21 Hubbard-Modell

Bisher haben wir für die Elektronen das Bändermodell zu Grunde gelegt. Die Wechselwirkung zwischen den Elektronen haben wir nur als Hartree-Fock-Potential wie auch für die dielektrischen Eigenschaften im Rahmen der RPA berücksichtigt (Abschnitt 16 und 17). Tatsächlich hat die abstoßende Wechselwirkung zwischen den Elektronen weitreichendere Konsequenzen, da sie zu starken Korrelationen (oder Anti-Korrelationen) im Festkörper führt. Dieses Gebiet der starken Korrelationen ist zur Zeit ein wichtiges Forschungsgebiet in der Festkörperphysik.

J.Hubbard (und zur gleichen Zeit unabhängig auch J. Kanamori und M.C. Gutzwiller) haben 1963 ein Modell zur Beschreibung von stark korrelierten elektronischen Systemen vorgeschlagen, das heute Hubbard-Modell genannt wird. Sie nehmen an, dass ein wesentlicher Effekt der Coulomb-Wechselwirkung in einer Abstossung von zwei Elektronen am gleichen Gitterplatz besteht. Sie fügen daher zu dem Einteilchen-tight-binding Hamilton-Operator

$$H_{\rm kin} = - \sum_{\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2,s} t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2} c_s^\dagger(\mathbf{R}_1) c_s(\mathbf{R}_2) \tag{21.1}$$

noch eine Abstoßung hinzu,

$$H_{\rm int} = U \sum_{\mathbf{R}} n_\uparrow(\mathbf{R}) n_\downarrow(\mathbf{R}) \tag{21.2}$$

mit den Teilchenzahloperatoren

$$n_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}) = c^\dagger_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}) c_{\uparrow,\downarrow}(\mathbf{R}) \tag{21.3}$$

am Ort $\mathbf{R}$ hinzu.

21.a Mott-Metall-Isolator-Übergang

Dieses Modell wurde zunächst eingeführt, um zu verstehen, dass ein System mit einer ungeraden Anzahl von Leitungselektronen pro Elementarzelle ein Isolator sein kann. Man würde erwarten, dass solch ein System ein Metall ist, da die Bänder auf Grund der Kramers-Entartung jeweils zweifach entartet sind (siehe Abschnitt 12.d). Daher ist das oberste Band dann nur halb gefüllt und sollte daher metallisch sein. Der Grund für das isolierende Verhalten liegt in Folgendem: Wir nehmen an, das Band sei halb gefüllt. Dann werden sich bei starker Abstoßung U die Elektronen aus dem Weg gehen. Jeder Gitterplatz ist einfach besetzt. Nimmt man nun ein Elektron weg, so wird man eine typische Bandenergie der Größenordnung $\pm tz$ gewinnen, wobei z die Koordinationszahl, also die Anzahl der nächsten Nachbarn ist. Fügt man dagegen ein Elektron hinzu, so muss man nicht nur die Energie $\pm tz$ aufwenden, sondern zusätzlich noch die Energie U, da das Elektron sich nur auf an einem schon von einem Elektron besetzten Ort bewegen kann. Damit erhält man für die Valenz-Elektronen, grob gesagt, ein Band von $-tz$ bis $+tz$, für die Leitungselektronen dagegen von $U - tz$ bis $U + tz$. Falls $U > 2tz$, tritt eine Energielücke auf. Man spricht daher von dem unteren und dem oberen Hubbard-Band und spricht von einem Mott-Isolator.

21.b Pauli-Paramagnetismus und Stoner-Kriterium

Wir wollen uns nun ansehen, wie das System auf ein äußeres Magnetfeld reagiert. Dazu schreiben wir den Hamilton-Operator mit einem äußeren Feld

$$H - \mu\mathcal{N} = \sum_{\mathbf{k}s} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} + U \sum_{\mathbf{R}} n_\uparrow(\mathbf{R}) n_\downarrow(\mathbf{R}) - \mu_{\rm B} B \sum_{\mathbf{R},s} s n_s(\mathbf{R}). \tag{21.4}$$

Dabei haben wir den g-Faktor gleich 2 gesetzt. Wir erwarten, dass bei Anlegen des äußeren Feldes die Elektronen mit Spin nach oben und die mit Spin nach unten unterschiedliche Besetzung haben und setzen daher unterschiedliche Erwartungswerte $n_\uparrow$ und $n_\downarrow$ an. Für den Erwartungswert des Hamilton-Operators erhalten wir

$$\langle H - \mu\mathcal{N} \rangle = \sum_{\mathbf{k},s} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - \mu_{\rm B} B s) n_{\mathbf{k}s} + U N_{\rm s} n_\uparrow n_\downarrow \tag{21.5}$$

mit

$$n_s = \frac{1}{N_\mathrm{s}} \sum_{\mathbf{k},s} n_{\mathbf{k}s}. \tag{21.6}$$

Durch Ableiten des großkanonischen Potentials erhalten wir

$$\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}n_{\mathbf{k}s}} = \epsilon_\mathbf{k} - \mu - \mu_\mathrm{B} Bs + Un_{-s} - T\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}n_{\mathbf{k}s}} \tag{21.7}$$

woraus wieder

$$n_{\mathbf{k}s} = f(\epsilon_\mathbf{k} - \mu - \mu_\mathrm{B} Bs + Un_{-s}) \tag{21.8}$$

folgt. Wir betrachten nun die Magnetisierung

$$M = \mu_\mathrm{B} \frac{N_\mathrm{s}}{V_\mathrm{P}} (n_\uparrow - n_\downarrow) \tag{21.9}$$

und die Suszeptibilität

$$\chi = \frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}B} = \frac{\mu_\mathrm{B}}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k},s} \frac{\mathrm{d}sn_{\mathbf{k},s}}{\mathrm{d}B} = \frac{\mu_\mathrm{B}}{V_\mathrm{P}} \sum_{\mathbf{k},s} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\epsilon_k} \left(-\mu_\mathrm{B} + Us\frac{\mathrm{d}n_{-s}}{\mathrm{d}B} \right). \tag{21.10}$$

Ausgehend vom nicht magnetisierten Zustand lässt sich das in

$$\left(1 + \frac{U}{N_\mathrm{s}} \sum_\mathbf{k} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\epsilon_\mathbf{k}} \right) \chi = \frac{2\mu_\mathrm{B}^2}{V_\mathrm{P}} \sum_\mathbf{k} \left(-\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\epsilon_\mathbf{k}} \right) \tag{21.11}$$

umformen. Man beobachtet, dass sich für niedrige Temperaturen die Summe

$$-\frac{1}{V_\mathrm{P}} \sum_\mathbf{k} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\epsilon_\mathbf{k}} = \frac{1}{2} D(\epsilon_\mathrm{F}) \tag{21.12}$$

durch die Zustandsdichte an der Fermikante ausdrücken lässt. Damit folgt für die Suszeptibilität mit $\hat{U} = V_\mathrm{P} U / N_\mathrm{s} = V_\mathrm{z} U$

$$\chi = \frac{\mu_\mathrm{B}^2 D(\epsilon_\mathrm{F})}{1 - \frac{1}{2}\hat{U} D(\epsilon_\mathrm{F})} \tag{21.13}$$

Siehe Hunklinger-Enss: Pauli-Paramagnetismus Abschnitt 7.2 S. 211-212 für $U = 0$. Solange

$$\frac{1}{2}\hat{U} D(\epsilon_\mathrm{F}) < 1, \tag{21.14}$$

ist das System paramagnetisch. Wenn dieses nach Stoner benannte Kriterium nicht erfüllt ist, das heißt bei größerem U oder größerer Zustandsdichte, ist die Lösung $M = 0$ bei $B = 0$ nicht stabil.Das System wird ferromagnetisch. Voraussetzung ist, dass es nicht noch leichter in einen anderen Ordnungszustand übergeht.

21.c Antiferromagnetismus

Tatsächlich zeigt das Hubbard-Modell eine Reihe weiterer interessanter Eigenschaften. Eine dieser Eigenschaften ist, dass es bei halber Füllung antiferromagnetische Ordnung aufweist, falls es sich um ein paares Gitter handelt, d.h. falls es sich in zwei Untergitter A und B aufteilen lässt, so dass alle nächsten Nachbarn von Gitterpunkten aus A Gitterpunkte in B sind und umgekehrt. Ein quadratisches Gitter hat solch eine Eigenschaft. Markieren wir die Gitterpunkte abwechselnd weiß und schwarz wie bei einem Schachbrett, so haben wir die beiden Untergitter gekennzeichnet. Auch ein einfach kubisches Gitter und ein kubisch-raumzentriertes Gitter haben diese Eigenschaft. Dagegen hat ein Dreiecksgitter und ein kubisch flächenzentriertes Gitter diese Eigenschaft nicht.

Wir wollen diesen Antiferromagnetismus jetzt betrachten. In diesem Antiferromagneten sind abwechselnd an den Gitterpunkten mehr Spins nach oben oder nach unten. Wir setzen daher an

$$\langle n_s(\mathbf{R})\rangle = \frac{1}{2}(n + ms\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{R}}), \tag{21.15}$$

wobei der Wellenvektor $\mathbf{q}_0$ so gewählt ist, dass

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{R}} = \begin{cases} 1 & \mathbf{R}\in A, \\ -1 & \mathbf{R}\in B \end{cases} \tag{21.16}$$

gilt. Für ein quadratisches Gitter mit Gitterkonstante a gilt $\mathbf{q}_0 = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$, für ein einfaches kubisches Gitter (sc) $\mathbf{q}_0 = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ und für ein raumzentriertes kubisches Gitter (bcc) $\mathbf{q}_0 = (\frac{2\pi}{a}, 0, 0)$. Damit formen wir um

$$\begin{aligned} n_\uparrow(\mathbf{R})n_\downarrow(\mathbf{R}) &= :(n_\uparrow(\mathbf{R}) + \frac{1}{2}(n + m\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{R}}))(n_\downarrow(\mathbf{R}) + \frac{1}{2}(n - m\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{R}})): \\ &= \frac{1}{4}(n^2 - m^2) + \frac{1}{2}\sum_s (n - ms\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{R}}) : n_s(\mathbf{R}) : + : n_\uparrow(\mathbf{R})n_\downarrow(\mathbf{R}) : \end{aligned} \tag{21.17}$$

Beachten wir noch, dass

$$\sum_{\mathbf{R}} c^\dagger(\mathbf{R})c(\mathbf{R})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{R}} = \frac{1}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{R},\mathbf{k},\mathbf{k}'} c^\dagger_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}_0)\cdot\mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} c^\dagger_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}'}\delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}_0,\mathbf{0}} = \sum_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0}, \tag{21.18}$$

dann erhalten wir für den Hamilton-Operator bei Vernachlässigung der $: nn :$-Terme

$$H - \mu\mathcal{N} = E_0 + \sum_{\mathbf{k},s}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + \frac{Un}{2}) : c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}s} : -\frac{Um}{2}\sum_{\mathbf{k},s} s : c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s} :, \tag{21.19}$$

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k},s}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)n_{\mathbf{k}s} + \frac{UN_\mathrm{s}}{4}(n^2 - m^2) \tag{21.20}$$

mit

$$n = \frac{1}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{R},s}\langle n_s(\mathbf{R})\rangle = \frac{1}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{k},s}\langle c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}s}\rangle, \quad m = \frac{1}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{R},s} s\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot\mathbf{R}}\langle n_s(\mathbf{R})\rangle = \frac{1}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{k},s} s\langle c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s}\rangle. \tag{21.21}$$

Bevor wir diese Gleichungen lösen, beachten wir, dass wir nur Hüpf-Matrix-Elemente zwischen den Untergittern A und B haben. Daraus folgt für den Einteilchen-Hamilton-Operator

$$-\sum t_{\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2}c^\dagger(\mathbf{R}_1)c(\mathbf{R}_2) = \sum \epsilon_{\mathbf{k}}c^\dagger_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}} \tag{21.22}$$

mit

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{R}} t_{\mathbf{R}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \tag{21.23}$$

Da zwischen verschiedenen Untergittern $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{q}_0\cdot(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)} = -1$, folgt dann

$$\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0} = -\epsilon_{\mathbf{k}}. \tag{21.24}$$

Wir zerlegen nun die Brillouinzone in zwei Anteile, so dass in einem der Vektor $\mathbf{k}$, im anderen $\mathbf{k}+\mathbf{q}_0$ liegt und bezeichnen die Summe über einen Teil mit einem Strich. Tatsächlich haben wir beim Eintreten des Antiferromagnetismus eine Gitterzelle doppelter Größe, da jetzt in einer Gitterzelle sowohl ein Gitterpunkt des Untergitters A wie auch des Untergitters B liegt. Dieser Verdoppelung der Wigner-Seitz-Zelle entspricht eine Halbierung der Brillouinzone. Wir können dann den Hamilton-Operator in der Form

$$
\begin{aligned}
H - \mu\mathcal{N} = E_0 \quad &+ \quad (\frac{Un}{2} - \mu) \sum_{\mathbf{k},s}{}' : c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} + c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s} : \\
&+ \quad \sum_{\mathbf{k},s}{}' \epsilon_{\mathbf{k}} : c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}s} - c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s} : \\
&- \quad \frac{Um}{2} \sum_{\mathbf{k},s}{}' s : c^\dagger_{\mathbf{k}s} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s} + c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s} c_{\mathbf{k}s} : \qquad (21.25)
\end{aligned}
$$

schreiben. Im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung bilden wir die Kommutatoren

$$
\begin{aligned}
[H - \mu\mathcal{N}, c^\dagger_{\mathbf{k}s}] &= (\frac{Un}{2} - \mu + \epsilon_{\mathbf{k}}) c^\dagger_{\mathbf{k}s} - \frac{Ums}{2} c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s}, \qquad (21.26) \\
[H - \mu\mathcal{N}, c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s}] &= -\frac{Ums}{2} c^\dagger_{\mathbf{k}s} + (\frac{Un}{2} - \mu - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s}) c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s}. \qquad (21.27)
\end{aligned}
$$

Eigenlösungen

$$
[H - \mu\mathcal{N}, \alpha^\dagger_{\mathbf{k}s}] = (\frac{Un}{2} - \mu + \hat{\epsilon}_k) \alpha^\dagger_{\mathbf{k}s} \qquad (21.28)
$$

kann man mit dem Ansatz

$$
\alpha^\dagger_{\mathbf{k}s} = u_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}s} + s v_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s} \qquad (21.29)
$$

finden. Mit diesem Ansatz sind die beiden Gleichungen

$$
\begin{aligned}
\epsilon_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} - \frac{Um}{2} v_{\mathbf{k}} &= \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}, \qquad (21.30) \\
-\frac{Um}{2} u_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} &= \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \qquad (21.31)
\end{aligned}
$$

zu erfüllen. Multiplizieren wir die erste Gleichung mit $u_{\mathbf{k}}$, die zweite mit $v_{\mathbf{k}}$ und addieren und subtrahieren wir die Gleichungen, so erhalten wir, wenn wir auch noch die Normierung

$$
u^2_{\mathbf{k}} + v^2_{\mathbf{k}} = 1 \qquad (21.32)
$$

fordern,

$$
\begin{aligned}
\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} &= (u^2_{\mathbf{k}} - v^2_{\mathbf{k}}) \epsilon_{\mathbf{k}} - Um u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}, \qquad (21.33) \\
\epsilon_{\mathbf{k}} &= (u^2_{\mathbf{k}} - v^2_{\mathbf{k}}) \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} \qquad (21.34)
\end{aligned}
$$

Multiplizieren wir die Gleichung (21.30) mit $v_{\mathbf{k}}$ und (21.31) mit $u_{\mathbf{k}}$, dann folgt

$$
-\frac{Um}{2} = 2 u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}. \qquad (21.35)
$$

Aus diesen drei Gleichungen erhält man dann

$$
u^2_{\mathbf{k}} - v^2_{\mathbf{k}} = \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}, \quad 2 u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = -\frac{Um}{2\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}, \quad \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\frac{Um}{2})^2 + \epsilon^2_{\mathbf{k}}}. \qquad (21.36)
$$

Eine zweite Eigenlösung ergibt sich mit

$$
\beta^\dagger_{\mathbf{k}s} = -s v_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}s} + u_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0 s} \qquad (21.37)
$$

zu

$$
[H - \mu\mathcal{N}, \beta^\dagger_{\mathbf{k}s}] = (\frac{Un}{2} - \mu - \hat{\epsilon}_k) \beta^\dagger_{\mathbf{k}s}. \qquad (21.38)
$$

Man hat also zwei Arten von Anregungen, die durch eine Lücke $U|m|$ von einander getrennt sind, da für die α-Anregungen die Einteilchenergien größer gleich $\frac{Un}{2}-\mu+\frac{U|m|}{2}$ sind, während sie für die β-Anregungen kleiner gleich $\frac{Un}{2}-\mu-\frac{U|m|}{2}$ sind. Man überzeugt sich leicht davon, dass die Operatoren $\alpha^\dagger$, α, $\beta^\dagger$, β den bekannten Anti-Kommutator-Beziehungen für Fermionen genügen. Den Hamilton-Operator können wir dann

$$H-\mu\mathcal{N}=E_0+\sum_{\mathbf{k}s}{}'(\frac{Un}{2}-\mu+\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}):\alpha^\dagger_{\mathbf{k}s}\alpha_{\mathbf{k}s}+\sum_{\mathbf{k}s}{}'(\frac{Un}{2}-\mu-\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}):\beta^\dagger_{\mathbf{k}s}\beta_{\mathbf{k}s}:. \tag{21.39}$$

schreiben. Man erhält für die Erwartungswerte

$$\langle\alpha^\dagger_{\mathbf{k}s}\alpha_{\mathbf{k}'s'}\rangle=\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{s,s'}f(\frac{Un}{2}-\mu+\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}),\quad\langle\beta^\dagger_{\mathbf{k}s}\beta_{\mathbf{k}'s'}\rangle=\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{s,s'}f(\frac{Un}{2}-\mu-\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}). \tag{21.40}$$

Es bleibt nun die Selbstkonsistenz-Gleichung (21.21) für m

$$m=\frac{1}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{k}s}{}'s\langle c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}+c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}c_{\mathbf{k}s}\rangle, \tag{21.41}$$

zu lösen. Zunächst drücken wir die Erzeuger $c^\dagger$ durch $\alpha^\dagger$ und $\beta^\dagger$ aus,

$$c^\dagger_{\mathbf{k}s}=u_{\mathbf{k}}\alpha^\dagger_{\mathbf{k}s}-sv_{\mathbf{k}}\beta^\dagger_{\mathbf{k}},\quad c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}=sv_{\mathbf{k}}\alpha^\dagger_{\mathbf{k}s}+u_{\mathbf{k}}\beta^\dagger_{\mathbf{k}s}. \tag{21.42}$$

Damit folgt dann für die Erwartungswerte

$$\begin{aligned}
\langle c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}s}\rangle &= u^2_{\mathbf{k}}f(\frac{Un}{2}-\mu+\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}})+v^2_{\mathbf{k}}f(\frac{Un}{2}-\mu-\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}), &(21.43)\\
\langle c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}\rangle &= v^2_{\mathbf{k}}f(\frac{Un}{2}-\mu+\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}})+u^2_{\mathbf{k}}f(\frac{Un}{2}-\mu-\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}), &(21.44)\\
\langle c^\dagger_{\mathbf{k}s}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}\rangle=\langle c^\dagger_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_0s}c_{\mathbf{k}s}\rangle &= su_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}(f(\frac{Un}{2}-\mu+\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}})-f(\frac{Un}{2}-\mu-\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}})) &(21.45)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
n &= \frac{2}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{k}}{}'(f(\frac{Un}{2}-\mu+\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}})+f(\frac{Un}{2}-\mu-\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}})), &(21.46)\\
m &= \frac{4}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{k}}{}'u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}(f(\frac{Un}{2}-\mu+\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}})-f(\frac{Un}{2}-\mu-\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}})) &(21.47)\\
&= \frac{Um}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{k}}{}'\frac{1}{\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}(f(\frac{Un}{2}-\mu-\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}})-f(\frac{Un}{2}-\mu+\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}})) &(21.48)
\end{aligned}$$

Man sieht, dass $m=0$ immer eine Lösung ist. Für $\mu=Un/2$ erreicht man halbe Besetzung, das heißt im Mittel ist jeder Gitterplatz einfach besetzt. Dann ergibt sich für halbe Füllung

$$m=\frac{Um}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{k}}{}'\frac{1}{\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}(f(-\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}})-f(\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}))=\frac{Um}{N_\mathrm{s}}\sum_{\mathbf{k}}{}'\frac{1}{\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}\frac{1-\mathrm{e}^{-\beta\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}}{1+\mathrm{e}^{-\beta\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}}. \tag{21.49}$$

Dies ist die gleiche Gleichung wie für die Lücke in der Supraleitung (19.41), wobei m durch Δ und V durch U ersetzt ist. Man erhält also bei halber Füllung bei tiefen Temperaturen stets Antiferromagnetismus. An die Stelle von $\hbar\omega_\mathrm{D}$ tritt dann etwa die halbe Breite W des Elektronenbandes in (19.42). Unter der vereinfachten Annahme, dass die Zustandsdichte D im Band konstant ist, folgt aus

$$V_\mathrm{P}\int_{-W}^{W}D(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon=2N_\mathrm{s}\quad\rightarrow\quad V_\mathrm{z}WD=1. \tag{21.50}$$

Damit ergibt sich aus (19.44) für die Übergangstemperatur zum Antiferromagnetismus unter Berücksichtigung, dass in (21.49) nur über die eine Hälfte der **k** summiert wir, während in (19.41) über alle summiert wird,

$$k_\mathrm{B}T_\mathrm{c} = 1.14W\mathrm{e}^{-2/(\hat{U}D)} = 1.14W\mathrm{e}^{-2W/U}. \tag{21.51}$$

Die Übergangs-Temperatur wächst also mit U an.

Allerdings ist die Situation anders, wenn man die halbe Füllung verlässt. In diesem Fall hat man für den Grundzustand, der gerade noch nicht antiferromagnetisch ist,

$$n = 1 + \delta V_\mathrm{z} D(0) \text{ mit } \mu = \frac{Un}{2} + \delta \tag{21.52}$$

wobei D die Zustandsdichte ohne Wechselwirkung ist. Im Grenzfall $m \to 0$ erhält man dann

$$1 = \frac{U}{4} V_\mathrm{z} \int_{|\delta|}^{W} \mathrm{d}\epsilon \frac{D(\epsilon)}{\epsilon} = \frac{UV_\mathrm{z}D}{4} \ln \frac{W}{|\delta|}, \tag{21.53}$$

wobei W von der Größenordnung der halben Bandbreite ist. Aus diesen beiden Gleichungen ergibt sich dann, dass der Antiferromagnetismus bei

$$n = 1 \pm \mathrm{e}^{-4W/U} \tag{21.54}$$

verschwindet. Er ist also nur in der Umgebung halber Füllung zu erwarten.