

Применение диаграммной техники.

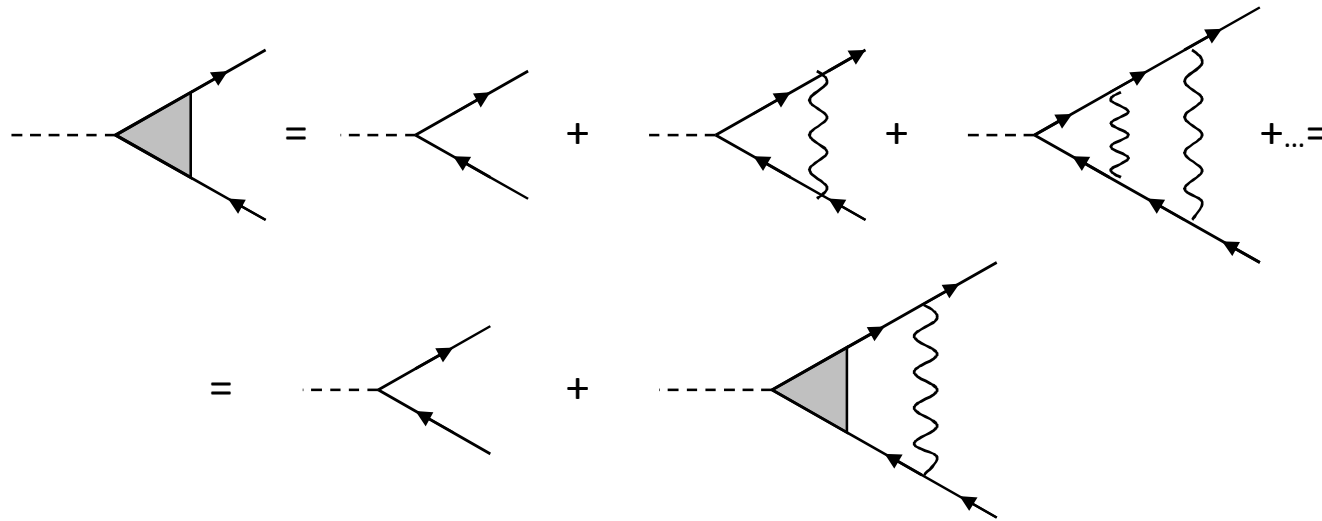
Уравнение Дайсона. Суммирование диаграмм.

Иногда оказывается, что нельзя ограничиться учетом нескольких первых членов ряда (4.50) теории возмущений. Необходимо суммировать **бесконечные последовательности** членов – "главные" диаграммы. Это можно сделать графически:

$$\begin{array}{c} \overline{x \quad x'} + \overline{x \quad x'} + \overline{x \quad x'} + \overline{x \quad x'} + \dots = \overline{\overline{x \quad x'}} \\ \overline{\overline{x \quad x'}} = \overline{x \quad x'} + \overline{\overline{x \quad x'}} \end{array}$$

Здесь тонкая линия соответствует "свободной" функции Грина $G^{(0)}$, толстая линия - функции Грина с учетом кулоновского взаимодействия с окружающими частицами.

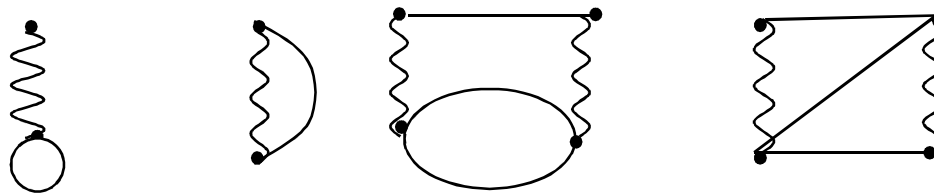
Пример суммирования диаграмм для **вершинной части** амплитуды фотопоглощения:



Любая часть диаграммы, соединенная с остальными частями двумя $G^{(0)}$ -линиями, называется *собственно энергетической частью* Σ . Все диаграммы, представляющие собственно-энергетическую часть, могут быть разбиты на две части: на **неприводимые** и **приводимые** диаграммы.

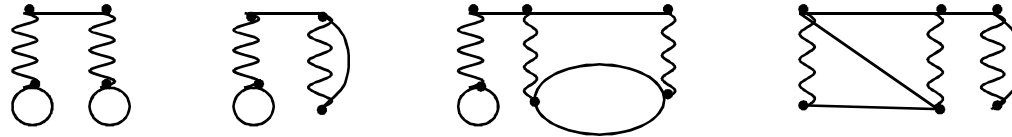
Неприводимая собственно энергетическая часть диаграммы – это диаграмма, которая не может быть разделена на две части, соединенные только одной $G^{(0)}$ - линией.

Пример неприводимых диаграмм :

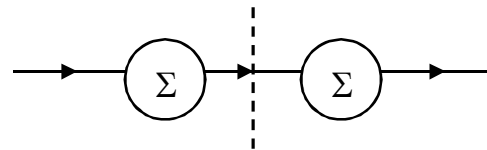


Диаграммы с *приводимой собственно энергетической частью* – диаграммы, которые состоят из неприводимых частей, соединенных, по крайней мере, одной $G^{(0)}$ - линией.

Пример приводимых диаграмм :



Любая диаграмма для G функции начинается с $G^{(0)}$ - линии и заканчивается ею. Затем стоит неприводимая собственно энергетическая часть.



У **точной одночастичной функции Грина G** между начальной (входящей) и конечной (выходящей) линиями расположен бесконечный ряд чередующихся неприводимых частей, соединенных одной $G^{(0)}$ - линией. Уравнение для точной функции Грина может представлено в графическом виде: жирная линия соответствует функции G , тонкая линия соответствует "свободной" функции Грина $G^{(0)}$:

$$\begin{aligned}
 \text{---} \xrightarrow{G} &= \text{---} \xrightarrow{G^{(0)}} + \text{---} \xrightarrow{G^{(0)}} \text{---} \text{---} \xrightarrow{G^{(0)}} + \text{---} \xrightarrow{G^{(0)}} \text{---} \text{---} \text{---} \xrightarrow{G^{(0)}} + \dots = \\
 &= \text{---} \xrightarrow{G^{(0)}} + \text{---} \xrightarrow{G^{(0)}} \text{---} \text{---} \xrightarrow{G}
 \end{aligned}
 \tag{5.1}$$

Это графическое уравнение в операторном виде : $G = G^{(0)} + G^{(0)} \Sigma G$ (5.2)

(уравнение Дайсона)

Здесь $\Sigma = \Sigma^{(1)} + \Sigma^{(2)} + \dots$ - полная неприводимая собственно энергетическая часть, равная сумме всех неприводимых частей.

Аналитические выражения

Можно получить уравнение Дайсона (5.2) аналитически. Соответствующее аналитическое уравнение для функции Грина с учетом взаимодействия:

$$G_{\alpha\beta}(x, x') = G_{\alpha\beta}^{(0)}(x, x') + \int d^4x_1 d^4x_2 G_{\alpha\gamma_1}^{(0)}(x, x_1) \Sigma_{\gamma_1\gamma_2}(x_1, x_2) G_{\gamma_2\beta}^{(0)}(x_2, x') \quad (5.3)$$

Здесь Σ – **полная** собственно-энергетическая часть функции Грина. Нужно переписать (5.3), выделив **неприводимую** часть.

Обозначим сумму всех **неприводимых** диаграмм $\Sigma_{\gamma_1\gamma_2}^H(x_1, x_2)$:

$$\Sigma_{\gamma_1\gamma_2}^H(x_1, x_2) = \begin{array}{c} x_1 \\ \bullet \\ \text{\textcircled{\scriptsize Σ^H}} \\ \bullet \\ x_2 \end{array} \quad (5.4)$$

(точками помечены координаты входа и выхода пропагаторов $G^{(0)}$). **Полную** собственно-энергетическую часть можно записать в виде ряда:

$$\begin{aligned} \Sigma(x_1, x_2) &= \Sigma^H(x_1, x_2) + \int d^4x_3 d^4x_4 \Sigma^H(x_1, x_3) G^{(0)}(x_3, x_4) \Sigma^H(x_4, x_2) + \\ &+ \int d^4x_3 d^4x_4 d^4x_5 d^4x_6 \Sigma^H(x_1, x_3) G^{(0)}(x_3, x_4) \Sigma^H(x_4, x_5) G^{(0)}(x_5, x_6) \Sigma^H(x_6, x_2) + \dots = \\ &= \Sigma^H(x_1, x_2) + \int d^4x_3 d^4x_4 \Sigma^H(x_1, x_3) G^{(0)}(x_3, x_4) \Sigma(x_4, x_2) \end{aligned} \quad (5.5)$$

Графически (5.5) представляется следующим образом:

$$\begin{array}{c} x_1 \\ \bullet \\ \text{\textcircled{\scriptsize Σ}} \\ \bullet \\ x_2 \end{array} = \begin{array}{c} x_1 \\ \bullet \\ \text{\textcircled{\scriptsize Σ^H}} \\ \bullet \\ x_2 \end{array} + \begin{array}{c} x_1 \\ \bullet \\ \text{\textcircled{\scriptsize Σ^H}} \\ \bullet \\ x_3 \end{array} \xrightarrow{x_4} \begin{array}{c} x_4 \\ \bullet \\ \text{\textcircled{\scriptsize Σ}} \\ \bullet \\ x_2 \end{array} \quad (5.6)$$

Из (5.3) и (5.1) следует **аналитическое выражение для уравнения Дайсона** (5.1):

$$G_{\alpha\beta}(x, x') = G_{\alpha\beta}^{(0)}(x, x') + \int d^4x_1 d^4x_2 G_{\alpha\gamma_1}^{(0)}(x, x_1) \Sigma_{\gamma_1\gamma_2}^H(x_1, x_2) G_{\gamma_2\beta}(x_2, x') \quad (5.7)$$

Голдстоуновские диаграммы.

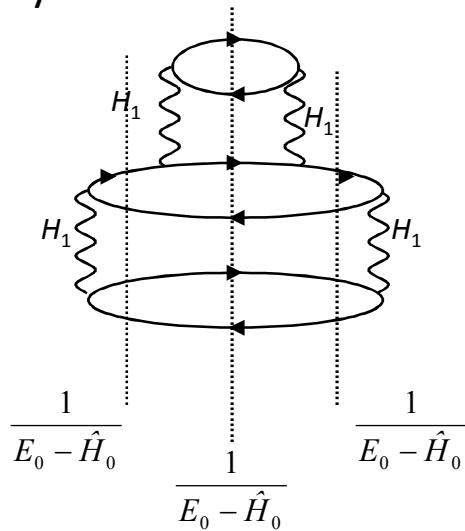
Дж. Голдстоун в 1957 г. предложил альтернативный подход, основанный на суммировании связанных диаграмм во всех порядках теории возмущений для вычисления сдвига энергии основного состояния (*теорема Голдстоуна*):

$$E - E_0 = \left\langle \Phi_0 \left| \hat{H}_1 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{E_0 - \hat{H}_0} \hat{H}_1 \right)^n \right| \Phi_0 \right\rangle_{\text{связ}} \quad (5.8)$$

Здесь операторы \hat{H}_0 и \hat{H}_1 – время-независимые операторы в представлении Шредингера. Этот результат может быть интерпретирован как вставка **полного набора** собственных состояний невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 между взаимодействиями \hat{H}_1 .

- 1) Оператор \hat{H}_1 действует на основное состояние и создает **две частицы и две дырки**. Это возбужденное состояние затем распространяется с пропагатором $(E_0 - \hat{H}_0)^{-1}$.
- 2) При следующем взаимодействии или создается больше частиц и дырок или рекомбинируют уже существующие частицы и дырки.
- 3) Полученное промежуточное состояние снова распространяется с $(E_0 - \hat{H}_0)^{-1}$ и т.д.
- 4) Конечное взаимодействие (действие оператора \hat{H}_1) возвращает систему в основное состояние $|\Phi_0\rangle$.

Типичный процесс, соответствующий поправке четвертого порядка (5.7) представлен на рисунке:



Поправка четвертого порядка к энергии основного состояния (5.7)

Подобные диаграммы называются Голдстоуновскими.

Учитываются **только "связанные"** диаграммы, т.е. диаграммы, которые связаны от начального до конечного состояния.

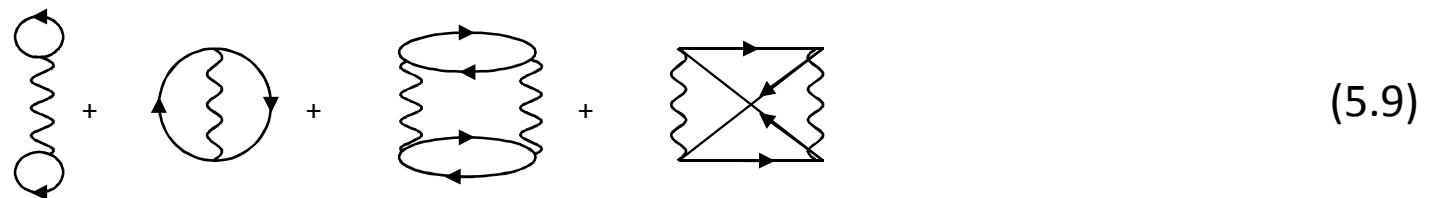
Состояние $|\Phi_0\rangle$, которое не включает частиц и дырок, никогда не может встречаться в качестве промежуточного.

Теорема Голдстоуна (5.8) определяет энергию основного состояния в рамках время-зависящей теории возмущений (во всех порядках теории возмущений).

Можно записать ряд (5.8) в явном виде:

$$E - E_0 = \langle \Phi_0 | \hat{H}_1 | \Phi_0 \rangle + \sum_{n \neq 0} \frac{\langle \Phi_0 | \hat{H}_1 | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | \hat{H}_1 | \Phi_0 \rangle}{E_0 - E_n} + \dots \quad (5.9)$$

Диаграммы, соответствующие **первым двум порядкам** теории возмущений (5.9):



Первые две диаграммы – “прямое” и обменное взаимодействия в первом матричном элементе (5.9). Следующие две диаграммы учитывают процессы с рождением частично-дырочных пар и описывают поправки 2-го порядка (поляризационные).

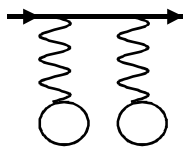
Диаграммная техника Голдстоуна.

Оба подхода (Фейнмановский и Голдстоуновский) эквивалентны в каждом порядке теории возмущений. Набор всех возможных время-упорядоченных связанных Фейнмановских диаграмм дает полный набор связанных Голдстоуновских диаграмм. При этом в одну диаграмму Фейнмана соединяются много членов теории возмущений.

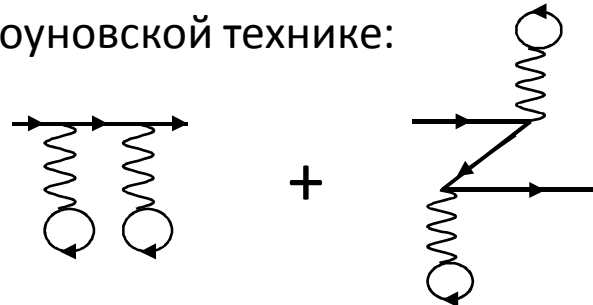
В технике Фейнмана диаграммы "неупорядочены по времени". В каждой вершине подразумевается интегрирование по всей временной оси. При этом пропагатор свободных частиц существенно зависит от того, является ли временной аргумент положительным (пропагаторы "частиц") или отрицательными (пропагаторы "дырок"). При интегрировании по времени это различие необходимо учитывать.

Из-за упорядоченности по времени **линии частиц и дырок в диаграммах Голдстоуна разделены**, и весь процесс может интерпретироваться как последовательность рождения и уничтожения **частично-дырочных пар**. Такой подход более нагляден, но приводит к **увеличению числа диаграмм**.

Фейнмановская диаграмма для функции Грина второго порядка:

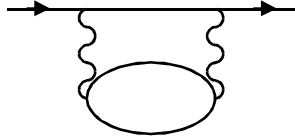


Соответствующие 2 диаграммы в Голдстоуновской технике:

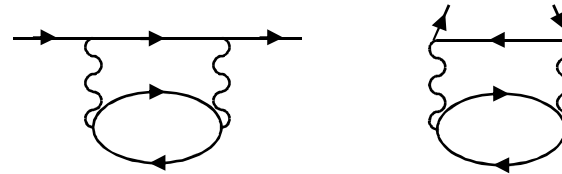


Еще пример:

Фейнмановская диаграмма:



Соответствующие диаграммы Голдстоуна:



Таким образом, во втором порядке теории возмущений каждой Фейнмановской диаграмме соответствуют две диаграммы в технике Голдстоуна.

При переходе от диаграммной записи к аналитическому выражению отличие заключается в разделении **частичных пропагаторов** (линии, идущей слева направо) и **дырочных пропагаторов** (линии, идущие справа налево).

В члене n -го порядка Фейнмановской техники появляется $n!$ дополнительных членов в технике Голдстоуна. Это число возможных способов временного упорядочения n вершин в диаграмме.

Приближение Хартри-Фока с точки зрения диаграммной техники

Идея самосогласованного приближения Хартри-Фока состоит в использовании **одночастичного подхода** для описания системы взаимодействующих частиц. В аналитическом уравнении для функции Грина (5.3) в промежуточных состояниях подразумевается суммирование по спинам :

$$G(x, x') = G^{(0)}(x, x') + \int d^4x_1 d^4x_2 G^{(0)}(x, x_1) \Sigma^n(x_1, x_2) G(x_2, x') \quad (5.10)$$

При этом функция Грина невзаимодействующих частиц, точная функция Грина и неприводимая собственно-энергетическая часть диагональны по спиновым переменным.

Соответствующее (5.10) графическое уравнение:

При определении неприводимой собственно-энергетической части функции Грина ограничимся диаграммами первого порядка :

Поправка (5.11) **несамосогласованная**, поскольку в промежуточных линиях содержит невозмущенные функции Грина невзаимодействующих частиц $G^{(0)}(x, x')$.

Для **самосогласованного решения** необходимо вставлять "толстую" функцию Грина (взаимодействующих частиц) во все промежуточные состояния (5.11):

Примеры применения диаграммной техники.

Взаимодействие системы с внешним электромагнитным полем.

В дипольном приближении, используемом при описании процессов фотоионизации (дипольное приближение справедливо, если длина волны фотона много больше радиуса ионизируемой оболочки), одночастичный оператор \hat{d} может быть задан в форме "скорости" (∇) или длины (r),

$$\hat{d}^\nabla = \frac{i(\vec{e}\vec{\nabla})}{\omega}, \hat{d}^r = (\vec{e}\vec{r}),$$

где $\vec{\nabla} = \partial/\partial\vec{r}$ и \vec{e} – вектор поляризации фотона с частотой ω .

Пусть $D(\omega)$ - **амплитуда** удаления фотоном одного электрона из системы. Появляется электрон на изначально свободном уровне в сплошном спектре и возникает дырка в состоянии v_1 , т.е. рассматривается переход в состояние v_2 с энергией ε_2 выше порога ионизации.

Полное сечение фотоионизации $\sigma(\omega)$ фотоном энергии ω выражается через матричный элемент взаимодействия фотона и многочастичной системы $\langle v_2 | \hat{D}(\omega) | v_1 \rangle$:

$$\sigma(\omega) = \frac{4\pi^2\omega}{c} \sum_{v_1 \leq F} \int \left| \langle v_2 | \hat{D}(\omega) | v_1 \rangle \right|^2 \delta(\omega - \varepsilon_2 + \varepsilon_1) dv \quad (5.15)$$

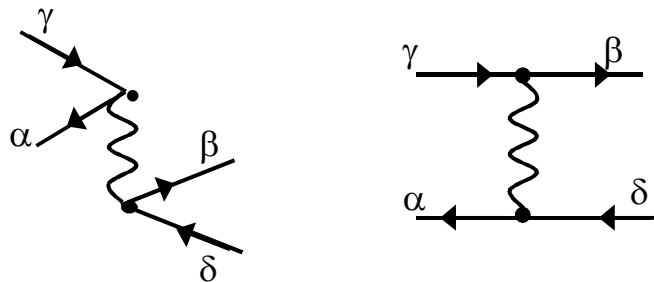
где F – уровень Ферми, c – скорость света, ε_1 – Хартри-Фоковская энергия связанного начального состояния v_1 .

Приближение Хартри-Фока, включающее в себя диаграммы (5.13), соответствующие первому порядку межчастичного взаимодействия, учитывает лишь некоторую часть корреляций, что при описании процессов в многочастичных системах оказывается недостаточным. В следующем порядке теории возмущений следует учесть состояния, содержащие возбуждения вида "одна частица–одна дырка" из Хартри-Фоковского вакуумного (основного) состояния плюс корреляции в основном состоянии описании типа "две частицы–две дырки". Это приближение называется **ПРИБЛИЖЕНИЕ СЛУЧАЙНЫХ ФАЗ С ОБМЕНОМ** (ПСФО).

В матричной форме **уравнение для дипольной амплитуды** в приближении ПСФО имеет вид

$$\langle v_2 | \hat{D}(\omega) | v_1 \rangle = \langle v_2 | \hat{d} | v_1 \rangle + \left(\sum_{\substack{v_3 > F \\ v_4 \leq F}} - \sum_{\substack{v_4 > F \\ v_3 \leq F}} \right) \frac{\langle v_3 | \hat{D}(\omega) | v_4 \rangle \langle v_4 v_2 || v_3 v_1 \rangle}{\omega - E_3 + E_4 + i\delta} \quad (5.16)$$

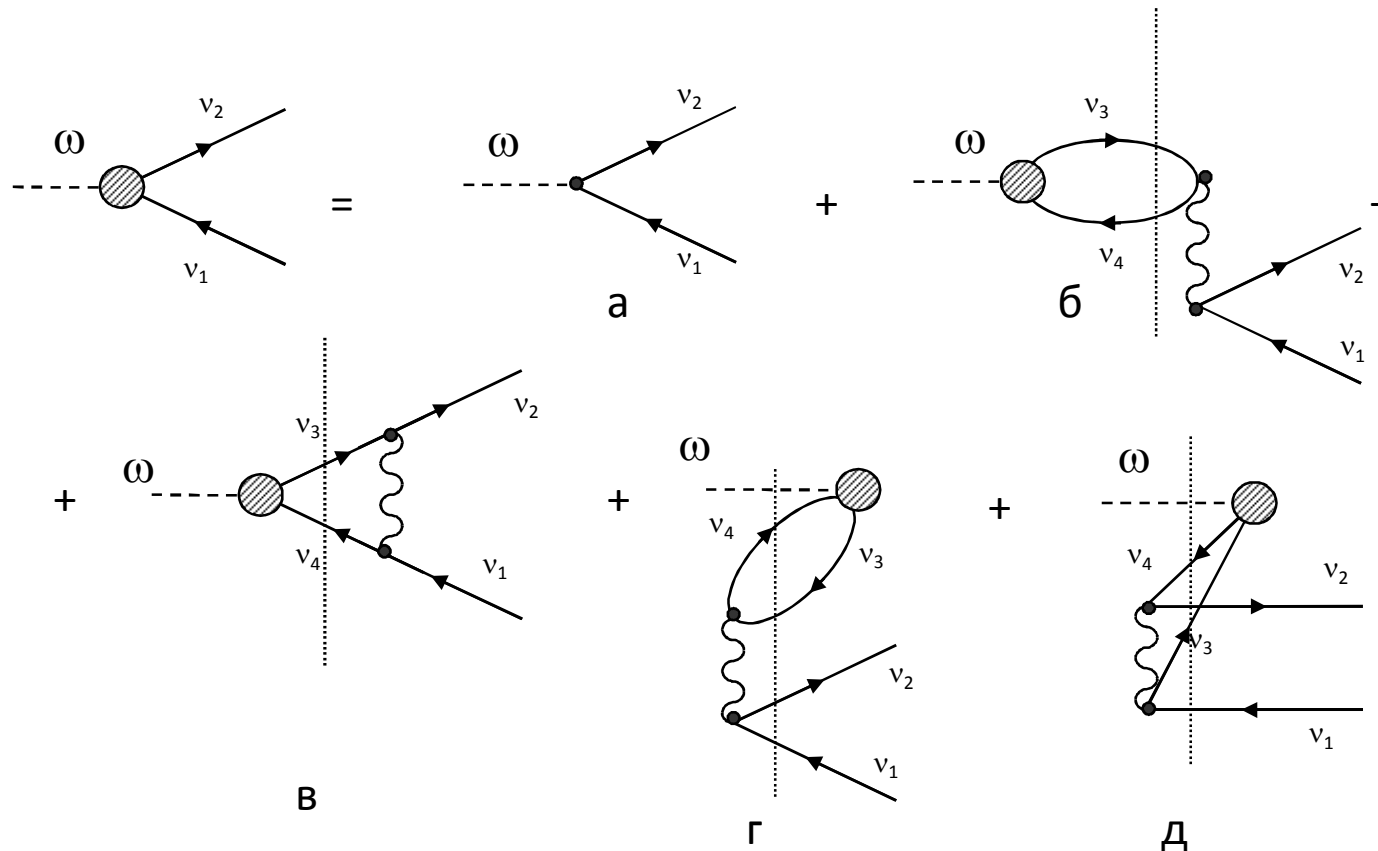
где матричные элементы $\langle \alpha\beta || \gamma\delta \rangle = \langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle - \langle \alpha\gamma | V | \beta\delta \rangle$ содержат "прямую" и обменную компоненты,



$$\langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle = \delta_{\sigma_\alpha \sigma_\gamma} \delta_{\sigma_\beta \sigma_\delta} \iint d\vec{r} d\vec{r}' \frac{\phi_\alpha^*(\vec{r}) \phi_\gamma(\vec{r}) \phi_\delta^*(\vec{r}') \phi_\beta(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|},$$

Индексы $\sigma_\alpha, \sigma_\beta, \sigma_\gamma, \sigma_\delta$ обозначают проекции спина одночастичных состояний.

Графически процесс фотопоглощения, описываемый уравнением (5.16) может быть изображен в виде следующей последовательности диаграмм:



Пунктирной линией обозначен налетающий фотон, волнистой линией – кулоновское взаимодействие, сплошной линией со стрелкой направо – электрон, а со стрелкой налево – дырка. Диаграммы (6.79) представляют процесс поглощения фотона, разворачивающийся **во времени**, причем в начальном состоянии присутствует фотон и невозбужденная система, а в конечном – возбужденный электрон и дырка. Диаграмма (а) описывает поглощение фотона в одночастичном приближении.

Упругое рассеяние медленных электронов

Сечение **упругого рассеяния** электронов, как и любых других частиц с энергией E и импульсом $p = \sqrt{2mE}$ выражается через фазы рассеяния парциальных волн $\delta_\ell(E)$:

$$\sigma^{el}(E) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_\ell^{el}(E) = \frac{\pi}{p^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \left| 1 - e^{2i\delta_\ell(p)} \right|^2 \quad (5.17)$$

Фазы парциальных волн определяются асимптотикой волновой функции рассеиваемой частицы при $r \rightarrow \infty$:

$$\phi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{i}{2pr} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta) \left[(-1)^\ell e^{-ipr} - e^{+ipr+2i\delta_\ell} \right]$$

Для примера рассмотрим рассеяние электрона на нейтральном атоме с N электронами. Расчет радиальных волновых функций с данным орбитальным моментом l для дополнительного $N+1$ -го электрона проводится нами сначала в **приближении Хартри-Фока**. Налетающий электрон рассеивается на ядре и N атомных электронах. Его волновая функция уже учитывает часть межэлектронного взаимодействия, определяемого диаграммами (5.13). Радиальная часть волновой функции имеет асимптотику

$$P_{E\ell}^{N+1}(r) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi p}} \sin\left(pr - \frac{\pi\ell}{2} + \delta_\ell^{HF}(E) \right) \quad (5.18)$$

Роль **многоэлектронных корреляций** сводится к тому, что появляется дополнительное по сравнению с Хартри-Фоковским, **поляризацонное** воздействие со стороны атома мишени на налетающий электрон, приводящее к дополнительным фазовым сдвигам.

Поляризационное взаимодействие, описываемое собственно-энергетической частью функции Грина $\Sigma = \Sigma(\vec{r}, \vec{r}', E)$ не сводится к потенциалу, является **нелокальным**, т.е. зависит от двух координат \vec{r} и \vec{r}' , а также от энергии налетающего электрона.

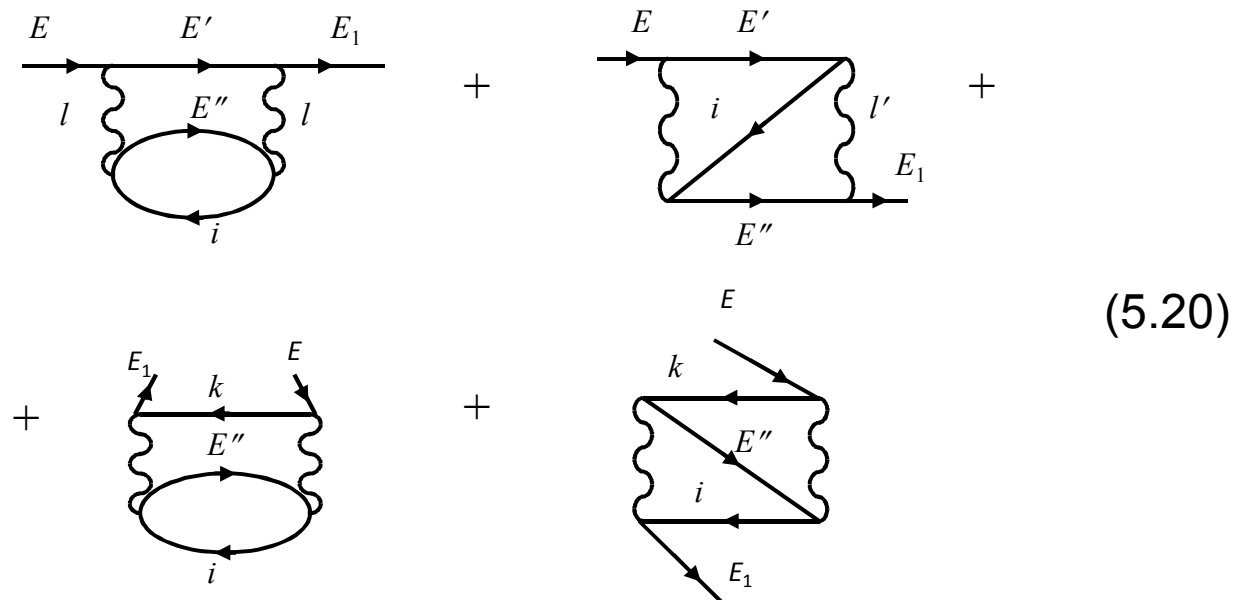
Определение **корреляционных поправок к фазе рассеяния** с учетом многоэлектронных корреляций производится путем вычисления матричного элемента **приводимой собственно-энергетической части функции Грина** :

$$e^{i\Delta\delta_l(E)} \sin \Delta\delta_l(E) = -\pi \langle E\ell | \hat{\Sigma}(E) | E\ell \rangle$$

Полное значение **фазы упругого рассеяния** есть сумма ХФ и корреляционного вкладов:

$$\delta_l(E) = \delta_l^{HF}(E) + \Delta\delta_l(E) \quad (5.19)$$

Во **втором порядке** теории возмущений **поляризационные поправки** к функции Грина представлены диаграммами:

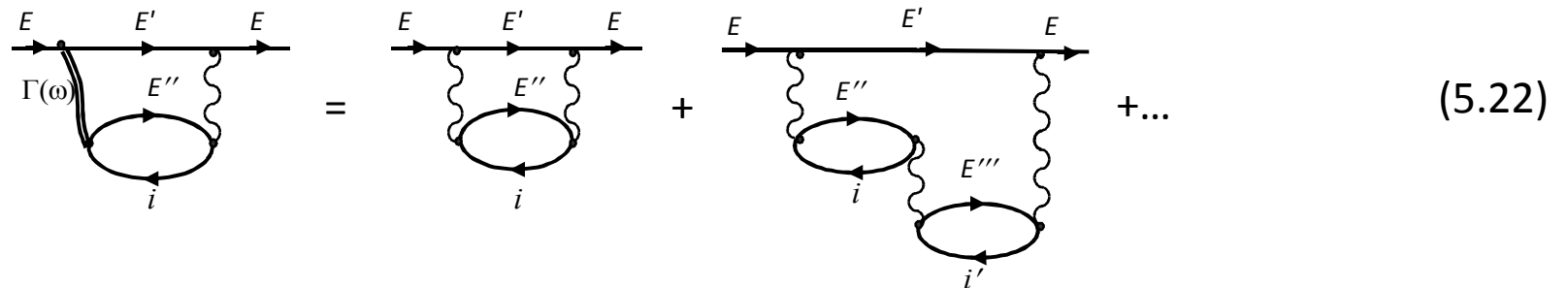


Вычисление матричных элементов неприводимой собственно-энергетической части функции Грина $\langle E\ell | \hat{\Sigma}(E) | E'\ell \rangle$ (5.20) проводится по формуле :

$$\langle E\ell | \hat{\Sigma}_E | E_1\ell \rangle = \sum_{E' > F} \sum_{\substack{E'' > F \\ i \leq F}} \frac{\langle E', E'' | \hat{U} | E, i \rangle \langle E_1, i | \hat{V} | E', E'' \rangle}{E - E' - E'' + E_i + i\delta} + \sum_{k \leq F} \sum_{\substack{i \leq F \\ E'' > F}} \frac{\langle k, i | \hat{U} | E, E'' \rangle \langle E_1, E'' | \hat{V} | k, i \rangle}{E - E_k + E'' - E_i - i\delta} \quad (5.21)$$

Первое слагаемое учитывает первые две диаграммы (5.20), а второе – две остальные. Матричные элементы $\langle \alpha\beta | \hat{U} | \gamma\delta \rangle$ содержат матричные элементы прямого и обменного кулоновского взаимодействия: $\langle \alpha\beta | \hat{U} | \gamma\delta \rangle \equiv \langle \alpha\beta || \gamma\delta \rangle = \langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle - \langle \alpha\beta | V | \delta\gamma \rangle$.

В рамках **ПСФО**, учитывающим суммирование **бесконечной последовательности** диаграмм (5.20), поляризационное взаимодействие может быть графически изображено:



$$\Gamma(\omega) = \text{[Diagram 1]} + \text{[Diagram 2]} + \dots \quad (5.22)$$

Таким образом, учет диаграмм высших порядков, входящих в (5.22), происходит при замене матричного элемента $\langle | \hat{U} | \rangle$ на **эффективное взаимодействие** $\langle | \hat{\Gamma}(\omega) | \rangle$:

$$\langle v_2 v_3 | \hat{\Gamma}(\omega) | v_1 v_4 \rangle = \langle v_2 v_3 || v_1 v_4 \rangle + \left(\sum_{\substack{v_5 > F \\ v_6 \leq F}} - \sum_{\substack{v_6 > F \\ v_5 \leq F}} \right) \frac{\langle v_2 v_5 | \hat{\Gamma}(\omega) | v_1 v_6 \rangle \langle v_6 v_3 || v_5 v_4 \rangle}{\omega - E_5 + E_6 + i\delta} \quad (5.23)$$

Учет поляризационного взаимодействия, представленного в виде диаграммы (5.22), в аналитическом виде эквивалентен решению интегрального уравнения для нахождения **приводимой собственно-энергетической части функции Грина** :

$$\langle E\ell | \hat{\Sigma}(E_2) | E_1\ell \rangle = \langle E\ell | \hat{\Sigma}(E_2) | E_1\ell \rangle + \sum_{E'} \langle E\ell | \hat{\Sigma}(E_1, 2) | E'\ell \rangle \frac{1}{E_2 - E' + i\delta} \langle E'\ell | \hat{\Sigma}(E_2) | E_1\ell \rangle \quad (5.24)$$

Если поляризационное взаимодействие невелико, его достаточно учесть по теории возмущений в низшем порядке в уравнении (5.24) (т.е. ограничиться первым слагаемым), а корреляционные правки ПСФО поправки к ХФ фазе в этом определяются как

$$\delta_\ell(E) \approx -\pi \langle E\ell | \hat{\Sigma}(E) | E\ell \rangle \quad (5.25)$$

Рекомендуемая литература:

1. В.К.Иванов, А.Н.Ипатов, Р.Г.Полозков. *Квантовая теория многих тел*. Учебное пособие. Издательство Политехнического Университета, СПб, 2013.
2. А.А.Абрикосов, А.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*. Физмат, М. 1962.
3. С.Реймс. *Теория многоэлектронных систем*, "Мир", М. 1976
4. Р.Маттук. *Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел*. "Мир", М. 1969.
5. Д.Таулес. *Квантовая механика систем многих частиц*. "Мир", М. 1975.
6. I.Lindgren, J.Morrison. *Atomic many-body theory*. Springer-Verlag, Berlin, New York, 1982.
7. Н.Марч, У.Янг, С.Сампантхар. *Проблема многих тел в квантовой механике*. "Мир", М. 1969.
8. A.F.Fetter, J.D.Walecka. *Quantum theory of many-particle systems*. McGraw Hill Book Company, San Francisco, 1971.
9. Д.Пайнс. *Проблема многих тел*. "Иностранная литература", М. 1963.
10. *Теория неоднородного электронного газа*. Под ред. С.Лундквиста и Н.Марча. "Мир", М. 1987.
11. Д.Хартри, *Расчеты атомных структур*, ИЛ, М. 1960.
12. М.Я.Амусья, *Атомный фотоэффект*, "Наука", М. 1987.
13. М.Я.Амусья, В.К.Иванов, Н.А.Черепков, Л.В.Чернышева, *Процессы в многоэлектронных атомах*, "Наука", М. 2006.