Lista 5 de FI-193

1. 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)

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

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 freqüência 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

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

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

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

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

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

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

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

onde $n\left(x\right) = 1/\left(e^{\beta x} - 1\right)$ e $f\left(x\right) = 1/\left(e^{\beta x} + 1\right)$ 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

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

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

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

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

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

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 $\mathrm{Im}\left[\Sigma^A\left(k_F,\omega\right)\right]$ 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: $\mathrm{Im}\left[\Sigma^A\left(k_F,\omega\right)\right]\ll\omega$ quando $\omega\to 0$.

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

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

onde $dS_{\hat{\mathbf{p}}}$ é um elemento de área na superfície de Fermi na direção $\hat{\mathbf{p}}$, $v_{\hat{\mathbf{p}}}=\boldsymbol{\nabla}\xi\left(\mathbf{p}\right)$ 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

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

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

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

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

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

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

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

(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,

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

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 $\left.\frac{\partial \mathrm{Re}\left[\Sigma^A\left(k_F,\omega\right)\right]}{\partial\omega}\right|_{\omega=0}$ e $\mathrm{Im}\left[\Sigma^A\left(k_F,\omega\right)\right]$ obtidos nos itens (v) e (vi).

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