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

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

に対し, 外部ソース $f(x)$ が加わったときの応答

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

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.

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

このとき

$$\phi(x) = \int dx' G(x, x') f(x') \tag{1.4}$$

について,

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

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

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

に摂動 $\hat{V}(x)$ が加わり

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

となった場合, Green 関数は以下を満たす

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

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

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

$G(x, x')$ を用いて以下のような自己無撞着方程式が得られる

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \int dx' G(x, x')\hat{V}(x')(\Psi_0(x') + \psi(x')) && (1.10)\\
&= \int dx' G(x, x')\hat{V}(x')\Psi_0(x) + \int dx' dx'' G(x, x')\hat{V}(x')G(x', x'')\hat{V}(x'')(\Psi_0(x'') + \psi(x'')) && (1.11)\\
&= \cdots && (1.12)
\end{aligned}$$

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

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

を満たすものであり,

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

と表される. ここで δ 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

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

が成り立つので

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

この虚部はスペクトル密度 $\hat{A}(E)$ と呼ばれる

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

$\hat{A}(E)$ のトレースは状態密度 $D(E)$ に等しい

$$D(E)=\mathrm{Tr}\Big(\hat{A}(E)\Big)=\sum_n\delta(E-\varepsilon_n) \tag{2.6}$$

なぜなら状態数 $N(E)$ は

$$N(E)=\sum_n\Theta(E-\varepsilon_n) \tag{2.7}$$

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

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

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,

$$(E - \hat{E})\left|\Psi\right\rangle = 0 \tag{2.9}$$

に対し外部ソース $\left|f\right\rangle$ が加わったときの応答

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

について

$$\left|\psi\right\rangle = \hat{G}(E)\left|f\right\rangle \tag{2.11}$$

と求められる.

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

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

に摂動 $\hat{V}$ が加わり

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

となった場合

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

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

$$= \cdots \tag{2.16}$$

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.