

Z 4 Ground States of the Hubbard Model

理解一个量子哈密顿量的第一步是寻找它的基态. 而如果没有严格解, 合理地找到一族关于变分参数(variational parameters) γ 的变分态 (variational states) Ψ^γ 可以得到一些有用的结果.

变分定理(variational theorem): 对于精确的基态能量 E_0 , 有

(Assa4.1)

$$\frac{\langle \Psi^\gamma | \mathcal{H} | \Psi^\gamma \rangle}{\langle \Psi^\gamma | \Psi^\gamma \rangle} = E^\gamma \geq E_0$$

- 优点: 变分法在概念上很直接, 避免了微扰理论和渐近展开方法出现的、数学上微妙的收敛问题. 可以通过将式(Assa4.1)左手边的能量在**更大的变分态范围**内最小化, 来系统性地提高基态能量和波函数向真值的接近度.
- 局限性: 但另一方面, 必须认识到变分法寻找基态序可能会将人引入歧途. 能量大多数都对短程关联非常敏感, 因此, 在一个 trivial states 构成的约束空间中, 具有最低能量的状态可能具有错误的长程关联.

Contents

这一章, 我们关注 Hubbard 模型的磁性关联.

- 4.1 Variational Magnetic States: 使用自旋密度波Fock态(spin density wave Fock states)来应用变分法, 这给出了一个零温下 Hartree-Fock 理论的变分导出.
- 4.2 Some Ground State Theorems: 这一节不加证明地给出了一些关于有限晶格上基态总自旋的重要定理.
 - 后续的章节会致力于讨论半填充时的磁性行为, 即 Heisenberg 模型.
 - 对离开半填充时Hubbard模型的特性关心的读者可以看第19章. 那里讨论了 2D 掺杂反铁磁体, 与铜氧化物超导相联系, 利用了 $t - J$ 模型的大自旋展开来半经典地处理.
- 4.3 Exercise

Bibliography

A Green's function derivation of the Hartree-Fock approximation and Stoner's criterion is found in

- S. Doniach and E.H. Sondheimer, Green's Functions for Solid State Physicists (Benjamin/Cummings, 1974).

A comprehensive treatise on spin density waves, theory, and experiment is found in

- T. Moriya, Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism (SpringerVerlag, 1985).

For a recent review on rigorous theorems of the Hubbard model and open problems, see

- E. Lieb, Proceedings of the conference Advances in Dynamical Systems and Quantum Physics, Capri (World Scientific, 1993).

| Bibliography about Gutzwiller variational states

Gutzwiller variational states (4.26) were proposed in his classic paper

- M.C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. 10, 159 (1963).

Analytical calculations of correlations in Gutzwiller states were performed by

- W. Metzner and D. Vollhardt, Phys. Rev. B 37, 7382 (1988);

- F. Gebhard and D. Vollhardt, Phys. Rev. B 38, 6911 (1988).

The Haldane-Shastry model was introduced in

- F.D.M. Haldane, Phys. Rev. Lett. 60, 635 (1988);
- B.S. Shastry, Phys. Rev. Lett. 60, 639 (1988),

where the ground state is proven to be the Gutzwiller state Ψ^{GPG} of (4.27).

Z 4.1 Variational Magnetic States

Hubbard 模型和变分空间

Hubbard 模型

(Assa4.2)

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, s=\uparrow\downarrow} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}s} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

最简单的变分态是一系列的 Fock 态:

(Assa4.3)

$$|\{n_{\alpha}^{\gamma}\}\rangle$$

其中 α 标记单粒子态 $\{\phi_{\alpha}^{\gamma}\}$, γ 是一组变分参数.

哈密顿量(Assa4.2)中所出现的四个费米算符乘积, 其期望值可以因式分解为

(Assa4.4)

$$\langle c_1^{\dagger} c_3^{\dagger} c_4 c_2 \rangle = \langle c_1^{\dagger} c_2 \rangle \langle c_3^{\dagger} c_4 \rangle - \langle c_1^{\dagger} c_4 \rangle \langle c_3^{\dagger} c_2 \rangle$$

这里我们忽略了像 $\langle c^{\dagger} c^{\dagger} \rangle$ 这样的反常期望值.

这是一种平均场处理, 先对两粒子算符 $c_1^{\dagger} c_3^{\dagger} c_4 c_2$ 做常规平均场处理, 然后取期望值就得到了(Assa4.4).

也可以通过简单特例的分类讨论来理解. 考虑期望值 w.r.t. 的态是某个 Fock 态, 则容易知道期望值非零条件只有两种:

- $1 = 2 \neq 3 = 4$: $\langle c_1^{\dagger} c_3^{\dagger} c_4 c_2 \rangle = \langle c_1^{\dagger} c_2 c_3^{\dagger} c_4 \rangle = \langle c_1^{\dagger} c_2 \rangle \langle c_3^{\dagger} c_4 \rangle$
- $1 = 4 \neq 3 = 2$: $\langle c_1^{\dagger} c_3^{\dagger} c_4 c_2 \rangle = -\langle c_1^{\dagger} c_4 c_3^{\dagger} c_2 \rangle = -\langle c_1^{\dagger} c_4 \rangle \langle c_3^{\dagger} c_2 \rangle$

因此式(Assa4.4)相当于是这两种情况的综合考虑. 如果期望值 w.r.t. 的态是 Fock 态的线性组合, 则可能会让这两项均不为零.

自旋密度波态

但 Fock 空间实际上非常大, 在整个空间中做变分如大海捞针. 我们一般会根据体系基态的物理特性, 构造一个 ansatz, 它是由 Hilbert 空间中一些态构造而来的, 包含若干个待定参数(变分参数 γ), 如氢分子中就将两个原子轨道的线性组合作为总波函数 ansatz, 变分参数是线性叠加的系数.

用于描述磁序(magnetic ordering)的 Fock 态被称为自旋密度波态(spin density wave states, 简称 SDW 态). 这种态总可以通过将原始电子算符 $c_{\mathbf{k}s}$ 正则变换为磁性准粒子算符 $\alpha_{\mathbf{k}\pm}$ 来构造

(Assa4.5)

$$\begin{aligned}\alpha_{\mathbf{k}+}^{\dagger} &= \cos \theta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} + \sin \theta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger}, \\ \alpha_{\mathbf{k}-}^{\dagger} &= -\sin \theta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} + \cos \theta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger}.\end{aligned}$$

逆变换

(Assa4.5b)

$$\begin{aligned}c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} &= \cos \theta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}+}^{\dagger} - \sin \theta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}-}^{\dagger} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger} &= \sin \theta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}+}^{\dagger} + \cos \theta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}-}^{\dagger}\end{aligned}$$

- #Question 将 $c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}$ 和 $c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger}$ 做一个二维旋转之后得到 $\alpha_{\mathbf{k}\pm}$, \pm 应该已经不再具有自旋的物理意义, 对应什么含义?

- 磁性准粒子算符的指标 $\sigma = \pm$ 之间依然是正交的, 正则变换=二维旋转, 是保持两个坐标轴之间的正交性的. 这一点可以通过做反对易关系来直接验证,

$$\begin{aligned}\{\alpha_{\mathbf{k}+}, \alpha_{\mathbf{k}-}^\dagger\} &= \{\cos \theta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \sin \theta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, -\sin \theta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + \cos \theta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger\} \\ &= -\cos \theta_{\mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}} \{c_{\mathbf{k}\uparrow}, c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger\} + \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} \{c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^\dagger\} \\ &= 0\end{aligned}$$

- 另外, 正则变换还具有保"长度"(内积), 保"体积元", 保辛等等概念, 归结起来 $\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ 所产生的粒子的"份数"和电子算符 $c_{\mathbf{k}s}^\dagger$ 所产生的"一个电子"之间在测度上是一样的. 含有 N 个电子系统, 在两套描述之下的态, 构造所需用到的作用在真空态上的产生算符数量是一致的.
- #Question** 这里的 \mathbf{q} (用于上自旋和下自旋之间的动量差) 具有什么含义? $\theta_{\mathbf{k}}$ 作为旋转的角度具有什么含义?

变分SDW态是各种各样可能的磁性准粒子构成的"海", 类比于费米海, 由下面的态矢给出

(Assa4.6)

$$|\Psi^{\mathbf{q}, \theta_{\mathbf{k}}, \Sigma_F}\rangle = \prod_{\sigma=\pm, \mathbf{k} \in \Sigma_F^\pm} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger |0\rangle$$

Ψ 的变分参数包括:

- 磁序波矢 (ordering wave vector) \mathbf{q} , 它标记了一组正则变换(Assa4.5), 意味着你会用动量相差多少的电子来混合得到准粒子.
- 角度 $\{\theta_{\mathbf{k}}\}$: 不同 \mathbf{k} 的正则变换参数
- 占据数 $\{n_{\mathbf{k}}^\pm = 1, 0\}$: 定义了两个磁性准粒子构成的费米面 (记为 Σ_F^\pm), 其中装入了 $n\mathcal{N}$ 个占据态:

(Assa4.7)

$$\begin{aligned}n &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\sigma, \mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^\sigma, \\ n_{\mathbf{k}}^\sigma &= \begin{cases} 1 & \mathbf{k} \in \Sigma_F^\sigma \\ 0 & \mathbf{k} \notin \Sigma_F^\sigma \end{cases}.\end{aligned}$$

其中 \mathcal{N} 是晶格中格点的数量, n 是平均单个格点的态数目, 即**填充数**.

- 总粒子数 $n\mathcal{N}$ (占据态数) 或者填充数 n , 或许是电子和磁性准粒子两种描述之间唯一相等的量. 就像哈密顿正则方程控制的动力学中, 一般来说, 只有能量总是守恒的.

序参量

变分参数通过将 Ψ 对应能量最小化来确定. 对某一个波矢 \mathbf{q} 的 Ψ , 有机会实现在 $x-y$ 方向上具有非零磁化强度且 z 方向均匀磁化. 这一点可以通过考察一些自旋算符的期望值来看.

另外, 这里所计算的自旋算符期望值, 也是我们计算变分能量时会用到的基本单元.

$x-y$ 平面磁序

首先注意到, 升算符期望值可以与 x, y 方向自旋期望值直接表达出来

$$\langle S_i^+ \rangle = \langle S_i^x \rangle + i \langle S_i^y \rangle = \sqrt{\langle S_i^x \rangle^2 + \langle S_i^y \rangle^2} e^{i \arctan\left(\frac{\langle S_i^y \rangle}{\langle S_i^x \rangle}\right)}$$

其中的相位因子反应了 $x-y$ 平面上局域自旋的指向. 下面我们对磁性准粒子态空间中的升算符期望值进行具体计算

(Assa4.8a)

$$\begin{aligned}
\langle S_i^+ \rangle &= \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_i} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}_i} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow} \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}'} e^{-i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{x}_i} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\downarrow} \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}'} e^{-i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{x}_i} \sum_{\mathbf{k}} \left(\sin \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'} \cos \theta_{\mathbf{k}} \langle \alpha_{\mathbf{k}+}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'+} \rangle \right. \\
&\quad \left. - \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'} \langle \alpha_{\mathbf{k}-}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'-} \rangle \right) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}'} e^{-i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{x}_i} \sum_{\mathbf{k}} \left(\sin \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'} \cos \theta_{\mathbf{k}} \langle \alpha_{\mathbf{k}+}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}+} \rangle \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \right. \\
&\quad \left. - \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'} \langle \alpha_{\mathbf{k}-}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}-} \rangle \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \right) \\
&= \frac{1}{N} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i} \sum_{\mathbf{k}} \left(\sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^+ - \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^- \right) \\
&= m_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i},
\end{aligned}$$

- 第一步需要代入Wannier表象到Bloch表象的Fourier变换

$$\begin{aligned}
f(\mathbf{R}_j^0) &\equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{FBZ}} f(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^0}, \quad \delta_{\mathbf{R}_j^0,0} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \text{FBZ}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^0} \\
f(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N f(\mathbf{R}_j^0) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^0}, \quad \delta_{\mathbf{k},0} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^0}
\end{aligned}$$

- 第三行等号代入了正则变换表达式(Asa4.5b), 并且考虑到了磁性准粒子指标 $\sigma = \pm$ 之间的正交性.
- 倒数第三个等号利用了不同磁性准粒子指标 \mathbf{k} 之间的正交性. 这是显然的直接从电子算符继承下来的, 每个 \mathbf{k} 对应的正则变换都是独立的.
- 倒数第二个等号引入了磁性准粒子态密度 $n_{\mathbf{k}}^\pm \equiv \langle \alpha_{\mathbf{k}\pm}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}\pm} \rangle$.

最后一步定义了用于描述 $x - y$ 平面磁序的序参量,

(Asa4.8b)

$$m_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \sin(2\theta_{\mathbf{k}}) (n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^-).$$

- $m_{\mathbf{q}} \neq 0$ 时 $\langle S_i^+ \rangle$ 描述了 $x - y$ 平面上的螺旋形自旋, 自旋角度由与**实空间**相关的相位 $\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i$ 给出, 如图4.1所示.

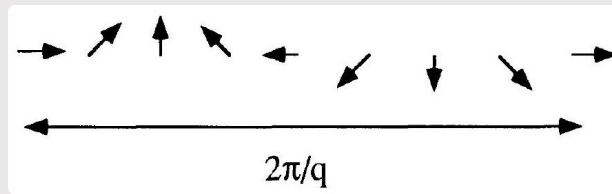


图4.1. 波矢 \mathbf{q} 所标记的螺旋自旋序(Spiralling spin order), 图中展示了一个波长内的自旋变换. 为具体起见, 可以认为这张图即 xy 平面, $\mathbf{q} = q\mathbf{e}_x$, 图中画的是沿着 x 方向, $x - y$ 平面上自旋角度的变化趋势.

- 当我们不做正则变换, 即 $\theta_{\mathbf{k}} = 0$ 时, $m_{\mathbf{q}} = 0$. 这符合我们对电子Fock态的计算经验,

另外可以证明, 动量空间中的自旋算符期望值满足

(Asa4.9)

$$\langle S^+(\mathbf{q}) \rangle = \langle S^-(\mathbf{-q}) \rangle^*.$$

- 这种结论的证明过程类似于: 对于一个实场 $E(\mathbf{x})$, 其Fourier展开式中, 互相相反数频率的Fourier分量之间一定互为共轭, $E_{\mathbf{q}} = E_{-\mathbf{q}}^*$.
- 证明:

$$\begin{aligned}\langle S_i^+ \rangle &= \langle S_i^- \rangle^* \\ \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i} \langle S^+(\mathbf{q}) \rangle &= \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i} \langle S^-(\mathbf{q}) \rangle^* \\ \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i} \langle S^+(\mathbf{q}) \rangle &= \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i} \langle S^-(-\mathbf{q}) \rangle^* \\ \langle S^+(\mathbf{q}) \rangle &= \langle S^-(-\mathbf{q}) \rangle^*\end{aligned}$$

I z方向磁序

z 方向的磁化强度由如下序参量描述, 最后计算出来的结果与 \mathbf{q} 无关

(Assa4.10a)

$$\begin{aligned}\langle S_i^z \rangle &= \frac{1}{2} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{q}'} e^{-i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{x}_i} \sum_{\mathbf{k}} \left\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\downarrow} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{q}'} e^{-i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{x}_i} \sum_{\mathbf{k}} \left\langle \cos^2 \theta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}+}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'+} + \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}-}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'-} \right. \\ &\quad \left. - \sin^2 \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{q}+}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{q}+\mathbf{q}'+} - \cos^2 \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}-\mathbf{q}+\mathbf{q}'-} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{q}'} e^{-i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{x}_i} \sum_{\mathbf{k}} \left(\cos^2 \theta_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^+ + \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^- - \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^+ - \cos^2 \theta_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^- \right) \delta_{\mathbf{q}',0} \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \left(\cos 2\theta_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^+ - \cos 2\theta_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^- \right) \\ &= m_z,\end{aligned}$$

(Assa4.10b)

$$m_z = \frac{1}{2\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \cos(2\theta_{\mathbf{k}}) (n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^-).$$

Hubbard 模型变分能量

Hubbard 相互作用的期望值可以利用式(4.4)来因式分解得到

(Assa4.11)

$$\begin{aligned}\left\langle U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right\rangle &= U \sum_i \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle - U \sum_i \langle S_i^+ \rangle \langle S_i^- \rangle \\ &= U \sum_i \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle - U \sum_i m_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i} m_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i} \\ &= \mathcal{N} U \frac{n^2}{4} - \mathcal{N} U m_z^2 - \mathcal{N} U m_{\mathbf{q}}^2\end{aligned}$$

- 其中第一项期望值利用了如下期望值恒等式

$$\begin{aligned}\langle S_i^z \rangle &= \frac{1}{2} (\langle n_{i\uparrow} \rangle - \langle n_{i\downarrow} \rangle), \quad \frac{1}{2} n = \frac{1}{2} (\langle n_{i\uparrow} \rangle + \langle n_{i\downarrow} \rangle) \\ \frac{n^2}{4} - \langle S_i^z \rangle^2 &= \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle\end{aligned}$$

- 自旋算符期望值 $\langle S_i^z \rangle$ 见式(Assa4.10a), $\langle S_i^+ \rangle$ 见式(Assa4.8a).

动能项的期望值则为

(Assa4.12)

$$\begin{aligned}
 T &= \left\langle \sum_{\mathbf{k}, s} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}s}^\dagger c_{\mathbf{k}s} \right\rangle = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} (\cos^2 \theta_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^+ + \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^-) \\
 &\quad + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} (\sin^2 \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ + \cos^2 \theta_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} n_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^-) \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} (\cos^2 \theta_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^+ + \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^-) \\
 &\quad + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} (\sin^2 \theta_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^+ + \cos^2 \theta_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^-) \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} \left(\epsilon_{\mathbf{k}} \frac{1 + \cos 2\theta_{\mathbf{k}}}{2} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \frac{1 - \cos 2\theta_{\mathbf{k}}}{2} \right) n_{\mathbf{k}}^+ \\
 &\quad + \sum_{\mathbf{k}} \left(\epsilon_{\mathbf{k}} \frac{1 - \cos 2\theta_{\mathbf{k}}}{2} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \frac{1 + \cos 2\theta_{\mathbf{k}}}{2} \right) n_{\mathbf{k}}^- \\
 &= \sum_{\pm, \mathbf{k}} \left[\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} \pm \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} \right) \cos(2\theta_{\mathbf{k}}) \right] n_{\mathbf{k}}^\pm
 \end{aligned}$$

通过往 T 塞入 $-2(\mathcal{N}U m_z^2 + \mathcal{N}U m_{\mathbf{q}}^2)$, 定义

(Assa4.14)

$$E^0 = \sum_{\pm \mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}^\pm n_{\mathbf{k}}^\pm$$

$E_{\mathbf{k}}^\pm$ 是所谓"磁性能带能量(magnetic band energies)", 定义为

(Assa4.15)

$$E_{\mathbf{k}}^\pm = \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} \pm \left[\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} - U m_z \right) \cos(2\theta_{\mathbf{k}}) - U m_{\mathbf{q}} \sin(2\theta_{\mathbf{k}}) \right]$$

多加的项为

$$\begin{aligned}
 &\sum_{\pm \mathbf{k}} \pm [-U m_z \cos(2\theta_{\mathbf{k}}) - U m_{\mathbf{q}} \sin(2\theta_{\mathbf{k}})] n_{\mathbf{k}}^\pm \\
 &= -U m_z \sum_{\mathbf{k}} \cos(2\theta_{\mathbf{k}}) (n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^-) - U m_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}} \sin(2\theta_{\mathbf{k}}) (n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^-) \\
 &= -2\mathcal{N}U m_z^2 - 2\mathcal{N}U m_{\mathbf{q}}^2
 \end{aligned}$$

注意, $E_{\mathbf{k}}$ 是基态的变分参数, 并不是模型的真实激发能量.

基态能量的变分表达式为

(Assa4.13)

$$E[\mathbf{q}, \theta_{\mathbf{k}}, \Sigma^\pm] = \langle \Psi^{\mathbf{q}, \theta_{\mathbf{k}}, \Sigma^F} | T + U | \Psi^{\mathbf{q}, \theta_{\mathbf{k}}, \Sigma^F} \rangle = E^0 + U\mathcal{N} (m_z^2 + m_{\mathbf{q}}^2 + n^2/4)$$

变分能量最小化

很容易验证, 式(Assa4.14)中的 E^0 关于 $m_{\mathbf{q}}$ 和 m_z 的最小化一定会分别带来式(Assa4.8b)和(Assa4.10b).

$$0 = \frac{\partial E^0}{\partial m_{\mathbf{q}}} \propto m_{\mathbf{q}} \Rightarrow m_{\mathbf{q}} = 0$$

$$0 = \frac{\partial E^0}{\partial m_z} \propto m_z \Rightarrow m_z = 0$$

这并不直接给出关于 $\theta_{\mathbf{k}}$ 的信息. 因此, 我们可以将 m_z 和 $m_{\mathbf{q}}$ 作为自由变分参数, 它们并不依赖于 $\cos(2\theta_{\mathbf{k}})$. 换句话说, 我们后面对 $\theta_{\mathbf{k}}$ 求导的时候, 不会考虑 m_z 和 $m_{\mathbf{q}}$ 对 $\theta_{\mathbf{k}}$ 的依赖.

总之, 现在我们的任务是最小化泛函 $E[m_{\mathbf{q}}, m_z, \mathbf{q}, \theta_{\mathbf{k}}, \Sigma_f^{\pm}]$.

- 从式(Assa4.14)中可以清晰看到, 最小能量对应的 Σ_F^{\pm} 是那些依次装入了最低磁性能带能量的(磁性准粒子)费米面.
- 变分函数 $\cos(2\theta_{\mathbf{k}})$ 由下式确定

(Assa4.16)

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial \cos(2\theta_{\mathbf{k}})} &= \frac{\partial E^0}{\partial \cos(2\theta_{\mathbf{k}})} \\ &= \left[\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} - Um_z + Um_{\mathbf{q}} \cot(2\theta_{\mathbf{k}}) \right] (n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^-) = 0 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \sin(2\theta_{\mathbf{k}})}{\partial \cos(2\theta_{\mathbf{k}})} = \frac{\partial(2\theta_{\mathbf{k}})}{\partial \cos(2\theta_{\mathbf{k}})} \frac{\partial \sin(2\theta_{\mathbf{k}})}{\partial(2\theta_{\mathbf{k}})} = \frac{\cos(2\theta_{\mathbf{k}})}{-\sin(2\theta_{\mathbf{k}})} = -\cot(2\theta_{\mathbf{k}})$$

这给出了 $\cos(2\theta_{\mathbf{k}})$ 关于 m_z 和 $m_{\mathbf{q}}$ 的显明依赖,

$$\cot(2\theta_{\mathbf{k}}) = \frac{\cos(2\theta_{\mathbf{k}})}{\sin(2\theta_{\mathbf{k}})} = -\frac{\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} - Um_z}{Um_{\mathbf{q}}}$$

然后从上式导出 $\sin(2\theta_{\mathbf{k}})$ 和 $\cos(2\theta_{\mathbf{k}})$, 这里有一点歧义, 就是究竟把负号放在 \sin 还是 \cos 上? 书上是把负号放在了 \sin 上. 但结合 m_z 的表达式, 似乎放在 \cos 上更合理. 考虑 $\mathbf{q} = 0$ 的特例, 则有 $\cos(2\theta_{\mathbf{k}}) \sim -m_z$, 这说明两者异号, 但从 m_z 表达式(Assa4.10b)看出矛盾, 当 $m_z > 0$ 时, 物理上可知对大多数的 \mathbf{k} 有 $n_{\mathbf{k}}^+ > n_{\mathbf{k}}^-$, 这意味着 $\cos(2\theta_{\mathbf{k}})$ 应当也是正的.

(Assa4.17)

$$\begin{aligned} \cos(2\theta_{\mathbf{k}}) &= \frac{\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} - Um_z}{\sqrt{\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} - Um_z\right)^2 + (Um_{\mathbf{q}})^2}} \\ \sin(2\theta_{\mathbf{k}}) &= \frac{-Um_{\mathbf{q}}}{\sqrt{\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} - Um_z\right)^2 + (Um_{\mathbf{q}})^2}} \end{aligned}$$

将式(Assa4.17)代入到(Assa4.15)之中, 可以得到磁性能带(magnetic bands)

(Assa4.18)

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}}^{\pm}(m_z, m_{\mathbf{q}}) &= \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} \pm \left[\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} - Um_z \right) \cos(2\theta_{\mathbf{k}}) - Um_{\mathbf{q}} \sin(2\theta_{\mathbf{k}}) \right] \\ &= \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} \pm \left[\frac{\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} - Um_z \right)^2 + (Um_{\mathbf{q}})^2}{\sqrt{\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} - Um_z \right)^2 + (Um_{\mathbf{q}})^2}} \right] \\ &= \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} - Um_z \right)^2 + (Um_{\mathbf{q}})^2} \end{aligned}$$

现在, 两个序参量 m_z 和 m_q 确定了磁性能带、费米面(会优先填充 E_k^- 以获得最低能量)和总能量 $E(m_z, m_q)$. 最后我们只需要对序参量求变分极小值, 得到如下的耦合方程组

(Assa4.19)

$$\begin{aligned}\frac{dE}{dm_q} &= \frac{dE^0}{dm_q} - 2\mathcal{N}U m_q = 0 \\ \frac{dE}{dm_z} &= \frac{dE^0}{dm_z} - 2\mathcal{N}U m_z = 0.\end{aligned}$$

上式是著名的**零温Hartree-Fock平均场方程**. 对任意无相互作用能带结构 ϵ_k , 填充数 n 和相互作用 U , 这组方程都可以被求解 (大多数情况是数值解).

不稳定性判据: Stoner判据

从式(Assa4.19)中, 我们可以得到关于顺磁态不稳定、形成磁性态的判据。

铁磁不稳定性

通过假设 $m_q = 0$, E^0 为

$$\begin{aligned}E^0(m_z, m_q = 0) &= \sum_{\pm \mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}^{\pm} n_{\mathbf{k}}^{\pm} \\ &= \sum_{\pm \mathbf{k}} \left[\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} - U m_z \right)^2} \right] n_{\mathbf{k}}^{\pm} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} (n_{\mathbf{k}}^+ + n_{\mathbf{k}}^-) + \left| \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{2} - U m_z \right| (n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^-) \right]\end{aligned}$$

✅ TODO

现在由于我们讨论的是由序参量 m_z 所描述的铁磁性, \mathbf{q} 并不重要, 下面我们取 $\mathbf{q} = 0$,

$$E^0(m_z, m_q = 0) = \sum_{\mathbf{k}} [\epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^+ + \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^- + U |m_z| (n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^-)]$$

对其求 m_z 导数时, 需要注意磁性准粒子费米面 $n_{\mathbf{k}}^{\pm}$ 的取值是由 m_z, m_q 确定的, 当 $m_q = 0$ 时, $\cos \theta_{\mathbf{k}} = 1$ 恒成立, 故有

$$m_z = \frac{1}{2\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} \cos(2\theta_{\mathbf{k}}) (n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^-) = \frac{1}{2\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^-)$$

E^0 第二项可以表达为 m_z 的二次函数,

$$E^0(m_z, m_q = 0) = \sum_{\mathbf{k}} [\epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^+ + \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^-] + 2\mathcal{N}U |m_z| m_z$$

第一项则需要做近似了. 设 $\sigma = \pm$ 对应的费米面为 μ_{σ} , 则有

$$\begin{aligned}\sum_{\mathbf{k}} [\epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^+ + \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^-] &= \sum_{\epsilon_{\mathbf{k}} \leq \mu_+} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^+ + \sum_{\epsilon_{\mathbf{k}} \leq \mu_-} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^- \\ &= \mathcal{N} \int_B^{\mu_+} \epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon + \mathcal{N} \int_B^{\mu_-} \epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon\end{aligned}$$

$$E(m_z) = \mathcal{N} \int_B^{\mu_+} \epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon + \mathcal{N} \int_B^{\mu_-} \epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon + 2\mathcal{N}U |m_z| m_z + U\mathcal{N} (m_z^2 + n^2/4)$$

这里的 $\rho(\epsilon)$ 是单位格点单位自旋态密度. 扣去 $m_z = 0$ 时($\mu_{\pm} = \mu_0$)的能量, 得到

$$\begin{aligned} \Delta E(m_z) &= \mathcal{N} \int_{\mu_0}^{\mu_+} \epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon - \mathcal{N} \int_{\mu_-}^{\mu_0} \epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon + 2\mathcal{N}U |m_z| m_z + U\mathcal{N}m_z^2 \\ &\approx \mathcal{N} \rho(\epsilon_F) \frac{\mu_+^2 + \mu_-^2 - 2\mu_0^2}{2} + 2\mathcal{N}U |m_z| m_z + U\mathcal{N}m_z^2 \end{aligned}$$

$\sigma = \pm$ 的费米能级由 m 确定

$$\begin{aligned} m_z &= \frac{1}{2\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^-) = \frac{1}{2\mathcal{N}} \mathcal{N} \int d\epsilon_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}}^+ - n_{\mathbf{k}}^-) \rho(\epsilon_{\mathbf{k}}) \\ &= \frac{1}{2} \left(\int_B^{\mu_+} d\epsilon \rho(\epsilon) - \int_B^{\mu_-} d\epsilon \rho(\epsilon) \right) \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mu_-}^{\mu_+} d\epsilon \rho(\epsilon) \approx \frac{1}{2} \rho(\epsilon_F) [\mu_+ - \mu_-] \end{aligned}$$

近似认为 μ_{\pm} 关于 μ_0 上下对称, 有

$$\rho(\epsilon_F) (\mu_+ - \mu_0) = \rho(\epsilon_F) (\mu_0 - \mu_-) = m_z$$

$$\mu_{\sigma} = \mu_0 + \sigma \frac{m_z}{\rho(\epsilon_F)}$$

故有

$$\Delta E(m_z) = \frac{\mathcal{N}m_z^2}{\rho(\epsilon_F)} + 2\mathcal{N}U |m_z| m_z + U\mathcal{N}m_z^2$$

这里的绝对值非常碍事. 按照Fazekas书上的经验, 关联项就是 $-Um_z^2$. 在这里意味着要让 $m_z < 0$, 似乎有点不太合理. 如果一开始将负号放在 \cos 上, 则结果为

$$\Delta E(m_z) = \frac{\mathcal{N}m_z^2}{\rho(\epsilon_F)} - 2\mathcal{N}U |m_z| m_z + U\mathcal{N}m_z^2$$

$m_z > 0$ 就可以让它回归到Fazekas书上的表达式, 或者说回到了式(Asa4.11). 但无论如何, 要求 m_z 的正负都很不自然.

并将式(Asa4.19)在 $m_z = 0$ 附近线性展开, 我们得到沿 z 方向上有均匀磁化的条件($m_z \neq 0$),

(Asa4.20)

$$\begin{aligned} \frac{dE^0}{dm_z} &= 4\mathcal{N}U^2 m_z \chi|_{m_z=0} + \mathcal{O}(m_z^2) \\ &= 2\mathcal{N}m_z U, \end{aligned}$$

其中 χ 是无相互作用电子的均匀磁化率(magnetic susceptibility)

(Asa4.21)

$$\chi(0) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{dn(\epsilon_{\mathbf{k}})}{d\epsilon_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{2} \rho_{\uparrow}(0)$$

其中 $n(\epsilon) = (e^{\epsilon/T} + 1)^{-1}$ 是费米函数, $\rho_{\uparrow}(0)$ 是无相互作用体系的费米能级处单位格点单位自旋态密度. 式(Assa4.21)就得到了著名的**铁磁不稳定性(ferromagnetic instability)**的**Stoner 判据**: 要么 $m_z = 0$, 要么

(Assa4.22)

$$2U\chi(0) = 1$$

| SDW不稳定性

另一个不稳定性是往 $m_{\mathbf{q}} \neq 0$ 的SDW态发展的. 假设 $m_z = 0$, 然后将式(Assa4.19)展开到 $m_{\mathbf{q}}$ 的线性阶, 我们得到了 $m_{\mathbf{q}} \neq 0$ 的解的条件

(Assa4.23)

$$\begin{aligned}\frac{dE^0}{dm_{\mathbf{q}}} &= 4U^2 m_{\mathbf{q}} \chi(\mathbf{q})|_{m_{\mathbf{q}}=0} + \mathcal{O}(m_{\mathbf{q}}) \\ &= 2m_{\mathbf{q}} U\end{aligned}$$

其中 $\chi(\mathbf{q})$ 是波矢 \mathbf{q} 处的磁化率

(Assa4.24)

$$\chi(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - n(\epsilon_{\mathbf{k}})}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}$$

式(4.23)同样带来了一个**波矢 \mathbf{q} 处SDW不稳定性(spin density wave instability at wave vector \mathbf{q})**的 **Stoner 判据**

(Assa4.25)

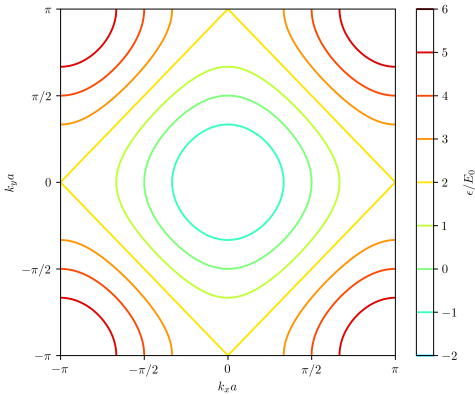
$$2U\chi(\mathbf{q}) = 1$$

因此将磁化率 $\chi(\mathbf{q})$ 最大化就给出了磁序波矢(ordering magnetic vector), 随着 U 的逐渐增大时, 磁性不稳定性首先发生在这一磁性波矢上.

| 费米面嵌套

根据式(Assa4.24), 我们知道 $\chi(0)$ 只依赖于费米面处态密度, 而有限 $|\mathbf{q}|$ 处的 $\chi(\mathbf{q})$ 会对费米面的几何非常敏感, 特别是它的嵌套特性(nesting properties).

- "嵌套(Nesting)"指的是费米面上存在可以用波矢 \mathbf{q}_{nest} 分离的平行剖面(parallel sections).
- 这些效应在1D和近半满2D正方晶格中非常显著.
 - 在一维体系中, 位于 $-k_F$ 处的费米面平移 $2k_F$ 之后就会和 $+k_F$ 的费米面完全重合, 这种现象被称为费米面嵌套(Fermi surface nesting), 这个平移矢量被称为嵌套矢量(nesting vector).
 - 2D正方晶格的紧束缚能带



- 嵌套为式(Asa4.24)中的求和提供了大量的低能分母 $|\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_{\text{nest}}}| \ll W$, 这增强了 $\chi(q_{\text{nest}})$.
- 这一发散可能会产生磁性基态, 即使关联 U/t 非常小!

总结和讨论

- 上面展示的磁性态常常用于金属性铁磁体(如铁)和SDW系统(如铬)的建模.
 - 在激发的 Hartree-Fock 平均场理论中, 磁性能带结构中没有能隙意味着存在低能携流激发(low-lying current carrying excitations). 这样的系统被称为**巡游磁体(itinerant magnets)**.
- 所有这些变分分析真正告诉我们的是, 最低SDW态具有比任何其他Fock态都低的能量, 包括非磁性能带结构.
 - 但是, Stoner判据其实高估了磁序, 低估了自旋涨落带来的量子无序效应.
 - 有限温Hartree-Fock方程会找到长程磁序, 甚至在1D和2D中. 这一点违背了 Mermin-Wagner 定理 (见第六章).
 - 因此, 我们只能说, 当Stoner判据满足时, Hubbard模型中至少存在短程磁序.
- 在这里, 我们只关心了磁性变分Fock态. 另外还存在其他变分Fock态, 分别描述电荷密度序(charge density ordering), 超导电性或者几个不同序的混合.
 - 不同的序可以通过对电子开展不同的正则变换来得到, 类比于式(Asa4.5). 例如:
 - 电荷密度波(CDW): 将相同自旋、不同动量的粒子做混合
 - 超导态: 将粒子和空穴混合, 打破规范对称性.
 - 每个可能序的加入会增加变分参数和平均场方程. 对角度和序参量的求解是对本节讨论一个直接而又笨重的推广.

Gutzwiller states

作为最后的对变分态主题的讨论, 我们介绍一类重要的non-Fock变分态--**Gutzwiller 态**

(Asa4.26)

$$\Psi^g = \prod_i [1 - g n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}] \Psi^{\text{Fock}}$$

其中 Ψ^{Fock} 是任意的变分Fock态, 例如(Asa4.6). g 是一个额外的参数, 它用于降低双占据态的相对权重. $g \rightarrow 1$ 就完全消除了双占据态. Gutzwiller 态家族中一个被研究地特别好的成员是 1D Gutzwiller 投影费米气体(Gutzwiller Projected Fermi Gas in one dimension):

(Asa4.27)

$$\Psi^{GPFG} = \prod_i (1 - n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}) \prod_{|\mathbf{k}| \leq \pi/a} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle$$

Ψ^{GPFG} 是一个纯粹的自旋变分态. 事实上, 它是 Haldane-Shastry Heisenberg model of $S = \frac{1}{2}$ 的精确基态, 具有随距离 $1/r^2$ 衰减的反铁磁耦合.

Gutzwiller 态的能量和关联计算是非常非平庸的, 因为它们并不能像式(Asa4.4)一样将期望值简单因式分解. 关于 g 的微扰展开会引入 $g n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ 的大量乘积. 在1D系统中, 这样的解析计算由Vollhardt and Metzner给出了.

| Bibliography about Gutzwiller variational states

Gutzwiller variational states (4.26) were proposed in his classic paper

- M.C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. 10, 159 (1963).

Analytical calculations of correlations in Gutzwiller states were performed by

- W. Metzner and D. Vollhardt, Phys. Rev. B 37, 7382 (1988);

- F. Gebhard and D. Vollhardt, Phys. Rev. B 38, 6911 (1988).

The Haldane-Shastry model was introduced in

- F.D.M. Haldane, Phys. Rev. Lett. 60, 635 (1988);
- B.S. Shastry, Phys. Rev. Lett. 60, 639 (1988),

where the ground state is proven to be the Gutzwiller state Ψ^{GPG} of (4.27).