PGF5295 - Teoria Quântica de Muitos Corpos em Matéria Condensada

Lista de exercícios 4 - 2s/2015 (entrega em 17/12/2015)

1. Considere o efeito de interação elétron-elétron no gás de elétrons (modelo de "Jellium").

$$\hat{U}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\int d\mathbf{r}d\mathbf{r}'\,\frac{\Psi^\dagger_{\sigma_1}(\mathbf{r})\Psi^\dagger_{\sigma_2}(\mathbf{r}')\Psi_{\sigma_2}(\mathbf{r}')\Psi_{\sigma_1}(\mathbf{r})}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \ ,$$

onde $\Psi^\dagger_{\sigma_i}(\mathbf{r})$ e $\Psi_{\sigma_i}(\mathbf{r})$ são operadores de campo (soma sobre os índices de spin repetidos σ_i).

(a) Calcule a expressão para o potencial no espaço de momentos $\hat{U}(\mathbf{q})$ em termos de operadores de criação/destruição $c^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}$ ($c_{\mathbf{k},\sigma}$) de elétrons com momento $\mathbf{k}$ e spin σ.

(b) Mostre que, até 1^a ordem no parâmetro adimensional r_s, a energia por partícula é dada por:

$$\frac{E^{(0)}+E^{(1)}}{N} = \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s}\ \text{Ryd} \ .$$

Sugestão: Calcule a correção em 1a ordem $\langle\hat{U}(\mathbf{q})\rangle_0$ para o estado fundamental do gás de elétrons. Considere os diferentes processos que contribuem (desenhe os diagramas de Feynman correspondentes). Argumente que uma das contribuições é cancelada pelo background positivo dos íons (por quê?) e calcule a contribuição do outro processo para a energia.

(c) Considere agora a correção de *segunda ordem*. Mostre que a contribuição para a energia é dada por

$$\frac{E^{(2)}}{N} = (\epsilon_d + \epsilon_x)\ \text{Ryd} \ ,$$

onde

$$\epsilon_d = \frac{-3}{8\pi^5}\int\frac{d\bar{\mathbf{q}}}{\bar{q}^4}\int_{|\bar{\mathbf{k}}+\bar{\mathbf{q}}|>1} d\bar{\mathbf{k}}\int_{|\bar{\mathbf{p}}+\bar{\mathbf{q}}|>1} d\bar{\mathbf{p}}\,\frac{\theta(1-\bar{k})\theta(1-\bar{p})}{\bar{\mathbf{q}}\cdot(\bar{\mathbf{q}}+\bar{\mathbf{p}}+\bar{\mathbf{k}})} \ ,$$

$$\epsilon_x = \frac{3}{16\pi^5}\int\frac{d\bar{\mathbf{q}}}{\bar{q}^2}\int_{|\bar{\mathbf{k}}+\bar{\mathbf{q}}|>1} d\bar{\mathbf{k}}\int_{|\bar{\mathbf{p}}+\bar{\mathbf{q}}|>1} d\bar{\mathbf{p}}\,\frac{\theta(1-\bar{k})\theta(1-\bar{p})}{[\bar{\mathbf{q}}\cdot(\bar{\mathbf{q}}+\bar{\mathbf{p}}+\bar{\mathbf{k}})]\ |\bar{\mathbf{q}}+\bar{\mathbf{p}}+\bar{\mathbf{k}}|^2} \ .$$

(os momentos nas integrais estão reescalonados em unidades de k_F: $\bar{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k_F$, etc.)

(d) Alguma dessas contribuições de 2a ordem (ϵ_d, ϵ_x) diverge? Justifique!

2. Considere a polarizibilidade do gás de elétrons em ordem zero:

$$\Pi^{(0)}(\mathbf{q},\omega_{\mathbf{q}}) = -2i\int\frac{d^4p}{(2\pi)^4}\mathcal{G}^{(0)}(p+q)\mathcal{G}^{(0)}(p)$$

sendo $p = (\mathbf{p},\omega_{\mathbf{p}})$ e $q = (\mathbf{q},\omega_{\mathbf{q}})$ quadri-momentos ($d^4p = d^3\mathbf{p}\,d\omega_{\mathbf{p}}$).

Usando a expressão do propagador livre $\mathcal{G}^{(0)}(p)$ (derivada em sala), mostre que

$$\Pi^{(0)}(\mathbf{q},\omega_{\mathbf{q}}) = -2\int\frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\frac{\theta(k_F-|\mathbf{p}|)\theta(|\mathbf{p}+\mathbf{q}|-k_F)}{\omega_{\mathbf{q}}+\epsilon_{|\mathbf{p}|}-\epsilon_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|}+i\eta}$$
$$+2\int\frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\frac{\theta(|\mathbf{p}|-k_F)\theta(k_F-|\mathbf{p}+\mathbf{q}|)}{\omega_{\mathbf{q}}+\epsilon_{|\mathbf{p}|}-\epsilon_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|}-i\eta}$$

3. Modelo de Hubbard-Holstein. Considere o caso de uma impureza tipo Anderson (com repulsão Coulombiana U) acoplada a um único modo vibracional (fônon) de frequência ω_0.

$$H = H_d + H_{\rm ph} + H_{\rm e-ph}$$

onde o primeiro termo é o termo de Hubbard (vide Lista 03):

$$H_d = \sum_\sigma \varepsilon_d \hat{n}_{d\sigma} + U \hat{n}_{d\uparrow}\hat{n}_{d\downarrow}$$

e os dois últimos correspondem à energia do fônon e ao acoplamento elétron-fônon respectivamente:

$$\begin{aligned} H_{\rm ph} &= \omega_0 a^\dagger a \\ H_{\rm e-ph} &= -\lambda \textstyle\sum_\sigma \left(\hat{n}_{d\sigma} - 1\right)\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right) \end{aligned}$$

Acima, os operadores $c_{d\sigma}$ e $c^\dagger_{d\sigma}$ são fermiônicos ($\{c_{d\sigma}, c^\dagger_{d\sigma'}\} = \delta_{\sigma\sigma'}$) e os operadores $\hat{a}^\dagger$ e $\hat{a}$ são bosônicos ($[\hat{a},\hat{a}^\dagger] = 1$).

Considere agora a transformação unitária definida pelo operator

$$\hat{O} = e^{\frac{\lambda}{\omega_0}\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right)\left(\hat{n}_{d\uparrow} + \hat{n}_{d\downarrow} - 1\right)}$$

(a) Mostre que:

$$\hat{O}^{-1}\hat{a}\hat{O} = \hat{a} + \frac{\lambda}{\omega_0}\left(\hat{n}_{d\uparrow} + \hat{n}_{d\downarrow} - 1\right)$$

Sugestão: calcule o comutador $[\hat{a},\hat{O}]$ e mostre que $\hat{O}^{-1}\hat{a}\hat{O} = \hat{a} + \hat{O}^{-1}[\hat{a},\hat{O}]$

(b) Mostre que:

$$\tilde{c}_{d\sigma} \equiv \hat{O}^{-1} c_{d\sigma} \hat{O} = e^{\frac{\lambda}{\omega_0}\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right)} c_{d\sigma}$$

(c) Mostre que:

$$\hat{O}^{-1}\hat{n}_{d\sigma}\hat{O} = \hat{n}_{d\sigma}$$

(d) Usando os resultados acima, faça a transformação do Hamiltoniano completo e mostre que o termo de acoplamento elétron-fonon pode ser "absorvido"em parâmetros renormalizados $\tilde{\varepsilon}_d$ e $\tilde{U}$:

$$\hat{O}^{-1} H \hat{O} = \sum_\sigma \tilde{\varepsilon}_d \hat{n}_{d\sigma} + \tilde{U}\hat{n}_{d\uparrow}\hat{n}_{d\downarrow} + H_{\rm ph} + \text{const.}$$

e encontre expressões para $\tilde{\varepsilon}_d$ e $\tilde{U}$ em termos de ε_d, U, λ e ω_0.

(e) Discuta a possibilidade de que este Hamiltoniano efetivo tenha interação Coulombiana *atrativa* (ou seja, $\tilde{U} < 0$).

4. Um par de Cooper em um mar de Fermi. Em sala, argumentamos que um par de Cooper pode ser descrito por um estado do tipo:

$$|\psi_{CP}\rangle = \sum_{|\mathbf{k}|>k_F} A_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} |\Psi_0\rangle \equiv \sum_{|\mathbf{k}|>k_F} A_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow\rangle$$

onde $|\Psi_0\rangle$ é o estado fundamental de um gás de elétrons não-interagentes (estados de partícula única $|\mathbf{k}\sigma\rangle \equiv c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}|0\rangle$ preenchidos até o vetor de onda de Fermi k_F).

Sendo $H_{CP} = H_0 + V_{\text{eff}}$ onde $H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}$ e V_{eff} a interação efetiva entre os elétrons mediada por fônons:

(a) Mostre que

$$H_0|\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow\rangle = 2\epsilon_{\mathbf{k}}|\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow\rangle$$

(b) Assumindo que

$$\langle \mathbf{k}'\uparrow, -\mathbf{k}'\downarrow|V_{\text{eff}}|\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow\rangle = -V w^*_{\mathbf{k}'} w_{\mathbf{k}}$$

onde $w_{\mathbf{k}} = \Theta(\omega_D - |\epsilon_{\mathbf{k}}|)$ (ω_D é a frequência de Debye), calcule a energia E_{CP} do par de Cooper dada por $H_{CP}|\psi_{CP}\rangle = E_{CP}|\psi_{CP}\rangle$ e verifique o resultado obtido em sala (Eq. 18.5 do livro do Bruus).

Dica: Diagonalize o Hamiltoniano na base $\{|\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow\rangle\}$. Por exemplo, faça $\langle \mathbf{k}'\uparrow, -\mathbf{k}'\downarrow|H_{CP}|\psi_{CP}\rangle = E_{CP}\langle \mathbf{k}'\uparrow, -\mathbf{k}'\downarrow|\psi_{CP}\rangle$ e manipule para obter uma equação em $A_{\mathbf{k}'}$. Depois, multiplique por $w_{\mathbf{k}'}$ e some sobre $\mathbf{k}'$ para obter uma equação algébrica similar à que usamos para descrever a instabilidade de Cooper.

Dica 2: lembre do truque de transformar somas em $\mathbf{k}$ em integrais em energia usando a densidade de estados $D(\epsilon)$.