

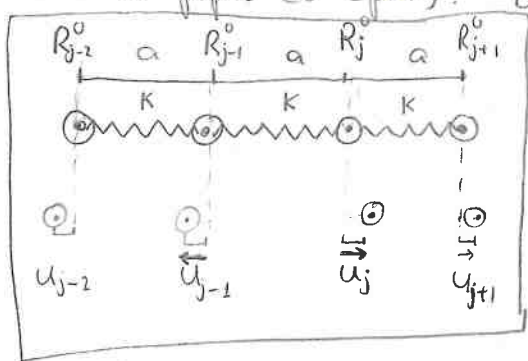
Função de Green e Fônons

Vibração em uma rede iônica podem, muitas vezes, ser descritas como uma superposição de modos vibracionais de osciladores quânticos acoplados. Em grande parte dos casos de interesse, essas oscilações são harmônicas, permitindo uma descrição segundo-quantizada em termos de operadores bosônicos. As excitações associadas a tais operadores são comumente denominadas de fônons.

O Hamiltoniano de "fônons livres" é, assim, similar ao de um oscilador harmônico, com uma importante diferença: fônons tem momento:

$$H_{ph} = \sum_{\vec{q}, \lambda} \Omega_{\vec{q}, \lambda} \left(b_{\vec{q}, \lambda}^\dagger b_{\vec{q}, \lambda} + \frac{1}{2} \right), \quad [b_{\vec{q}, \lambda}, b_{\vec{q}', \lambda'}^\dagger] = \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} \delta_{\lambda, \lambda'}$$

onde $\Omega_{\vec{q}, \lambda} = \Omega_{|\vec{q}|, \lambda} \propto |\vec{q}|$ é linear em $|\vec{q}|$ (fônons acústicos) e λ é um "índice de polarização" de modo a incluir mais do que um "tipo" de fônons (similar ao papel do spin). É instrutivo derivar H_{ph} no caso 1D ($\vec{q} = q \hat{e}_x$).



O Hamiltoniano será dado por N osciladores acoplados em posições de equilíbrio R_j^0 tais que $R_j^0 - R_{j\pm 1}^0 = a = \text{cte}$. O Hamiltoniano será:

$$H_{ph} = \sum_{j=1}^N \left[\frac{1}{2M} p_j^2 + \frac{1}{2} K (u_j - u_{j-1})^2 \right] \quad [p_{j_1}, u_{j_2}] = \frac{\hbar}{i} \delta_{j_1, j_2}$$

$u_j \rightarrow$ deslocamento a partir de R_j^0
 $L = Na \rightarrow$ "componentes" do sistema.

Impondo condições periódicas de contorno ($u_{N+1} = u_1$), definiremos:

$$p_j \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{p}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}R_j^0} \quad u_j \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{u}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}R_j^0} \quad \left(\delta_{R_j^0, 0} \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}R_j^0} \right)$$

onde "k" é definido tal que $e^{iKL} = 1 \Rightarrow k = \pm \frac{2n\pi}{Na}$ de modo

que temos condições periódicas de contorno ($u_{N+1} = u_1$).

As transformações inversas são:

$$\hat{P}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N P_j e^{-iKR_j^0} ; \hat{u}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N u_j e^{-iKR_j^0}$$

$$\left(\delta_{k,k'} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{-i(k-k')R_j^0} \right)$$

$$\left(\delta_{k,0} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{-iKR_j^0} \right)$$

Note que $P_k^\dagger = P_{-k}$ de modo que $\underline{P_j^2} = P_j^\dagger P_j = \frac{1}{N} \sum_{kk'} P_k^\dagger e^{-iKR_j^0} P_{k'} e^{iKR_j^0} = \sum_k \hat{P}_k \hat{P}_{k'} \frac{e^{i(k-k')R_j^0}}{N}$

Substituindo no Hamiltoniano e usando $\delta_{k,k'} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{-i(k-k')R_j^0}$, obtemos:

$$H_{ph} = \sum_{k \in FBZ} \frac{1}{2m} \hat{P}_k \hat{P}_{-k} + \frac{1}{2} M \omega_k^2 \hat{u}_k \hat{u}_{-k} ; \omega_k = \sqrt{\frac{k}{M}} 2 \left| \sin \frac{Ka}{2} \right| ; [P_{k_1}, u_{k_2}] = \frac{\hbar}{i} \delta_{k_1, -k_2}$$

que tem a "cara" de um Hamiltoniano de oscilador harmônico (exceto por k, -k)

Para diagonalizá-lo, definimos os operadores de criação e destruição:

$$\begin{cases} b_{-k}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{u_k}{l_k} - \frac{i P_k}{\hbar/l_k} \right) \\ b_k \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{u_k}{l_k} + \frac{i P_k}{\hbar/l_k} \right) \end{cases} \quad (l_k = \sqrt{\frac{\hbar}{M \omega_k}})$$

(Note o "-k" na definição de b^\dagger)

$$\begin{cases} \hat{u}_k = \frac{l_k}{\sqrt{2}} (b_{-k}^\dagger + b_k) \\ \hat{P}_k = \frac{\hbar}{l_k} \frac{i}{\sqrt{2}} (b_{-k}^\dagger - b_k) \end{cases}$$

p/ K pequeno
 $\omega_k = v_s K$ $v_s = \sqrt{\frac{k}{M}} a$
 Fônons acústicos

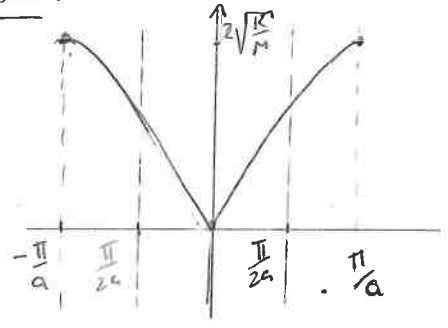
e chegamos ao resultado:

$$H_{ph} = \sum_k \hbar \omega_k \left(b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2} \right) ;$$

com $[b_{k_1}, b_{k_2}^\dagger] = \delta_{k_1, k_2}$ (bósons)

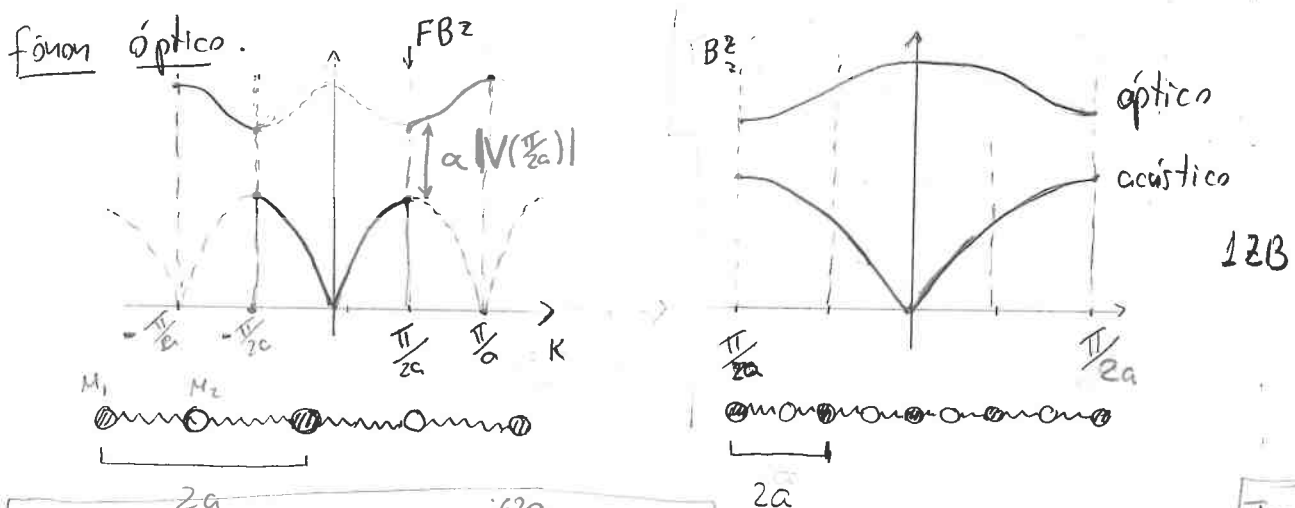
1 fônon por célula unitária

dispersão: $\omega_k = \sqrt{\frac{k}{M}} 2 \left| \sin \frac{Ka}{2} \right|$



Quando temos mais do que um íon por célula unitária, temos uma modificação nesse resultado (se os íons forem diferentes).

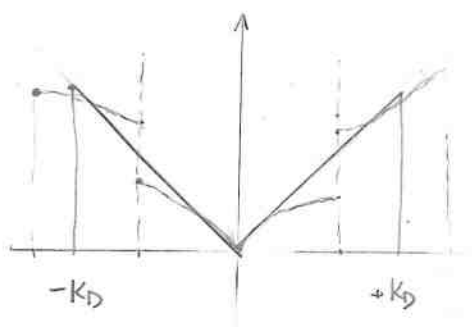
Para $p=2$ íons por célula unitária em 1D, há o aparecimento de um outro modo, com uma dispersão diferente para $\omega_{K(a=2)}$. É o chamado fônon óptico.



$p = q + G \quad (q \in 1ZB) \Rightarrow e^{iG \cdot \vec{r}} = 1$
 $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}) \quad e^{i\vec{G} \cdot \vec{R}} = 1$
 $\Rightarrow G = \frac{\pi}{a}$
 $\odot + \frac{\pi}{a} = \frac{\pi}{a} \rightarrow k=0 \text{ and } k = \frac{\pi}{a} \text{ s\~{a}o equivalentes.}$
 Teorema de Bloch
 de fônons

Em 1D, se tivermos p íons na célula unitária, teremos 1 ramo acústico e $p-1$ ramos fônons ópticos. Em 3D, teremos 3 ramos acústicos e $3(p-1)$ modos ópticos.

Modelo de Debye: O modelo de Debye consiste em se fazer uma "média" sobre modos ópticos e acústicos e substituir tudo por um único modo acústico na forma



$$\omega_{K,D} \equiv v_D K \Rightarrow \boxed{E = \hbar v_D K}$$

onde v_D é a velocidade de Debye que corresponde à média das diferentes velocidades dos diferentes modos.

A dispersão vale no domínio $-k_D \leq k \leq k_D$ onde k_D é determinado pela "ocupação" do ramo acústico médio pelos $3N_{ion}$ modos que existem antes da média. Assim temos uma "esfera" no espaço \vec{k} tal que

$$N_{ion} = \frac{V_{vol}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_D^3 = \frac{V_{vol}}{(2\pi)^3} \times (\text{volume no espaço } \vec{k})$$

De certa forma, o modelo de Debye "conta" as fônons como se fossem independentes (ramos ópticos são equivalentes a "extensão" dos ramos acústicos) e isotrópicos no espaço \vec{k} . Assim, há uma certa analogia entre K_D e " K_F " (embora estejam falando de bósons) e também podemos definir " ω_D ", " T_D " e " E_D ".

$E_D = \hbar \omega_D \equiv K_B T_D = \hbar v_D K_D$
 energia de Debye $\rightarrow E_D$
 frequência de Debye $\rightarrow \omega_D$
 Temperatura de Debye $\rightarrow T_D$

Como $K_D^3 = \frac{6\pi^2 N_{ion}}{Vol} \Rightarrow K_B T_D = \hbar \omega_D = \hbar v_D \left(\frac{6\pi^2 N_{ion}}{Vol} \right)^{1/3}$

Podemos também definir uma "densidade de estados de fônons" se considerarmos

que $N_{ph}(E_D) = 3 N_{ion} = 3pN \Rightarrow N_{ph}(E) = \frac{3}{2\pi^2} \frac{V}{(v_D)^3} E^3 \Rightarrow N_{ph}(E) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{E^3}{(v_D)^3}$

Densidade de fônons no modelo de Debye

$D_{ph}(E) = \frac{dN_{ph}(E)}{dE} = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{E^2}{(v_D)^3}$ $0 < E < E_D$

e calculamos a energia total relativa às vibrações da rede na forma:

$E_{ph}(T) = \int_0^{E_D} dE \cdot E \cdot D_{ph}(E) N_B(E) = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{1}{(v_D)^3} \int_0^{E_D} dE \frac{E^3}{e^{\beta E} - 1}$

e também o calor específico $C_V^{ph}(T) = \frac{\partial E_{ph}}{\partial T} = \frac{1}{T_D} \frac{\partial E_{ph}}{\partial (T/T_D)}$

$C_V(T) = 9 N_{ion} K_B \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \int_0^{T_D/T} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2}$
 e $\left\{ \begin{array}{l} T \ll T_D \quad C_V(T) \approx \frac{12\pi^2}{5} N_{ion} K_B \left(\frac{T}{T_D} \right)^3 \\ T \gg T_D \quad C_V(T) \approx 3 N_{ion} K_B \end{array} \right.$

que concorda muito bem com resultados

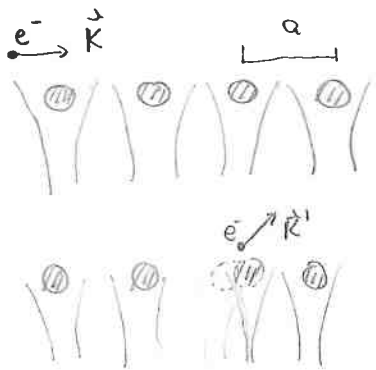
experimentais (vide fig. 3.6 no livro de Brues + Flawberg).

Interações elétron-fônons: Os elétrons são atraídos pelo potencial

periódico $V_{ion}(r)$ formado pelo íon na posição \vec{R}_j . Isso, em última instância, indica que os elétrons são afetados pelas vibrações na rede.

É ilustrativo considerar essa interação efetiva elétron-vibração em 1D:

1D: Se o potencial dos íons for periódico em 1D tal que $V_{ion}(x) = V_{ion}(x+a)$



Tomar $V_{ion}(x) = \frac{1}{V} \sum_p V_p e^{ipx}$

onde p é o momento na rede recíproca tal que

$p = q + G$ onde q é um "vetor em 1D" na 1ª

zona de Brillouin. (Isso não é o modelo de Jellium!)

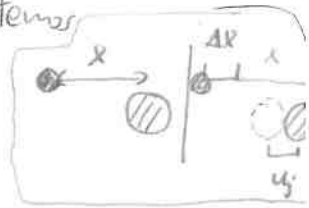
A interação entre elétrons com densidade $\rho_e(\vec{r})$ e os íons será atrativa na forma:

$Vel_{ion} = -e \int dx \rho_e(x) \sum_{j=1}^N V_{ion}(x - R_j)$ onde R_j são as posições dos íons.

Se houver deslocamento dos íons, então $R_j = u_j - R_j^0$ e temos (Equivalente a um deslocamento Δx do elétron).

$V_{ion}(x - R_j) \approx V_{ion}(x - R_j^0) - u_j \frac{dV_{ion}(x - R_j^0)}{dx}$

para u_j pequenos ($u_j = -\Delta x$)



O primeiro termo é "estático" e corresponde ao potencial de Bloch que dá origem a banda de energia. O segundo termo é o que nos interessa:

$Vel_{ph} = +e \int dx \rho_e(x) \sum_{j=1}^N u_j \frac{dV_{ion}(x - R_j^0)}{dx}$ onde $\left\{ \begin{aligned} V_{ion}(x - R_j^0) &= \frac{1}{V} \sum_p V_p e^{ipx} e^{-ipR_j^0} \\ \frac{dV}{dx} \Big|_{x=R_j^0} &= \frac{1}{V} \sum_p (ip) V_p e^{ip(x - R_j^0)} \end{aligned} \right.$

Seeds:
$$u_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in \text{FBZ}} \hat{u}_k e^{i k R_j^0} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in \text{FBZ}} \frac{e_k}{\sqrt{2}} (b_{-k}^+ + b_k) e^{i k R_j^0}$$

$$\left. \frac{d}{dx} V_{\text{ion}} \right|_{x=R_j} = \frac{1}{L} \sum_{\substack{q \in \text{FBZ} \\ G \in \text{RL}}} i(q+G) V_{q+G} e^{i(q+G) \cdot (x-R_j^0)}$$

Logo
$$+ e \sum_{j=1}^N u_j \left. \frac{d}{dx} V_{\text{ion}} \right|_{x=R_j} = \frac{1}{L} \sum_{\substack{q \in \text{FBZ} \\ G \in \text{RL}}} \sum_{k \in \text{FBZ}} \frac{e}{\sqrt{N}} \frac{1}{\sqrt{2}} b_k (b_{-k}^+ + b_k) i(q+G) V_{q+G} e^{i(q+G)x}$$

$\left(\sum_{j=1}^N e^{i(k-q)R_j^0} e^{iGR_j^0} \right) = N \delta_{k,q}$

$$= \frac{1}{L} \sum_{\substack{q \in \text{FBZ} \\ G \in \text{RL}}} \left(e^{iq \frac{N}{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} i(q+G) V_{q+G} \right) (b_{-q}^+ + b_q) e^{i(q+G)x}$$

$\equiv g_{q,G}$

A interação de íon-fônon fica:
$$\left[\hat{P}_{\text{el}}(x) = \frac{1}{L} \sum_{k', p'} e^{-ip'x} C_{k'+p'}^+ C_{k'} = \frac{1}{L} \sum_{p'} \hat{P}_{\text{el}}(p') e^{-ip'x} \right]$$

$$V_{\text{el-ph}} = \frac{1}{L^2} \sum_{\substack{k', p' \\ \sigma}} \sum_{\substack{q \\ G}} C_{k'+p', \sigma}^+ C_{k', \sigma} g_{q,G} (b_{-q}^+ + b_q) \int dx e^{i(q+G-p')x}$$

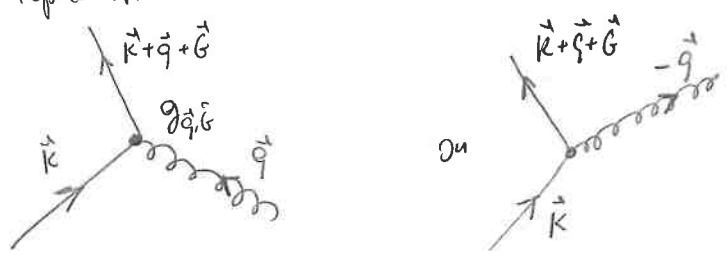
$$V_{\text{el-ph}} = \frac{1}{L} \sum_{\substack{k' \\ \sigma}} \sum_{\substack{q \\ G}} g_{q,G} C_{(k'+q+G)\sigma}^+ C_{k', \sigma} (b_{-q}^+ + b_q) \quad (1D)$$

$\equiv L \delta_{q+G, p'}$

Já escrita em segunda quantização. O resultado pode facilmente ser generalizado para 3D:

$$V_{\text{el-ph}} = \frac{1}{V} \sum_{\substack{\vec{k}' \\ \sigma \\ \in \text{FBZ}}} \sum_{\substack{\vec{q} \\ \in \text{FBZ}}} \sum_{\vec{G}} g_{\vec{q}, \vec{G}} C_{(\vec{k}'+\vec{q}+\vec{G})\sigma}^+ C_{\vec{k}', \sigma} (b_{-\vec{q}}^+ + b_{\vec{q}}) \quad (3D)$$

que representa um vértice:



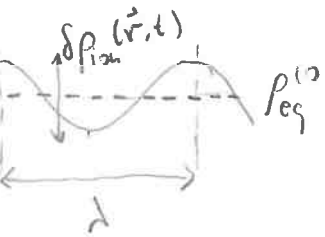
Fônons no modelo de "jellium"

Até aqui, falamos sobre "vibração na rede iônica", ou seja, considerando os íons positivamente carregados como partículas pontuais oscilando em torno de posição de equilíbrio $R_j^{(0)}$, conectadas por "moléculas" ideais.

Como ficariam essas oscilações em um modelo contínuo? Esse é o caso do modelo de "jellium", onde os íons formam uma distribuição de carga contínua.

$\rho_{ion}^c(\vec{r}, t) = +ze \rho_{ion}(\vec{r}, t)$ Neste caso, as oscilações se manifestam como flutuação da densidade de íons em torno da densidade de equilíbrio: $\rho_{ion}(\vec{r}, t) = \rho_{ion}^{(0)} + \delta \rho_{ion}(\vec{r}, t)$

Por hipótese do modelo $\rho_{ion}^{(0)}$ é uniforme (e depende de \vec{r}) e estática. Se as oscilações forem harmônicas com frequência Ω , podemos escrever:



$$\delta \rho_{ion}(\vec{r}, t) = \delta \rho_{ion}(\vec{r}) e^{-i\Omega t}$$

que gera um campo elétrico $\vec{E}(\vec{r}, t)$ dado por

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\delta \rho_{ion}^c(\vec{r}, t)}{\epsilon_0} = \frac{ze}{\epsilon_0} \delta \rho_{ion}(\vec{r}, t)$$

Temos ainda a Eq de continuidade: $\frac{\partial \rho_{ion}^c}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$ e $\vec{j} = \rho_{ion}^c \vec{v}$, $\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \frac{ze \vec{E}}{M}$

Logo: $\left\{ \begin{aligned} \nabla \cdot \vec{j} &\approx ze \rho_{ion}^{(0)} \nabla \cdot \vec{v} + o(\delta \rho^2) \\ \frac{\partial (\nabla \cdot \vec{v})}{\partial t} &= \frac{ze}{M} \left(\frac{ze}{\epsilon_0} \right) \delta \rho_{ion} \end{aligned} \right\} \Rightarrow ze \frac{\partial^2 \delta \rho_{ion}}{\partial t^2} = -ze \left(\frac{ze^2}{M \epsilon_0} \right) \rho_{ion}^{(0)} \delta \rho_{ion} \Rightarrow \Omega^2 = \frac{(ze)^2 \rho_{ion}^{(0)}}{M \epsilon_0}$

Com isso, obtemos a "frequência de plasma" iônica, que é a frequência característica de oscilações do "background" contínuo do modelo de Jellium.

Voltando ao acoplamento elétron-fônon deduzido para fônons na rede $[g_{qG} = (e l_q \sqrt{\frac{N}{2}}) i(q+G) V_{q+G}]$, no caso contínuo teremos

$$\boxed{G \rightarrow 0}$$

$$\omega_q \rightarrow \Omega \Rightarrow l_q = \sqrt{\frac{\hbar}{M \omega_q}} \Rightarrow \sqrt{\frac{\hbar}{M \Omega}} \text{ (independente de } q \text{)}$$

Ou seja, g_q para o modelo de jellium será proporcional ao potencial coulombiano "puro" $V(q) = \frac{z e^2}{\epsilon_0 q^2}$ entre elétron e íons:

$$g_q^{(\text{Jellium})} = i q (e V(q)) \sqrt{\frac{\hbar n}{2 M \Omega}} \sqrt{V_{0e}}$$

sistema neutro

onde $n = \frac{N}{V_{0e}}$ é a densidade eletrônica, ou de íons vezes z : $n = z \rho_{ions}^{(z)}$

Como $\Omega^2 = \frac{z^2 e^2 \rho_{ions}^{(z)}}{M \epsilon_0} = \frac{e^2 z n}{M \epsilon_0}$, temos: $\frac{n}{M} = \frac{\epsilon_0 \Omega^2}{z e^2}$

$$|g_q^{(\text{Jellium})}|^2 = q^2 \cdot \cancel{e} \cdot V(q) \cdot V(q) \cdot \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\epsilon_0 \Omega^2}{z e^2} \cdot \frac{1}{\cancel{e}} \cdot V_{0e} = \cancel{e} \cdot V(q) \frac{z e^2}{\epsilon_0 q^2} \frac{\hbar}{2} \frac{\epsilon_0 \Omega^2}{z} \cdot V_{0e}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{|g_q^{(\text{Jellium})}|^2}{V_{0e}} = \frac{1}{2} V(q) (\hbar \Omega)}$$

que é um resultado que usaram mais à frente.

Função de Green para fônons livres

Consideramos agora as funções de Green para o Hamiltoniano

$$H = H_{ph} + H_{el-ph} \quad \text{no modelo de Jellium}$$

onde H_{el-ph} é tratado para o caso isotrópico, ou seja, $\vec{G} = 0$.

$$H_{ph} = \sum_{\vec{q}, \lambda} \Omega_{\vec{q}, \lambda} (b_{\vec{q}, \lambda}^\dagger b_{\vec{q}, \lambda} + \frac{1}{2})$$

$$H_{el-ph} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \sigma} \sum_{\vec{q}, \lambda} g_{\vec{q}, \lambda} C_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^\dagger C_{\vec{k}, \sigma} (b_{\vec{q}, \lambda} + b_{-\vec{q}, \lambda}^\dagger)$$

Pela forma de H_{el-ph} , vemos que o operador relevante é a combinação

$$\hat{A}_{\vec{q}, \lambda} \equiv b_{\vec{q}, \lambda}^\dagger + b_{-\vec{q}, \lambda} \quad ; \quad \hat{A}_{\vec{q}, \lambda}^\dagger \equiv b_{\vec{q}, \lambda} + b_{-\vec{q}, \lambda}^\dagger = \hat{A}_{-\vec{q}, \lambda}$$

que pode ser definido na Rep. de Interação como

$$A_{\vec{q}, \lambda}(\tau) \equiv e^{\tau H_{ph}} A_{\vec{q}, \lambda} e^{-\tau H_{ph}}$$

e introduzimos a função de Green de Matsubara para fônons livres:

$$D_{\lambda}^{(0)}(\vec{q}, \tau) \equiv - \langle T_{\tau} A_{\vec{q}, \lambda}(\tau) A_{\vec{q}, \lambda}^\dagger(0) \rangle_0 = - \langle T_{\tau} A_{\vec{q}, \lambda}(\tau) A_{-\vec{q}, \lambda}(0) \rangle_0$$

$$D_{\lambda}^{(0)}(\vec{q}, i q_n) \equiv \int_0^{\beta} d\tau D^{(0)}(\vec{q}, \tau) e^{i q_n \tau} \quad q_n = \frac{2\pi}{\beta} n$$

De modo análogo ao que fizemos nos cálculos da função de Green para $H_0 = \sum_v \epsilon_v c_v^\dagger c_v$, obtenemos agora:

$$D_\lambda^{(0)}(\vec{q}, \tau) = \begin{cases} -[n_B(\Omega_{\vec{q}\lambda}) + 1] e^{-\Omega_{\vec{q}} \tau} - n_B(\Omega_{\vec{q}}) e^{-\Omega_{\vec{q}} \tau} & \text{pr } \tau > 0 \\ -n_B(\Omega_{\vec{q}}) e^{-\Omega_{\vec{q}} \tau} - [n_B(\Omega_{\vec{q}}) + 1] e^{\Omega_{\vec{q}} \tau} & \text{pr } \tau < 0 \end{cases}$$

onde usamos o fato que $\langle b_{\vec{q}\lambda}^\dagger b_{\vec{q}\lambda} \rangle = n_B(\Omega_{\vec{q}\lambda})$ e $\langle b_{\vec{q}\lambda}^\dagger b_{\vec{q}\lambda} \rangle_0 = \langle b_{\vec{q}\lambda} b_{\vec{q}\lambda} \rangle_0 = 0$

Fazendo a transformação de Fourier

$$D_\lambda^{(0)}(\vec{q}, i q_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i q_n \tau} D_\lambda^{(0)}(\vec{q}, \tau) = \int_0^\beta -[n_B(\Omega_{\vec{q}}) + 1] e^{(i q_n - \Omega_{\vec{q}}) \tau} d\tau - \int_0^\beta n_B(\Omega_{\vec{q}}) e^{(i q_n + \Omega_{\vec{q}}) \tau} d\tau$$

$$= (n_B(\Omega_{\vec{q}}) + 1) (e^{\beta \Omega_{\vec{q}}} - 1)^{-1} = n_B(\Omega_{\vec{q}}) + 1 = \frac{1 + e^{\beta \Omega_{\vec{q}}}}{e^{\beta \Omega_{\vec{q}}} - 1} = \frac{1 - e^{-\beta \Omega_{\vec{q}}}}{1 - e^{-\beta \Omega_{\vec{q}}}}$$

$$= - \frac{[n_B(\Omega_{\vec{q}}) + 1] (e^{i q_n \beta} e^{-\Omega_{\vec{q}} \beta} - 1)}{i q_n - \Omega_{\vec{q}}} - \frac{n_B(\Omega_{\vec{q}}) (e^{i q_n \beta} e^{\Omega_{\vec{q}} \beta} - 1)}{i q_n + \Omega_{\vec{q}}}$$

$$= \frac{1}{i q_n - \Omega_{\vec{q}}} - \frac{1}{i q_n + \Omega_{\vec{q}}} = \frac{2 \Omega_{\vec{q}}}{(i q_n)^2 - (\Omega_{\vec{q}})^2}$$

Interações elétron-fônon e diagramas de Feynman

(9)

Considerem agora o Hamiltoniano com interações elétron-fônon (no modelo de Jellium):

$$H = H_0 + H_{e-ph} \quad \text{onde} \quad H_0 = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{q}\lambda} \Omega_{\vec{q}\lambda} (b_{\vec{q}\lambda}^\dagger b_{\vec{q}\lambda} + \frac{1}{2})$$

Qual será o efeito de H_{e-ph} na função de Green do elétron?

Nesse caso, H_{e-ph} terá o papel de "interação" de modo que

$$G_0(\vec{k}, z) = - \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots d\tau_m \langle T_\tau (H_{e-ph}(\tau_1) \dots H_{e-ph}(\tau_m) c_{\vec{k}\sigma}(\tau) c_{\vec{k}\sigma}^\dagger(0)) \rangle_0$$

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots d\tau_m \langle T_\tau (H_{e-ph}(\tau_1) \dots H_{e-ph}(\tau_m)) \rangle_0$$

Seja $H_{e-ph}(\tau) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}\sigma} \sum_{\vec{q}\lambda} g_{\vec{q}\lambda} c_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} A_{\vec{q}\lambda}(\tau)$ e sendo que

$A_{\vec{q}\lambda}$ e $c_{\vec{k}\sigma}$ ($c_{\vec{k}\sigma}^\dagger$) atuam em setores distintos do espaço de Hilbert, podemos escrever os termos no denominador de $G(\vec{k}, z)$ na forma

$$\langle T_\tau (A_{\vec{q}_1}(\tau_1) \dots A_{\vec{q}_m}(\tau_m) c_{\vec{k}+\vec{q}_1\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{\vec{k}\sigma}(\tau_1) \dots c_{\vec{k}+\vec{q}_m\sigma}^\dagger(\tau_m) c_{\vec{k}\sigma}(\tau_m)) \rangle_0 =$$

$$\langle T_\tau (A_{\vec{q}_1}(\tau_1) \dots A_{\vec{q}_m}(\tau_m)) \rangle_0 \langle T_\tau (c_{\vec{k}+\vec{q}_1\sigma}^\dagger(\tau_1) c_{\vec{k}\sigma}(\tau_1) \dots c_{\vec{k}+\vec{q}_m\sigma}^\dagger(\tau_m) c_{\vec{k}\sigma}(\tau_m)) \rangle_0$$

o primeiro termo ↑

e desacopla (usando o teorema de Wick) em produto de função de Green

de fônons livres $\boxed{- \langle T_\tau (A_{\vec{q}_i}(\tau_i) A_{\vec{q}_j}(\tau_j)) \rangle = D^{(0)}(\vec{q}_i, \tau_i - \tau_j) \delta_{\vec{q}_i, -\vec{q}_j}}$

em dois tempos (τ_i e τ_j) mas que força o momento \vec{q}_i a ser igual a \vec{q}_j .

Esse "pareamento" tem consequência para G : apenas

termos com $m=2n$ (par) sobrevivem. No entanto, um termo típico, teremos:

$$\frac{1}{(2n)!} \langle T_{\tau} (A_{\vec{q}_1}^{\dagger}(\tau_1) \dots A_{\vec{q}_{2n}}^{\dagger}(\tau_{2n})) \rangle_0 \xrightarrow{\text{ Wick }} \frac{1}{(2n)!} \sum_{\text{pareamento}} \langle T_{\tau} (A_{\vec{q}_1}^{\dagger}(\tau_1) A_{\vec{q}_2}^{\dagger}(\tau_2)) \dots \langle T_{\tau} (A_{\vec{q}_i}^{\dagger}(\tau_i) A_{\vec{q}_j}^{\dagger}(\tau_j)) \rangle_0 \dots \rangle_0$$

$2n \vec{q}_i$ independente n pares com $\vec{q}_i = -\vec{q}_j$

$$\int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_{2n} g_{\vec{q}_1}^{\dagger} \dots g_{\vec{q}_{2n}}^{\dagger}$$

2n tempo

$$= \frac{1}{(2n)!} (-1)^n \times \frac{(2n)!}{n!n!} \frac{n!}{2^n} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots d\tau_n \langle T_{\tau} (\hat{D}_{\vec{q}_1}^{\dagger}(\tau_1) \dots \hat{D}_{\vec{q}_n}^{\dagger}(\tau_n)) \rangle_0$$

de definições dos $D^{(n)}(\vec{q}_i)$

dentre as 2n \vec{q}_i originais escolhemos n independente

número de maneiras de combinar as n \vec{q}_i independente com as "n outros (independente)" produz os pares que dão o mesmo resultado

onde, para cada " \vec{q} independente" (seja n delu) temos $\int_0^{\beta} \hat{D}(\tau_i) d\tau_i$ definidos como

$$\int_0^{\beta} d\tau_i \hat{D}_{\vec{q}_i}^{\dagger}(\tau_i) = \int_0^{\beta} d\tau_i \int_0^{\beta} d\tau_j |g_{\vec{q}_i}|^2 D^{(0)}(\vec{q}_i, \tau_i - \tau_j)$$

Note que o pré-fator fica então $\frac{(-1)^n}{n!} \times \left(\frac{1}{2}\right)^n$ e agora falta incorporar

os graus de liberdade eletrônicos. O importante é que a parte "bosônica" foi

totalmente incorporada na "interação" $\hat{D}_{\vec{q}_i}^{\dagger}(\tau_i)$ acima de nós que, efetivamente:

$$\int_0^{\beta} d\tau_j H_{e-ph}(\tau_i) H_{e-ph}(\tau_j) \rightarrow H_{eff}(\tau_i) \propto \int_0^{\beta} d\tau_j D^{(0)}(\vec{q}_i, \tau_i - \tau_j) C_{\vec{k}+\vec{q}_i}^{\dagger}(\tau_j) C_{\vec{k}'-\vec{q}_i}^{\dagger}(\tau_i) \times C_{\vec{k}'}(\tau_i) C_{\vec{k}}(\tau_j)$$

Assim, podemos escrever

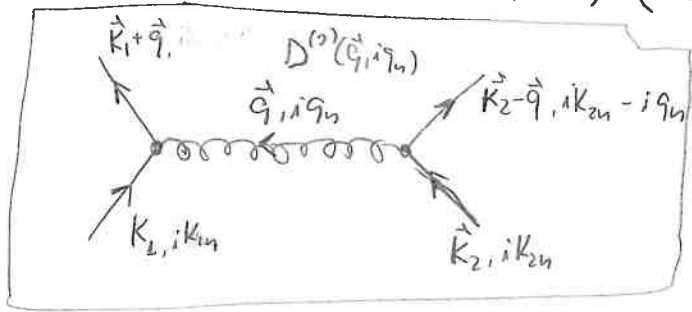
$$G_0(\vec{k}, \tau) = - \frac{\sum_m \frac{(-1)^m}{m!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots d\tau_m \langle \text{Tr} (\hat{P}(\tau_1) \dots \hat{P}(\tau_m) C_{\vec{k}\sigma}(\tau) C_{\vec{k}\sigma}(\tau)) \rangle_0}{\sum_m \frac{(-1)^m}{m!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots d\tau_m \langle \text{Tr} (\hat{P}(\tau_1) \dots \hat{P}(\tau_m)) \rangle_0}$$

onde cada $\hat{P}(\tau_i)$ já engloba uma função de Green de forma livre:

$$\int_0^\beta d\tau_i \hat{P}(\tau_i) = \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_i \int_0^\beta d\tau_j \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \sum_{\lambda} \frac{1}{V^2} |g_{\vec{q}\lambda}|^2 D_{\lambda}^{(0)}(\vec{q}, \tau_i - \tau_j) \times C_{\vec{k}_1 + \vec{q}, \sigma}^{\dagger}(\tau_j) C_{\vec{k}_2 - \vec{q}, \sigma}^{\dagger}(\tau_i) C_{\vec{k}_2, \sigma}(\tau_i) C_{\vec{k}_1, \sigma}(\tau_j)$$

Note que o resultado final é que $\hat{P}(\tau_i)$ é, efetivamente uma interação elétron-elétron mediada por $D_{\lambda}^{(0)}(\vec{q}, \tau_i - \tau_j)$ ou $D_{\lambda}^{(0)}(\vec{q}, i\omega_n)$ na rep. de frequências. Temos então que $G(\vec{k}, \tau)$ pode ser escrita como

uma expansão em diagramas de Feynman com as linhas de interação de fonon com $D_{\lambda}^{(0)}(\vec{q}, i\omega_n)$ (substituindo $U(\vec{q}, i\omega_n)$)



As regras para esse diagrama são similares ao caso de interação elétron-elétron, substituindo-se $-U(\vec{q}, i\omega_n)$ por $-\frac{1}{V} |g_{\vec{q}\lambda}|^2 D_{\lambda}^{(0)}(\vec{q}, i\omega_n)$.

Combinando interações elétron-elétron e elétron-fônon

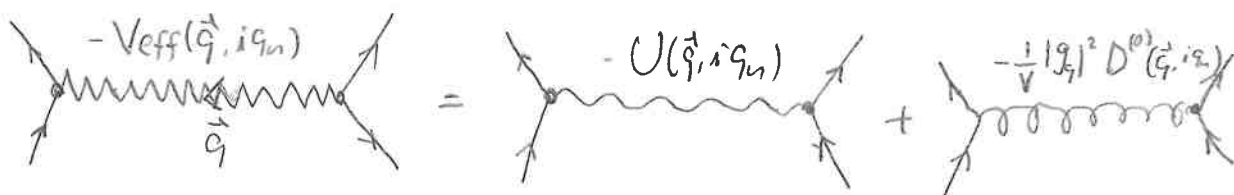
Consideremos agora o Hamiltoniano mais completo:

$$H = H_0 + H_{e-ph} + H_{e-e} \quad \text{onde}$$

H_{e-e} é a repulsão coulombiana pura:
$$H_{e-e} = \frac{1}{2} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \psi_\alpha^\dagger(\vec{r}_1) \psi_\beta^\dagger(\vec{r}_2) \psi_\beta(\vec{r}_2) \psi_\alpha(\vec{r}_1)$$

Como vimos, H_{e-ph} é, no final, escrito em uma forma quântica parecida com H_{e-e} com $U(\vec{q}, iq_n)$ substituído por $\frac{|g_q|^2}{V} D^{(0)}(\vec{q}, iq_n)$. Assim, quando temos as duas interações juntas, a "linha de interação" efetiva será

a soma das duas:



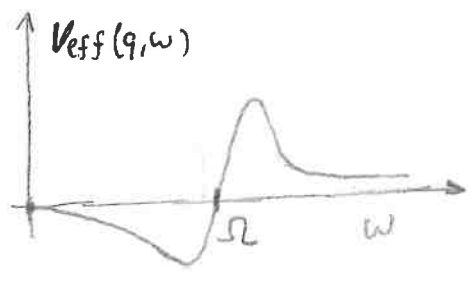
Ocorre que o pré-fator $\frac{1}{V} |g_q|^2$ tem, no modelo de jellium, uma dependência $|g_q|^2 \sim \frac{1}{q^2}$, idêntica à de $U(\vec{q})$; Na verdade, conforme vimos, no modelo de jellium

$$\frac{1}{V} |g_q|^2 = \frac{1}{2} U(q) \Omega \quad \text{para } q \ll \Phi_D \quad (\Omega q = \Omega)$$

Nesse caso $\frac{1}{V} |g_q|^2 D^{(0)}(\vec{q}, iq_n) = U(q) \frac{\Omega^2}{(iq_n)^2 - \Omega^2}$

$$V_{eff}(\vec{q}, iq_n) = U(q) + U(q) \frac{\Omega^2}{(iq_n)^2 - \Omega^2} = U(q) \frac{(iq_n)^2}{(iq_n)^2 - \Omega^2} \xrightarrow{iq_n \rightarrow \omega + i\eta} U(q) \frac{\omega^2}{\omega^2 - \Omega^2 + i\eta}$$

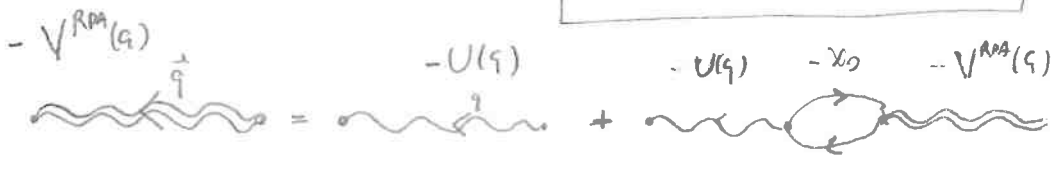
O resultado é interessante quando tomarmos a continuação analítica $iq_n \rightarrow \omega$: o potencial de



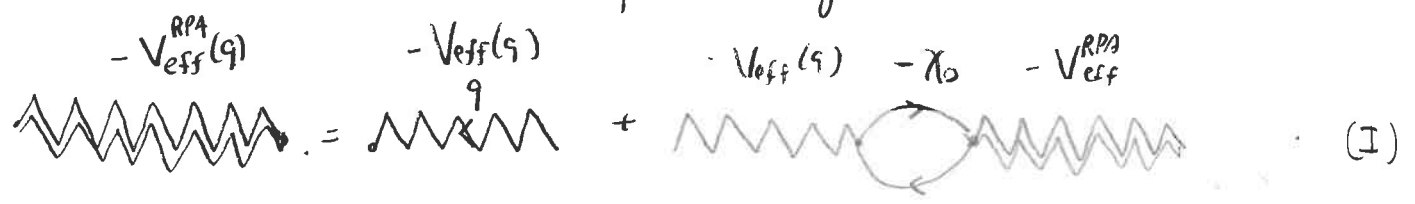
Coulomb renormalizado ^{apenas} por fônons se torna atrativo a baixas frequências (ou $\omega < \Omega$ nessa aproximação).

Agora, sabemos da análise de RPA que o potencial de Coulomb em um gás de elétrons também é renormalizado pela polarização $-\chi_0 = \text{loop}$

que reduz o seu alcance efetivo: $V^{RPA}(q) = \frac{U(q)}{1 - U(q)\chi_0(q)}$ Em diagramas:



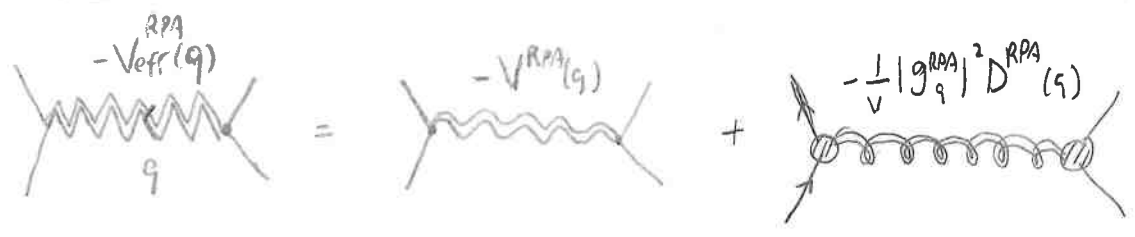
Assim, é natural incluir a renormalização RPA também em $V_{eff}(q, iq_n)$ fazendo $U(q) \rightarrow V^{RPA}(q)$ de modo que, em diagramas, tem



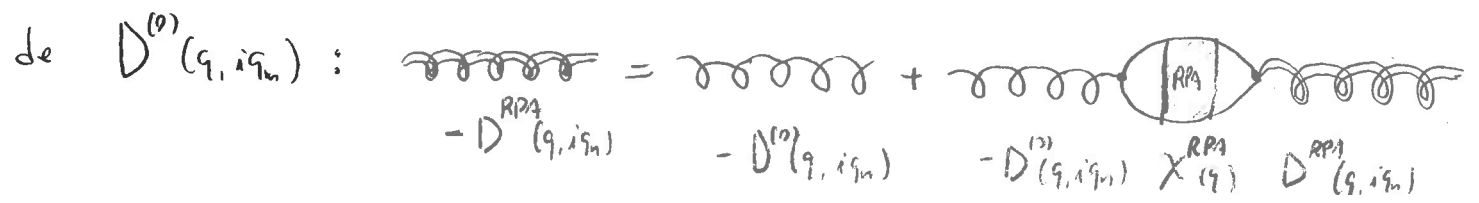
ou seja

$$V_{eff}^{RPA}(q, iq_n) = \frac{V_{eff}(q, iq_n)}{1 - V_{eff}(q, iq_n)\chi_0(q, iq_n)}$$

ou, equivalentemente, podemos escrever V_{eff}^{RPA} como uma soma:

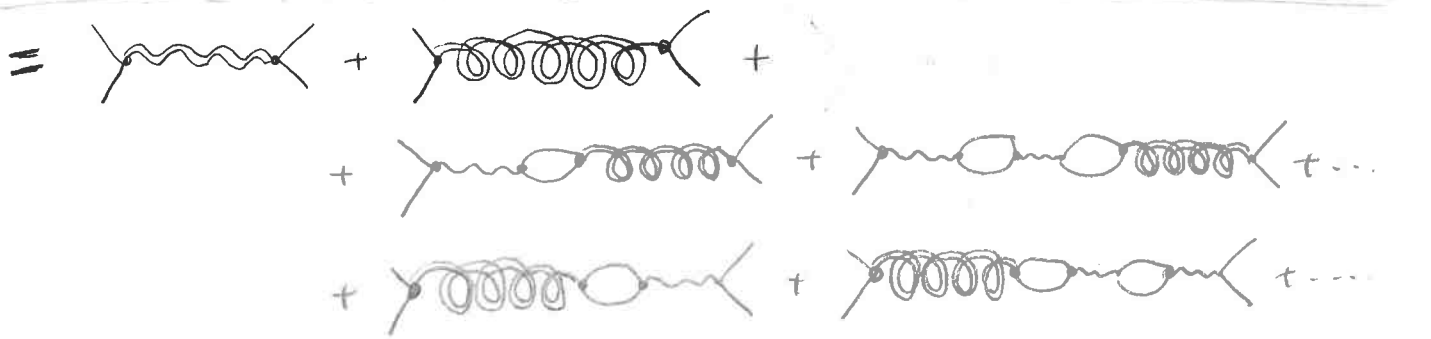
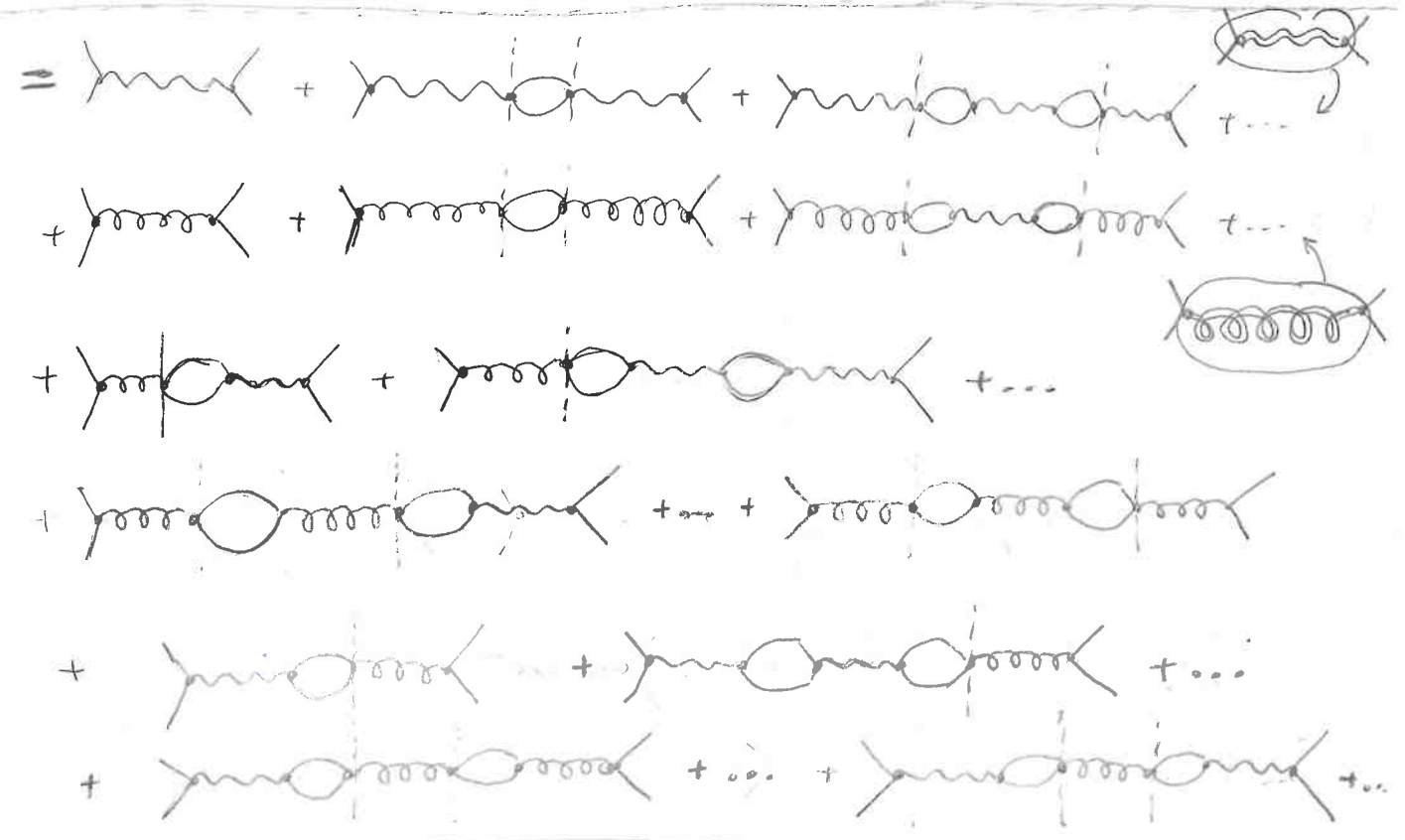


onde substituímos toda as linhas $U(q)$ por $V^{RPA}(q)$ inclusive dentro



Note que o acoplamento elétron-fônon também é renormalizado
 isso por que quando "abrimos" $\text{---}\text{---}\text{---} = \text{---}\text{---}\text{---} + \text{---}\text{---}\text{---}$ na equação
 de RPA (I), há "termos cruzados" misturando linhas de interações com
 linhas de fônon. Fazendo explicitamente:

$$\text{---}\text{---}\text{---}^{\text{RPA}}_{-V_{\text{eff}}(q)} = \left(\text{---}\text{---}\text{---}^{U(q)} + \text{---}\text{---}\text{---}^{V_{\text{eff}}(q)} \right) + \left(\text{---}\text{---}\text{---} + \text{---}\text{---}\text{---} \right) \text{---}\text{---}\text{---} + \dots$$



$$\text{---}\text{---}\text{---}^{\text{RPA}}_{-V_{\text{eff}}} = \text{---}\text{---}\text{---}^{-V^{\text{RPA}}} + \text{---}\text{---}\text{---}^{-\frac{1}{V} |g^{\text{RPA}}|^2 D^{\text{RPA}}}$$

Acoplamento renormalizado

É possível calcular expressões para $D^{RPA}(\vec{q}, i\omega_q)$, $|g_q^{RPA}|^2$:

$$D^{RPA}(\vec{q}, i\omega_q) = \frac{\text{diagram with 4 circles in a row}}{1 - \text{diagram with a circle containing 'RPA' and a wavy line}} \quad \text{onde } \text{diagram with a circle containing 'RPA'} = \text{diagram with a circle} + \text{diagram with a circle and a wavy line} + \dots$$

$$= \frac{D^{(0)}(\vec{q}, i\omega_q)}{1 - \chi^{RPA}(\vec{q}, i\omega_q) \frac{1}{V} |g_q|^2 D^{(0)}(\vec{q}, i\omega_q)}$$

Lembrando que $\chi^{RPA}(\vec{q}) = \frac{\chi_0(\vec{q}, i\omega_q)}{1 - U(\vec{q}) \chi_0(\vec{q}, i\omega_q)} = \frac{\text{diagram with a circle}}{1 - \text{diagram with a circle and a wavy line}} = \frac{\chi_0(\vec{q}, i\omega_q)}{\epsilon^{RPA}(\vec{q}, i\omega_q)}$

$D^{(0)}(\vec{q}, i\omega_q) = \frac{ze^2 \Omega}{(i\omega_q)^2 - \Omega^2}$ e $\frac{1}{V} |g_q|^2 = \frac{1}{2} U(\vec{q}) \Omega$ // o modelo de jellium.

Temos então:

$$D^{RPA}(\vec{q}, i\omega_q) = \frac{ze^2 \Omega}{(i\omega_q)^2 - \Omega^2} \cdot \left(\frac{(1 - U(\vec{q}) \chi_0) [(i\omega_q)^2 - \Omega^2] - U(\vec{q}) \chi_0 \Omega^2}{(1 - U(\vec{q}) \chi_0) [(i\omega_q)^2 - \Omega^2]} \right)^{-1}$$

$$= \frac{ze^2 \Omega}{(i\omega_q)^2 - \Omega^2} \cdot \frac{(1 - U(\vec{q}) \chi_0) ((i\omega_q)^2 - \Omega^2)}{(i\omega_q)^2 - \Omega^2 - U(\vec{q}) \chi_0 (i\omega_q)^2 + U(\vec{q}) \chi_0 \Omega^2 - U(\vec{q}) \chi_0 \Omega^2}$$

$$= \frac{(1 - U(\vec{q}) \chi_0) ze^2 \Omega}{(1 - U(\vec{q}) \chi_0) \left[(i\omega_q)^2 - \frac{\Omega^2}{1 - U(\vec{q}) \chi_0} \right]} = \frac{ze^2 \Omega}{(i\omega_q)^2 - \omega_q^2} \quad // \text{ onde}$$

$\omega_q^2 = \frac{\Omega^2}{\epsilon^{RPA}(\vec{q})} = \frac{ze^2 n}{M \epsilon^{RPA}(\vec{q}) \epsilon}$ que é a frequência de plasma renormalizada pela função dielétrica de RPA.

Para $q \rightarrow 0$ $\left\{ \begin{aligned} \epsilon^{RPA}(\vec{q}) &= 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi_0(\vec{q}, \omega_q) \rightarrow 1 - \frac{4e^2 m K_F}{\pi q^2} \propto \frac{1}{q^2} \\ \Rightarrow \omega_q &\propto q \Rightarrow \text{ramo acústico} \end{aligned} \right.$

Por outro lado:

$$g_q^{RPA} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} = g_q + U(q) \chi^{RPA} g_q$$


$$= \left(1 + U(q) \chi^{RPA}(q, iq_n) \right) g_q = \frac{g_q}{\epsilon^{RPA}(q, iq_n)} \quad \text{(" também renormalizado por } \epsilon^{RPA} \text{)}$$

de modo que:

$$\frac{1}{V} |g_q^{RPA}|^2 D^{RPA}(\vec{q}, iq_n) = \frac{1}{V} |g_q|^2 \cdot \frac{1}{(\epsilon^{RPA})^2} \cdot \frac{2\Omega}{(iq_n)^2 - \frac{\Omega^2}{\epsilon^{RPA}}} = \frac{1}{2} \frac{U(q)}{\epsilon^{RPA}} \cdot \frac{2(\Omega^2/\epsilon^{RPA})}{(iq_n)^2 - (\frac{\Omega^2}{\epsilon^{RPA}})}$$

$$= V^{RPA}(q) \cdot \frac{\omega_q^2}{(iq_n)^2 - \omega_q^2} \quad //$$

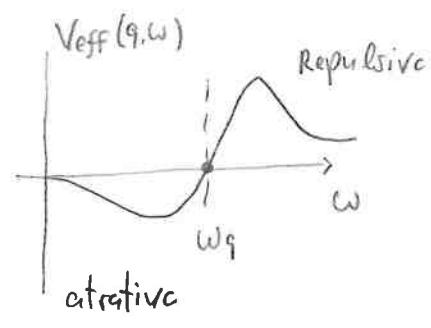
e assim, como

$$-V_{eff}^{RPA}(\vec{q}, iq_n) = -V^{RPA}(q) - \frac{1}{V} |g_q^{RPA}|^2 D^{RPA}(\vec{q}, iq_n)$$


$$\Rightarrow V_{eff}^{RPA}(\vec{q}, iq_n) = V^{RPA}(q) \left(1 + \frac{\omega_q^2}{(iq_n)^2 - \omega_q^2} \right) = V^{RPA}(\vec{q}, iq_n) \frac{(iq_n)^2}{(iq_n)^2 - \omega_q^2}$$

Fazendo a continuação analítica $iq_n \rightarrow \omega + i\eta$:

$$V_{eff}^{RPA}(\vec{q}, \omega) = V^{RPA}(\vec{q}, \omega) \frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_q^2}$$



que é atrativa p/ $\omega < \omega_q$ onde

$\omega_q \sim v_s q$ para q pequeno.