и дискретный спектр системы для четвертого триплетного состояния системы. Доказано, что в одномерном и двумерном случаях существенный спектр оператора шестиэлектронного четвертого триплета является объединением семи отрезков, а дискретный спектр системы содержит не более одного собственного значения. В трехмерном случае имеют место следующие ситуации: (а) существенный спектр оператора шестиэлектронного четвертого триплета является объединением семи отрезков, а дискретный спектр содержит не более одного собственного значения; (б) существенный спектр является объединением четырех отрезков, а дискретный спектр пуст; (в) существенный спектр является объединением двух отрезков, а дискретный спектр пуст; (г) существенный спектр состоит из единственного отрезка, а дискретный спектр пуст. Найдены условия, при которых реализуется каждая ситуация.

***Ключевые слова*:** модель Хаббарда, шестиэлектронная система, триплетное состояние, существенный спектр, дискретный спектр.

STRUCTURE OF THE ESSENTIAL SPECTRUM AND THE DISCRETE SPECTRUM OF THE ENERGY OPERATOR OF SIX-ELECTRON SYSTEMS IN THE HUBBARD MODEL. FOURTH TRIPLET STATE

© 2024 **S. M. TASHPULATOV**

Abstract. In this paper, we analyze the energy operator of six-electron systems within the framework of the Hubbard model and examine the structure of the essential spectrum and the discrete spectrum of the system in the fourth triplet state. We prove that in the one- and two-dimensional cases, the essential spectrum of the six-electron fourth triplet state operator is the union of seven segments, whereas the discrete spectrum contains at most one eigenvalue. In the three-dimensional case, the following situations can occur: (a) the essential spectrum of the operator is the union of seven segments and the discrete spectrum contains at most one eigenvalue; (b) the essential spectrum is the union of four segments and the discrete spectrum is empty; (c) the essential spectrum is the union of two segments and the discrete spectrum is empty; (d) the essential spectrum consists of a single segment and the discrete spectrum is empty. We found conditions under which each of these situations occurs.

***Keywords and phrases*:** Hubbard model, six-electron system, triplet state, essential spectrum, discrete spectra.

***AMS Subject Classification*:** 62M15, 46L60, 47L90

1. Введение. В 1963 г. почти одновременно и независимо появились три работы [10, 11, 15], 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.

Предложенная в [10, 11, 15] модель получила название модели Хаббарда в честь Дж. Хаббарда, внесшего фундаментальный вклад в изучение статистической механики этой системы, хотя локальная форма кулоновского взаимодействия впервые введена Андерсоном для примесной модели в металле [8].

Модель Хаббарда является приближением, которое используется в физике твердого тела для описания перехода между проводящим и диэлектрическим состояниями. Она представляет собой простейшую модель, описывающей 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 H 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.

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 проводит 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 изучаемых многоэлектронных моделей металла (см. [2, 3, 5, 9]). В обзоре [2] обобщены полученные результаты по модели Хаббарда; чем больший прогресс достигается в получении теоретических решений, тем яснее становится, что эта простая модель может демонстрировать поразительный набор фаз и режимов, многие из которых имеют четкие параллели с наблюдаемым поведением широкого спектра сложных материалов. Например, имеются убедительные доказательства того, что ферромагнетизм, различные формы антиферромагнетизма, нетрадиционная сверхпроводимость, волны плотности заряда, электронные жидкокристаллические фазы и топологические упорядоченные фазы (например «спиновые жидкости») встречаются в конкретных реализациях модели Хаббарда. Показано также, что положительные собственные значения в модели Хаббарда (соответствующие отталкивающим эффективным взаимодействиям) ослаблевают, а отрицательные растут. Различные собственные функции соответствуют, но не полностью определяются неприводимым представлением группы кристаллических точек в модели Хаббарда.

Получение точных результатов для спектра и волновых функций кристалла, описываемого моделью Хаббарда, представляет большой интерес.

В [4] изучались 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 (см. [4]). В [4] доказано, что спектр гамильтониана H^t системы в триплетном состоянии чисто непрерывен и представляет собой отрезок $[m, M]$, а у оператора H^s системы в синглетном состоянии, кроме непрерывного спектра $[m, M]$, при некоторых значениях квазиимпульса существует единственное антисвязанное состояние (см. [4]). 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 формируется. Это вполне понятно, так как взаимодействие имеет характер отталкивания. Заметим, что при $U < 0$ реализуется, как нетрудно видеть, 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 $U \to 0$, а при $U \to \infty$ неограниченно возрастает. Вторая полоса в основном соответствует одночастичному состоянию, а именно, движению двойки, т.е. двухэлектронным связанным состояниям.

В [6] изучался спектр и волновые функции системы трёх электронов в кристалле, который описывается гамильтонианом Хаббарда. Известно, что трехэлектронные системы могут находиться в трех состояниях: квартетном и двух состояниях дублетного типа (см. [6]). Квартетное состояние соответствует свободному движению трех электронов на решетке, и ему отвечают базисные функции

$$q^{3/2}_{m,n,p} = a^+_{m,\uparrow} a^+_{n,\uparrow} a^+_{p,\uparrow} \varphi_0.$$

В [6] доказано, что существенный спектр системы в квартетном состоянии состоит из единственного отрезка, а трехэлектронное связанное состояние или трехэлектронное антисвязанное состояние отсутствуют.

Дублетному состоянию соответствуют базисные функции

$$^1d^{1/2}_{m,n,p} = a^+_{m,\uparrow} a^+_{n,\downarrow} a^+_{p,\uparrow} \varphi_0, \quad ^2d^{1/2}_{m,n,p} = a^+_{m,\uparrow} a^+_{n,\uparrow} a^+_{p,\downarrow} \varphi_0.$$

Если $\nu = 1$ и $U > 0$, то существенный спектр оператора первого дублетного состояния $\widetilde{H}^d_1$ является объединением трех отрезков, а дискретный спектр состоит из единственной точки, т.е. в системе существует единственное антисвязанное состояние. В двумерном случае имеем аналогичные результаты. В трехмерном случае существенный спектр либо является объединением трех отрезков, а дискретный спектр состоит из единственной точки, либо существенный спектр является объединением двух отрезков, а дискретный спектр пуст, либо существенный спектр состоит из единственного отрезка, а дискретный спектр пуст, т.е., в системе антисвязанные состояние отсутствуют. В одномерном случае существенный спектр оператора второго дублетного состояния $\widetilde{H}^d_2$ является объединением трёх отрезков, а дискретный спектр содержит не более одной точки. В двумерном случае имеем аналогичные результаты. В трехмерном случае либо существенный спектр оператора второго дублетного состояния $\widetilde{H}^d_2$ является объединением трех отрезков, а дискретный спектр содержит не более одной точки (т.е. в системе существует не более одного антисвязанного состояния), либо существенный спектр является объединением двух отрезков, а дискретный спектр пуст, либо существенный спектр состоит из единственного отрезка, а дискретный спектр пуст, т.е. в системе антисвязанные состояния отсутствуют.

В [18] изучались спектр и волновые функции системы четырех электронов в кристалле, который описывается гамильтонианом Хаббарда в триплетном состоянии системы. Четырехэлектронные системы могут находиться в шести состояниях: квинтетном, трех состояниях триплетного типа и двух состояниях синглетного типа (см. [18]). Триплетным состояниям соответствуют базисные функции

$$^{1}t^{1}_{m,n,p,r} = a^{+}_{m,\uparrow}a^{+}_{n,\uparrow}a^{+}_{p,\uparrow}a^{+}_{r,\downarrow}\varphi_0, \quad ^{2}t^{1}_{m,n,p,r} = a^{+}_{m,\uparrow}a^{+}_{n,\uparrow}a^{+}_{p,\downarrow}a^{+}_{r,\uparrow}\varphi_0, \quad ^{3}t^{1}_{m,n,p,r} = a^{+}_{m,\uparrow}a^{+}_{n,\downarrow}a^{+}_{p,\uparrow}a^{+}_{r,\uparrow}\varphi_0.$$

Если $\nu = 1$ и $U > 0$, то существенный спектр оператора в первом триплетном состоянии $^{1}\widetilde{H}^{1}_{t}$ является объединением двух отрезков, а дискретный спектр пуст. В двумерном случае имеем аналогичные результаты. В трехмерном случае либо существенный спектр в первом триплетном состоянии $^{1}\widetilde{H}^{1}_{t}$ является объединением двух отрезков, а дискретный спектр пуст, либо существенный спектр системы оператора состоит из единственного отрезка, а дискретный спектр пуст.

Если $\nu = 1$ и $U > 0$, то существенный спектр системы оператора во втором дублетном состоянии $^{2}\widetilde{H}^{1}_{t}$ является объединением трех отрезков, а дискретный спектр содержит не более одной точки. В двумерном случае имеем аналогичные результаты. В трехмерном случае либо существенный спектр оператора во втором триплетном состоянии $^{2}\widetilde{H}^{1}_{t}$ является объединением трех отрезков, а дискретный спектр содержит не более одной точки, либо существенный спектр является объединением двух отрезков, а дискретный спектр пуст, либо существенный спектр состоит из единственного отрезка, а дискретный спектр пуст.

Если $\nu = 1$ и $U > 0$, то существенный спектр оператора в третьем триплетном состоянии $^{3}\widetilde{H}^{1}_{t}$ является объединением трех отрезков, а дискретный спектр содержит не более одной точки. В двумерном случае имеем аналогичные результаты. В трехмерном случае либо существенный спектр оператора в третьем триплетном состоянии $^{3}\widetilde{H}^{1}_{t}$ является объединением трех отрезков, а дискретный спектр содержит не более одной точки, либо существенный спектр является объединением двух отрехков, а дискретный спектр пуст, либо существенный спектр состоит из единственного отрезка, а дискретный спектр пуст. Видим, что здесь существует три типа триплетных состояний, и они имеют различные происхождение.

В [19] изучался спектр и волновые функции системы четырех электронов в кристалле, который описывается гамильтонианом Хаббарда в квинтетном и синглетных состояниях системы. Квинтетному состоянию соответствуют свободные движения четырех электронов в решетке, описываемые базисными функциями $q^{2}_{m,n,p,r} = a^{+}_{m,\uparrow}a^{+}_{n,\uparrow}a^{+}_{p,\uparrow}a^{+}_{r,\uparrow}\varphi_0$. В [19] доказано, что спектр системы в квинтетном состоянии чисто непрерывен и представляет собой отрезок, а четырехэлектронные связанные состояния и четырехэлектронные антисвязанные состояния в системе отсутствуют. Синглетным состояниям соответствуют базисные функции

$$^{1}s^{0}_{p,q,r,t} = a^{+}_{p,\uparrow}a^{+}_{q,\uparrow}a^{+}_{r,\downarrow}a^{+}_{t,\downarrow}\varphi_0, \quad ^{2}s^{0}_{p,q,r,t} = a^{+}_{p,\uparrow}a^{+}_{q,\downarrow}a^{+}_{r,\uparrow}a^{+}_{t,\downarrow}\varphi_0,$$

и эти два синглетных состояния имеют различное происхождение.

Если $\nu = 1$ и $U > 0$, то существенный спектр оператора первого синглетного состояния $^{1}\widetilde{H}^{s}_{4}$ является объединением трех отрезков, а дискретный спектр состоит из единственной точки. В двумерном случае имеем аналогичные результаты. В трехмерном случае существенный спектр оператора первого синглетного состояния $^{1}\widetilde{H}^{s}_{4}$ является объединением трех отрезков, а дискретный спектр состоит из единственной точки, либо существенный спектр является объединением двух отрезков, а дискретный спектр пуст, либо существенный спектр состоит из единственного отрезка, а дискретный спектр пуст.

Если $\nu = 1$ и $U > 0$, то существенный спектр оператора второго синглетного состояния $^{2}\widetilde{H}^{s}_{4}$ является объединением трех отрезков, а дискретный спектр состоит из единственной точки. В двумерном случае имеем аналогичные результаты. В трехмерном случае существенный спектр оператора второго синглетного состояния $^{2}\widetilde{H}^{s}_{4}$ является объединением трех отрезков, а дискретный спектр состоит из единственной точки, либо существенный спектр является объединением двух отрезков, а дискретный спектр пуст, либо существенный спектр состоит из единственного отрезка, а существенный спектр пуст.

В [20–24] изучались спектр и волновые функции системы пяти электронов в кристалле, который описывается гамильтонианом Хаббарда в секстетном, квартетных и синглетных состояниях системы.

В [7] изучались спектр и волновые функции системы шести электронов, который описывается гамильтонианом Хаббарда во втором синглетном состоянии системы.

2. Гамильтониан системы. В настоящей работе рассматривается оператор энергии шестиэлектронных систем в модели Хаббарда и описывается структура существенного спектра и дискретный спектр системы для четвертых триплетных состояний. Гамильтониан рассматриваемой модели имеет вид

$$H = A\sum_{m,\gamma} a^+_{m,\gamma}a_{m,\gamma} + B\sum_{m,\tau,\gamma} a^+_{m,\gamma}a_{m+\tau,\gamma} + U\sum_{m} a^+_{m,\uparrow}a_{m,\uparrow}a^+_{m,\downarrow}a_{m,\downarrow}. \tag{1}$$

Здесь A — энергия электрона в узле решетке; B — интеграл переноса между соседними узлами (для удобства считаем, что $B > 0$); $\tau = \pm e_j$, $j = 1, 2, \ldots, \nu$, 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 $m \in Z^\nu$.

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, $S = S_{\max}, S_{\max} - 1, \ldots, S_{\min}$, где $S_{\max} = N_e/2$, $S_{\min} = 0, 1/2$. Гамильтониан (1) 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 антисимметричном пространстве Фока $\mathcal{H}_{\mathrm{as}}$.

Пусть φ_0 — вакуумный вектор в пространстве $\mathcal{H}_{\mathrm{as}}$. Четвертое триплетное состояние соответствует свободному движению шести электронов на решетке и их взаимодействие, и ему отвечают базисные функции

$${}^4t^1_{p,q,r,k,m,n\in Z^\nu} = a^+_{p,\downarrow}a^+_{q,\downarrow}a^+_{r,\uparrow}a^+_{k,\uparrow}a^+_{m,\uparrow}a^+_{n,\uparrow}\varphi_0.$$

Подпространство ${}^4\mathcal{H}^1_{p,q,r,k,m,n\in Z^\nu}$, соответствующее четвертому триплетному состоянию, есть множество всех векторов вида

$${}^4\psi^1_t = \sum_{p,q,r,k,m,n\in Z^\nu} \widetilde{f}(p,q,r,k,m,n)\,{}^4t^1_{p,q,r,k,m,n\in Z^\nu}, \quad \widetilde{f} \in l^{\mathrm{as}}_2,$$

где l^{as}_2 — подпространство антисимметричных функций из пространства $l_2((Z^\nu)^6)$.

Теорема 1. *Подпространство ${}^4\widetilde{\mathcal{H}}^1_{p,q,r,k,m,n\in Z^\nu}$ инвариантно относительно оператора H, а сужение ${}^4H^1_t = H\big|_{{}^4\mathcal{H}^1_{p,q,r,k,m,n\in Z^\nu}}$ оператора H на подпространство ${}^4\mathcal{H}^1_{p,q,r,k,m,n\in Z^\nu}$ является ограниченным самосопряженным оператором. Он порождает ограниченный самосопряженный оператор ${}^4\overline{H}^1_t$, действующий в пространстве l^{as}_2 по формуле*

$$\begin{aligned}
\big({}^4\overline{H}^1_t f\big)(p,q,r,k,m,n) &= 6Af(p,q,r,k,m,n) + \\
&+ B\sum_{\tau}\Big[f(p+\tau,q,r,k,m,n) + f(p,q+\tau,r,k,m,n) + f(p,q,r+\tau,k,m,n) + \\
&+ f(p,q,r,k+\tau,m,n) + f(p,q,r,k,m+\tau,n) + f(p,q,r,k,m,n+\tau)\Big] + \\
&+ U\Big[\delta_{p,r} + \delta_{p,k} + \delta_{p,m} + \delta_{p,n} + \delta_{q,r} + \delta_{q,k} + \delta_{q,m} + \delta_{q,n}\Big].
\end{aligned} \tag{2}$$

Сам оператор ${}^4H_t^1$ *действует на вектор* ${}^4\psi_t^1 \in {}^4\widetilde{\mathcal{H}}^1_{p,q,r,k,m,n\in Z^\nu}$ *по формуле*

$$ {}^4H_t^1\, {}^4\psi_t^1 = \sum_{p,q,r,k,m,n\in Z^\nu} \bigl({}^4\overline{H}_t^1 f\bigr)(p,q,r,k,m,n) {}^4t^1_{p,q,r,k,m,n\in Z^\nu}. \tag{3}$$

Доказательство. Подействуем гамильтонианом H на векторы ${}^4\psi_t^1 \in {}^4\widetilde{\mathcal{H}}^1_{p,q,r,k,m,n\in Z^\nu}$ 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 ${}^4\widetilde{\mathcal{H}}^1_{p,q,r,k,m,n\in Z^\nu}$. Отсюда получается утверждение теоремы. □

Лемма 1. *Спектры операторов* ${}^4H_t^1$ *и* ${}^4\overline{H}_t^1$ *совпадают.*

Доказательство. Так как операторы ${}^4H_t^1$ и ${}^4\overline{H}_t^1$ являются ограниченными самосопряженными операторами, то из критерия Вейля (см. [16, гл. VII, § 3]) следует существование такой последовательности векторов ψ_i, что

$$\psi_i = \sum_{p,q,r,k,m,n} f_i(p,q,r,k,m,n) a^+_{p,\downarrow} a^+_{q,\downarrow} a^+_{r,\uparrow} a^+_{k,\uparrow} a^+_{m,\uparrow} a^+_{n,\uparrow}\varphi_0, \quad \|\psi_i\| = 1,$$

$$\lim_{i\to\infty} \bigl\|\bigl({}^4H_t^1 - \lambda\bigr)\psi_i\bigr\| = 0, \tag{4}$$

где $\lambda \in \sigma({}^4H_t^1)$. С другой стороны,

$$\begin{aligned}
&\bigl\|\bigl({}^4H_t^1 - \lambda\bigr)\psi_i\bigr\|^2 = \Bigl(\bigl({}^4H_t^1 - \lambda\bigr)\psi_i,\ \bigl({}^4H_t^1 - \lambda\bigr)\psi_i BNB\bigr) = \\
&= \sum_{p,q,r,k,m,n} \bigl\|\bigl({}^4\overline{H}_t^1 - \lambda\bigr) f_i(p,q,r,k,m,n)\bigr\|^2 \cdot \Bigl(a^+_{p,\downarrow} a^+_{q,\downarrow} a^+_{r,\uparrow} a^+_{k,\uparrow} a^+_{m,\uparrow} a^+_{n,\uparrow}\varphi_0, a^+_{p,\downarrow} a^+_{q,\downarrow} a^+_{r,\uparrow} a^+_{k,\uparrow} a^+_{m,\uparrow} a^+_{n,\uparrow}\varphi_0\Bigr) = \\
&= \sum_{p,q,r,k,m,n} \bigl\|\bigl({}^4\overline{H}_t^1 - \lambda\bigr) F_i(p,q,r,k,m,n)\bigr\|^2 \cdot \Bigl(a_{n,\uparrow} a_{m,\uparrow} a_{k,\uparrow} a_{r,\uparrow} a_{q,\downarrow} a_{p,\downarrow} a^+_{p,\downarrow} a^+_{q,\downarrow} a^+_{r,\uparrow} a^+_{k,\uparrow} a^+_{m,\uparrow} a^+_{n,\uparrow}\varphi_0, \varphi_0\Bigr) = \\
&= \sum_{p,q,r,k,m,n} \bigl\|\bigl({}^4\overline{H}_t^1 - \lambda\bigr) F_i(p,q,r,k,m,n)\bigr\|^2 \cdot (\varphi_0,\varphi_0) = \sum_{p,q,r,k,m,n} \bigl\|\bigl({}^4\overline{H}_t^1 - \lambda\bigr) F_i(p,q,r,k,m,n)\bigr\|^2 \to 0
\end{aligned}$$

при $i\to\infty$, где

$$F_i = \sum_{p,q,r,k,m,n} f_i(p,q,r,k,m,n), \quad \|F_i\|^2 = \sum_{p,q,r,k,m,n} \bigl|f_i(p,q,r,k,m,n)\bigr|^2 = \|\psi_i\|^2 = 1.$$

Это означает, что $\lambda \in \sigma\bigl({}^4\overline{H}_t^1\bigr)$. Следовательно, $\sigma\bigl({}^4\overline{H}_t^1\bigr) \subset \sigma\bigl({}^4\overline{H}_t^1\bigr)$.

Обратно, пусть $\overline{\lambda} \in \sigma\bigl({}^4\overline{H}_t^1\bigr)$. Тогда в силу того же критерия Вейля существует такая последовательность $\{F_i\}_{i=1}^\infty$, что $\|F_i\| = 1$ и

$$\lim_{i\to\infty} \bigl\|\bigl({}^4\overline{H}_t^1 - \overline{\lambda}\bigr)\psi_i\bigr\| = 0.$$

Полагая

$$F_i = \sum_{p,r,t,k,m,n} f_i(p,r,t,k,m,n), \quad \|F_i\| = l\left(\sum_{p,r,t,k,m,n} \bigl|f_i(p,r,t,k,m,n)\bigr|^2\right)^{1/2},$$

имеем $\|\psi_i\| = \|F_i\| = 1$ и

$$\bigl\|\bigl({}^4\overline{H}_t^1 - \overline{\lambda}\bigr)F_i\bigr\| = \bigl\|\bigl({}^4\overline{H}_t^1 - \overline{\lambda}\bigr)\psi_i\bigr\| \xrightarrow[i\to\infty]{} 0.$$

Отсюда вытекает, что $\overline{\lambda} \in \sigma\bigl({}^4\overline{H}_t^1\bigr)$ и, следовательно, $\sigma\bigl({}^4\overline{H}_t^1\bigr) \subset \sigma\bigl({}^4H_t^1\bigr)$. Эти два соотношение означают, что $\sigma\bigl({}^4H_t^1\bigr) = \sigma\bigl({}^4\overline{H}_t^1\bigr)$. □

Оператор ${}^4H_t^1$ будем называть оператором шестиэлектронного четвертого триплета в модели Хаббарда.

Обозначим через $\mathcal{F}$ преобразование Фурье

$$\mathcal{F}: l_2((Z^\nu)^6) \to L_2\big((T^\nu)^6\big) \equiv {}^4\widetilde{\mathcal{H}}_t^1,$$

где T^ν — ν-мерный тор, снабженный нормированной мерой Лебега $d\lambda$, т.е., $\lambda(T^\nu) = 1$. Положим ${}^4\widetilde{H}_t^1 = \mathcal{F}\,{}^4\overline{H}_t^1\mathcal{F}^{-1}$. В квазиимпульсном представлении оператор ${}^4\overline{H}_t^1$ действует в гильбертовом пространстве $L_2^{\mathrm{as}}\big((T^\nu)^6\big)$, где L_2^{as} — подпространство антисимметричных функций в $L_2\big((T^\nu)^6\big)$.

Теорема 2. *Преобразование Фурье переводит оператор ${}^4\overline{H}_t^1$ в ограниченный самосопряженный оператор ${}^4\widetilde{H}_t^1 = \mathcal{F}\,{}^4\overline{H}_t^1\mathcal{F}^{-1}$, действующий в пространстве $L_2^{\mathrm{as}}\big((T^\nu)^6\big)$ по формуле*

$$\begin{aligned}
{}^4\widetilde{H}_t^{14}\psi_t^1 &= h\big(\lambda,\mu,\gamma,\theta,\eta,\xi\big) f\big(\lambda,\mu,\gamma,\theta,\eta,\xi\big) + \\
&+ U\Bigg[\int_{T^\nu} f\big(s,\mu,\lambda+\gamma-s,\theta,\eta,\xi\big)ds + \int_{T^\nu} f\big(s,\mu,\gamma,\lambda+\theta-s,\eta,\xi\big)ds + \\
&+ \int_{T^\nu} f\big(s,\mu,\gamma,\theta,\lambda+\eta-s,\xi\big)ds + \int_{T^\nu} f\big(s,\mu,\gamma,\theta,\eta,\lambda+\xi-s\big)ds + \\
&+ \int_{T^\nu} f\big(\lambda,s,\mu+\gamma-s,\theta,\eta,\xi\big)ds + \int_{T^\nu} f\big(\lambda,s,\gamma,\mu+\theta-s,\eta,\xi\big)ds + \\
&+ \int_{T^\nu} f\big(\lambda,s,\gamma,\theta,\mu+\eta-s,\xi\big)ds + \int_{T^\nu} f\big(\lambda,s,\gamma,\theta,\eta,\mu+\xi-s\big)ds\Bigg], \quad (5)
\end{aligned}$$

где

$$h\big(\lambda,\mu,\gamma,\theta,\eta,\xi\big) = 6A + 2B\sum_{i=1}^{\nu}\Big[\cos\lambda_i + \cos\mu_i + \cos\gamma_i + \cos\theta_i + \cos\eta_i + \cos\xi_i\Big]$$

и L_2^{as} — подпространство антисимметричных функций в $L_2\big((T^\nu)^6\big)$.

Используя тензорные произведения гильбертовых пространств и тензорные произведения операторов в гильбертовых пространствах (см. [17]) и учитывая, что $f\big(\lambda,\mu,\gamma,\theta,\eta,\xi\big)$ — антисимметричная функция, можно убедиться, что оператор ${}^4\widetilde{H}_t^1$ представим в виде

$${}^4\widetilde{H}_t^{14}\psi_t^1 = \widetilde{H}_2^1 \otimes I \otimes I + I \otimes \widetilde{H}_2^2 \otimes I + I \otimes I \otimes \widetilde{H}_3^2, \quad (6)$$

где

$$\big(\widetilde{H}_2^1 f\big)(\lambda,\mu) = \left\{2A + 4B\sum_{i=1}^{\nu}\cos\frac{\Lambda_1^i}{2}\cos\left(\frac{\Lambda_1^i}{2} - \lambda_i\right)\right\} f_{\Lambda_1}(\lambda) + U\int_{T^\nu} f_{\Lambda_1}(s)ds,$$

$$\big(\widetilde{H}_2^2 f\big)(\gamma,\theta) = \left\{2A + 4B\sum_{i=1}^{\nu}\cos\frac{\Lambda_2^i}{2}\cos\left(\frac{\Lambda_2^i}{2} - \gamma_i\right)\right\} f_{\Lambda_2}(\gamma) + U\int_{T^\nu} f_{\Lambda_2}(s)ds,$$

$$\big(\widetilde{H}_2^3 f\big)(\eta,\xi) = \left\{2A + 4B\sum_{i=1}^{\nu}\cos\frac{\Lambda_3^i}{2}\cos\left(\frac{\Lambda_3^i}{2} - \eta_i\right)\right\} f_{\Lambda_3}(\eta) - 2U\int_{T^\nu} f_{\Lambda_3}(s)ds;$$

здесь I — единичный оператор в пространстве двухэлектронных состояний $\widetilde{\mathcal{H}}_2$, $\Lambda_1 = \lambda + \mu$, $\Lambda_2 = \gamma + \theta$, и $\Lambda_3 = \eta + \xi$.

Спектр оператора $A \otimes I + I \otimes B$, где A и B — плотно определенные ограниченные линейные операторы, был изучен в [12–14], где получены явные выражения для существенного спектра $\sigma_{\mathrm{ess}}(A \otimes I + I \otimes B)$ и дискретного спектра $\sigma_{\mathrm{disc}}(A \otimes I + I \otimes B)$ оператора $A \otimes I + I \otimes B$ через спектр $\sigma(A)$ и дискретный спектр $\sigma_{\rm disc}(A)$ оператора A и через спектр $\sigma(B)$ и дискретный спектр $\sigma_{\rm disc}(B)$ оператора B:

$$\sigma_{\rm disc}(A\otimes I+I\otimes B)=\Big\{\sigma(A)\setminus\sigma_{\rm ess}(A)+\sigma(B)\setminus\sigma_{\rm ess}(B)\Big\}\setminus \\ \setminus\Big\{\big(\sigma_{\rm ess}(A)+\sigma(B)\big)\cup\big(\sigma(A)+\sigma_{\rm ess}(B)\big)\Big\}, \tag{7}$$

$$\sigma_{\rm ess}(A\otimes I+I\otimes B)=\big(\sigma_{\rm ess}(A)+\sigma(B)\big)\cup\big(\sigma(A)+\sigma_{\rm ess}(B)\big). \tag{8}$$

Ясно, что $\sigma\big(A\otimes I+I\otimes B\big)=\big\{\lambda+\mu:\ \ \lambda\in\sigma(A),\ \mu\in\sigma(B)\big\}$. Следовательно, мы должны исследовать спектр операторов двухэлектронных систем в модели Хаббарда $\widetilde H_2^1,\widetilde H_2^2$ и $\widetilde H_2^3$.

3. Спектр операторов $\widetilde H_2^1$, $\widetilde H_2^2$ и $\widetilde H_2^3$. Сначала исследуем спектр оператора

$$\big(\widetilde H^1_{2\Lambda_1}f_{\Lambda_1}\big)(\lambda)=\left\{2A+4B\sum_{i=1}^{\nu}\cos\frac{\Lambda_1^i}{2}\cos\left(\frac{\Lambda_1^i}{2}-\lambda_i\right)\right\}f_{\Lambda_1}(\lambda)+U\int\limits_{T^\nu}f_{\Lambda_1}(s)ds.$$

Известно, что непрерывный спектр оператора $\widetilde H_2^1$ не зависит от параметра U и заполняет отрезок

$$\left[2A-4B\sum_{i=1}^{\nu}\cos\frac{\Lambda_1^i}{2},\ 2A+\sum_{i=1}^{\nu}\cos\frac{\Lambda_1^i}{2}\right].$$

Положим

$$D^\nu_{\Lambda_1}(z)=1+U\int\limits_{T^\nu}\frac{ds_1\,ds_2\,\ldots\,ds_\nu}{2A+4B\sum\limits_{i=1}^{\nu}\cos\frac{\Lambda_1^i}{2}\cos\left(\frac{\Lambda_1^i}{2}-s_i\right)-z}.$$

Лемма 2. *Число $z=z_0\notin\sigma_{\rm cont}\big(\widetilde H^1_{2\Lambda_1}\big)$ является собственным значением оператора $\widetilde H_2^1$ тогда и только тогда, когда оно является нулем функции $D^\nu_{\Lambda_1}(z)$, т.е. $D^\nu_{\Lambda_1}(z)=0$.*

Теорема 3.

A. *Если $\nu=1$ и $U<0$, то оператор $\widetilde H^1_{2\Lambda_1}$ имеет единственное собственное значение*

$$z_1=2A-\sqrt{U^2+16B^2\cos^2\frac{\Lambda_1}{2}}, \tag{9}$$

лежащее ниже области непрерывного спектра этого оператора.

B. *Если $\nu=1$ и $U>0$, то оператор $\widetilde H^1_{2\Lambda_1}$ имеет единственное собственное значение*

$$\widetilde z_1=2A+\sqrt{U^2+16B^2\cos^2\frac{\Lambda_1}{2}}, \tag{10}$$

лежащее выше области непрерывного спектра этого оператора.

Доказательство. Если $U<0$, в одномерном случае, $D^\nu_{\Lambda_1}(z)$ — монотонно убывающая функция z в области, лежащей ниже непрерывного спектра оператора $\widetilde H^1_{2\Lambda_1}$. Для $z<m^1_{\Lambda_1}$ функция $D^\nu_{\Lambda_1}(z)$ убывает от 1 до $-\infty$,

$$D^\nu_{\Lambda_1}(z)\xrightarrow[z\to-\infty]{}1,\quad D^\nu_{\Lambda_1}(z)\xrightarrow[z\to m^1_{\Lambda_1}-0]{}-\infty.$$

Поэтому ниже значений $m^1_{\Lambda_1}$ уравнение $D^\nu_{\Lambda_1}(z)=0$ имеет единственный корень (9).

Если $U<0$, в одномерном случае, $D^\nu_{\Lambda_1}(z)$ монотонно убывающая функция z в области, лежащей выше непрерывного спектра оператора $\widetilde H^1_{2\Lambda_1}$. Для $z>M^1_{\Lambda_1}$ функция $D^\nu_{\Lambda_1}(z)$ убывает от $+\infty$ до 1,

$$D^\nu_{\Lambda_1}(z)\xrightarrow[z\to\infty]{}1,\quad D^\nu_{\Lambda_1}(z)\xrightarrow[z\to M^1_{\Lambda_1}+0]{}\infty.$$

Поэтому выше значений $M^1_{\Lambda_1}$ уравнение $D^\nu_{\Lambda_1}(z)=0$ не имеет корней.

Если $U > 0$, в одномерном случае, $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z)$ — монотонно возрастающая функция z в области, лежащей ниже непрерывного спектра оператора $\widetilde{H}^1_{2\Lambda_1}$. Для $z < m^1_{\Lambda_1}$ функция $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z)$ возрастает от 1 до ∞,

$$D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) \xrightarrow[z\to-\infty]{} 1, \quad D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) \xrightarrow[z\to m^1_{\Lambda_1}-0]{} \infty.$$

Поэтому ниже значений $m^1_{\Lambda_1}$ уравнение $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) = 0$ спектра не имеет корней.

Если $U > 0$, в одномерном случае, $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z)$ — монотонно возрастающая функция z выше области непрерывного спектра оператора $\widetilde{H}^1_{2\Lambda_1}$. Для $z > M^1_{\Lambda_1}$ функция $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z)$ возрастает от $-\infty$ до 1,

$$D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) \xrightarrow[z\to+\infty]{} 1, \quad D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) \xrightarrow[z\to M^1_{\Lambda_1}+0]{} -\infty.$$

Поэтому уравнение $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) = 0$ имеет единственный корень (10), лежащий выше значения $M^1_{\Lambda_1}$. $\square$

Теорема 4.

A. *Если $\nu = 2$ и $U < 0$, то оператор $\widetilde{H}^1_{2\Lambda_1}$ имеет единственное собственное значение z'_1, лежащее ниже области непрерывного спектра этого оператора.*

B. *Если $\nu = 2$ и $U > 0$, то оператор $\widetilde{H}^1_{2\Lambda_1}$ имеет единственное собственное значение $\widetilde{z}'_1$, лежащее выше области непрерывного спектра этого оператора.*

Доказательство. Если $U < 0$, в двумерном случае, $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z)$ — монотонно убывающая функция z в области, лежащей ниже непрерывного спектра оператора $\widetilde{H}^1_{2\Lambda_1}$. Для $z < m^2_{\Lambda_1}$ функция $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z)$ убывает от 1 до $-\infty$,

$$D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) \xrightarrow[z\to-\infty]{} 1, \quad D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) \xrightarrow[z\to m^2_{\Lambda_1}-0]{} -\infty.$$

Поэтому ниже значений $m^2_{\Lambda_1}$ уравнение $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) = 0$ имеет единственный корень в точке z'_1.

Если $U < 0$, в двумерном случае, $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z)$ — монотонно убывающая функция z выше области непрерывного спектра оператора $\widetilde{H}^1_{2\Lambda_1}$. Для $z > M^2_{\Lambda_1}$ функция $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z)$ убывает от ∞ до 1,

$$D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) \xrightarrow[z\to\infty]{} 1, \quad D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) \xrightarrow[z\to M^2_{\Lambda_1}+0]{} \infty.$$

Поэтому выше значений $M^2_{\Lambda_1}$ уравнение $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) = 0$ не имеет корней.

Если $U > 0$, в двумерном случае, $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z)$ — монотонно возрастающая функция z в области, лежащей ниже непрерывного спектра оператора $\widetilde{H}^1_{2\Lambda_1}$. Для $z < m^2_{\Lambda_1}$ функция $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z)$ убывает от ∞ до 1,

$$D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) \xrightarrow[z\to-\infty]{} 1, \quad D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) \xrightarrow[{[z\to m^2_{\Lambda_1}-0}]{]} \infty.$$

Поэтому уравнение $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) = 0$ ниже области непрерывного спектра не имеет корней.

Если $U > 0$, в двумерном случае, $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z)$ — монотонно возрастающая функция z выше области непрерывного спектра оператора $\widetilde{H}^1_{2\Lambda_1}$. Для $z > M^2_{\Lambda_1}$ функция $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z)$ возрастает от $-\infty$ до 1,

$$D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) \xrightarrow[z\to+\infty]{} 1, \quad D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) \xrightarrow[z\to M^2_{\Lambda_1}+0]{} -\infty.$$

Поэтому выше значений $M^2_{\Lambda_1}$ уравнение $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) = 0$ имеет единственный корень $\widetilde{z}'_1$. $\square$

Теперь рассмотрим трехмерный случай. Обозначим через W интеграл Ватсона (см. [1])

$$W = \frac{1}{\pi^3}\int\limits_{-\pi}^{\pi}\int\limits_{-\pi}^{\pi}\int\limits_{-\pi}^{\pi} \frac{dx\,dy\,dz}{3-\cos x-\cos y-\cos z} \approx 1{,}516.$$

Так как λ — нормированная мера, имеем

$$J = \int\limits_{-\pi}^{\pi}\int\limits_{-\pi}^{\pi}\int\limits_{-\pi}^{\pi} \frac{dx\,dy\,dz}{3-\cos x-\cos y-\cos z} = \int\limits_{-\pi}^{\pi}\int\limits_{-\pi}^{\pi}\int\limits_{-\pi}^{\pi} \frac{dx\,dy\,dz}{3+\cos x+\cos y+\cos z} = \frac{W}{3}.$$

Пусть полный квазиимпульс двухэлектронных систем Λ_1 имеет вид

$$\Lambda_1 = (\Lambda_1^1, \Lambda_1^2, \Lambda_1^3) = (\Lambda_1^0, \Lambda_1^0, \Lambda_1^0).$$

Теорема 5.

A. *Если $\nu = 3$ и $U < -\dfrac{12B}{W}\cos\dfrac{\Lambda_1^0}{2} < 0$, то оператор $\widetilde{H}_{2\Lambda_1}^1$ имеет единственное собственное значение z_1'', лежащее ниже области непрерывного спектра этого оператора. Если же $-\dfrac{12B}{W}\cos\dfrac{\Lambda_1^0}{2} < U < 0$, то оператор $\widetilde{H}_{2\Lambda_1}^1$ не имеет собственных значений, лежащих ниже области непрерывного спектра оператора $\widetilde{H}_{2\Lambda_1}^1$.*

B. *Если $\nu = 3$ и $U > \dfrac{12B}{W}\cos\dfrac{\Lambda_1^0}{2}$, то оператор $\widetilde{H}_{2\Lambda_1}^1$ имеет единственное собственное значение $\widetilde{z}_1''$, лежащее выше области непрерывного спектра этого оператора. Если же $0 < U < \dfrac{12B}{W}\cos\dfrac{\Lambda_1^0}{2}$, то оператор $\widetilde{H}_{2\Lambda_1}^1$ не имеет собственных значений, лежащих выше области непрерывного спектра оператора $\widetilde{H}_{2\Lambda_1}^1$.*

Доказательство. Если $U < 0$, то в трехмерном случае $D_{\Lambda_1}^{\nu}(z)$ — монотонно убывающая функция z в области, лежащей ниже непрерывного спектра оператора $\widetilde{H}_{2\Lambda_1}^1$. Для $z < m_{\Lambda_1}^3$ функция $D_{\Lambda_1}^{\nu}(z)$ убывает от 1 до $1 + \dfrac{UW}{12B\cos(\Lambda_1^0/2)}$,

$$D_{\Lambda_1}^{\nu}(z) \xrightarrow[z\to-\infty]{} 1, \quad D_{\Lambda_1}^{\nu}(z) \xrightarrow[z\to m_{\Lambda_1}^3-0]{} 1 + \frac{UW}{12B\cos(\Lambda_1^0/2)}.$$

Поэтому ниже значения $m_{\Lambda_1}^3$ уравнение $D_{\Lambda_1}^{\nu}(z) = 0$ имеет единственный корень в точке z_1'', если выполняется условие

$$U < -\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}.$$

Если же $-\dfrac{12B}{W}\cos\dfrac{\Lambda_1^0}{2} < U < 0$, то уравнение $D_{\Lambda_1}^{\nu}(z) = 0$ не имеет корней ниже области непрерывного спектра оператора $\widetilde{H}_{2\Lambda_1}^1$.

Если $U < 0$, в трехмерном случае, $D_{\Lambda_1}^{\nu}(z)$ — монотонно убывающая функция z в области, лежащей выше непрерывного спектра оператора $\widetilde{H}_{2\Lambda_1}^1$. Для $z > M_{\Lambda_1}^3$ функция $D_{\Lambda_1}^{\nu}(z)$ убывает от $1 - \dfrac{UW}{12B\cos(\Lambda_1^0/2)} > 1$ до 1,

$$D_{\Lambda_1}^{\nu}(z) \xrightarrow[z\to\infty]{} 1, \quad D_{\Lambda_1}^{\nu}(z) \xrightarrow[z\to M_{\Lambda_1}^3+0]{} 1 - \frac{UW}{12B\cos(\Lambda_1^0/2)} > 1.$$

Поэтому выше значений $M_{\Lambda_1}^3$ уравнение $D_{\Lambda_1}^{\nu}(z) = 0$ не имеет корней.

Если $U > 0$, в трехмерном случае, $D_{\Lambda_1}^{\nu}(z)$ — монотонно возрастающая функция z в области, лежащей ниже непрерывного спектра оператора $\widetilde{H}_{2\Lambda_1}^1$. Для $z < m_{\Lambda_1}^3$ функция $D_{\Lambda_1}^{\nu}(z)$ возрастает от 1 до $1 + \dfrac{UW}{12B\cos(\Lambda_1^0/2)} > 1$,

$$D_{\Lambda_1}^{\nu}(z) \xrightarrow[z\to-\infty]{} 1, \quad D_{\Lambda_1}^{\nu}(z) \xrightarrow[z\to m_{\Lambda_1}^3-0]{} 1 + \frac{UW}{12B\cos(\Lambda_1^0/2)} > 1.$$

Поэтому ниже значений $m_{\Lambda_1}^3$ уравнение $D_{\Lambda_1}^{\nu}(z) = 0$ не имеет корней.

Если $U > 0$, в трехмерном случае, $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z)$ — монотонно возрастающая функция z в области, лежащей выше непрерывного спектра оператора $\widetilde{H}^1_{2\Lambda_1}$. Для $z > M^3_{\Lambda_1}$ функция $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z)$ возрастает от $1 - \dfrac{UW}{12B\cos(\Lambda^0_1/2)}$ до 1,

$$D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) \xrightarrow[z\to+\infty]{} 1, \quad D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) \xrightarrow[z\to M^1_{\Lambda_1}+0]{} 1 - \frac{UW}{12B\cos(\Lambda^0_1/2)}.$$

Поэтому выше значений $M^3_{\Lambda_1}$ уравнение $D^{\nu}_{\Lambda_1}(z) = 0$ имеет единственный корень $\widetilde{z}'_1$, если выполняется условие

$$1 - \frac{UW}{12B\cos(\Lambda^0_1 2)} < 0, \quad \text{т.е.} \quad U > \frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda^0_1}{2}.$$

Ясно, что если это условие не выполняется, то оператор $\widetilde{H}^1_{2\Lambda_1}$ выше области непрерывного спектра этого оператора не имеет собственных значений. □

Так как операторы $\widetilde{H}^1_2$ и $\widetilde{H}^2_2$ тождественны, их спектры одинаковы; нужно лишь в полученных результатах Λ_1 заменить на Λ_2.

Теперь исследуем спектр оператора $\widetilde{H}^3_2$. Непрерывный спектр оператора $\widetilde{H}^3_2$ представляет собой отрезок

$$\sigma_{\text{cont}}\big(\widetilde{H}^3_2\big) = \left[2A - 4B\sum_{i=1}^{\nu}\cos\frac{\Lambda^i_3}{2},\ 2A + 4B\sum_{i=1}^{\nu}\cos\frac{\Lambda^i_3}{2}\right].$$

Положим

$$D^{\nu}_{\Lambda_3}(z) = 1 - 2U\int\limits_{T^{\nu}} \frac{ds_1\,ds_2\ldots ds_{\nu}}{2A + 4B\sum\limits_{i=1}^{\nu}\cos\dfrac{\Lambda^i_3}{2}\cos(\dfrac{\Lambda^1_3}{2} - s_i) - z}.$$

Теорема 6.

A. *Если $\nu = 1$ и $U < 0$, то оператор $\widetilde{H}^3_{2\Lambda_3}$ имеет единственное собственное значение*

$$\widetilde{z}_3 = 2A + 2\sqrt{U^2 + 4B^2\cos^2\frac{\Lambda_3}{2}},$$

лежащее выше области непрерывного спектра этого оператора.

B. *Если $\nu = 1$ и $U > 0$, то оператор $\widetilde{H}^3_{2\Lambda_3}$ имеет единственное собственное значение*

$$z_3 = 2A - 2\sqrt{U^2 + 4B^2\cos^2\frac{\Lambda_3}{2}},$$

лежащее ниже области непрерывного спектра этого оператора.

Доказательство теоремы 6 аналогично доказательству теоремы 5.

В двумерном случае справедлив аналог теоремы 6; в этом случае собственные значение оператора $\widetilde{H}^3_{2\Lambda_3}$ обозначим через $\widetilde{z}_3$ и z_3 соответственно.

Теперь рассмотрим трехмерный случай. Имеет место следующая теорема.

Теорема 7.

A. *Если $\nu = 3$ и $U < -\dfrac{6B}{W}\cos\dfrac{\Lambda^0_3}{2} < 0$, то оператор $\widetilde{H}^3_{2\Lambda_3}$ имеет единственное собственное значение $\widetilde{z}''_3$, лежащее выше области непрерывного спектра этого оператора. Если же $-\dfrac{6B}{W}\cos\dfrac{\Lambda^0_3}{2} < U < 0$, то оператор $\widetilde{H}^3_{2\Lambda_3}$ не имеет собственных значений, лежащих выше области непрерывного спектра оператора $\widetilde{H}^3_{2\Lambda_3}$.*

B. *Если $\nu = 3$ и $U > \dfrac{6B}{W}\cos\dfrac{\Lambda^0_3}{2} > 0$, то оператор $\widetilde{H}^3_{2\Lambda_3}$ имеет единственное собственное значение z''_3, лежащее ниже области непрерывного спектра этого оператора. Если же*

$0 < U < \dfrac{6B}{W}\cos\dfrac{\Lambda_3^0}{2}$, *то оператор* $\widetilde{H}^3_{2\Lambda_3}$ *не имеет собственных значений, лежащих ниже области непрерывного спектра оператора* $\widetilde{H}^3_{2\Lambda_3}$.

Теорема 7 доказывается аналогично теореме 5.

4. Структура существенного спектра и дискретный спектр оператора $^4\widetilde{H}^1_t$. Теперь, используя полученные результаты и представления (6), опишем структуру существенного спектра и дискретный спектр оператора энергии шестиэлектронных систем модели Хаббарда в четвертом триплетном состоянии оператора $^4\widetilde{H}^1_t$.

Теорема 8. *Пусть* $\nu = 1$ *и* $U < 0$. *Тогда существенный спектр оператора* $^4\widetilde{H}^1_t$ *является объединением семи отрезков*:

$$\begin{aligned}\sigma_{\mathrm{ess}}\bigl({}^4\widetilde{H}^1_t\bigr) = \bigl[a+c+e,\ b+d+f\bigr] \cup \bigl[a+c+\widetilde{z}_3,\ b+d+\widetilde{z}_3\bigr]\cup\\ \cup \bigl[a+e+z_2,\ b+f+z_2\bigr] \cup \bigl[a+z_2+\widetilde{z}_3,\ b+z_2+\widetilde{z}_3\bigr] \cup \bigl[c+e+z_1,\ d+f+z_1\bigr]\cup\\ \cup \bigl[c+z_1+\widetilde{z}_3,\ d+z_1+\widetilde{z}_3\bigr] \cup \bigl[e+z_1+z_2,\ f+z_1+z_2\bigr];\end{aligned}$$

здесь и далее

$$a = 2A - 4B\cos\frac{\Lambda_1}{2},\quad b = 2A + 4B\cos\frac{\Lambda_1}{2},\quad c = 2A - 4B\cos\frac{\Lambda_2}{2},$$
$$d = 2A + 4B\cos\frac{\Lambda_2}{2},\quad e = 2A - 4B\cos\frac{\Lambda_3}{2},\quad e = 2A - 4B\cos\frac{\Lambda_3}{2},$$
$$z_1 = 2A - \sqrt{U^2 + 16B^2\cos^2\frac{\Lambda_1}{2}},\quad z_2 = 2A - \sqrt{U^2 + 16B^2\cos^2\frac{\Lambda_2}{2}},$$
$$\widetilde{z}_3 = 2A + 2\sqrt{U^2 + 4B^2\cos^2\frac{\Lambda_3}{2}}.$$

Дискретный спектр оператора $^4\widetilde{H}^1_t$ *содержит не более одного собственного значения*:

$$\sigma_{\mathrm{disc}}\bigl({}^4\widetilde{H}^1_t\bigr) = \bigl\{z_1 + z_2 + \widetilde{z}_3\bigr\} \quad \text{либо} \quad \sigma_{\mathrm{disc}}\bigl({}^4\widetilde{H}^1_t\bigr) = \varnothing.$$

Доказательство. В одномерном случае непрерывные спектры операторов $\widetilde{H}^1_{2\Lambda_1}$, $\widetilde{H}^2_{2\Lambda_2}$ и $\widetilde{H}^3_{2\Lambda_3}$ суть отрезки

$$\sigma_{\mathrm{cont}}(\widetilde{H}^1_{2\Lambda_1}) = \left[2A - 4B\cos\frac{\Lambda_1}{2},\ 2A + 4B\cos\frac{\Lambda_1}{2}\right],$$
$$\sigma_{\mathrm{cont}}(\widetilde{H}^2_{2\Lambda_2}) = \left[2A - 4B\cos\frac{\Lambda_2}{2},\ 2A + 4B\cos\frac{\Lambda_2}{2}\right],$$
$$\sigma_{\mathrm{cont}}(\widetilde{H}^3_{2\Lambda_3}) = \left[2A - 4B\cos\frac{\Lambda_3}{2},\ 2A + 4B\cos\frac{\Lambda_3}{2}\right];$$

эти операторы имеют собственные значения z_1, z_2 и $\widetilde{z}_3$ соответственно. Поэтому спектр оператора $^4\widetilde{H}^1_t$ представляет собой множество

$$\Bigl\{\lambda + \mu + \gamma:\ \lambda \in \sigma\bigl(\widetilde{H}^1_{2\Lambda_1}\bigr),\ \mu \in \sigma\bigl(\widetilde{H}^2_{2\Lambda_2}\bigr),\ \gamma \in \sigma\bigl(\widetilde{H}^3_{2\Lambda_3}\bigr)\Bigr\}$$

(см. [12–14]). Отсюда, из представления (6) и формул (7) и (8)) следует, что существенный спектр оператора $^4\widetilde{H}^1_t$ является объединением семи отрезков:

$$\left[6A - 4B\left(\cos\frac{\Lambda_1}{2} + \cos\frac{\Lambda_2}{2} + \cos\frac{\Lambda_3}{2}\right),\ 6A + 4B\left(\cos\frac{\Lambda_1}{2} + \cos\frac{\Lambda_2}{2} + \cos\frac{\Lambda_3}{2}\right)\right],$$
$$\left[4A - 4B\left(\cos\frac{\Lambda_1}{2} + \cos\frac{\Lambda_2}{2}\right) + \widetilde{z}_3,\ 4A + 4B\left(\cos\frac{\Lambda_1}{2} + \cos\frac{\Lambda_2}{2}\right) + \widetilde{z}_3\right],$$
$$\left[4A - 4B\left(\cos\frac{\Lambda_1}{2} + \cos\frac{\Lambda_3}{2}\right) + z_2,\ 4A + 4B\left(\cos\frac{\Lambda_1}{2} + \cos\frac{\Lambda_3}{2}\right) + z_2\right],$$

$$\left[2A-4B\cos\frac{\Lambda_1}{2}+z_2+\widetilde{z}_3,\ 2A+4B\cos\frac{\Lambda_1}{2}+z_2+\widetilde{z}_3\right],$$
$$\left[4A-4B\left(\cos\frac{\Lambda_2}{2}+\cos\frac{\Lambda_3}{2}\right)+z_1,\ 4A+4B\left(\cos\frac{\Lambda_2}{2}+\cos\frac{\Lambda_3}{2}\right)+z_1\right],$$
$$\left[2A-4B\cos\frac{\Lambda_2}{2}+z_1+\widetilde{z}_2,\ 2A+4B\cos\frac{\Lambda_2}{2}+z_1+\widetilde{z}_2\right],$$
$$\left[2A-4B\cos\frac{\Lambda_3}{2}+z_1+z_2,\ 2A+4B\cos\frac{\Lambda_3}{2}+z_1+z_2\right],$$

а дискретный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$– состоит из единственного собственного значения $z_1+z_2+\widetilde{z}_3$, т.е.

$$\sigma_{\rm disc}\big({}^4\widetilde{H}_t^1\big)=\big\{z_1+z_2+\widetilde{z}_3\big\}.$$

Если $z_1+z_2+\widetilde{z}_3\in\sigma_{\rm ess}\big({}^4\widetilde{H}_t^1\big)$, то дискретный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ пуст. □

Теорема 9. *Пусть $\nu=1$ и $U>0$. Тогда существенный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ является объединением семи отрезков*:

$$\sigma_{\rm ess}\big({}^4\widetilde{H}_t^1\big)=\big[a+c+e,\ b+d+f\big]\cup\big[a+c+z_3,\ b+d+z_3\big]\cup$$
$$\cup\big[a+e+\widetilde{z}_2,\ b+f+\widetilde{z}_2\big]\cup\big[a+\widetilde{z}_2+z_3,\ b+\widetilde{z}_2+z_3\big]\cup\big[c+e+\widetilde{z}_1,\ d+f+\widetilde{z}_1\big]\cup$$
$$\cup\big[c+\widetilde{z}_1+z_3,\ d+\widetilde{z}_1+z_3\big]\cup\big[e+\widetilde{z}_1+\widetilde{z}_2,\ f+\widetilde{z}_1+\widetilde{z}_2\big];$$

здесь

$$\widetilde{z}_1=2A+\sqrt{U^2+16B^2\cos^2\frac{\Lambda_1}{2}},\ \widetilde{z}_2=2A+\sqrt{U^2+16B^2\cos^2\frac{\Lambda_2}{2}},\ z_3=2A-2\sqrt{U^2+4B^2\cos^2\frac{\Lambda_3}{2}}.$$

Дискретный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ содержит не более одного собственного значения:

$$\sigma_{\rm disc}\big({}^4\widetilde{H}_t^1\big)=\big\{\widetilde{z}_1+\widetilde{z}_2+zfd_3\big\}\quad\text{либо}\quad\sigma_{\rm disc}\big({}^4\widetilde{H}_t^1\big)=\varnothing.$$

Теорема 9 доказывается аналогично теореме 8. В двумерном случае также имеет место аналог этой теоремы.

Теорема 10. *Пусть $\nu=3$ и $U<0$.*

A. *Если*

$$U<-\frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2},\quad\cos\frac{\Lambda_3^0}{2}>2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},\quad\cos\frac{\Lambda_2^0}{2}>\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}\quad\text{или}\quad\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}>\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$U<-\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2},\quad\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}>2\cos\frac{\Lambda_3^0}{2},\quad\cos\frac{\Lambda_3^0}{2}>2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2}\quad\text{или}\quad\cos\frac{\Lambda_3^0}{2}<2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$U<-\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},\quad\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}<\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},\quad2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}>\cos\frac{\Lambda_3^0}{2}\quad\text{или}\quad\cos\frac{\Lambda_3^0}{2}>2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2},$$

то существенный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ является объединением семи отрезков:

$$\sigma_{\rm ess}\big({}^4\widetilde{H}_t^1\big)=\big[a_1+c_1+e_1,\ b_1+d_1+f_1\big]\cup\big[a_1+c_1+\widetilde{z}_3'',\ b_1+d_1+\widetilde{z}_3''\big]\cup$$
$$\cup\big[a_1+e_1+z_2'',\ b_1+f_1+z_2''\big]\cup\big[a_1+z_2''+\widetilde{z}_3'',\ b_1+z_2''+\widetilde{z}_3''\big]\cup\big[c_1+e_1+z_1'',\ d_1+f_1+z_1''\big]\cup$$
$$\cup\big[c_1+z_1''+\widetilde{z}_3'',\ d_1+z_1''+\widetilde{z}_3''\big]\cup\big[e_1+z_1''+z_2'',\ f_1+z_1''+z_2''\big];\quad(11)$$

здесь и далее

$$a_1=2A-12B\cos\frac{\Lambda_1^0}{2},\quad b_1=2A+12B\cos\frac{\Lambda_1^0}{2},\quad c_1=2A-12B\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

$$d_1 = 2A + 12B\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},\quad e_1 = 2A - 12B\cos\frac{\Lambda_3^0}{2},\quad f_1 = 2A - 12B\cos\frac{\Lambda_3^0}{2},$$

а z_1'', z_2'' *и* $\widetilde{z}_3''$ — *собственные значения операторов* $\widetilde{H}^1_{2\Lambda_1}$, $\widetilde{H}^2_{2\Lambda_2}$ *и* $\widetilde{H}^3_{2\Lambda_3}$, *соответственно. Дискретный спектр оператора* ${}^4\widetilde{H}^1_t$ *содержит не более одного собственного значения*:

$$\sigma_{\rm disc}\big({}^4\widetilde{H}^1_t\big) = \big\{z_1'' + z_2'' + \widetilde{z}_3''\big\},\quad \textit{либо}\quad \sigma_{\rm disc}\big({}^4\widetilde{H}^1_t\big) = \varnothing.$$

B. *Если*

$$-\frac{6B\cos}{W}\frac{\Lambda_3^0}{2} \leqslant U < -\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} > 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < \cos\frac{\Lambda_2^0}{2}$$

или

$$-\frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2} \leqslant U < -\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} > 2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} > \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$-\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2} \leqslant U < -\frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < 2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} > 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$-\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2} \leqslant U < -\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} > \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$-\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2} \leqslant U < -\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < 2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2},$$

или

$$-\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2} \leqslant U < -\frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} > 2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2},$$

то существенный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}^1_t$ *является объединением четырех отрезков*:

$$\sigma_{\rm ess}\big({}^4\widetilde{H}^1_t\big) = \big[a_1 + c_1 + e_1,\ b_1 + d_1 + f_1\big] \cup \big[a_1 + e_1 + z_2'',\ b_1 + f_1 + z_2''\big] \cup \\ \cup \big[c_1 + e_1 + z_1'',\ d_1 + f_1 + z_1''\big] \cup \big[e_1 + z_1'' + z_2'',\ f_1 + z_1'' + z_2''\big]$$

или

$$\sigma_{\rm ess}\big({}^4\widetilde{H}^1_t\big) = \big[a_1 + c_1 + e_1,\ b_1 + d_1 + f_1\big] \cup \big[a_1 + c_1 + \widetilde{z}_3'',\ b_1 + d_1 + \widetilde{z}_3''\big] \cup \\ \cup \big[a_1 + e_1 + z_2'',\ b_1 + f_1 + z_2''\big] \cup \big[a_1 + z_2'' + \widetilde{z}_3'',\ f_1 + z_2'' + \widetilde{z}_3''\big],$$

или

$$\sigma_{\rm ess}\big({}^4\widetilde{H}^1_t\big) = \big[a_1 + c_1 + e_1,\ b_1 + d_1 + f_1\big] \cup \big[a_1 + c_1 + \widetilde{z}_3'',\ b_1 + d_1 + \widetilde{z}_3''\big] \cup \\ \cup \big[c_1 + e_1 + z_1'',\ d_1 + f_1 + z_1''\big] \cup \big[c_1 + z_1'' + \widetilde{z}_3'',\ d_1 + z_1'' + \widetilde{z}_3''\big],$$

а дискретный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}^1_t$ *пуст.*

C. *Если*

$$-\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2} \leqslant U < -\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} > 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < \cos\frac{\Lambda_2^0}{2}$$

или

$$-\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2} \leqslant U < -\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} > 2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} > \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$-\frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2} \leqslant U < -\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} > 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},\quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} > \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$-\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2} \leqslant U < -\frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} > \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$-\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2} \leqslant U < -\frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < 2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$-\frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2} \leqslant U < -\frac{12B}{W}, \cos\frac{\Lambda_1^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

то существенный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ *является объединением двух отрезков*:

$$\sigma_{\mathrm{ess}}\big({}^4\widetilde{H}_t^1\big) = \big[a_1 + c_1 + e_1,\ b_1 + d_1 + f_1\big] \cup \big[c_1 + e_1 + z_1'',\ d_1 + f_1 + z_1''\big],$$

или

$$\sigma_{\mathrm{ess}}\big({}^4\widetilde{H}_t^1\big) = \big[a_1 + c_1 + e_1,\ b_1 + d_1 + f_1\big] \cup \big[a_1 + e_1 + z_2'',\ b_1 + f_1 + z_2''\big],$$

или

$$\sigma_{\mathrm{ess}}\big({}^4\widetilde{H}_t^1\big) = \big[a_1 + c_1 + e_1,\ b_1 + d_1 + f_1\big] \cup \big[a_1 + c_1 + \widetilde{z}_3'',\ b_1 + d_1 + \widetilde{z}_3''\big],$$

а дискретный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ *пуст.*

D. *Если*

$$-\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2} \leqslant U < 0, \quad \text{или} \quad -\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2} \leqslant U < 0, \quad \text{или} \quad -\frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2} \leqslant U < 0,$$

то существенный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ *состоит из единственного отрезка*

$$\sigma_{\mathrm{ess}}\big({}^4\widetilde{H}_t^1\big) = \big[a_1 + c_1 + e_1,\ b_1 + d_1 + f_1\big],$$

а дискретный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ *пуст.*

Доказательство. При $\nu = 3$ из теорем 5 и 7 следует, что если выполняется условие A теоремы 10, то непрерывный спектр оператора $\widetilde{H}_{2\Lambda_1}^1$ является отрезком $\left[2A - 12B\cos\frac{\Lambda_1^0}{2},\ 2A + 12B\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}\right]$, дискретный спектр оператора $\widetilde{H}_{2\Lambda_1}^1$ состоит из единственного собственного значения z_1'', непрерывный спектр оператора $\widetilde{H}_{2\Lambda_2}^2$ является отрезком $\left[2A - 12B\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},\ 2A + 12B\cos\frac{\Lambda_2^0}{2}\right]$, дискретный спектр оператора $\widetilde{H}_{2\Lambda_2}^2$ состоит из единственного собственного значения z_2'', непрерывный спектр оператора $\widetilde{H}_{2\Lambda_3}^3$ является отрезком $\left[2A - 12B\cos\frac{\Lambda_3^0}{2},\ 2A + 12B\cos\frac{\Lambda_3^0}{2}\right]$, дискретный спектр оператора $\widetilde{H}_{2\Lambda_3}^3$ состоит из единственного собственного значения $\widetilde{z}_3''$. Поэтому существенный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ является объединением семи отрезков, а дискретный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ содержит не более одного собственного значения.

Если выполняется условие B теоремы 10, то лишь один из операторов $\widetilde{H}_{2\Lambda_2}^2$, $\widetilde{H}_{2\Lambda_2}^2$ и $\widetilde{H}_{2\Lambda_3}^3$ обладает единственным собственным значением, а дискретные спектры остальных двух операторов пусты. Поэтому существенный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ является объединением двух отрезков, а дискретный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ пуст.

Остальные утверждение теоремы 10 доказывается аналогично. □

Теорема 11. *Пусть* $\nu = 3$ *и* $U > 0$.

A. *Если*

$$U > \frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} > 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_2^0}{2} > \cos\frac{\Lambda_1^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} > \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$U > \frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_2^0}{2} < \cos\frac{\Lambda_1^0}{2}, \quad 2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2} > \cos\frac{\Lambda_3^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$U > \frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < \cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad 2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2} > \cos\frac{\Lambda_3^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} > 2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2},$$

то существенный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ *является объединением семи отрезков*:

$$\sigma_{\text{ess}}\bigl({}^4\widetilde{H}_t^1\bigr) = \bigl[a_1+c_1+e_1,\ b_1+d_1+f_1\bigr] \cup \bigl[a_1+c_1+z_3'',\ b_1+d_1+z_3''\bigr] \cup \\ \cup \bigl[a_1+e_1+\widetilde{z}_2'',\ b_1+f_1+\widetilde{z}_2''\bigr] \cup \bigl[a_1+\widetilde{z}_2''+z_3'',\ b_1+\widetilde{z}_2''+z_3''\bigr] \cup \bigl[c_1+e_1+\widetilde{z}_1'',\ d_1+f_1+\widetilde{z}_1''\bigr] \cup \\ \cup \bigl[c_1+\widetilde{z}_1''+z_3'',\ d_1+\widetilde{z}_1''+z_3''\bigr] \cup \bigl[e_1+\widetilde{z}_1''+\widetilde{z}_2'',\ f_1+\widetilde{z}_1''+\widetilde{z}_2''\bigr];$$

здесь $\widetilde{z}_1''$, $\widetilde{z}_2''$ *и* z_3'' — *собственные значения операторов* $\widetilde{H}_{2\Lambda_1}^1$, $\widetilde{H}_{2\Lambda_2}^2$ *и* $\widetilde{H}_{2\Lambda_3}^3$, *соответственно.*

Дискретный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ *содержит не более одного собственного значения*:

$$\sigma_{\text{disc}}\bigl({}^4\widetilde{H}_t^1\bigr) = \bigl\{\widetilde{z}_1''+\widetilde{z}_2''+z_3''\bigr\} \quad \text{либо} \quad \sigma_{\text{disc}}\bigl({}^4\widetilde{H}_t^1\bigr) = \varnothing.$$

B. *Если*

$$\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2} < U \leqslant \frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} > 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < U \leqslant \frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} > 2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} > \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$\frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < U \leqslant \frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} > \cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} > 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2} < U \leqslant \frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} > \cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < U \leqslant \frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < \cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < 2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2},$$

или

$$\frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < U \leqslant \frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < \cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

то существенный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ *является объединением четырех отрезков*:

$$\sigma_{\text{ess}}\bigl({}^4\widetilde{H}_t^1\bigr) = \bigl[a_1+c_1+e_1,\ b_1+d_1+f_1\bigr] \cup \bigl[a_1+e_1+\widetilde{z}_2'',\ b_1+f_1+\widetilde{z}_2''\bigr] \cup \\ \cup \bigl[c_1+e_1+\widetilde{z}_1'',\ d_1+f_1+\widetilde{z}_1''\bigr] \cup \bigl[e_1+\widetilde{z}_1''+\widetilde{z}_2'',\ f_1+\widetilde{z}_1''+\widetilde{z}_2''\bigr],$$

или

$$\sigma_{\text{ess}}\bigl({}^4\widetilde{H}_t^1\bigr) = \bigl[a_1+c_1+e_1,\ b_1+d_1+f_1\bigr] \cup \bigl[a_1+c_1+z_3'',\ b_1+d_1+z_3''\bigr] \cup \\ \bigl[a_1+e_1+\widetilde{z}_2'',\ b_1+f_1+\widetilde{z}_2''\bigr] \cup \bigl[a_1+\widetilde{z}_2''+z_3'',\ f_1+\widetilde{z}_2''+z_3''\bigr],$$

или

$$\sigma_{\text{ess}}\bigl({}^4\widetilde{H}_t^1\bigr) = \bigl[a_1+c_1+e_1,\ b_1+d_1+f_1\bigr] \cup \bigl[a_1+c_1+z_3'',\ b_1+d_1+z_3''\bigr] \cup \\ \cup \bigl[c_1+e_1+\widetilde{z}_1'',\ d_1+f_1+\widetilde{z}_1''\bigr] \cup \bigl[c_1+\widetilde{z}_1''+z_3'',\ d_1+\widetilde{z}_1''+z_3''\bigr],$$

а дискретный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ *пуст.*

C. *Если*

$$\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < U \leqslant \frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} > 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2} < U \leqslant \frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} > 2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} > \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2} < U \leqslant \frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < 2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} > \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$\frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < U \leqslant \frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < 2\cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} > \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$\frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < U \leqslant \frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < 2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

или

$$\frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < U \leqslant \frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_3^0}{2} < 2\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}, \quad \cos\frac{\Lambda_1^0}{2} < \cos\frac{\Lambda_2^0}{2},$$

то существенный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ *является объединением двух отрезков*:

$$\sigma_{\text{ess}}\big({}^4\widetilde{H}_t^1\big) = \big[a_1+c_1+e_1,\ b_1+d_1+f_1\big] \cup \big[c_1+e_1+\widetilde{z}_1'',\ d_1+f_1+\widetilde{z}_1''\big],$$

или

$$\sigma_{\text{ess}}\big({}^4\widetilde{H}_t^1\big) = \big[a_1+c_1+e_1,\ b_1+d_1+f_1\big] \cup \big[a_1+e_1+\widetilde{z}_2'',\ b_1+f_1+\widetilde{z}_2''\big],$$

или

$$\sigma_{\text{ess}}\big({}^4\widetilde{H}_t^1\big) = \big[a_1+c_1+e_1,\ b_1+d_1+f_1\big] \cup \big[a_1+c_1+z_3'',\ b_1+d_1+z_3''\big],$$

а дискретный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ *пуст.*

D. *Если*

$$0 < U \leqslant \frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_1^0}{2}, \quad \text{или} \quad 0 < U \leqslant \frac{12B}{W}\cos\frac{\Lambda_2^0}{2}, \quad \text{или} \quad 0 < U \leqslant \frac{6B}{W}\cos\frac{\Lambda_3^0}{2},$$

то существенный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ *состоит из единственного отрезка*:

$$\sigma_{\text{ess}}\big({}^4\widetilde{H}_t^1\big) = \big[a_1+c_1+e_1,\ b_1+d_1+f_1\big],$$

а дискретный спектр оператора ${}^4\widetilde{H}_t^1$ *пуст.*

Теорема 11 доказывается аналогично теореме 10.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Вальков В. В., Овчинников С. Г., Петраковский О. Г.* Спектр возбуждений двухмагнонных систем в легкоосном квазимерном ферромагнетике// Физика твердого тела. — 1988. — *30*. — С. 3044–3047.
2. *Изюмов Ю. А.* Модель Хаббарда в режиме сильных корреляций// Усп. физ. наук. — 1995. — *165*, № 4. — С. 403–427.
3. *Изюмов Ю. А., Чащин Н. И., Алексеев Д. С.* Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала. — М.-Ижевск, 2006.
4. *Карпенко Б. В., Дякин В. В., Будрина Г. Л.* Двухэлектронные системы в модели Хаббарда// Физика металлов и металловедение. — 1986. — *61*, № 4. — С. 702–706.
5. *Овчинников С. Г., Шнейдер Е. И.* Спектральные функции модели Хаббарда в случае половинного заполнения// Физика твердого тела. — 2004. — *46*, № 8. — С. 1428–1432.

6. *Ташпулатов С. М.* О спектральных свойствах трехэлектронных систем в модели Хаббарда// Теор. мат. физ. — 2014. — *179*, № 3. — С. 387–405.
7. *Ташпулатов С. М.* Структура существенного спектра и дискретный спектр оператора энергии шестиэлектронных систем в модели Хаббарда. Второе синглетное состояние// Тр. Ин-та мат. мех. УрО РАН. — 2023. — *29*, № 3. — С. 210–230.
8. *Anderson P. W.* Localized magnetic states in metals// Phys. Rev. — 1961. — *124.* — P. 41–53.
9. *Arovas D. P., Berg E., Kivelson S., Raghy S.* The Hubbard model// Ann. Rev. Condens. Matter Phys. — 2022. — *13.* — P. 239–274.
10. *Gutzwiller M. C.* Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals// Phys. Rev. Lett. — 1963. — *10.* — P. 159–162.
11. *Hubbard J.* Electron correlations in narrow energy bands// Proc. Roy. Soc. A. — 1963. — *276.* — P. 238–257.
12. *Ichinose T.* Spectral properties of tensor products of linear pperators. I// Trans. Am. Math. Soc. — 1978. — *235.* — P. 75–113.
13. *Ichinose T.* Spectral properties of tensor products of linear operators. II. The approximate point spectrum and Kato essential spectrum// Trans. Am. Math. Soc. — 1978. — *237.* — P. 223–254.
14. *Ichinose T.* Tensor products of linear oOperators. Spectral theory// in: Banach Center Publications. Vol. 8. — Warsaw: Polish Scientific Publishers, 1982. — P. 294–300.
15. *Kanamori J.* Electron correlation and ferromagnetism of transition metals// Progr. Theor. Phys. — 1963. — *30.* — P. 275–289.
16. *Reed M., Simon B.* Methods of Modern Mathematical Physics. Vol 1. Functional Analysis. — New York: Academic Press, 1972.
17. *Reed M., Simon B.* Methods of Modern Mathematical Physics. Vol 4. Operator Analysis. — New York: Academic Press, 1982.
18. *Tashpulatov S. M.* Spectra of the energy operator of four-electron systems in the triplete state in the Hubbard model// J. Phys. Conf. Ser. — 2016. — *697.* — 012025.
19. *Tashpulatov S. M.* The structure of essential spectra and discrete spectrum of four-electron systems in the Hubbard model in a singlet state// Lobachevskii J. Math. — 2017. — *38*, № 3. — P. 530–541.
20. *Tashpulatov S. M.* Structure of essential spectrum and discrete spectra of the energy operator of five-electron systems in the Hubbard model-doublet state// in: Operator Theory and Differential Equations (*Kusraev A. G., Totieva Z. D.*, eds.). — cham: Birkhäuser, 2021. — P. 275—301.
21. *Tashpulatov S. M.* The structure of essential spectra and discrete spectrum of the energy operator of five-electron systems in the Hubbard model. Fifth doublet state// Bull. Inst. Math. — 2018. — *5.* — P. 43–52.
22. *Tashpulatov S. M.* Structure of the essential and discrete spectra of the energy operator of five-electron systems in the Hubbard model. Third and Fourth doublet states// J. Appl. Math. Phys. — 2020. — *8*, № 12. — P. 2886–2918.
23. *Tashpulatov S. M.* Structure of the essential and discrete spectra of the energy operator of five-electron systems in the Hubbard model. Sextet and quartet states// Am. Rev. Math. Stat. — 2021. — *9.* — P. 12–40.
24. *Tashpulatov S. M.* Structure of the essential and discrete spectra of the energy operator of five-electron systems in the Hubbard model. Fourth quartet state// Far Eastern Math. J. — 2023. — *23*, № 1. — P. 112–133.

ДЕКЛАРАЦИЯ АВТОРА

Конфликт интересов. Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Финансирование. Автор заявляет об отсутствии финансовой поддержки от каких-либо организаций или частных лиц.

Финансовые интересы. Автор заявляет об отсутствии подлежащих раскрытию финансовых или нефинансовых интересов, связанных с публикуемым материалом.

Ташпулатов Садулла Мамаражабович (Tashpulatov Sadulla Mamarazhabovich)
Институт ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан, Ташкент
(Institute of Nuclear Physics of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent)
E-mail: `sadullatashpulatov@yandex.ru, toshpul@mail.ru`