

Lista 5 de FI-193

1. Fetter & Walecka, Prob. 7.5

2. Considere o problema de elétrons que não interagem entre si mas que interagem com as vibrações da rede cristalina (fônons), conhecido como o problema elétron-fônon. Vamos considerar elétrons com uma dispersão livre ($E_F = k_F^2/2m$ é a energia de Fermi)

$$H_e = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\frac{k^2}{2m} - \mu \right) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}.$$

e fônons acústicos longitudinais descritos por operadores bosônicos $a_{\mathbf{q}}, a_{\mathbf{q}}^\dagger$ e dispersão $\omega_{\mathbf{q}} = cq < cq_0 = \omega_D$, onde $\omega_D \ll E_F$ é a frequência de Debye e q_0 é o momento máximo dos fônons (“cutoff”)

$$H_{ph} = \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{q}} cq a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}}.$$

Lembre-se que fônons tem potencial químico zero, pois o número total de fônons não é conservado. A interação elétron-fônon é descrita por

$$H_{int} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} M_{\mathbf{q}} \left(c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \right) \left(a_{-\mathbf{q}}^\dagger + a_{\mathbf{q}} \right), \quad (1)$$

onde $M_{\mathbf{q}} = g_{\mathbf{q}}\sqrt{q} = M_{-\mathbf{q}}^*$ (ver notas de aula) é a constante de acoplamento. Vamos simplificar e considerar $g_{\mathbf{q}} \approx g = \text{const.}$

(i) Como os fônons são sempre trocados através da combinação $a_{\mathbf{q}}^\dagger + a_{-\mathbf{q}}$ (Eq. 1), é conveniente definir a função de Green de Matsubara dos fônons como

$$\mathcal{D}(\mathbf{q}, \tau) = - \left\langle T_\tau \left\{ [a_{-\mathbf{q}}(\tau) + a_{\mathbf{q}}^\dagger(\tau)] [a_{\mathbf{q}}(0) + a_{-\mathbf{q}}^\dagger(0)] \right\} \right\rangle.$$

Calcule a função de Green de Matsubara não-interagente dos fônons $\mathcal{D}^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n)$. Note que essa função de Green tem o seguinte vínculo $\mathcal{D}^{(0)}(\mathbf{q}, \nu_n) \propto \theta(q_0 - q)$.

(ii) Calcule a auto-energia dos elétrons $\Sigma_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, \omega_n)$ em segunda ordem de teoria de perturbação em g .

(iii) Faça a continuação analítica de $\Sigma_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}, \omega_n)$ para o eixo real e obtenha a função avançada $\Sigma_\sigma^{(2A)}(\mathbf{k}, \omega - i\eta)$. Você deve encontrar

$$\Sigma^A(\mathbf{k}, \omega) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} |M_{\mathbf{p}}|^2 \theta(q_0 - |\mathbf{p}|) \left[\frac{1 + n[\omega(\mathbf{p})] - f[\xi(\mathbf{k} - \mathbf{p})]}{\omega - \xi(\mathbf{k} - \mathbf{p}) - \omega(\mathbf{p}) - i\eta} + \frac{n[\omega(\mathbf{p})] + f[\xi(\mathbf{k} - \mathbf{p})]}{\omega - \xi(\mathbf{k} - \mathbf{p}) + \omega(\mathbf{p}) - i\eta} \right], \quad (2)$$

onde $n(x) = 1/(e^{\beta x} - 1)$ e $f(x) = 1/(e^{\beta x} + 1)$ são as funções de distribuição de Bose-Einstein e Fermi-Dirac, respectivamente.

(iv) A partir de agora, considere o limite de $T = 0$. Para simplificar os cálculos, use $q_0 = k_F$, já que essas duas quantidades são da mesma ordem. Mostre que

$$\left| \frac{1}{v_F} \frac{\partial \text{Re} [\Sigma^A(\mathbf{k}, 0)]}{\partial k} \right|_{k=k_F} \ll \left| \frac{\partial \text{Re} [\Sigma^A(k_F, \omega)]}{\partial \omega} \right|_{\omega=0},$$

onde $v_F = k_F/m \gg c$. Isso significa que a dependência da auto-energia com a frequência é muito mais forte que dependência com o momento e esta última pode ser desprezada. Para esse cálculo, a seguinte troca de variáveis é útil

$$(\mathbf{k} - \mathbf{p})^2 = k^2 + p^2 - 2kp\mu,$$

onde $\mu = \cos \theta$ e θ é o ângulo entre \mathbf{k} e \mathbf{p} . As duas derivadas acima podem ser calculadas analiticamente para o modelo simplificado que estamos usando ou, pelo menos, reduzidas a uma integral simples, que pode ser estimada.

(v) A partir de

$$\left. \frac{\partial \text{Re} [\Sigma^A(k_F, \omega)]}{\partial \omega} \right|_{\omega=0},$$

obtenha a renormalização da velocidade de Fermi (ou a massa efetiva) e o resíduo de quasi-partícula Z devido à interação elétron-fônon.

(vi) Obtenha a taxa de decaimento da quasi-partícula $\text{Im} [\Sigma^A(k_F, \omega)]$ como função da frequência para $0 < \omega < \omega_D$. Mostre que ela obedece a condição de validade da teoria dos líquidos de Fermi de Landau: $\text{Im} [\Sigma^A(k_F, \omega)] \ll \omega$ quando $\omega \rightarrow 0$.

(vii) É comum definir-se a função de Migdal

$$\alpha^2 F(\nu, \hat{\mathbf{k}}) \equiv \int \frac{dS_{\hat{\mathbf{p}}}}{(2\pi)^3 v_{\hat{\mathbf{p}}}} |M_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}|^2 \theta(q_0 - |\mathbf{k} - \mathbf{p}|) \delta[\nu - \omega(\mathbf{k} - \mathbf{p})],$$

onde $dS_{\hat{\mathbf{p}}}$ é um elemento de área na superfície de Fermi na direção $\hat{\mathbf{p}}$, $v_{\hat{\mathbf{p}}} = \nabla \xi(\mathbf{p})$ é a velocidade de Fermi na direção $\hat{\mathbf{p}}$ e tanto \mathbf{k} quanto \mathbf{p} são tomados na superfície de Fermi. Usando essa definição da função de Migdal e supondo que a integral na Eq. (2) é dominada pela região da superfície de Fermi, mostre que

$$\Sigma^A(k_F, \omega) = \int_0^\infty d\nu \int_{-\infty}^\infty d\xi \alpha^2 F(\nu, \hat{\mathbf{k}}) \left[\frac{1 + n(\nu) - f(\xi)}{\omega - \xi - \nu - i\eta} + \frac{n(\nu) + f(\xi)}{\omega - \xi + \nu - i\eta} \right]. \quad (3)$$

A partir dessa expressão, mostre que a $T = 0$,

$$\Sigma^A(k_F, \omega) = \int_0^\infty d\nu \alpha^2 F(\nu, \hat{\mathbf{k}}) \ln \left(\frac{\omega - \nu - i\eta}{\omega + \nu - i\eta} \right),$$

(faça a integral sobre ξ entre $-D$ e D , onde $\omega, \nu \ll D$),

$$-\left. \frac{\partial \text{Re} [\Sigma^A(k_F, \omega)]}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} = 2 \int_0^\infty d\nu \frac{\alpha^2 F(\nu, \hat{\mathbf{k}})}{\nu},$$

e, se $0 < \omega < \omega_D$,

$$\text{Im} [\Sigma^A(k_F, \omega)] = \pi \int_0^\omega d\nu \alpha^2 F(\nu, \hat{\mathbf{k}}).$$

(viii) Para o nosso modelo acima $dS_{\hat{\mathbf{p}}} = k_F^2 d\Omega_{\hat{\mathbf{p}}}$ e $v_{\hat{\mathbf{p}}} = v_F$. Mostre que, nesse caso,

$$\alpha^2 F(\nu) = \frac{\rho_F g^2}{2c} \left(\frac{\nu}{\omega_D} \right)^2 \theta(\nu) \theta(\omega_D - \nu), \quad (4)$$

que não depende de $\hat{\mathbf{k}}$. Na expressão acima

$$\rho_F = \frac{mk_F^2}{2\pi^2},$$

é densidade de estados dos elétrons (por spin) na superfície de Fermi. Use a função de Migdal acima e recupere os resultados para $\left. \frac{\partial \text{Re} [\Sigma^A(k_F, \omega)]}{\partial \omega} \right|_{\omega=0}$ e $\text{Im} [\Sigma^A(k_F, \omega)]$ obtidos nos itens (v) e (vi).

(ix) Considere agora a expressão (3) em temperatura finita. Obtenha $\text{Im} [\Sigma^A(k_F, 0)]$ para a função de Migdal (4) como função da temperatura, no regime $T \ll \omega_D$.