# Serie 13: Variationelle Wellenfunktionen

Abgabe: 1. Februar 2005

### Aufgabe 13.1 Magnetischen Variationelle Zustände

Wir betrachten das Hubbard-Model der Form,

$$\mathcal{H} = \sum_{k,\sigma=\uparrow\downarrow} \epsilon_k c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \tag{1}$$

Die einfachsten magnetischen variationellen Zustände sind die Slater-Determinanten,

$$|\psi^{q,\theta,\Sigma_F}\rangle = \prod_{k\in\Sigma_F^+} \alpha^\dagger_{k+} \prod_{k\in\Sigma_F^-} \alpha^\dagger_{k-} |\rangle, \tag{2}$$

mit,

$$\alpha^\dagger_{k+} = \cos\theta_k c^\dagger_{k\uparrow} + \sin\theta_k c^\dagger_{k+q\downarrow} \tag{3}$$

$$\alpha^\dagger_{k-} = -\sin\theta_k c^\dagger_{k\uparrow} + \cos\theta_k c^\dagger_{k+q\downarrow}. \tag{4}$$

Die variationellen Parameter sind der Ordnungswellenvektor $q$, die Winkel $\theta_k$ und die Fermi-Flachen $\Sigma_F^\pm$, definiert so dass,

$$n_{k\pm} = \begin{cases} 1 & k \in \Sigma_F^\pm, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \tag{5}$$

[a] Zeige, dass

$$\langle\psi^{q,\theta,\Sigma_F}|S_i^+|\psi^{q,\theta,\Sigma_F}\rangle = N m_q e^{-iqR_i}, \qquad \text{mit} \quad m_q = \frac{1}{2N}\sum_k \sin(2\theta_k)(n_{k+} - n_{k-}) \tag{6}$$

und dass,

$$\langle\psi^{q,\theta,\Sigma_F}|S_i^z|\psi^{q,\theta,\Sigma_F}\rangle = N m_z, \qquad \text{mit} \quad m_z = \frac{1}{2N}\sum_k \cos(2\theta_k)(n_{k+} - n_{k-}). \tag{7}$$

[b] Zeige, dass sich der Erwartungswert des Hamilton-Operators (1), als

$$\langle\psi^{q,\theta,\Sigma_F}|\mathcal{H}|\psi^{q,\theta,\Sigma_F}\rangle = \underbrace{\sum_{k\in\Sigma_F^\pm} (E_k^+ n_{k+} + E_k^- n_{k-})}_{\equiv E_0} + N m_z^2 + N m_q^2 + N\frac{n^2}{4}, \tag{8}$$

schreiben lässt, wobei $E_k^\pm$ die 'Magnetischen Bänder', durch

$$E_k^\pm = \frac{\epsilon_k + \epsilon_{k+q}}{2} \pm \left[\left(\frac{\epsilon_k - \epsilon_{k+q}}{2} - U m_z\right)\cos 2\theta_k - U m_q \sin 2\theta_k\right], \tag{9}$$

gegeben, sind.

[c] Die Variationelle Bedingung für $\cos 2\theta_k$ ist,

$$\frac{\partial E}{\partial \cos 2\theta_k} = 0. \tag{10}$$

Löse die obige Gleichung und schreibe $\cos 2\theta_k$ als eine Funktion von $m_z$ und $m_q$. Zeige, dass man die 'Magnetischen Bänderenergien' als,

$$E_k^{\pm}(m_z, m_q) = \frac{\epsilon_k + \epsilon_{k+q}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_k - \epsilon_{k+q}}{2} + U m_z\right)^2 + U^2 m_q^2} \tag{11}$$

ausdrücken kann.

[d] Nehme jetzt an, dass $m_q = 0$ ist. Die Variationele Annahme für $m_z$ ist,

$$\frac{\partial E}{\partial m_z} = \frac{dE_0}{dm_z} - 2NUm_z = 0. \tag{12}$$

Beachte, dass

$$\frac{dE_0}{dm_z} = 4U^2 m_z \, \chi_0|_{m_z=0} + \mathcal{O}(m_z^2), \tag{13}$$

wobei $\chi_0$ die Magnetische Suszeptibilität des nicht wechselwirkenden Elektronengases ist (siehe Skript Kap. 6.2). Leite daraus das Stoner-Kriterium für ferromagnetische Instabilität des Grundzustands her,

$$2U \, \chi_0|_{m_z=0} = 1. \tag{14}$$

[e] *(*Perfect nesting*) Betrachte nun das Hubbard-Model auf einem Quadrat-Gitter (2D) mit $\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$ und genau einem Elektron per Gitterpunkt. Nehme an, dass $m_z = 0$, $q = (\pi, \pi)$ und leite die Instabilitäts Gleichung für $m_q$ her. Zeige, dass die Instabilität für beliebig kleine, aber endliche Wechselwirkung ($U \neq 0$) entstehet, so dass dieses System für beliebig kleine Wechselwirkung keine Fermi-Flussigkeit sondern änlich einem Band-Isolator ist. (Warum?)