Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theoretische Festkörperphysik

Übungen zur Theorie der Kondensierten Materie WS 13/14

Prof. Dr. G. Schön
Dr. M. Marthaler

Lösungsvorschlag zu Blatt 1
04.11.2013

---

1. Stoner Magentismus (A)

uf Aufgabenblatt 2 haben wir einen Tight-Binding Hamilton-Operator diagonalisiert. Wenn mann zu diesem Hamiltonian noch einen Elektronen-Elektronen Wechselwirkungsterm hinzufügt erhält man den Hubbard-Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \mathbf{r},\mathbf{r}' \rangle} \sum_{\sigma} \left[c^\dagger_{\mathbf{r},\sigma} c_{\mathbf{r}',\sigma} + c_{\mathbf{r}',\sigma} c^\dagger_{\mathbf{r},\sigma} \right] + U \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r},\uparrow} n_{\mathbf{r},\downarrow} \tag{1}$$

mit fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $c^\dagger$, c, dem „Hopping-Matrixelement“ t, $\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle$ bezeichnet die Summation über benachbarte Gitterplätze, σ den Spin und wir verwenden die definition $n_{\mathbf{r},\sigma} = c^\dagger_{\mathbf{r},\sigma} c_{\mathbf{r},\sigma}$.

(a) Wir betrachten nun die Anzahl-Operatoren $n_{\mathbf{r},\sigma}$ um ihren Mittelwert und erhalten

$$\begin{aligned} n_{\mathbf{r},\uparrow} n_{\mathbf{r},\downarrow} &\approx \langle n_{\mathbf{r},\uparrow} \rangle \langle n_{\mathbf{r},\downarrow} \rangle + \langle n_{\mathbf{r},\uparrow} \rangle (n_{\mathbf{r},\downarrow} - \langle n_{\mathbf{r},\downarrow} \rangle) + (n_{\mathbf{r},\uparrow} - \langle n_{\mathbf{r},\uparrow} \rangle) \langle n_{\mathbf{r},\downarrow} \rangle \\ &= \langle n_{\mathbf{r},\uparrow} \rangle n_{\mathbf{r},\downarrow} + \langle n_{\mathbf{r},\downarrow} \rangle n_{\mathbf{r},\uparrow} - \langle n_{\mathbf{r},\uparrow} \rangle \langle n_{\mathbf{r},\downarrow} \rangle \end{aligned} \tag{2}$$

Dies ist eine gute Näherung wenn die Fluktuationen um den Mittelwert klein bleiben. Allerdings wird die sogenannte 'Molekularfeld-Näherung' dazu benutzt um Phasenübergänge zu analysieren. Aber gerade an einem kritischen Punkt, sind die Fluktuationen groß.

(b) Wir nehmen nun noch Zusätzlich an dass die mittlere Anzahl an Elektronen auf jedem Gitterplatz gleich ist, $\langle n_{\mathbf{r},\sigma} \rangle = \langle n_\sigma \rangle$. Nun können wir den Hamilton-Operator in folgende Form bringen:

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\epsilon(\mathbf{k}) + U \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle) c^\dagger_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} \tag{3}$$

Hierbei ist $\bar{\sigma}$ immer die entgegengesetzte Spin-Richtung zu σ.
Dazu lassen wir zuerst eine unwesentliche Konstante wegefallen und schreiben,

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle \mathbf{r},\mathbf{r}' \rangle} \sum_{\sigma} \left[c^\dagger_{\mathbf{r},\sigma} c_{\mathbf{r}',\sigma} + c_{\mathbf{r}',\sigma} c^\dagger_{\mathbf{r},\sigma} \right] + U \sum_{\mathbf{r},\sigma} \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle n_{\mathbf{r},\sigma} \tag{4}$$

Bereits auf Aufgabenblatt 2 haben wir gezeigt wie der erste Term im Hamiltonoperator diagonalisiert werden kann. Dazu verwendeten wir die Transformation,

$$c^\dagger_{r\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N^D}} \sum_k^{BZ} e^{ik\cdot r} c^\dagger_{k\sigma} \tag{5}$$

$$c_{r\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N^D}} \sum_k^{BZ} e^{-ik\cdot r} c_{k\sigma} \tag{6}$$

$$\tag{7}$$

Damit ergibt sich auch

$$\sum_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{r}\sigma} = \frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{k}}^{BZ} \sum_{\mathbf{k}'}^{BZ} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}}^{BZ} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \tag{8}$$

und

$$U \sum_{\mathbf{r},\sigma} \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle n_{\mathbf{r},\sigma} = U \sum_{\mathbf{k},\sigma} \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle n_{\mathbf{k},\sigma} \tag{9}$$

Daraus ergibt sich der oben gezeigte Hamilton-Operator.

(c) Es ist nun zu zeigen das der Erwartungswert für die anzahl an Elektronen gegeben ist durch,

$$\langle n_\sigma \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon(\mathbf{k})-\mu+U\langle n_{\bar{\sigma}}\rangle)} + 1} \,. \tag{10}$$

Aus der Statistischen Thermodynamik wissen wir das,

$$\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \frac{1}{\exp(\beta(\epsilon(\mathbf{k} - \mu + U\langle n_{\bar{\sigma}}\rangle))) + 1} \tag{11}$$

Wir benutzen nun die Transformation vom Impulsraum in den Ortsraum,

$$\langle n_{\mathbf{r},\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{12}$$

Da der Mittelwert auf allen Gitterplätzen gleich ist wählen wir $\mathbf{r} = 0$. Damit ergibt sich

$$\langle n_\sigma \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\exp(\beta(\epsilon(\mathbf{k} - \mu + U\langle n_{\bar{\sigma}}\rangle))) + 1} \tag{13}$$

(d) (4 Punkte) Nun definieren wir die Teilchzahl $n = \langle n_\uparrow \rangle + \langle n_\downarrow \rangle$ und die normalisierte Magnetisierung $m = \langle n_\uparrow \rangle - \langle n_\downarrow \rangle$. Damit ergibt sich,

$$\langle n_\uparrow \rangle = (n+m)/2 \tag{14}$$
$$\langle n_\downarrow \rangle = (n-m)/2 \tag{15}$$

oder

$$\langle n_\sigma \rangle = (n+\sigma m)/2 \tag{16}$$
$$\tag{17}$$

Damit können wir schreiben

$$n = \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\exp(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu + U(n-\sigma m)/2)) + 1} \tag{18}$$

$$m = \frac{1}{N} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\sigma}{\exp(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu + U(n-\sigma m)/2))) + 1} \tag{19}$$

(e) Wir definieren nun ein neues chemisches Potential, $\mu \to \mu_r = \mu - Un/2$. Damit bekommen wir

$$\begin{aligned}
m &= \frac{1}{N}\sum_\sigma\sum_{\mathbf{k}} \frac{\sigma}{\exp(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_r - U\sigma m/2))) + 1} && (20)\\
&= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{1}{\exp(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_r - Um/2)) + 1} - \frac{1}{\exp(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_r + Um/2)) + 1}\right]\\
&= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\exp(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_r + Um/2))) - \exp(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_r - Um/2)))}{(\exp(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_r - Um/2)) + 1)(\exp(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_r + Um/2)) + 1)}\right]\\
&= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \frac{(\exp(\beta Um/2) - \exp(-\beta Um/2))e^{\beta(\epsilon(\mathbf{k})-\mu_r)}}{(\exp(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_r - Um/2)) + 1)(\exp(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_r + Um/2)) + 1)}\\
&= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \frac{(\exp(\beta Um/2) - \exp(-\beta Um/2))}{e^{\beta(\epsilon(\mathbf{k})-\mu_r)}(e^{-\beta Um/2} + e^{-\beta(\epsilon(\mathbf{k})-\mu_r)})(e^{\beta Um/2} + e^{-\beta(\epsilon(\mathbf{k})-\mu_r)})}\\
&= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \frac{\sinh(\beta Um/2)}{\cosh(\beta Um/2) + \cosh(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_r))}
\end{aligned}$$

(f)

$$a = \frac{U\beta}{2}\int d\omega\rho(\omega)\frac{1}{1+\cosh(\beta(\omega-\mu_r))} \tag{21}$$

$$b = -\frac{U^3\beta^3}{48}\int d\omega\rho(\omega)\frac{\cosh(\beta(\omega-\mu_r)) - 2}{(1+\cosh(\beta(\omega-\mu_r)))^2} \tag{22}$$

Für welche Werte von a und b ist eine Lösung $|m| > 0$ möglich: a¿1 und b¿0.

2. Stoner-Instabilität (4 Punkte)

In dieser Aufgabe sollen sie die paramagnetische Suszeptibilität im Rahmen der phänomenologischen Landau Fermi-Flssigkeitstheorie herleiten und zeigen, dass die Wechselwirkung zur sog. ferromagentischen Stoner-Instabilität führt.

In der Landau Fermi-Flüssigkeitstheorie wird die Korrektur der Energie der Quasiteilchen geschrieben als

$$\delta\epsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \sum_{\mathbf{p}',\sigma'} f_{\mathbf{p}\sigma,\mathbf{p}'\sigma'}\delta n_{\mathbf{p}'\sigma'} \tag{23}$$

wobei $\delta n_{\mathbf{p}'\sigma'}$ eine Änderung der Teilchendichte ist. Das Landau-Parameter $f_{\mathbf{p}\sigma,\mathbf{p}'\sigma'}$ hängt dabei von den zwei Spin-Richtungen ab. Wir können diese Abhängigkeiten explizit schreiben als,

$$f_{\mathbf{p}\sigma,\mathbf{p}'\sigma'} = f^s_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} + \sigma\sigma' f^a_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \tag{24}$$

Sie können weiter verwenden, dass

$$\delta n_{\mathbf{p}'\sigma'} = \frac{\partial n}{\partial\epsilon_{\mathbf{p}'\sigma'}}\delta\epsilon_{\mathbf{p}'\sigma'} \ . \tag{25}$$

Desweiteren können sie annehmen, dass uns nur die Modifikation der Energien an der Fermi-Kante interessiert,

$$\frac{\partial n}{\partial\epsilon_{\mathbf{p}'\sigma'}} = -\delta(\epsilon_{\mathbf{p}'\sigma'} - \epsilon_F) \ . \tag{26}$$

Damit lässt sich nun die Summation/Integration über die Impulse ausführen, und Gl. (23) lässt sich kompakt schreiben indem man folgende Konstanten einführt,

$$F_0^{s(a)} = D(\epsilon_F) \int \frac{d\Omega}{4\pi} f^{s(a)}(\cos\theta) \,. \tag{27}$$

$F_0^{s(a)}$ kann Temperaturabhängig sein.

(a) (4 Punkte) Wir betrachten das System in einem äusseren Magnetfeld. Es ergibt sich eine Korrektur der Energie nach dem Zeman Effekt

$$\delta\epsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \mu_B H\sigma + \sum_{\mathbf{p}',\sigma'} f_{\mathbf{p}\sigma,\mathbf{p}'\sigma'} \delta n_{\mathbf{p}'\sigma'} \,. \tag{28}$$

Mit den oben genannten Angaben lässt sich nun $\delta\epsilon_{\mathbf{p}\sigma}$ schreiben als,

$$\delta\epsilon_{p_F\sigma} = \mu_B H\sigma - \sum_{\sigma'} (F_0^s + \sigma\sigma' F_0^a) \delta\epsilon_{p_F\sigma'} \tag{29}$$

Wir lösen diese Aufgabe durch den Ansatz,

$$\delta\epsilon_{p_F\sigma} = A\mu_B H\sigma \tag{30}$$

Damit ergibt sich

$$\sum_{\sigma'} F_0^s \sigma' = 0 \tag{31}$$

und

$$\sum_{\sigma'} \sigma\sigma' F_0^a \sigma' = 2\sigma F_0^a \tag{32}$$

und damit

$$A\mu_B H\sigma = \mu_B H\sigma - 2\sigma F_0^a A\mu_B H \;\Rightarrow\; A = 1 + 2AF_0^a \tag{33}$$

Dementsprechend,

$$\delta\epsilon_{p_F\sigma} = \frac{\mu_B H\sigma}{1 + 2F_0^a} \tag{34}$$

(b) Wirberechnen nun die Magnetisierung des Systems und die paramagnetische Suszptibilität.

$$\begin{aligned} M &= -\mu_B \sum_{\mathbf{p}} (\delta n_{\mathbf{p}\uparrow} - \delta n_{\mathbf{p}\downarrow}) && (35) \\ &= -\mu_B D(\epsilon_F)(\delta\epsilon_{p_F\uparrow} - \delta\epsilon_{p_F\downarrow}) && (36) \\ &= -2\mu_B D(\epsilon_F) \frac{\mu_B H}{1 + 2F_0^a} && (37) \end{aligned}$$

Suszptibilität

$$M = \xi H \;\Rightarrow\; \xi = -2\mu_B D(\epsilon_F) \frac{\mu_B}{1 + 2F_0^a} \tag{38}$$

ξ divergiert für $F_0^a = -1/2$. Dies nennt man ferromagentische Instabilität, da es sozusagen auch für $H = 0$ eine endliche Magnetisierung gibt.