

Class 24

Martes 01/12/2020

La clase pasada vimos:

- i) Ejemplo: diagramas de primer orden de G
- ii) Análisis diagramático de $G(\mathbf{k}, \omega)$: Diagramas y reglas de Feynman con invariancia traslacional y temporal.

Chapter 24

Diagrammatic analysis of the Green's function $G(\mathbf{k}, \omega)$

Hoy vemos:

- i) Relación entre M y G_2
- ii) Ecuación de Dyson con invariancia traslacional y temporal
- ii) Tratamiento diagramático de la aproximación de Hartree-Fock

Chapter 25

Self-consistent perturbation theory, an advanced perspective on Hartree-Fock theory

Feynman rules for $G(\mathbf{k}, \omega)$:

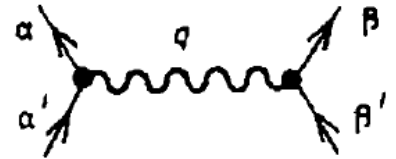
REPASO

- (1) The Green's function $G_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{k})$ is represented by a line labeled by the momentum \mathbf{k} and with the spin-indices α and β labeling the end-points (figure 24.7). Each such line gives a factor

$$G_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{k}) = \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \delta_{\alpha\beta} \left[\frac{\theta(|\mathbf{k}| - k_F)}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)} + i\xi} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}|)}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)} - i\xi} \right]$$



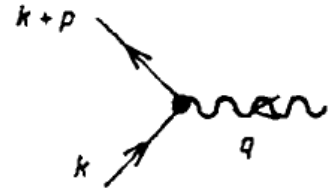
- (2) An interaction line is labeled by the momentum q transferred by the interaction, and the vertices are labeled by spin-indices α, α' (first vertex) and β, β' (second vertex) (see figure 24.8). Each interaction line contributes a factor $u(q)_{\alpha\alpha' \beta\beta'}$.



- (3) $G^{(0)}$ -lines which begin and end on the same interaction line are interpreted as $e^{i\omega\eta} G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega)$, where the limit $\eta \rightarrow 0^+$ is taken at the end of the calculation (figure 24.9).



(4) Momentum is conserved at each vertex. This is illustrated in figure 24.10.



(5) All four-momenta that appear (after satisfying momentum conservation) are integrated over. When the integrals are performed, each is multiplied by a phase-space factor:

$$(2\pi)^{-4} \int d^4 p.$$

(6) The sign of the diagram is given by $(-)^{\ell}$, where ℓ is the number of closed $G^{(0)}$ -loops.

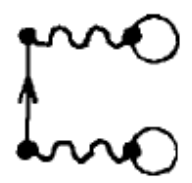
(7) The prefactor of a diagram of order n is

$$\begin{cases} \frac{(i)^n}{2^n n!} & \text{for an indexed diagram of order } n \\ (i)^n & \text{for an unindexed diagram of order } n \end{cases}$$

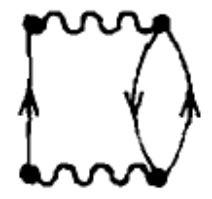
REPASO

Relación entre la autoenergía propia y la función de Green de 2 partículas

Teníamos “inserciones” de la autoenergía:

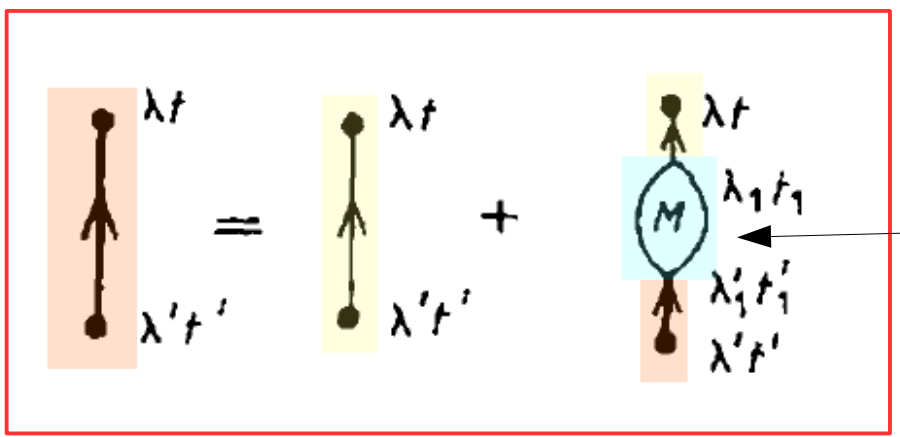


REDUCIBLE



IRREDUCIBLE

ECUACION DE DYSON



Autoenergía propia

$$G(\lambda t \lambda' t') = G^{(0)}(\lambda t, \lambda' t') + \sum_{\lambda_1} \sum_{\lambda'_1} \int dt_1 \int dt'_1 G^{(0)}(\lambda t, \lambda_1 t_1) M(\lambda_1 t_1, \lambda'_1 t'_1) G(\lambda'_1 t'_1, \lambda' t')$$

Relación entre la autoenergía propia y la función de Green de 2 partículas

Teníamos la ecuación de movimiento de la función de Green:

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \right] G^{(0)}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \right] G(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - i \int d^3y v(\mathbf{r}, \mathbf{y}) G_2(\mathbf{r}t, \mathbf{y}t, \mathbf{y}t^+, \mathbf{r}'t')$$

Acá definimos una función M que satisfaga:

$$-i \int d^3y v(\mathbf{r}, \mathbf{y}) G_2(\mathbf{r}t, \mathbf{y}t, \mathbf{y}t^+, \mathbf{r}'t') \equiv \int d\tau' \int d^3y' M(\mathbf{r}t, \mathbf{y}'\tau') G(\mathbf{y}'\tau', \mathbf{r}'t')$$

Y deberíamos identificar esta M con la autoenergía propia

Relación entre la autoenergía propia y la función de Green de 2 partículas

Y deberíamos identificar esta M con la autoenergía propia.

Para esto podríamos probar que la función de Green escrita así:

$$G(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = G^{(0)}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') + \int d\tau' \int d^3y' \int d\tau \int d^3y G^{(0)}(\mathbf{r}t, \mathbf{y}\tau) M(\mathbf{y}\tau, \mathbf{y}'\tau') G(\mathbf{y}'\tau', \mathbf{r}'t')$$

Es solución de la ecuación de movimiento:

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} \right] G(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') = \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \int d\tau' \int d^3y' M(\mathbf{r}t, \mathbf{y}'\tau') G(\mathbf{y}'\tau', \mathbf{r}'t')$$

Keep in mind:

$$-i \int d^3y v(\mathbf{r}, \mathbf{y}) G_2(\mathbf{r}t, \mathbf{y}t, \mathbf{y}t^+, \mathbf{r}'t') \equiv \int d\tau' \int d^3y' M(\mathbf{r}t, \mathbf{y}'\tau') G(\mathbf{y}'\tau', \mathbf{r}'t')$$

Ecuación de Dyson para sistemas con invariancia en x y t

$$G_{\alpha\beta}(x-y) = G_{\alpha\beta}^{(0)}(x-y) + \sum_{\lambda\mu} \int d^4x_1 \int d^4x'_1 G_{\alpha\lambda}^{(0)}(x-x_1) M_{\lambda\mu}(x_1-x'_1) G_{\mu\beta}(x'_1-y)$$

notar la dependencia en x-y

Pasamos al espacio recíproco usando la transformada de Fourier.

Se obtiene la siguiente ecuación, algebraica (sin integrales):

$$G_{\alpha\beta}(k) = G_{\alpha\beta}^{(0)}(k) + \sum_{\lambda} \sum_{\mu} G_{\alpha\lambda}^{(0)}(k) M_{\lambda\mu}(k) G_{\mu\beta}(k)$$

Ecuación de Dyson para sistemas con invariancia en x y t

Si el Hamiltoniano es independiente del espín tenemos:

$$\left. \begin{aligned} G_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{k}) &= \delta_{\alpha\beta} G^{(0)}(\mathbf{k}) \\ G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) &= \delta_{\alpha\beta} G(\mathbf{k}) \\ M_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) &= \delta_{\alpha\beta} M(\mathbf{k}) \\ G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) &= G_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{k}) + \sum_{\lambda} \sum_{\mu} G_{\alpha\lambda}^{(0)}(\mathbf{k}) M_{\lambda\mu}(\mathbf{k}) G_{\mu\beta}(\mathbf{k}) \end{aligned} \right\} G(\mathbf{k}) = G^{(0)}(\mathbf{k}) + G^{(0)}(\mathbf{k}) M(\mathbf{k}) G(\mathbf{k})$$

→
$$G(\mathbf{k}) = \frac{G^{(0)}(\mathbf{k})}{1 - G^{(0)}(\mathbf{k}) M(\mathbf{k})} = \frac{1}{[G^{(0)}(\mathbf{k})]^{-1} - M(\mathbf{k})}$$

Ecuación de Dyson para sistemas con invariancia en x y t

$$G(\mathbf{k}) = \frac{G^{(0)}(\mathbf{k})}{1 - G^{(0)}(\mathbf{k})M(\mathbf{k})} = \frac{1}{[G^{(0)}(\mathbf{k})]^{-1} - M(\mathbf{k})}$$

$$G^{(0)}(\mathbf{k}) = \lim_{\xi \rightarrow 0^+} \left[\frac{\theta(|\mathbf{k}| - k_F)}{\omega - \epsilon_k^{(0)} + i\xi} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}|)}{\omega - \epsilon_k^{(0)} - i\xi} \right] \longrightarrow [G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega)]^{-1} = \omega - \epsilon_k^{(0)}$$

$|\mathbf{k}| > k_F$ or $|\mathbf{k}| < k_F$

$$\longrightarrow \boxed{G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k^{(0)} - M(\mathbf{k}, \omega)}}$$

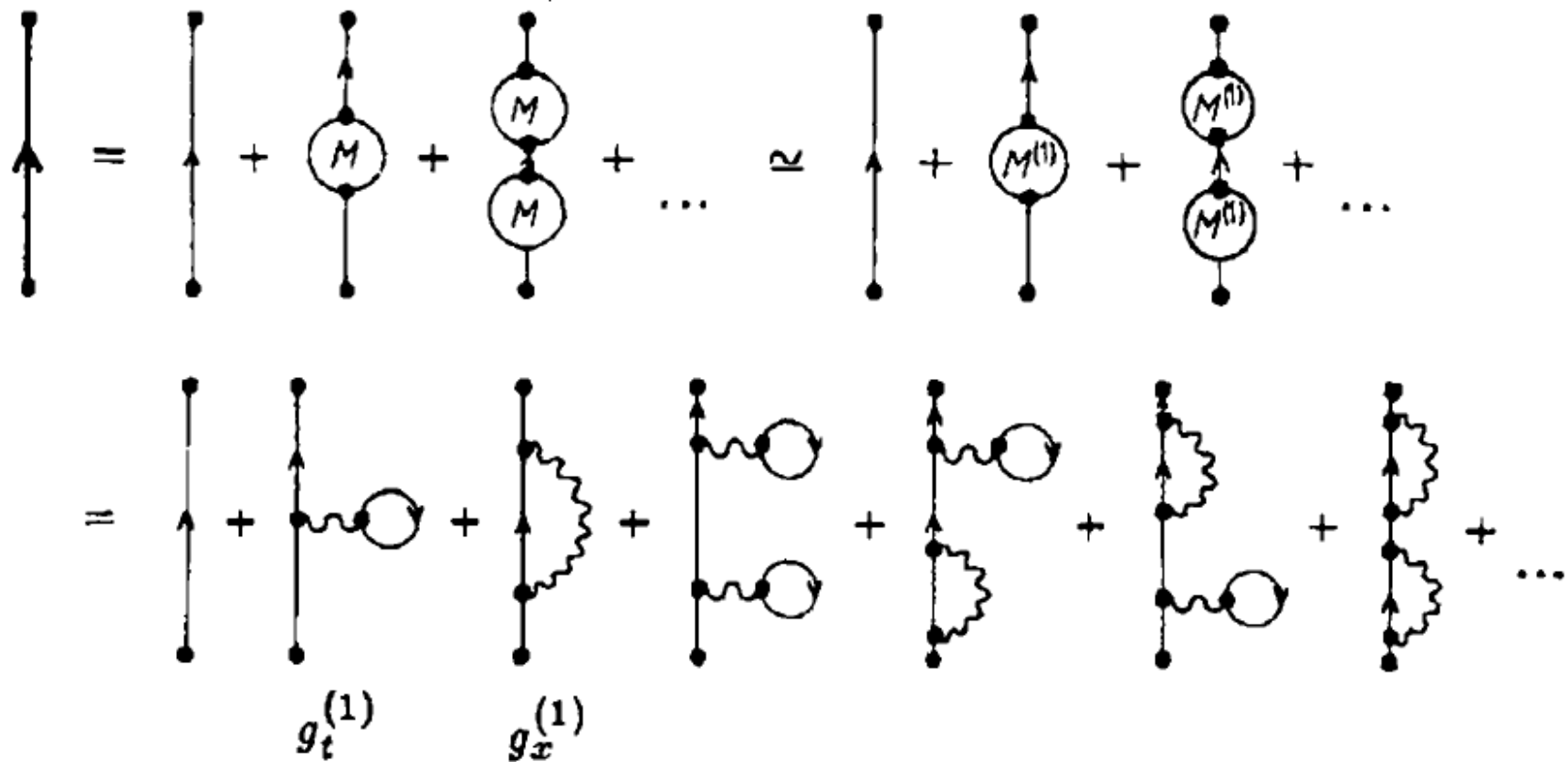
Los polos de la función de Green dan las energías de excitación del sistema:

$$\omega - \epsilon_k^{(0)} - M(\mathbf{k}, \omega) = 0$$

Ecuación de Dyson para sistemas con invariancia en x y t

Si tomamos sólo los diagramas de primer orden de la self-energy: $M \approx M^{(1)}$

la función de Green contiene diagramas de todos los órdenes:



Ecuación de Dyson para sistemas con invariancia en x y t

Energía del estado fundamental con interacción

Teníamos la expresión de la energía del GS en términos de la función de Green:

$$E_0 = -\frac{i}{2} \frac{\Omega}{(2\pi)^4} \lim_{\tau \rightarrow 0^+} \int d^3k \int d^3\omega e^{i\omega\tau} \left[\frac{|\mathbf{k}|^2}{2m} + \omega \right] \text{Tr} \{ G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) \}$$

En este caso sin espín: $\text{Tr} \{ G_{\alpha\beta}(k) \} = \text{Tr} \{ \delta_{\alpha\beta} G(k) \} = 2G(k)$

Y usando: $G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k^{(0)} - M(\mathbf{k}, \omega)}$



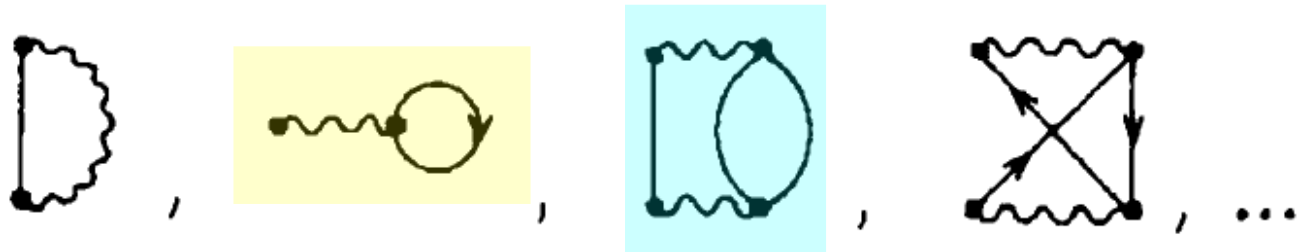
$$E_0 = -i \frac{\Omega}{(2\pi)^4} \lim_{\tau \rightarrow 0^+} \int d^3k \int d\omega e^{i\omega\tau} \frac{\frac{k^2}{2m} + \omega}{\omega - \frac{k^2}{2m} - M(\mathbf{k}, \omega)}$$

Energía del fundamental en función de la autoenergía propia M

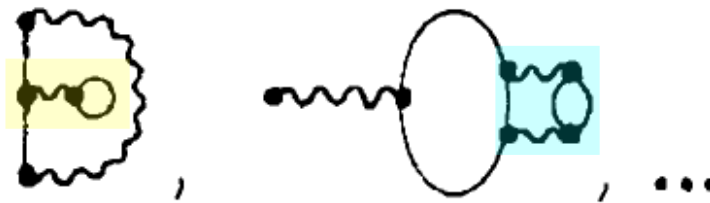
Teoría de perturbaciones auto-consistente: aproximación de Hartree-Fock

Definición - otra clasificación de las inserciones de autoenergía:

Esqueletos:

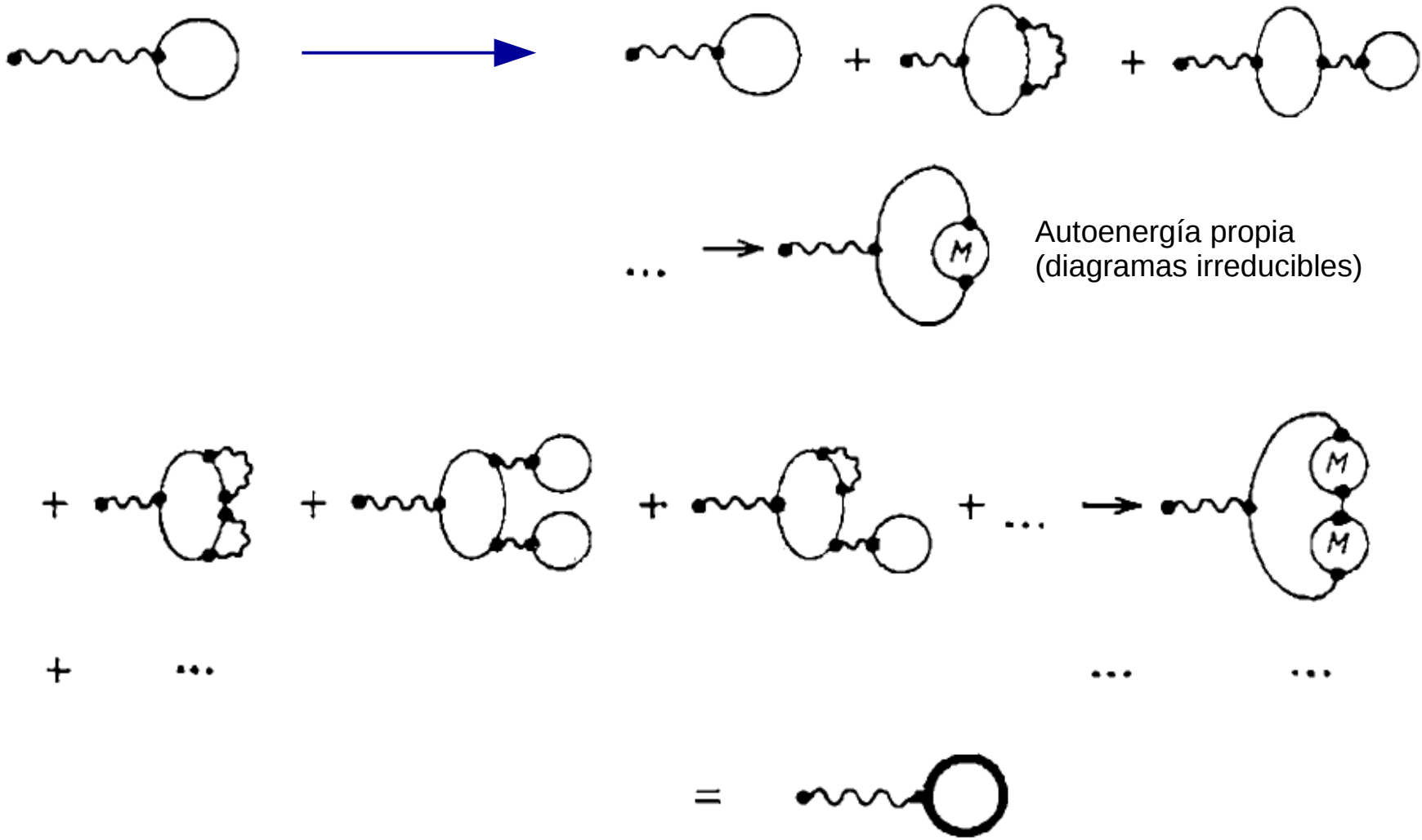


No esqueletos:



Teoría de perturbaciones auto-consistente: aproximación de Hartree-Fock

Vamos a vestir los esqueletos:



Teoría de perturbaciones auto-consistente: aproximación de Hartree-Fock

De la misma forma se visten los demás esqueletos, reemplazando **propagadores libres** por **exactos**. Sumando todos se obtiene de nuevo la autoenergía propia:

$$M = \sum_{\text{all dressed skeletons}} ::= \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \text{diagram 4} + \dots$$

Notar: antes habíamos definido la **autoenergía propia** como la suma de inserciones **irreducibles**. Ahora solo dibujamos **esqueletos**, pero hay que **vestirlos**

Teoría de perturbaciones auto-consistente: aproximación de Hartree-Fock

Esta formulación es una buena fuente de aproximaciones.

Por ejemplo, si nos quedamos con **esqueletos de primer orden**:

The diagram shows a diagrammatic equation for the first-order skeleton approximation of the Green's function. On the left, a vertical line with an upward arrow is equal to the sum of a vertical line with an upward arrow and a vertical line with an upward arrow and a loop labeled 'M'. This is approximately equal to the sum of a vertical line with an upward arrow, a vertical line with an upward arrow and a loop with a wavy line, and a vertical line with an upward arrow and a loop with a wavy line and a star-like shape.

Notar: es una ecuación perturbativa autoconsistente para la función de Green.

Corresponde a la aproximación de **Hartree-Fock**.

FIN de la clase 24

Temas de la clase 24

- i) Relación entre la autoenergía propia (M) y la función de Green de dos partículas (G_2)
- ii) Ecuación de Dyson en sistemas con invariancia traslacional y temporal
- iii) Esqueletos y esqueletos vestidos: Análisis diagramático de la aproximación de Hartree-Fock

