

## Theorie der Kondensierten Materie I WS 2014/2015

Prof. Dr. A. Mirlin, Dr. I. Gornyi  
U. Briskot, N. Kainaris, Dr. E. KönigBlatt 9: Lösungen  
Besprechung 08.01.2015

## 1. Coulomb Wechselwirkung in Graphen: (3+5+7=15 Punkte)

Auf Übungsblatt 3 haben Sie schon gelernt, dass der Hamilton-Operator in Graphen in der Nähe des Dirac-Punktes als eine  $2 \times 2$  Matrix dargestellt wird

$$\mathcal{H} = v \begin{pmatrix} 0 & p_x + ip_y \\ p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix}.$$

Dieses Verhalten ist korrekt für Impulse  $|\mathbf{p}| < \Lambda$ , wobei  $\Lambda$  ein cut-off Impuls ist ( $\Lambda \sim 1/a$ , wobei  $a$  die Gitterkonstante ist). Das Energie-Spektrum ist dann linear  $E_{\mathbf{p}} = \pm v|\mathbf{p}|$ .

## (a) Dielektrizitätskonstante in Graphen.

Betrachten Sie eine einzelne Graphen-Schicht zwischen zwei Isolatoren mit Dielektrizitätskonstanten  $\epsilon_1$  bzw.  $\epsilon_2$ . Betrachten Sie die Coulomb-Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen in Graphen. Zeigen Sie mit der Hilfe der Maxwell-Gleichungen und Randbedingungen für das elektrische Feld an Grenzflächen, dass die Coulomb-Wechselwirkung von der Form

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^2}{\epsilon} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

ist. Hier haben wir Gaussche Einheiten verwendet. Bestimmen Sie  $\epsilon$  als Funktion von  $\epsilon_1$  und  $\epsilon_2$ .

**Lösung:**

Wir nutzen im folgenden die Vektoren  $\mathbf{x} = (x, y)$  und  $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$  und die Konvention  $q = |\mathbf{q}|$ . Die Poissongleichung für das Coulomb-Potential  $\varphi$  lautet

$$\Delta[\epsilon(z)\varphi(\mathbf{x}, z)] = -4\pi\rho(\mathbf{x}, z). \quad (1)$$

Wir wählen die Dielektrizitätskonstante als

$$\epsilon(z) = \begin{cases} \epsilon_1, & z > 0 \\ \epsilon_2, & z < 0 \end{cases}. \quad (2)$$

Wir lösen die Poissongleichung durch Fouriertransformation

$$\epsilon(z)(\partial_z^2 - q^2)\varphi(\mathbf{q}, z) = -4\pi\rho(\mathbf{q}, z). \quad (3)$$

Da die Isolatorschichten keine freien Ladungen enthalten gilt  $\rho(\mathbf{q}, z \neq 0) = 0$  und wir erhalten die Lösung

$$\varphi(\mathbf{q}, z) = \begin{cases} A_+ e^{-qz}, & z > 0 \\ A_- e^{qz}, & z < 0 \end{cases}. \quad (4)$$

Die unbestimmten Konstanten  $A_{\pm}$  folgen aus den Randbedingungen. Das Potential ist stetig an der Grenzfläche,  $\varphi(\mathbf{q}, z \rightarrow 0+) = \varphi(\mathbf{q}, z \rightarrow 0-)$  und somit  $A_+ = A_- \equiv A$ . Für das elektrische Feld gilt

$$\epsilon_1 E_z(\mathbf{q}, z \rightarrow 0+) - \epsilon_2 E_z(\mathbf{q}, z \rightarrow 0-) = 4\pi\sigma(\mathbf{q}), \quad (5)$$

mit der Oberflächenladung  $\sigma$ . Dabei ist

$$E_z(\mathbf{q}, z \rightarrow 0\pm) = - \left. \frac{d\varphi(\mathbf{q}, z)}{dz} \right|_{z \rightarrow 0\pm} = \pm Aq. \quad (6)$$

Somit erhalten wir

$$A = \frac{2\pi\sigma(\mathbf{q})}{\epsilon q}, \quad (7)$$

mit der effektiven elektrischen Konstanten

$$\epsilon = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2}. \quad (8)$$

Das Potential ist somit

$$\varphi(\mathbf{q}, z) = \frac{2\pi\sigma(\mathbf{q})}{\epsilon q} e^{-q|z|}. \quad (9)$$

Die Ladungsdichte einer Testladung ist  $\sigma(\mathbf{q}) = e \exp(-\eta q)$ ,  $\eta \rightarrow 0$ . Um die Form des Potentials in der Graphenschicht ( $z=0$ ) in der Ortsdarstellung zu erhalten führen wir eine Fouriertransformation in  $(q_x, q_y, q_z)$  durch.

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{x}, z=0) &= \frac{2\pi e}{\epsilon} \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} \frac{e^{-\eta q}}{q} \\ &= \frac{e}{\epsilon} \int_0^\infty \frac{dq}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{iqx \cos(\theta)} e^{-\eta q} \\ &= \frac{e}{\epsilon} \int_0^\infty dq J_0(qx) e^{-\eta q} \\ &\stackrel{\eta \rightarrow 0}{=} \frac{e}{\epsilon} \frac{1}{x}. \end{aligned} \quad (10)$$

Daraus erhalten wir das elektrische Potential

$$V(\mathbf{r}) = e\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\epsilon} \frac{e^2}{|\mathbf{r}|}. \quad (11)$$

(b) **Coulomb-Matrixelemente.**

Betrachten Sie den Hamiltonian der Coulomb-Wechselwirkung von der Form

$$V = \frac{e^2}{2\epsilon} \sum_{\sigma, \sigma' = \{\uparrow, \downarrow\}} \sum_{\tau, \tau' = \{K, K'\}} \int d^2\mathbf{x} d^2\mathbf{y} \frac{\rho_{\sigma\tau}(\mathbf{x}) \rho_{\sigma'\tau'}(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}$$

mit Dichteoperator  $\rho_{\sigma\tau}(\mathbf{x}) = \psi_{\sigma\tau}^\dagger(\mathbf{x}) \psi_{\sigma\tau}(\mathbf{x})$ . Hier bezeichnet  $\sigma$  den elektronischen Spin und  $\tau$  den Valley-Pseudospin. Die Dielektrizitätskonstante  $\epsilon$  ist wie in Aufgabe 1a berechnet eine Funktion von  $\epsilon_1$  und  $\epsilon_2$ , den Dielektrizitätskonstanten der beiden

Medien, die die Graphen-Schicht einschließen. Finden Sie die Matrixelemente der Coulomb-Wechselwirkung in der Eigenbasis des Hamilton-Operators.

**Lösung:**

Wir bestimmen zunächst die Eigenbasis des Hamilton-Operators. Dazu führen wir Polarkoordinaten ein

$$p_x = p \cos(\varphi_{\mathbf{p}}), \quad p_y = p \sin(\varphi_{\mathbf{p}}). \quad (12)$$

mit  $p = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$ . Der Hamilton-Operator lautet somit

$$\mathcal{H} = vp \begin{pmatrix} 0 & e^{i\varphi_{\mathbf{p}}} \\ e^{-i\varphi_{\mathbf{p}}} & 0 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Die Eigenwerte und (normierten) Eigenvektoren sind

$$E_{\mathbf{p},a} = avp, \quad \psi_{\mathbf{p},a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} ae^{-i\varphi_{\mathbf{p}}} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Hierbei ist  $a = \pm$  der Bandindex. Die Eigenzustände sind vierfach entartet in den Spin und Valley-Pseudospin Indizes. Nun entwickeln wir den Elektron-Feldoperator in diesen Eigenfunktionen

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p},a} \psi_{\mathbf{p},a}(\mathbf{r}) \hat{c}_{\mathbf{p},a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p},a} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \begin{pmatrix} ae^{-i\varphi_{\mathbf{p}}} \\ 1 \end{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{p},a}. \quad (15)$$

Der Dichteoperator ist somit

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \psi^\dagger(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \sum_{a,a'} e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\mathbf{r}} \hat{c}_{\mathbf{p},a}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}',a'} \lambda_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}^{a,a'}, \quad (16)$$

wobei

$$\lambda_{\mathbf{p},\mathbf{p}'}^{a,a'} = \frac{1}{2} (1 + aa' e^{i(\varphi_{\mathbf{p}} - \varphi_{\mathbf{p}'})}). \quad (17)$$

Die Coulomb-Wechselwirkung in der Eigenbasis des Hamilton-Operators ist somit gegeben durch

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} \sum_{\tau,\tau'} \int d^2r d^2r' \hat{\rho}_{\sigma,\tau}(\mathbf{r}) U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho_{\sigma',\tau'}(\mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{2} \sum_{a,a',b,b'} \sum_{\sigma,\sigma'} \sum_{\tau,\tau'} \int \frac{d^2k}{2\pi} \frac{d^2p}{2\pi} \frac{d^2q}{2\pi} U(q) \hat{c}_{\mathbf{k},a,\sigma,\tau}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},a',\sigma,\tau} \hat{c}_{\mathbf{p},b,\sigma',\tau'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}+\mathbf{q},b',\sigma',\tau'} \times \\ &\quad \times \lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{a,a'} \lambda_{\mathbf{p},\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{b,b'}. \end{aligned} \quad (18)$$

(c) **Hartree-Fock Näherung.**

Betrachten Sie die Coulomb-Wechselwirkung in der Hartree-Fock Näherung und berechnen Sie die Korrektur zur Energie des Grundzustandes des Systems. Zeigen Sie, dass die Energie der Elektronen mit der Hartree-Fock Korrektur von der Form

$$E_{\mathbf{p}}^{HF} = \pm v(p)|\mathbf{p}|, \quad v(p) = v \left( 1 + A \frac{e^2}{\hbar v \epsilon} \ln \frac{\Lambda}{|\mathbf{p}|} \right)$$

ist, wobei  $A$  eine Konstante ist. Bestimmen Sie  $A$ .

### Lösung

In der Hartree-Fock Näherung nutzt man die Identität

$$AB = \langle A \rangle B + \langle B \rangle A - \langle A \rangle \langle B \rangle + (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) \quad (19)$$

für Operatoren  $A$  und  $B$  und vernachlässigt Fluktuationen um den Grundzustand (letzter Term). In unserem Fall entkoppeln wir das Produkt zweier Dichteoperatoren. In diesem Fall vernachlässigen wir auch den Term der  $\langle A \rangle \langle B \rangle$  entspricht, da dieser nur das chemische Potential verschiebt. Es gibt zwei Möglichkeiten die Elektron-Feldoperatoren zu kombinieren.

1. Hartree, z.B.

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{k},a,\sigma,\tau}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},a',\sigma,\tau} \rangle = \delta_{a,a'} \delta_{\mathbf{q},\mathbf{0}}. \quad (20)$$

Diese Beiträge kürzen sich mit der positiven Ladung der Ionen und werden im folgenden nicht betrachtet.

2. Fock, z.B.

$$\langle \hat{c}_{\mathbf{k},a,\sigma,\tau}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}+\mathbf{q},b',\sigma',\tau'} \rangle = \delta_{a,b'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{p}+\mathbf{q}} \delta_{a,-} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\tau,\tau'}. \quad (21)$$

Im folgenden nehmen wir an, dass nur das untere Band gefüllt ist [ansonsten würden sich die Beiträge beider Bänder aufheben].

Des weiteren benötigen wir die Matrixelemente der Coulomb-Wechselwirkung

$$\begin{aligned} \lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{a,a'} \lambda_{\mathbf{p},\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{b,b'} &= \frac{1}{4} (1 + aa' e^{i(\varphi_{\mathbf{k}} - \varphi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})}) (1 + bb' e^{i(\varphi_{\mathbf{p}} - \varphi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})}) \\ &= \frac{1}{4} (1 + aa' e^{i(\varphi_{\mathbf{k}} - \varphi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})} + bb' e^{i(\varphi_{\mathbf{p}} - \varphi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})} + aa' bb' e^{i(\varphi_{\mathbf{k}} - \varphi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \varphi_{\mathbf{p}} - \varphi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})}). \end{aligned} \quad (22)$$

Damit erhalten wir die Wechselwirkung

$$\begin{aligned} V^{\text{HF}} &= -\frac{1}{2} \sum_{a,a',b,b'} \sum_{\sigma,\sigma'} \sum_{\tau,\tau'} \int \frac{d^2k}{2\pi} \frac{d^2p}{2\pi} \frac{d^2q}{2\pi} U(q) \lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{a,a'} \lambda_{\mathbf{p},\mathbf{p}+\mathbf{q}}^{b,b'} \times \\ &\quad \times \left[ \hat{c}_{\mathbf{k},a,\sigma,\tau}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}+\mathbf{q},b',\sigma',\tau'} \langle \hat{c}_{\mathbf{p},b,\sigma',\tau'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},a',\sigma,\tau} \rangle + \hat{c}_{\mathbf{p},b,\sigma',\tau'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},a',\sigma,\tau} \langle \hat{c}_{\mathbf{k},a,\sigma,\tau}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}+\mathbf{q},b',\sigma',\tau'} \rangle \right] \\ &= -\sum_{a,b,b'} \int \frac{d^2k}{2\pi} \frac{d^2p}{2\pi} \frac{d^2q}{2\pi} U(q) \lambda_{\mathbf{k},\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{a,b} \lambda_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{k}}^{b,b'} \hat{c}_{\mathbf{k},a}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},b'} \delta_{b,-} \\ &= -\frac{1}{4} \sum_{a,b'} \int \frac{d^2k}{2\pi} \frac{d^2q}{2\pi} U(q) \hat{c}_{\mathbf{k},a}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},b'} \left( (1 + ab') - a e^{i(\varphi_{\mathbf{k}} - \varphi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})} - b' e^{-i(\varphi_{\mathbf{k}} - \varphi_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})} \right). \end{aligned} \quad (23)$$

Im ersten Schritt haben wir verwendet, dass beide Terme in der Klammer nach einer Umdefinition der Variablen gleich sind. Der erste Term in der letzten Zeile liefert eine konstante Korrektur der Dispersion und wird daher vernachlässigt. Somit erhalten wir

$$V^{\text{HF}} = v \sum_{a,b'} a \int \frac{d^2k}{2\pi} k \hat{c}_{\mathbf{k},a}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},b'} A_{a,b'}(\mathbf{k}), \quad (24)$$

$$A_{a,b'}(\mathbf{k}) = \frac{1}{4vk} \int \frac{d^2k'}{2\pi} U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \left[ e^{i(\varphi_{\mathbf{k}} - \varphi_{\mathbf{k}'})} + ab' e^{i(\varphi_{\mathbf{k}} - \varphi_{\mathbf{k}'})} \right]. \quad (25)$$

Wir führen nun Polarkoordinaten ein mit dem Winkel  $\theta = \varphi_{\mathbf{k}} - \varphi_{\mathbf{k}'}$  zwischen  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{k}'$ . Falls  $a \neq b'$  im oberen Ausdruck, also  $ab' = -1$  erhalten wir den  $\sin(\theta)$  und die Integration über den Winkel verschwindet. Es muss daher gelten  $A_{a,b'}(\mathbf{k}) = \delta_{a,b'} A(\mathbf{k})$ . Nutzen wir zudem das Potential aus Aufgabenteil a)

$$U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{2\pi e^2}{\epsilon |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|} = \frac{2\pi e^2}{\epsilon \sqrt{k^2 - (k')^2 - 2kk' \cos(\theta)}} \quad (26)$$

so erhalten wir

$$\begin{aligned} A(\mathbf{k}) &= \frac{e^2}{4\epsilon v k} \int_0^\Lambda dk' \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\cos(\theta)}{\sqrt{k^2 + (k')^2 - 2kk' \cos(\theta)}} = |x = k'/k| \\ &= \frac{e^2}{4\epsilon v} \int_0^{\Lambda/k} dx \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\cos(\theta)}{\sqrt{1 + x^2 - 2x \cos(\theta)}}. \end{aligned} \quad (27)$$

Wir teilen das Integral über  $x$  auf in  $\int_0^1 dx + \int_1^{\Lambda/k} dx$ . Das erste Integral liefert einen konstanten (unabhängig von  $k$ ) Beitrag zur Dispersion und wird daher vernachlässigt. Im zweiten Integral entwickeln wir den Integranden für  $x \gg 1$ ,

$$\frac{1}{\sqrt{1 + x^2 - 2x \cos(\theta)}} \simeq \frac{1}{x} + \frac{\cos(\theta)}{x^2}. \quad (28)$$

Somit

$$A(\mathbf{k}) \simeq \frac{e^2}{4\epsilon v} \int_1^{\Lambda/k} dx \int_0^{2\pi} d\theta \left( \cos(\theta) + \frac{\cos^2(\theta)}{x} \right) = \frac{e^2}{4\epsilon v} \ln \left( \frac{\Lambda}{k} \right) + const.. \quad (29)$$

und

$$V^{\text{HF}} = \sum_a \int \frac{d^2 k}{2\pi} \delta v(\mathbf{k}) k \hat{c}_{\mathbf{k},a}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},b'}. \quad (30)$$

Hierbei ist

$$\delta v(\mathbf{k}) = \frac{e^2}{4\epsilon} \ln \left( \frac{\Lambda}{k} \right). \quad (31)$$

Die Konstante im Text ist somit  $A = 1/4$ .

### 3. Spindichtewellen Instabilität

(6+4=10 Punkte)

Betrachten Sie das Hubbard Modell für Elektronen auf einem zweidimensionalen quadratischen Gitter welches durch den folgenden Hamilton-Operator definiert ist

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (32)$$

Der Operator  $c_{i\sigma}^\dagger$  erzeugt ein Fermion mit Spin  $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$  am Gitterplatz  $i = (i_1, i_2)$  wobei  $i_{1,2} \in \mathbb{N}$  und  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ . Die Summe läuft über nächste Nachbarn  $\langle i, j \rangle$  im zweidimensionalen quadratischen Gitter mit den Basisvektoren des Bravais-Gitters,  $\mathbf{a}_1 = a(1, 0)$  und  $\mathbf{a}_2 = a(0, 1)$ . Nehmen Sie an, dass die Amplitude des Hüpfens positiv ist,  $t > 0$  und dass die on-site Wechselwirkung repulsiv ist,  $U \geq 0$ .

- (a) Betrachten Sie den Fall  $U > 0$  und nutzen Sie die Hartree-Fock Näherung um einen quadratischen Molekularfeld-Hamilton-Operator  $H_{HF}$  zu erhalten.

**Lösung**

Wir betrachten die freie Energie

$$H - \mu N = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} \left( c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \text{h.c.} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}. \quad (33)$$

Wir führen die Hartree-Fock-Näherung für die Wechselwirkung durch,

$$n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \rightarrow n_{i,\uparrow} \langle n_{i,\downarrow} \rangle + n_{i,\downarrow} \langle n_{i,\uparrow} \rangle - \langle n_{i,\uparrow} \rangle \langle n_{i,\downarrow} \rangle \quad (34)$$

und nutzen den Ansatz

$$\begin{aligned} \langle n_{i,\uparrow} \rangle &= n + (-1)^{i_1+i_2} m, \\ \langle n_{i,\downarrow} \rangle &= n - (-1)^{i_1+i_2} m \end{aligned} \quad (35)$$

Damit lautet die freie Energie in der Hartree-Fock-Näherung

$$\begin{aligned} F_{HF} &= -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} \left( c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \text{h.c.} \right) + U n \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} \\ &+ U m \sum_i (-1)^{i_1+i_2} (n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow}) - U N (n^2 - m^2) - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma}. \end{aligned} \quad (36)$$

Wir führen eine Fouriertransformation durch

$$c_{j,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in BZ} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_j} c_{\mathbf{k},\sigma}. \quad (37)$$

Beachten Sie dabei, dass

$$(-1)^{j_1+j_2} = e^{i\pi(j_1+j_2)} = e^{i\mathbf{Q}\mathbf{x}_j}. \quad (38)$$

mit dem reziproken Gittervektor  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  [wir arbeiten in Einheiten in denen  $a = 1$ ]. Wir erhalten somit

$$F_{HF} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in BZ} \mathbf{c}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & \Delta & 0 & 0 \\ \Delta & \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi_{\mathbf{k}} & -\Delta \\ 0 & 0 & -\Delta & \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \end{pmatrix} \mathbf{c}_{\mathbf{k}} - \frac{N}{U} (U^2 n^2 - \Delta^2). \quad (39)$$

wobei  $\xi_{\mathbf{k}} = -2t[\cos(k_1) + \cos(k_2)] - \mu + U n$ ,  $\mathbf{c}_{\mathbf{k}} = (c_{\mathbf{k},\uparrow}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow}, c_{\mathbf{k},\downarrow}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow})^T$  und  $\Delta = U m$ .

- (b) Betrachten Sie das System bei halber Füllung, d.h. im Mittel ist jeder Gitterplatz mit einem Elektron besetzt. Bestimmen Sie das Energiespektrum des resultierenden Molekularfeld-Hamilton-Operators  $H_{HF}$ .

**Lösung**

Ist das Band nur halb besetzt, so gilt  $\mu = U n$  uns somit  $\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -\xi_{\mathbf{k}}$ . Die beiden Unterräume der freie Energie in Gleichung. (39) lassen sich somit leicht diagonalisieren und wir erhalten

$$F_{HF} = \sum_{\mathbf{k} \in BZ} \sum_{\sigma} \sum_{a=\pm} a E_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k},a,\sigma}^{\dagger} d_{\mathbf{k},a,\sigma} - \frac{N}{U} (U^2 n^2 - \Delta^2) \quad (40)$$

mit der Dispersion  $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Delta^2 + \epsilon_{\mathbf{k}}^2}$ ,  $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t[\cos(k_1) + \cos(k_2)]$ .

(c) **5 Bonuspunkte**

Betrachten Sie nun das System bei halber Füllung und Temperatur  $T = 0$ . Definieren Sie den Ordnungsparameter des Molekularfelds mit (antiferromagnetischer Spindichtewellen Kanal)

$$\langle n_{(i_1, i_2), \uparrow} \rangle = n + (-1)^{i_1 + i_2} m; \quad \langle n_{(i_1, i_2), \downarrow} \rangle = n - (-1)^{i_1 + i_2} m.$$

Leiten Sie durch Minimierung der freien Energie eine selbstkonsistente Gleichung für die Spindichtewellenamplitude  $m$  her:

$$\frac{\partial}{\partial m} \langle H_{HF} - \mu N \rangle_{T=0} = 0,$$

wobei  $N = \sum_{j, \sigma} n_{j, \sigma}$  die Anzahl der Teilchen im System beschreibt, welche durch das chemische Potential  $\mu$  bestimmt ist. Nutzen Sie  $\mu = Un$  um sicherzustellen, dass sich das System bei halber Füllung befindet.

**Lösung**

Wir nehmen an, dass bei  $T=0$  nur das untere Band gefüllt ist und somit  $\langle d_{\mathbf{k}, a, \sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}, a, \sigma} \rangle = \delta_{a, -}$  gilt. Minimieren wir den Erwartungswert der freien Energie in Gleichung (40) nach der Bandlücke  $\Delta$ ,

$$\frac{\partial}{\partial \Delta} \langle F_{HF} \rangle = 0, \quad (41)$$

und ziehen den Kontinuumsliches  $\sum_{\mathbf{k} \in BZ} \rightarrow N \int_{BZ} d^2k / (2\pi)^2$  so erhalten wir die Selbstkonsistenzgleichung

$$\begin{aligned} \frac{N}{2} \sum_{\sigma, a} \int_{BZ} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{a\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + \epsilon_{\mathbf{k}}^2}} \delta_{a, -} + \frac{2N}{U} \Delta = 0 \\ \Leftrightarrow 1 = \frac{U}{2} \int_{BZ} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + \epsilon_{\mathbf{k}}^2}}. \end{aligned} \quad (42)$$

Der letzte Ausdruck lässt sich mit Hilfe der Zustandsdichte  $\rho(\epsilon)$  umschreiben (beachten Sie, dass nur das untere Band gefüllt ist und daher die Integrationsgrenzen entsprechend gewählt werden)

$$1 = \frac{U}{2} \int_{-4t}^0 d\epsilon \frac{\rho(\epsilon)}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}}. \quad (43)$$

Führen wir die dimensionslose Variable  $x = \epsilon/\Delta$  ein, so lautet die Selbstkonsistenzgleichung

$$1 = -\frac{U}{2} \int_0^{\frac{4t}{\Delta}} dx \frac{\rho(x\Delta)}{\sqrt{1+x^2}} = -\frac{UN_0}{2} \int_0^{\frac{4t}{\Delta}} dx \frac{\ln\left(\frac{\Delta x}{16t}\right)}{\sqrt{1+x^2}}. \quad (44)$$

mit  $N_0 = 1/2\pi^2 t$ .

(d) **10 Bonuspunkte**

Lösen Sie die resultierende Gleichung für die Anregungslücke  $\Delta = Um$  zu logarithmischer Genauigkeit [nutzen Sie dazu den Ausdruck  $\rho(\epsilon) = 1/2\pi^2 t \ln(16t/\epsilon)$  für die Zustandsdichte und lösen Sie das Integral indem Sie nur den führenden Term in der asymptotischen Entwicklung für  $\Delta \rightarrow 0$  behalten].

## Lösung

Wir teilen die Energie-Integration in Gleichung (44) in  $\int_0^{\frac{4t}{\Delta}} d\epsilon = \int_0^1 d\epsilon + \int_1^{\frac{4t}{\Delta}} d\epsilon$  auf und entwickeln den Integranden jeweils für  $x \ll 1$  bzw.  $x \gg 1$ . Somit

$$\int_0^1 dx \ln\left(\frac{\Delta x}{16t}\right) = -1 + \ln\left(\frac{\Delta}{16t}\right), \quad (45)$$

$$\int_1^{\frac{4t}{\Delta}} dx \frac{\ln(x)}{x} = \frac{1}{2} \left\{ [\ln(4)]^2 - \left[ \ln\left(\frac{\Delta}{16t}\right) \right]^2 \right\}. \quad (46)$$

Wir behalten im Ergebnis nur den führenden Term für  $\Delta/t \ll 1$ . Somit

$$1 = \frac{UN_0}{4} \left[ \ln\left(\frac{16t}{\Delta}\right) \right]^2 + \mathcal{O}\left(\ln\left(\frac{16t}{\Delta}\right)\right) + \text{const.} \quad (47)$$

Die Anregungslücke in logarithmischer Genauigkeit lautet daher

$$\Delta = 16te^{-2\sqrt{2}\pi\sqrt{\frac{t}{U}}}. \quad (48)$$

Das System kann also seine freie Energie durch Ausbildung einer Spindichtewelle (d.h.  $\Delta \neq 0$ ) verringern.