

# Green Function

Green 関数とは「系の応答」や「遷移の振る舞い」を記述するのに強力なツールである.

## 1 実空間の Green 関数 $G(x, x')$

演算子  $\hat{L}(x)$  で記述される系

$$\hat{L}(x)\Phi_0(x) = 0 \quad (1.1)$$

に対し, 外部ソース  $f(x)$  が加わったときの応答

$$\hat{L}(x)(\Phi_0(x) + \phi(x)) = f(x) \quad (1.2)$$

を考える. これを解く際に, 以下を満たす Green 関数  $G(x, x')$  を考えることが有用である.

$$\hat{L}(x)G(x, x') = \delta(x - x') \quad (1.3)$$

このとき

$$\phi(x) = \int dx' G(x, x') f(x') \quad (1.4)$$

について,

$$\begin{aligned} \hat{L}(x)\phi(x) &= \int dx' \hat{L}(x)G(x, x')f(x') = \int dx' \delta(x - x')f(x') \\ &= f(x) \end{aligned} \quad (1.5)$$

より (1.2) を満たす.

(例) Hamiltonian  $\hat{H}_0(x)$  に摂動  $\hat{V}(x)$  が加わったとき

$$(E - \hat{H}_0(x))\Psi_0(x) = 0 \quad (1.6)$$

に摂動  $\hat{V}(x)$  が加わり

$$(E - \hat{H}_0(x))(\Psi_0(x) + \psi(x)) = \hat{V}(x)(\Psi_0(x) + \psi(x)) \quad (1.7)$$

となった場合, Green 関数は以下を満たす

$$(E - \hat{H}_0(x))G(x, x') = \delta(x - x') \quad (1.8)$$

例えば  $\hat{H}_0(x) = -\nabla^2, E = k^2$  とすると,

$$G(x, x') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|x-x'|}}{|x - x'|} \quad (1.9)$$

$G(x, x')$  を用いて以下のような自己無撞着方程式が得られる

$$\psi(x) = \int dx' G(x, x') \hat{V}(x') (\Psi_0(x') + \psi(x')) \quad (1.10)$$

$$= \int dx' G(x, x') \hat{V}(x') \Psi_0(x) + \int dx' dx'' G(x, x') \hat{V}(x') G(x', x'') \hat{V}(x'') (\Psi_0(x'') + \psi(x'')) \quad (1.11)$$

$$= \dots \quad (1.12)$$

これを  $\hat{V}(x)$  について逐次近似することができる.

## 2 Green 関数演算子 $G(E)$

エネルギー依存のグリーン関数  $\hat{G}(E)$  は Hamiltonian  $\hat{H}$  について

$$(E - \hat{H})\hat{G}(E) = \hat{1} \quad (2.1)$$

を満たすものであり,

$$\hat{G}(E) = \frac{1}{E - \hat{H} + i\delta} = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{E - \varepsilon_n + i\delta} \quad (2.2)$$

と表される. ここで  $\delta$  は正の微小量であり, 分母の発散を防ぐために取り入れたものである.

主値積分  $\mathcal{P}$  を用いて

$$\frac{1}{x + i\delta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x) \quad (2.3)$$

が成り立つので

$$\hat{G}(E) = \sum_n |n\rangle \langle n| \left( \mathcal{P} \frac{1}{E - \varepsilon_n} - i\pi\delta(E - \varepsilon_n) \right) \quad (2.4)$$

この虚部はスペクトル密度  $\hat{A}(E)$  と呼ばれる

$$\hat{A}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \hat{G}(E) = \sum_n |n\rangle \langle n| \delta(E - \varepsilon_n) \quad (2.5)$$

$\hat{A}(E)$  のトレースは状態密度  $D(E)$  に等しい

$$D(E) = \text{Tr}(\hat{A}(E)) = \sum_n \delta(E - \varepsilon_n) \quad (2.6)$$

なぜなら状態数  $N(E)$  は

$$N(E) = \sum_n \Theta(E - \varepsilon_n) \quad (2.7)$$

で与えられ ( $\Theta(\varepsilon)$  はステップ関数),  $D(E)$  はそのエネルギー微分

$$D(E) = \frac{d}{dE} N(E) = \sum_n \delta(E - \varepsilon_n) \quad (2.8)$$

となるからである.

$\hat{G}(E)$  もやはり外部ソースに対する応答を記述するのに便利であり,

$$(E - \hat{E}) |\Psi\rangle = 0 \quad (2.9)$$

に対し外部ソース  $|f\rangle$  が加わったときの応答

$$(E - \hat{H})(|\Psi\rangle + |\psi\rangle) = |f\rangle \quad (2.10)$$

について

$$|\psi\rangle = \hat{G}(E) |f\rangle \quad (2.11)$$

と求められる.

(例) Hamiltonian  $\hat{H}_0$  に摂動  $\hat{V}$  が加わったとき

$$(E - \hat{H}) |\Psi_0\rangle = 0 \quad (2.12)$$

に摂動  $\hat{V}$  が加わり

$$(E - \hat{H}_0)(|\Psi_0\rangle + |\psi\rangle) = \hat{V}(|\Psi_0\rangle + |\psi\rangle) \quad (2.13)$$

となった場合

$$|\psi\rangle = \hat{G}(E) \hat{V}(|\Psi_0\rangle + |\psi\rangle) \quad (2.14)$$

$$= \hat{G}(E) \hat{V} |\Psi_0\rangle + \hat{G}(E) \hat{V} \hat{G}(E) \hat{V}(|\Psi_0\rangle + |\psi\rangle) \quad (2.15)$$

$$= \dots \quad (2.16)$$

これを  $\hat{V}$  について逐次展開すると, まさに摂動論の式となる.