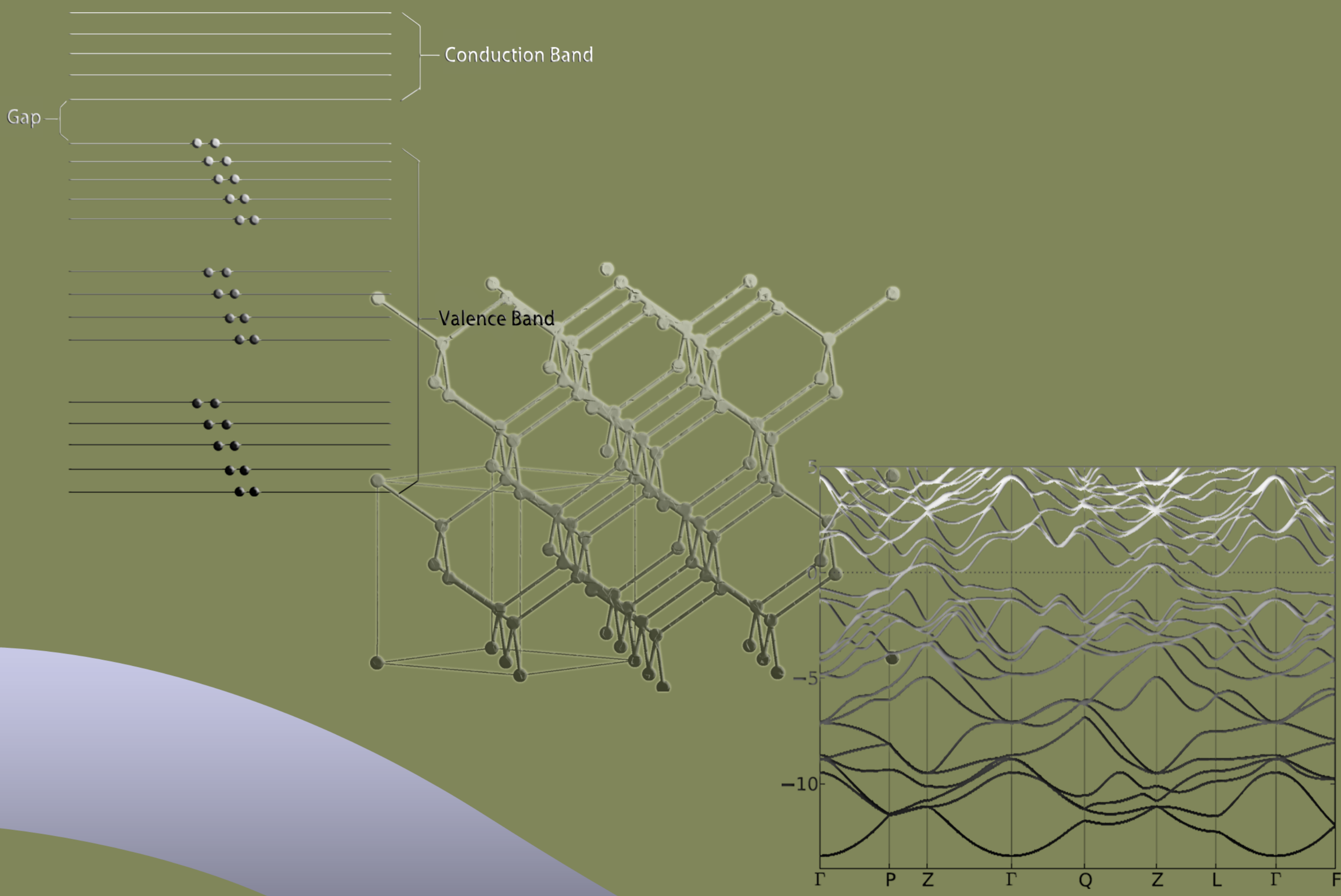
Queen Mary, University of London

School of Physics and Astronomy

格林函数法简要总结



一、 什么是格林函数

给定一个微分算符L以及与之对应的微分方程：

$$Lu(x) = f(x) \tag{1-1}$$

这里的微分算符L指的是包含任意微分运算（任意阶微分，也可以是偏微分）的算符，换句话说，某一待求解的函数$u(x)$经过某种给定的微分运算，得到了一个已知的函数$f(x)$，而求解方程-（1-1）的一种基本思想是，既然函数$u(x)$经过微分运算得到$f(x)$，则必然可以由函数$f(x)$出发，经过某一与微分算符L相对应的积分算符L^{-1}（这只是一种符号上的'逆'关系）的作用，得到函数$u(x)$，具体的运算式为：

$$\begin{aligned} u(x) &= L^{-1}f(x) \\ &= \int G(x,\xi)f(\xi)d\xi \end{aligned} \tag{1-2}$$

其中函数$G(x,\xi)$（当然，对于每一个特定的问题，G函数具有不同的形式，且求解过程并不唯一，同时也很复杂）与$f(x)$共同作用，通过积分运算，得到待求解的函数$u(x)$，由于函数$f(x)$是已知的，所以问题求解的核心（kernel）就是函数G，数学上称之为格林函数（Green's Function，由George Green在1830年代首先提出）。

格林函数在求解微分方程的领域有着重要的应用，在物理上，格林函数也是求解泊松方程、热传导问题以及在量子力学领域求解薛定谔方程等二阶偏微分方程问题的一种非常重要的手段，在进一步讨论关于格林函数相关的定理、公式以及具体应用之前，这里给出一个格林函数在求解泊松方程（关于泊松方程的由来，参见附录一）问题上应用的直观例子，通过这个例子，可以清楚的看到格林函数的求解思想。

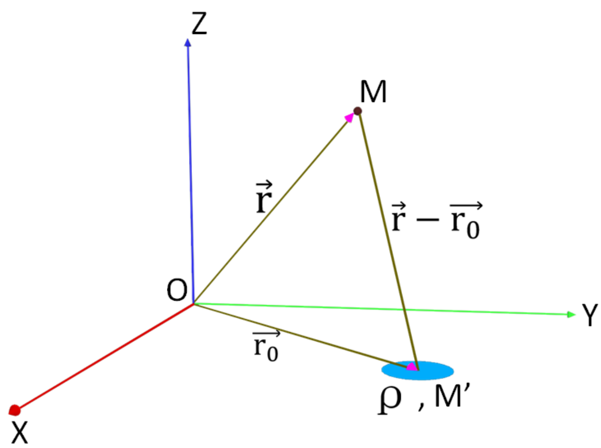


图 一 空间中，静电荷产生的电势问题图示

图一给出的是在空间中给定电荷分布，求解对应势函数的图示，假定电荷分布于图中的圆盘处，与之相对应的整个求解空间的电荷密度分布函数为ρ（这里的ρ所代表的不只包括存在电荷的

局域空间，而是指向整个求解空间），则场点M 处的电势函数u 满足相应的泊松方程：

$$\nabla^2 u = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \tag{1-3}$$

求解方程-（1-3）即可以得到空间中的势函数，当然，实际问题的求解还必须给定相应的边界（求解区域及相应边界未在图一中画出）以及相应的边界条件，那么在所有必要条件都给定的情况下，如何求解方程- （1-3）是这里的关键，下面就给出利用点电荷分割法从另外一个角度得到上述方程解的过程，从最后的结果中可以清楚的看到格林函数方法求解微分方程的本质。首先，方程-（1-3）的给出是为了求解由电荷分布ρ引起的空间电势分布，因此换个角度考虑，如果将电荷分布ρ看成是有无数点电荷组成的，则每一个点电荷产生的电势是容易得到的，之后再通过对点电荷分布求积分就可以得到空间的电势分布函数，如图一 所示，位于空间$\vec{r}_0$处的单位正电荷在场点$\vec{r}$处产生的电势为：

$$G(\vec{r}, \vec{r}_0) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} \tag{1-4}$$

于是根据叠加原理，由电荷分布ρ在场点$\vec{r}$引起的电势为：

$$u(\vec{r}) = \int\limits_V \frac{\rho(\vec{r}_0)}{4\pi\epsilon_0|\vec{r} - \vec{r}_0|}dV \tag{1-5}$$

$$= \int\limits_V G(\vec{r}, \vec{r}_0)\rho(\vec{r}_0)dV \tag{1-6}$$

式-（1-5）与（1-6）对比可知，从点电荷电势叠加原理出发（未经过微分方程求解过程）得到的式-（1-5）与泊松方程的概念形式解——（1-6）应该是等价的，也就是说我们找到了与泊松方程对应的格林函数——点电荷势函数。

需要指出的是，式-（1-4）给出的点电荷势函数形式，针对的只是无界空间形成的稳定场的情形，也只有在这种情况下，空间电荷分布产生的势函数才能根据叠加原理通过对点电荷势函数的积分求得，如果给定了边界条件，那么显然不能再通过简单的点电荷势函数的叠加给出总的势函数，此时求解相应的格林函数通常就变得比较复杂，所以这里给出的只是对利用格林函数法求解泊松方程的基本思想，目的是对抽象的式- （1-1）与（1-2）给出一个具体的例子，简单理解，格林函数法，就是换一条路去罗马。

二、 几个例子

对于某一个具体的问题，格林函数的求法各异，尤其是偏微分方程，求解格林函数的过程可能非常复杂，这里只给出几个常见的例子，从中可以进一步了解格林函数的基本思想，包括最简单的常微分方程的格林函数问题，以及简单的含时偏微分方程的格林函数，最后过渡到比较常用的泊松方程的格林函数问题，最后，给出一个比较复杂的实例，同时也是在量子力学领域非常重要的求解薛定谔方程的格林函数方法，但是首先需要说明的是，除了最后给出的薛定谔方程的求解问题，其他几个问题都是在已知方程解的形式的前提下最后给出的相应的格林函数的形式，目的只是为了得到相应问题的格林函数形式，实际上并不是按照前面给出的思路先求得相应问题的格林函数形式，再通过积分方法求得原函数（在实际的应用中确实应该如此）。

2.1 常微分方程的格林函数

首先给定一种常见的常微分方程形式，对应的是两端固定，长度为$'l'$的弦，在力$f(x)[0 \leq x \leq l]$ 的作用下产生的振动模式的求解问题：

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} + k^2u(x) = -f(x); \quad 0 \leq x \leq l \tag{2-1}$$

$$u(0) = u(l) = 0; \quad \Rightarrow \quad Boundary\ condition \tag{2-2}$$

首先，根据齐次（homogeneous）常微分方程解的形式，假设方程-（2-1）的解具有如下的形式：

$$u(x) = A(x)coskx + B(x)sinkx \tag{2-3}$$

然后可以得到：

$$\frac{du(x)}{dx} = A^{'}(x)coskx - kA(x)sinkx + B^{'}sinkx + kB(x)coskx \tag{2-4}$$

为了进一步求解，这里不失一般性的假定：

$$A^{'}(x)coskx + B^{'}sinkx = 0 \tag{2-5}$$

于是有：

$$\frac{du(x)}{dx} = -kA(x)sinkx + kB(x)coskx \tag{2-6}$$

所以：

$$\frac{d^2u(x)}{dx} = -kA^{'}(x)sinkx - k^2A(x)coskx + kB^{'}(x)coskx - k^2B(x)sinkx \tag{2-7}$$

将式-（2-7）带入式-（2-1），可以得到：

$$-kA^{'}(x)sinkx + kB^{'}(x)coskx = -f(x) \tag{2-8}$$

将之前的假设式-（2-5）与式-（2-8）联立可得：

$$\begin{aligned} &A^{'}(x)coskx + B^{'}(x)sinkx = 0 \\ &-kA^{'}(x)sinkx + kB^{'}(x)coskx = -f(x) \end{aligned} \tag{2-9}$$

解方程组-（2-9）可以得到：

$$A^{'}(x) = \frac{f(x)sinkx}{k} \tag{2-10}$$

$$B^{'}(x) = -\frac{f(x)coskx}{k} \tag{2-11}$$

因此有：

$$u(x) = \frac{coskx}{k}\int_{c_1}^{x} f(y)sinkydy - \frac{sinkx}{k}\int_{c_2}^{x} f(y)coskydy \tag{2-12}$$

这里的c_1, c_2是待定的常，需要由相应的边界条件确定，首先有$u(0)=0$，因此：

$$u(0)=\frac{1}{k}\int_{c_1}^{0}f(y)sinkydy=0 \tag{2-13}$$

由式-（2-13）可知，必须有：$c_1=0$，所以可将方程-（2-1）的解进一步写成：

$$u(x)=\frac{coskx}{k}\int_{0}^{x}f(y)sinkydy-\frac{sinkx}{k}\int_{c_2}^{x}f(y)coskydy \tag{2-14}$$

进一步，根据第二个边界条件：$u(l)=0$，可得：

$$\begin{aligned}u(l)&=\frac{coskl}{k}\int_{0}^{l}f(y)sinkydy-\frac{sinkl}{k}\int_{c_2}^{x}f(y)coskydy\\&=0\end{aligned} \tag{2-15}$$

整理得到：

$$\int_{c_2}^{l}f(y)coskydy=\frac{coskl}{sinkl}\int_{0}^{l}f(y)sinkydy \tag{2-16}$$

将左边的积分进行分段处理可得：

$$\begin{aligned}&\int_{c_2}^{0}f(y)coskydy+\int_{0}^{l}f(y)coskydy\\&=\frac{coskl}{sinkl}\int_{0}^{l}f(y)sinkydy\end{aligned} \tag{2-17}$$

进一步整理：

$$\begin{aligned}\int_{c_2}^{0}f(y)coskydy&=\frac{1}{sinkl}\int_{0}^{l}f(y)[sinkycoskl-coskysinkl]dy\\&=\frac{1}{sinkl}\int_{0}^{l}f(y)sin[k(y-l)]\end{aligned} \tag{2-18}$$

回到方程-（2-1）的解式-（2-14）：

$$\begin{aligned}u(x)&=\frac{coskx}{k}\int_{0}^{x}f(y)sinkydy-\frac{sinkx}{k}\int_{c_2}^{x}f(y)coskydy\\&=\frac{coskx}{k}\int_{0}^{x}f(y)sinkydy-\frac{sinkx}{k}\int_{c_2}^{0}f(y)coskydy\\&\quad-\frac{sinkx}{k}\int_{0}^{x}f(y)coskydy\end{aligned} \tag{2-19}$$

利用前面得到式-（2-18），带入式-（2-19）可得：

$$\begin{aligned}u(x)&=\frac{coskx}{k}\int_{0}^{x}f(y)coskydy-\frac{sinkx}{k}\int_{0}^{l}f(y)coskydy\\&\quad-\frac{sinkx}{ksinkl}\int_{0}^{l}f(y)sin[k(y-l)]dy\\&=\frac{1}{k}\int_{0}^{x}f(y)sin[k(y-x)]dy-\frac{sinkx}{ksinkl}\int_{0}^{l}f(y)sin[k(y-l)]\end{aligned} \tag{2-20}$$

对于式-（2-20）最终表达式的右边第二项，可以做如下变换：

$$\begin{aligned} & -\frac{sikx}{ksinkl}\int_0^l f(y)sin[k(y-l)]dy \\ =& \int_0^x \frac{sikx}{ksinkl}f(y)sin[k(l-y)]dy+\int_x^l \frac{sikx}{ksinkl}f(y)sin[k(l-y)]dy \end{aligned} \tag{2-21}$$

所以，式-（2-20）可以重新写成：

$$\begin{aligned} u(x)=&\frac{1}{k}\int_0^x f(y)sin[k(y-x)]dy \\ &+\int_0^x \frac{sinkx}{ksinkl}f(y)sin[k(l-y)]dy \\ &+\int_x^l \frac{sikx}{ksinkl}f(y)sin[k(l-y)]dy \end{aligned} \tag{2-22}$$

对于式-（2-22）中右边前两项，可以进行进一步合并整理：

$$\begin{aligned} & \frac{1}{k}\int_0^x f(y)sin[k(y-x)]dy+\int_0^x \frac{sinkx}{ksinkl}f(y)sin[k(l-y)]dy \\ =& \int_0^x \frac{f(y)}{ksinkl}\{sinklsin[k(y-x)]+sinkxsin[k(l-y)]\}dy \\ =& \int_0^x \frac{f(y)}{ksinkl}(sinklsinkycoskx-sinklcoskysinkx \\ & \qquad +sinkxsinklcosky-sinkxcosklsinky)dy \\ =& \int_0^x \frac{sinkysin[k(l-x)]}{ksinkl} \end{aligned} \tag{2-23}$$

所以，方程-（2-1）解的最终形式可以表示为：

$$\begin{aligned} u(x)=&\int_0^x f(y)\frac{sinkysin[k(l-x)]}{ksinkl}dy \\ &+\int_x^l f(y)\frac{sinkxsin[k(l-y)]}{ksinkl}dy \\ =&\int_0^l f(y)G(x,y)dy \end{aligned} \tag{2-24}$$

这里的函数$G(x,y)$有：

$$G(x,y)=\frac{sinkysin[k(l-x)]}{ksinkl};\quad 0\le y\le x \tag{2-25}$$

$$=\frac{sinkxsin[k(l-y)]}{ksinkl};\quad 0\le x\le l \tag{2-26}$$

由式-（2-24）的最终解的形式可以看出，这里的函数$G(x,y)$就是该常微分方程所对应的格林函数形式。

2.2 非齐次偏微分方程的格林函数

首先，给出齐次偏微分方程的分离变量解法，偏微分方程的形式为：

$$\begin{aligned} & u_t = \alpha^2 u_{xx} && 0 < x < 1,\ 0 < t < \infty \\ & \left.\begin{aligned} &\alpha_1 u_x(0,t) + \beta_1 u(0,t) = 0 \\ &\alpha_2 u_x(1,t) + \beta_2 u(1,t) = 0 \end{aligned}\right. && \mathit{Boundary\ condition} \\ & u(x,0) = \phi(x) \qquad 0 \le x \le 1 && \mathit{Initial\ condition} \end{aligned} \tag{2-27}$$

假设可以通过分离变量将方程-（2-27）的解表示成：$u = T(t)X(x)$，则应有：

$$T^{'}(t)X(x) = \alpha^2 T(t)X^{''}(x) \tag{2-28}$$

$$\Rightarrow$$

$$\frac{T^{'}(t)}{T(t)} = \alpha^2 \frac{X^{''}(x)}{X(x)} \tag{2-29}$$

如果要使式-（2-29）在一般条件下成立，则必须有：

$$\frac{T^{'}(t)}{T(t)} = \alpha^2 \frac{X^{''}(x)}{X(x)} = \lambda \tag{2-30}$$

这样就可以将空间部分与时间部分分开求解，这里具体的求解过程从略，只给出相应的结论，空间部分会解得一系列本征值（eigenvalue）与对应的本征函数（eigenfunction），而时间部分会得到指数衰减的形式，最后将时间部分与空间部分的解合并可以得到方程-（2-27）解的无穷级数形式：

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{(-\lambda_n \alpha)^2 t} X_n(x) \tag{2-31}$$

式中，λ_n与$X_n(x)$分别为空间部分的本征值及与其相对应的本征函数。

回到方程-（2-27），齐次微分方程在物理上描述的一维热传导在体系无热源情况下的情形，由于体系无热源，因此热量自然成指数形式衰减，但是如果考虑非齐次的情况，对应在物理上，便是引入了额外的热源，此时虽然同样可以借助于分离变量法解偏微分方程，但是时间部分的解显然不能再具有指数衰减的形式（因为在物理上，此时有热源向体系传导热量），首先，还是给出对应的非齐次偏微分方程的具体形式：

$$\begin{aligned} & u_t = \alpha^2 u_{xx} + f(x,t) && 0 < x < 1,\ 0 < t < \infty \\ & \left.\begin{aligned} &\alpha_1 u_x(0,t) + \beta_1 u(0,t) = 0 \\ &\alpha_2 u_x(1,t) + \beta_2 u(1,t) = 0 \end{aligned}\right. && \mathit{Boundary\ condition} \\ & u(x,0) = \phi(x) \qquad 0 \le x \le 1 && \mathit{Initial\ condition} \end{aligned} \tag{2-32}$$

在引入非齐次项-$f(x)$-之后，不能够通过式-（2-29）给出的方式直接将变量分离，但是如果将非齐次项$f(x)$按照如下的方式分解，便可以应用分离变量法的思想求解方程：

$$\begin{aligned} f(x,t) &= \sum_{n=1}^{\infty} f_n(t)X_n(x) \\ &= f_1(t)X_1(x) + f_2(t)X_2(x) + \cdots + f_n(t)X_n(x) + \cdots \end{aligned} \tag{2-33}$$

此时如果继续把方程的解写成分离变量的形式：

$$u_n(x,t) = T_n(t)X_n(x) \tag{2-34}$$

带入方程-（2-32），同时考虑式-（2-33）的形式，可以得到：

$$T_n^{'}(t)X_n(x) = \alpha^2 T_n(t)X^{''}(x) + f_n(t)X_n(x) \tag{2-35}$$

$$\Rightarrow$$

$$(T_n^{'}(t) - f_n(t))X_n(x) = \alpha^2 T_n(t)X_n^{''}(x) \tag{2-36}$$

此时按照式-（2-30）给出的规则，空间部分的解与齐次偏微分方程的形式完全相同，只不过对于非齐次方程而言，时间部分的解变得比较复杂，这里首先给出空间部分解的本征函数形式：

$$X_n(x) = sinn\pi x \ (n = 1, 2, 3, \cdots) \tag{2-37}$$

解得式-（2-37）形式的过程是基本的常微分方程本征解的求解，具体的说，就是设定方程解具有e指数的形式，之后将含有待定e指数的函数形式（$e^{\lambda x}$）带入齐次常微分方程即可求解，具体过程这里不做介绍。求得$X_n(x)$的形式，就可以将$f(x,t)$进一步写成：

$$f(x,t) = f_1(t)sin\pi x + f_2(t)sin2\pi x + \cdots + f_n(t)sinn\pi x + \cdots \tag{2-38}$$

由三角函数的正交性可以求得式-（2-38）中的系数$f_n(t)$：

$$f_n(t) = 2\int_0^1 f(x,t)sinn\pi x dx \tag{2-39}$$

这里的因子‘2’是因为积分区间$(0,1)$只是半周期，考虑式-（2-34）与（2-39），则方程-（2-32）可以写成：

$$\begin{aligned} &\sum_{n=1}^{\infty} T_n^{'}(t)sinn\pi x = -\alpha^2 \sum_{n=1}^{\infty}(n\pi)^2 T_n(t)sinn\pi x + \sum_{n=1}^{\infty} f_n(t)sinn\pi x \quad 0 < x < 1,\ 0 < t < \infty \\ &\left.\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} T_n(t)sin0 = 0 \\ \sum_{n=1}^{\infty} T_n(t)sinn\pi = 0 \end{aligned}\right\} \quad Boundary\ condition \\ &\sum_{n=1}^{\infty} T_n(0)sinn\pi x = \phi(x) \qquad 0 \le x \le 1 \quad Initial\ condition \end{aligned} \tag{2-40}$$

这里需要指出的是，为了讨论方便，方程-（2-32）的边界条件被简化成：$u(0,t)=0$, $u(1,t)=0$，进一步整理方程-（2-40），同时考虑边界条件实际上为恒等式（$sin0 = sinn\pi \equiv 0$），可以得到：

$$\sum_{n=1}^{\infty}[T_n^{'}(t) + (n\pi\alpha)^2 T_n(t) - f_n(t)]sinn\pi x = 0 \tag{2-41}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} T_n(0) sinn\pi x = \phi(x) \tag{2-42}$$

式-（2-41）如果对于任意的x都成立，则必须有：

$$T_n^{'}(t) + (n\pi\alpha)^2 T_n(t) - f_n(t) = 0 \tag{2-43}$$

而对于式-（2-42），由三角函数的正交性应有：

$$T_n(0) = 2\int_0^1 \phi(x) sinn\pi x dx \tag{2-44}$$

同样，这里的因子‘2’来源于半周期积分，将式-（2-43）与（2-44）结合在一起有：

$$T_n^{'}(t) + (n\pi\alpha)^2 T_n(t) - f_n(t) = 0 \tag{2-45}$$

$$T_n(0) = 2\int_0^1 \phi(x) sinn\pi x dx \tag{2-46}$$

$(2-45) \times e^{(n\pi\alpha)^2 t}$：

$$T_n^{'}(t)e^{(n\pi\alpha)^2 t} + (n\pi\alpha)^2 T_n(t)e^{(n\pi\alpha)^2 t} = f_n(t)e^{(n\pi\alpha)^2 t} \tag{2-47}$$

对式-（2-47）可以做进一步变形：

$$(T_n(t)e^{(n\pi\alpha)^2 t})' = f_n(t)e^{(n\pi\alpha)^2 t} \tag{2-48}$$

两侧同时对t积分可得：

$$\int_0^t T_n(\tau)e^{(n\pi\alpha)^2 \tau})' d\tau = \int_0^t f_n(\tau)e^{(n\pi\alpha)^2 \tau} d\tau \tag{2-49}$$

$$\Rightarrow$$

$$T_n(t)e^{(n\pi\alpha)^2 t} - T_n(0) = \int_0^t f_n(\tau)e^{(n\pi\alpha)^2 \tau} d\tau \tag{2-50}$$

所以有：

$$\begin{aligned} T_n(t) &= T_n(0)e^{-(n\pi\alpha)^2 t} + e^{-(n\pi\alpha)^2 t}\int_0^t f_n(\tau)e^{(n\pi\alpha)^2 \tau} d\tau \\ &= T_n(0)e^{-(n\pi\alpha)^2 t} + \int_0^t f_n(\tau)e^{(n\pi\alpha)^2 (\tau - t)} d\tau \end{aligned} \tag{2-51}$$

式-（2-51）中的$T_n(0)$已经由初始条件确定[见式-（2-46）]，这里将$T_n(0)$ 写成$T_n(0) = a_n$以使表达式更为简洁，将得到的$T_n(t)$表达式-（2-51）带入式- （2-34）可以得到非齐次方程- （2-40）(边界条件已经经过简化）解的最终表达形式：

$$
\begin{aligned}
u(x,t) &= \sum_{n=1}^{\infty} T_n(t) sinn\pi x \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-(n\pi\alpha)^2 t} sinn\pi x + \sum_{n=1}^{\infty} sinn\pi x \int_0^t f_n(\tau) e^{(n\pi\alpha)^2(\tau - t)} d\tau
\end{aligned}
\tag{2-52}
$$

式-（2-52）中解的第一项对应于齐次方程的解（物理上，体系无热源），而第二项则对应非齐次项的影响（物理上，对应热源对于体系的影响），同时需要注意，非齐次项$f(x,t)$（已经表示无穷级数的形式）已经写到了积分形式内，这意味着与非齐次微分方程- （2-32）对应的积分内核——格林函数——的形式已经找到，而对于齐次项，其中$a_n = T_n(0) = 2\int_0^1 \phi(x) sinn\pi x dx$，如果将$a_n$的完整形式写入式-（2-52）中同样可以得到相应的积分形式，于是至此非齐次项与齐次项对应的格林函数都已经找到。

三、 格林公式

设函数$u(x,y,z)$和$v(x,y,z)$在区域τ及其边界σ上具有连续一阶导数，同时在τ中具有连续的二阶导数，则有积分高斯公式应有：

$$
\begin{aligned}
\iint_\sigma u\nabla v \cdot d\sigma &= \iiint_\tau \nabla \cdot (u\nabla v) d\tau \\
&= \iiint_\tau u\nabla^2 v d\tau + \iiint_\tau \nabla u \cdot \nabla v d\tau
\end{aligned}
\tag{3-1}
$$

这实际上就是将区域边界上的面积分转化成区域的体积分的公式，称为**格林第一公式**，类似的将u与v调换，还可以得到：

$$
\iint_\sigma v\nabla u \cdot d\sigma = \iiint_\tau v\nabla^2 u d\tau + \iiint_\tau \nabla v \cdot \nabla u d\tau \tag{3-2}
$$

（3-1）-（3-2）可得：

$$
\iint_\sigma (u\nabla v - v\nabla u) \cdot d\sigma = \iiint_\tau (u\nabla^2 v - v\nabla^2 u) d\tau \tag{3-3}
$$

即：

$$
\iint_\sigma (u\frac{\partial v}{\partial n} - v\frac{\partial u}{\partial n}) \cdot d\sigma = \iiint_\tau (u\nabla^2 v - v\nabla^2 u) d\tau \tag{3-4}
$$

这就是**格林第二公式**。

以上两个关于格林函数问题的基本公式是推导许多微分方程对应的格林函数形式所需要的最重要的公式。

四、 泊松方程的边值问题

泊松方程的基本形式包括相应的边界条件均可以写成一下的统一形式：

$$\nabla^2 u = -h(M), \quad M \in \tau \tag{4-1}$$

$$[\alpha \frac{\partial u}{\partial n} + \beta u] = g(M), \quad Boundary\ Condition \tag{4-2}$$

回到式-（1-4）至（1-6），与泊松方程对应的格林函数应该具有δ函数的形式，即对应的格林函数应该是点源在相应边界条件（与泊松方程的边界条件具有相同的形式——同为微分边界条件，原函数边界条件或二者同时出现）产生的场，即：

$$\nabla^2 G = -\delta(M - M_0), \quad M \in \tau,\ M_0 \in \tau \tag{4-3}$$

有了相应的格林函数形式，再给定格林函数满足的边界条件就可以求得相应的格林函数，之后再通过格林第一及第二公式，加之边界条件-（4-2），最终可以将待求解的函数写成包含边界条件及格林函数的积分形式，具体的过程及结论参见格林函数.ppt，这里只给出其中涉及的几个问题的解释。

4.1 点源引起的势函数

式-（4-3）给出了点电荷引起的势函数满足的泊松方程的形式，考虑到泊松方程的一般形式-（1-3），同时考虑到点电荷密度函数具有δ函数的形式，不难理解点电荷产生的势函数满足的方程的形式-（4-3），同时由于无界空间的点电荷势函数形式是已知的：

$$G_0 = \frac{1}{4\pi r} \tag{4-1}$$

其中r是指场点至源点的距离，在上面给出的资料中，给出了一种求解格林函数的方法，即将相应边界条件对应的格林函数的求解分割成无界空间泊松方程的求解以及有界空间拉普拉斯方程的求解两个过程，这里已经给出了无界空间解的形式，所以问题的关键就只剩下有界空间拉普拉斯方程的求解，此处不做继续讨论。

4.2 一个有用的公式

首先给出上述介绍泊松方程的格林函数解法的材料中用到的这个公式的一般形式：

$$f(x_0) = \lim_{x \to x_0} \frac{1}{4\pi(x - x_0)^2} \oiint_{\sigma_s} f(x) d\vec{s} \tag{4-2}$$

这里给出简要的证明：

$$\begin{aligned}\lim_{x\to x_0}\oiint_{\sigma_s} f(x)d\vec{s} &= \oiint_{\sigma_s}\lim_{x\to x_0} f(x)d\vec{s}\\ &= \oiint_{\sigma_s} f(x_0)d\vec{s}\\ &= f(x_0)\oiint_{\sigma_s} d\vec{s}\\ &= 4\pi(x-x_0)^2 f(x_0)\end{aligned} \tag{4-3}$$

整理之后就可以得到式-（4-2）的形式，这里需要注意的是能够交换极限与积分符号的前提是函数f的连续性。上述介绍泊松方程材料中应用这一公式的具体形式为：

$$u_n(M_0) = \lim_{r\to 0}\frac{1}{4\pi r^2}\oiint_{\sigma_s}\frac{\partial u}{\partial n}d\vec{s} \tag{4-4}$$

其中$u_n(M_0)$是函数u在M_0点的法向导数（梯度）值。

4.3 场点与源点

在上述介绍泊松方程的格林函数解法材料中，涉及到了变量替换，将场点变量——M，与源点变量——M_0进行替换从而实现由源点函数$u(M_0)$到场点函数$u(M)$的变换，从这里的表述中就可以看出，场点M与源点M_0都是变量，所以在材料中给出了对于源点变量M_0的积分过程也是容易理解的。

五、 格林函数法求解薛定谔方程

在介绍格林函数在求解Shrödinger方程上的应用之前，需要首先给出更为普适的情况，首先给出这种微分方程的普适形式：

$$[z - L(r)]u(r) = f(r) \tag{5-1}$$

这里$L(r)$是线性的厄米算符（关于厄米算符的详细介绍，见附录二），且不包含时间因子，$L(r)$有一系列的本征值λ_n以及与之相对应的本征函数$\phi_n(r)$，z是复数，包含实部λ 及虚部s （$z=\lambda+is$，至于为什么要引入复数到方程中，从后面的求解过程可以看出原因，这里暂不介绍），$u(r)$是待求解函数，$f(r)$ 是给定的已知函数。

这里首先给出与方程-（5-1）对应的格林函数形式的解：

$$u(r) = \begin{cases}\int G(r,r';z)f(r')dr', & z\neq\lambda_n\\ \int G^{\pm}(r,r';z)f(r')dr' + \phi_n(r), & z=\lambda_n\end{cases} \tag{5-2}$$

式-（5-2）的第一个表达式是容易理解的，就是格林函数求解的一般形式，至于为什么要引入第二个表达式以及相应的约束条件，则必须要在后续的讨论中给出了$G(r,r^{'}:z)$的具体形式之后才能够给出解释，这里暂不考虑第二个表达式，只考虑一般形式解，将式-（5-2）带入方程-（5-1）可得：

$$\begin{aligned}[z-L(r)]u(r) &= [z-L(r)]\int G(r,r^{'};z)f(r^{'})dr^{'} \\ &= \int [z-L(r)]G(r,r^{'};z)f(r^{'})dr^{'} \\ &= f(r) \end{aligned} \tag{5-3}$$

要使式-（5-3）成立，考虑到δ函数的性质：$\int \delta(x-x_0)f(x)=f(x_0)$，则可以看出，应该存在下面的关系式：

$$[z-L(r)]G(r,r^{'};z)=\delta(r-r^{'}) \tag{5-4}$$

于是有：

$$\begin{aligned}\int [z-L(r)]G(r,r^{'};z)f(r^{'})dr^{'} &= \int f(r^{'})\delta(r-r^{'})dr^{'} \\ &= f(r) \end{aligned} \tag{5-5}$$

因此式-（5-4）就是与方程-（5-1）对应的格林函数满足的方程。

从以上的推导过程可以看出，给定微分方程的格林函数形式所满足的方程的另外一种获取方式，回到一开始提到的泊松方程的格林函数解法，那里给出了得到泊松方程对应的格林函数形式的一种物理上的方法：任意电荷分布产生的电势可由点电荷电势叠加得到——式-（1-5）与（1-6），由此过渡到了积分的形式并最终给出了积分内核——格林函数——的形式。

接下来的问题就是如何求解方程-（5-4），进而根据式-（5-3）得到方程-（5-1）的解，想要求解方程-（5-4），首先需要将其变换成另外一种易于求解的形式，在给出变换形式之前，需要给出一些定义式及关系式（这里只给出表达式，其中一些表达式的推导或者证明，参见Green Function and Their Application to Quantum Mechanics.pdf）：

$$L(r)\phi_n(r)=\lambda_n\phi_n(r) \tag{5-6}$$

$$\int_\omega \phi_n^*(r)\phi_m(r)dr=\delta_{mn} \tag{5-7}$$

$$\sum_n \phi_n(r)\phi^*(r^{'})=\delta(r-r^{'}) \tag{5-8}$$

$$\delta(r-r^{'})=\begin{cases}0 & (r-r^{'})\neq 0 \\ \infty & (r-r^{'})=0\end{cases} \tag{5-9}$$

利用Bra-Ket符号形式，还可以给出以下关系式：

$$\phi_n(r) = \langle r|n\rangle \tag{5-10}$$

$$\delta(r-r^{'})L(r) \equiv \langle r|L|r^{'}\rangle \tag{5-11}$$

$$G(r,r^{'};z) \equiv \langle r|G(z)|r^{'}\rangle \tag{5-12}$$

$$\langle r|r^{'}\rangle = \delta(r-r^{'}) \tag{5-13}$$

$$\int dr|r\rangle\langle r| = 1 \tag{5-14}$$

这里有几点需要说明：式-（5-10）$|r\rangle$是位置算符的本征矢，$|n\rangle$是相应空间的基矢，而$\langle r|n\rangle$则表示的是$|r\rangle$在该表象（$|n\rangle$）中的投影，式-（5-11）与（5-12）都是定义式，式中右边给出的是真正的计算式，而左边则是对应的表示形式，式-（5-11）中L为$L(r)$算符的一系列本征值，而$G(z)$只是变量z的单值函数。

在以上给出的这些关系式及定义式的基础上，方程-（5-4）及相关的关系式可以写成如下的形式（即前面提到的方便求解的“另一种”形式）：

$$(z-L)G(z) = 1 \tag{5-15}$$

$$L|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle \tag{5-16}$$

$$\langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{nm} \tag{5-17}$$

$$\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = 1 \tag{5-18}$$

下面证明形式-（5-15）与（5-4）的等价性，首先从式-（5-15）出发：

$$\begin{aligned}\langle r|(z-L)G(z)|r^{'}\rangle &= \langle r|1|r^{'}\rangle \\ &= \langle r|r^{'}\rangle \\ &= \delta(r-r^{'})\end{aligned} \tag{5-19}$$

而对于上式的左边应有：

$$\begin{aligned}\langle r|(z-L)G(z)|r^{'}\rangle &= \langle r|zG(z)|r^{'}\rangle - \langle r|LG(z)|r^{'}\rangle \\ &= zG(r,r^{'};z) - \langle r|LG(z)|r^{'}\rangle\end{aligned} \tag{5-20}$$

进一步由位置算符的本征矢完备性：

$$\begin{aligned}zG(r,r^{'};z) - \langle r|LG(z)|r^{'}\rangle &= zG(r,r^{'};z) - \int ds\langle r|L|s\rangle\langle s|G(z)|r^{'}\rangle \\ &= zG(r,r^{'};z) - \int ds\delta(r-s)L(r)\langle s|G(z)|r^{'}\rangle \\ &= zG(r,r^{'};z) - L(r)\langle r|G(z)|r^{'}\rangle \\ &= zG(r,r^{'};z) - L(r)G(r,r^{'};z) \\ &= [z-L(r)]G(r,r^{'};z)\end{aligned} \tag{5-21}$$

由上面的推导可以看出，方程-（5-15）与（5-4）是等价的，这意味着方程-（5-1）的格林函数可以由方程-（5-15）给出，而求解方程-（5-15 ）是比较容易的：

$$G(z) = \frac{1}{z - L} \tag{5-22}$$

式-（5-22）中的L为算符$L(r)$的本征值，式-（5-22）成立的前提是：$z - L \neq 0$，当$z - L = 0$时，下面将直接给出对应的格林函数的形式，需要指出，从这里就已经能够看出为什么方程-（5-1）的格林函数形式的解（5-2）存在两种形式——一种对应$z \neq L$，而另外一种则对应$z = L$的情况，进一步考虑式-（5-18），可以将式-（5-22）写成：

$$\begin{aligned} G(z) &= \frac{1}{z - L}\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| \\ &= \sum_n \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{z - \lambda_n}, \quad z \neq \lambda_n \end{aligned} \tag{5-23}$$

在$z = \lambda_n$的情况下，对应的格林函数按照如下定义式给出（这里只给出表达式，具体推导过程参见Green Function and Their Application to Quantum Mechanics.pdf中给出的参考资料）：

$$G^{\pm}(r, r^{'}; \lambda_n) \equiv \lim_{s \to 0^+} G(r, r^{'}; \lambda \pm is) \tag{5-24}$$

这里有：$z = \lambda_n \pm is$，从中可以看出在微分方程的一般形式-（5-1）中引入复数z 实际上对应的是当实数$z = \lambda_n$时的情况，此时引入复数z的形式，再通过极限的方法求得该情况下格林函数的形式。

上面给出的是形式如式-（5-1）的微分方程利用格林函数求解的过程，而对于定态Shrödinger方程：

$$H\psi = E\psi \tag{5-25}$$

有：

$$[E - H(r)]\psi(r) = 0 \tag{5-26}$$

与方程-（5-1）对比可得如下一系列的对应关系：

$$L(r) \to H(r) \tag{5-27}$$

$$\lambda_n \to E_n \tag{5-28}$$

$$z = \lambda \pm is \to z = E \pm is \tag{5-29}$$

$$\phi_n(r)\phi_n(r) \tag{5-30}$$

由此可以得到定态不含时Shrödinger方程格林函数形式的解：

$$u(r) = \begin{cases} \int G(r, r^{'}; z) f(r^{'}) dr^{'}, & z \neq E_n \\ \int G^{\pm}(r, r^{'}; z) f(r^{'}) dr^{'} + \phi_n(r), & z = E_n \end{cases} \tag{5-31}$$

其中：

$$G(r,r^{'};z)=\sum_{n}\frac{\phi_{n}^{*}(r^{'})\phi_{n}(r)}{z-E_{n}},\quad z\neq E_{n} \tag{5-32}$$

$$f(r)=0 \tag{5-33}$$

将式-（5-33）带入到式-（5-31）中可以看出，最终定态不含时Shrödinger方程解的形式又回到了哈密顿算符$H(r)$的本征矢的形式，格林函数在此问题上只体现了自洽性，对求解不含时Shrödinger方程并没有实际意义，但推广到含时的情况以及当体系引入微扰等复杂作用之后，格林函数的方法对于获得Shrödinger方程的解则具有重要的意义，具体涉及的内容过于复杂，此处从略，详细的资料参见参考资料列表以及其中给出的推荐书目，以上关于格林函数法在求解不含时Shrödinger方程中应用的介绍主要来自于Green Function and Their Application to Quantum Mechanics.pdf，另外，Linear Operators Eigenvalues and Green Operator.pdf中给出了同样问题的另一种推导方式，可作参考。

六、 格林算符——Green's operator

给定微分方程：

$$[L(r)-\lambda]|\psi\rangle=|s(r)\rangle \tag{6-1}$$

其中$L(r)$同上为厄米算符，λ为实数，$|s(r)\rangle$为已知给定的函数，$|\psi\rangle$为待求解函数，如果将$|s(r)\rangle$视为外加的“源”，则函数$|\psi\rangle$则表示的是体系对外界“源”的响应，为求解方程-（6-1），首先给出两个关系式：

$$L(r)|n\rangle=\lambda_{n}|n\rangle \tag{6-2}$$

$$\sum_{n}|n\rangle\langle n|=1 \tag{6-3}$$

这两个关系式在前面的讨论中已经给出过，这里的重复式为了下面讨论的方便，将函数$|\psi\rangle$利用式-（6-3）在本征基矢上展开：

$$|\psi\rangle=\sum_{n}|n\rangle\langle n|\psi\rangle \tag{6-4}$$

于是方程-（6-1）变为：

$$\sum_{n}[L(r)-\lambda]|n\rangle\langle n|\psi\rangle=|s(r)\rangle \tag{6-5}$$

$$\Rightarrow$$

$$\sum_{n}[\lambda_{n}-\lambda]|n\rangle\langle n|\psi\rangle=|s(r)\rangle \tag{6-6}$$

将式-（6-6）两边分别左乘$\langle n^{'}|$，同时考虑：$\langle n^{'}|n\rangle = \delta_{n^{'}n}$，则可以得到：

$$(\lambda_n - \lambda)\langle n|\psi\rangle = \langle n|s(r)\rangle \tag{6-7}$$

$$\Rightarrow$$

$$\langle n|\psi\rangle = \frac{\langle n|s(r)\rangle}{\lambda_n - \lambda} \tag{6-8}$$

再利用式-（6-3）插入到式-（6-8）中可以得到：

$$|\psi\rangle = \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{\lambda_n - \lambda}|s(r)\rangle \tag{6-9}$$

于是便得到了方程-（6-1）解的表达形式-（6-9），进一步将式-（6-9）写成：

$$|\psi\rangle = G|s(r)\rangle \tag{6-10}$$

其中：

$$G = \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{\lambda_n - \lambda} \tag{6-11}$$

这里定义的G就称为**格林算符（Green's Operator）**，它描述的是体系对于外界扰动[“源” $s(r)$]的响应，同样当出现$\lambda = \lambda_n$的情况时，则重新定义对应格林算符的形式：

$$G^{\pm} = \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{\lambda_n - \lambda \pm is} \tag{6-12}$$

在很多文献中也将此时的格林算符写成：$G = (H - E + i\eta)^{-1}$，对应的不含时的Shrödinger的情况，其中的η 是无穷小量。

七、 参考资料

本文是在阅读了介绍格林函数及其具体应用的很多资料后总结的，这里列出了相关资料（点击可进入链接）以备查阅：

- Introduction To Green Function.pdf
- Solving the Non-homogeneous Function using Eigenfunction Expansion.pdf
- Green Function and Their Application to Quantum Mechanics.pdf
- 格林函数.ppt
- Linear Operators Eigenvalues and Green Operator.pdf

附录一、泊松方程的由来

在静电场问题中，在给定区域D内电荷密度分布为ρ，泊松方程则是在给定边界条件的情况下求解区域电势函数的非常重要的方程，这里给出泊松方程的推导，首先，给定区域D的边界，则由静电场高斯定理应该有：

$$\oiint_{\sigma} \vec{E} \cdot d\vec{s} = \frac{Q}{\epsilon_0} \tag{A1-13}$$

其中Q代表区域D内总的电荷量，σ为区域D的边界，ϵ_0为真空介电常数，将式-（A1-13）中的电场$\vec{E}$写成电势函数ψ的梯度，即$\vec{E} = -\nabla\psi$，可以得到：

$$-\oiint_{\sigma} \nabla\psi \cdot d\vec{s} = \frac{Q}{\epsilon_0} \tag{A1-14}$$

进一步，根据体积分与面积分转换的高斯定理，应有：

$$-\iiint_D \nabla \cdot (\nabla\psi) d\tau = \iiint_D \frac{\rho}{\epsilon_0} d\tau \tag{A1-15}$$

$$\Rightarrow$$

$$\nabla^2\psi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \tag{A1-16}$$

式-（A1-16）就是静电场的泊松方程，需要指出的是，式-（A1-16）给出的是在国际单位制下的泊松方程形式，通常情况下如果方程中没有给出真空介电常数，则对应的泊松方程是在高斯单位制下的形式，所以通常情况下，泊松方程在形式上写为：

$$\nabla^2\psi = -h, \quad \text{这里的h为任意给定的函数} \tag{A1-17}$$

附录二、厄米算符——Hermitian operator

首先给出厄米共轭（Hermitian adjoint）——$H^\dagger$的运算式：

$$(j, H^\dagger i) = (Hj, i) \tag{A2-1}$$

厄米共轭运算实际上可以分两步进行——转置运算与共轭运算，首先给出这两种运算的方法：

$$(j, H^T i) = (i, Hj), \quad \text{转置} \tag{A2-2}$$

$$(j, H^* i) = (Hi, j), \quad \text{共轭} \tag{A2-3}$$

在给定两个基本运算——转置与共轭——之后，可以将二者结合在一起构成厄米共轭运算：

$$\begin{aligned}(j, (H^*)^T i) &= (i, H^* j) \\ &= (Hj, i) \\ &= (j, H^\dagger i)\end{aligned} \tag{A2-4}$$

在此基础上可以定义厄米算符，如果算符A满足：$(j, Ai) = (Aj, i)$，则称算符A是厄米的（Hermitian），厄米算符A具有如下两个性质：

- 厄米算符的本征值都是实数；

 推论： 所有可观测量对应的算符都是厄米的；

- 厄米算符的本征矢之间是彼此正交的；

下面给出这两个性质的证明，设算符L是厄米的，并给定L的两个本征矢$|\lambda\rangle$、$|\mu\rangle$以及相应的本征值λ与μ，则有：

$$L|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \tag{A2-5}$$
$$L|\mu\rangle = \mu|\mu\rangle \tag{A2-6}$$

将式-（A2-5）与（A2-6）分别左乘$|\mu\rangle$与$|\lambda\rangle$可得：

$$\langle\mu|L|\lambda\rangle = \lambda\langle\mu|\lambda\rangle \tag{A2-7}$$
$$\langle\lambda|L|\mu\rangle = \mu\langle\lambda|\mu\rangle \tag{A2-8}$$

式-（A2-7）的左边$\langle\mu|L|\lambda\rangle = (\mu, L\lambda)$，而由于算符$L$是厄米的，因此有：

$$L^\dagger = L \tag{A2-9}$$
$$\Rightarrow$$
$$\langle\mu|L|\lambda\rangle = (\mu, L\lambda) = (L\mu, \lambda) \tag{A2-10}$$

而（A2-8）式左边$\langle\lambda|L|\mu\rangle = (\lambda, L\mu)$，比较式-（A2-7）左边与（A2-8）式左边可以看出：

$$[(A2-8) - Left] = [(A2-7) - Left]^* \tag{A2-11}$$

即：

$$[(A2-8) - Right] = [(A2-7) - Right]^* \tag{A2-12}$$

因此有：

$$\lambda^*\langle\lambda|\mu\rangle = \mu\langle\lambda|\mu\rangle \tag{A2-13}$$

如果$|\lambda\rangle \neq |\mu\rangle$，不考虑能级简并的情况，应该有：$\lambda^* \neq \mu$，则由式-（A2-13）可以得到：

$$\langle\lambda|\mu\rangle = 0 \tag{A2-14}$$

这就是厄米算符本征矢的正交性，如果有：$|\lambda\rangle = |\mu\rangle$，则有：

$$\lambda^*\langle\lambda|\lambda\rangle = \lambda\langle\lambda|\lambda\rangle \tag{A2-15}$$

由式-（A2-15）可得：$\lambda^* = \lambda$，因此可以得到厄米算符的本征值为实数的结论。