Übungen zur Theorie der Kondensierten Materie WS 13/14

Prof. Dr. G. Schön
Dr. M. Marthaler

Blatt 4
Besprechung, 25.11.13

---

1. Stoner-Magnetismus (16 Punkte)

Wir betrachten den Hubbard-Hamilton-Operator, der die Elektronen-Elektronen-Wechselwirkung in einem Festkörper beschreibt,

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

mit fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $c^{\dagger}$, c, dem „Hopping-Matrixelement“ t, dem Spin σ und die Summation wird über benachbarte Gitterplätze $\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle$ durchgeführt. Wir verwenden die Definition $n_{\mathbf{r},\sigma} = c^{\dagger}_{\mathbf{r},\sigma} c_{\mathbf{r},\sigma}$.

(a) (1 Punkt) Wir entwickeln nun die Anzahl-Operatoren $n_{\mathbf{r},\sigma}$ um ihren Mittelwert und erhalten

$$n_{\mathbf{r},\uparrow} n_{\mathbf{r},\downarrow} \approx \langle n_{\mathbf{r},\uparrow} \rangle n_{\mathbf{r},\downarrow} + \langle n_{\mathbf{r},\downarrow} \rangle n_{\mathbf{r},\uparrow} - \langle n_{\mathbf{r},\uparrow} \rangle \langle n_{\mathbf{r},\downarrow} \rangle$$

Unter welcher Bedinung ist dies eine gute Näherung?

(b) (3 Punkte) Wir nehmen nun noch zusätzlich an, dass die mittlere Anzahl an Elektronen auf jedem Gitterplatz gleich ist, $\langle n_{\mathbf{r},\sigma} \rangle = \langle n_{\sigma} \rangle$. Zeigen sie, dass sie den Hamilton-Operator in folgende Form bringen können:

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\epsilon(\mathbf{k}) + U \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle) c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} \tag{2}$$

Hierbei ist $\bar{\sigma}$ immer die entgegengesetzte Spin-Richtung zu σ.
Hinweis: $\epsilon(\mathbf{k})$ wurde auf dem zweiten Aufgabenblatt berechnet.

(c) (1 Punkte) Zeigen sie nun, dass der Erwartungswert für die Anzahl an Elektronen auf einem Gitterplatz gegeben ist durch,

$$\langle n_{\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu + U \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle)} + 1} \,. \tag{3}$$

(d) (2 Punkte) Nun definieren wir die Teilchenzahl $n = \langle n_{\uparrow} \rangle + \langle n_{\downarrow} \rangle$ und die dimensionslose Magnetisierung $m = \langle n_{\uparrow} \rangle - \langle n_{\downarrow} \rangle$. Finden sie ein Gleichungssytem mit dem sich m und n bestimmen lassen.

(e) (4 Punkte) Wir definieren nun ein neues chemisches Potential, $\mu \to \mu_r = \mu - Un/2$. Zeigen sie, dass damit gilt,

$$m = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\sinh(\beta U m/2)}{\cosh(\beta U m/2) + \cosh(\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu_r))} \tag{4}$$

(f) (5 Punkte) Finden sie die Lösung für m für tiefe Temperaturen. Entwickeln sie dazu Gl. 4 für kleine m und bringen sie die Gleichung in die Form,

$$m = am - bm^3 \tag{5}$$

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

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

$$\delta\epsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \sum_{\mathbf{p}',\sigma'} f_{\mathbf{p}\sigma,\mathbf{p}'\sigma'} \delta n_{\mathbf{p}'\sigma'} \tag{6}$$

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,

$$f_{\mathbf{p}\sigma,\mathbf{p}'\sigma'} = f^s_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} + \sigma\sigma' f^a_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \tag{7}$$

Sie können weiter verwenden, dass

$$\delta n_{\mathbf{p}'\sigma'} = \frac{\partial n}{\partial \epsilon_{\mathbf{p}'\sigma'}} \delta\epsilon_{\mathbf{p}'\sigma'} \ . \tag{8}$$

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

$$\frac{\partial n}{\partial \epsilon_{\mathbf{p}'\sigma'}} = -\delta(\epsilon_{\mathbf{p}'\sigma'} - \epsilon_F) \ . \tag{9}$$

Damit lässt sich nun die Summation/Integration über die Impulse ausführen, und Gl. (6) lässt sich kompakt schreiben indem man folgende Konstanten einführt,

$$F_0^{s(a)} = D(\epsilon_F) \int \frac{d\Omega}{4\pi} f^{s(a)}(\cos\theta) \, . \tag{10}$$

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

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

$$\delta\epsilon_{\mathbf{p}\sigma} = \mu_B H \sigma + \sum_{\mathbf{p}',\sigma'} f_{\mathbf{p}\sigma,\mathbf{p}'\sigma'} \delta n_{\mathbf{p}'\sigma'} \ . \tag{11}$$

Verwenden sie die oben beschriebenen Näherungen und berechnen sie $\delta\epsilon_{p_F\sigma}$.

(b) (Extra) Berechnen sie die Magnetisierung des Systems und die paramagnetische Suszptibilität.
Unter welchen Umständen divergiert die Suzeptibilität? Warum ist dies eine 'ferromagentische' Instabilität.