

Spektrálna funkcia pre elektrón-fonónový problém

(František Horváth)

Úlohou je preskúmať spektrálnu funkciu elektrónu $A(\mathbf{k}, \omega)$ pre rôzne hodnoty energie $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ (ďalej budeme písať namiesto $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ iba ε). Spektrálna funkcia je definovaná ako

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_R(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma(\omega)}{[\omega + \Lambda(\omega) + \varepsilon_{\mathbf{k}}]^2 + \gamma^2(\omega)}, \quad (1)$$

kde

$$\gamma(\omega) = \pi \int_0^{|\omega|} d\nu \alpha^2 F(\nu) \quad (2)$$

$$\Lambda(\omega) = \int_0^{\infty} d\nu \alpha^2 F(\nu) \ln \left| \frac{\nu + \omega}{\nu - \omega} \right|. \quad (3)$$

Za $\alpha^2 F(\nu)$ zoberieme nasledovnú modelovú funkciu

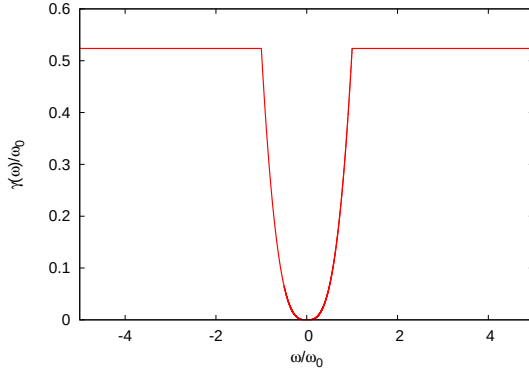
$$\alpha^2 F(\nu) = \begin{cases} g_0 \left(\frac{\nu}{\omega_0} \right)^2, & |\nu| < \omega_0 \\ 0, & |\nu| > \omega_0 \end{cases} \quad (4)$$

Hodnota g_0 je určená zo vzťahu

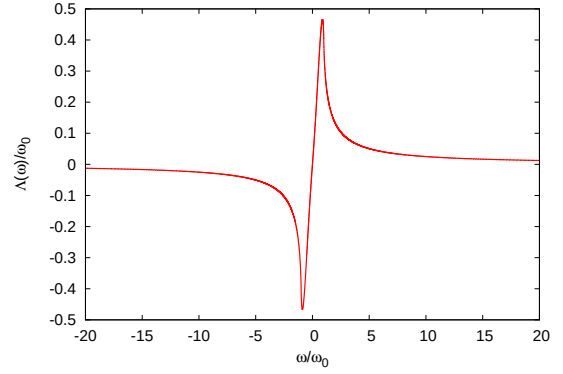
$$2 \int_0^{\infty} d\nu \frac{\alpha^2 F(\nu)}{\nu} = \lambda \Rightarrow g_0 = \lambda.$$

Vo výpočtoch používame jednotky ω_0 a ak nie je napísané inak, tak $\lambda = 0.5$.

Funkcie $\gamma(\omega)$ a $\Lambda(\omega)$



(a) Funkcia $\gamma(\omega)$

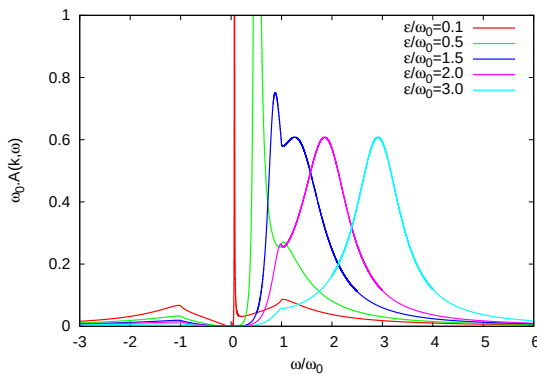


(b) Funkcia $\Lambda(\omega)$

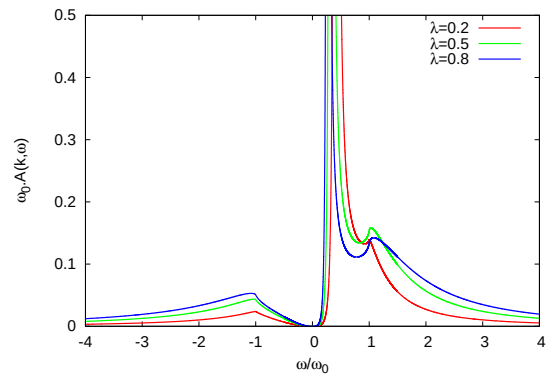
Obrázok 1: $\gamma(\omega)$ a $\Lambda(\omega)$ pre zvolenú modelovú funkciu $\alpha^2 F(\nu)$.

Spektrálna funkcia $A(\mathbf{k}, \omega)$

Na obrázku 2 je zobrazená spektrálna funkcia pre rôzne hodnoty ε a λ . Z obrázkov vidíme, že pri $\varepsilon \rightarrow 0$ nastáva zužovanie kvázičasticového maxima, čo súvisí s tým, že v limite nízkych energií máme dobre definované kvázičastice. Pri zmene hodnoty λ dochádza k prerozdeleniu váhy spektrálnej funkcie medzi kvázičasticovou a nekoherentnou časťou, pričom sme overili, že váha pod kvázičasticovou časťou spektrálnej funkcie je $1/1 + \lambda$.



(a) Pre rôzne hodnoty ε ($\lambda = 0.5$).



(b) Pre rôzne hodnoty λ ($\varepsilon = 0.5$).

Obrázok 2: Spektrálna funkcia $A(\mathbf{k}, \omega)$.

Spektrálna funkcia musí spĺňať nasledovné sumačné pravidlá

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(\mathbf{k}, \omega) = 1, \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{A(\mathbf{k}, \omega)}{1 + e^{-\omega/T}} = \langle c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle.$$

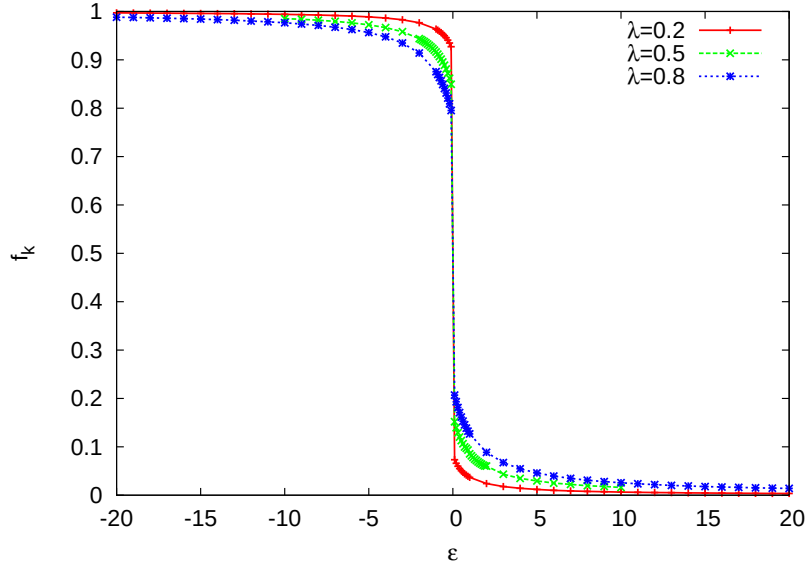
Prvé z nich sme numericky overili a druhé sme použili pri výpočte distribučnej funkcie $f_{\mathbf{k}}$. Pomocou antikomutačného vzťahu pre kreačný a anihilačný operátor môžeme pravú stranu prepísať a dostaneme

$$f_{\mathbf{k}} \equiv \langle c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} \rangle = 1 - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{A(\mathbf{k}, \omega)}{1 + e^{-\omega/T}}.$$

V limite $T \rightarrow 0$ pre distribučnú funkciu platí

$$f_{\mathbf{k}} = 1 - \int_0^{\infty} d\omega A(\mathbf{k}, \omega).$$

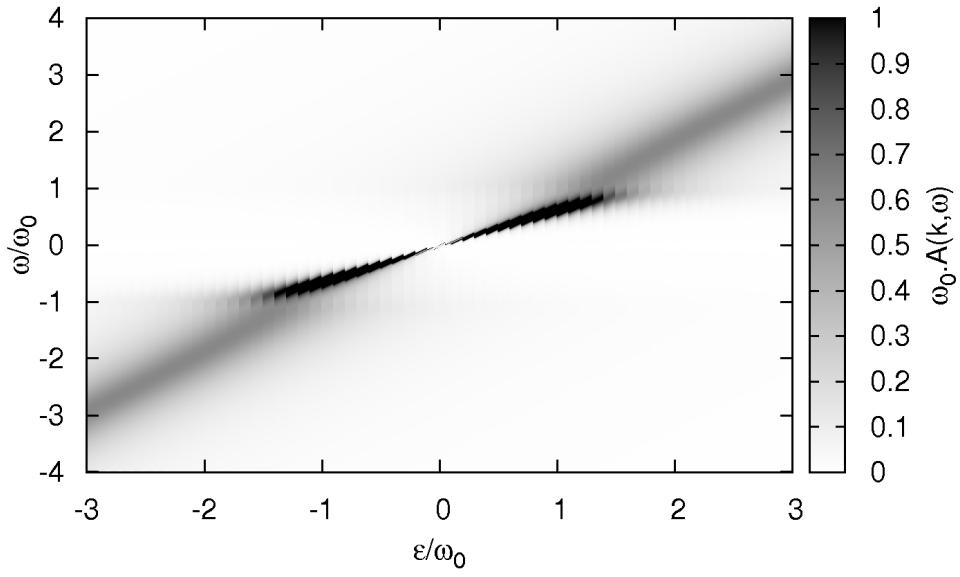
Ako vidíme na obrázku 3, na rozdiel od distribučnej funkcie pre voľné elektróny, teraz sú obsadené aj stavy s energiou vyššou ako je Fermiho energia. Okrem toho, výška skoku na Fermiho energii je rovná $1/1 + \lambda$.



Obrázok 3: Distribučná funkcia $f_{\mathbf{k}}$ pre rôzne hodnoty λ v limite $T \rightarrow 0$.

Renormalizácia spektra elektrónov

Z obrázka 4 vidíme, že pre malé energie dochádza k zmene spektra elektrónov $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{1+\lambda}$, pričom tento výsledok možno interpretovať ako nárast efektívnej hmotnosti kvázičastíc. Na druhej strane, pre veľké energie sa disperzný zákon nezmení a $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} \approx \varepsilon_{\mathbf{k}}$.



Obrázok 4: Spektrálna funkcia $A(\mathbf{k}, \omega)$ pre $\lambda = 0.5$.