Diagramas de Feynman na Rep. de $(\vec{k},\omega)$.

Para sistemas homogeneos ou quase homogêneos (leia-se, metais) é mais conveniente trabalhar no espaço $\vec{k}$. Também, na maioria dos casos, é útil trabalhar no espaço de frequência ω

Fazemos então a transformada de Fourier "dupla"

$(\vec{r},t) \to (\vec{k},\omega)$ nas função de Green:

$$G_{\alpha\alpha'}(x,x') = \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4k \; e^{i\,k\cdot(x-x')}\, G_{\alpha\alpha'}(k)$$

onde $k = \vec{k},\omega$ é um quadri-vetor covariante de modo que

$$\boxed{k\cdot x \equiv \vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t} \Rightarrow \boxed{G_{\alpha\alpha'}(\vec{r},t,\vec{r}'t') = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\frac{d\omega}{(2\pi)}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\, e^{-i\omega(t-t')}\, G_{\alpha\alpha'}(\vec{k},\omega)}$$

Nessa representação, o potencial U fica na forma:

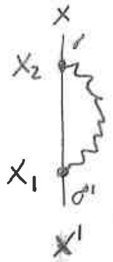
$$U_{\substack{\alpha\alpha'\\ \beta\beta'}}(x,x') = U_{\substack{\alpha\alpha'\\ \beta\beta'}}(\vec{r}-\vec{r}')\,\delta(t-t') \qquad \text{(Coulombiano e "instantâneo")}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4k\; e^{i\,k\cdot(x-x')}\, U_{\substack{\alpha\alpha'\\ \beta\beta'}}(k) = \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\, U_{\substack{\alpha\alpha'\\ \beta\beta'}}(\vec{q})\,\delta(t-t')$$

$\left(\text{Já que } \delta(t-t') = \int \frac{d\omega}{2\pi}\, e^{-i\omega(t-t')}\right)$ sendo $\boxed{U_{\substack{\alpha\alpha'\\ \beta\beta'}}(\vec{q}) = \int d^3\vec{r}\; e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\, U_{\substack{\alpha\alpha'\\ \beta\beta'}}(\vec{r})}$

Como ficam os diagramas nesse caso?

Exemplo:



$$i\,\mathcal{G}^{(\text{Diagrama})}(x\,x') = -\int d^4x_1\, d^4x_2\; \mathcal{G}^{(0)}(x,x_2)\, \mathcal{G}^{(0)}(x_2,x_1)\, U(x_1 x_2)\, \mathcal{G}^{(0)}(x_1,x')$$

$$i\,\mathcal{G}^{(\text{Diagrama})}(x,x') = -\int d^4x_1\, d^4x_2 \int \frac{d^4q\, d^4k\, d^4p\, d^4p'}{(2\pi)^{16}}\; e^{+iq(x_1-x_2)}\, e^{+ik(x_1-x')}\, e^{+ip(x_2-x_1)}\, e^{+ip'(x-x_2)}$$

$$\times\; U(q)\, \mathcal{G}^{(0)}(k)\, \mathcal{G}^{(0)}(p)\, \mathcal{G}^{(0)}(p')$$

cons. de momento

(*) [no quadro]

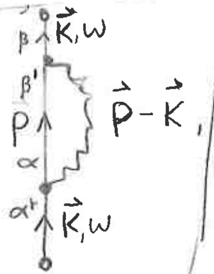
$$= -\int \frac{d^4q\, d^4k\, d^4p\, d^4p'}{(2\pi)^{16}}\; (2\pi)^4\, \underline{\underline{\delta^4(p-q-k)}}\, (2\pi)^4\, \underline{\underline{\delta^4(p-q-p')}}$$

$$\times\; U(q)\, \mathcal{G}^{(0)}(k)\, \mathcal{G}^{(0)}(p)\, \mathcal{G}^{(0)}(p')\, e^{-ikx'}\, e^{ip'x}$$

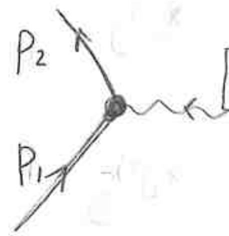
$$\begin{pmatrix} p' \to p-q \\ q \to p-k \end{pmatrix} \quad = -\int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4}\; e^{ik(x-x')}\, U(p-k)\, \mathcal{G}^{(0)}(k)\, \mathcal{G}^{(0)}(p)\, \mathcal{G}^{(0)}(k)$$

ou seja:

$i\,\mathcal{G}^{(\text{diagrama})}(\vec{k},\omega) =$

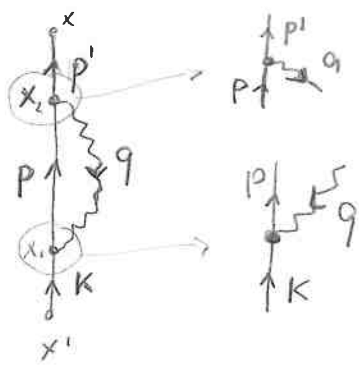


de modo que os vértices ficam na forma (momento é conservado em cada vértice):



$\boxed{q = p_2 - p_1}$

Cons. de momento (vide transf)



$\boxed{p' + q - p = 0} \Rightarrow \underline{\underline{\delta^4(p-q-p')}}$

$\boxed{K + q = p} \Rightarrow \underline{\underline{\delta^4(p-q-K)}}$

Usando esse diagrama como base, podemos enunciar as regras dos diagramas de ordem $\underline{\underline{n}}$ para $G_{\alpha\alpha'}(K)$ $(K \equiv \vec{K}, \omega)$:

1) Desenhe todos os diagramas conectados, topologicamente distintos com n linhas de interação.

2) Associe quadri-momentos $(K_i, q_j, \dots)$ a <u>cada</u> linha de interação e a cada propagador; <u>conservando o momento em cada vértice</u>.

3) Associe $i\,G^{(0)}(K_i)$ às linhas contínuas e $-i\,U(q_j)$ às linhas de interação. Some (integre) sobre os momentos internos $\left(\int \frac{d^4p}{(2\pi)^4}\right)$ e índices de spin/estado internos.

4) Multiplique por $(-1)^F$ onde F é o número de circuitos fermiônicos fechados.

5) A cada propagador proveniente de índices temporais iguais, multiplique por $e^{i\omega\eta}$ $\eta \to 0^+$. Isso vem de:

$$G^{(0)}(\vec{r}t, \vec{r}'t') = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} G^{(0)}(\vec{k},\omega) \underbrace{e^{-i\omega(t-t')}}_{\boxed{e^{i\omega\eta} \text{ p/ } t \to t'^+}}$$

Auto-energia e Equação de Dyson

Quando introduzimos as funções de Green de partícula única $G(\vec{r}t,\vec{r}'t')$, mostramos que elas obedecem uma Equação de Dyson:

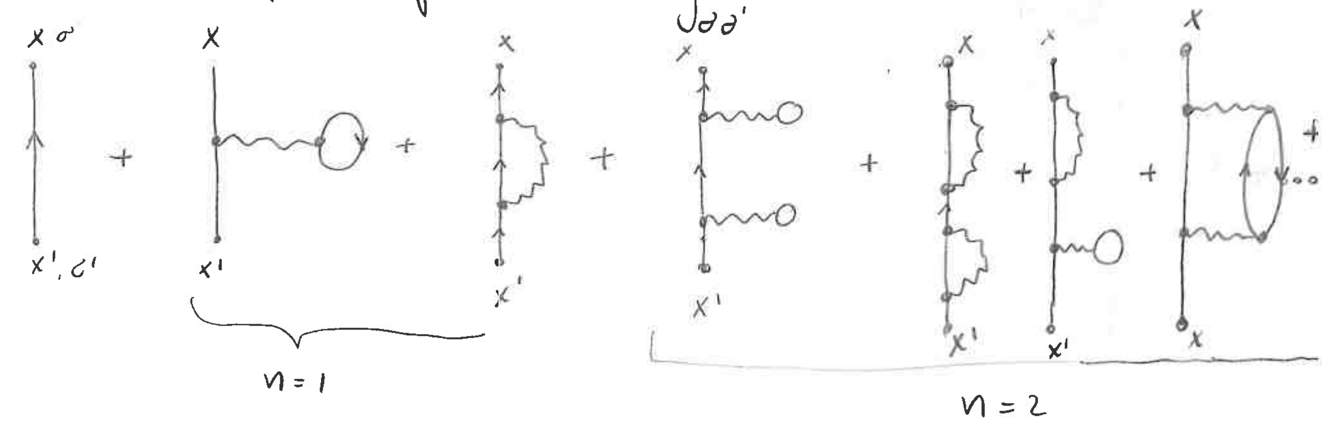
se $H = H_0 + V \rightarrow G = G_0 + G_0 V G_0 + G_0 V G_0 V G_0 + \ldots$

$$\boxed{G = G_0 + G_0 V G}$$

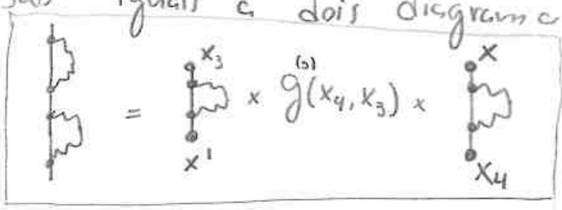
(integrais implícitas em cada produto).

As Funções de Green (de muitos corpos) temporalmente ordenadas também obedecem uma eq de Dyson com a mesma estrutura. Isso pode ser "visualizado" pela expansão de $G_{\sigma\sigma'}(x,x')$:

$iG_{\sigma\sigma'}(x,x') =$

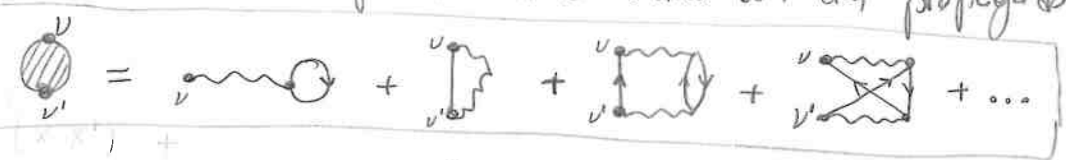


Note que alguns diagramas de $n=2$ são iguais a dois diagramas de $n=1$ "colados" por um propagador $G^{(0)}$:



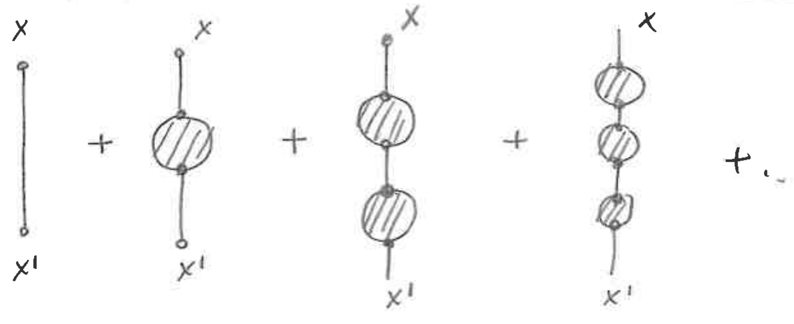
Tais diagramas são chamados "redutíveis". Considerando apenas diagramas "irredutíveis" (não separáveis em dois outros por um "corte" único em um propagador): SEM PERNAS

$-i\Sigma^{\star}_{\nu\nu'} =$



Temos:

$iG_{\sigma\sigma'}(x,x') =$



Ou seja: integral + soma sobre índices

$$iG_{\alpha\alpha'}(x,x') = iG^{(0)}_{\alpha\alpha'}(x,x') + iG^{(0)}_{\alpha\nu}(-i)\Sigma^{\star}_{\nu\nu'}\, iG^{(0)}_{\nu'\alpha'} + iG^{(0)}_{\alpha\nu}\Sigma^{\star}_{\nu\nu'}G^{(0)}_{\nu'\nu''}\Sigma^{\star}_{\nu''\nu'''}G^{(0)}_{\nu'''\alpha'} + \dots$$

$$\Rightarrow \boxed{G_{\alpha\alpha'} = G^{(0)}_{\alpha\alpha'} + G^{(0)}_{\alpha\nu}\Sigma^{\star}_{\nu\nu'}G_{\nu'\alpha}}$$

Pictoricamente

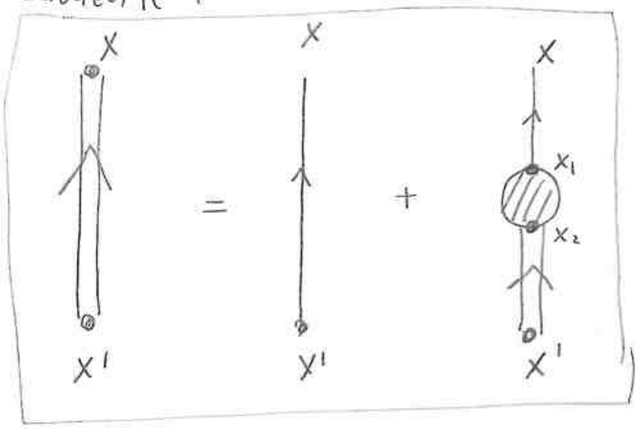
Eq de Dyson para $G_{\alpha\alpha'}(x,x')$

soma

ou

$$\boxed{G_{\alpha\alpha'}(x,x') = G^{(0)}_{\alpha\alpha'}(x,x') + \sum_{\nu\nu'}\int d^4x_1\, d^4x_2\, G^{(0)}_{\alpha\nu}(x,x_1)\,\Sigma^{\star}_{\nu\nu'}(x_1,x_2)\,G_{\nu'\alpha'}(x_2,x')}$$

Pictoricamente:

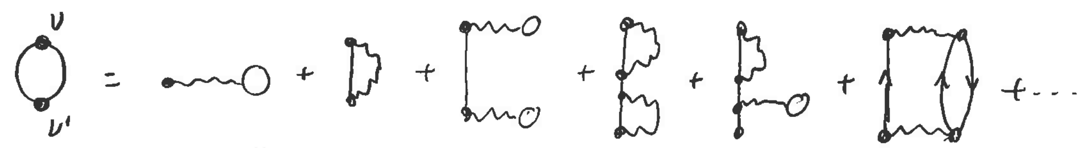


Eq. de Dyson em formato de Diagramas de Feynman.

onde $\Sigma^{\star}_{\nu\nu'}$ é a chamada auto-energia própria.
externa

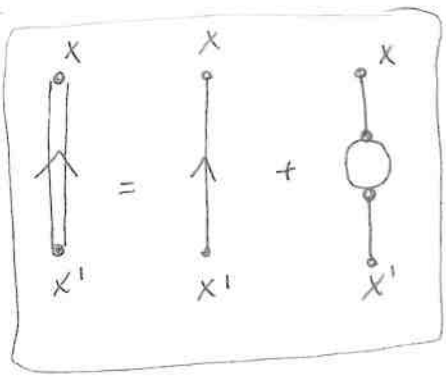
Por outro lado, se apenas tirarmos as "pernas" dos diagramas mas mantendo tanto redutíveis como irredutíveis, temos:

$-i\tilde{\Sigma}_{\nu\nu'} =$



(auto-energia imprópria)

$\Rightarrow$



$$\Rightarrow \boxed{G_{\alpha\alpha'}(x,x') = G^{(0)}_{\alpha\alpha'}(x,x') + \sum_{\nu\nu'}\int d^4x_1\, d^4x_2\, G^{(0)}_{\alpha\nu}(x,x_1)\,\tilde{\Sigma}_{\nu\nu'}(x_1,x_2)\,G^{(0)}_{\nu'\alpha'}(x_2,x')}$$

(ñ é tipo Dyson)

$\tilde{\Sigma}_{\nu\nu'} \rightarrow$ auto-energia imprópria

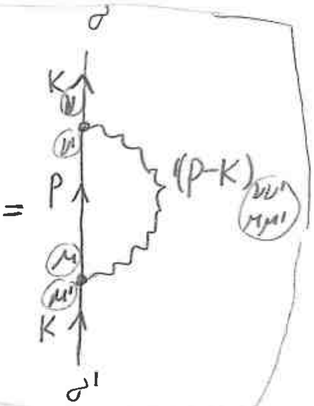
Auto-energia e Eq. de Dyson no espaço de momentos

Os mesmos argumentos podem ser aplicados no espaço $K=(\vec{K},\omega)$

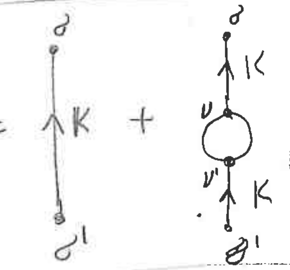
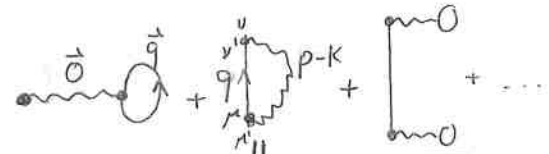
Havíamos mostrado que a contribuição para o diagrama  $U_{\nu\nu'\,\mu\mu'}$ será:

$$\boxed{i G^{(\text{Diagrama})}_{\delta\delta'}(x,x') = \int \frac{d^4K}{(2\pi)^4}\, e^{iK(x-x')} \left(i G^{(\text{Diagrama})}(K) \right)} \quad \text{onde}$$

$$\boxed{i G^{(\text{Diagrama})}_{\delta\delta'}(K) = \sum_{\substack{\nu\nu' \\ \mu\mu'}} i G^{(0)}_{\delta\nu}(K) \left[\int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \left(-i\, U_{\substack{\nu\nu' \\ \mu\mu'}}(p-K)\right) i G^{(0)}_{\nu'\mu}(p) \right] i G^{(0)}_{\mu'\delta'}(K) =} $$



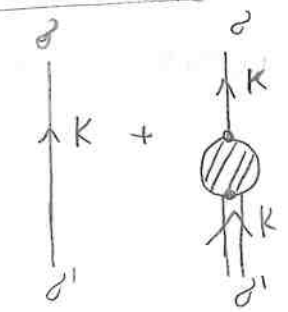
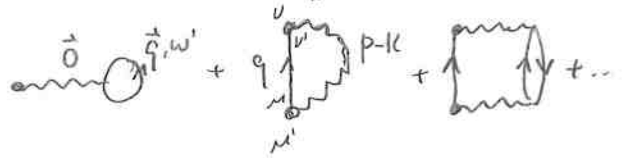
ou seja, o momento da contribuição é dado pelo momento K das "pernas" que multiplicam a integral no momento interno p. Em geral:

$$\boxed{i G_{\delta\delta'}(K) = }$$  onde $\bigcirc = -i \tilde{\Sigma}_{\nu\nu'}(\vec{K},\omega) =$ 

(imprópria)

$$\boxed{\sum_{\substack{\nu\nu' \\ \mu\mu'}} \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} U_{\substack{\nu\nu' \\ \mu\mu'}}(p-K) G^{(0)}_{\nu'\mu}(p)}$$

ou ainda

$$i G_{\delta\delta'}(K) = $$  onde $= -i \Sigma^{\star}(\vec{K},\omega) =$ 

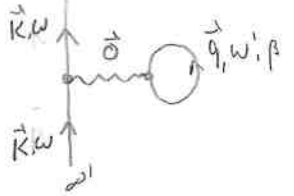
(própria)

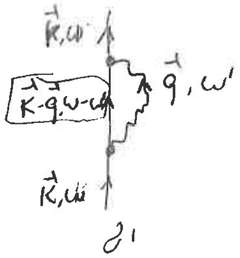
Eq de Dyson

Ou seja, sabendo-se as expressões para $U(\vec{q},\omega)$ e $G^{(0)}_{\alpha\beta}(\vec{K},\omega)$ as contribuições dos diagramas em $\tilde{\Sigma}(\vec{K},\omega)$ ou $\Sigma^{\star}(\vec{K},\omega)$ podem ser calculadas (em integrais como as acima) e $G_{\delta\delta'}(\vec{K},\omega)$ pode $\underbrace{\text{ser calculada}}_{\text{(em princípio)}}$ ordem a ordem...

Exemplos (importantes) de cálculo de Diagramas

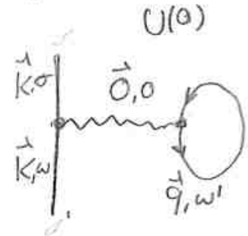
Iniciamos com a função de Green em 1ª ordem $(n=1)$: para férmions em um sistema homogêneo e $\boxed{U(q)_{\alpha\alpha' \atop \beta\beta'} = U(q)\,\delta_{\alpha\alpha'}\,\delta_{\beta\beta'}}$ $\boxed{\text{indep. de spin}}$

$$i\,\mathcal{G}^{(n=1)}_{\gamma\gamma'}(\vec{k},\omega) =$$


$+$


$= \text{I} + \text{II}$

de modo que $\mathcal{G}_{\gamma\gamma'}(\vec{k},\omega) \approx \mathcal{G}^{(0)}_{\gamma\gamma'}(\vec{k},\omega) + \mathcal{G}^{(1)}_{\gamma\gamma'}(\vec{k},\omega)$. Avaliemos os termos I e II:

I "Diagrama de Hartree"


$\times\ \delta_{\gamma\gamma'}$ (interação não depende do spin)

$$\text{I} = \underbrace{[i.i.i.(-i)]}_{(-1)} \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3}\frac{d\omega'}{(2\pi)} \times \underbrace{(-1)^1}_{\text{1 loop fechado}} \left(\mathcal{G}^{(0)}(\vec{k},\omega)\right)^2 U(0)\,.\,\mathcal{G}^{(0)}(\vec{q},\omega').\,\underbrace{e^{i\omega'\eta}}_{\text{tempos iguais}}$$

$$= + \left(\mathcal{G}^{(0)}(\vec{k},\omega)\right)^2 U(0) \boxed{\int \frac{d^4q}{(2\pi)^4}\,\mathcal{G}^{(0)}(q)\,e^{i\omega\eta}} \rightarrow$$

Utilizaremos agora o fato de que o sistema é homogêneo (e.g., gás de elétrons) de modo que usamos:

$$\underbrace{\mathcal{G}^{(0)}_{\gamma\gamma'}}_{\text{spin}}(\vec{k},\omega) = \delta_{\gamma\gamma'}\left[\frac{\Theta(|\vec{k}|-k_F)}{\omega-\varepsilon_k+i\eta} + \frac{\Theta(k_F-|k|)}{\omega-\varepsilon_k-i\eta}\right]$$

onde $\boxed{H_0 = \sum_{k\sigma}\varepsilon_k\,c^\dagger_{k\sigma}c_{k\sigma} \qquad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2k^2}{2m}}$

que é o "propagador livre"

Cálculo do propagador livre do gás de elétrons

Sendo $H_0 = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_k C^{\dagger}_{k\sigma} C_{k\sigma}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} C^{\dagger}_{k\sigma}|\Phi_0\rangle = \begin{cases} 0 & |\vec{k}|<K_F \\ |\Phi_{1e}'(N+1)\rangle & |\vec{k}|>K_F \end{cases} \\ C_{k\sigma}|\Phi_0\rangle = \begin{cases} |\Phi_{1h}^{1}(N-1)\rangle & |\vec{k}|<K_F \\ 0 & |\vec{k}|>K_F \end{cases} \end{array} \right.$$

$|\Phi_0\rangle \to$ estado fundamental

Sendo $\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_{k\sigma} \psi_{k\sigma}(\vec{r})\, \hat{C}_{k\sigma}$, com $\psi_{k\sigma}(\vec{r}) = \boxed{\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}$, temos: $\boxed{\psi_I(\vec{r},t) = e^{iH_0 t}\,\psi(\vec{r})\, e^{-iH_0 t}}$

$$\boxed{i G^{(0)}_{\alpha\beta}(\vec{r}t,\vec{r}'t') = \langle\Phi_0|T[\psi_I(\vec{r}t)\,\psi_I^{\dagger}(\vec{r}'t')]|\Phi_0\rangle} = \Theta(t-t')\langle\Phi_0|\psi_I(\vec{r},t)\psi_I^{\dagger}(\vec{r}'t')|\Phi_0\rangle + \Theta(t'-t)\langle\Phi_0|\psi^{\dagger}(\vec{r}'t')\,\psi(\vec{r}t)|\Phi_0\rangle$$

$$= \delta_{\alpha\beta}\cdot\frac{1}{V}\cdot\sum_k e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\, e^{-i\varepsilon_k(t-t')}\cdot\left(\Theta(t-t')\cdot\Theta(|\vec{k}|-K_F) - \underbrace{\Theta(t'-t)}_{t<t'}\cdot\Theta(K_F-|\vec{k}|)\right)$$

excitação tipo: partícula ($|\vec{k}|>K_F$) buracos ($K<K_F$)

$\frac{1}{V}\sum_k \to \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}$ e temos

$$i G^{(0)}_{\alpha\beta}(\vec{r}t,\vec{r}'t') = \delta_{\alpha\beta}\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}\, e^{-i\varepsilon_k(t-t')}\left(\Theta(t-t')\Theta(|\vec{k}|-K_F) - \Theta(t'-t)\Theta(K_F-|\vec{k}|)\right)$$

Para calcular $iG^{(0)}_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega)$ utilizamos a identidade: $\boxed{\Theta(t-t') = -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{(2\pi i)}\frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega+i\eta}}$

$t>t'$ $\omega \Rightarrow -i\eta$

$t<t'$ $\omega \Rightarrow +i\eta$

$$i G^{(0)}_{\alpha\beta}(x,x') = \delta_{\alpha\beta}\int\frac{d^4K}{(2\pi)^4}\, e^{ik(x-x')}\underbrace{\left[\frac{\Theta(|\vec{k}|-K_F)}{\omega-\varepsilon_k+i\eta} + \frac{\Theta(K_F-|\vec{k}|)}{\omega-\varepsilon_k-i\eta}\right]}_{G^{(0)}(\vec{k},\omega)}$$

de modo que:

$$\boxed{G^{(0)}_{\alpha\beta}(\vec{k},\omega) = \delta_{\alpha\beta}\left[\frac{\Theta(|\vec{k}|-K_F)}{\omega-\varepsilon_k+i\eta} + \frac{\Theta(K_F-|\vec{k}|)}{\omega-\varepsilon_k-i\eta}\right]}$$

Desta forma, o diagrama (I) pode ser calculado por

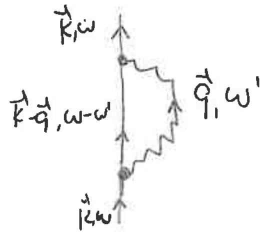
$$\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{d\omega'}{(2\pi)} \cdot \left[\frac{\Theta(|\vec{q}|-K_F)}{\omega'-\varepsilon_k+i\eta} + \frac{\Theta(K_F-|\vec{q}|)}{\omega'-\varepsilon_k-i\eta}\right] e^{i\omega'\eta} = \left(\frac{1}{\omega \pm i\eta} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{\omega}\right) \mp i\pi\delta(\omega)\right)$$

$$= 2\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{i\Theta(K_F-|\vec{q}|)}{2} = i\frac{N}{V} \quad \Leftarrow \boxed{\text{densidade}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\int \frac{d\omega'}{(2\pi)}\frac{f(\omega')}{\omega' \pm i\eta} = \mp \frac{i}{2} f(0)}$$

$\boxed{\text{Logo}}$: $(I) = \underbrace{\left(G^{(0)}(\vec{k},\omega)\right)^2}_{\text{"perna"}} \cdot iU(0)\frac{N}{V}$ "Hartree"

Calculemos o termo (II): "Exchange"



$$(II) = \underbrace{[i \cdot i \cdot i(-1)]}_{-1} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\frac{d\omega'}{(2\pi)} \cdot \left(G^{(0)}(\vec{k},\omega)\right)^2 U(\vec{q})\, G^{(0)}(\vec{k}-\vec{q},\omega-\omega')\, e^{i(\omega-\omega')\eta}$$

$$\begin{cases} \vec{k}' = \vec{k}-\vec{q} \\ \omega'' = \omega-\omega' \end{cases}$$

$$= -\underbrace{\left(G^{(0)}(\vec{k},\omega)\right)^2}_{\text{perna}} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} U(\vec{k}-\vec{k}') \underbrace{\int \frac{d\omega''}{(2\pi)} G^{(0)}(\vec{k}',\omega'')\, e^{i\omega''\eta}}_{I(\vec{k}')}$$

Calculando $I(\vec{k}')$:

$$\boxed{\frac{1}{\omega \pm i\eta} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{\omega}\right) \mp i\pi\delta(\omega)}$$

$$I(\vec{k}') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega''}{(2\pi)} e^{i\omega''\eta}\left[\frac{\Theta(K_F-k')}{\omega''-\varepsilon_k-i\eta} + \frac{\Theta(k'-K_F)}{\omega''-\varepsilon_k+i\eta}\right] = \dots = i\,\Theta(K_F-k')$$

Outro jeito: usando $\int_{-\infty}^{\infty} = \int_{\circlearrowleft} - \int_{\frown}$ e escolhendo o contorno "por cima", ficamos apenas com o polo $\underline{\omega = \varepsilon + i\eta}$

tomando $\eta \to 0$:

$$\boxed{I(\vec{k}') = i\,\Theta(K_F-k')} \Rightarrow \boxed{(II) = -i\left(G^{(0)}(\vec{k},\omega)\right)^2 \cdot \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} U(\vec{k}-\vec{k}')\,\Theta(K_F-k')}$$

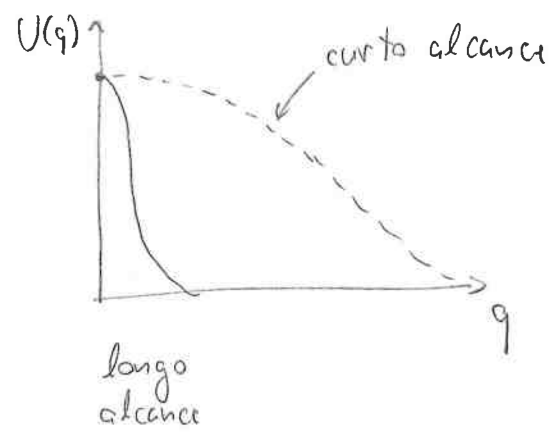
Juntando tudo, obtemos as contribuições em 1ª ordem:

$$G^{(n=1)}_{\sigma\sigma'}(\vec{k},\omega) = \delta_{\sigma\sigma'}\left[G^{(0)}(\vec{k},\omega)\right]^2 \cdot \left[\underbrace{U(0)\frac{N}{V}}_{\text{"direto"}} - \underbrace{\int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3}\, U(\vec{k}-\vec{q})\, \Theta(k_F - |\vec{q}|)}_{\text{"troca"}} \right]$$

Esses dois termos tem interpretações físicas bem claras na aproximação de Born, o primeiro termo corresponde a um espalhamento "direto" (elástico) do elétron pelo potencial, sem troca de momento. É o chamado termo de "Hartree".

O segundo termo envolve uma troca de momento e sua magnitude vai depender da ocupação do elétron no estado $|\vec{q}|$ via a distribuição de Fermi-Dirac (no caso, a $T=0$, $\Theta(k_F - |\vec{q}|)$).

A magnitude relativa do termo de troca depende crucialmente do alcance da interação $U(\vec{r}-\vec{r}')$, ou equivalentemente, do formato de sua transformada de Fourrier



Se a interação for de longo alcance, ou seja $U(q) \to 0$ rapidamente para q grande, o termo de troca vai ter uma contribuição relativa menor $\left(\int_0^{q_F} dq\, U(k-q) \ll U(0) \right)$ enquanto que para interações de curto alcance o termo de troca terá uma importância maior ("blindagem" mais forte).